

**Бердақ атындағы Қарақалпақ мәмлекетлик
университети**

Улыўма физика кафедрасы

ҚАТТЫ ДЕНЕЛЕР ФИЗИКАСА

пәни бойынша

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

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

Лекциялық сабаклар 32 (лекциялар саны 16), лабораториялық сабаклар 24
саат, студентлердин өз бетинше жұмысларының көлемі 50.

Пәнниң сабакларға мөлшерленген оқыў программысы Қарақалпақ мәмлекетлик университетиниң илимий-методикалық кеңесиниң 2011-жыл 29-июнь күнги мәжилисінде қарап шығылды ҳәм мақулланды. Протоколдың қатар саны 6.

Пәнниң сабакларға мөлшерленген оқыў программысы улыўма физика кафедрасының илимий-методикалық семинарының 2011-жыл 23-июнь күнги мәжилисінде 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

Дүзиүши улыўма физика кафедрасының баслығы, физика-математика илимдеринин 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 үйренийден ҳәм сол процесслерди тәриплөү усыллары менен танысыўды басшылыққа алады. Бул мағлыұматларды билиў физика илимнин теренирек билиў ушын зәрүрли. Соның ушын «Қатты денелер физикасы» кусын өтиуде алда турған ўзазыпа студенттерге ҳәзирги заман қатты денелеринин түсиникleri ҳәм тийкарларын үйретиўден ибарат.

Курс тәбийий ҳәм улыўмалық процессионаллық пәнлер блогына киреби, қатты денелер физикасы тараўы бойынша фундаменталлық билимдердин тийкарын пайда етеди.

Курсты менгериүге қойылатуғын талаплар мыналардан ибарат:

Студент мыналарды билиўи керек: қатты денелердеги физикалық қубылыштардың мәниси, материаллардың құрылымы менен физикалық қәсийеттери арасындағы қатнасларды орнатыў.

Студент мыналарды ислей алғыу керек: ҳәр қылыштың қатты денелердин физикалық параметрлерин анықтай алғыу, теориялық таллаулар ҳәм алынған эксперименталлық мағлыұматлар тийкарында олардың сан мәнисин баһалай алғыу.

2. Курстың мазмуны

1. Кирисиў. Физикалық қәсийеттери бойынша, соның ишинде электр өткізгишликтиң шамасы ҳәм харakterи бойынша қатты денелердин классификациясы. Қатты денелер физикасының кристаллография, ярым өткізгишлер физикасы менен байланысы. Қатты денелердин ҳәзирги заман илими менен техникасындағы әхмийети. Курстың предмети ҳәм мазмұны. Қатты денелердин анықламасы. Кристаллық ҳәм аморфлық қатты денелер. Кристаллографиялық пәренже. Пәнжерениң түйинлери ҳәм векторлары. Сингониялар, кристаллографиялық категориялар. Бравэ пәнжерелери. Бравэ пәнжерелеринин типтери бойынша кристалларды классификациялаў. Элементар қутыша.

2. Кристаллардың симметриясы. Симметрияның ноқатлық ҳәм кеңисликтеги топарлары. Симметриясының типтери бойынша кристаллардың классификациялары.

Кристаллардың симметриясы менен олардың физикалық қәсийеттерин тәриплейтуғын тензорлардың симметриялары арасындағы байланыс..

3. Кери пәнжерениң анықламасы. Кери пәнжерениң векторларының қәсийеттери. Пәнжерениң тегисликтери ҳәм Миллер индекслері. Кристаллардағы рентген нурларының дифракциясы. Рентген нурларының шашырауының атомлық ҳәм структуралық факторлары.

4. Кристаллардағы атомлар арасындағы байланыс күшлеринің тәбияты. Ионлық байланыс: байланыс энергиясы, Маделунг турақтысы. Ийтерилис күшлеринің тәбияты.

5. Коваленттік байланыс: алмасыў тәсирлесіүи, байланыслардың бағытланғанлығы ҳәм тойынышылығы. Ван-дер-Ваальс күшлери ҳәм молекулалық байланыс. Металлық байланыс.

6. Қатты денелер пәнжересіндеги атомлардың тербеліслери. Бир ҳәм еки атомлы пәнжерелердин тербеліслери спектри. Акустикалық ҳәм оптикалық модалар. Дисперсиялық қатнаслар. Бриллюэн зоналары. Үш өлшемли жағдай ушын улыұмаластырыў. Циклтық шегаралық шәртлер ҳәм толқын векторының руқсат етилген мәнислері. Ҳаллар тығызлығы.

7. Гармоникалық жақынласыўдағы кристаллық пәнжере динамикасының теңлемелери. Қатты денелердин жыллылық сыйымлығының классикалық теориясы.

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

9. Пәнжере атомларының тербеліслеридеги ангармонизм. Жыллылық кеңейіўи. Фононлардың өз-ара тәсир етисиүи. Нормаль процесслер менен асырып өткізиў процесслери. Жыллылық өткізигишилик.

10. Қатты денелердеги фазалық өтиўлер. Бириңиши ҳәм екінши әүлад фазалық өтиўлері. Екінши әүлад фазалық өтиўлеридеги кристаллық пәнжере симметриясының өзгерислері.

11. Кристаллардың серпимлилік қәсийеттері. Деформация ҳәм механикалық кернеўлер тензорлары, олардың қәсийеттері. Гук нызамы. Серпимлилік модули тензоры.

12. Металлардағы электронлар. Қатты денелердин зоналық структурасы. Электронлардың жалысқақтылығы, Фермидин кинетикалық энергиясы. Ферми қәдди. Электронлардың эффективлік массасы, ҳаллардың тығызлығы. Зоналардың толтырылышы. Ферми тарқалыўы, Ферми температурасы. Дәүирли өзгеретуғын майдандағы электронлар. Бриллюэнниң еки өлшемли зонасы, Бриллюэнниң үш өлшемли зонасы ҳәм Ферми беті. Зоналардың толтырылышы.

13. Сегнето-, пиро- ҳәм пьезоэлектрлердин физикалық қәсийеттері. Пироэффекттиң жүзеге келийиниң зәрүрли ҳәм жеткилик шәртлері. Электрострикция.

14. Кристаллардағы микро - и макроскопиялық электр майданлары. Локаллық майдан. Қатты денелердин поляризациясының механизмлери. Диэлектриктик сициргишилик.

15. Қатты денелердин магнитлик қәсийеттері. Алмасыў ҳәм релятивисттик тәсир етисиўлер. параметриктер, диамагнетиктер, ферромагнетиктер, антиферромагнетиктер, ферримагнетиктер. Қюри нызамы. Неель ноқаты. Магнитлик тәртиплеспеген кристаллардың энергиясы. Магнитлик резонанс.

3. Лабораториялық сабақлар. 24 саат.

«Қатты денелер физикасы» курсы бойынша лабораториялық жумыслар студенттердин алған теориялық билимлерин беккемлеў ушын орынланады. Соның менен бирге лабораториялық жумыслар эксперимент өткериў қәбилетликтерин пайда

етеди, өлшеў апаратурасы менен дұрыс ислеўге, алынған эксперименталлық нәтийжелерди саўатты түрде қайта ислеўге үйретеди.

Лабораториялық жұмысларды орынлаў барысында студентлер ҳәр қылыш болған кристаллық материалдардың бир қатар физикалық параметрлерин анықтайды.

1. Қатты денелерди поляризациялық микроскоп пенен изертлеў.
2. Кублық пәнжерелер ушын (әпиуайы, қапталдан орайласқан ҳәм көлемде орайласқан) кери пәнжерени дүзиў ҳәм Бриллюэн зоналарын белгилеў.
3. Квадрат пәнжере ушын Маделунг турақтысын есаплаў.
4. Серпимли модуллери белгили болған кублық кристаллардағы белгили кристаллографиялық бағыт бойынша тарқалатуғын ҳәм берилген поляризациядағы серпимли толқынлардың тезликтерин табыў.
5. Кристалдың лаэграммасы ҳәм эпиграммасы тийкарында оның кристаллографиялық бағыттарының ориентацияларын анықлаў.
7. Тербелий рентгенограммаларын түсириў жәрдемінде кристаллық пәнжере турақтыларын есаплаў.

4. Курстың саатларының темалар ҳәм жұмыслардың түрлери бойынша бөлистирилийи

	Темалар атлары	Бар-лы-ғы	Лекция-лар	Лабораториялық сабаклар	Өз бетин-ше
1	<p>Кирисиў. Физикалық қәсийетлери бойынша, соның ишинде электр өткізгишликтиң шамасы ҳәм характеристи бойынша қатты денелердин классификациясы. Қатты денелер физикасының кристаллография, ярым өткізгішлер физикасы менен байланысы. Қатты денелердин ҳәзирги заман илими менен техникасындағы әхмийети. Курстың предмети ҳәм мазмұны. Қатты денелердин анықтамасы. Кристаллық ҳәм аморфлық қатты денелер. Кристаллографиялық пәренже. Пәнжерениң түйинлери ҳәм векторлары. Сингониялар, кристаллографиялық категориялар. Бравэ пәнжерелери. Бравэ пәнжерелеринин типтери бойынша кристалларды классификациялаў. Элементар қутыша.</p>	10	2	6	4
2	<p>Кристаллардың симметриясы. Симметрияның ноқатлық ҳәм кеңисликтеги топарлары. Симметриясының типтери бойынша кристаллардың классификациялары. Кристаллардың симметриясы менен олардың физикалық қәсийетлерин тәриплейтуғын тензорлардың симметриялары арасындағы байланыс.</p>	10	2	6	2

3	Кери пәнжерениң анықламасы. Кери пәнжерениң векторларының қәсийетлери. Пәнжерениң тегисликлери ҳәм Миллер индекслери. Кристаллардағы рентген нурларының дифракциясы. Рентген нурларының шашырауының атомлық ҳәм структуралық факторлары.	6	2		4
4	Кристаллардағы атомлар арасындағы байланыс күшлериниң тәбияты. Ионлық байланыс: байланыс энергиясы, Маделунг тұрақтысы. Ийтерилис күшлериниң тәбияты.	6	2		4
5	Коваленттік байланыс: алмасыў тәсирлесіүи, байланыслардың бағытланғанлығы ҳәм тойыныўшылығы. Ван-дер-Ваальс күшлери ҳәм молекулалық байланыс. Металлық байланыс.	4	2		2
6	Қатты денелер пәнжересіндеги атомлардың тербелислери. Бир ҳәм еки атомлы пәнжерелердин тербелислери спектри. Акустикалық ҳәм оптикалық модалар. Дисперсиялық қатнаслар. Бриллюэн зоналары. Үш өлшемли жағдай ушын улыўмаластырыў. Цикллық шегаралық шәртлер ҳәм толқын векторының руқсат етилген мәнислери. Ҳаллар тығызылығы.	6	2		4
7	Гармоникалық жақынласыўдағы кристаллық пәнжере динамикасының теңлемелери. Қатты денелердин жыллылық сыйымлығының классикалық теориясы.	6	2		4
8	Гармоникалық осциллятор ҳақындағы элементар квантмеханикалық мәселе. Кристаллық пәнжерениң тербелислериниң энергияларының квантланыўы. Планк тарқалыўы. Жыллылық сыйымлығының квант теориясы. Дебай модели.	8	2	2	4
9	Пәнжере атомларының тербелислеридеги ангармонизм. Жыллылық кеңеиүи. Фононлардың өз-ара тәсир етисиүи. Нормаль процесслер менен асырып өткизиў процесслери. Жыллылық өткизигишилик.	4	2		2
10	Қатты денелердеги фазалық өтиўлер. Биринши ҳәм екінши әүлад фазалық өтиўлері. Екінши әүлад	12	2	6	4

	фазалық өтиўлериндеги кристаллық пәнжере симметриясының өзгерислери.				
11	Кристаллардың серпимлилик қәсийетлери. Деформация хәм механикалық кернеўлер тензорлары, олардың қәсийетлери. Гүк нызамы. Серпимлилик модули тензоры.	10	4	4	2
12	Қатты денелердин зоналық структурасы. Электронлардың жаһысқақлығы, Фермидин қинетикалық энергиясы. Ферми қәдди. Электронлардың эффективлик массасы, ҳаллардың тығыздығы. Зоналардың толтырылышы. Ферми тарқалыуы, Ферми температурасы. Дәүирли өзгеретуғын майдандағы электронлар. Бриллюэнниң еки өлшемли зонасы, Бриллюэнниң үш өлшемли зонасы ҳәм Ферми бети. Зоналардың толтырылышы.	6	2		4
13	Сегнето-, пиро- ҳәм пьезоэлектрлердин физикалық қәсийетлери. Пироэффекттиң жүзеге келийинин зәрүрли ҳәм жеткилики шәртлери. Электрострикция.	4	2		2
14	Кристаллардағы микро - и макроскопиялық электр майданлары. Локаллық майдан. Қатты денелердин поляризациясының механизмлери. Диэлектриклик сициргишилик.	4	2		2
15	Қатты денелердин магнитлик қәсийетлери. Алмасыў ҳәм релятивистлик тәсир етисиўлер. параметриктер, диамагнетиктер, ферромагнетиктер, антиферромагнетиктер, ферримагнетиктер. Кюри нызамы. Неель ноқаты. Магнитлик тәртиплеспеген кристаллардың энергиясы. Магнитлик резонанс.	10	2	2	6
	Жәми	106	32	24	50

Тийкарғы әдебият

- Ч.Уэрт. Р.Томсон Физика твердого тела. Издательство «Мир». Москва. 1969. 568 с.
- Ч.Киттель. Введение в физику твердого тела. М., Наука, 1978. 792 с.
- Дж. Блейкмор. Физика твердого тела. Издательство «Мир». Москва. 1988. 608 с.
- Н.Ашкрофт, Н.Мермин. Физика твердого тела, т.1. Москва. "Мир", 1979. 400 с.
- Н.Ашкрофт, Н.Мермин. Физика твердого тела, т.2. Москва. "Мир", 1979. 422 с.
- 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 әдебият

1. Задачи по физике твердого тела. Под редакцией Г.Дж.Гольдсмида. 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.

Студентлердин билимин қадағалаў баллары

Сабаклар түрлери	Саат көлеми (лек+әмел +лаб)	Өз бетинше	Ағымдағы баҳалаў	Шегаралық баҳалаў	Жуўмақлаұшы баҳалаў	Улыўма балл
Лекция	32	22	13	15	30	45
Лаборатория	24	12	14	15		35

Рейтинг қадағалаў түрлеринде ажыратылған қадағалаў түрлерінің анықлау усыллары

Қадағалаў тури	Қадағалаў усылы	Саны	Үақты	Максимал балл
Ағымдағы қадағалаў	Аудиторияда ҳәм өз бетинше мәселелер шешиү	3	Кесте тийкарында	13-14
Жәми				40
Шегаралық қадағалаў	Контрол жумысы	2	Кесте тийкарында	15
	Тест сораўлары			
Жәми				30
Жуўмақлаұшы қадағалаў	Жуўмақлаұшы жазба жумысы	1	Кесте тийкарында	30
Жәми		7		100

"Қатты денелер физикасы" бойынша жуўмақлаұшы қадағалаў сораўлары

1-вариант

1. Физикалық қәсийетлери бойынша, соның ишинде электр өткізгішліктиң шамасы ҳәм харakterи бойынша қатты денелердин классификациясы.

2. Қатты денелердин жыллылық қәсийетлери. Қатты денелердин жыллылық сыйымлығы. Дюлонг ҳәм Пти нызамы.

3. Қатты денелердеги атомлар ҳәм молекулалар арасындағы байланыслар. Ионлық байланыс.

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

5. Қатты денелерди поляризациялық микроскоп пенен изертлеў.

2-вариант

1. Қатты денелер физикасының кристаллография, ярым өткізгишлер физикасы менен байланысы.

2. Кублық пәнжерелер ушын (әпиүайы, қапталдан орайласқан ҳәм көлемде орайласқан) кери пәнжерени дүзиў ҳәм Бриллюэн зоналарын белгилеў.

3. Қатты денелердеги атомлар ҳәм молекулалар арасындағы байланыслар. Ковалентли байланыс (Гомеополяр байланыс).

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 кернеў табылсын.

5. Қатты денелердин атомлық-кристаллық құрылышын изертлеў усыллары. Рентгенструктуралық анализ.

3-вариант

1. Кристаллық ҳәм аморф қатты денелердин ҳәзирги заман илими менен техникасындағы әхмийети.

2. Қатты денелердеги атомлар ҳәм молекулалар арасындағы байланыслар. Ионлы байланыс (Гетерополяр байланыс).

3. Қатты денелердин механикалық қәсийетлери. Серпимли ҳәм эластик деформациялар.

4. Қатты денелердин атомлық-кристаллық құрылышын изертлеў усыллары. Электронлық микроскопия ҳәм электронография.

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

4-вариант

1. Кристаллық ҳәм аморфлық қатты денелер. Кристаллық ҳәм аморф денелердин бир биринен айырмашылығы. Кристаллық құрылыш.

2. Кристалдың лаэграммасы ҳәм эпиграммасы тийкарында оның кристаллографиялық бағыттарын анықлаў.

3. Қатты денелердеги атомлар ҳәм молекулалар арасындағы байланыслар. Ван-Дер-Ваальс байланысы.

4. Қатты денелердин электрлік өткізгишлиғи. Металлар ҳәм Ярым өткізгишлер.

5. Диаметри 1 мм болған полат сымның беккемлик шегарасы 294 МПа дан артпастан көбі менен қанша муғдардағы жүкке шыдаўы мүмкін. Усы жүктин тәсиринде сымның созылыўы басланғыш узынлығының қандай бөлимин қурайды.

5-вариант

1. Кристаллографиялық пәренже. Пәнжерениң түйинлери ҳәм векторлары. Сингониялар, кристаллографиялық категориялар. Структуралық кристаллографияның тийкарғы теңлемелери.

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

3. Металлық байланыс. Металлардың жыллылық ҳәм электр тоғын өткізгішилиги. Жыллылық өткізгішилик пенен электр өткізгішилик арасындағы байланыс.

4. Тербелиү рентгенограммаларын түсириү жәрдеминде кристаллық пәнжере турақтыларын есаплау.

5. Қорғасын сым жоқары ушынан тик ҳалатта илдирилген. Аўырлық күшинин тәсиринде ұзилип кетпеүи ушын сым қандай ең үлкен узынлыққа ийе болыўы мүмкін. Қорғасының беккемлік шегарасы 12,3 МПа.

6-вариант

1. Бравэ пәнжерелери. Бравэ пәнжерелеринин типлері бойынша кристалларды классификациялау. Элементар қутыша.

2. Ярым өткізгішлердеги тоқты тасыўшылардың тең салмақтық қәсийеттери. Электронлар ҳәм тесикшелер. Электронлық ҳәм тесикшелік өткізгішилик.

3. Металлардың электр өткізгішилигинің тәбияты ҳәм оның температураға ғәрзлиги.

4. Қатты денелердеги фазалық өтиўлер. Бириңши ҳәм екинши әүлад фазалық өтиўлері.

5. Сымға байланған 10 кг массалы тәрези тасы 2 1/с жийликтік пенен горизонтал бете сүйкеліссіз айланады. Сымның узынлығы 1,2 м ҳәм көлденең кесе-кесими 2 мм^2 . Сым материалының механикалық кернеўі табылсын.

7-вариант

1. Кристаллардың симметриясы. Симметрияның ноқатлық ҳәм кеңисликтеги топарлары.

2. Кристаллық денелердеги деформациялар менен кернеўлердин екинши тәртипли симметриялы тензордың жәрдеминде тәриплениўи.

3. Меншикли ҳәм қосымталы ярым өткізгішлер. Ҳәр қылды ярым өткізгішлердеги электронлар менен тесиклешелердин концентрациялары.

4. Қатты денелердің магнитлик қәсийеттери. Парамагнетизм, диамагнетизм ҳәм ферромагнетизм.

5. Узынлығы 5 м ҳәм кесе-кесими 2 мм^2 болған сымға 5,1 кг массалы жүк илдирилген. Нәтийжеде сым 0,6 мм ге узарады. Сым материалы ушын Юнг модулинин мәниси табылсын.

8-вариант

1. Симметриясының типлері бойынша кристалларды классификациялау.

2. Қатты денелердің жыллылық қәсийетлеринин кванттық теориясы. Эйнштейн ҳәм де Бройль моделлери.

3. Қатты денелердің энергиялық зоналық құрылышы. Бир өлшемли моделлер. Дерлик еркін электронлар жақынласыўы.

4. Серпимли модуллери белгилі болған кублық кристаллардағы белгилі кристаллографиялық бағыт бойынша тарқалатуғын ҳәм берилген поляризациядағы серпимли толқынлардың тезликтерин табыў.

5. Узынлығы 3 м ҳәм диаметри 2 см болған полат стерженге массасы 2,5 т жүк илдирилген. Стержендеги механикалық кернеў, стерженнин салыстырмалы ҳәм абсолют узайыўы анықлансын.

9-вариант

1. Кристаллардың симметриясы менен олардың физикалық қәсийетлерин тәриплейтуғын тензорлардың симметриялары арасындағы байланыс.
2. Еки атомлы сызықты шынжырдың киши тербелислери. Тербелислердин акустикалық ҳәм оптикалық тармақтары.
3. Кристаллық диэлектриклердин поляризациясы. Поляризация тензоры.
4. Қатты денелердин зоналық құрылымы. Валентли, қадаған етилген ҳәм өткізгішлик зоналары.
5. Узынлығы 2 м ҳәм диаметри 1 мм болған горизонтал ҳалда тартылған. Сымның ортасына массасы 1 кг жүк илдиригенде жүк илдирилген точка 4 см ге төменлейтуғын дәрежеде созылды. Сым материалының Юнг модулиниң шамасы анықлансын.

10-вариант

1. Кери пәнжерениң анықламасы. Туўры ҳәм кери пәнжерелер арасындағы байланыс. Кери пәнжере векторларының қәсийетлері.
2. Қатты денелердеги фазалық өтиўлер. Екинши әүлад фазалық өтиўлериндеги кристалдың симметриясының өзгериўлері.
3. Әпиўайы еки өлшемли квадрат пәнжерениң киши тербелислери. Әпиўайы кублық пәнжерениң киши тербелислери.
4. Қатты денелердин оптикалық қәсийетлері. Оптикалық индикатриса. Қос нур сындырыў.
5. Қаттылықтары 0,3 кН/м ҳәм 0,8 кН/м болған еки пружина избе-из жалғанды. Егер пружина 1,5 см ге деформацияланған болса, биринши пружинаның абсолют деформациясын анықлаңыз.

11-вариант

1. Кристаллографиялық пәнжере тегисликлери ҳәм Миллер индекслері. Структуралық кристаллографияның тийкарғы тәңлемелери.
2. Кристаллардағы рентген нурларының дифракциясы ҳәм кери пәнжере.
3. Кристаллардың жылдылық сыйымлышы. Дебай температурасы. Кристаллар ушын $C_p - C_v$ айырмасын табыў.
4. Диэлектриклердин қәсийетлері. Диэлектриклик сиригишлик ҳәм поляризацияланыўшылық. Электронлық поляризацияланыўшылық.
5. Қаттылықтары 2 кН/м ҳәм 6 кН/м болған пружиналардың избе-из ҳәм параллел жалғанғандағы қаттылықтары анықлансын.

12-вариант

1. Кристаллардағы рентген нурларының дифракциясы. Рентген нурларының шашыраўының атомлық ҳәм структуралық факторлары.
2. Қатты денелердеги фононлар ҳәм пәнжерениң тербелислери. Пәнжере тербелислеринин квантлық характеристикалары. Фононның импульси ҳәм энергиясы.
3. Сегнетоэлектриклик кристаллар. Сегнетоэлектриклик фазалық айланыслар. Пироэлектриклер.

4. Кристаллардағы байланыслар типтери. Инерт газлер кристаллары. Ван-дер-Ваальс-Лондон күшлери.

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

13-вариант

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

2. Кристаллардың серпимлиқ қәсийеттери. Кристаллардағы кернеўлер менен деформациялар. Серпимли деформацияларды анализлеў.

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

4. Ярым өткізгиш кристаллар. Меншикли ҳәм қосымталы өткізгишлик. Р ҳәм n типиндеги ярым өткізгишлер.

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?

14-вариант

1. Ковалентлик байланыс: алмасыў тәсирлесиүи, байланыслардың бағытланғанлығы ҳәм тойынышылығы.

2. Төртинги рангалы серпимли берилгишлик ҳәм серпимли қаттылық тензорлары.

3. Қатты денелердин жыллылық өткізгишлиги. Пәнжерениң жыллылық қарсылығы. Нормал процесслер ҳәм 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.

15-вариант

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

2. Ярым өткізгишлер. Меншикли өткізгишлик. Қадаған етилген зона.

3. Ферромагнитлердин магнитлик құрылышы.

4. Қатты денелердеги фотоөткізгишлик. Кенисликлеги заряд ямаса поляризациялық эффектлер.

5. Қаттылығы 1 кН/м болған пружина 4 см ге қысылған. Пружинаның қысылыўын 18 см ге шекем арттырыў ушын қандай жумыс атқарылыўы керек?

16-вариант

1. Қатты денелердеги металлық байланыс.

2. Сегнетоэлектриклердин, пироэлектриклердин ҳәм пьезоэлектрлердин физикалық қәсийеттери.

3. Еки атомлы сызықлы шынжырдың киши тербелислери. Тербелислердин акустикалық ҳәм оптикалық тармақтары.

4. Қатты денелердин магнитлик қәсийеттери. Алмасыў ҳәм релятивистлик тәсир етисиўлер. Парамагнетиклер, диамагнетиклер, ферромагнетиклер, антиферромагнетиклер, ферримагнетиклер.

5. Пружинаның жоқарғы ушында турған кишкане 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 пәнжересіндеги атомлардың тербелислери.
2. Қатты денелердин атомлық-кристаллық структурасын изертлеў усыллары. Рентгенографиядығы полихроматикалық Лауэ усылы.
3. Қатты денелердеги екинши әйләнештегі фазалық өтиўлериндеги кристаллық пәнжере симметриясының өзгерислери.
4. Пироэлектриклик кристаллар хәм олардың кристаллық құрылышының өзгешеліктері. Орайға карата симметриялы кристалларда пироэлектриклик қәсиееттің болмайтуғының дәлилләеў.
5. Массасы 10 г болған оқ затворының массасы 200 г болған мылтықтың стволының аүзынан 300 м/с тезлик пенен ушып шығады. Мылтықтың затворы стволға қаттылығы 25 кН/м болған пружина менен қысылады. Атыұдан кейин затвор қандай аралыққа жылжыйды?

18-вариант

1. Кюри ҳәм Нейман принциплері. Симметрияның шеклик топарлары. Кристаллардың физикалық қәсиеетлеринің симметриясы менен ноқатлық симметриясы арасындағы байланыс.
2. Бир ҳәм еki атомлы пәнжерелердин тербелислери спектри. Акустикалық ҳәм оптикалық модалар.
3. Қатты денелердин электр өткізгишлиги. Металлар менен ярым өткізгишлердин электр өткізгишликлери арасындағы айырма.
4. Қатты денелердин оптикалық қәсиееттері. Оптикалық актив кристаллар.
5. Қаттылықтары 0,3 кН/м ҳәм 0,5 кН/м болған еки пружина избе-из жалғанған ҳәм екинши пружинаның абсолют деформациясы 3 см ге тең болатуғындай етип созылады. Пружиналарды созыуда атқарылған жумыс есаплансын.

19-вариант

1. Кристаллық ҳәм аморф қатты денелердин ҳәзирги заман илими менен техникасындағы әхмийети.
2. Қатты денелердеги атомлар ҳәм молекулалар арасындағы байланыслар. Ионлы байланыс (Гетерополяр байланыс).
3. Кристалдың лаэграммасы ҳәм эпиграммасы тийкарында оның кристаллографиялық бағыттарының ориентацияларын анықлаў.
4. Қатты денелердин атомлық-кристаллық құрылышын изертлеў усыллары. Электронлық микроскопия ҳәм электронография.
5. Диаметри 2 см, узындығы 60 м болған қорғасын жоқарғы ушынан қозғалмайтуғындай қылып беккемленген. Төменги ушына 100 кг массалы жүк илдирилген. Сымның жоқарғы ушындағы механикалық кернеў табылсын.

20-вариант

1. Кристаллардың структурасы. Түўры ҳәм кери пәнжерелер. Элементар қутыша. Миллер индекслери. Жайластырыў тығыздығы.

2. Қатты денелердеги атомлар ҳәм молекулалар арасындағы байланыслар. Ковалентли байланыс (Гомеополяр байланыс).

3. Қатты денелердин механикалық қәсийетлери. Серпимли ҳәм эластик деформациялар.

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

5. Қатты денелердин атомлық-кристаллық курылышын изертлеў усыллары. Рентгенструктуралық анализ.

21-вариант

1. Қатты денелердин жыллылық қәсийетлери. Қатты денелердин жыллылық сыйымлығы. Дюлонг ҳәм Пти нызамы.

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

3. Қатты денелердеги атомлар ҳәм молекулалар арасындағы байланыслар. Ионлық байланыс.

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

5. Қатты денелерди поляризациялық микроскоп пенен изертлеў.

22-вариант

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

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

3. Қатты денелердин механикалық қәсийетлери. Серпимли ҳәм эластик деформациялар.

4. Қатты денелердеги атомлар ҳәм молекулалар арасындағы байланыслар. Ван-Дер-Ваальс байланысы.

5. Тербелий рентгенограммаларын ҳәм Лауэграммаларды түсириў жәрдеминде кристаллық пәнжере турақтыларын есаплаў.

23-вариант

1. Физикалық қәсийетлери бойынша, соның ишинде электр өткизгишилтиң шамасы ҳәм характеристи бойынша қатты денелердин классификациясы.

2. Кублық пәнжерелер ушын (әпиүайы, қапталдан орайласқан ҳәм көлемде орайласқан) кери пәнжерени дүзиў ҳәм Бриллюэн зоналарын белгилеў.

3. Металлық байланыс. Металлардың жыллылық ҳәм электр тоғын өткизгишилигі. Жыллылық өткизгишилк пенен электр өткизгишилк арасындағы байланыс.

4. Қатты денелердин электрлик өткизгишилигі. Металлар ҳәм ярым өткизгишлер.

5. Қорғасын сым жоқары ушынан тик ҳалатта илдирилген. Аүйрлық күшинин тәсиринде үзилип кетпеўи ушын сым қандай ең үлкен узынлыққа ийе болыўы мүмкін. Қорғасынның беккемлик шегарасы 12,3 МПа.

24-вариант

1. Кристаллық ҳәм аморфлық қатты денелер. Кристаллық ҳәм аморф денелердин бир биринен айырмашылығы. Кристаллық курылыш.

2. Қатты денелердеги атомлар ҳәм молекулалар арасындағы байланыслар. Ван-дер-Ваальс ҳәм ковалентлик байланыслыр.

3. Қатты денелердин механикалық қәсийетлери. Серпимли ҳәм эластик деформациялар.

4. Кристаллардағы микро - и макроскопиялық электр майданлары. Локаллық майдан. Қатты денелердин поляризацияның механизмлери. Диэлектриклик сициргишилк.

5. Диаметри 1 мм болған полат сымның беккемли шегарасы 294 МПа дан артпастан көби менен қанша муғдардағы жүкке шыдауы мүмкин. Усы жүктин тәсиринде сымның созылышы басланғыш узынлығының қандай бөлимин қурайды.

25-вариант

1. Металлардағы Бриллюэн зоналары. Үш өлшемли жағдай ушын улыўмаластырыў.

2. Гармоникалық осциллятор ҳаққындағы элементар квантмеханикалық мәселе. Кристаллық пәнжерениң тербелислериниң энергияларының квантланышы. Планк тарқалышы.

3. Пәнжере атомларының тербелислеридеги ангармонизм. Жыллылық кеңейиў. Қатты денелердин жыллылық кеңейиў коэффициенти.

4. Фононлардың өз-ара тәсир етисиўи. Нормаль процесслер менен асырып өткизиў процесслери. Жыллылық өткизигишилк.

5. Массасы 3,9 кг полат стержень өзиниң басланғыш узынлығының 0,001 бөлимине созылған. Созылған стерженнин потенциал энергиясы табылсын.

26-вариант

1. Қатты денелердеги фазалық өтиўлер. Бириңши ҳәм екінши әүлад фазалық өтиўлері.

2. Кристаллофизикадағы Кюри ҳәм Нейман принциплери. Бул принциплерди қолланышы.

3. Гармоникалық осциллятор ҳаққындағы элементар квантмеханикалық мәселе. Кристаллық пәнжерениң тербелислериниң энергияларының квантланышы. Планк тарқалышы.

4. Ҳәр қандай сингониялы кристаллардағы кристаллографиялық тегисликлер арасындағы қашықтықтар.

5. Узынлығы 2 м ҳәм көлденең кесе-кесим майданы 2 см^2 болған темир стержень 10 кН күш пенен созылмақта. Созылған стерженнин потенциал энергиясы ҳәм энергияның көлемлик тығыздығы табылсын.

27-вариант

1. Гук нызамы. Юнг модули. Серпимлилік модули тензоры.

2. Қатты денелердеги байланыс энергиясы. Металлардағы байланыс энергиясы.

3. Металлардағы еркін электронлар. Қатты денелердин зоналық структурасы.

4. Пироэффекттин тәбияты. Пироэффекттин жүзеге келийиниң зәрүрли ҳәм жеткилилік шәрттери. Электрострикция.

5. Узынлығы 2 м ҳәм көлденең кесе-кесим майданы 2 см^2 болған темир стержень 10 кН күш пенен созылмақта. Созылған стерженнин потенциал энергиясы ҳәм энергияның көлемлик тығыздығы табылсын.

28-вариант

1. Кристаллардың серпимлилік қәсийетлери. Деформация хәм механикалық кернеўлер тензорлары, олардың қәсийетлери.
2. Қатты денелердеги байланыс энергиясы. Молекулалар аралық кристаллардың байланыс энергиясы.
3. Қатты денелердеги байланыс энергиясы. Ионлық хәм ковалентлик кристаллардағы байланыс энергиялары.
4. Кристаллардың структурасы хәм кристаллардағы рентген нурларының дифракциясы. Вульф-Брэгг теңлемеси.
5. Қаттылықтары 1 кН/м хәм 3кН/м болған еки пружина параллел жалғанған. Усы системаның абсолют деформациясы 5 см болған ҳалдағы потенциал энергиясы анықлансын.

29-вариант

1. Симметрия ҳақындағы түснік. Симметрия элементлери. Кристаллардың трансляциялық симметриясы хәм Бриллюэн зоналары.
2. Жыллылық сыйымлығының квант теориясы. Эйнштейн хәм Дебай моделлери.
3. Диэлектриклердин электрик қәсийетлери. Поляризация. Поляризация векторы.
4. Ярым өткизгишлердин зоналық структурасы. Ярым өткизгишлердеги меншиклик, электронлық хәм тесикшелик өткизгишилік.
5. Полат стержень созылғанда стержень материалындағы механикалық кернеў 300 МПа болған. Созылған стержень потенциал энергиясының көлемлік тығызылдығы табылсын.

30-вариант

1. Ковалентлик байланыс: алмасыў тәсирлесиүи, байланыслардың бағытланғанлығы хәм тойынышылдығы.
2. Төртинши рангалы серпимли берилгишлик хәм серпимли қаттылық тензорлары.
3. Кристаллық диэлектриклердин поляризациясы. Поляризация тензоры.
4. Қатты денелердин зоналық құрылышы. Валентли, қадаған етилген хәм өткизгишилік зоналары.
5. Узынлығы 5 м хәм кесе-кесими 2 mm^2 болған сымға 5,1 кг массалы жүк илдирилген. Нәтийжеде сым 0,6 мм ге узарады. Сым материалы ушын Юнг модулиниң мәниси табылсын.

31 вариант

1. Кери пәнжерениң анықламасы. Туўры хәм кери пәнжерелер арасындағы байланыс. Кери пәнжере векторларының қәсийетлери.
2. Қатты денелердеги фазалық өтиўлер. Екинши әүлад фазалық өтиўлериндеги кристалдың симметриясының өзгериўлери.
3. Әпиўайы еки өлшемли квадрат пәнжерениң киши тербелислери. Әпиўайы кублық пәнжерениң киши тербелислери.
4. Қатты денелердин оптикалық қәсийетлери. Оптикалық индикаториса. Қос нур сындырыў.
5. Қаттылықтары 0,3 кН/м хәм 0,8 кН/м болған еки пружина избе-из жалғанды. Егер пружина 1,5 см ге деформацияланған болса, биринши пружинаның абсолют деформациясын анықлан.

32 вариант

1. Кристаллографиялық пәнжере тегисликleri ҳәм Миллер индекслери.
2. Кристаллардағы рентген нурларының дифракциясы ҳәм кери пәнжере.
3. Кристаллардың жылдылық сыйымлығы. Дебай температурасы. Кристаллар ушын $C_p - C_v$ айырмасын табыў.
4. Диэлектрикlerдин қәсийетлери. Диэлектриклик сициргишилк ҳәм поляризацияланышылық. Электронлық поляризацияланышылық.
5. Қаттылықлары 2 кН/м ҳәм 6 кН/м болған пружиналардың избе-из ҳәм параллел жалғанғандығы қаттылықлары анықлансын.

33 вариант

1. Кристаллардағы рентген нурларының дифракциясы. Рентген нурларының шашырауының атомлық ҳәм структуралық факторлары.
2. Қатты денелердеги фононлар ҳәм пәнжерениң тербелислери. Пәнжере тербелислеринин қвантлық характеристикалары. Фононның импульси ҳәм энергиясы.
3. Сегнетоэлектриклик кристаллар. Сегнетоэлектриклик фазалық айланыслар. Пироэлектриклер.
4. Кристаллардағы байланыслар типтери. Инерт газлер кристаллары. Ван-дер-Ваальс-Лондон күшлери.
5. Узынлығы 1 м ҳәм кесе-кесиминин майданы 1 см² болған полат стерженди 1 мм ге созыў ушын қандай жумыс атқарыў керек?

34-вариант

1. Кристаллардағы атомлар арасындағы байланыс күшлеринин тәбияты. Ионлық байланыс: байланыс энергиясы, Маделунг турақтысы. Ийтерилис күшлеринин тәбияты.
2. Кристаллардың серпимли қәсийетлери. Кристаллардың кернеўлер менен деформациялар. Серпимли деформацияларды анализлеў.
3. Қатты денелердеги диамагнетизм менен парамагнетизм. Парамагнетизмниң қвантлық теориясы.
4. Ярым өткізгиш кристаллар. Меншикли ҳәм қосымталы өткізгишилк. Р ҳәм n типидеги ярым өткізгишлер.
5. Пружинаны 1 см ге қысыў ушын 10 Н күш қысыў керек. Егер күш қысыўға пропорционал болса, пружинаны 10 см ге қысыў ушын қандай жумыс атқарыў керек?

35-вариант

1. Ковалентлик байланыс: алмасыў тәсирлесиүи, байланыслардың бағытланғанлығы ҳәм тойынышылығы.
2. Төртінши рангалы серпимли берилгишилк ҳәм серпимли қаттылық тензорлары.
3. Қатты денелердің жылдылық өткізгишилги. Пәнжерениң жылдылық қарсылығы. Нормал процесслер ҳәм 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 типтери. Инерт газлер кристаллары. Ван-дер-Ваальс-Лондон күшлери. Молекулалық байланыс.

2. Ярым өткізгішлер. Меншикли өткізгішлик. Қадаған етилген зона.
3. Ферромагнитлердин магнитлик құрылышы.
4. Қатты денелердеги фотоөткізгішлик. Кеңисликлеги заряд ямаса поляризациялық әффеクトтер.
5. Қаттылығы 1 кН/м болған пружина 4 см ге қысылған. Пружинаның қысылығын 18 см ге шекем арттырыў ушын қандай жумыс атқарылыўы керек?

37-вариант

1. Қатты денелердеги металлық байланыс.
2. Сегнетоэлектриклердин, пироэлектриклердин ҳәм пьезоэлектрлердин физикалық қәсийетлери.
3. Еки атомлы сывықты шынжырдың киши тербелислери. Тербелислердин акустикалық ҳәм оптикалық тармақтары.
4. Қатты денелердин магнитлик қәсийетлери. Алмасыў ҳәм релятивистлик тәсир етисиўлер. Парамагнетиклер, диамагнетиклер, ферромагнетиклер, антиферромагнетиклер, ферримагнетиклер.
5. Пружинаның жокарғы ушында турған тахтайша үстине қойылған тәрези тасы пружинаны 2 мм ге қысады. Пружинаның ушына 5 см бийиккітен түскен тәрези тасы пружинаны қаншаға қысады?

38-вариант

1. Қатты денелер пәнжересіндеги атомлардың тербелислери.
2. Қатты денелердин атомлық-кристаллық структурасын изертлеў усыллары. Рентгенографиядығы полихроматикалық Лауэ усылы.
3. Қатты денелердеги екинши әүләд фазалық өтиўлериндеги кристаллық пәнжере симметриясының өзгерислери.
4. Пироэлектриклик кристаллар ҳәм олардың кристаллық құрылышының өзгешеликтері. Орайға карата симметриялы кристалларда пироэлектриклик қәсиеттің болмайтуғының дәлиллеў.
5. Массасы 10 г болған оқ затворының массасы 200 г болған мылтықтың стволының аүзынан 300 м/с тезлик пенен ушып шығады. Мылтықтың затворы стволға қаттылығы 25 кН/м болған пружина менен қысылады. Атыўдан кейин затвор қандай аралықта жылжыйды?

39-вариант

1. Қюри ҳәм Нейман принциптери. Симметрияның шеклик топарлары. Кристаллардың физикалық қәсийетлеринің симметриясы менен ноқатлық симметриясы арасындағы байланыс.
2. Бир ҳәм еки атомлы пәнжерелердин тербелислери спектри. Акустикалық ҳәм оптикалық модалар.
3. Қатты денелердин электр өткізгішлігі. Металлар менен ярым өткізгішлердин электр өткізгішліктери арасындағы айырма.
4. Қатты денелердин оптикалық қәсийетлери. Оптикалық актив кристаллар.
5. Қаттылықтары 0,3 кН/м ҳәм 0,5 кН/м болған еки пружина избе-из жалғанған ҳәм екинши пружинаның абсолют деформациясы 3 см ге тең болатуғындай етип созылады. Пружиналарды созыуда атқарылған жумыс есаплансын.

40-вариант

1. Кристаллық ҳәм аморф қатты денелердин ҳәзирги заман илими менен техникасындағы әхмийети.
2. Қатты денелердеги атомлар ҳәм молекулалар арасындағы байланыслар. Ионлы байланыс (Гетерополяр байланыс).
3. Кристалдың лаэграммасы ҳәм эпиграммасы тийкарында оның кристаллографиялық бағытларының ориентацияларын анықлау.
4. Қатты денелердин атомлық-кристаллық құрылышын изертлеў усыллары. Электронлық микроскопия ҳәм электронография.
5. Диаметри 2 см, узынлығы 60 м болған қорғасын жоқарғы ушынан қозғалмайтуғындай қылышпек беккемленген. Төменги ушына 100 кг массалы жүк илдирилген. Сымның жоқарғы ушындағы механикалық кернеў табылсын.

41-вариант

1. Кристаллардың структурасы. Туўры ҳәм кери пәнжерелер. Элементар қутыша. Миллер индекслери. жайластырыў тығыздығы.
2. Қатты денелердеги атомлар ҳәм молекулалар арасындағы байланыслар. Ковалентли байланыс (Гомеополяр байланыс).
3. Қатты денелердин механикалық қәсийетлери. Серпимли ҳәм эластик деформациялар.
4. Диаметри 2 см, узынлығы 60 м болған қорғасын жоқарғы ушынан қозғалмайтуғындай қылышпек беккемленген. Төменги ушына 100 кг массалы жүк илдирилген. Сымның төменги ушындағы механикалық кернеў табылсын.
5. Қатты денелердин атомлық-кристаллық құрылышын изертлеў усыллары. Рентгенструктуралық анализ.

42-вариант

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

43-вариант

1. Кристаллографиялық пәренже. Пәнжерениң түйинлери ҳәм векторлары. Кристаллографиялық системалар, категориялар, сингониялар.
2. Қатты денелер физикасының кристаллография, ярым өткізгішлер физикасы менен байланысы.
3. Қатты денелердин механикалық қәсийетлери. Серпимли ҳәм эластик деформациялар.
4. Қатты денелердеги атомлар ҳәм молекулалар арасындағы байланыслар. Ван-Дер-Ваальс байланысы.
5. Тербелій рентгенограммаларын ҳәм лауэграммаларды түсириў жәрдемінде кристаллық пәнжере тұрақтыларын есаплаў.

44-вариант

1. Физикалық қәсийетлери бойынша, соның ишинде электр өткізгішліктиң шамасы ҳәм характеристи бойынша қатты денелердин классификациясы.

2. Кублық пәнжерелер ушын (әпійайы, қапталдан орайласқан ҳәм көлемде орайласқан) кери пәнжерени дүзиү ҳәм Бриллюэн зоналарын белгилеү.

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

4. Қатты денелердин электрлік өткізгішлігі. Металлар ҳәм ярым өткізгішлер.

5. Қорғасын сым жоқары ушынан тик ҳалда илдирилген. Аўырлық күшинин тәсиринде үзилип кетпеүи ушын сым қандай ең үлкен узынлыққа ийе болыуы мүмкін. Қорғасынның беккемлик шегарасы 12,3 МПа.

45-вариант

1. Кристаллық ҳәм аморфлық қатты денелер. Кристаллық ҳәм аморф денелердин бир биринен айырмашылығы. Кристаллық құрылыш.

2. Қатты денелердеги атомлар ҳәм молекулалар арасындағы байланыслар. Ван-дер-Ваальс ҳәм ковалентлик байланыслыр.

3. Қатты денелердин механикалық қәсийетлери. Серпимли ҳәм эластик деформациялар.

4. Кристаллардағы микро - и макроскопиялық электр майданлары. Локаллық майдан. Қатты денелердин поляризацияның механизмлери. Диэлектрик сициргишилік.

5. Диаметри 1 мм болған полат сымның беккемлик шегарасы 294 МПа дан артпастан көби менен қанша муғдардағы жүкке шыдауы мүмкін. Усы жүктин тәсиринде сымның созылышы басланғыш узынлығының қандай бөлимин қурайды.

46-вариант

1. Металлардағы Бриллюэн зоналары. Үш өлшемли жағдай ушын улыўмаластырыў.

2. Гармоникалық осциллятор ҳаққындағы элементар квантмеханикалық мәселе. Кристаллық пәнжерениң тербелислериниң энергияларының квантланыўы. Планк тарқалыўы.

3. Пәнжере атомларының тербелислеридеги ангармонизм. Жыллылық кеңейиў. Қатты денелердин жыллылық кеңейиў коэффициенти.

4. Фононлардың өз-ара тәсір етисиўи. Нормаль процесслер менен асырып өткізиў процесслери. Жыллылық өткізгішлік.

5. Массасы 3,9 кг полат стержень өзиниң басланғыш узынлығының 0,001 бөлімине созылған. Созылған стерженнин потенциал энергиясы табылсын.

47-вариант

1. Қатты денелердеги фазалық өтиўлер. Ериў ҳәм қатыў. Бириңи ҳәм екинши әүлад фазалық өтиўлері.

2. Кристаллофизикадағы Кюри ҳәм Нейман принциплери. Бул принциплерди айқын мысаллар ушын қолланыў.

3. Гармоникалық осциллятор ҳаққындағы элементар квантмеханикалық мәселе. Кристаллық пәнжерениң тербелислериниң энергияларының квантланыўы. Планк тарқалыўы.

4. Ҳәр қандай сингониялы кристаллардағы кристаллографиялық тегисликлер арасындағы қашықтықтар. Структуралық кристаллографияның тийкарғы теңлемелери.

5. Узынлығы 2 м ҳәм көлденең кесе-кесим майданы 2 см^2 болған темир стержень 10 кН күш пенен созылмақта. Созылған стерженнин потенциал энергиясы ҳәм энергияның көлемлик тығыздығы табылсын.

48-вариант

1. Гук нызамы. Юнг модули. Серпимлилик модули тензоры.
2. Қатты денелердеги байланыс энергиясы. Металлардағы байланыс энергиясы.
3. Металлардағы еркін электронлар. Қатты денелердин зоналық структурасы.
4. Пироэффекттиң тәбияты. Пироэффекттиң жүзеге келийиниң зәрүрли хәм жеткилилік шартлери. Электрострикция.
5. Узынлығы 2 м хәм көлденең кесе-кесим майданы 2 см^2 болған темир стержень 10 кН күш пенен созылмақта. Созылған стерженнин потенциал энергиясы хәм энергияның көлемлик тығыздығы табылсын.

49-вариант

1. Кристаллардың серпимлилик қәсийетлери. Деформация хәм механикалық кернеўлер тензорлары, олардың қәсийетлери.
2. Қатты денелердеги байланыс энергиясы. Молекулалар аралық кристаллардың байланыс энергиясы.
3. Қатты денелердеги байланыс энергиясы. Ионлық хәм ковалентлик кристаллардағы байланыс энергиялары.
4. Кристаллардың структурасы хәм кристаллардағы рентген нурларының дифракциясы. Вульф-Брэгг теңлемеси.
5. Қаттылықтары 1 кН/м хәм 3 кН/м болған еки пружина параллел жалғанған. Усы системаның абсолют деформациясы 5 см болған ҳалдағы потенциал энергиясы анықлансын.

50-вариант

1. Симметрия ҳаққындағы түсиник. Симметрия элементлери. Кристаллардың трансляциялық симметриясы хәм Бриллюэн зоналары.
2. Жыллылық сыйымлығының квант теориясы. Эйнштейн хәм Дебай моделлери.
3. Диэлектриклердин электрлік қәсийетлери. Поляризация. Поляризация векторы.
4. Ярым өткизгишлердин зоналық структурасы. Ярым өткизгишлердеги меншиклик, электронлық хәм тесикшелік өткизгишлик.
5. Полат стержень созылғанда стержень материалындағы механикалық кернеў 300 МПа болған. Созылған стержень потенциал энергиясының көлемлик тығыздығы табылсын.

«Қатты денелер физикасы» пәни бойынша лекциялар дизими

1-санлы лекция. Кирисиү. Физикалық қәсийетлери бойынша, соның ишинде электр өткизгишликтиң шамасы хәм характеристи бойынша қатты денелердин классификациясы. Қатты денелер физикасының кристаллография, ярым өткизгишлер физикасы менен байланысы. Қатты денелердин қәзіргі заман илими менен техникасындағы әхмийети. Курстың предмети хәм мазмұны. Қатты денелердин анықламасы. Кристаллық хәм аморфлық қатты денелер. Кристаллографиялық пәренже. Пәнжерениң түйинлери хәм векторлары. Сингониялар, кристаллографиялық категориялар. Бравэ пәнжерелери. Бравэ пәнжерелериниң типтери бойынша кристалларды классификациялау. Элементар күтыша.

2-санлы лекция. Кристаллардың симметриясы. Симметрияның ноқатлық хәм кеңисликтеги топарлары. Симметриясының типтери бойынша кристаллардың классификациялары. Кристаллардың симметриясы менен олардың физикалық қәсийетлерин тәриплейтуғын тензорлардың симметриялары арасындағы байланыс.

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

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

5-санлы лекция. Коваленттік байланыс: алмасыў тәсирлесиўи, байланыслардың бағытланғанлығы ҳәм тойынышылығы. Ван-дер-Ваальс күшлери ҳәм молекулалық байланыс. Металлық байланыс.

6-санлы лекция. Қатты денелер пәнжересіндеги атомлардың тербеліслери. Бир ҳәм еки атомлы пәнжерелердин тербеліслери спектри. Акустикалық ҳәм оптикалық модалар. Дисперсиялық қатнаслар. Бриллюэн зоналары. Үш өлшемли жағдай ушын улыұмаластырыў. Цикллық шегаралық шәртлер ҳәм толқын векторының руқсат етилген мәнислері. Ҳаллар тығызлығы.

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

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

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

10-санлы лекция. Қатты денелердеги фазалық өтиўлер. Бириңи ҳәм екинши әүлад фазалық өтиўлері. Екинши әүлад фазалық өтиўлериндеги кристаллық пәнжере симметриясының өзгерислері.

11-санлы лекция. Кристаллардың серпимлилік қәсийеттері. Деформация ҳәм механикалық кернеўлер тензорлары, олардың қәсийеттері. Гук нызамы. Серпимлилік модули тензоры.

12-санлы лекция. Қатты денелердин зоналық структурасы. Электронлардың жалысқақтығы, Фермидин кинетикалық энергиясы. Ферми қәдди. Электронлардың эффективлік массасы, ҳаллардың тығызлығы. Зоналардың толтырылыўы. Ферми тарқалыўы, Ферми температурасы. Дәүирли өзгеретуғын майдандағы электронлар. Бриллюэннин еки өлшемли зонасы, Бриллюэннин үш өлшемли зонасы ҳәм Ферми беті. Зоналардың толтырылыўы.

13-санлы лекция. Сегнето-, пиро- ҳәм пъезоэлектрлердин физикалық қәсийеттері. Пироэффекттің жүзеге келийинин зәрүрли ҳәм жеткилиқ шәртлері. Электрострикция.

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

15-санлы лекция. Қатты денелердин магниттик қәсийеттері. Алмасыў ҳәм релятивисттик тәсир етисиўлер. параметрлер, диамагнетиклер, ферромагнетиклер, антиферромагнетиклер, ферримагнетиклер. Кюри нызамы. Неель нокаты. Магниттик тәртипспеген кристаллардың энергиясы. Магниттик резонанс.

Кристаллық пәнжере

Кристаллық қатты денелердин ең баслы өзгешелиги оларды пайда етиші атомлардың ямаса молекулалардың кеңисликтері дәүирли түрде жайласыўы болып табылады. Сол атомлар менен молекулалар кеңисликтері үш өлшемли кристаллық

пәнжерени пайда етеди. Кристаллардың дұрыс геометриялық формаларға ийе болыўы атомлардың дәўирли жайласыўларына байланыслы. Кристаллық пәнжередеги атомлардың анизотропиялық жайласыўлары қатты денелердин техникада кең түрде қолланылатуғын көп сандағы анизотропиялық қәсийетлериниң пайда болыўын тәмийинлейді. Кристаллардың жылдылық қәсийеттери оның кристаллық пәнжересиниң тербелислерин таллаудан келип шығады. Электронлардың кристаллық пәнжерениң дәўирли потенциалындағы қозғалысларын қараў кристаллардың электрлик қасийетлерин түснеді. Кристаллық пәнжерениң ишинде қозғалатуғын бөлекшелердин де, сырттан келип түсетуғын бөлекшелердин де (электронлардың, нейtronлардың, фотонлардың) дифракциясы бақланады. Кристалларда қозғалатуғын электронлардың дифракциясының жәрдемінде кристаллардағы электронлардың энергиялық қәддилериниң жайласыўларының өзгешеликтери анықланады. Кристаллық пәнжередеги электронлардың, фотонлардың, нейtronлардың дифракциялары қатты денелердин қурылышын изертлеўдің ең көп информацияға ийе усыплары болып табылады. Бұзықтыклар, яғни кристаллық пәнжерениң дефекттери болса қатты денелердин барлық қәсийетлерине жұдә күшли тәсир етеди.

Биз төменде кристаллық пәнжере түснегиниң жәрдемінде кристалларды тәриплеўдің усыларын, кристаллардың пайда болыўының физикалық себеплерин хәм бөлекшелердин кристаллардағы дифракциясының өзгешеликтерин қарап шығамыз. Буннан кейинги лекцияларда қарап шығалатуғын қатты денелердин хәр қылды қәсийеттери усы лекциялардағы түснеклер менен концепцияларға тийкарланады.

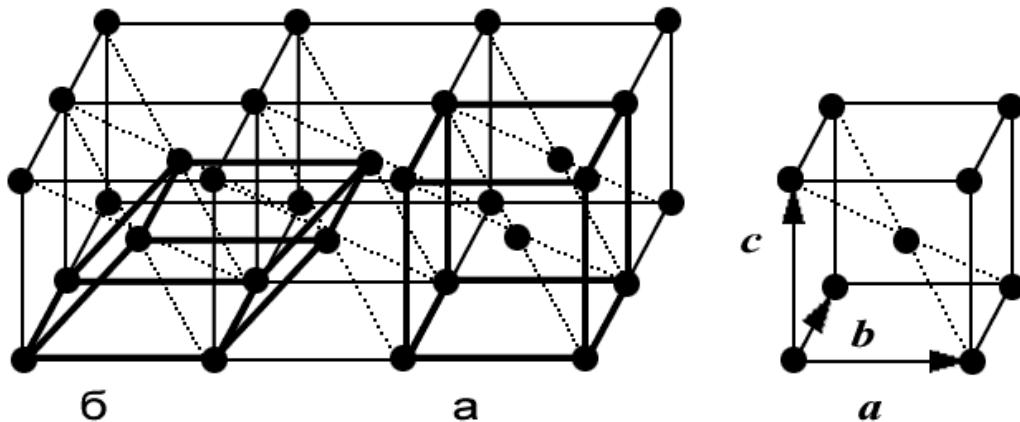
1.1. Кристаллардың қурылышын тәриплеў

Кристалды кеңисликте дәўирли түрде қайталанатуғын бирдей структуралық бирлик болған кристалдың элементар қутышаларынан турады деп көз алдымызға келтириўимиз мүмкин. Элементар қутыша бир ямаса бир неше атомнан турыўы мүмкин.

Элементар қутыша улыўма жағдайда қоя мүйешли паралелопипед формасына ийе болады. Бул қутышада жайласқан барлық атомларды кристалдың элементар қутышасының базиси деп атаў қабыл етилген. Элементар қутышаның хәм базистиң қурылышының нызамтықтары кристалдың көплеген қәсийетлерин анықтайты. Мысалы қутышаның симметриялық дәрежеси кристалдың көплеген қәсийетлерин, соның ишинде электрлик, магнитлик хәм механикалық қәсийетлерин анықтайты. Элементар қутыша өз ишине бир ямаса бир неше атомды алғыўы мүмкин. Темир, хром, мыс, гүмис сыйқылдық шартта кристалларда элементар қутыша тек бир атомнан турады. Кристал бир неше химиялық элементлерден туратуғын болса элементар қутыша кеминде еки атомнан турады. Бундай кристалларға мысал ретинде 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 алыў. Қәлелеген кристалдың қурылышын тәриплеў ушын оның элементар қутышасын сайлап алыў керек болады. Бир кристалдың элементар қутышасын көп санлы усыллар менен сайлап алыўдың мүмкин екенлеги өз-өзинен түснекли. (1.1-сүйрет). Элементар қутышаны сайлап алғанда қутышаның формасының әпиўайылығына, туўры мүйешлердин мүмкин болғанынша көп болыўына хәм оның көлеминиң минимумға ийе болыўына тырысады. Ең киши көлемге ийе болған элементар қутышаны әпиўайы элементар қутыша (примитивная элементарная ячейка) деп атайды. Бирақ көпшиликтік жағдайдарда элементар қутышаны көлемин ұлкенлеў, сонлықтан оның ишинде бир неше атом болатуғын, бирақ оның формасын әпиўайы етип сайлап алады. Бундай элементар қутышаларда базисти бир неше атом қурайды. 1.1-сүйретте α-темирдин кристаллық пәнжереси келтирилген. Бул қурылстық кублар менен толтырылған кеңислик

түринде сүйретлеген қолайлы. Кублардың мүйешлеринде (1) ҳәм 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 паралелопипед (б) түринде қабыл етиүге болады. Бирақ элементар қутыша ретинде көлеми 2 есе үлкен ҳәм мүйешлериниң барлығы да туұры мүйешли болған (а) қутышаны сайлад алған қолайлы. Бундай элементар катыша атомлардың жайласыўларындағы симметрияны жақсырақ сәүлелендіреди ҳәм оны математикалық жақтан таллау ушын қолайлы.



1.1-сүйрет. Көлемде орайласқан элементар қутышаны сайлад алыў.

Сайлад алынған элементар қутышаны оның қабырғаларына сәйкес келиўши ҳәм бир ноқатта кесилесетуғын үш a , b , c трансляциялары менен тәриплейди. $r' = r + n_1a + n_2b + n_3c$ қатнасы менен байланысқан (n_1, n_2, n_3 лер пүтин санлар) радиус-векторлары r' ҳәм r болған еки ноқат кристалдың ҳәр қылты элементар қутышалардағы базистиң бир ноқатын тәриплейди. Бундай жағдайда базистиң атомларының жайласыўларын бир элементар қутышаның шеклеринде тәриплеген қолайлы болады. Ал кристалдың барлық курылымы усы қутышаны «тиражлаў» менен әмелге асырылады. «Тиражлаў» ушын қутышаны трансляция векторлары деп аталатуғын $T = n_1a + n_2b + n_3c$ векторы шамаларына жылыстырып шығыў керек болады. Солай етип кристалдың курылымын толық тәриплеў ушын төмендегилерди бериў керек екен:

1) берилген ноқатты барлық T векторларына параллель көшириў жолы менен алынған кенисликтік пәнжере,

2) базис.

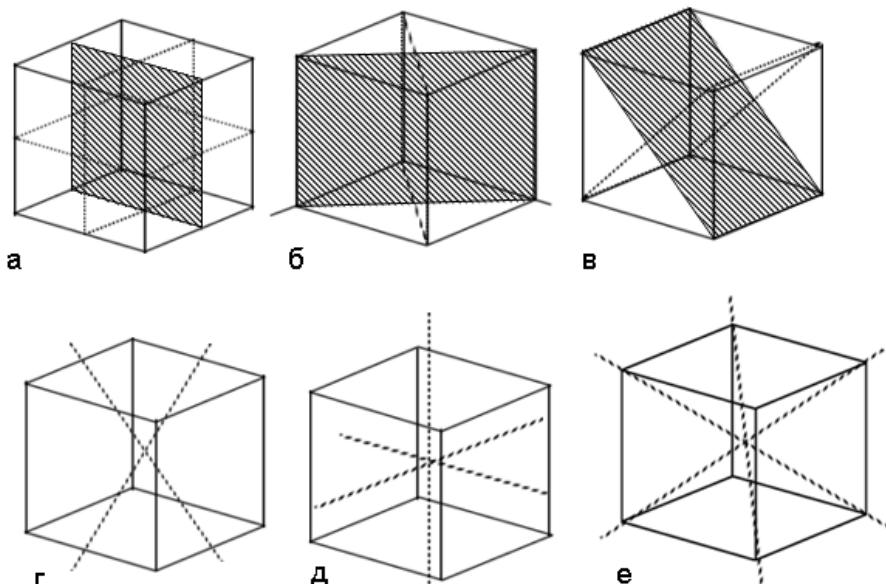
Кенисликтік пәнжерени әдетте a , b , c векторлары жәрдемінде харakterлейди. Буның ушын усы векторлардың узынлығы a , b , c шамаларын ҳәм олар арасындағы мүйешлер α , β , γ ларды бериў керек. a , b , c шамаларын кристаллық пәнжерениң дәүирлери деп атайды. Бул параметрлер затлардың қурылымы (структурасы) бойынша справочниклерде бериледи.

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

Базистеги атомлар санын қутышаның қаптал бетлері менен кесилген кенисликтеги атомлардың санын есаплаў менен әмелге асырылады. Элементар қутышаның ишиндеғи атомлар санына қаптал бетлер тәрепинен кесилген ярым, төрттен бир, сегизден бир атомлардың санлары қосылады. 1.1 (б) сүйретте көлтирилген қутышада төбелерде жайласқан мүйешлик сегизден бирлик 8 атом жайласқан. усыған байланыслы бундай

базис координаталары 000 болған 1 атомнан турады деп есаплайды. Кристаллографияда атомлардың координаталарын әдеттеги () түриндеги қаұсырмама алмайды. Себеби бундай қаұсырма жәрдеминде кристаллографиялық тегисликлер белгиленеди. КОК пәнжереде (1.1 (а) сүүретке қараңыз) қутышаның ишинде 1 атом ҳәм қутышаның төбелеринде сегизден бирлік 8 атом бар: бир атом 0,0,0 аүхалын, ал екинши атом $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ аүхалын ийелейди.

Кристаллық пәнжерелердин симметриясы. Көпшиликті заттардың кристаллық пәнжерелери бир неше симметрия элементтерине ийе болады. Симметрия элементтери менен симметриялық операциялар байланысқан. Симметриялық операциялар орынланғанда кеңисликлик пәнжере өзинин дәслепки аүхалына қайтып келеди. $2\pi/2$, $2\pi/3$, $2\pi/4$, $2\pi/6$ мүйешлерине бурауғын көшерлер (бундай көшерлерди екинши, үшинши, төртшінши ҳәм алтыншы тәртипли симметрия көшерлерди деп атайды) симметрия элементтери болып табылады. 1.1 (а) ҳәм 1.2-сүүреттерде көпшиликті пәнжерелер көп симметрия көшерлерине ийе (мысалы төртшінши, үшинши, екинши тәртипли симметрия көшерлер). Басқа түрдеги симметрия элементтери қатарына симметрия тегислигін (бундай тегисликті айналық шашыратыў тегислигі деп те атайды) ҳәм симметрия орайын (бундай ноқатты инверсия орайы деп те атайды) киргизүгө болады.



1.2-сүүрет.

Кубтың базы бир симметрия элементтери: а) кубтың қабырғаларына перпендикуляр болған үш дана симметрия тегислигі; б, в) кубтың қапталларының диагоналларына перпендикуляр болған 4 симметрия тегислигі (бундай тегисликлердин саны 6), г) кубтың қаптал диагоналларына параллель болған 2-тәртипли алты симметрия көшеринин екеюі (бул көшерлер қарама қарсы қабырғалардың орталары арқалы өтеди), д) кубтың қаптал беттерине перпендикуляр ҳәм олардың орайлары арқалы өтишши 4-тәртипли симметрия көшеринин үшінші, е) кубтың диагоналларына параллель ҳәм оның төбелері арқалы өтишши төрт дана 3-тәртипли симметрия көшері.

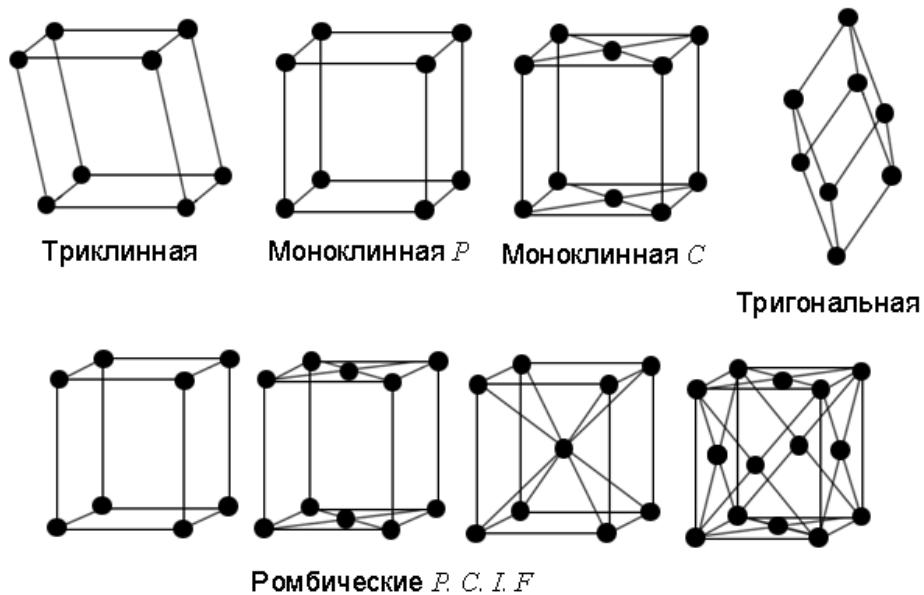
1.2-сүүреттеги кублық пәнжере қаптал беттерине параллель болған үш симметрия тегислигине, қаптал беттердин диагоналларына перпендикуляр болған алты дана диагоналлық симметрия тегислигине, үш төртшінши тәртипли симметрия көшерине, алты дана екинши тәртипли симметрия көшерине, төрт дана үшинши тәртипли симметрия көшерине ҳәм кубтың орайында жайласқан симметрия орайына ийе. Кристаллық

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

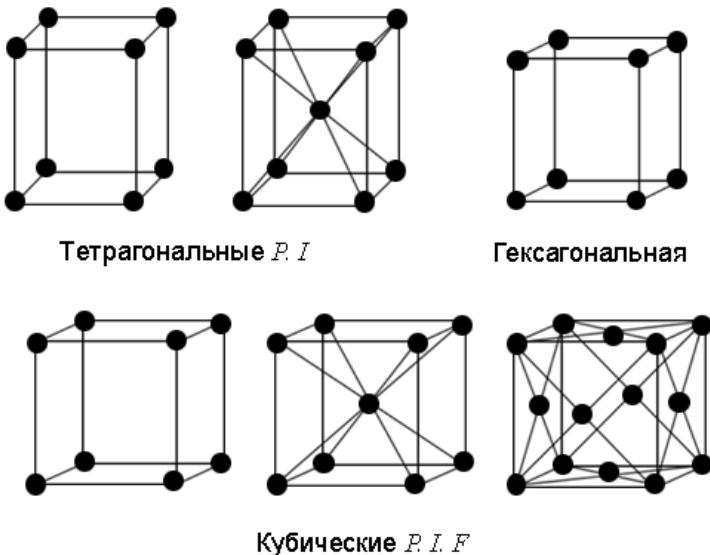
Кристаллық пәнжерелердин типтери. Топарлар теориясы жәрдемінде кристаллардың барлығын 14 дана кристаллық пәнжерениң жәрдемінде тәриплеудің мүмкін екенлегин көрсетти. Бундай пәнжерелерди Бравэ пәнжерелери деп атайдыз хәм олардың сұйыреттері 1.3-сұйыретте көлтирилген. Оларды элементар қутышаларының түри бойынша айрылатуғын жети системага бөлиү қабыл етилген:

- триклинилік,
- моноклинилік,
- ромбалик,
- тетрагоналлық,
- тригоналлық,
- гексагоналлық,
- кублық.

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



1.3а сұйырет.
Бравэ пәнжерелери.



1.3б сүйрет.

Бравэ пәнжерелери.

1. Триклиник системада барлық мүйешлер де, барлық тәреплердин узынлықтары да бир бирине тең емес. Бундай пәнжере элементар қутышаның орайында симметрия орайына иие болыўы мүмкін.

2. Моноклиник системада қутыша ҳәр қылыштың узынлықтағы қабырғаларға иие туұры призма түрінде болады. Қутыша туұры призманың ултанларында орайласқан болыўы мүмкін. Соныңтан моноклиник С пәнжере менен Р пәнжере бар. Усындағы пәнжереге симметрия элементтері қосылады: туұры призманың ултанына параллель симметрия тегислиги ҳәм ултанның орайы арқалы өтиўши 2-тәртипли симметрия көшери.

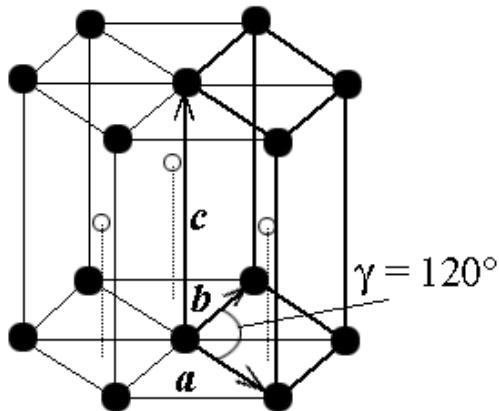
3. Ромбалық системада элементар қутыша туұры мүйешли ҳәм ҳәр қандай узынлықтағы қабырғаларға иие. Қутыша кристаллық пәнжерениң барлық 4 түрлерине иие: Р, I, F, A (В ямаса С). Бундай пәнжереде симметрия элементлеринің саны көп: қапталларға параллель болған үш симметрия тегислигі, бирдей болған қарама-қарсы қапталлардың орайы арқалы өтиўши үш 2-тәртипли симметрия көшери.

4. Тетрагоналлық системада қутыша ултанды квадрат болған туұры мүйешли параллелепипед түрінде иие. Қутыша примитивлик (әпиүайы) Р ямаса көлемде орайласқан I болыўы мүмкін. Ромбалық системада кириўши қутыша менен салыстырғанда тетрагоналлық системада бир дана төртінши тәртипли симметрия көшери ҳәм басқа да бир неше симметрия тегисликлери бар.

5. Кублық системада қутыша куб түрінде иие. Қутышаның қаптал бетлері орайласқан (қапталдан орайласқан куб ямаса КОК), қутышаның орайы орайласқан (көлемде орайласқан куб ямаса КОК) ямаса пүткиллей орайласпаған болыўы мүмкін (примитивлик ямаса Р-пәнжере). Бул ең жоқары симметрияға иие пәнжере болып табылады. Оның симметрия элементлерин биз жоқарыда көрдік (1.2-сүйрет).

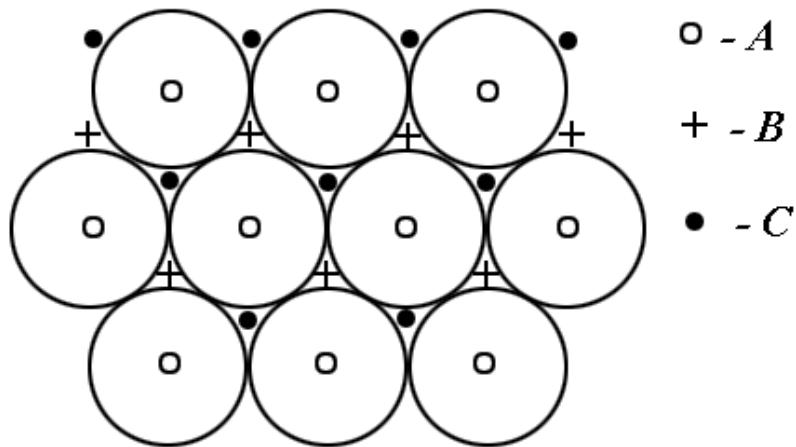
6. Гексагоналлық системада қутыша туұры призма формасына иие. Оның ултанды ромб болып табылады ҳәм ромбадағы мүйеш 60 градусқа тең. Қебинесе элементар қутышшадан үш есе үлкен қутышаны пайдаланады (1.4-сүйретте көрсетилген). Бундай қутыша дұрыс алты мүйешлик призма формасына иие ҳәм бундай призмадағы алтыншы тәртипли симметрия көшери анық көринип турады.

7. Тригоналлық системада қутышаны ромбоэдр формасында көрсетиў қабыл етилген. Оның барлық қабырғаларының узынлықтары бирдей. Оның тәбесиндеги мүйешлердин мәниси 90 градусқа тең емес. КОК ҳәм ҚОК пәнжерелерде көлеми сайлап алған кублық қутышшадан 2 ҳәм 4 есе киши болған тригоналлық қутышшаларды сайлап алғы мүмкін (1.1-мәселеге қараңыз).



1.4а сүйрет.

Гексагоналлық пәнжерениң элементар қутышалары.



1.4б сүйрет.

Тығыз жайластырылған құрылыштардағы (структуралардағы) атомлардың өзара жайласыў вариантылары.

Пәнжерелердин басқа барлық түрлері (тиpleri) a, b, c векторларын сайлап алыў жолы менен жоқарыда көлтирилген типлердин биреүине алып келинеди.

Пәнжерениң симметриясы физикалық қәсийетлердин анизотропиясын анықлады (хәр қыйлы бағыттар бойынша физикалық шамалардың хәр қыйлы болыўы). Базы бир физикалық қәсийетлердин анизотропиясын элементар қутышаның түри бойынша болжаўға болады. Мысалы салыстырмалы аз сандағы симметрия элементтерине ийе ромбалық, моноклинник хәм триклиник пәнжерелер ушын көп характеристикалардың анизотропиясы белгилі (мысалы салыстырмалы электр синиргишилік, жыллыштық өткізгишилік коэффициенті хәм басқалар). Затлардың бундай характеристикаларын әдетте екинши тәртипли тензорлардың жәрдемінде тәриплейди. Симметриялы кублық пәнжереде бул шамалар скаляр шамаларға айланады. Тетрагоналлық хәм гексагоналлық пәнжере жағдайларында кристалдың қәсийеттери с көшерине перпендикуляр болған қабырғаға перпендикуляр болған тегисликтерде бирдей болады.

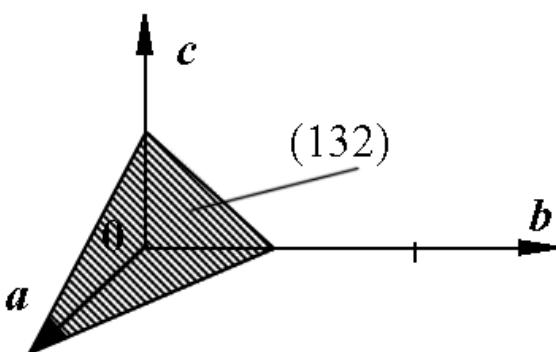
Вигнер-Зейц қутышасы. Вигнер-Зейц қутышасы деп аталатуғын элементар қутышаны сайлап алыўдың усылы бар. Бул қутышаны келеси лекцияларда кристалдағы бөлекшелердин қозғалысларын таллау ушын қолланамыз. Қутышаны сайлап алыў ушын кристаллық пәнжерениң берилген түйинине «ең жақын жайласқан» кеңисликтиң областын айырып алады. Буның ушын сайлап алынған түйинди қоңысылас түйин менен тутастырады хәм алынған сызықтың дәл ортасынан усы сызыққа перпендикуляр тегислик жүргизеди. Бул тегислик кеңисликти еки кеңисликке бөледи. Берилген түйинге ийе

кеңисликті айырып алады. Барлық айырып алғанған ярым кеңисликлердин кесілмелери Вигнер-Зейц құтышасын береди. Әпиүайы кублық, тетрагоналлық хәм ромбалық пәнжерелер ушын Вигнер-Зейц құтышасының формасы ҳәм өлшемлери бойынша орайы пәнжерениң түйинине сәйкес келиўши элементар құтышага сәйкес келеди. КОК ҳәм ҚОК пәнжерелеринде Вигнер-Зейц құтышасы қурамалырақ формаға ийе.

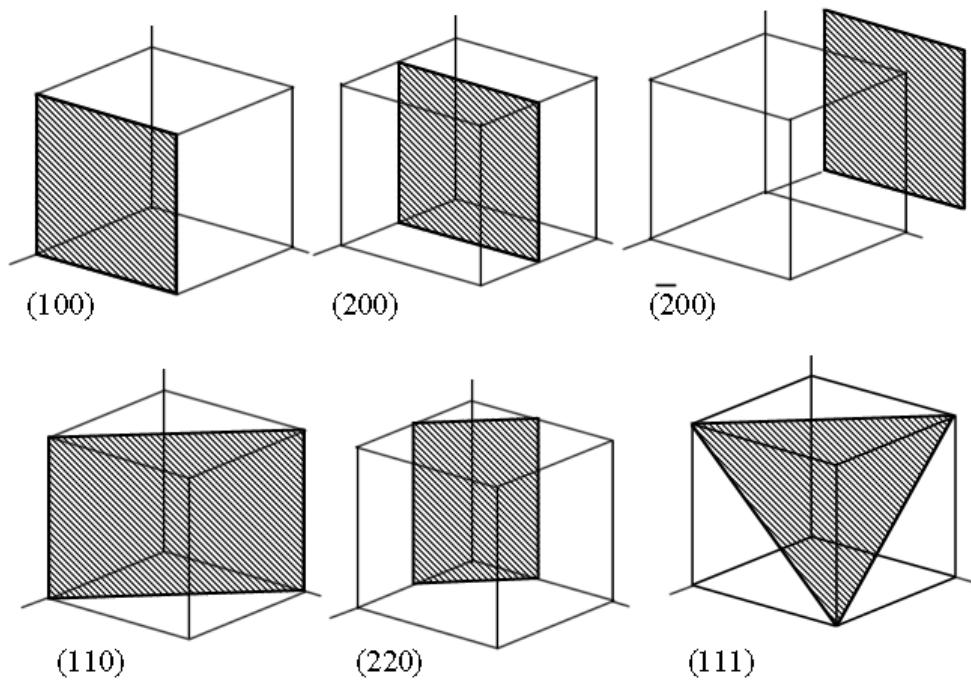
Кристаллық пәнжередеги бағыт. Кристаллық пәнжередеги бағытты a, b, c базислик векторындағы бағытлаұшы вектордың координаталары менен береди. Бул координаталарды әдетте квадрат қаўсырмаларға алып жазады. Координатаның мәниси терис болғандағы минус белгисин санның үстине минус белгисин қойыў менен әмелге асырады. Ең әхмийетлірек болған бағытлар пүтин санлар менен бериледи. 1.2-сүйреттеги [100] бағыты кубтың қабыргасына параллель. [100] ҳәм [110] бағытлары оның тәменгі ултанына параллель. Базы бир бағытлар пәнжерениң симметриялығына байланыслы бирдей (мысалы кублық пәнжереде [110], [101], [011] ҳәм [110] бағытлары). Бағытлардың усындай семействосын тәриплөў ушын $\langle 110 \rangle$ белгилеўи қабыл етилген.

Кристаллографиялық тегисликлер. Кристалда кристаллық пәнжерениң түйинлери арқалы өтетуғын кристаллографиялық тегисликлер үлкен әхмийетке ийе болады. Кристаллық пәнжерениң түйинлеринин өң көпшилиги жайласқан кристаллографиялық тегисликлер кристаллардың қапталларын болжағанды да, усы тегисликлер бойынша бөлекшелердин қозғалысларын қарағанды да жүдә үлкен әхмийетке ийе.

Кристаллографиялық тегисликлерди Миллер индекслері менен белгилеў қабыл етилген. Бундай индекслер үш саннын ибарат ҳәм әпиүайы қаўсырмамаға алып жазылады: (hkl) . Кери индекстиң терис белгисин жоқарысына жазады. Бундай индекслер әпиүайы 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 кесиндерди жүргизсе (1.5-сүйретті қараңыз), онда алынатуғын үш нокат усы нокатлар арқалы өтетуғын (hkl) тегисликлери бир мәнисли анықлады. 1.6-сүйретте (100), (200), (110), (110), (111) тегисликлери көрсетилген. 1.5-сүйреттеги тегисликке параллель етип кристаллық пәнжере түйинлери арқалы өтиўши ҳәм бир биринен $na/h, nb/k, nc/l$ қашықтығында турған (n арқалы пүтин сан белгиленген) көп сандағы тегисликлерди сайладап алыў мүмкін екенлигин аңғарыўға болады. Сондай тегисликлер арасындағы қашықтықты d_{hkl} арқалы белгилейди ҳәм (hkl) тегисликлер семействосы ушын тегисликлер арасындағы қашықтық деп атайды. d_{hkl} шамасын (000) нокатынан оған өң жақын болған (hkl) тегислигине шекемги аралық түринде есаплаў қолайлы. (1.5-сүйретте көрсетилген). Кублық құтышадағы ийе кристалларда Миллер индекслеринин мәнислері усы тегисликлерге түсірилген нормалдың бағытындағы вектордың индекслерине сәйкес келеди. Бирақ басқа түрдеги элементар құтышалар жағдайында бундай сәйкеслик орын алмайды.



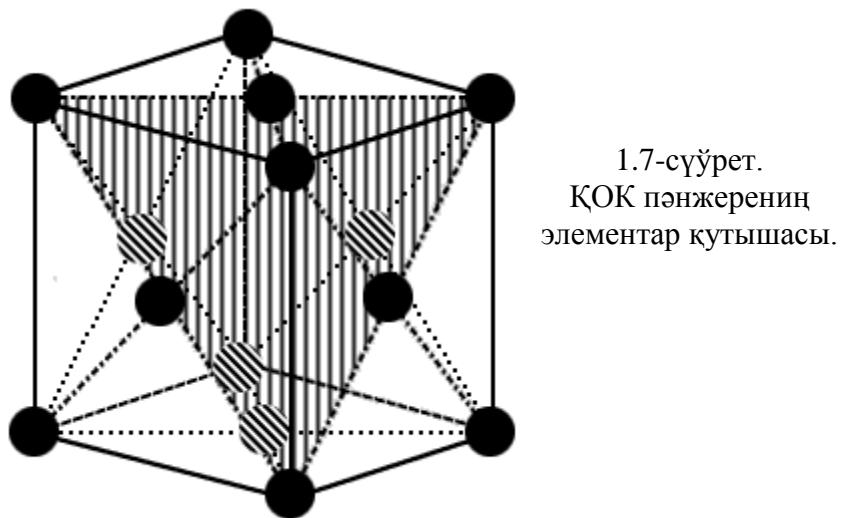
1.5-сүйрет.
Кристалдағы Миллер
индексинин геометриялық мәниси.



1.6-сүүрөт. Кублық пәнжерениң базы бир кристаллографиялык тегисликлери.

Жийи ушырасатуғын структуралар менен танысамыз.

Қапталда орайласқан кублық пәнжере 1.7-сүүретте көлтирилген элементтар қутышаға ийе болады. Түйинлер кубтың төбелеринде ҳэм қапталларының орайларында жайласқан. Қутышадағы түйинлердин саны 4 ке тең (8 дана сегизден бирге ҳэм 6 дана ярымға ийе). Ҳәр бир атомның $a/\sqrt{2}$ қашықтығында 12 қоңысыға ийе болатуғынығы көринип тур. Көп металлар тап усындан пәнжереге ийе (темир, кобальт, мыс ҳэм басқалар) ҳэм олардың атомлары пәнжерениң түйинлеринде жайласқан.

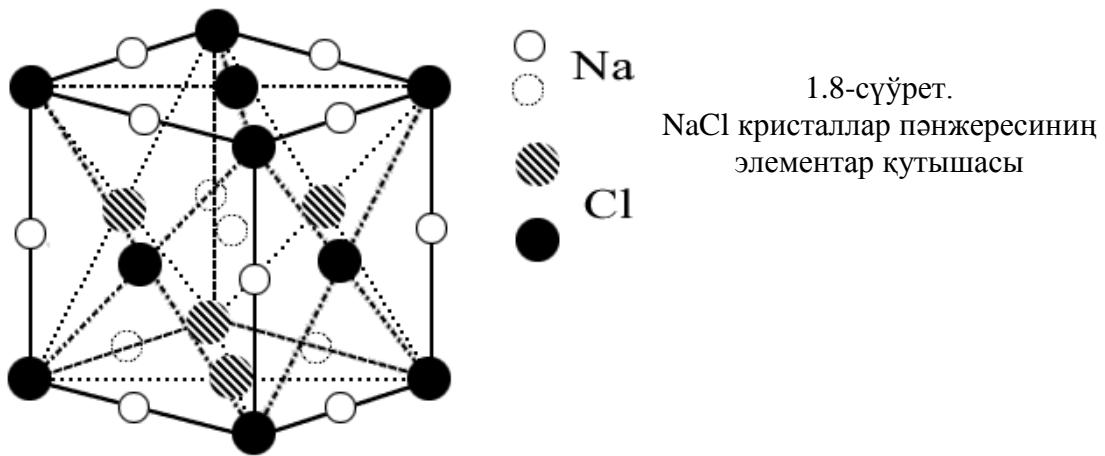


NaCl типиндеги құрылышты (1.8-сүүрет) ҚОК пәнжере түринде көрсетиў мүмкін. Бундай пәнжереде натрий ионлары түйинлерге сәйкес келеди, ал хлор ионлары болса Na ионларына салыстырғанда кубтың көлемлик диагоналы бойынша $a/2$ шамасына жылышқан. Бул жағдайда Бравэниң ҚОК пәнжересиниң базисин еки атом (еки ион) қурайды: координаталары $0,0,0$ болған натрий ҳэм координаталары $\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}$. Бирақ көпшиликтік жағдайдарда элементтар қутыша ретинде 8 атомнан ибарат куб қабыл етиледи. Олардың төртийи натрий ҳэм төртеюи 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 усындағы құрылышқа (структуратарға) көп кристаллар ийе (KCl, KBr, PbS, MgO ҳэм басқалар). Олар бир бириңен тек *a* шамаларының мәниси бойынша ғана парықланады.



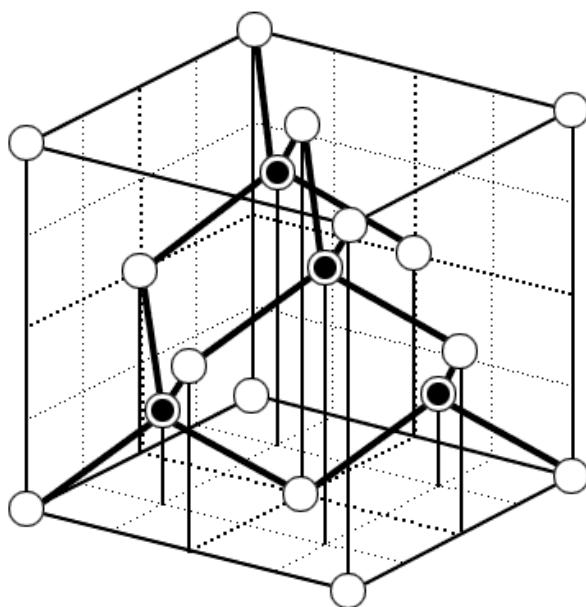
Алмаздың структурасы (1.9-сүүрет) ҚОК пәнжере сыпатында көрсетиўге болады. Бул жағдайда пәнжерени атомлары түйинлерде ҳәм көлемлик диагонал бойынша оларға салыстырғанда кеңисликлик диагоналдың $\frac{1}{4}$ бөлегине жылыстырылған еки пәнжерениң қосындысы түрінде көз алдыға елеслетемиз. Бундай ҚОК пәнжерениң базисин еки атом курайды. Олардың координаталары 0,0,0 ҳәм $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$. Көпшиликтің жағдайдарда алмаздың элементар қутышасы ретінде 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-сүүрет.

Алмаздың (ақ шариклер де, қара шариклер де углерод атомлары) ҳәм цинк сульфидинин (қара шариклер құқырт атомлары, ақ шариклер цинк атомлары) элементар қутышасы.

Хәр бир углерод атомының кеңисликлик диаметрдин $\frac{1}{4}$ шамасына теңдей қашықтықта жайласқан төрт ең жақын атом менен қоныслас екенлигин көрсетиўге болады. Басқа сөз беренен айтқанда хәр бир углерод атомы тетраэдрдин орайында жайласқан болып, сол

тетраэдрдин төбелеринде де углерод атомлары орналасқан. Ҳәр бир атом өз қонысылары менен ковалентли байланың хәм бир бири менен тендей мүйешлерди пайда етеди (келеси бөлімді қараңыз). Углеродтан басқа тап усындағы қурылышқа төрт валентли ярым өткізгишлер кремний менен германий ие.

Цинк сульфиди типиндеги қурылышты алыў ушын жоқарыда келтирилген алмаздың қурылышынан пайдаланыў керек. Бул жерде цинк атомларын «аўыспаған пәнжереге», ал құқырт атомларын «аўысқан пәнжереге» орналастырыў керек болады. Бундай қурылышта бир сорттағы атомның ҳәр бири тетраэдрлердин төбелеринде жайласқан екинши сорттағы төрт қонысыға ие. Олар бир бири менен ковалентли байланысқа ие. Бул байланыс бир бири менен тендей мүйешлерди пайда етеди.

Гексагоналлық структура (қурылыш) 1.4-сүүретте келтирилген. Уш элементар күтүшшаның сүүретин пайдаланған қолайлы. Бундай жағдайда қурылыш қатламлардан туратуғын хәррениң уясын көз алдына елеслетеди. Қөплеген заттар тап усындағы қурылышқа ие. Бундай жағдайда атомлар топары кеңисликте дұрыс алты мүйешликтерди пайда етеди. Бундай қурылыштың ҳәр қылыш түрлери жийи ушырасады. Бундай қурылышты әдетте тығыз жайластырылған гексагоналлық (ТЖГ) қурылыш деп атайды хәм оны қатламлар менен сәүлелендіриў мүмкін (1.4 б сүүрет): бириңи қатлам (A) – тәмендеги тегисликтиң түйинлеринде жайласқан атомлар – шарлар. Екинши қатламның атомлары (B) тәменги қатламдағы атомлардың арасындағы «ойықларда» тәменги қатламның атомлары менен тийисип жайласқан. Ал үшинши қатламдағы атомлар болса 1.4-сүүретте көрсетилгендей бириңи қатламдағы атомлардың дәл үстинде ямаса екинши қатламдағы атомлар арасындағы «ойықларда» жайласады. Нәтийжеде с векторының бағытында с дәүирине иие қатламлардың жайласыўларының дәүирилигі пайда болады. Бундай дәүирили қурылышты былайынша жазамыз: *ABABAB ...* Усындың салдарынан шарлардың тығыз жайластырылған қурылышы пайда болып, бунда ҳәр бир шар 12 жақын жайласқан қонысыға ие болады. Қонысылар арасындағы қашықтық шарлардың еки радиусына тең. Бундай қурылышта $\frac{c}{a}$ қатнасының $\frac{c}{a} = 8/3^{1/2} = 1,633$ шамасын тең екенлигине аңсат көз жеткериўге болады. Қөп металлар тап усындағы қурылышқа ие (тек ғана $\frac{c}{a}$ қатнасының мәниси сәл басқашалаў). Мысалы кобальтта $\frac{c}{a} = 1,622$, Магнийде $\frac{c}{a} = 1,623$, ал титанды $\frac{c}{a} = 1,586$.

Шарларды жайластырыўдың және бир усылыштың бар екенлигин аңфарыўымыз керек: дәслепки еки қатлам жоқарыдағыдан болып жайластырылады, ал үшинши қатламдағы (бул қатламды Сарқалы белгилеймиз) атомлар 1.4-сүүретте атанақлар менен белгиленген орында жайласады. Төртинги қатлам бириңи қатламның үстинде, бесинши қатлам екинши қатламның үстинде, қалғанлары тап сондай тәртипте жайластырылады. Бундай жағдайда с векторының бағытында $3c/2$ дәүирине иие қатламлардың *ABCABCABC ...* избе-излигиндеги жайластырыўлары жузеге келеди. Бундай жағдайда да жақын қонысы атомлардың саны 12 ге тең болады. Бундай қурылыштың қапталдан орайласқан кублық (ҚОК) қурылышқа сәйкес келетуғынлығын көрсетиўге болады (1.7-сүүрет). Бундай кублық қурылышта [111] бағыты с векторы менен бағытлас (1.4-сүүрет).

Жоқарыда баян етилген тығыз жайластырылған гексагоналлық ҳәм қапталда орайласқан кублық қурылышлардың бир бирине жұдә уқсас екенлигин аңсат аңфарыў мүмкін. Олар бир бириңен тек тығыз жайластырылған атомлардың избе-излиги менен парықланады. Сонықтан олардың пайда болыў энергиясы дерлік бирдей болыўы керек ҳәм қөплеген металлар шарайтлар азмаз өзгергенде ТЖГ ҳәм ҚОК пәнжерелерге иие бола алады. Мысалы неодим, ZnS , $ZnSe$ кристаллары тәменги температураларда ҚОК пәнжереге, ал жоқары температураларда ТЖГ пәнжереге ие.

Гейпара металлар менен қуймалар жоқарыда келтирилген атомлар қатламларының избе-излигиндеги дефектлерге иие болады (1.4-сүүретті қараңыз). Бундай жағдайда қатламлардың избе-излиги бузылады. Нәтийжеде ТЖГ ҳәм ҚОК пәнжерелер ҳақында кескин түрде анық айттыў мүмкіншилиги болмай қалады.

Көплеген затлар ҳәр қыйлы шарайтларда (мысалы температура, басым) ҳәр қыйлы кристаллық пәнжерелерге иие болады. Мысалы темир өжире температураларында көлемде орайласқан кублық (КОК), $910-1400^{\circ}\text{C}$ температураларында ҚОК, ал оннан да жоқары температураларда қайтадан КОК қурылышқа иие. Заттың бир бөлегинде еки түрли пәнжерениң бир ўақытта болыу мүмкін: олардың бири тең салмақлық, ал екиншиси метастабилли (метаорнықлы) болып, метаорнықлы пәнжере тең салмақлық пәнжереге өтип үлгемеген ҳалда сақланып қалады. Бундай ситуация шынықтырыудан (бирден салқынлатыудан) кейинги полатларда (Fe-C қуймаларында) орын алады. Шынықтырыудың ақыбетинде ҚОК ҳәм КОК пәнжерелерге иие областлардың қурамалы системасы пайда болады. Ҳәр қыйлы пәнжерелерге иие областлардың формалары менен жайласыўлары материалдың көплеген қәсийетлерин анықлайды.

1-мәселе: КОК пәнжерениң примитивли элементар қутышасы ретинде $a = \frac{1}{2}; -\frac{1}{2}; \frac{1}{2}; b = -\frac{1}{2}; \frac{1}{2}; c = (\frac{1}{2}; \frac{1}{2}; -\frac{1}{2})$ векторларында қурылған тригоналлық қутышаны сайлап алышың мүмкін екенлигин көрсетиңиз. Бұның ушын оның қабырғаларының узынлықтары ҳәм 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 ҳәм көшерлер бойынша узынлық ретинде 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 жәрдеминде есаплаймыз. a ҳәм b векторлары арасындағы ϕ мүйешинин косинусын

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

формуласының жәрдеминде табамыз. Сайлап алғынған элементар қутышаның көлемин төмөндеги анықлаўшының жәрдеминде есаплаймыз:

$$V_{\text{ак}} = a^3 \begin{vmatrix} 1/2 & -1/2 & 1/2 \\ -1/2 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & -1/2 \end{vmatrix} = a^3 1/2$$

Кутышаның көлеми еки атомға иие КОК пәнжерениң элементар қутышасының көлеминиң ярымына тең. Сайлап алғынған қутышаны примитивли деп атауға болады.

Аналитикалық геометрияның әпиүайы формулаларын есаплаўлар жүргизилип атырған координаталар системасы туұры мүйешли болғанда, ал оның ортлары бирдей узынлыққа иие болғанда ғана пайдаланыў мүмкін. Мәселени шешиүде биз пайдаланған координаталар системасы тап усындан 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 қурыў мүмкін (8-сүйретті қараңыз).

2-мәселе. Алмаздың кристаллық пәнжересинде (9-сүйрет) координаталары $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$ болған ҳәр бир атомның (қәлелеген атомның екенлигин де көрсетиүге болады) терт жақын жайласқан қоңысы атом менен қоршалғанлығын ҳәм 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 қонысыларының координаталарының 0 0 0; $\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0$; $0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}$; $\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}$ екенлигин көрсетиүге болады (егер a, b, c векторларын узынлығы a шамасына тең кубтың қабыргалары бойынша алсак). Сайлап алынған атомнан усы атомларға шекемги қашықтық аналитикалық геометрияның

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

формуласының жәрдеминде есапланады ҳәм барлық жақын жайласқан қонысылар ушын $a \frac{3}{4}$ шамасына тең болып шығады.

Ковалентлик байланыслар арасындағы мүйеш ϕ ди табыў ушын дәслеп басы сайлап алынған атомның орайында жайласқан, ал ушы индекси i болған жақын қонысыларда 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 жәрдеминде табамыз.

1.2. Кристаллардың пайда болыўының (өсиүинин) физикалық механизмлари

Хәзирги ўақытлары миллионлаған кристаллық заттар белгилі. Олардың ишине салыстырмалы эпиўайы металлар ҳәм олардың құймалары, жудә қурамалы құрылыштарға ийе кристаллар да киреди. Сол кристаллардың өзине тән қәсийеттери көп санлы атомлардың айрықша түрде жайласыўлары менен байланыслы. Бирақ усы жағдайларға қарамастан бул кристаллардың барлығы да көп санлы емес, бирақ бир бирине салыстырғанда ҳәр қыйлы болып жайласқан атомлардан турады. Атомлар арасындағы электромагнитлик тәсирлесіўлер атомлардың бир бири менен байланысыўын ҳәм кристаллық пәнжерелердин ҳәр қыйлы типлеринің пайда болыўын тәмийинлейди. Бул процессте зарядлардың тәсирлесіўинин электростатикалық энергиясы тийкарғы орынды ийелейди. Айырым жағдайларда магнитлик тәсирлесіўдин де үлеси көринеди. Бирақ магнитлик тәсирлесіўдин үлеси электростатикалық тәсирлесіўдин үлесине салыстырғанда әдеўир киши болады. Жоқарыда атап өтилген тәсирлесіўлер атомлық электронлық қабықлар сыйқылы белгили бир симметрияға ийе болады. Сонықтан атомлар да бир бири менен симметриялы болған құрылыштарды пайда етип кристаллық денелерди пайда етеди. Бундай симметриялық құрылыштар ҳақында жоқарыда гәп етилди. Тап усындей себептерге байланыслы харakterистикалары бойынша бир бирине жақын атомлар атомларының жайласыўы бир бирине сәйкес келетуғын структураларды пайда етеди. Кристаллардың дүзилисисинң улыўмалық нызамлықтарын биле отырып жаңа құрылыштарды болжау, қолда бар кристаллық материаллардың физикалық ҳәм технологиялық қәсийетлерин жақсылаў мүмкін.

Хәзирги ўақытлары атомлардың бир бири менен байланысының характеристи 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 ҳәм ҳәзирги заман техникасында әхмийетли орынларды ийелейди.

Кристалларды жоқарыдағыдай тәртиpte бөлиүдин қатаң түрдеги қағыйдасы жоқ. Себеби сондай типлердин арасындағы байланысқа ийе кристаллар да аз емес.

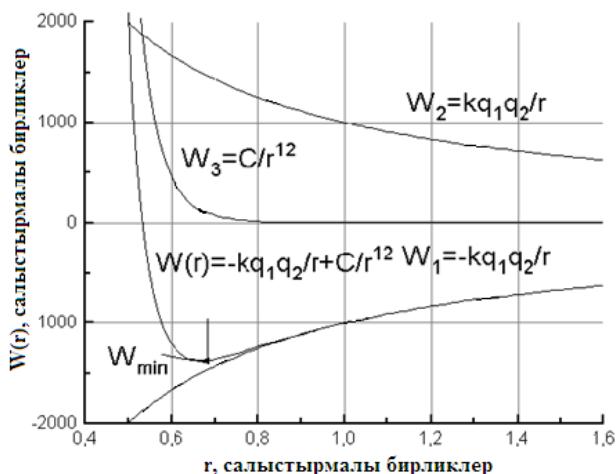
Байланыстың бир бөлеги ковалентлик, ал қалған бөлеги водородлық болған кристаллық заттар де бар. Енди кристалларды байланыстың типтери бойынша қарап шығамыз.

Ионлық кристаллар. Ионлық кристаллар бирдей беглиге иие ионлардың ийтерисиүиниң ҳәм қарама-қарсы белгилерге иие зарядларға иие ионлардың бир бирине тартысыуының нәтийжесинде қәлиплеседи. Ең коп тарқалған мысал ретинде NaCl ҳәм CsCl кристалларын алыш қараўға болады. Ҳәр бир оң зарядланған ион (мысалы Na , Cs) өзиниң этирапына қарама-қарсы зарядқа иие болған ионларды (Cl) жыйнауға тырысады. Ал терис зарядланған ионлар болса өзлерин оң зарядқа иие ионлар менен қоршайды. Ионлар бир бирине олардың электронлық қабықлары тийискенше жақынласады. Буннан кейин олар арасында квантлық тәбиятқа иие ийтериў күшлери пайда болады. Усының салдарынан 1- ҳәм 8-сүйретлерде көлтирилген структуралардай структуралар жийи пайда болады. CsCl кристалларында ҳәр бир ион қарама-қарсы белгидеги зарядқа иие сегиз ион менен қоршалған. Олар бир бирине салыстырғанда симметриялы болып ортадағы ионның орайынан $a^{3/2}$ қашықлықта жайласқан. Оннан арманырақ a қашықлығында тап сондай зарядқа иие 6 ион жайласады. Қурылым тап усындан избе-изликтे даўам етеди. NaCl кристалларында ҳәр бир ионның $a/2$ қашықлықта жайласқан қарама-қарсы белгидеги зарядқа иие алты жақын жайласқан қоңысысы бар, буннан кейин $a^{2/3}$ қашықлықта тап сондай белгидеги зарядқа иие 12 ион жайласқан. Демек сайлап алынған ионды қарама-қарсы зарядқа иие ионлардың қоршап турыў тенденциясы көринип тур деген сез. Ионлардың усындан тәқлитте жайласыулырында электростатикалық энергиядан утыў орын алады.

Енди электростатикалық энергиядан қанша утыў орын алатуғынлығын есаптаймыз. Буннан кейин усындан есаплаўлар нәтийжелери пайдаланып ионлардың кристаллардың байланыс энергиясын табамыз. Есаплаўды бир биринен г қашықлығында турған q_1 ҳәм q_2 зарядлы ионлар жубы арасындағы потенциаллық энергияны қараймыз:

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

Бириңи қосылыўшы ионлар арасындағы тартылымы ямаса ийтерилис күшлерин тәриплейди. Екинши қосылыўшы болса ионлардың электронлық қабықлары бир бирине тиіме баслағанда пайда болатуғын ийтерилис күшлерин дәл анықлады. С параметрин есаплаў нәтийжелери менен эксперименталлық нәтийжелерди бир бирине сәйкеслендирүү арқалы әмелге асырылады. $W(r)$ функциясының ҳәм оның еки қосылыўшыларының түрлери 10-сүйретте көлтирилген.



1.10-сүйрет.

Еки ионның тәсирлесиў энергиясы $W(r)$ шамасының ионлар арасындағы қашықлық r дән ғәрэзлиги.

Буннан кейин ионлардың биреүин сайлап алады ҳәм усы ионның этирапындағы жақын ҳәм узаклау жайласқан ионлар менен жуп-жуптан тәсирлесиў энергияларын табады ҳәм оларды бир бири менен қосып шығады (суммалайды). Есаплаўларда кристалды жүдә үлкен деп есаплайды ҳәм бетлик эффектлерди есапқа алмайды. Есапланған қосынды (сумма) кристалдағы сайлап алынған ионның энергиясын береди. Буннан кейин бул энергияны пәнжере турақтысы a ның функциясы деп есаплап энергия минимумға иие болатуғын a шамасының тең салмақтық мәнисин анықлады. Есапланған энергияның a бойынша екинши тәртипли туғындысын да есаплау мүмкін. Бундай жағдайда серпимликтің көлемлік модули болған $B = -V(dp/dV)$ шамасын есаплау мүмкіншилигине иие боламыз.

Егер С параметри дұрыс сайлап алынған болса байланыс энергиясының, пәнжере турақтысы a ның ҳәм модуль B ниң дәл мәнислерин есаплау мүмкіншилиги пайда болады.

Ионлық кристаллар әдетте салыстырмалы әпиүайы, күшли тығыз жайластырылған ҳәм жоқары симметриялы кристаллық пәнжереге иие (мысалы кублық). Бул кристаллардың көпшилиги морт келеди.

Ковалентлик кристаллар. Ковалентлик кристаллар атомлар арасындағы ковалентлик байланыслардың есабынан пайда болады. Ал ковалентлик байланыс электронлық бултлардың (қабықлардың) тийисиүиниң нәтийесинде бир бирине өтийиниң салдарынан пайда болады. Усының ақыбетинен атомлар арасында еки атомды бир бирине тартатуғын терис зарядтың қойыуласыўы пайда болады. Атом валентлигине байланыслы бир бири менен ҳәр қыйлы мүйешлерди жасап орналасатуғын байланыслардың бир неше типин пайда етеди. Ковалентлик кристалдағы атомлар бир бири менен ковалентлик байланыслардың есабынан биригеди. Қала берсе байланыслар арасындағы мүйешлер ҳәм олардың арасындағы «ұзынлықтар» ҳәр қыйлы болған кристаллар ушын азмаз айрылады.

Белгили ковалентлик кристалға мысал ретинде алмазды көрсетиүге болады. Оның кристаллық құрылышы 9-сүйретте берилген. Алмаздың құрылышында (пәнжересинде) ҳәр бир атом тетраэдрлік түрде жайласқан төрт атом менен қоршалған. Углерод атомының ковалентлик байланыслары көпшиликтің жағдайларда алмаздағыдан болып жайласады.

Ковалентлик кристаллар жағдайында байланыс энергиясын есаплау процедурасы жеткилики дәрежеде қурамалы. Соныңтан бундай есаплаўлар жумысын келтирмеймиз.

Ковалент кристаллардың кристаллық пәнжерелери ҳәм олардың базислери жудә қурамалы ҳәм тәмен симметрияға иие болады. Себеби кристал атомлар ямаса молекулалардың бөлімлериндеги ковалентлик байланыслардың бағытлары жүдә көп санлы. Ковалент кристалларды үйренгенде белгили бир сорттағы атомның «атомның ковалентлик радиусы», «ковалент байланыстың ұзынлығы», ковалент байланыслар арасындағы мүйешлер сыйқылды түсініктерди жийи қолланады. Бундай шамалардың дерлік барлығы да кристалдағы бул атомлар басқа атомлар тәрепинен ҳәр қыйлы болып қоршалғанда аз шамаға өзгереди.

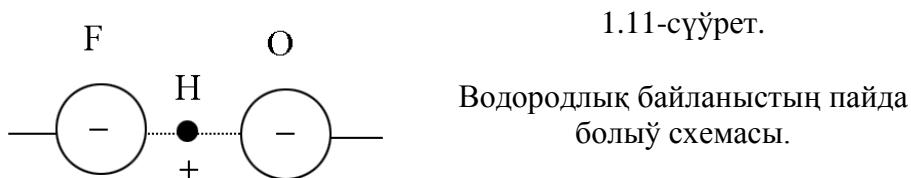
Ковалент ҳәм ионлық кристаллар арасында кристаллардың көп санлы аралықтық типлери бар. Бундай кристаллардағы байланыс ковалентлик ҳәм поляр. Бундай байланыста ковалентлик байланыска жуýап беретуғын электронлық тығызлықтың үлкенирек мәниске иие болған орынларда ионлардың бирине қарай аўысқан. Усының салдарынан азмаз зарядланған атомлар арасында қосымша кулонлық тәсирлесиў күши пайда болады. Ионлық байланыс әдетте электронлық қабықлары дерлік толған атомлар арасында пайда болады (силтили металлар, Менделеев кестесиндең бириңи ҳәм жетинши топар элементлері, екинши ҳәм алтыншы топар элементлері арасында кулонлық байланыс сиyrегирек ушырасады). Ушинши-бесинши топар элементлері әдетте ковалентлик байланыс пайда етеди. Айырым жағдайларда экспериментлерде кристалдағы ҳәр бир атомға сәйкес келетуғын электронлардың орташа мәнисин анықлау мүмкін (мысалы дифракциялық усыллардың жәрдемінде өткерилиген экспериментлерде). Бул өз

гезегинде атомлардың заряды ҳақында да, кристалдағы байланыстың харктери ҳақында да жүймаклар шығарыўға мүмкіншилик береди.

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

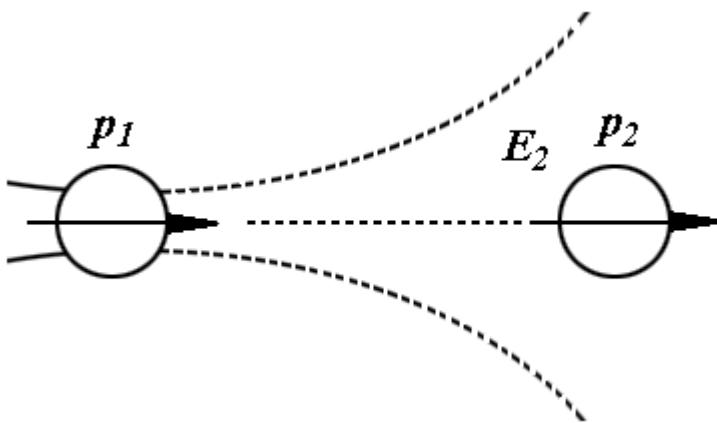
Әдетте металлар тығыз жайластырылған кристаллық пәнжерелерди пайда етеди (тығыз етип жайластырылған гексагоналлық, ҚОК ямаса КОК).

Водородлық байланысқа иие молекулалық кристаллар. Водородлық байланысқа иие 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 көпшилік жағдайларда еки терис зарядланған ион арасында орналасқан энергиялық жақтан утымлырақ болады (F, O, N атомлары менен байланысқанда салыстырғанда, 11-сүйретти қараныз). 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.



Водородлық байланыс биологиялық молекулаларда ҳэм кристалларда әхмийетли орынды ийелейди. Мысалы ДНК молекуласының еки спиралының бир бири менен байланысыўы водородлық байланыстың орын алғыуының салдарынан жүзеге келеди. Айырым кристаллардың сегнетоэлектриклик (ферроэлектриклик) қәсийетлері ҳэм суў менен мұздың молекулаларының 0°C температурадағы қәсийетлері оларда водородлық байланыслардың орын алатуғынлығын түсіндиреди.

Ван-дер-Ваальс кристаллары. Ван-дер-Ваальс кристаллары электрлік жақтан нейтрал болған атомлардан олар арасындағы диполь-диполлик байланыстың есабынан пайда болады. Бундай байланыслардың тәсиринде төменги температураларда инерт газлердин кристаллары пайда болады. Бундай кристаллар барлық ўақытларда да тығыз жайластырылған ҚОК қурылышқа иие болады. Ван-дер-Ваальс байланысы жоқарыда қарап өтилген байланыслардың ишиндеги ең әззиси. Сонлықтан ионлық, ковалентлик ҳэм металлық байланыслардың пайда болыўы ушын шарайтлар дөретилмеген жағдайларда айқын көринеди.



1.12-сүйрет.
Диполь-диполлик байланыстың
пайда болыў схемасы.

Ван-дер-Ваальс байланысының пайда болыўын әпиўайы классикалық моделден көриўге болады.. Еки нейтрал болған атомның бир бири менен тәсирлесиүн қараймыз. Олардың орайлары арасындағы қашықтық r ге тең болсын (12-сүйретті қараңыз). Үақыттың ҳәр бир моментинде терис зарядтың орайы оң зарядланған атомның орайы менен сәйкес келмейди. Соңықтан 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 екинши атомды поляризациялайды ҳәм соңықтан екинши атом да диполь моментине иие болады:

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

бул аңлатпада β арқалы атомның поляризациялыўшылығы белгиленген. Еки диполь арасындағы тәсирлесиў энергиясы $p_1 p_2 / r^3$ шамасына пропорционал. Соңықтан еки атом арасындағы тәсирлесиў энергиясы $1/r^6$ шамасына пропорционал болып, мәниси жудә киши ҳәм қашықтықтың өсиўи менен тез кемейетуғын шама болады. Соңықтан Ван-дер-Ваальс тәсирлесиў тек киши қашықтықтарда ғана сезилерліктей мәниске иие болады. Ионлық кристалларды қарағандағы көз-қараслар бойынша тәсирлесиў энергиясы ушын аңлатпаны жазыў мүмкін. 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 болыў энергиясын, пәнжере параметрин ҳәм серпимлилік модулин есаплаў мүмкін болады. Усындан избе-изликтे өткерилген есаплаўлардың нәтийжелери экспериментте алынған мағлыўматлар арасында жақсы сәйкеслик орын алған.

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

Техникада тийкарынан поликристаллар деп атала туғын материаллар қолланылады. Поликристаллар бир биринен өсип шыққан оғада көп монокристаллық дәнешелерден турады. Бундай кристаллық құрылыштың пайда болыўының себеби мынадан ибарат: затлардың кристалланыўы бир үақытта оғада көп санлы кристалланыў орайларында басланады. Нәтийжеде поликристаллық зат қәлиплеседи. Егер арнаўлы иләжлар қолланылса еритпеден яmasa еритилген (балқытылған) заттан монокристал алынады.

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

Мәселе:

Егер 0°C температурада қоңылас атомлары арасындағы тәсирлесиўге сәйкес келиўши потенциаллық энергия $W(r) = \frac{c}{r^{12}} - b/r^6$ болса аргон кристалларындағы Ван-дер-Ваальс байланысының ҳәм оның ериў (балқыў) температурасының мәнисин есаплаңыз. Есаплаўларда тек ең жақын қоңы атомлар арасындағы тәсирлесиўди ҳәм аргонның қурылышының ҚОК екенligин есапқа алыңыз.

Шешими. ҚОК қурылышта атомның ең жақын жайласқан 12 қоңысы менен тәсирлесиў энергиясы $W(r) = 12 \frac{c}{r^{12}} - b/r^6$ формуласы менен бериледи. Буннан кейин дәстүрге айланған математикалық усыл менен бул аңлатпаның минимумын табыў керек болады. Оның ушын $W(r)$ функциясынан r бойынша туғынды алынады ҳәм оны нолге теңдейди. Усындай жоллар менен $W(r)$ функциясынан минималлық мәниси есапланады. Бул мәнисти Больцман турақтысына бөлип ериў (балқыў) термпературасының мәнисин баҳалаў мүмкин.

Нурлар менен бөлекшелердин кристаллық пәнжередеги дифракциясы

Техниканың қанша дәрежеде раўажланғанлығы бәршеге мәлим. Бирақ усы жағдайға қарамастан кристаллық пәнжередеги ямаса молекулалардағы атомлардың қандай орынларда жайласқанлығы ҳаққында тиккелей мағлыўматларды беретүүн исенимли ҳәм эффектив асбап-ұскенелер елгеге шекем дөретилген жоқ. Ең жетилистирилген электронлық микроскоплардың жәрдеминде тек ең ири болған атомларды (мысал ретинде уран менен алтынның атомларын) бақлаў мүмкин. Ең көп тарқалған электронлық микроскоплардың жәрдеминде бир неше атомлардың өлшемлериндей болған бир текли емес орынларды бақлаўға болады. Ионлық микроскоплар принципинде ири атомларды бақлаў мүмкиншилигине ийе болса да оларды пайдаланыў оғада қыйын. Бундай асбап-ұскенелердин жәрдеминде атомлар арасындағы қашықтықтарды анықлаў мәселеси болса оғада қыйын шешилетүүн мәселелер қатарына киреди.

Усы күнлери кристаллардағы атомлардың бир бирине салыстырғанда жайласыўларын үйрениўдің ең эффективлик усылы микробөлекшелер: фотонлардың, электронлардың, нейтронлардың дифракциясы болып табылады. Кристаллар менен молекулалардың қурылышы ҳаққында справочниклерде көлтирилген мағлыўматлардың барлығы да тап усы усылдың жәрдеминде алынған.

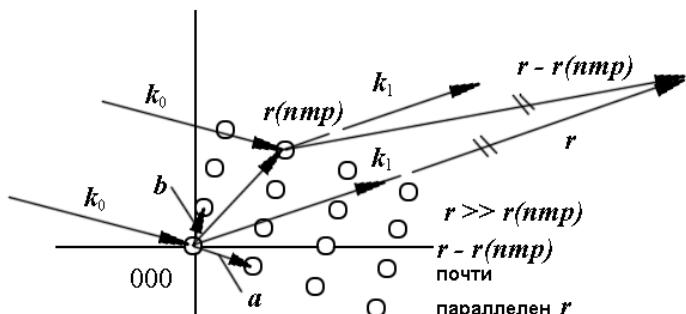
Кристалларды дифракциялық усыллар менен изертлегенде кристаллық үлгиге бөлекшелердин дерлик параллель дәстесин бағытлайды, усы бөлекшелердин дифракциясының ҳәр қылышы бағытлар бойынша интенсивлігиниң тарқалыўын үйренеди (гейпара жағдайларда кристалдың ҳәр қылышы ориентировкалында), ал буннан кейин дифракциялық сүйрет бойынша кристалдың элементар қутышасының типи ҳәм оның базисинин қурылышы ҳаққында жуўмақтар шығарады. Бул усыллардың (методлардың) жәрдеминде кристаллық пәнжерениң дәйирилерин 4-5 белгиге шекемги дәллікте ҳәм базистеги атомлардың жайласыўларын анықлады.

Кристаллық денелердеги дифракция қубылышын бақлаў ушын дифракцияға ушыраўшы бөлекшелердин де-Бройль толқын узынлығы кристаллық пәнжерениң дәйиринен киши болыўы керек. Бундай шәртке энергиялары $E = 5\text{-}20 \text{ кэВ}$ шамасындағы фотонлар (рентген ҳәм гамма нурлары), энергиясы $E = 10\text{-}100 \text{ эВ}$ болған электронлар ҳәм

енергиясы $E = 0,01 - 0,1$ эВ болған нейтронлар ийе болады (бундай нейтронларды жыллылық нейтронлары деп атайды ҳәм оның энергиясының шамасы kT ға барабар). Жоқарыда атлары атап өтилген үш түрли бөлекшелер (фотонлар, электронлар ҳәм нейтронлар) кристалларды дифракциялық изертлеўлерде қолланылады. Фотонлардың дифракциясын бақлау ең аңсат дифракциялық усыллардың бири болып табылады. Соныңтан фотонлардың (рентген нурларының) дифракциясы электронлардың дифракциясын пайдаланыўға салыстырғанда жүдә көп қолланылады. Электронлардың дифракциясы бақлау ушын жоқары вакуум (бундай вакуум электрон микроскопының ишинде алынады), ал нейтронларды пайдаланыў ушын олардың дереги ретинде үлкен ядролық реактор талап етиледи. Нейтронлар менен электронлардың дифракциясы фотонлардың дифракциясына жүдә уксас. Соныңтан биз төменде кристаллық пәнжерениң қурылышын үйрениў ушын фотонлардың дифракциясының қолланылыўы менен толығырақ танысамыз. Бул жуўмақтарды кристаллардағы нейтронлар менен электронлардың дифракциясын таллау ушын да пайдаланыўға болады.

Кристаллық пәнжере кристалда қозғалыўшы фотонлар, электронлар ҳәм нейтронлар ушын үш өлшемли дифракциялық пәнжерениң орнын ийеледи. Электромагнит толқынларының квантлары болған фотонлардың үш өлшемли пәнжередеги дифракциясының нызамлықтарын үйрениў ушын N дана санлаққа ийе бир өлшемли дифракциялық пәнжередеги дифракцияны еске түсириў керек. Ең дәслеп изертлеўшилер ени шексиз киши санлақлардағы дифракция құбылышын изертледи, кейинирек санлақлардың ениниң шекли мәниске ийе болатуғынлығын есапқа алды. Усының нәтийжесинде айқын максимумлар сериясынан туратуғын сүүрет алынды. Ал интенсивликтер болса бир санлақтың шеклериндеги интенсивликтин тарқалыўының характеристерине байланыслы болып шықты.

Дәслеп туýры мүйешлик емес примитивлик элементар қутышаға ийе кристаллық пәнжерени алып қараймыз. Оның тәреплеринин ұзынлығы a, b, c векторларының жәрдеминде 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
шашыратылыўы.

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, яғни $\omega_0 = \omega_1 = \omega$. Анықлама бойынша $\omega = kc$. Соныңтан $k_0 = k_1 = k$. Кристалға келип түсиўши толқынның $r = (0,0,0)$ ноқатындағы кернеўлиги $E_0(r, t)$ төмендегидей анатапаның жәрдеминде 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:

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

Номери m,n,p болған түйинде шашыраған толқын $0,0,0$ түйининде шашыраған толқынға салыстырғанда басқа узынлықтағы жолды өтеди (1.13-сүйрет). Кристалдың өлшемлеринің киши екенлигін есапқа аламыз. Бундай жағдайда $r(m,n,p)$ менен r модуллери арасындағы айырма есапқа алынбайды ҳәм $r - r(m,n,p) = r$ шәрти орынланады. Кристалдағы толқынның жұтылығын да есапқа алмаймыз. Рентген нурлары ушын сыйның көрсеткишин 1 ге тең деп есаптаймыз (хақықатында да рентген нурлары ушын сыйның көрсеткиши жұдә үлкен дәлліктегі 1 ге тең). Бундай жағдайда $r(m,n,p)$ менен $r(0,0,0)$ ноқатларында шашыраған нурлар арасындағы оптикалық жүрислер айырмасын мына формуланың жәрдемінде есаплау мүмкін:

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

Фазалар айырмасы тәмендеги шамага тең болып шығады:

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

E векторына m, n, p номерине ийе түйин тәрепинен 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 $G = k_1 - k_0$ арқалы шашыраў векторы белгиленді. Бул вектор дифракция теориясында жұдә үлкен өхмийетке ийе ҳәм шашыраудың салдарынан толқын векторының қаншаға өзгергенлигин аңғартады.

Пәнжерениң барлық түйинлеринің E векторына үлеси мына аңлатпа жәрдемінде анықланады:

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

Бул формула бойынша суммалау пәнжерениң барлық түйинлери бойынша жүргизиледи.

$r m, n, p = na + mb + pc$ екенлигін есапқа алып ҳәм $E_1 = const \cdot E_0(r \cdot t) \cdot \exp i \omega t - (k_0 - k_1) \cdot r \cdot \frac{1}{r}$ белгилеўин қабыл етип тәмендегини 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 ушын жазылған аңлатпа үш сумманың көбеймесинен турады. Бириншии биринши ағзасы 1 ге тең ҳәм бөлими $\text{Exp } i \alpha G$ болған биринши 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 усындай аңлатпаны басқа суммалар ушын да алдыра болады. Дифракцияға ушыраған толқынның интенсивлиги I шамасы ушын E ни оның комплексли түйинлеси E^* ге көбейтип бир қанша түрлендириўлерден кейин мына аңлатпаны аламыз:

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

Егер бир ўақытта

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

шәртлери орынланатуғын болса, онда I дин мәниси максималлық ҳәм NMP^2 шамасына тең болады. Бул аңлатпада H, K, L шамалары пүтин санлар. Егер $\frac{G_a}{2}, \frac{G_b}{2}$ ҳәм $\frac{G_c}{2}$ шамалары да пүтин санлардан сәйкес $\frac{\pi}{N}, \frac{\pi}{M}, \frac{\pi}{L}$ шамаларынан көп мәниске айырмаға ийе болмаса да интенсивлик нолге тең болмайды.

(1.134)-формула таллаў ушын дым қолайсыз. Бирақ бул аңлатпаға әпиүайы түрдеги көргизбели геометриялық мәнис беріү мүмкін. буның ушын кери пәнжере түсинигин көрип шығамыз.

Кери пәнжере. Кери 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 қатнаслардың орынланатуғынлығын тексерип көриў 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 модулинин $2\pi/d$ ға тең екенлигин көрсетиўге болады. Бул аңлатпада d арқалы c менен b векторларында қурылған кристаллографиялық тегисликлер арасындағы кашықтық. Тап сол сияқты қатнаслар B һәм C векторлары ушын да орынлы.

Кристаллық пәнжередегидей мүмкін болған трансляциялар векторлары болған $T = hA + kB + lC$ векторларының ушлары кери пәнжере деп аталатуғын көнисликтік пәнжерени пайда етеди.

Кери пәнжерени де кристаллық пәнжере сыйқылды таллау мүмкін. буның ушын ондағы hkl түйинлерин, hkl координаталарына ийе векторларды, әхмийетли бағытларды, тегисликлерди, ноқатлардың координаталарын ҳәм тағы басқаларды қарап шығыу керек болады. Мысалы hkl координаталарына ийе кери пәнжерениң векторының Мюллэр индекслері hkl болған кристаллографиялық тегисликке перпендикуляр екенligin дәлиллеүге болады. Ал оның узынлығы болса $2\pi/d$ шамасына тең (d арқалы тегисликлердин усы системасы ушын тегисликлер арасындағы қашықтық белгиленген).

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

Ромбалық элементар қутышасы бар кери пәнжерени қараймыз. (1.14, 1.15) формулалары бойынша ҳәм a, b, c векторлары арасындағы мүйешлерди туұры деп есаплап 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 тәрепине кери пәнжерениң қутышасының ең келте тәрепинин сәйкес келетуғынлығы көринип тур. Тап усындај жоллар менен примитивлик кублық пәнжере ушын элементар қутышаның қабырғасының узынлығы $1/a$ шамасына тең куб болатуғынлығына аңсат көз жеткериүге болады..

Тетрагоналлық ҳәм гексагоналлық пәнжерелерде A, B, C векторларының кери көнисликті сәйкес тетрагоналлық ҳәм гексагоналлық пәнжерелерди пайда ететуғынлығын да аңсат көрсетиүге болады. Бул жағдайда a менен c арасындағы қатнаслар ғана өзгереди. Триклиник ҳәм моноклиник қутышалар ушын кери пәнжерениң векторлары болған A, B, C шамаларын табыу бираз қурамалы. Бундай жағдайда (1.14)-формуланы пайдаланығына туұры келеди.

Дифракция шәрти (1.13) ти қанаатландыратуғын G векторларын излеүге қайтып келемиз. Енди оларға әпиүайы геометриялық мәнис беріу мүмкін. Мейли G векторлары A, B, C векторлары бойынша жайылған болсын:

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

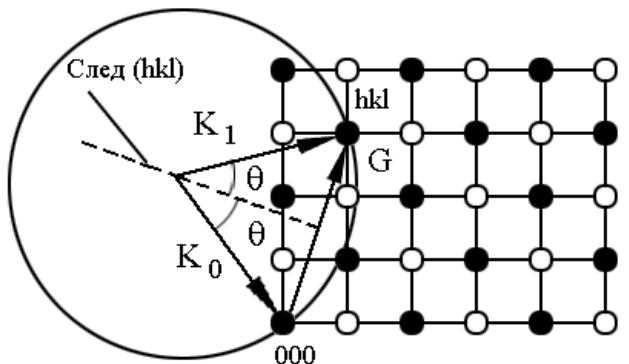
Бундай жағдайда (1.17)-аңлатпаны (1.13)-аңлатпаға қойып (1.15)-қатнасты есапқа алып дифракция максимумлары шәртин аламыз: $h = H, k = K, l = C$. Бул аңлатпадағы H, K ҳәм L шамалары пүтин санлар. Демек h, k, l шамалары пүтин санға тең болғанда, яғни G векторлары кери пәнжерениң трансляция векторлары болған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

Кери пәнжерениң үш өлшемли пәнжереден алынатуғын дифракциялық сүүретti сәүлелендиретуғынлығын көрсетиүге болады. Оптика курсында Фраунгофердин дифракциялық сүүретинин нурланыу интенсивлигинин бир ҳәм еки өлшемли тарқалығының Фурье-образы екенligin тастыбықлайды. Тап сол сыйқылды үш өлшемли кери пәнжере шексиз үлкен кристалдың Фурье-образы, ал шекли өлшемли түйинлерге ийе кери пәнжере шекли өлшемлерге ийе кристалдың Фурье-образы болып табылады. Бундай кери пәнжерениң өлшемлери [яғни дифракцияның интенсивлиги (1.12)-формулаға

сәйкес нолге тең емес областлар] кристалдың сәйкес бағыттағы узынлығына кери пропорционал. Соныңтан дифракциялық сүйреттің түрин кристаллық пәнжерениң Фурье түрлендіриүин есаплау арқалы алдын-ала есапладап көрсетиүге болады. Буның кристалдағы электронлық тығызлықтың тарқалыўына байланыслы екенлигин биз төменде көремиз

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

Эвальд қурылмасы. Дифракция шәртинин орынланыўын ҳәм дифракцияға ушыраған толқынлардың бағытын анықлау ушын Эвальд қурылмасынан пайдаланыў жүдә қолайлы (1.14-сүйрет).



1.14-сүйрет.
Эвальд қурылмасы.

Кристалға келип тусиўши толқынның k_0 векторының ушын кери пәнжерениң 000 түйининде жайластырамыз. Тусиўши ҳәм шашыраған толқынлардың тезликleri де, жийиликleri де бирдей болғанлықтан k_1 векторының да узынлығы k_0 векторының узынлығындай болады. Енди ўазыйпа усы k_1 векторының бағытын табыудан ибарат. Радиусының шамасы k_1 векторының модулине тең сфера сымамыз (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 бириңиң 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) ҳәм Эвальд сферасына қандай да бир түйинниң тийетуғынлығын тексеремиз. Бирак нокатлық түйинлердин сфера бети менен тийисетуғынлығының итималлығының жүдә киши екенлиги белгилі. Соның ушын (түйинди сфераның бетине тийдириў ушын) кристалды, оның менен байланысқан кери пәнжерени бурыў керек. Енди геометрияның жәрдемінде кери пәнжерени (кристалдың өзин) қанша мүйешке бурыўдың зәрүрлиги аңсат түрде анықланады.

Хәзирги ўақыттарды дифракция құбылысын бақлауға арналған дифрактометр деп аталауғын әсбаплар компьютерлер менен толықтырылған. Олар кристалды, дифракцияға ушыраған толқынларды регистрациялаушы детекторды қанша шамаға бурыўды автомат түрде анықтай алады.

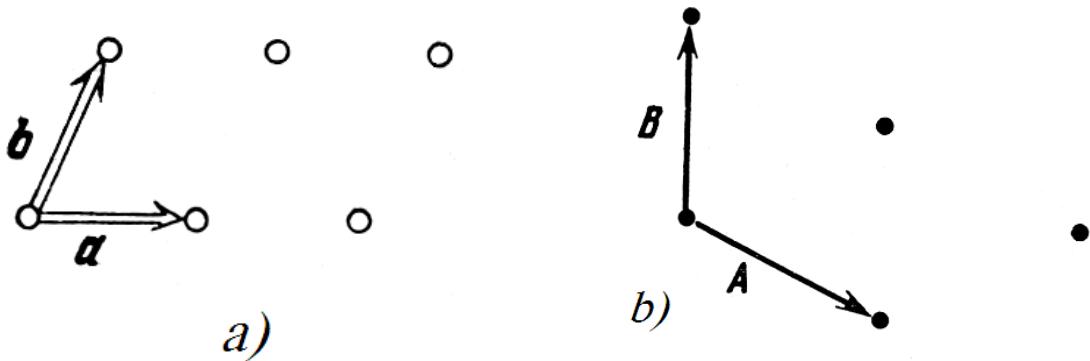
1.14-сүйретте k_0 менен G векторларының узынлықтары арасында

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

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

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

Бул теңлемеде d_{hkl} шамасы шашыраў тәртиби n ди де өз ишине алады. Себеби қандай да бир сен еселенген hkl шамалары шашыраў тәртиби n ди өз ишине алады (Вульф-Брэгг теңлемесиниң әдетте $2d_{hkl} \sin[\theta] = n\lambda$ түринде жазылатуғының есапқа аламыз).



Кристаллық пәнжере (a) ҳәм 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. Усындей ҳәр бир дәнешеге кери пәнжере сәйкес келеди. Ҳәр қыйлы дәнешелерге жуўап беретуғын кери пәнжерелер бирдей дәўірлерге, 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 кеңисликтеги радиусы T_{hkl}^* ге тең болған бетте жайласқан көп санлы түйинлер сәйкес келеди. Іккىярлы түрде бағыттарга ийе дәнешелерге ийе идеал поликристалл жағдайында кери пәнжерениң түйинин сферага айланады деп есаплаўға болады. Кери пәнжерениң барлық түйинлериниң жыйнағына радиуслары T_{hkl}^* шамасына тең болған, кристаллографиялық тегисликлердиң мәнисине байланыслы избе-из жайласқан сфералар жыйнағы сәйкес келеди. Бундай жағдайда Эвальд курылмасында Эвальд сферасын кери пәнжере түйинлериниң сфералар жыйнағы базы бир шеңберлер бойынша кесип өтеди (1.14-сүйрет). Соныңтан усындей поликристалдан дифракция поликристалдың қәлеген бағытында ҳәм қәлеген толқын узынлығында алынады. Поликристаллардан дифракцияны бақлау ушын монохром рентген нурларын ямаса рентген спектриниң характеристикалық сыйықтарынан пайдаланады.

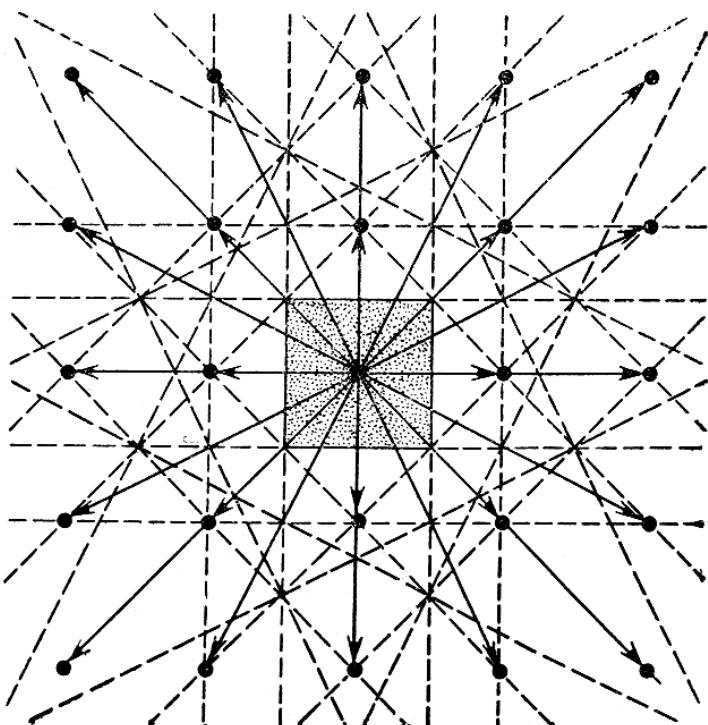
Бриллюэн зоналары. Кристалларда дифракция шәртин қанаатландыратуғын толқынлар менен бөлекшелердин толқын векторлары болған k_0 векторларының көплигин тапқан пайдалы болады. (1.18)-теңлемени билайынша жазыўға болады:

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

Кейинги теңлеме G векторына перпендикуляр ҳәм координата басынан $G/2$ қашықтығында жайласқан тегислик 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

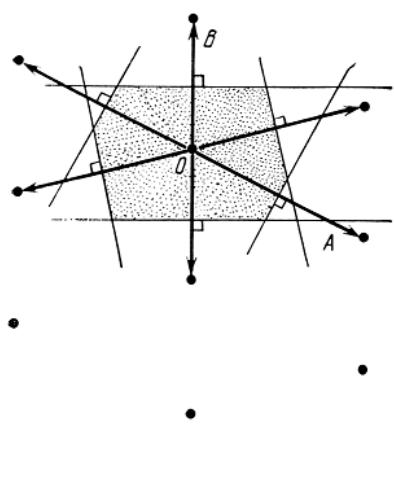
дифракция шәртине жуўап беретүүн k_0 векторларының ушларының көплиги бир тегисликте жатады ҳәм бул тегислик кери пәнжерениң барлық векторларының ортасы арқалы өтеди ҳәм олардың барлығына да перпендикуляр бағытланған. Тап усындай жоллар менен жоқарыда Вигнер-Зейтц қутышасы соғылған (дүзилген) еди. Кери кеңисликте дүзилген Вигнер-Зейтц қутышасын Бриллюэнниң биринши зонасы деп атайды. Был зона әхмийетли қәсийетке ийе: толқын векторы оның шегарасына сәйкес келетүүн толқынлар менен бөлекшелер дифракция шәртин қанаатландырады. Бриллюэн зоналары электронлардың, фононлардың ҳәм баска да бөлекшелердин кристалларда қозғалыбын, кристаллардағы энергиялық зоналардың курылышын изертлегендеге әхмийетли орынды ийелейди. Бул ҳаққында кейинирек толық түрде гэп этиледи.

Бриллюэн зоналарын курыў қыйын процедуралар қатарына кирмейди. Бул 1.14 б-f сүүретлерде демонстрацияланған.



1.14 б сүүрет.

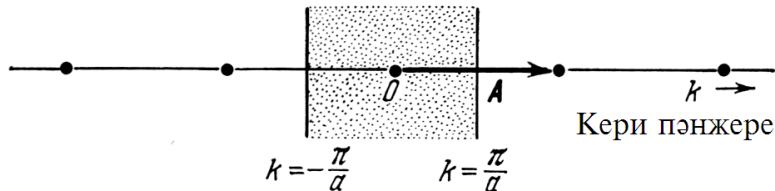
Квадрат кери пәнжере. Жиңишке тутас сызықлардың жәрдеминде кери пәнжерениң векторлары белгиленген. Усы векторларға перпендикуляр пункттир сызықлар оларды тендей екиге бөледи. Сүүреттин орайында жайласқан квадрат ең киши майданға ийе болады ҳәм пункттир сызықлар менен толық түйіктілік болады. Бул квадраттың майданы координаталар басының этирапындағы барлық квадратлардың майданынан киши. Бул квадрат кери пәнжередеги Вигнер-Зейтцтиң примитивлик элементар қутышасы болып табылады.



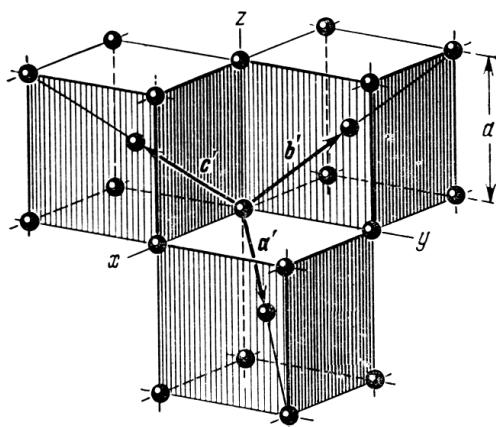
1.14 с сүүрет.

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 ҳәм оларды тендей екиге бөлетүүн сызықларды жүргиземиз. Майданы ең киши болған тап усындай жоллар менен алғынған көп мүйешлик Бриллюэнниң биринши зонасы болып табылады.

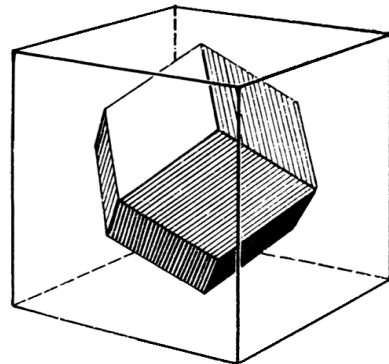
Сызықты кристаллық пәнжере



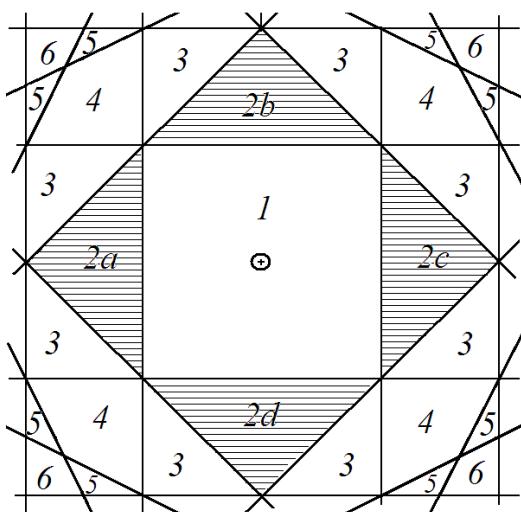
1.14 d сүйрет. Бир өлшемли кристаллық пәнжере менен кери пәнжере. Узынлығы $2\pi/a$ болған \mathbf{A} векторы кери пәнжерениң базислик векторы, ал \mathbf{A} ҳэм $-\mathbf{A}$ векторлары координата басынан түсірилген ең қысқа векторлар болып табылады. Усы векторларға перпендикуляр хэм усы векторларды тендей екіге бөлетуғын сызықлар Бриллюэнниң бириńши зонасының шегаралары болып табылады. Бул шегараларда $k = \pm\pi/a$.



1.14 i сүйрет.
КОК кристалдың примитивлик базислик векторлары.



1.14 f сүйрет.
КОК кристаллардағы Бриллюэнниң бириńши зонасы. Бул зона дұрыс ромбододекаэдрдин формасына ие.



1.14 g сүйрет.
Әпиўайы кублық пәнжерениң Бриллюэн зоналары.

1 арқалы Бриллюэнниң бириńши, 2 арқалы екинши, 3 арқалы үшинши зонасы көрсетилген. Басқа санлар да сәйкес Бриллюэн зоналарын аңғартады.

Базистиң структуралық факторы. Биз жоқарыда пәнжерениң ҳәр бир түйинин ноқатлық шашыратыўшы орай деп есапладық. Ал әдетте ҳәр бир орай менен кристаллық пәнжерениң базиси деп аталатуғын бир неше бирдей болып жайласқан атом байланыслы. Базистиң ҳәр қыйлы атомларында шашыраған толқынлар атомлардың бир бирине

салыстырғанда қалайынша жайласқанлығына байланыслы ҳәр қылыш фазаларда қосылады. Дифракцияға ушыраған $E_0(r, t)$ нур векторының амплитудасына қосылатуғын үlestи есаплау жоқарыда қарап өтилген үлеслерди қосыў менен бирдей түрде әмелге асырылады. Бул жағдайда суммалау қристаллық пәнжерениң барлық түйинлери бойынша емес, ал базистиң барлық атомлары бойынша әмелге асырылады.

Мейли базис бир неше атомды өз ишине алсын. Сол атомлардың биреүиниң 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 $\exp ir_j G$ көбеймесине ийе және f_i шамасына пропорционал болады:

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

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

$$\sum_j E_j = \sum_j f_i \cdot \exp ir_j G . \quad (1.22)$$

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

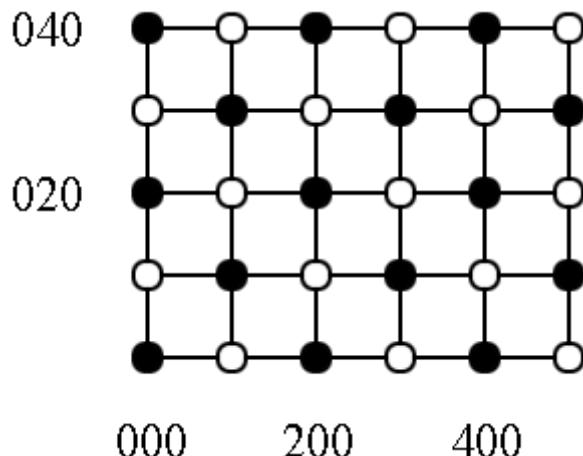
$$\sum_j F_{hkl} = \sum_j f_i \cdot \exp 2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j) . \quad (1.23)$$

F_{hkl} шамасын берилген кристалдың базисиниң структуралық факторы ямаса заттың элементар қутышасының структуралық факторы деп атайды. Бул шама үш өлшемли кристаллық пәнжере тәрепинен берилетуғын дифракциялық максимумлардың салыстырмалы амплитудасын анықтайды. Берилген кристалл ушын F_{hkl} шашырау векторынан ғәрезли. Кери пәнжерениң базы бир түйини ушын бул шаманың мәниси нолге тең болыуы мүмкин. Бундай жағдайда базистиң ҳәр қылыш атомлары тәрепинен дифракцияға ушыраған толқынлардың амплитудалары қосылады ҳәм нолге тең амплитуданы береди (яғый олар бир бириң сөндиреди). Бундай жағдайда «ноқатлық түйинлерден» туратуғын кристаллық пәнжере күшли дифракцияны бериүи керек (егер шашырау векторы оның кери пәнжересиниң түйинлериниң бириңе сәйкес келетуғын болса).

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

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

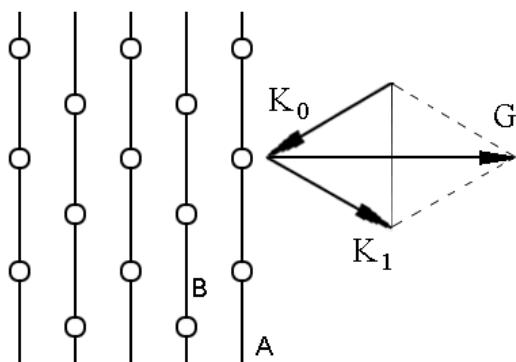
Бул формулада F_{hkl} шамасының индекслердин суммасы болған $h+k+l$ қосындысынан ғәрезли екенлиги көринип түр. Егер $h+k+l$ қосындысы жуп болса $F_{hkl} = 2$, ал так болса $F_{hkl} = 0$. Енди структуралық факторлары нолге тең емес түйинлерди дөңгелеклер менен белгилеп шықса, онда дөңгелеклер кери пәнжереде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



1.15-сүйрет.

КОК кристаллардың ҳәм CsCl типиндеги структуралар ушын кери пәнжерениң түйинлериниң жайласыўы.

1.15-сүйретте боялмаган дөңгелеклер менен белгиленген түйинлер ушын дифракция бақланбайды. Себеби кублық қутышаның орайында жайласқан атомларда шашыраған толқынлар кубтың төбелеринде шашыраған толқынлар менен қарама-қарсы фазада болады. Бул құбылысты 1.16-сүйреттің жәрдемінде аңсат түсіндіриўге болады. 1.16-сүйретте КОК қутышаның (100) тегислиги сәүлелендірілген. Бул тегислик А арқалы белгиленген. Бул тегислике параллель етип (200) тегислигин жүргизиўге болады (оны В арқалы белгиледік). В тегислигіндеги атомлар саны А тегислигіндеги атомлар санына тең. Демек (100) тегислигіндеги тегисликлер еки есе жийи жайласқан болып шығады. В типиндеги тегисликлер болмағанда А типиндеги тегисликлерде шашыраған толқынлар бир бириң күшайткен болар еди. В типиндеги тегисликлеринде де толқынлар шашырайды, олардың амплитудаларының қосындысы А типиндеги тегисликлерде шашыраған толқынлардың амплитудаларының қосындысына тең. Бирақ В типиндеги шашыраған толқынлардың фазасы менен А типиндеги тегисликлерде шашыраған толқынлардың фазалары қарама-қарсы болады (фазалар айырмасы π ге тең). Соныңтан А ҳәм В типиндеги тегисликлерде жайласқан атомларда шашыраған толқынлар бир бириң толық сөндіреди. КОК пәнжереге иие кристаллардың рентгенограммаларында (110), (200), (112), (220), (130), (222) сыйқылы индекслерге иие рефлекслер орын алады. Демек рентгенограммада индекслердин суммасы жуп болатуғын болса, онда бул КОК пәнжерениң белгиси болып табылады.



1.16-сүйрет.

Толқынлардың КОК пәнжерениң (100) тегислиги тәрепинен шағылыштырылыўы.

Енди хлорлы цезий типиндеги құрылышты қараймыз (1.1-сүйрет). Бул құрылыш кублық қутышаға иие ҳәм еки базиси бар. Бириңисиниң координатасы 000 (Cs ушын), екіншисиниң $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ (Cl ушын). (1.23)-формула жәрдемінде 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} индекслердин қосындысы жуп болса да, тақ болса да нолге тең болмайды. Ҳақыйқатында да бул жағдайда элементар қутышаның орайында ҳәм мүйешлеринде жайласқан атомлар ҳәр қыйлы. Соныңтан олар толқынларды ҳәр қыйлы етип шашыратады ($f_{Cs} \neq f_{Cl}$). Структуралық фактор f_{Cs} ҳәм f_{Cl} шамаларының қосындысына ямаса айырмасына тең болады. Егер мәселени КОК пәнжере ушын қарағанымыздай етип қарасақ (1.16-сүрет), онда А ҳәм В типиндеги тегисликлер ҳәр қыйлы атомларга иие болады. Олар шашыраған толқынлардың амплитудасына ҳәр қыйлы үлес қосады. Олардың үлеслериниң қосындысы нолге тең болмайды. Соныңтан индекслердин суммасы жуп болғанда күшли дифракциялық максимумлар, ал так болғанда (хлор менен цезийдин берген үлеслериниң белгилери ҳәр қыйлы) әззи дифракциялық максимумлар пайда болады. Кери пәнжередеги түйинлердин бир бирине салыстырғандағы жайласыўлары бойынша пәнжерениң дәүириң, ал күшли ҳәм ҳәлсиз максимумлардың избе-излиги бойынша пәнжерениң базислериндеги атомлардың ийелеген орынларын анықлады.

Енди ҚОК пәнжерениң структуралық факторын есаптаймыз. Егер элементар қутыша сипатында кубты қабыл етсек, онда базис 4 атомнан турады ҳәм 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 индекслердин ишинде тақ инлекслер де, жуп индекслерде бар болса.

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

Қапталда орайласқан кублық кристалдың структуралық факторлары нолге тең емес түйинлер көлемде орайласқан кублық пәнжерени пайда етеди (бұны геометриялық жақтан көрсетиў қыйын емес). ҚОК пәнжерениң рентгенограммаларында (111), (200), (113), (220), (133), (222) ҳәм тап сондай индекслерге иие кристаллографиялық тегисликлерде дифракцияға ушырыған толқынлардың рефлекслері болады. Рентгенограммада ҳәр қыйлы жуплыққа иие индекслерге иие шашыраўлардың (рефлекслердин ямаса дифракциялық дақлардың) болмауы ҚОК пәнжерениң белгиси сипатында қабыл етиледи.

Базислер қурамалырақ қурылышқа иие болғанда структуралық фактордың комплекс шамаға айланыуы, кери пәнжерениң бир түйининен екинши түйинине өткенде базистеги атомлардың жайласыў нызамлары тийкарында өзгериўи мүмкин. Солай етип структуралық фактор ҳәр қыйлы кристаллографиялық тегисликлерде шашыраған толқынлардың салыстырмалы интенсивлигин анықлады. Усыған байланысы кери мәселени де шешиў мүмкин, яғни дифракцияға ушыраған толқынлардың интенсивлигин өлшеў арқалы базистеги атомлардың ийелеген орынларын анықлау. Бул кристалдың структурасын расшифровкалаўға (анықлаўға) мүмкиншилик береди. Ҳәзирги ўақытларға шекем базислери жүзлеген, мыңлаған, оннан да көп атомларға иие кристаллардың қурылышы анықланды

Шашыраўдың атомлық факторы. Айырым атомларда шашыраған толқынлардың амплитудаларын биз ҳәзирше қарағанымыз жоқ. Айырым атомларда шашыраған толқынның амплитудасын беретуғын f_j шамасын шашыраўдың атомлық факторы деп атайды. Шашыраў амплитудасының мәнисин экспериментте анықлады ямаса теориялық жоллар менен есаплайды. Бундай есаплаўларды жүргизиў ушын атомды зарядтың $\rho(r)$ түриндеги зарядлардың тарқалыўы деп қараў керек. Оның ушын атомды ойымында шексиз киши dV көлем элементтерине бөлемиз. Буннан кейин $\rho(r)$ шамасын ҳәм ҳәр қыйлы элементлерде шашыраған толқынлардың фазалар айырмасын есапқа алып барлық

элементлер бойынша төмендеги формуланың жәрдеминде сумманы есаплаймыз (биз жокарыда базистин структуралық факторын есаплаудың схемасы бойынша):

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

f шамасы электронлар менен фотонлардың дифракциясында G векторының модулинен ғәрэзли. Әдетте G шамасы өссе f тиң мәниси кемейеди. f шамасы үлкен номерге ийе атомларда үлкен. Қара берсе f шамасы G ның өсиўи менен үлкен өлшемлерге ийе атомларда тезирек кемейеди. Себеби G ның өсиўи менен атомның ҳәр қыйлы бөлімлери ҳәр қыйлы фазада шашыратады. Электронларының санлары бир бирине жақын атомлар ушын f шамаларының мәнислери бир бирине жақын. Атомлық фактор тек G дан ғәрэзли болса, онда ондай атом сфералық симметрияға ийе деген сез. Дифракциялық экспериментлер өткөрилгенде f функциясының шамасын справочниклерде көлтирилген кестелерден алады.

Мәселелер:

1-мәселе. (1.14)-формула жәрдеминде анықланған кери пәнжере векторы A векторының с ҳәм b векторларына перпендикуляр еkenligin, ал усы A векторының модулиниң $2\pi/d$ шамасына тең еkenligin көрсетициз. Бул жерде d арқалы с ҳәм b векторлары жататуғын кристаллографиялық тегисликтер ушын тегисликтер арасындағы қашықтық белгиленген.

Шешими. a , b ҳәм c векторларында соғылған параллелопипедтин көлеминин олардың арасас қәбеймесине, екиншиден параллелопипедтин ултанының (яғни c ҳәм b вектораларының векторлық қәбеймесиниң модулине) бийиклигине (яғни биз излеп атырған тегисликтер арасындағы қашықтыққа) қәбеймесине тең еkenligin еске түсиремиз. Бул қатнастан d шамасының мәнисиниң (1.14)-аңлатпа бойынша есапланған A векторының модулине тең еkenligi келип шығады.

2-мәселе. Кублық пәнжереге ийе кристалларда $[hkl]$ бағытының Миллер индекслері (hkl) болған кристаллографиялық тегисликтерге перпендикуляр еkenligin ҳәм усы тегисликтен координаталар басына шекемги қашықтықтың $d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$ формуласының жәрдеминде есапланатуғының көрсетициз. Басқа системаларға киришши кристаллар ушын бул формуланың дұрыс нәтийжелерди бермейтуғының анғарамыз ҳәм d_{hkl} шамаларының мәнислерин есаплау ушын кери пәнжерениң векторының узынлығын есаплау зәрүрлиги пайдада болады.

3-мәселе. Параметрлері a ҳәм c болған ($a < c$) тетрагоналлық пәнжере ушын кери пәнжерениң векторларын соғыңыз. Бриллюэнниң бириңи зонасының сүйретин салыңыз. Индекслері (hkl) болған кристаллографиялық тегисликтер семействосы ушын тегисликтер арасындағы қашықтық ушын $d_{hkl} = G(hkl) / 2\pi$ шамаларын анықланыз.

4-мәселе. Параметрлері a ҳәм c болған ($a < c$) гексагоналлық пәнжере ушын кери пәнжерениң векторларын соғыңыз. Бриллюэнниң бириңи зонасының сүйретин салыңыз. Индекслері (hkl) болған кристаллографиялық тегисликтер семействосы ушын тегисликтер арасындағы қашықтық ушын $d_{hkl} = G(hkl) / 2\pi$ шамаларын анықланыз.

5-мәселе. Кери пәнжерениң 000, 110, 200 түйинлери арқалы өтетуғын тегисликтери КОК кристаллар ушын Бриллюэнниң бириңи зонасының кесе-кесиминиң сүйретин салыңыз.

2-бап. Кристаллық пәнжерениң дефектлери

Атомлары қатаң түрде дәйирили жайласқан кристалларды идеал кристаллар деп атайды. Барлық идеал кристаллар идеаллық қурылышқа ийе болмайды. Қурылыштың идеаллықтан айытқыбын қурылыш дефектлери деп атау қабыл етилген. Қурылыш дефектлерин динамикалық хәм статикалық деп айырады. Динамикалық дефектлерге жыллылық тербелислеринің ақыбетинде ямаса кристаллар арқалы электромагнит толқынлары өткенде пәнжерелердин майысыўларын жатқарады. Бул дефектлер атомлардың тен салмақлық аўхалларынан айысыўы менен байланыслы. Соныңтан бундай дефектлер ҳэтте идеал кристалларда да болады. Биз төменде қарайтуғын статикалық дефектлер кристаллық пәнжередеги атомлардың жайласыўларындағы бузылыўлар менен байланыслы. Мысалы пәнжерениң түйининде атомның болмаўы ямаса басқа түрдеги атом менен алмасыўы орын алады. Соның менен бирге атомлар кристалда топарласып ирирек дефектті пайда етийи мүмкін.

Статикалық дефектлерди сол дефектлердин формалары тийкарында 4 топарға бөледи:

- 1). Ноқатлық дефектлер, мысалы пәнжерениң түйининде атомның болмаўы;
- 2). Сызықтық дефектлер болған дислокациялар. Бундай дефектлерде дәйирилкитиң бузылыўы бир сызықтың бойында орын алады;
- 3). Бетлик дефектлер. Бундай дефектлерге кристалдың бети ямаса поликристалдың дәнешелеринің бетлери киребі;
- 4). Көлемлик дефектлер болған қуұыслықтар, микрожарықтар, басқа фазалың кишкене қалдықтарының ямаса зародыштарының болыўы хәм басқалар.

Кристаллардың көплеген физикалық қәсийеттери ҳәр қыйлы топарлардағы дефектлерге байланыслы күшли өзгереди. Мысалы материалдың беккемлиги менен пластиклигі сызықты, бетлик хәм көлемлик дефектлерге байланыслы. Электр қарсылығы тийкарынан ноқатлық дефектлерге байланыслы. Диффузия коэффициенти, жыллылық өткізгішлік, кристаллардың рени сыйқылы қәсийеттер де ноқатлық дефектлерге байланыслы.

Ноқатлық дефектлер

Ноқатлық дефектлер ең майда дефектлер болып, олар әдетте бир атомның этирапында орын алған нормал емес ситуациялар менен байланыслы (бир атомның орнында болмаўы, бир атомның орнын екинши атомның ийелеўи ямаса «картық» атомның пайда болыўы). 2.1-сүйретте схема түрінде көрсетилген ҳәр қыйлы ноқатлық дефектлерди қараймыз

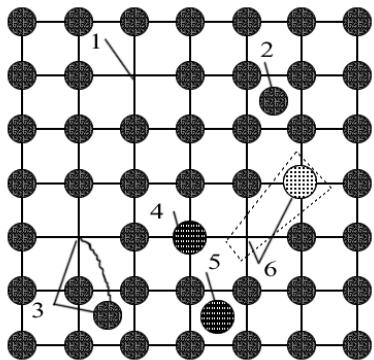
Вакансия. Атом кристаллық пәнжерениң базы бир түйининде болмаўы мүмкін (2.1 (1)-сүйретті қараңыз). Усындаған орын вакансия деп аталағы. Вакансия кристаллизация процессинде жийирек пайда болады, бир түйин тосыннан бос қалады. Егер еритпедеги келеси атом басқа атом ушын жолды жабатуғын болса түйинниң бос қалыўы мүмкін. Вакансияларды Шотки дефекти деп те атайды.

Түйинлер арасындағы атом. Атом кристаллық пәнжерениң түйининде емес, ал атомлар арасында – түйинлер арасында жайласыўы мүмкін (2.1 (2)-сүйрет). Бундай дефектті түйинлер арасындағы атом деп атайды. Түйинлер арасындағы атом да тийкарынан вакансиялар сыйқылы кристаллизация процессинде пайда болады. Атомлардың бири тосыннан жыллылық қозғалысларының себебинен қоңылас атомлардың ортасына түсип қалады. Егер түйинлердин ортасына түсип қалған атомның орнын басқа атом ийелеп қойған болса, онда түйинлер арасындағы атом сол жағдайда ноқатлық дефект түрінде қалып қояды.

Френкель бойынша дефект. Вакансия менен түйинлер арасындағы атом көпшиликтің жағдайларда жубы менен пайда болады (2.1 (3)-сүйретті қараңыз). Бундай жағдайда түйинде турған атом түйинниң ортасына секирип өтеди. Салыстырмалы жоқары

температуралардағы жыллылық қозғалыслары бундай секирип өтиўдин тийкарғы себеби болып табылады. Соның менен бирге бундай секирип өтиўлерди сырттан ушып келген бөлекшелер де әмелге асыра алады (радиациялық дефект). Дефектлердин усындај жубын Френкель бойынша дефектлер деп атайды.

Қосымта атом. Атомлардың бири қосымтасын (қристалға киргизилген қосымта) атомы менен алмасқан болыуы мүмкин (2.1 (4)-сүүретті қараңыз). Бундай жағдайда алмастырышты қосымта атом деп аталышты дефект пайда болады. Қосымта атом түйинлер арасына кирип жайласа алады (2.1 (5)-сүүрет). Бундай дефектті ендирилген қосымша атом деп атайды. 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 көпшиликтік жағдайларда ендирилген қосымша атомлардың орындарын ийелейді. Егер қосымталардың атомларының өлшемлери кристалдың атомларының өлшемлеринен үлкен болса, ендирилген атомлар кристалдың атомларын алмастырады.



2.1-сүүрет.

Ноқатлық дефектлердин типтери: 1 – вакансия; 2 – түйинлер арасындағы атом; 3 – Френкель бойынша дефект; 4 – алмастырышты қосымта атомы; 5 – ендирилген қосымта атомы; 6 – үлкен валенттікке ииे алмастырышты атом.

Көпшиликтік жағдайларда валенттігі менен айрылатуғын қосымта атомлары вакансиялардың пайда болыуына алып келеди. Бундай жағдай KCl кристалларына Ca атомларын киргизгенде орын алады. Бундай жағдайда кристал нейтралдығын сақтайтын ҳәм екі валенттік кальция атомы бир калий атомының орнын алмастырады, ал калий атомы туратуғын орын бос орынға айланады (2.1 (6)-сүүретті қараңыз).

Ноқатлық дефекттің энергиясы ҳәм оның пайда болыў итималлығы. Ноқатлық дефекттің пайда болыуы ушын E_V энергиясы талап етиледи: вакансия жағдайында атомды кристалдың бетине шығарыў ушын керек болатуғын энергия; ендирилген атомда кристалдың бетинен атомды түйинлер арасына жайластырыў ушын керек болатуғын энергия. Бул энергияның мұғдары шама менен 1 эВ шамасын қурайды.

Ноқатлық дефекттің пайда болыў итималлығы Больцман формуласының жәрдемінде есапланады:

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

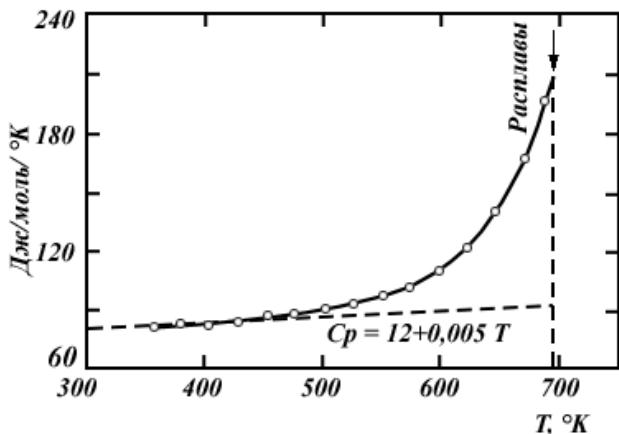
Бул формула бойынша есапланған итималлықтың мәнисиниң қандай болатуғынлығын анықтайды. Мейли $E_V = 1$ эВ, $T = 1000$ К болсын. Бундай жағдайда $P \approx 10^{-5}$. Төменирек температураларда дефектлердин тығыздығы экспоненциаллық нызам бойынша кемейеди ҳәм өжире температураларынан киши температураларда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

Френкель бойынша дефектлерде дефектлер жубын (вакансия менен түйинлер арасындағы атом) пайда етиў ушын зәрүрли болған энергияның мәнисин E_{Fr} арқалы белгилеймиз. Оның сан шамасы атомды кристалдың бетине шығарыў ушын керек болған энергия менен кристалдың бетинен түйинлер ортасына атомды жылыстырыў ушын керек болған энергияның қосындысынан турады. Усындағы дефектлердин санының төмөндегидей формуланың жәрдеминде анықланатуғының көрсетиўге 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 жоқарылаўы менен дефектлердин тең салмақтық саны жоқарылайды ҳәм олардың жаңадан пайда болыўы ушын қосымша энергия талап етиледи. Сонықтан айрым кристалларда балқыў (ериў) температурасына жақын температураларда қыздырыўдың барысында дефектлердин саны азмаз көбейеди. Усының салдарынан жыллылық сыйымлығының кристаллық пәнжерениң тербелислерине байланыслы болған моллик жыллылық сыйымлығының мәнисине шекемги өсиў эффекти бақланады. Бул жағдай 2.2-сүйретте келтирилген.



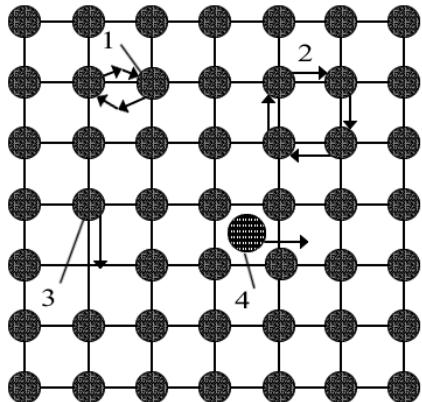
2.2-сүйрет.
Балқыў (ериў) температурасы жанында нокатлық дефектлердин пайда болыўының жыллылық сыйымлығына қосатуғын үлеси.

Нокатлық дефектлердин диффузияға тәсіри. Нокатлық дефектлер кристаллардағы диффузияның тезлигине ҳәм диэлектрик кристаллардың электр өткізгішлигине ең үлкен тәсир етеди. Дәслеп кристаллардағы диффузияның мүмкін болған барлық механизмлерин көріп шығыўға тоқтаймыз.

Кристаллардың атомлар бир орыннан екинши орынға көшип өте алады (секирип өте алады, атлап өте алады). Усындағы көшип өтиўлердин вариантылары 2.3-сүйретте келтирилген. Еки ямаса төрт атом бир бири менен орын алмастыра алады (2.3 (1, 2)-сүйретлер). Атомға ең аңсаты вакансияға көшип өтиў болып табылады (2.3 (3)-сүйрет). Түйинлер арасында турған атомға да (егер оның өлшемлері үлкен болмаса) бир орыннан екинши орынға көшип өтиў де қыйын емес (2.3 (4)-сүйрет). Сонықтан қатты денелердеги диффузияның тийкарғы механизми мыналар болып табылады:

Вакансиялық механизм. Бул механизм вакансиялардың этирапында атомлардың қайтадан топарласыўы менен байланыслы (2.3 (3)-сүйрет);

Түйинлер аралық механизм. Бул жағдай түйинлер арасында салыстырмалы майда атомлардың көшеўлери менен байланыслы (2.3 (4)-сүйрет).



2.3-сүйрет.

Кристаллардағы диффузияның ең көп тарқалған механизмлері: 1 – қоңсылас атомлардың бир бири менен орын алмастырыуы; 2 – бир неше қоңсылас атомлардың бир бири менен орын алмастырыуы; 3 – атомның вакансияға секирип өтийі; 4 – түйинлер арасында турған атомлардың қоңсысы түйинлер арасына секирип өтийі.

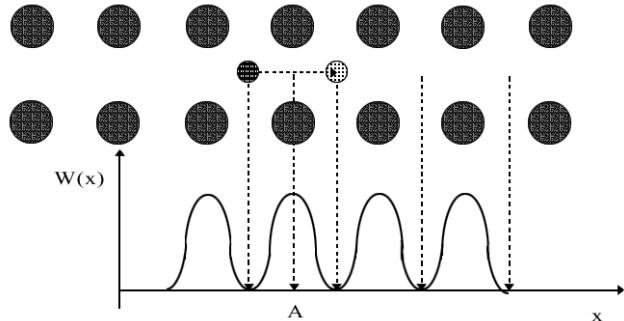
Барлық жағдайларда да атомлар потенциаллық барьер арқалы өтеди. Потенциаллық барьердин пайда болыуы атомлар бир бирине жақынлағанда пайда болатуғын кванттық итерилис күшлери менен байланыслы. Түйинлер арасында турған атомның қоңсылас түйинлердин арасына көшип өтийін таллау ушын ең әпиүайы жағдайды қарап өтемиз. 2.4-сүйретте түйинлер арасында турған атомның энергиясының x координатасынан ғәрзслиги көрсетилген. Усындағы көшиү ушын зәрүрли болған энергияның шамасы активация энергиясы деп аталады ҳәм E_a арқалы белгиленеди. Активация энергиясының мәниси әдетте жылдылық энергиясының ($\approx kT$) орташа мәнисинен әдеүір үлкен. Бундай ўақыяның итималлығы жұдә киши ҳәм Больцман формуласы менен бериледи:

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

Сонлықтан кристаллардағы атомлар узак ўақыттар даўамында өзлериниң тең салмақтық аўхаллары әтирапында базы бир v жийилиги менен тербеледи ҳәм жылдылық тербелислериниң энергиясы тосыннан активация энергиясынан үлкен болған жағдайларда жаңа орынларға секирип (көшип) өте алады. Усындағы көшип өтиўлердин жийилигин f арқалы белгилеймиз ҳәм бул шама былайынша анықланады:

$$f = vP. \quad (2.4)$$

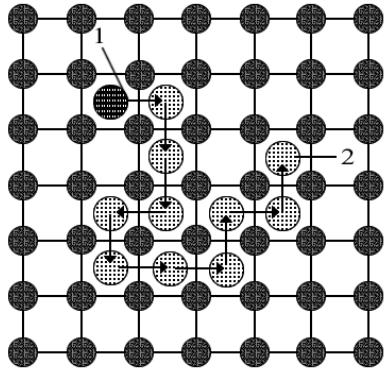
Солай етип қатты денелердеги атом сийрек болатуғын секириўлер жолы менен бир орыннан a қашықтығындағы екинши орынға f жийилиги менен көшеди. Бул жағдай 2.5-сүйретте көрсетілген.



2.4-сүйрет.

Түйинлер арасында турған атомның энергиясының x координатасынан ғәрзслиги. Атомның энергиясы түйинлер арасында минималлық мәнисине, ал А жағдайларында максималлық мәнисине иие.

Жоқарыда көрсетілген моделдин жәрдеми менен параметри a болған әпиүайы кублық пәнжере ушын түйинлер арасында турған атомлардың диффузия коэффициентин есаптаймыз. Мейли берилген түйинлер арасындағы орыннан қоңсылас сондай орынға көшийдің жийилиги f шамасына тең болсын.



2.5-сүйрет.

Эпиўайы (примитивлик) кублық пәнжередеги түйинлер арасында турған атомның диффузиясының схема түриндеги сүйрети.

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

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

D параметри диффузия коэффицинети деп аталады. Оның мәниси диффузияға ушырайтуғын атомға ҳәм усы атомлар диффузияға ушырайтуғын затқа байланыслы. Кристалдағы [100] бағытын, оған перпендикуляр ҳәм пәнжерениң түйинлери арқалы өтиўши S тегисликті (2.6 а сүйретте дөңгелеклер менен белгиленген), усы тегисликтің он ҳәм шеп тәреплеринде турған және 1 ҳәм 2 арқалы белгиленген, S тегислигиге параллел болған ең жақын еки тегисликті қараймыз (квадратлар менен белгиленген). 1 ҳәм 2 тегисликлери арасындағы қашықтық (бул қашықтық қоңсылас түйинлөр арасындағы орынлар арасындағы қашықтыққа тең) a шамасына тең («көшип өтиў узынлығы»). Мейли 1 тегислигинин S түйинлер арасындағы N_1 атом болсын, 2 тегислигинин тап сондай участкасында N_2 атом жайласқан деп есаптайық (2.6 а сүйретті қараңыз).

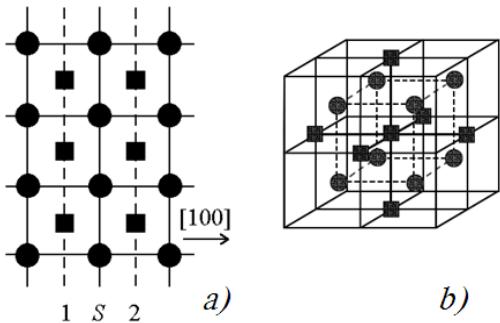


Рис. 2.6.

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 ҳәм C_2 шамаларының мәнислерин де есаплаў мүмкин.

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

тендиклеринин орынланатуғыны өз-өзинен түснікли. Δt ўақыты ишинде S бети арқалы шеп тәрептен он тәрепке қарай кесип өтетуғын атомлар саны ΔN_1 шамасын есаптаймыз. Бириńши тегисликтеги ҳәр бир атом ең жақын жайласқан алты орынның биреүине көшип өте алады (2.6 б сүйретке қараңыз). Олардың тек биреүи ғана сайлап алынған орайлық тегисликті кесип өтеди. Бундай жағдайда

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

Δt ўақыты ишинде S бети арқалы өтетуғын 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 өтетуғын атомлардың улыўмалық саны мынаған тең болады:

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

$C_1 - C_2 = - dC/dx a$ 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-сүүретте келтирилген басқа да жағдайлар ушын диффузия коэффициентин есаплау мүмкін. Сол сүүреттеги 1- ҳәм 2- жағдайлардағы активация энергиясының мәнислери 3- ҳәм 4-жағдайлардағы активация энергиясының мәнислеринен үлкен болады. Атомлар вакансияның әтирапында орынларын алмастырған жағдайындағы активация энергиясының мәниси оннан да үлкен.

2.3-сүүретте 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 ҳәр бир жуп ушын (диффузияланыўшы элемент – диффузия құбылысы жүретуғын зат) ушын экспериментте өз алдына анықланады. Нәтийжелер 2.1-кестеде берилген.

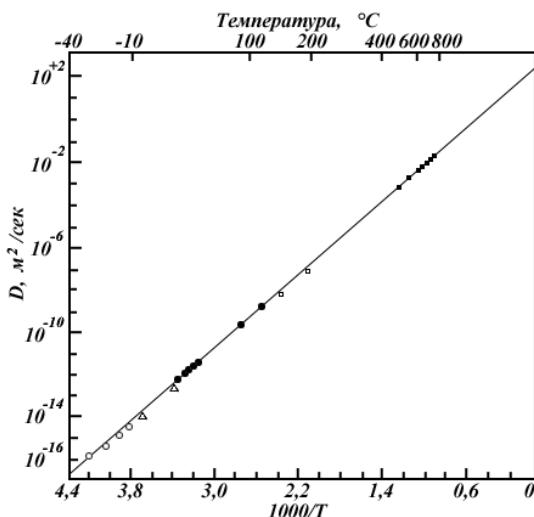
2.1-кесте.

Базы бир диффузияланыўшы элемент – диффузия құбылысы жүретуғын зат ушын D_0 ҳәм E_a параметрлері

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-сүретте углеродтың КОК темирдеги диффузиясы коэффициентиниң температурадан ғәрзелиги көлтирилген. Бул сүретте 2.12-аңлатпандың дәл орынланатуының көринип тур.



2.7-сүрет.

Углеродтың КОК темирдеги диффузиясы коэффициентиниң температурадан ғәрзелиги.

Жоқарыда көрип өтилген моделдиде жәрдеминде атомның $t = \frac{N}{t_1} = N/f$ ўақыты аралығында жүрип өтетуғын орташа жолы болған x^2 шамасының мәнисин есаплау мүмкін. Бул жерде $t_1 = 1/f$ арқалы бириңен соң бири болатуғын еки көшиў арасындағы орташа ўақыт белгиленді. Бұның ушын x^2 шамасын бурынғы көшиўлерден пүткиллей ғәрзесиз деп есаптаймыз. 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 анықлау ушын пайдаланылады.

Қатты денелердеги диффузияны ҳәзирги ўақытлары «тамға салынған» атомлар уысылын пайдаланып эффективли түрде үйренеди. Бундай изертлеўлерде затлардың бетине радиоактивли «тамға салынған» атомлар «отырғызылады». Буннан кейин алынған үлгі берилген температурада «тамға салынған» атомлардың 0,3-1 мм тереңлікке өтетуғындағы ўақыт ишинде услап турылады. Буннан кейин үлгинин активлиги өлшенеди. Бул катлам ысқылап тегислеў жолы менен жоқ етилгеннен кейин активлик қайтадан өлшенеди. Бундай операцияларды бир неше рет қайталайды. Усындағы жоллар менен «тамға салынған» атомлардың өтийиниң орташа тереңлігі ҳәм берилген температурадағы D диффузия коэффициентин есаплайды. Ҳәр қылыш температураларда тәжирийбелер сериясын өткериў жолы менен (2.12)-формуладағы D_0 менен E_a параметрлериниң мәнислері анықланады.

(2.3)- ҳәм (2.4)-формулалар және 1.1-кестедеги мағлыўматлар жәрдеминде ҳәр қылыш температуралардағы атомлардың көшиў жийиликлерин баҳалау мүмкін. Мысалы альфатемирде 1800 К температурада углерод атомы 1 секундта 10^{11} рет көшеди. Өжире температурасында болса онлаған секундта 1 рет көшеди. Солай етип диффузия сезилерліктей 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 қозғаушы никель ямаса

хром қатламы жоқары температураларда диффузияны жәрдемінде пайда етеди екен. Ярым өткізгишке ҳәр қандай араласпалары киргизиў (легирование полупроводника, ярым өткізгишти легириүй) ушын қысқа ўақытлар ишинде қыздырыўлар интеграллық схемаларды алғыш үшын қолланылады: шаңландырыў жолы менен ярым өткізгиштиң бетиниң белгили бир участкаларына түсирилген араласпаларды (легирлеўши араласпаларды) бир неше жұз градусқа қыздырыў жолы менен диффузиялайды ҳәм оны легирлейди. Нәтийжеде кристалда p ҳәм n типиндеги ярым өткізгишлердин қурамалы областлары пайда болады.

Дефектлердин орын алмастырыўының есабынан жүретуғын диффузия затлардағы дефектлердин санының кем-кемнен өзгериүиниң баслы механизми болып. (2.1)-формула бойынша заттың балқыш үйретуғынан өзгертілген дефектлердин пайда болып үткізгіштің өзгешесінде көп есе үлкен болады. Себеби олар жоқары температураларда пайда болады: кристалдың өсімдіктерінде ямаса жоқары температурадан шынықтырыў барысында. Дефектлердин тығызлығы кем-кемнен киширеяди. Бул құбылыс түйинлер арасында турған атомлардың вакансияларға өтийиниң (бұны дефектлердин рекомбинациясы деп атайды) ямаса дефектлердин кристалдың бетине ямаса кристалдағы дәнешелер арасындағы шегараға өтийиниң салдарынан жүзеге келеди. Айырым жағдайларда нокатлық дефектлер болған қосымта топарласады ҳәм жаңа кристаллық фаза областларын пайда етеди. Бул процесслердин барлығы да дефектлердин емленийи деп аталаады.

Нокатлық дефектлердин электр өткізгишликке тәсіри. Егер зоналық теория тийкарында есаплаўлар өткерилисе ҳақықый кристаллардың электр өткізгишлігі идеал кристал-диэлектриктиң электр өткізгишлігінен өзгертілген жоқары болып шығады. Бул жағдай тәмендегидей еки себепке байланыслы:

Бириңшиден донорлық ҳәм акцепторлық қосымталар диэлектриктиң электр өткізгишлігін жоқарылатады (тап ярым өткізгишлердеги сыйқылды).

Екиншиден ионлық кристаллардың вакансиялардың тузынан ионлардың зарядты алып журийиниң жекеленійи менен байланыслы. Бул жағдай схема түринде 2.3-сүйретте келтирилген. Егер 3 вакансияда он зарядланған ионның түрүйі керек болса ҳәм ол E электр майданында жайласқан болса, онда бул вакансияға он зарядланған ионның E ниң бағытында секирип өтийиниң итималлығы E ге қарама-қарсы бағытта секирип өтийиниң итималлығынан жоқары болады. Он зарядланған ионлар орташа сыртқы электр майданының бағытында қозғалады ҳәм электр өткізгишликке тәсір етеди. Тап сол сыйқылды терис зарядланған ионға E бағытында қозғалғанға қарағанда E ниң кери бағытында қозғалған утымлырақ. Соның ушын терис зарядланған ионлар E ниң бағытында қарама-қарсы бағытта қозғалады ҳәм электр өткізгишликке өзиниң үлесин қосады. Еки жағдайда да вакансия кристал бойынша орын алмастырып зарядтың көшийин тәмийинлейди. Бирақ ҳақықатында зарядты ионлар тасыйды ҳәм олар (он ҳәм терис зарядланған ионлар) вакансиялардың әтирапында ҳәр қылыш болып топарласады. Бундай жағдайларда зарядты көшириүдиң вакансиялық механизми ҳаққында гәп етеди (биз тәменде ярым өткізгишлердин электр өткізгишлігінің тесиклешик механизма ҳаққында гәп етемиз). Бундай механизм бойынша зарядларды көшириў ушын өзгертілген киши потенциаллық барьерден өтийди талап етеди. Ал электронды ионнан ионға өткериў ушын үлкен потенциаллық барьерден өтий керек болады.

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

Нокатлық дефектлердин кристаллардың рецинне тәсіри. Қосымта атомлар кристаллардың рецин өзгертеди. Мысалы алмастырыў қосымталары (примеси замещения) болған хром ионлары Al_2O_3 кристалларының қызыл рецин тәмийинлейди (рубин

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

Ноқатлық дефектлерди үйрениү усыллары. Көлем бирлигиндеги вакансиялардың санын анықлау ушын әдетте төмендегидей еки нәтийже салыстырылып көриледи: бириншиси рентгенографиялық усыллардың жәрдеминде алынған пәнжере параметриниң дәл мәниси, екиншиси заттың тығызлығын дәл анықлау (кристалдың массасының көлемине қатнасының шамасын дәл анықлау). Вакансиялардың кристаллық пәнжерениң параметрин азмаз ғана, бирақ кристалдың көлемин сезилерліктей өзгереттуғынлығы белгили. Усындај жоллар менен жоқары емес дәлліктеге кристалдың көлем бирлигиндеги түйинлер арасындағы атомлардың санын анықлау мүмкін. Себеби түйинлер арасында жайласқан атомлар заттың тығызлығын әдеүір үлкейтеди, ал кристаллық пәнжерениң параметриниң шамасын аз шамаға өзгертеди. Егер кристалда вакансиялар да, түйинлер арасында жайласқан атомлар да бар болатуғын болса, онда жоқарыда баянланған усылдың жәрдеминде кристалдың көлем бирлигиндеги вакансиялар саны менен түйинлер арасындағы атомлар санының айырмасын баҳалауға болады. Ал Френкель бойынша дефектлердин тығызлығын қарап өтилген усылдың жәрдеминде анықлау мүмкін емес.

Жоқарыда қарап өтилген электр қарсылығы менен диффузияны өлшеу, соның менен бирге хәр қыйлы электромагнит нурларының жұтылығы коэффициентлериниң мәнисин өлшеу кристаллардағы ноқатлық дефектлерди үйрениүге мүмкіншилик береди.

Мәселелер.

1-мәселе. Егер вакансияның пайда болыўы ушын зәрүрли болған энергияның шамасы 1 эВ қа тең болса 300 К ҳәм 900 К температураларындағы вакансиялардың тең салмақтық концентрацияларын табыңыз.

Көрсетпе. (2.1)-формуладан пайдаланыў керек.

2-мәселе. 3 saat даўымында 300 K ҳәм 1500 K температураларда темирдин бетлик қатламына углерод атомларының қандай теренлікке өте алатуғынлығын баҳалаңыз. Углеродты өз ишине алатуғын орталықты темирдин бетине тийип тур деп есаплау керек. Диффузия коэффициентиниң мәнисин 2.1-кестеде көлтирилген мағлыұматтар бойынша есаплау талап етиледи. Шынықтырыў менен жуўмақланатуғын тап усындај операция бети қатты, ал өзеги жумсақ деталларды алыў ушын қолланылады. КОК темирдин (көлемде орайласқан кублық темирдин) пәнжересиниң параметри 0,288 нм шамасына тең.

Көрсетпе. (2.12)- ҳәм (2.13)-формулалардан пайдаланыў керек.

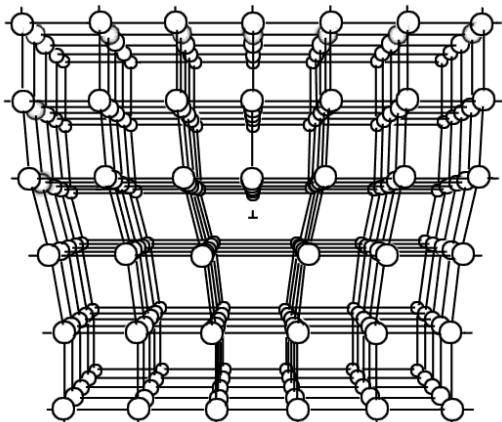
2.2. Дислокациялар

Дислокациялар деп аталауғын кристаллық пәнжерениң сзызықлы дефектлерин толығырақ үйрениү олардың барлық конструкциялық кристаллық материаллардың беккемлиги менен пластиклигине үлкен тәсір ететуғынлығына байланыслы. Дефектлердин усы типин есапқа алмаған кристаллардың беккемлиги теориялары ҳәтте монокристаллық ҳәм поликристаллық материаллардың әмелде бақланып жүрген механикалық қәсийетлерин түсіндірип бере алмады.

Дислокациялардың типтери. Дислокацияларды шетлик ҳәм винтлик деп екиге бөледи. Бирақ экспериментлерде бақланып жүрген дислокациялар тек айырым жағдайларда ғана сол дислокациялардың моделлик типлериниң екеўиниң бири болыўы мүмкін. Себеби әдетте дислокациялар еки типтиң де элементлерине ийе болады. Көргизбелилік ушын моделлик дислокацияларды үйрениуди баслаймыз. Эпиүайылық ушын эпиүайы кублық пәнжерени қараймыз. Алынған нәтийжелер азмаз өзгерислер менен басқа типтеги пәнжерелер ушын да дұрыс болады.

Шетлик дислокация ҳәм оның этирапында атомлардың жайласыў схемасы 2.8-сүйретте эпиүайы кублық пәнжере мысалында көлтирилген. Бул сүйретте 100 типиндеги

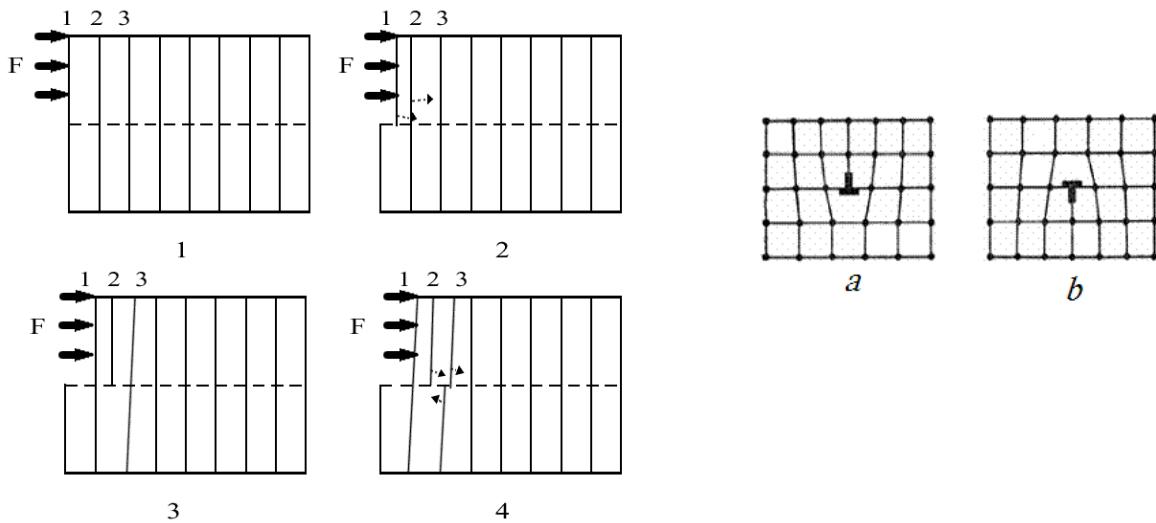
қоңылас толық тегисликлер арасындағы «ярым тегислик» көрсетилген. Бул пүтин тегисликлердин атомлары сұйреттиң төменинде бир бири менен әдеттегидей болып байланысқан, бирақ ярым тегисликтің төменги шетинде жұдә күшли деформациялар пайда болған. Артық болған ярым тегисликтің төменги шетин шетлик дислокациясызығы, ал айырым жағдайдарда әпиүайы түрде шетлик дислокация деп атайды. Усы жағдайға байланыслы дислокацияларды сызықлы дефектлерге жатқарады. Бул сызық артық ярым тегисликтің шети бойынша жайласады. дислокациялардың әтирапындағы күшли деформацияға ушыраған областтың өлшемлери шама менен кристаллық пәнжерениң 2-3 дәүирине тең болады. Үлкенирек қашықтықтарда майысыўдың шамасы киши хэм оларды серпимлилік теориясы тийкарында тәриплеўге болады.



2.8-сұйрет.

Шетлик дислокация әтирапындағы атомлардың жайласыў схемасы.

Шетлик дислокациялар көбинесе кристалларды 2.9-сұйретте келтирилгендей етип деформацияғанда пайда болады. Дислокациялар көбинесе жылжыў деформацияларында жылжыў тегисликлери деп аталатуғын тығыз жайласқан атомларға ийе тегисликлерде пайда болады. Биз әпиүайы кублық пәнжерени хэм оның {100} тегислигигин қараймыз. КОК кристалларда {110}, {112} хэм {123} тегисликлериниң, ал ҚОК кристалларды {111} тегисликлериниң жылжыў тегисликлери екенлигин атап өтемиз. Егер кристалға F күши менен тәсир етсек (2.9 (1)-сұйретке қараңыз), онда (100) тегислигиги пунктир менен белгиленген орында «жыртылады» (2.9 (2)-сұйрет), буннан кейин 1 тегислигиниң жоқарғы ярымы 2 тегисликтің төменги ярымы менен тутасады (2.9 (3)-сұйрет). 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)-сұйрет). Процесс тап усынданай избезликтен даўам етеди. Солай етип кристалда артық (100) ярым тегислигиги пайда болады. Ол F күшининде тәсиринде жылжыў тегислигиги бойынша қоңсы тегисликлердин «жыртылыўының» есабынан қозғала алады. Жаңа тегисликтің жыртылыўы дислокациясызығының қасында болатуғынлығын аңғарыўымыз шәрт. Себеби кристаллық пәнжерениң майысыўы тап сол орында максималлық мәниске ийе (2.8-сұйрет).



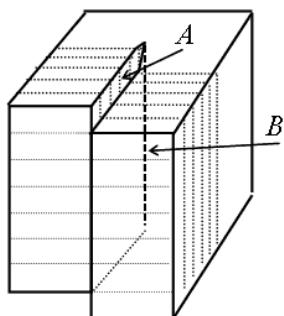
2.9-сүйрет. Кристалдың жылжыў деформациясының барысында шетлик дислокацияның пайда болыўының ҳэм қозғалыўының схемасы.

2.9- а ҳәм b сүйретлер.
Оң ҳәм терис белгиге иие дислокациялар
(оң ҳәм терис дислокациялар).

Шетлик дислокацияларды шәртли түрде оң ҳәм терис шетлик дислокациялар деп екіге бөледи. Оң белгиге иие дислокацияда (2.9 а сүйрет) артық ярым тегислик жоқарыда жайласқан. Бундай жағдайда кристалдың жоқарғы бөлегинде қысыўшы кернеў, ал төменинде созыўшы кернеў орын алады. Терис дислокация (2.9 б сүйрет) жағдайында кристалдың жоқары бөлегинде созыўшы кернеў, ал төменги бөлегинде қысыўшы кернеў орын алады. Сүйретте оң ҳәм терис дислокациялардың белгиленийлери де келтирилген. Еки дислокацияның бир бириңен тек 180^0 қа айырмасының бар екенлигин анғарыў қыйын емес. Сонықтан тек бир дислокация бар жағдайда оның белгиси ҳаққында гәп етиўдің кереги жоқ. Егер дислокацияның қасында басқа дислокация жайласқан болса, онда дислокациялардың белгисин айтыў зәурүрги пайда болады. Дислокациялар арасындағы серпимли тәсирлесиў құшлери дислокацияның белгисине байланыслы: бирдей белгиге иие дислокациялар бир бири менен ийтериседи, ал хәр қылыш белгиге иие бир бири менен тартысады.

Винтлик дислокация. Эпиўайы кублық кристал ушын винтлик дислокация схема түринде 2.10-сүйретте келтирилген. Бул сүйретте А тегислигинин шеп тәрепинде жайласқан атомлар өзлериниң орынларында қалған, ал оң тәрепиндеги атомлар оң тәрептегиге салыстырғанда төменге қарай бир тегисликлер арасындағы қашықлыққа жылжыған. Усының салдарынан В сызығының этирапында құшли деформация пайда болады. А ярым тегислигинин ҳәм қалған ярым тегисликтің шегарасы арқалы өтиўши В сызығын винтлик дислокация деп атайды. 2.10-сүйретте көринип турғанындағы горизонт бағытындағы деформацияланған (001) типиндеги тегислик бойынша В сызығын бир рет айланып шықса кристаллық пәнжерениң 1 дәүирине жоқарыға көтерилийге, ал В сызығының дөгерегинде бир неше рет айланып шықса пәнжерениң бир неше дәүирине көтерилийге болатынылығын көремиз. Көтерилий винтлик баспалдақ ямаса винтлик автожол менен көтерилийге усайды. Усыннан винтлик дислокация атамасы келип шыққан. Винтлик дислокацияда барлық (010) тегисликлери бөлекленген болмай шығатуғынлығын анғарамыз. Себеби олардың барлығы да көшери В болған бир курамалы винтлик бетке айланған. 2.10-сүйретте келтирилген бет В сызығының этирапында saat тилиниң бағытына қарама-қарсы бағытта қозғалғанда көтерилийди тәмийинлейди (егер жоқарыдан қарасақ). Егер В сызығының этирапында saat тилиниң қозғалыў бағытында қозғалғанда да жоқарыға көтерилийди тәмийинлейтуғын бетти курыў мүмкін (бұның ушын 2.10-сүйретте келтирилген кристалдың оң тәрепин төменге емес, ал жоқарыға қарай

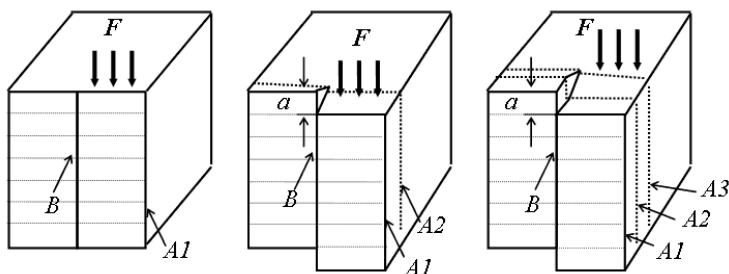
жылжытыў керек). Соңықтан винтлик дислокациялар оң винтлик ҳэм терис винтлик бола алады.



2.10-сүүрет.

Винтлик дислокацияның этирапында атомлық тегисликлердин жайласыўының схемасы.

Винтлик дислокация кристалды деформациялағанда пайда болады. Эпиўайы кублық пәнжередеги {100} типиндеги тегисликті қараймыз. Егер кристалға F күши менен тәсир жасасақ (2.11 а сүүрет), онда A_1 тегислиги стрелка менен белгиленген орында B сызығы бойынша «жыртылады». Буннан кейин A_1 дин төменги ҳэм жоқарғы ярымлары пәнжерениң 1 дәүирине жылжыў менен биригеди (2.11 б сүүрет). Егер кристалға тәсир етийди даўам ете берсек, онда келеси тегислик «жыртылады», буннан кейин A_2 тегислигинин төменги ҳэм жоқарғы бөлимлери жылжыў менен байланысады (2.11 в сүүрет). Процесс тап усындан избе-изликтे даўам етеди. Солай етип кристалда винтлик дислокация пайда болып, ол кристалға тәсир етийдің ақыбетинде тегисликлердин қоңсы ярымларының «жыртылыўы» ҳэм «биригүйлеринин» себебинен жылжыў тегислиги бойынша қозгалады. Жаңа тегисликтин «жыртылыўы» тек дислокация сызығының қасында жүзеге келетуғынлығын аңғарамыз. Себеби сол орында кристаллық пәнжерениң майысыўы ең үлкен мәниске ийе болады (2.11-сүүретке қараңыз).



2.11-сүүрет.

Кристалдың жылжыў деформациясындағы винтлик дислокацияның пайда болыўы ҳэм жылжыўы.

Бюргерс векторы. Винтлик дислокацияны алыў ушын кристалдың үстинен төмендегидей моделлик операция жүргиземиз (2.12 а сүүретті қараңыз). Кристалда пәнжерениң түйинлери арасынан өтетуғын (100) тегислигинде А ярым тегислиги бойынша қыялымызда кесим кесемиз. Буннан кейин кесимниң оң тәрепинде атомларды бир тегисликлер арасындағы қашықтыққа төменге қарай жылжытамыз ҳэм А арқалы өтиўши байланыслар менен байланыстырамыз. Кристалдың «шеп» тәрепине салыстырғанда «оң» тәрепинин аўысыў векторы В винтлик дислокацияның Бюргерс векторы болып табылады. Оны b арқалы белгилеймиз. Винтлик дислокацияның Бюргерс векторының усы дислокацияның өзине параллел екенligи көринип тур.

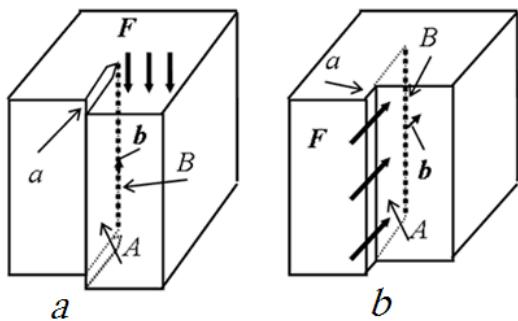


Рис. 2.12.

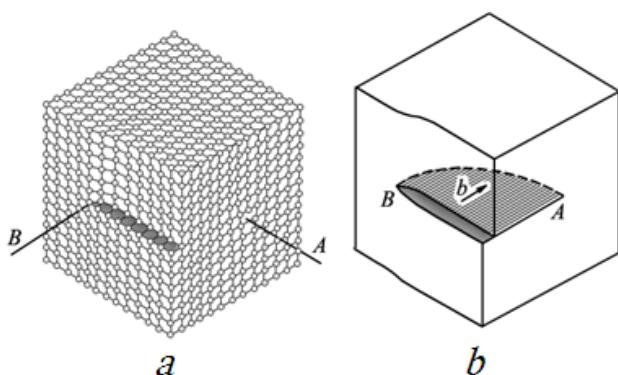
Винтлик ҳәм шетлик дислокациялардағы кристалдың атомларының аүйсығуының схемасы.

b арқалы Бюргерс векторы белгиленген.

Тап сондай жоллар менен шетлик дислокацияны да алғыға болады. Бұның ушын кристалдың «он» тәрепин А бети бойынша «бизден арман қарай» жылжытыў керек ҳәм В дислокациясы сызығынан басқа орынлардағы байланысларды бириктириў керек болады (2.12 а сүйрет). Кристалдың бул бөлімінің аүйсығу векторы Бюргерс векторы болып табылады. Шетлик дислокацияның Бюргерс векторының дислокацияның өзине перпендикуляр екенлиги көринип түр.

Аралас типтеги дислокациялар. 2.13-сүйретте А ҳәм В нокаттарын тутастырыўшы аралас типтеги қыйсық сызықлы дислокацияға мысал келтирилген. А нокатында атомлардың жайласығу шетлик, ал В нокатында винтлик дислокацияға сәйкес келеди. Бундай дислокация *b* бағытында тәсир ететуғын *F* күшиниң тәсиринде жүретуғын бир текли емес жылжыў деформациясының ақыbetинде пайда болады (2.13-сүйретті қараңыз). Тәсир етиўді даўам етсек А - В дислокациясы жылжыйды ҳәм штрихланған областтың майданы ұлкейеди. Тап усынданай аралас типтеги курамалы дислокациялар кристалларда жийи ушырасады.

Дислокациялардың тығыздығы. **Дислокацияларды бақлаў усыллары.** Дислокациялардың тығыздығы кристалдың ишинде алынған майданы бир бирлик болған бетті кесип өтетуғын дислокациялардың санына тең. Бул шама кристалдың көлемининң бир бирлигиндеги барлық дислокациялардың узынлығына тең. Дислокациялардың тығыздықтарының жийи ушырасатуғын мәнислері ҳәм дислокациялардың усынданай тығыздықтарын үйрениў ушын қолланылатуғын усыллар 2.2-кестеде берилген.



2.13-сүйрет.

Аралас типтеги қыйсық сызықлы дислокация.

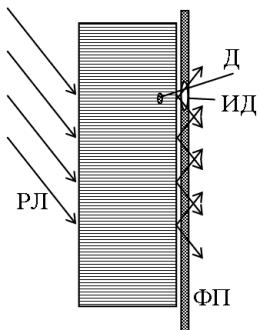
2.2-кесте.

Дислокациялардың тығыздықтарының мәнислері ҳәм оларды бақлаў усыллары

Дислокациялардың үйрениў уஸýлы	Үлгинин қалындығы, мкм	Дислокациялардың сүйретинин қеңлигі, мкм	Дислокациялардың максималық тығыздығы (1 см^2 майдандағы)
Электрон	$10^{-0} - 10^{-1}$	10^{-2}	$10^{11} - 10^{12}$

микроскопиясы			
Рентген топографиясы (кристалл арқалы өтиўши 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 ойықлары бойынша)	қәлеген қалыңлықтағы үлги	0,3-0,5	$10^{-6}-10^{-7}$

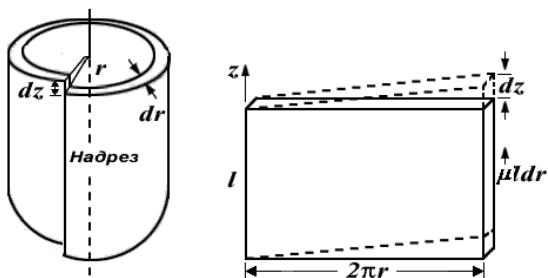
Электрон микроскопларының жәрдеминде қәлеген тығызылыштағы дислокацияларды бақлау мүмкін. Құрылымы жеткилилік дәрежеде жетилискең кристаллардағы дислокацияларды рентген топографиясының жәрдеминде бақлайды. Дислокацияларды бақлайтуғын усыллардың барлығы да дислокациялардың өзлерин «көрмейди», ал дислокация әтирапындағы кристаллық пәнжерениң майысыңын «көреди».



2.14-сүүрет.

Рентген топографиясы жәрдеминде монокристалдағы дислокацияның сүүретин пайда етиў схемасы (кристалл арқалы өтиўши толқынлардағы рентген топографиясы).

Дислокациялардың энергиясы. Дислокацияға усы дислокация пайда еткен кристаллық пәнжересиниң майысыңын энергиясы байланыслы. Бул энергияның шамасын дислокациядан қашықласқан тутас орталық жақынласыңын (приближение) ҳәм дислокацияларға жақын қашықтылардағы бир бири менен тәсирлесиўши атомлар моделин қолланып есаплауға болады.



2.15-сүүрет.

Винтлик дислокация жаңындағы кристалдың деформациялыныңы.

Бундай есаплауды винтлик дислокациялар ушын орынлаған аңсат. Кристалды тутас изотроп орталық деп есаптаймыз. 2.15-сүүретте винтлик дислокация жаңындағы серпимли деформациялар картинасы көрсетилген. Бундай жағдайда дислокацияның әтирапындағы кеңисликти ишкі радиусы r ҳәм сыртқы радиусы $r + dr$ болған жүзға

цилиндрлик қатламларға бөлемиз. Ярым тегисликтे ҳәр бир қатлам кесилген ҳәм Бюргерс векторы b шамасына жылысыў менен байланысқан. Бундай жағдайда ҳәр бир қатлам $\varepsilon = b/2\pi r$ шамасына жылжыў менен деформацияланған деп есаптай аламыз (көрсетпелик ушын 2.15-сүйретте ҳәр бир цилиндрди бурауға ҳәм пайда болған жылжыў деформациясының шамасын анықлауға болады). Жылжыў деформациясының энергиясының тығызылдығын салыстырмалы деформация ε ҳәм жылжыў модули μ арқалы төмендеги формуланың жәрдеминде табыуға болады:

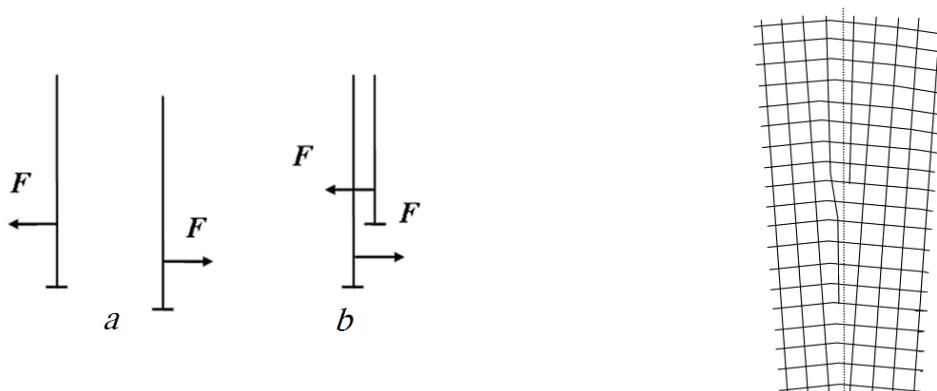
$$w = \mu \varepsilon^2 / 2 = (\mu/2)(b / 2\pi r)^2 \quad (2.14)$$

Егер бул формуланы ҳәр бир цилиндрдин көлемине көбейтсек ҳәм r дин мүмкин болған мәнислери бойынша интегралласақ, онда узынлығы l ге тең винтлик дислокацияның энергиясын баҳалау мүмкин.

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

Бул формулада r_0 ди шама менен пәнжеренин дәүирине тең деп есаплауға болады. R_0 болса дислокациялар арасындағы орташа қашықтық. Оның мәниси пәнжере дәүириниң мәнисинен шама менен 100-200 есе үлкен. (2.15)-формулада үлкен дәллік талап етилмейди. Себеби R_0/r_0 қатнасы логарифм ишинде тур ҳәм биз нәтийжени тек энергияның мәнисин баҳалау ушын исследик. Жоқарыдағы (2.15)-формулада дислокацияның «ядросының» энергиясы есапқа алынбаған. «Ядро» да болса кристаллық пәнжере құшлы майысқан. Оның энергиясын есаплау ушын санлы усыллар талап етиледи. (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 ҳәм $R_0 = 200 \cdot 10^{-10}$ м мәнислерин қойып узынлық бирлигине сәйкес келетуғын винтлик дислокацияның энергиясының $\frac{U}{l} = 4 \cdot 10^{-9}$ Дж/м, ал ҳәр бир атом арасындағы қашықтық ушын (яғни ҳәр бир атом ушын) $\frac{U}{b} = 10^{-18}$ Дж/атом шамасына тең болатуғынлығын көремиз. Бул үлкен шама ҳәм атомлардың жылдымдық тербелислериниң энергиясынан әдеуир үлкен. Сонықтан дислокация жылдымдық қозғалысларының тәсиринде пайда бола алмайды. Дислокацияларды пайда етиў ушын тең салмақты емес процесслер (мысалы кристалларды деформациялау) керек.

Дислокациялардың бир бири менен тәсирлесиүи. Дислокация деформациялар майданын пайда етеди ҳәм усы майдан арқалы басқа дислокацияларға тәсир етеди. Мысалы 2.16 (а) сүйретте көрсетилген дислокациялар бир бирин ийтериўи, ал 2.16 (б) сүйреттеги бир бири менен тартысыўы керек. Дислокациялардың узынлық бирлигиниң механикалық кернеўлер майданы, басқа дислокациялар менен тәсир етисиў күшинин мәнисин есаплау мүмкин. Бирақ бул есаплаулар әдеуир қурамалы. Сонықтан биз оларды талламаймыз.



2.16-сүйрет.

Бир бири менен ийтерисетуғын (а) ҳәм тартысадатуғын (б) жағдайлардағы еки шетлик дислокацияның жайласыўы.

2.17-сүйрет.

Кристаллық пәнжерелери азмаз бурылған еки монокристал арасындағы бөлип турыұшы беттеги (пунктир сызық) дислокациялар.

2.16 (б) ҳәм 2.17-сүйретлерде келтирилген дислокациялар монокристаллардың өсиў процессинде пайда болатуғын кристаллық пәнжерелери бир бириңен азмаз бурылған еки монокристалды бир бириңен айырып туратуғын беттеге пайда болады. Есаплаўлар дислокациялар тап усындей болып жайласқанда еки кристаллук арасындағы беттингө бир бирлигіне сәйкес келетуғын энергияның минимум мәнисине тен болатуғының көрсетеди.

Дислокациялар менен ноқатлық дефектлердин бир бири менен тәсирлесиўи. Дислокация, әсиресе шетлик дислокация кристаллық пәнжерениң күшли қысылған ҳәм созылған участкаларын пайда етеди. (2.18-сүйретті қараңыз). Созылған орынларда алмастырышы ири қосымта атомлардың, ал қысылған орынларда алмастырышы майдада атомлардың жайласыўы энергиялық жақтан утымлы. Түйинлер арасына ендирілген ири атомлардың созылған орынларда, ал қысылған орынларда түйинлер арасына ендирілген майдада атомлардың жайласыўы утымлы. усындей жағдайда дислокациялардың этирапында қосымта атомлардың жыйнағы пайда болып, оны «дислокацияның постыны» деп атайды. Бул дислокациялар этирапындағы локаллық деформацияларды ҳәм дислокацияның энергиясын кемейтеди. Пластикалық деформацияда «постыны» бар дислокацияларды жылыштырыу «постыны» жоқ дислокацияларды жылыштырғаннан қызынырақ болады. Себеби бириңи 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 беккемлік теориясындағы «ағыўтиси» («зуб текучести») биз айтқан жағдайды анық түсіндіреди.

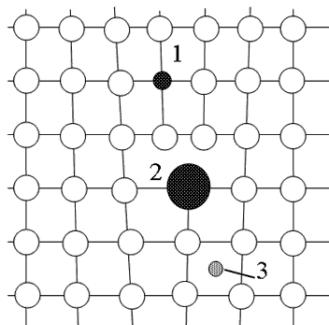


Рис. 2.18.

Ноқатлық дефектлердин дислокациялардың жанында жайласыўы энергиялық жақтан утымлы: алмастырышы қосымтасы болған киширек атом (1), алмастырышы қосымтасы болған ирирек атом (2), ендирілген атом (3).

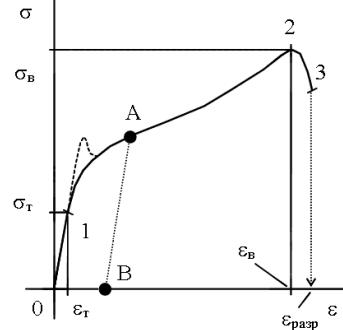


Рис. 2.19.

Үлгіни созғанда σ кернеўининң салыстырмалы узарыў ε шамасынан ғәрзелиги.

Дислокациялардың қасындағы созылған кристаллық пәнжереге ииे участкалар диффузияның өтийи ушын жениллестірілген каналлар болып табылады. Дислокациялардың тығыздығы жоқары болған деформацияланған материалларда деформацияланбаған материалларға салыстырғанда диффузияның тезирек жүргетуғының белгилі.

Ноқатлық дефектлер «артық» ярым тегисликтиң шегарасына жетип көп жағдайларда жоғалады (2.18-сүйретті қараңыз). Усының салдарынан бул «ярым тегисликтиң» шетининң

формалары өзгереди. Дислокациялар қозғалғанда ноқатлық дефектлерди, соның ишинде вакансияларды пайда етеди деп есаптайтын. Бул вакансиялар артық тегисликтиң шетлеринде пайда болады. Бундай процесслерде дислокация сыйығы жаңа орынға жылышады («еңбеклейди»). Дислокациялардың «еңбеклеүи» (переползание) деп аталатуғын бундай процесс жийи ушырасады.

Кристаллардың пластикликтік (эластик) деформациясы ҳәм дислокациялар. Деталға берилген өлшемлерди ҳәм форманы бериү ушын көп материалдарды технологиялық қайта ислеү процессинде қайтымсыз түрде деформациялайды. Қайтымсыз деформациялар Гук нызамы орынланбайтуғын жағдайларда бақланады. Бул жағдайларда деталлардағы кернеўлердин мәнислери салыстырмалы деформациядан қурамалы түрдеги сыйықты емес ғәрзеликке ийе.

Поликристаллық ұлгини созыў процессин қараймыз. Ұлгилер әдетте узын цилиндр формасына ийе болады. Оларды бекитиү ушын ушларын жуқартады. Бул процесс төмөндегидей түрде харakterленеди:

- а) механикалық кернеў σ менен (тәсир ететуғын күштин ұлгинин кесе-кесиминиң майданына қатнасы), а,
- б) ұлгинин салыстырмалы узайыўы ε менен:

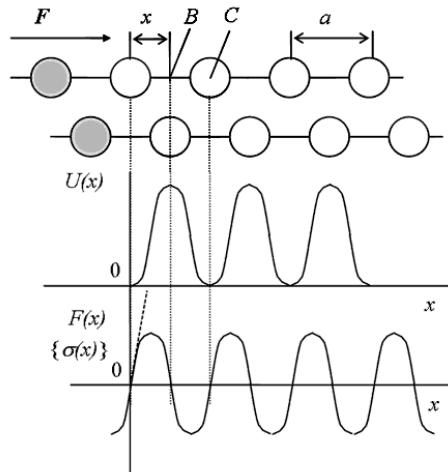
$$\varepsilon = \frac{\Delta l}{l} = \frac{l - l_0}{l_0}. \quad (2.16)$$

Бул аңлатпада l арқалы σ кернеўи тәсир еткендеги ұлгинин узынлығы, l_0 арқалы ұлгинин дәслепки узынлығы белгилендеген. 2.19-сүйретте ұлгини созғанда механикалық кернеў σ менен салыстырмалы узайыў ε шамасы арасындағы байланыс көрсетилген. Иймеклик өзине тән үш участкаға ийе. 0-1 участкасы серпимли қайтымлы деформацияға сәйкес келеди. Бул участкада Гук нызамы орынланады. 1-2 участкасы қайтымлы емес пластикалық деформацияға тийисли; егер А ноқатында деформациялауды тоқтатса (буның ушын $\sigma = 0$ етиў керек), онда ұлгинин халы В ноқатына сәйкес келеди. 2-3 участкасы ұлгинин қыйрауына сәйкес келеди. 1 ноқатының жаңында иймеклик көп жағдайларда «ағыў тиси» не ийе болады (2.19-сүйреттеги пункттир сыйық). Оның пайда болыўы дислокациялардың этирапында топарласқан ноқатлық дефектлер менен байланыслы. Бундай орынларда дислокацияларды орнынан жылжытыў қыйынырақ. Себеби жаңа орында оның энергиясының жоқарылаўға керек.

1 ноқатына сәйкес келиўши σ шамасын аққышлық шеги σ_t деп атайды, ал 2 ноқатына сәйкес келиўши кернеўди беккемлик шеги деп атап, оны σ_B арқалы белгилейди.

Дислокацияларды есапқа алмай кристаллық денелердин беккемлик шегин есапласа (беккемликтің теориялық шеги) ҳақыйқый мәнислеринен 100-1000 есе үлкен болған шамалар алынады. Биз моделлик кристаллық пәнжере ушын жылжыў деформациясындағы аққышлық шегин есаплауға тырысамыз.

Экспериментлер пластикалық деформацияның жылжыў тегисликтери деп аталатуғын тегисликтер бойынша жүретуғынлығын көрсетеди. Бундай тегисликтер атомлар тығыз жайласқан тегисликтер болып табылады. Бундай тегисликке мысал 2.20-сүйретте келтирилген. Егер жоқарыдағы тегисликке тангенсиаллық күш түсирилсе атомлар орынларынан жылжыйды ҳәм шамасы түсирилген күштиң шамасына тең серпимлилік күши пайда болады. Деформация энергиясының мәниси усы күштин мәниси менен байланыслы. Деформацияның энергиясы жоқарыдағы тегисликтеги атомлары төмөнгі тегисликтеги атомлардың үстинде жайласқанға шекем (яғни 2.20-сүйреттеги В ноқатында) жоқарылайды. Буннан кейинги жылышыўларда атомларға С аүхалына «түсій» утымлы болады. Солай етип жоқарыда жайласқан тегислик жаңа орынға жылышып өте алады. Егер пластикалық деформациядан кейин монокристаллардың бетин абайлас тегислесе сондай жылышыўлардың излерин «баспалдақтар» түринде көриўге болады.



2.20-сүйрет. Атомлардың жоқарыда жайласқан тегислигиниң төменде жайласқан тегислигиге салыстырғандағы жылжыўының есабынан жүретуғын деформацияның схемасы.

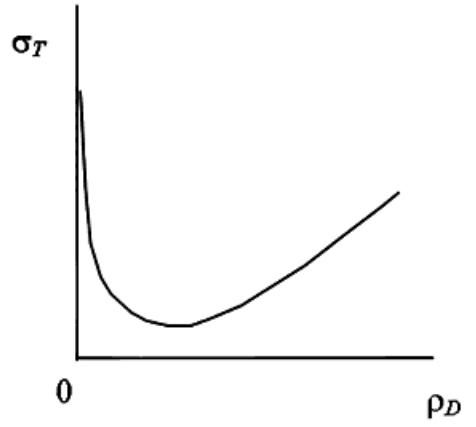
Жоқарғы тегисликти төменги тегисликке салыстырғанда жылыстырыў ушын зәрүрли болған күштин мәнисин баҳалаўға болады. (2.20-сүйретті қараңыз). Буның ушын механикалық кернеў ҳәм оның менен байланыслы болған потенциал энергиядан пайдаланамыз. 2.20-сүйретте усы күш ҳәм оның менен байланыслы потенциаллық энергияның x координатасынан ғәрзелигі көлтирилген. $\sigma_c(x)$ ғәрзелигин дәйири a ға ҳәм амплитудасы $\mu a / (2\pi d)$ болған синусоида менен тәриллеўге болады. Бул аңлатпада d арқалы тегисликтер арасындағы қашықтық белгиленген. Бул синусоиданың амплитудасының мәнисин биз есапладық. Буның ушын x тың киши мәнислеринде синусоиданың қыялышының тангенси $\mu \epsilon = \mu(\frac{x}{d})$ шамасына тең болыўы кереклигин пайдаландық (2.20-сүйретті 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 жәрдеминде орынланған есаплаў $\sigma_c(x)$ ушын тәжирийбеде алынған мәнисинен жүзлеген - он мындағы есе үлкен мәнис береди. Бундай күшли айырманың себеби мынадан ибарат: жоқарыдағы тегисликте жайласқан атомлардың барлығының төменги тегисликте жайласқан атомларға салыстырғанда бир ўақытта жылысады деп есапладық. Бул дұрыс емес. Себеби жоқарыдағы ярым тегисликтиң 1 атомлар арасындағы қашықтыққа жылжыўы дислокацияның жылжыўы менен де әмелге асады (бул 2.9-сүйретте көрсетилген). Бундай жылжыў ушын әдеўир киши күш керек болады. Себеби енди жылжыўда барлық атомлық байланыслардың бир ўақыттағы үзилиўи орын алмайды, ал дислокацияның қасындағы байланыслар ғана үзиледи.

Пластикалық деформацияның дислокациялық механизми тәжирийбелерде бақланатуғын ағыў шегиниң мәнислерин (σ_T ҳәм σ_B шамаларын), 2.19-сүйреттеги 1-2 участкасындағы $\sigma(\epsilon)$ ғәрзелигиниң өсиўин де түсіндіре алады. Деформацияда дәслеп әззи беркиген дислокациялар, ал кейин күшлирек беркиген дислокациялар қозғала баслайды. Соның менен бирге деформацияның барысында дислокациялардың саны ҳәм басқа да дефекттер көбейеди.

Материалдың ағыў шеги усы материалдағы дислокациялардың тығызлығынан жүдә күшли ғәрзели. 2.21-сүйретте усындағы ғәрзелик көрсетилген. Дислокациялардың



2.21-сүйрет. Аққышлық шегиниң дислокациялардың тығызлығынан схема түриндеги ғәрзелиги.

тығызлығы (ρ_D) киши болғанда ағыў шеги σ_T шамасының үлкен болатуғынлығы, ал ρ_D ның шамасы үлкен болғанда ағыў шегинин киши болатуғынлығы көринип тур. Үлкен ρ_D шамасында σ_T тың үлкейиүин дислокациялардың бир бири менен ҳәм кристаллық пәнжерениң басқа да дефектлери менен тәсир етисиүинин нәтийжеси болып табылады.

Материаллардың беккемлигин жоқарылатыў жоллары. Ҳәзирги ўақытлары беккемлик шегин $0,01\mu$ ге шекем жеткериүге мүмкиншилик беретуғын материаллардың беккемлигин жоқарылататуғын көп санлы усыллар бар. Олардың көпшилиги дислокациялардың қозғалыўына мүмкиншилик бермейтуғын қосымша тоқынлықтарды киргизиў менен байланыслы. Усындағы тоқынлықтарға мысал ретинде кристаллық пәнжерениң тәмендегидей дефектлерин көрсетемиз:

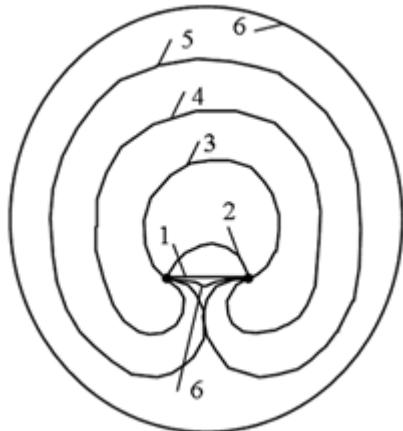
- 1) басқа фазаның айрылып шығыўы (бул ҳақында тәмениректе гәп етиледи);
- 2) ноқатлық дефектлер ҳәм олардың топарлары (дара жағдайда жоқарыда гәп етилген «дислокациялар постыны»);
- 3) дислокациялардың қозғалыўын қыйынластыратуғын дислокациялардың өзлеринин көп болыўы (дислокациялардың бир бири менен тәсирлесиўлери олардың қозғалыўына кесент береди);
- 4) атомлардың орналасыўындағы жақыннан тәртиптиң орын алыўы (бул ҳақында тәменде кенирек гәп етемиз).

Қөпшиликтің құймаларда жақыннан тәртип деп аталатуғын құбылыс бақланады. Бундай тәртипте бир сорттағы атом өзин басқа сорттағы атомлардың қоршап турыўына тырысады. Усындағы жоллар менен құйманың киши энергияға иие болыўы тәмийинленеди. дислокациялардың қозғалыўы барысында атомлар арасындағы энергиялық жақтан утымлы байланыслар үзиледи ҳәм энергиялық жақтан утымлы емес байланыслар қәлиплеседи. Буның ушын үлкен энергия талап етиледи, ал бул өз гезегинде дислокацияларды жылжытыў ушын зәрүрли болған құшлердин өсиүине, ақырғы есапта кристаллық материалдың беккемлигинин артыўына алып келеди.

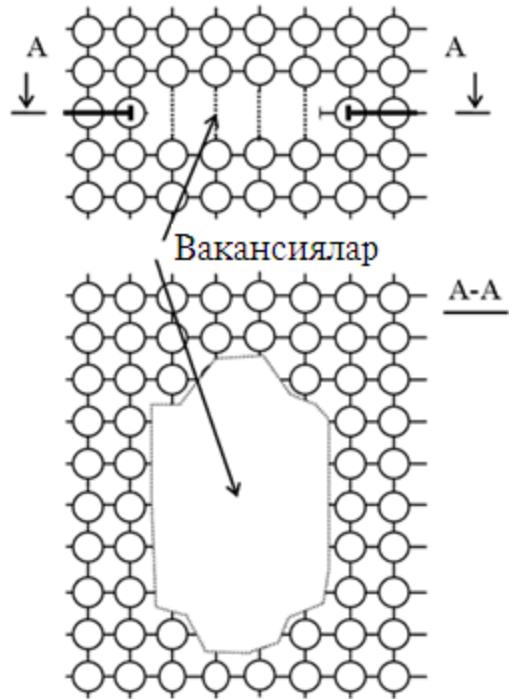
Жоқарыда келтирилген усыллар беккемликті әдеўир жоқарылататуғын болса да, әдетте материаллардың пластиклигин күшли тәменледети.

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

Дислокациялардың пайда болыўы. Жоқарыда айтылып өтилгениндей, дислокациялар тийкарынан кристаллардың пластиклик деформациясының нәтийжесинде пайда болады. Пластикалық деформациядағы дислокациялардың пайда болыў источниклеринин бириң Франк-Рид источниги (дереги) деп атайды. Ол 2.22-суўретте көрсетилген. Мейли дислокация 1 А ҳәм В ноқатларында бекитилген болсын. Бундай ноқатлардың орнын басқа өлшемлерге иие атомлардың жыйнақлары, басқа фаза областлары ҳәм басқалар болыўы мүмкін. Сырттан механикалық кернеў түсирилгенде дислокация жылжыйды ҳәм 2, 3, 4 аўхалларынан избе-из етеди. Ең ақырында 5-аўхалда дислокацияның шеп ҳәм он тәреплердеги ярым илмеклері бир бири менен тийиседи, дәңгелек формаға иие (6) дислокациялық илмекти пайда етеди. Бул илмек болса механикалық кернеўдин тәсиринде 1 формасына келеди. Буннан кейин процесс қайталанады ҳәм келеси дислокация пайда болады.



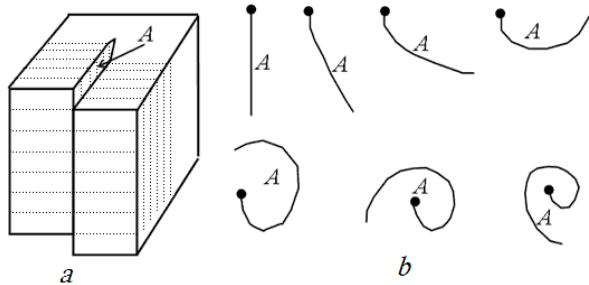
2.22-сүйрет.
Дислокациялардың Франк-Рид источниги
(дереги)



2.23-сүйрет. Аралас типтеги дислокацияларға эквивалент болған түйік сзығ түріндеги вакансиялардың диск тәризли жыйнағы (топарласыўы).

Кристалларды салқынлатқанда вакансиялардың диск тәризли жыйнақлары пайда болғанда да түйікленған дислокациялар пайда болады. Бул жағдай 2.23-сүйретте көлтирилген.

Дислокациялар хэм кристаллардың өсиўи. Винтлик дислокациялары кристаллардың (балқыған сұйық фазадан, еритпеден хэм пуўлардан) өсиўин женииллестириди. Себеби винтлик дислокацияға байланыслы кристалдың бетинде пайда болған текше 2.24-сүйретте А арқалы көрсетилген кристалдың бетине атомлардың келип отырыўын женииллестириди. Текшениң астында көп санлы байланыслар бар. Соныңтан атомлардың текшениң астына келип кристалға биригиүи тегис бетке келип кристал менен биригиүине қарағанда әдеуир утымлы.



2.24-сүйрет.
Винтлик дислокацияның кристалдың өсиўин женииллестириюи (а) хэм А текшесинин астындағы областқа атомлар келип кристалға қосылғанда дислокацияның формасының өзгериүинин избе-излиги (б).

Жеткиликли дәрежеде жетилискең кристаллардың бетинде сондай текшелер жийи бақланады.

Мәселе.

Вакансиялардың туýры сзығына хэм вакансиялардың бир қатlamдағы диск тәризли топарына сәйкес келетуғын дислокациялар жубының сүйретин салыңыз.

Бетлик хэм қолемлиқ дефекттер

Бетлик ҳәм көлемлик дефектлер көп санлы атомлардан туратуғын салыстырмалы ири дефектлер болып табылады. Бетлик дефектлер жағдайында атомлардың дәүирли жайласыўлары құшлы бузылған областлар (яғни бетлик дефектлер) қалыңлығы 1-2 атомлық тегисликлер арасындағы қашықтыққа тең кристалдың бетине түсирилген нормалға перпендикуляр бағытланған базы бир бет формасына ийе болады. Көлемлик дефектлер жағдайында атомлардың жайласыўындағы дәүирлилік 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 бетинин қасында атомлардың дәүирли жайласыўы белгили бир дәрежеде бузылатуғынлығы белгили. Усының салдарынан бетлик қатlam кернеўлик ҳалда турады, нәтийжеде бет базы бир энергияға ийе болады (суйықтықтың бетиниң бет керими энергиясына ийе болатуғынлығындай). Қәлеген система сыйқы кристалдың да энергияның минимумына қарай умтылыўы кристалдың бетиниң минималласыўына алып келеди. Тап сол себеплерге байланыслы көпшилилк жағдайларда кристаллар дөңес көп мүйешликлер формасына ийе болады.

Бирақ бетлик дефектлер кристаллардың ишинде де болады. Кристаллардың көпшилиги бир бири менен байланыспаған бир неше кристаллизацияланыў орайында есе баслайды. Соныңтан олар кристаллық пәнжерелериниң ориентациялары бир бирине жақын дәнешелерден турады. Бул дәнешелердин арасындағы шегарада атомлардың жайласыўларындағы дәүирлилік сөзсиз бузылады (2.17-сүрет). Бундай шегараларды киши мүйешли шегаралар деп атайды.

Шегаралардың басқа да типи бар. Бул поликристаллық материаллардағы дәнешелер арасындағы шегаралар болып табылады. Бул жағдайда қоңсылас дәнешелердин кристаллық пәнжерелери арасындағы разориентировка ықтыйрылған мәнислерди қабыл етеди.

Майысқан кристаллық пәнжереге ийе дәнешелер арасындағы шегарада механикалық кернеўлер топланған болады. Соныңтан қосымша механикалық кернеўлер түсирилгенде сол областларда кристаллардың бөлинійи, сыныўы 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 көрсетійгө болады. Усының салдарынан кристаллардан соғылған буйымлардың коррозияға шыдамлығы төменлейді. Реакциялардың өнимлери (мысалы оксидлер, нитридлер ҳәм тағы басқалар) дәнешелер арасындағы шегараларда кристаллық пәнжерени және де майыстырады. Соныңтан дәнешелер арасындағы шегаралар бойлап кристалдың сыныў итималлығы ҳәм оның мортлығы жоқарылайды.

Жоқарыда көріп өтилген бетлик дефектлердин кристаллардың механикалық ҳәм коррозиялық қәсийетине унамсыз тәсирлерин кемейтиўдин көп санлы усыллары бар.

Бириңи усыл ең көп тарқалған усыллардың қатарына киребі. Бул кристалларды балқыў температурасынан шама менен 2 есе төмен температурада услап турыў. Бундай жағдайда атомлардың миграциясы орын алады ҳәм дәнешелер арасындағы шегаралардағы кернеўлердин мәниси кемейеди. Усының ақыбетинде шегара бойлап диффузияның өтийі күйинласады ҳәм кристалдың коррозиялық беккемлиги артады.

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

Дәнешелер арасындағы шегаралар ҳәм басқа да дефектлер кристаллық денелердин жыллылық өткізгішлігіне ҳәм электр қарсылығына тәсир етеди. Себеби бундай

дефектлерде жыллылық энергиясын тасыўшы фононлардың, энергия менен заряд тасыўшы электронлардың қосымша шашыраўы орын алады. Бетлик дефектлер эсиресе төменги температураарда жыллылық өткізгишлик пенен электр өткізгишликке үлкен тәсир көрсетеди. Бундай температураарда фотонлар менен электронлардың еркин жүриў жолының узынлығы кристаллық дәнешелердин өлшемлери менен барабар болады. Бул ҳақында төменде толығырақ гәп етиледи.

Көлемлик дефектлер. Көлемлик дефектлерге киши (микро) көлемди ийелейтуғын басқа кристаллық фазалар, геўеклер хәм жарықтар (санлаклар) киреди. Геўеклер менен жарықтардың болыўы материалларға құшлы түрде унамсыз тәсириң тийгизеди. Себеби олар кристалдың барлық физикалық қәсийетлерин өзгертереди (майыстырады), буйымлардың беккемлиги менен пластиклигин әдеўир төменлетеди.

Киши (микро) көлемди ийелейтуғын басқа кристаллық фазалар материаллардың беккемлигин жоқарылатыў ушын кең түрде қолланылады.

Кристаллардың жыллылық қәсийетлері

Кристалл белгили бир массага ийе тәртипли түрде жайласқан атомлардың системасы болып табылады. Атомлар арасында белгили бир қашықтықтарда бир бириң тенгерип туратуғын тартысыў ҳәм ийтерисиў құшлери орын алады. Атом тең салмақтың ҳалынан айысса оны өзиниң тең салмақтың ҳалына қайтарып алып келетуғын құш пайда болады. Бул құштың шамасы атомның типинен, оның әтирапындағы атомлардан ҳәм кристалдағы атомның айысыў бағыты менен қанша шамага айысқанлығынан ғәрэзли. Тербелислердин 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 байланыслы емес. Атомлардың қозғалыслары усы нормал тербелислердин суперпозициясы сыпатында табылады.

Кристаллардың ҳәм молекулалардың жыллылық қәсийетлериниң классикалық теориясында да, квант теориясында да кристалды ω_i индивидуаллық меншикли жийилигине ийе бир бириңен ғәрэзсиз осцилляторлардың жыйнағы деп қарайды.

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

Кристаллардың жыллылық қәсийетлерин Эйнштейн ҳәм Дебай тәрепинен ислеп шығылған кристаллардың жыллылық сыйымлығының квант теориясы әдеўир жоқары дәллікте тәриплейди. Бул кванттық теорияның тийкарында жыллылық нурланыўы теориясындағы электромагнит тербелислердин энергиясының квантланғанлығы сыйқыл атомлардың тербелис энергиясының квантланыўы ҳақындағы болжай жатады.

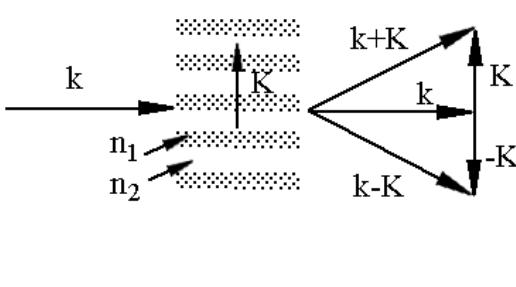
Квант теориясына сәйкес ҳәр бир нормал тербелистиң энергиясы жеке осциллятордың энергиясы сыйқыл квантланады. $\hbar\omega$ энергиясын осциллятордың тербелислериниң энергиясының квантты (порциясы) деп есаптайтын. Ал кванттың өзин фонон деп атау, оны энергиясы $E = \hbar\omega$, импульси $p = \hbar K$ шамасына тең белекше деп қарау қабыл етилген. Нормал тербелислердин бир бириңен ғәрэзсизлигин пайдаланып оны Бозе газы теориясын тәриплеў ушын қолланады. Ал Бозе газы теориясы фононларды Бозе бөлекшелери деп қарайды. Биз төменде кристалдың тербелислериниң квант теориясының тәжирийбелерде бақланып жүрген көплеген құбылысларды ҳәм нызамлықтарды, солардың ишинде

жыллылық сыйымлығы менен жыллылық өткізгішликтиң температурадан ғәрзелигин дұрыс түсіндеретуғының көремиз. Бул теория фононның теория деп те аталады ҳәм ол заттар тәрепинен нурлар менен бөлекшелердин шашыратылығын, энергия менен зарядтың алып бериліүине байланыслы процесслерди жақсы түсіндіре алады. Көпшиликтік мәселелерди шешійде фотонлардың характеристикалары билиў жүдә әхмийетли. Ал фотонлардың характеристикаларын экспериментлерде үйрениүге болады.

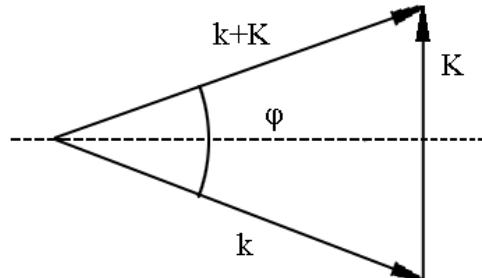
Фононларды экспериментте үйрениү усыллары

Бир фононның энергиясы менен импульсин анықлауға мүмкіншілік беретуғын фононларды үйрениү усылларын қарап өтемиз. Бул усыллар фононның кристалға келип түсіүши бөлекшелер менен (нейтронлар, электронлар, фононлар ямаса фотонлар) тәсир етисиүине тийкарланған. Бундай тәжирийбелерде кристалға келип түсіүши ҳәм кристалда шашыраған бөлекшелердин энергиялары менен импульслары өлшенеди. Буннан кейин сақланыў нызамлары тийкарында (энергия менен импульстің сақланыў нызамлары тийкарында) фононлардың энергиялары менен импульслары бир бириңен ғәрзесиз анықланады. Фононның фотон менен тәсирлесіүн қарап өткен аңсатырақ.

Фотонның деформацияланған кристаллық пәнжере менен тәсир етисиүи. Мейли энергиясы $E = \hbar\omega$ болған фотон сыныў көрсеткиши n болған кристал менен тәсир етисетуғын болсын. Егер кристалда энергиясы $E = \hbar\Omega$, импульси $p = \hbar K$ болған фонон болатуғын болса, онда фотон менен байланыслы болған серпимли толқын кристалдың бир областын қысады, ал екинши областын созады. Бул өз гезегинде кристалдың хәр қылышы областларында сыныў көрсеткиши n ниң өзгериүине алып келеди. Нәтижеде дифракциялық пәнжереге усаған жағдай пайда болады (3.1-сүйретті қараңыз). Бул дифракциялық пәнжереге келип түскен фотонлар дифракцияға ушырайды. 3.1-сүйретте фотонлардың тийкары шашырамаған толқыны менен бир қатарда минимум еки дифракциялық толқынның пайда болатуғының көринип түр. Фотонның қозғалыс бағытының өзгериүи кристалдың тербелиүине сәйкес келетуғын фононның жутылышы ямаса пайда етилийи (туұлылышы) менен байланыслы деп есаплау қабыл етілген. Ал фононлар болса кристалдың сыныў көрсеткиши n ниң модуляциясын жүзеге келтиреди деп есаплаймыз



3.1-сүйрет.
Фотонның дәйирилі түрде
деформацияланған кристаллық пәнжере
менен тәсир етисиүинің схемасы.



3.2-сүйрет.
Фотонлар менен фононлардың бир бири
менен тәсирлескендегі векторлары
арасындағы қатнаслар.

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

менен импульси басқа мәнислерге ийе болады. Оларды сәйкес $E' = \hbar\omega'$ ҳәм $p' = \hbar K'$ арқалы белгилеймиз. Бул шамалар төмендеги қатнаслар менен байланысқан:

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

Бул аңлатпа энергия менен импульстің сақланыў нызамларын аңлатады.

Фононлардың ҳәм фотонлардың тезликлери ҳәр қыйлы болғанлықтан бирдей $k = K$ ушын олардың энергиялары менен импульслері де ҳәр қыйлы болады. Фононлардың тезлигин v , ал фотонлардың тезлигин c арқалы белгилеймиз. Ҳақыйкатында да $\omega = ck$ ҳәм $\Omega = vK$. $c \gg v$ болғанлықтан (3.1) ге сәйкес $\omega = \omega'$ ҳәм $k = k'$. Бул фотон менен фонон тәсир етискенде фотонның жийилиги менен импульсиниң сезилерліктең өзгермейтуғынлығын билдиреди. 3.2-сүретке сәйкес

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

Енди φ мүйеши менен жұтылған (туұылған) фононның жийилиги менен фотонның жийилигин байланыстыратуғын формуланы алыў мүмкін (бул формула Комптон формуласына сәйкес келеди).

$$\Omega = vK \approx (2n\alpha\omega/c) \sin(\varphi/2). \quad (3.3)$$

v/c шамасының киши екенлиги Ω/ω шамасының киши болатуғынлығына алып келеди. Нәтийжеде фотонлар фононларда шашырағанда фотонның жийилигиниң салыстырмалы өзгериўи болған $\Delta\omega/\omega$ шамасы да жұдә киши болып, оны экспериментте бақлаудың мүмкіншилиги болмайды.

Жақтылықтың фононлардағы шашыраўы. Жақтылықтың фононлардағы шашыраўын изертлеў ушын жоқары монохромат нурлардың жицишке дәстеси қолланылады. Әдетте ҳәр қыйлы мүйешлерде шашыраған жақтылықтың спектри регистрацияланады. Усындај жоллар менен k ҳәм k' векторларының бағытлары анықланады. Шашыраған жақтылық нурларының спектринде жийилиги ω шамасына тең жоқары интенсивликке ийе бас сызық пенен бир қатарда жийилик бойынша $\pm \Omega$ шамасына жылысқан фононның жұтылығына ҳәм туұылығына сәйкес келетуғын сызықтар да орын алады. Солай етип бир бириңен ғәрэзсиз k ҳәм k' , ω ҳәм ω' шамалары арасындағы байланыслар орнатылады, нәтийжеде K және Ω векторлары, олар арасындағы байланыс анықланады. Жақтылық толқынлары ушын k ҳәм k' шамалары киши болғанлықтан усындај усылдың жәрдеминде киши K ға тең (узын толқын узынлығына ийе) фононларды изертлеў мүмкіншилиги туұылады.

Рентген нурларының фононлардағы шашыраўы. Бул усыл менен тек киши толқын узынлығына ийе фононларды үйрениүге болады. Себеби рентген нурлары ушын k ның шамасы Бриллюэн зонасының шамасына барабар. Тәжирийбениң схемасы жақтылық толқынларының фононларда шашыраўын изертлеўдің схемасындағы. Монохромат рентген нурларының жицишке дәстеси пайдаланылады. Белгилі бир мүйешке (мысалы φ мүйешине) шашыраған рентген толқынларының спектри регистрацияланады. Усындај жоллар менен k ҳәм k' векторларының бағытлары анықланады. Шашыраған рентген нурларының спектринде жийилиги ω шамасына тең жоқары интенсивликке ийе бас сызық пенен бир қатарда жийилик бойынша $\pm \Omega$ шамасына жылысқан фононның жұтылығына ҳәм туұылығына сәйкес келетуғын тийкарғы сызыққа дым жақын жайласқан әззи сызықтар пайда болады. Көпшилік жағдайларда спектрдеги қосымша сызықтар тийкарғы сызықтар менен биригип кеткен болады. Усылған байланыслы сызықтардың жийилик бойынша аўысыўы киши болғанлықтан шашыраған рентген толқынларының

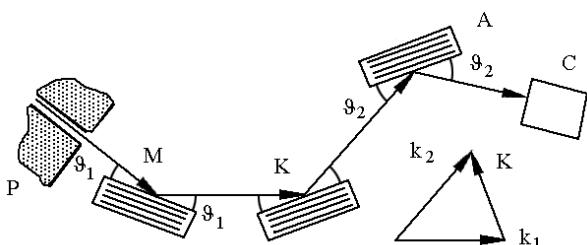
жийилигиниң өзгериүин өлшеў оғада қыйын болған эксперименталлық мәселелер көтөрүлгөнде киреби. Нейтронлардың өзгериүүнүң табылады.

Нейтронлардың фононлардағы шашырауы. Нейтронлардың фононлардағы шашырауы усылы ҳәзирги ўақытлардағы фононларды үйренийдиң ең көп маглыўматларды беретугын усылы болып табылады. Бундай жағдайда нейтронның толқын векторы менен энергиясының өзгерислерин дәл өлшеў мүмкіншилиги пайдаланылады. Нейтронлар шашырағанда төмөндегидей қатнаслар орынлана болады:

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

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

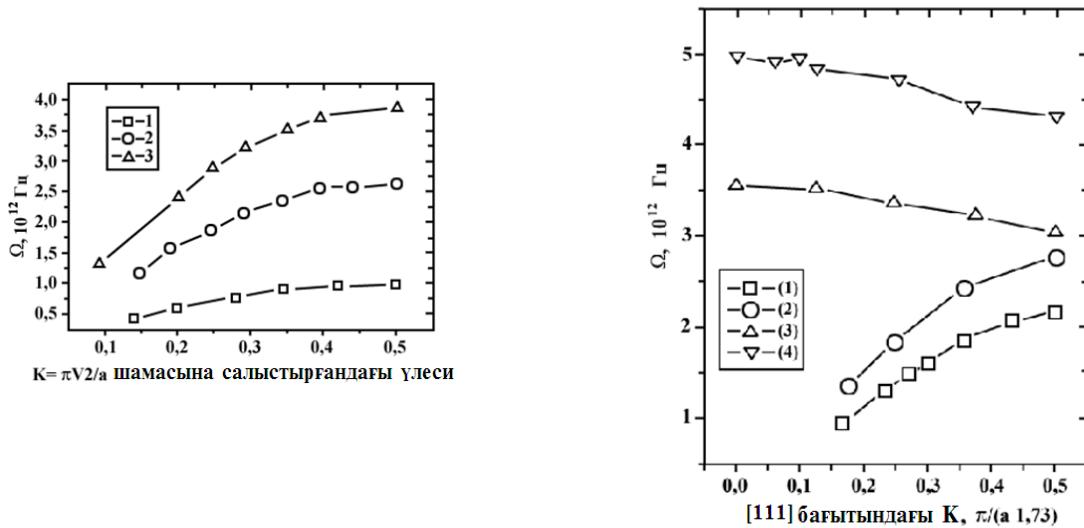
Эксперимент схемасы 3.3-сүйретте көтөрүлгөн. Р ядролық реактордан шықкан жылдылық нейтронлардың дәстеси М монохроматорына келип түседи (монохроматор жетилискең, яғни дефектлери жоқ монокристалдан соғылады). Кристалдан Вульф-Брэгг шәртине сәйкес белгилі бир толқын узынлығына ийе нейтронлар интенсивли түрде шашырайды (яғни дифракцияға ушырайды). Усындаған жоллар менен нейтронлар дәстесин монохроматластырыў ҳәм k' векторының бағытын бериў эмелге 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 шағылыштырады. Анализаторды пайдаланыў шашыраған нейтронлардың k' векторының модули бойынша (энергиясы бойынша да) спектрин алғыуға мүмкіншилик береди ҳәм усындаған жоллар менен шашыраған нейтронлардың энергиялары өлшенеди. Буннан кейин (3.4)-аңлатпа бойынша фононның энергиясы Ω менен импульси K бир бириңен ғәрэзсиз түрде анықланады. Фононның энергиясы Ω шамасының импульси K арасындағы ғәрэзлик фононның дисперсиялық ғәрэзлигі деп атайды.



3.3-сүйрет.

Нейтронлар менен тәсир етисиүди пайдаланып фононның энергиясы менен импульсин эксперименталлық анықлаудың схемасы.

Нейтронларды пайдаланғанда көп информация алынатуғын болса да жүдә көп ўақыт ҳәм қуұтталы ядролық реактордың пайдаланылыуы талап етиледи. Сонықтан нейтронлардың фононлардағы шашырауы қуұтталы ядролық реакторы бар илимий орайлар да ғана изертлениледи. Усындаған усылдың жәрдеминде алынған жийи ушырасатуғын дисперсиялық ғәрэзлик 3.4-сүйретте көтөрүлгөн.



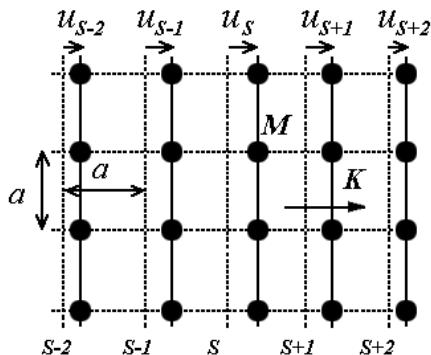
3.4-сүйрет. Нейтронлардың фононларда шашырауын үйретиүде алынған фотонлардың дисперсиялық ғәрэзлиги.

Фононлық спектрди үйрениү ушын басқа да бөлекшелерди (мысалы электронларды) пайдаланыў мүмкін. Бирақ бундай экспериментлерди өткериў қурамалы хәм үлкен ғәрежетлерди талап етеди. Мысалы электронларды пайдаланыў ушын үлкен камералардың ишинде жүдә жоқары вакуумды пайда етиў керек болады. Фононлық спектрлерди басқа фононларды (мысалы ультрасости) пайдаланып үйрениў мүмкін. Бирақ бул усыллардың дәллигинин оғада төмен екенлиги белгилі.

Кристаллардағы атомлардың тербелислери

Енди бизлер фононлар ушын дисперсиялық ғәрэзлики теориялық жоллар менен анықлаў мәселеси менен шуғылланамыз. Фононлар ушын дисперсиялық ғәрэзлик деп олардың жийиликтериниң толқын векторларына ғәрэзлигин айтамыз. Улыўма жағдайлар ушын бул мәселени шешиў жүдә қыйын. Сонлықтан мәселени әдетте санлы усыллар жәрдемінде шешеди.

Бир өлшемли жағдай. Эпиүайылық ушын дәүири a шамасына тең примитивлик элементар қутышаға ииे кублық кристалдағы атомлардың тербелислерин үйренемиз. Усындағы кристалдағы [100] бағытын ҳәм усы бағытта тарқалатуғын тегис бойлық толқынды қарап шығамыз. Қөлденең толқынлардың да тап усындағы жоллар менен үйренилетуғынлығын атап өтемиз. (3.5-сүйретті қараңыз).



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

Бундай жағдайда номери s болған (100) тегислигинин биринде жайласқан атомлар бирдей фазада усы тегисликке түсирилген нормал бағытында (яғни [100] бағытында) u_s

шамасына аўысады. Тегисликте жайласқан атомлардың барлығы да бирдей болып тербеледи. Усы тегисликтеги номери s болған атомға номери $s + p$ болған тегислик F_{sp} күши менен тәсир етеди. Киши аўысыўлар орын алғанда (яғный u_s шамасы киши болғанда) бул күштиң шамасы тегисликлердин тең салмақтық орнынан аўысыўлар айырмасы болған $u_{s+p} - u_s$ шамасына пропорционал. Қосынды күш F_s шамасы F_{sp} күшлериниң қосындысына тең:

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

Массасы M болған s -номерли тегисликте жайласқан атом ушын Ньютоның екинши нызамын жазамыз:

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

u_s функциясын бойлық тегис толқын түринде излеймиз:

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

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

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

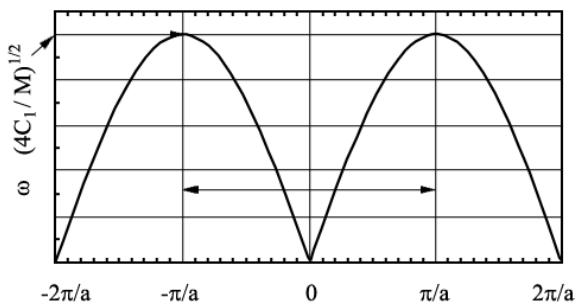
Егер қарап атырған пәнжеремиздеги ҳәм $\cos(a) = [\exp(ia) + \exp(-ia)]/2$ аңлатпасындағы симметрияны, онда $C_p = C_{-p}$ екенлигине ийе боламыз ҳәм төмендегидей аңлатпа аламыз:

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

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

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

$\omega(K)$ ғәрэзлигиниң графиги 3.6-сүйретте келтирилген. $K = \pi/a$ ноқатында (бул ноқат Бриллюэнниң биринши зонасының шегарасында жайласқан екенлигин еске түсирремиз) $\omega(K)$ дан K бойынша алынған туýынды нолге тең екенлиги көринип тур. Бул фононның топарлық тезлигиниң (групповая скорость) нолге тең екенлигине сәйкес келеди.



3.6-сүйрет.

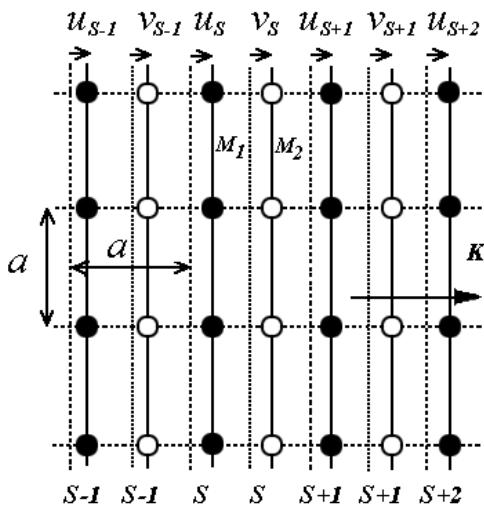
Примитивлик кублық пәнжередеги [100] бағытында тарқалатуғын тегис бойлық толқынның жийилиги ω ның толқын векторы K дан ғәрэзлиги.

$\omega(K)$ ғәрэзлигиниң тап усындағы өзгешелігі сайлаңған атомның тек жақын тегисликлер менен тәсирлесіүін есапқа алатуғын (3.9)-аңлатпадан да келип шығады. $K = \pi/a$ болған жағдайда (3.7)-аңлатпаға сәйкес қоңылас 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 болыуы толқынның ҳәр бир атомнан шағылысыўы ҳәм шағылысқан толқынның интерференциялық күшейтіүі менен байланыслы. Ҳақықатында да a қашықтығында жайласқан атомлардан шағылысқан атомлардың бир бириң күшетиүі шәрти $\Delta_{opt} = 2a = \lambda n = \frac{2\pi}{K}$ ($n = 1$). Буннан $K = \frac{\pi}{a}$.

Үш өлшемли пәнжереде фононлар рентген нурлары сыйқыл атомлық тегисликлерде де шағылыса алады. Интерференциялық күшетиүі шәрти Вульф-Брэгг теңлемесі болып табылады. Бул шәрт фононның толқын векторының Бриллюэн зонасының шегарасына түсіүине сәйкес келеди.

(3.7)-формула бойынша атомлардың тербелесін үйренгенде K шамасына кери пәнжерениң векторына тең $2\pi/a$ шамасын қосқанда да атомлардың қозғалыс нызамының өзгермейтуғынлығының келип шығатуғынлығын аңсат аңғарыўға болады. Соныңтан бир қарап атырған әпиүайы жағдайда атомлардың қозғалысларын үйрениү ушын $K \leq \pi/a$ шәртин қанаатландыратуғын K ның мәнислерин алыу жеткилик. Үш өлшемли кеңисликте бул шәртке Бриллюэннин биринши зонасының ишинде жайласқан K векторларының мәнислері қанаатландырады.

Базиси еки атомнан туратуғын құтышаның атомларының тербелесі. Түсіндіриўди әпиүайыластырыў ушын дәүири a ға тең примитив элементар құтышага ие кублық кристалды қараймыз (3.7-сүйрет). Мейли атомлардың массалары M_1 ҳәм M_2 шамаларына тең болсын.



3.7-сүйрет.

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

Бул кристалдағы [100] бағытын ҳәм усы бағытта тарқалатуғын тегис бойлық толқынды қараймыз (көлденең толқынлар да тап сондай тәқлетте үйрениледи). Бундай жағдайда 3.7-сүйретте қара рең менен боялған номери s болған (100) тегислигинде жайласқан массасы M_1 болған барлық атомлар бирдей фазада [100] бағытында [яғни (100) тегислигине перпендикуляр бағытта] u_s шамасына айысады. Яғни тегислик бир пүтиң тутас тегислик сияқты болып тербеледи (себеби тегис толқынды қарап атырмыз). Тап сол сияқты массасы M_2 ге тең номери s болған бир тегисликтен жайласқан боялмаған атомлар да (3.7-сүйрет) бир фазада усы тегисликтен перпендикуляр бағытта тутасы менен тербеледи. Қосымша және бир әпиүайыластырыуды қабыл етемиз: номери s болған тегисликтеги сайлап алғынған атомға тек еки жақын жайласқан тегисликлердеги атомларғана тәсир етеди деп болжаймыз.

Атомлар жайласқан тегисликлердин айысыўларын u_s ҳәм v_s арқалы белгилеймиз. Айысыўларды киши деп есаптаймыз ҳәм сонлықтан жақын қоңсы атомлар тегисликлери тәрепинен тәсир етиші күштиң шамасын боялмаған атомлар ушын $u_{s+1} - v_s$ ҳәм $v_s - u_s$, ал боялған атомлар ушын $u_s - v_{s-1}$ ҳәм $v_s - u_s$ айырмаларына пропорционал деп есаптай аламыз.

Номери s болған тегисликтен жайласқан «боялған» ҳәм «боялмаған» атомлар ушын Ньютоның екинши 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 ҳәм v_s шамаларын тегис бойлық толқынлар түринде излеймиз:

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

(3.12) ни (3.11) ге қойғаннан кейин и ҳәм v шамалары ушын бир текли сыйықты еки теңлемеден ибарат системаны аламыз:

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

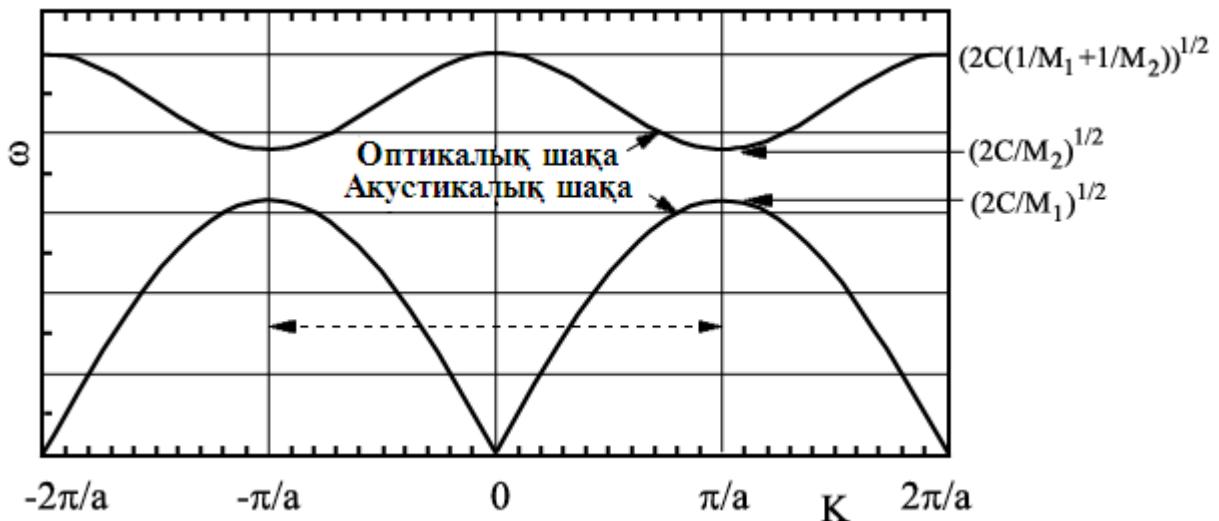
Егер бул теңлемелердин анықлаушысы (определители) нолге тең болса, онда олар ноллик емес шешимлерге ийе болады.

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

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

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

Іккяярлы K лар ушын (3.15)-теңлемени шешиүдің нәтийжелери 3.8-сүйретте көлтирилген.



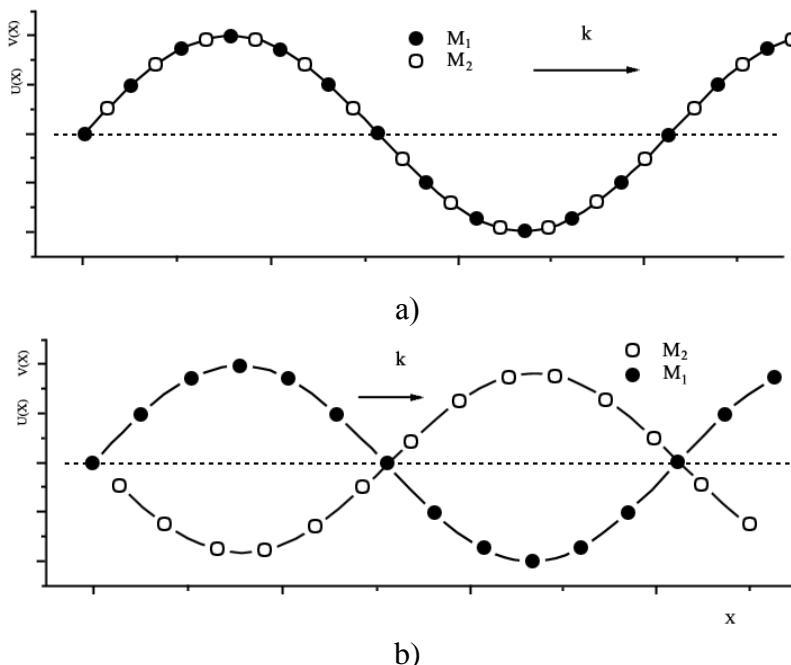
3.8-сүрет. Базиси еки атомнан туратуғын кублық пәнжереде [100] бағытында тарқалатуғын тегис бойлық толқынның жийилиги ω шамасының толқын векторы K дан ғәрзелиги.

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

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

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

Бириңи түбір фононның дисперсиялық ғәрзелигинин $[\omega(K)]$ оптикалық шақасына, ал екінши түбір фононның дисперсиялық ғәрзелигинин $[\omega(K)]$ акустикалық шақасына сәйкес келеди.



3.9-сүрет.
Атомлардың көлденең тербелислериндеги атомлардың аўысыўының акустикалық (а) ҳәм оптикалық типтери (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. Тербелислердин усындау түрин (3.9 б сүйретке қараңыз) егер 1 ҳәм 2 атомлары хәр қыйлы электр зарядына ийе болғанда өзгермели электр майданының тәсиринде қоздырыў мүмкин. Усы себепке байланыслы «оптикалық фонон» түснеги пайда болған. Биз қарап атырған жағдайларда магнит майданының тәсирин үйренбейді. Себеби электродинамика нызамларына сәйкес киши тезликлерде толқынның магнит майданы зарядларға әззирек тәсір 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. Тербелислердин усындау түрин кристалға өзгермели серпимли тәсир етиў арқалы пайда етиўге болады (3.9 а сүйрет). Бул тутас орталықтың узын толқынлы жақынласыўындағы атомлардың акустикалық тербелислерине сәйкес келеди. Бундай жағдайда атомлар бир бири менен келискең халда шама менен бирдей фазада тербеледи. Усыннан «акустикалық фонон» түснеги пайда болған.

$K = \pm\pi/a$ болған жағдай әдеўир қызықлы. Бундай жағдайда (3.15)-аңлатпа күшли әпиүйыласады ҳәм ω^2 шамасы ушын $\omega^2 = 2C/M_1$ ҳәм $\omega^2 = 2C/M_2$ түбірлери алынады. 3.8-сүйретте $K = \pm\pi/a$ шәрти орынланғанда үлкен түбірдин оптикалық шақаға, ал киши түбірдин акустикалық шақаға тийисли болатуғынлығы көрініп тур.

(3.14)-тенлемениң шешимлериниң болмайтуғын ω^2 шамасының областының бар екенлеги көрініп тур. Демек бундай область ушын еки атомлы элементар құтышасы бар кристалда толқын тарқала алмайды деген сөз. Терецирек таллаўлар жүргизилгенде бундай жиийиликлер областларына К ның комплексли мәнислериниң сәйкес келетуғынлығын көрсетеди. Бул орталықта толқынның амплитудасының тез кемейиүине сәйкес келеди.

Көп атомлы пәнжерениң атомларының тербелислерин еки атомлы жағдай ушын жоқарыда көлтирилген схема бойынша үйрениўге болады. Бирақ бундай етип мәселени шешиў математикалық жақтан қыйынырақ. Себеби көп санлы тенлемелерден туратуғын системаны шешиўгө туýры келеди. Элементар құтышасы r атомға ийе кристал ушын (3.14)-тенлемениң бойлық ҳәм көлденең толқынлар ушын r дана түбири алынады; олардың бир нешелерин $\omega(K)$ ғәрэзлигиниң акустикалық шақасына жуўап береди, ал калғанлары оптикалық шақасына жуўап береди деп есаплаў қабыл етилген. $\omega(K)$ ғәрэзлигиниң үш акустикалық шақасы ҳәм $3r - 3$ оптикалық шақасы, жәми болып фононлық спектрдин $3r$ дана шақасы алынады.

Мәселелер:

1. Киши $K \ll 1/a$ (үлкен толқын узынлықтары) ҳәм атомлардың тек жақын тегисликтер менен тәсир етисетуғын жағдайындағы (3.6)-тенлемениң тутас орталықтардың толқын тенлемесине айланатуғынлығын көрсетициз.

Көрсетпе: (3.6)-тенлемедеги екинши тәртипли туýынды ушын шекли айырмалар формуласын пайдаланыңыз.

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

Көрсетпе: Буның ушын $K = \pi/a$ болған жағдайдағы акустикалық ҳәм оптикалық шақалар ушын и менен v дың қатнасларын есаплаў керек болады.

Кристаллардың жыллылық сыйымлығы

Кристалдың ишки энергиясын есаплаў, буннан кейин оның жыллылық сыйымлығын кристалдың анықлаў ушын нормал тербелислерин ҳәм Бозе-Эйнштейн тарқалығын пайдаланыў жолы менен барлық осцилляторлардың энергиясын билиў менен әмелге асырылатуғынлығы туýралы жоқарыда атап етилген еди. Мәселениң екинши бөлими айрықша қыйыншылықты пайда етпейтуғын болса да, мәселениң биринши бөлими

математикалық көз-қарастан жүдә қурамалы. Усы құнлери бундай мәселелер әпиүайы молекулалар ушын ғана шешилмекте. Сонықтан осцилляторлардың меншикілі жийиликлерин есаплаудың әпиүайыластырылған усыллары қолланылады. Бул усыллардың айырымларын биз төменде қарап шығамыз.

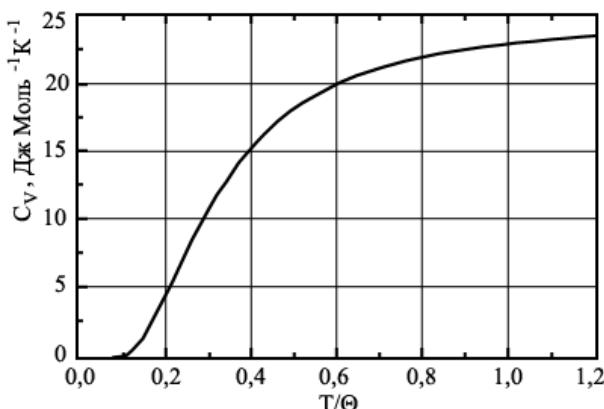
Эйнштейн модели. Эйнштейн модединде барлық атомлар бир бириңен ғәрэзсиз тербеледи ҳәм барлық атомлардың тербелис жийиликлери бирдей. Бундай жағдайда N дана атомға ииे кристалдың ишкі энергиясын есаплау ушын тек бир осциллятор керек болады. Буннан кейин нәтийжени осцилляторлардың саны болған $3N$ санына қебейтій керек. Мейли ҳәр бир осциллятор ω жийилиги менен тербелсин. Бундай осциллятордың орташа энергиясын Бозе-Эйнштейн тарқалыу функциясын пайдаланыудың жәрдеминде есаплаймыз:

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

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

$$\begin{aligned} C_V &= (\partial E / \partial T)_v = \\ &= 3N_A k (\hbar \omega / kT)^2 \exp(\hbar \omega / kT) / (\exp(\hbar \omega / kT) - 1)^2. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Модель 20-100 К температурасынан жоқары температураударда (яғни абсолют ноль температураға жүдә жақын болмағанда) эксперимент пенен жақсы сәйкеслик көрсетеди. $C_V(T)$ ғәрэзлигинин температурадан ғәрэзлиги 3.10-сүйретте көлтирилген.



3.10-сүйрет.

Осциллятордың жийилиги $\omega = k\Theta/\hbar$ болған жағдай ушын Эйнштейн модели тиіккарында есапланған жылдылық сыйымлығы C_V ның температурадан ғәрэзлиги.

$\hbar \omega \ll kT$ болғанда (бул шарт жоқары температураударда орын алады) $C_V \approx 3N_A k = 3R$. Бул Диюонг ҳәм Пти нызамына сәйкес келеди. $\hbar \omega \gg kT$ болғанда (бул шарт төменгі температураударда орын алады) ҳәм $T \rightarrow 0$ шегинде $C_V \approx 3N_A k \frac{\hbar \omega}{kT}^2 \exp \frac{\hbar \omega}{kT} \rightarrow 0$. Абсолют нолде жылдылық сыйымлығының нолге умтылығын термодинамиканың үшинши нызамы талап етеди. Бирақ $C_V(T)$ функциясының киширейиүй экспериментте бақланған жағдайға қарағанда әстерек жүреди (экспериментте $C_V \sim T^3$ нызамы бақланады). Бул атомлардың тербелислеринің бир бириңен ғәрэзсизлиги ҳаққындағы гипотезаның дұрыс емес екенлигине байланыслы. Кристалды қураушы атомлар бир бири менен тәсирлеседи, усының нәтийжесинде кристалларда ҳәр қылышы узынлықтағы серпимли толқынлар пайда болады. Бул толқынлар атомлардың бир бирине байланыслы болған колективлик тербелислерине сәйкес келеди.

Бирақ усындағы кемшилигine қарамастан Эйнштейн модели өжире ҳәм жоқары температуралардағы кристаллардың жыллылық сыйымлығын дұрыс тәриплейди. Бул модель айырмамен молекулалардың жыллылық сыйымлығын тәриплеүге, оптикалық фононлардың (олардың жийилиги толқын векторының мәнисинен дерлик ғәрзели емес) кристаллардың жыллылық сыйымлығына беретуғын үлесин жақсы түсіндіре алады.

Атомлардың коллективлик нормал тербелислерин есапқа алыў төменгі температуралардағы кристаллардың жыллылық сыйымлығы ушын алынған аңлатпаның дәллигин әдеўир жоқарылатады. Мәселе соннан ибарат, акустикалық коллективлик тербелислердин жийилиги киши. kT шамасындағы жыллылық тербелислеринин энергиясы оларды қоздырыў ушын жетеди. Бундай тербелислер киши температуралардағы жыллылық сыйымлығына өзлериңін үлеслерин қоса алады. Ал Эйнштейн модели бойынша барлық осцилляторлар салыстырмалы үлкен жийилик пенен тербеледи хәм қоңылас энергиялық қәддилер арасындағы айырманың шамасы $\hbar\omega$ шамасына тең. Соныңтан төменгі температураларда $\hbar\omega \gg kT$ шәрти орынланатуғын болғанлықтан осциллятордың бир қәддинен екинши қәддиге өтиў итималлығы жүдә киши шамаға тең болады. Соныңтан олардың ишки энергияға хәм жыллылық сыйымлығына қосатуғын үлесинің шамасы жүдә кем болады.

Кристалдың тербелислери энергиясын есаплау. Жоқарыда атап өтилгеніндегі, нормал тербелислердің жийиликтеринің спектрин есаплау жүдә қыйын мәселелер қатарына киреди. Соныңтан кристаллардағы атомлардың тербелислеринің энергиясын есаплағанда хәр қылыштың әпиүайыластырыўларды қолланады. Фононлардың руқсат етилген толқын векторларының мәнислерин көбинесе Ферми-газ теориясында Планк тарқалыўын келтирип шығарыў схемасы бойынша әмелге асырады. Атап айтқанда өлшеми L ге тен кублық кристалды алады. Буннан кейин кристалдың серпимли тербелислерин тәриплейтуғын толқын функцияларын комплексли түрде излейди:

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

Буннан кейин кристалдың серпимли тербелислерин тәриплейтуғын $f(x, y, z, t)$ функциясының түрине дәйирли 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 шэртлер

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

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

$$K = (2\pi m_1 / L; \quad 2\pi m_2 / L; \quad 2\pi m_3 / L); \quad (3.22)$$

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

Бундай жағдайда K векторының ҳәр бир руқсат етилген мәнисине K көнислигіндегі $V_K = \frac{\frac{2\pi}{L}^3}{V} = \frac{(2\pi)^2}{V}$ көлеми сәйкес келеди. Бул аңлатпада $V = L^3$ арқалы кристалдың көлеми белгиленген. Буннан кейин жийиликтиң толқын векторы K шамасынан ғәрзлиги болжап табылады. Әдетте көпшилик жағдайларда ω K ғәрзлигин экспериментте алынған ғәрзлик тиімділікте теориялық жоллар менен есаплайды. Буннан кейин K

векторының рұқсат етилген мәнислери областын шеклери ишинде ωK шамасы аз өзгеретуғын участкаларға бөледи. Бул процедура Эйнштейн моделинде пайдаланылған формулаларды пайдаланыудың мүмкін болыўы ушын исленеди. Буннан кейин санлы усыллар жәрдемінде есапланып атырған физикалық шамаға (мысалы ишкі энергияға) барлық участкалардың үлеслері қосып шығылады (суммаланады).

Сфералық симметрия орын алатуғын жағдайдарда (бундай жағдайларда ω шамасы K векторының модулинен ғана ғәрэзли болады) нормал тербелислердин жийиликлер бойынша тарқалыўын пайдаланған қолайлы (бул тарқалыў ω шамасының қасында $d\omega$ интервалында неше нормал тербелистиң болатуғынлығын көрсетеди). $d\omega$ интервалындағы нормал тербелислердин санын dN арқалы белгилесек:

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

$D(\omega)$ ның жәрдемінде көп физикалық шамалардың орташа мәнислерин табыў 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 қанаатландырыўы керек:

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

Бул нормировка шәрти нормал тербелислериниң улыўмалық санының $3N$ ге тең болыўының керек екенлегин талап етеди.

Бундай жоллар менен мәселени шешиўди Дебай модели мысалында қарап шығамыз.

Дебай модели. Дебай модели шеклеринде $\omega = Kv$ формуласы қабыл етиледи (v арқалы сес толқынларының тезлиги белгиленген). Усындај жақынласыўды тутас орталық жақынласыўы деп атайды. Бундай жақын келиўде фононлардың дисперсиясы менен дисперсиялық ғәрэзликтиң оптикалық шақасын есапқа алыўдың мүмкіншилигиниң болмайтуғынлығы түснікли. Соның менен бир қатарда қосымша түрде v тезлигиниң мәниси ретинде көлденең ҳәм бойлық толқынлардың тезликтери арасындағы орташа мәнис алынады (көлденең ҳәм бойлық толқынлардың тезликтери арасындағы айырманың үлкен шама екенлегин атап өтепиз). ωK ғәрэзлигиниң сфералық симметрияға ийе екенлиги мәселени шешиўди әдеўир аңсатластырады. Шамасы белгиленген шамадан киши болған рұқсат етилген K векторларының санын K кеңисликтеги радиусы K болған сфераны K векторларының рұқсат етилген бир мәнисине сәйкес келетуғын көлемине бөлиў 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 табыўға болады. dN_K шамасын да тап сол сыйқылар менен табады. Буның ушын K кеңислигінде K шамасы

$K, K + dK$ аралығында катламның көлемин $\frac{2\pi}{L}^3$ шамасына бөледи. Бундай жағдайда $V = L^3$ екенлегин есапқа алсақ $D(\omega)$ функциясы ушын төмендегидей аңлатпаны аламыз:

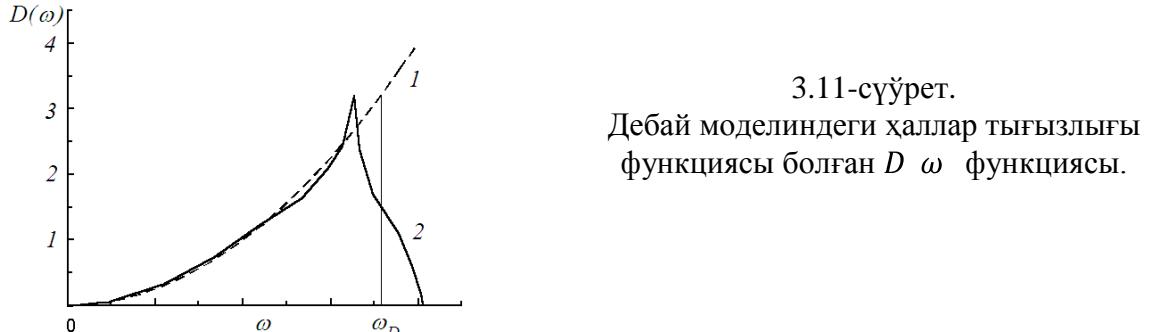
$$D(\omega) = dN_K / d\omega = (4\pi K^2 dK) / ((2\pi / L)^3 d\omega) = V\omega^3 / (2v^3 \pi^2) \quad (3.27)$$

Нормировка шәртин умытпаўымыз зәрүр. Бул шәрт осциллятордың санының $3N$ ге тең болыўын талап етеди. Дебай моделинде болса K векторының модулине шек қояды.

Оның максималлық мәнисин K_D арқалы белгилеймиз. Буннан кейин бул шаманы (3.26)-аңлатпаға қойсак шеп тәрепинде осцилляторлардың улыўмалық саны болған поляризацияның берилген типине сәйкес келиўши N алыш мүмкіншилигине ийе боламыз. (3.26)-аңлатпаға K_D ҳәм $\omega_D = vK_D$ шамаларын киргизиў арқалы төмендегини аламыз:

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

$D \omega$ функциясының түри 3.11-сүйретте келтирилген (1-иймеклик).



Есаплаўлар K_D шамасының мәнисиниң π/a шамасына жұдә жақын екенлигин көрсетеди, ал π/a шамасының Бриллюэнниң биринши зонасының шегарасына сәйкес келетуғынлығын билесиз. көремиз. Бирақ Дебай модели шеклеринде Бриллюэнниң биринши зонасына сәйкес келиўши K векторының мүмкін болған мәнислеринин ҳақыйқый областы оған сәйкес келмейтуғын сфера менен алмастырылады.

Осцилляторлардың поляризациясының үш типине сәйкес келиўши ишкі энергияның мәниси Дебай теориясында төмендеги интеграл түринде есапланады:

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

Бул жерде $x = \frac{\hbar \omega}{kT}$ ҳәм $x_D = \frac{\hbar \omega_D}{kT} = \frac{\Theta}{T}$. Бул жерде Θ арқалы Дебай температуrasы белгиленген. Оның шамасы мынаған тен:

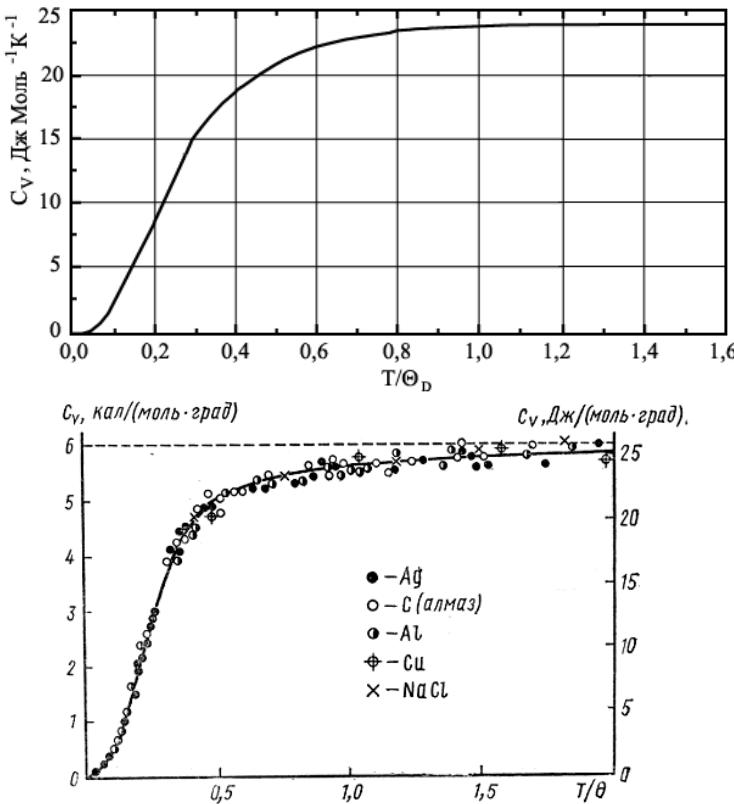
$$\Theta = \omega_D \hbar / k = (v \hbar / k) ((6N^3 \pi^2) / V)^{1/3}. \quad (3.30)$$

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

C_V жыллылық сыйымлығын табыў ушын (3.29) ды температура T бойынша дифференциаллаў керек:

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

(3.31)-аңлатпадағы интегралды (3.29)-аңлатпа сыйқлы тек санлы усыллардың жәрдемінде есаплау мүмкін. $C_V(T)$ ғәрзелігі 3.12-сұйретте көлтирилген.



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

Төменги температураларда $C_V T \approx \text{const} \cdot T^3$. Усы теңліктиң дұрыслығын көрсетемиз. (3.31)-аңлатпада $T \rightarrow 0$ шегінде $x \rightarrow \infty$ ҳәм $x_D \rightarrow \infty$ екенлигин итибарға аламыз. Бундай жағдайда (3.31)-интегралының шегараларын нол менен шексизлик деп есаптаймыз. Интегралдың өзи базы бир константаға тең болып шығады. Солай етип $C_V T \approx \text{const} \cdot T^3$ ғәрзелигинң орын алатуғының дәлилленеди.

$C_V T \approx \text{const} \cdot T^3$ ғәрзелигин (нызамын) төмендегидей түрде көрсетпелирек етип алыу мүмкін. Температура нолге умтылғанда (яғни $T \rightarrow 0$ шәрти орынланғанда) C_V жыллылық сыйымлығына тийкарғы үлесті киши жийиликке иие акустикалық тербелислер береди. Ал Дебай модели болса киши жийиликке иие акустикалық тербелислерди тәриплейди. Сонықтан $kT > \hbar\omega = v\hbar K$. Кеңеслигинде усындау векторлардың областы болып көлеми $(kT)^3$ шамасына пропорционал болған сфера хызмет етеди. Ҳәр бир фонон орташа $(kT)^1$ шамасына барабар энергияға иие болады. Сонықтан энергияның қоры (запасы) нормал тербелислердин санына пропорционал ҳәм олардың ҳәр қайсысының орташа энергиясы $(kT)^4$ шамасына тең болып шығады. C_V жыллылық сыйымлығын энергияның температура бойынша алынған тууындысына 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 жеткиликli дәрежеде дұрыс тәриплейди. Сонықтан оны фононлардың дисперсиялық ғәрзелигинин 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 етисиүин изертлеўлерде де көп қолланады.

3.12-сұйрет.

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

3.12-а сұйрет.

Айырмамен затлардың экспериментте алынған жыллылық сыйымлықтарының температурадан ғәрзелігі. Тутас сызық пенен Дебай модели тийкарында сыйылған теориялық иймекликті белгиленді.

Эксперименталлық нәтийжелер тийкарында ҳәр бир зат ушын жыллылық сыйымлығының мәниси де, Дебай температурасының мәниси де анықланған ҳәм олар ҳәр қыйлы справочниклерде берилген.

Биз де төменде ҳәр қыйлы химиялық элементлер ҳәм базы бир бирикпелер ушын Дебай температурасының мәнислерин кесте түринде 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 ғәрзелигинин оптикалық шақаларын жуұық түрде аппроксимациялау ушын Эйнштейннин моделин жийирек қолланады ямаса Дебай моделине үксас болған моделлерден пайдаланады. Бул моделлерде тийкарынан ω К функциясының түрін өзгертиү менен шекленеди.

Биз енди фононлар ҳаққында толығырақ гәп етемиз.

Биз жоқарыда пәнжерениң нормал тербелисимиң энергиясының массасы тербелиүши атомлардың массасына тең, нормал тербелислердин жийилигине тең жийилик пенен тербелетуғын осциллятордың энергиясына тең екенлигин атап өткен едик. i -номерли нормал тербелистиң жийилигин ω_i , ал энергиясын E_i арқалы белгилейик. 3N нормал тербелистиң 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 ҳаққында жүрип атырганлығын умыттаймыз) 3N дана бир биринен ғәрзесиз тербелетуғын нормал сызықлы гармоникалық осциллятордың энергиясына тең. Бундай мағанада N дана тербелиүши атомнан туратуғын система 3N дана нормал осцилляторға эквивалент. Сонықтан бундай системаның орташа энергиясын анықлау мәселесин нормал осцилляторлардың орташа энергиясын есаплау мәселеси менен алмастырыў мүмкін.

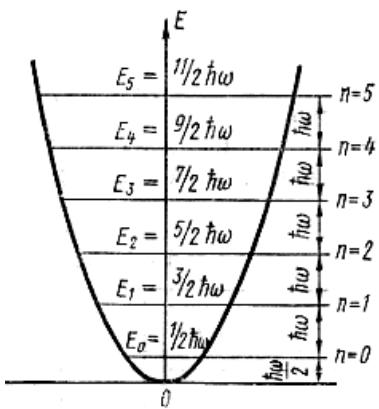
Нормал осцилляторлардың ҳақынчайтын атомлар менен массасынан басқа ҳеш қандай қатнасының жоқ екенлигин атап өтепиз. Ҳәр бир осциллятор пәнжерениң бир нормал тербелисine сәйкес келеди, ал сондай бир нормал тербелиске кристалдағы барлық атомлардың тап сондай жийиликтеги тербелиси сәйкес келеди.

Квант осцилляторының энергиясы төмендеги формуланың жәрдеминде есапланады:

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

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

Төменде көлтирилген сүйретте сызықлы гармоникалық осциллятордың энергиялық спектри көлтирилген (3.12-б сүйрет). Бул спектр бир биринен $\hbar\omega$ қашықтығында турған дискрет қәддилердин жыйнағынан турады.



3.12-б сүйрет.

Сызықлы гармоникалық осциллятордың энергиялық спектри. Бул спектр бир биринен $\hbar\omega$ қашықтығында турған дискрет қәддилердин жыйнағынан турады.

Нормал тербелислердин энергиясы нормал осциллятордың (гармоникалық осциллятордың) энергиясына тең болғанлықтан кристаллық пәнжерениң нормал тербелислеринің энергиясы (3.33)-аңлатпаның жәрдемінде анықланыўы керек. Ал оның энергиялық спектри 3.12 б сүйретте көлтирилген спектрге сәйкес келиўи шәрт.

Жыллылық тербелислеринде кристаллық пәнжере тәрепинен жутылыўы ямаса шығарылыўы мүмкін болған минималлық энергияның мәниси (демек нормал тербелистинң энергияның бир қәддинен екинши қәддине өтиўи ушын керек болатуғын минималлық энергияның мәниси) $\hbar\omega$ шамасына тең екен. Пәнжерениң жыллылық тербелислеринің энергиясының бул порциясына ямаса энергиясының квантына фонон деген атама берилген.

Жоқарыда айтылған жағдайларды айқынластырыў ушын әпиўайы салыстырыў (аналогия) көлтиремиз. Мейли абсолют қара денениң ишиндең қуыссылық тең салмақлы жыллылық нурланыўы менен толтырылған болсын. Квантлық көз-қарастан бул нурланыў жақтылықтың квантлары болған фотонлар газы түринде қабыл етиледи. Фотонлардың энергиясы $\varepsilon = \hbar\omega = h\nu$, импульси $p = \hbar\omega/c = h/\lambda$ шамаларына тең. Бул формулаларда с арқалы жақтылықтың вакуумдағы тезлиги, λ арқалы жақтылық толқынының толқын узынлығы, v арқалы жақтылықтың жийилиги белгилендеген. Тап сол сияқты кристалды толтырып туратуғын серпимли толқынларды да пәнжерениң нормал тербелислері болған фононлардан туратуғын газ сыпатында көз алдымызға көлтириўимизге болады. Бир фононның энергиясы $\varepsilon_{\text{фонон}} = \hbar\omega = h\nu$, ал импульси болса $p_{\text{фонон}} = \hbar\omega/v = h/\lambda$ шамаларына тең.

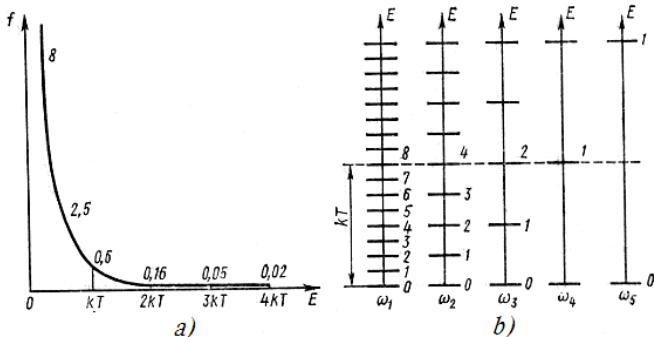
Усындаған көз-қараслар бойынша қыздырылған кристал фонон газы менен толтырылған күтіға мегзес.

Фононлар да фотонлар сияқты Бозе-Эйнштейн тарқалыў функциясы менен тәрилленеди:

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

Козыў дәрежесине байланыслы нормал тербелислер бирдей болған бир неше фононды нурланыра алады. Мысалы, егер нормал тербелис 3-қәддиге шекем қозған болса (3.12-б сүйретті қараңыз), онда оның энергиясы $E_n = 3 + \frac{1}{2} \hbar\omega$ шамасына тең болады. Демек ол берилген нормал тербелис қайсысының энергиясы $\hbar\omega$ ға тең болған уш фононды пайда етти деп есаптаймыз. Ал төмендеги 33.13 –с сүйретте фононлар ушын $f(E)$ тарқалыў функциясының графиги көлтирилген. Бул графикте берилген T температурада энергиясы $\hbar\omega \approx kT$ ға тең болған барлық нормал тербелислердин козатуғынлығы көринип тұр. Ал энергиясы $\hbar\omega > kT$ шәртин қанаатландыратуғын нормал тербелислер бундай температураарда дерлик қозбайды. 33.13-с сүйретте берилген T температурада жийилиги ω_1 болған тербелислер 8-қәддиге шекем қозған. Демек бул нормал тербелис орташа ҳәр қайсысының энергиясы $\hbar\omega_1 = kT/8$ ғе тең сегиз бирдей фононды пайда етеди екен.

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



33.13 –с сүүрет.

фононлар ушын $f(E)$ тарқалыў функциясының графиги көлтирилген.

Бул графикте берилген T температурада энергиясы $\hbar\omega \approx kT$ га тең болған барлық нормал тербелислердин қозатуғынылығы көринип тур.

Мәселелер:

5. (3.31)-аңлатпа тийкарында Дюлонг ҳәм Пти нызамын ҳәм жоқары температуналар ушын ($T \gg \Theta$ болған температуналар ушын) Дюлонг ҳәм Пти нызамына қосымшалар (дүзетиўлер) киргизиціз.

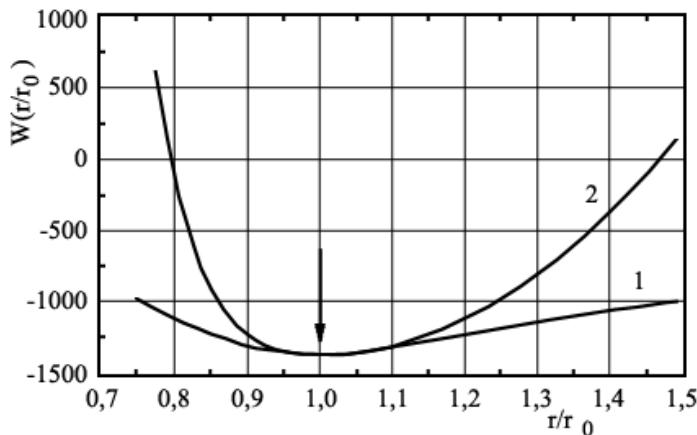
Көрсетпе. (3.31)-формуладағы интеграл астындағы аңлатпаны $\hbar\omega/kT$ киши параметри бойынша қатарға жайып оның жууық мәнисин есаплау қерек.

Ангармоникалық жақынласыў

Биз жоқарыда кристалды бир бири менен тәсир етиспейтуғын осцилляторлардың жыйнағы деп қарадық. Бундай жағдайда потенциаллық энергия осциллятордың тең салмақтықтан аұысыўының квадратына пропорционал өседи, ал пәнжерениң қаттылығын тәриплейтуғын параметрлер болса осцилляторлардың тең салмақтық ҳалдан аұысыўының өсиүине байланыссыз өзгермей қалады. Мәселени бундай етип қарауды гармоникалық жақынласыў деп атайдыз. Бундай моделлер кристалдың жыллылық сыйымлығын дұрыс есаплауға мүмкіншиликті береди, бирақ фононлардың бир бири менен тәсирлесіўлерине байланыслы болған кристалдың көплеген параметрлерин (мысалы жыллылық өткізгішлик) есаплауға мүмкіншиликті бермейді. Гармоникалық моделлердин фононлардың фононлар менен тәсирлесіўлерин есапқа алмайтуғынылығын аңғарыўымыз қерек. Биз төменде кристалдың серпимлик модуллеринің термператураға ғәрезлигинин, жыллылық кенейиўинин ангармоникалық қосымталарды көрсетілгенде талап ететуғынылығын көремиз. Бул қосымталар осцилляторлардың энергиясының олардың тең салмақтық аұхалдан аұысыўларының квадратынан ғәрезли емес екенлигинен дерек береди..

Кристаллардың жыллылық кенейиўи. Дерлік барлық кристаллар (тап сол сыйқылардың басым көпшилигі) температураның жоқарылауы менен кенейеди. Егер бул қубысларды терең түрде қарайтуғын болсақ, олардың тәбиятының жүдә курамалы екенлигине исениүге болады. Жыллылық кенейиўин кристалдың атомлары арасындағы орташа қашықтықтың үлкейиўи менен байланыслы деп есаплады. Бирақ жыллылық сыйымлығының себеби жүдә көп болыўы мүмкін. Соның ишинде потенциал энергияның атомлардың аұысыўының асимметриялық (яғнай симметрияның болмауынан) ғәрезлигинен орын алғыўы мүмкін. Бирақ соның менен бир қатарда жыллылық кенейиўи температура жоқарылағанда атомлар арасындағы тәсир етиў күшинин өзгерійинин, ҳәр қыйлы атомлардың қайтадан топарласыўының, олардың электронлық бултларының ориентацияларының өзгерислерге ушырауына да, басқа да себептерге байланыслы болыўы итимал. Төменде биз тийкарынан биринши себепті қарап шығамыз. Оны әдетте тийкарғы себеплердин қатарына киргизеди. Ал басқа себеплерди таллау курамалы математикалық процедураларды талап етеди.

Ең дәслеп жыллылық кеңейиүин жоқарыда атап өтилген гармоникалық жақынласыўлардың жәрдемінде тәриплейдің мүмкін емес екенлигин атап өтемиз. Бул жағдайда атомларды тең салмақтық орнына қайтарыўшы күштің шамасы аўысыўдың өзине, ал потенциал энергия болса атомлардың аўысыўының квадратына пропорционал еди.



3.13-сүйрет.

Хәр қандай жақынласыўлардағы еки атом арасындағы тәсирлесіүге сәйкес келиўши потенциал энергия $U(r)$ дин атомлар арасындағы қашықтық r ге ғәрэзлиги

Еки атом арасындағы тәсирлесіүге сәйкес келиўши потенциал энергия $U(r)$ шамасының олар арасындағы қашықтық r ден ғәрэзлигин ҳақыйқый жағдайлар ушын (3.13-сүйреттеги 1-сызық) хәм гармоникалық жақынласыў жағдайы ушын қарайық (3.13-сүйреттеги 2-сызық). Кейинги (гармоникалық жақынласыўда) жағдайда атомлардың тербелис амплитудаларының өсиўи менен олардың потенциал энергияларының минимумына сәйкес келиўши тең салмақтық орынлары (яғни олар арасындағы қашықтықтың орташа мәниси) өзгермейди. Демек бундай жағдайларда жыллылық кеңейиүи орын алмайды деген сөз. Ал егер ҳақыйқатта орын алатуғын $U(r)$ ғәрэзлигинин температураларың жоқарылаўы менен өзгерисин қарайтуғын болсақ, онда энергияның өсиўи менен бақланатуғын оның асимметриялығынан атомлар арасындағы орташа қашықтық өзгериске ушырайды. Атомлар арасындағы қашықтықтың өсиў дәрежеси $U(r)$ ғәрэзлигинин симметриялықтан аўысыў (шетке кетиў) дәрежесине байланыслы. Усындај асимметриялықты есапқа алыў ушын $U(r)$ функциясын $r - r_0$ бойынша $r - r_0^2$ шамасына салыстырғанда жоқарырақ дәрежеге ииे қатарға жайыў керек болады. Асимметриялық әдетте $r - r_0^3$ ағзасы тәрепинен тәриплениди.

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

Больцман тарқалыўы орын алатуғын Жеткилилди дәрежедеги жоқары температураларда (3.33)-аңлатпаны есапқа алыў төмендегидей аңлатпаның алышыўына алып келеди:

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

Бул нәтийже өжире температураларына жақын температуралардағы жыллылық кеңейиүинин әмперикалық нызамларын есаплаўға мүмкіншилик береди:

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

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

сызықлы жыллылық кеңейиүи коэффициенти ямаса жыллылық кеңейиүи коэффициенти деп аталады. Бул коэффициенттин мәниси физикада былайынша анықланады:

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

α шамасының (коэффициентинин) мәнисин өлшеү ушын бир неше әпиүайы хәм дәл усыллар ислеп шығылған. Олардың ишиндеги ең көп тарқалғаны дилатометрия болып табылады. Бул усылда үлгинин ұзынлығы ҳәр қыйлы температураларда дәл анықланады. Усы мағлыўматтар тийкарында жыллылық кеңейиүи коэффициентинин мәниси есапланады. Ал рентгенографияда (рентгенографиялық дилатометрия) болса ҳәр қыйлы температуралардағы кристаллографиялық тегисликтер арасында қашықтылардың мәниси аңсат өлшенеди. Нәтийжеде $d(T)$ ғарезлиги анықланады. Ал рентгенографиялық экспериментлердин оптикалық схемасына байланыслы үлгинин ұзынлығын $d T = const \cdot l(T)$ формуласына сәйкес анықлады. Өлшеүлерде анықланған $d(T)$ ямаса $l(T)$ ғәрзеликтери бойынша (3.36)-формуланың жәрдемінде 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 E , 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 независящим 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].

Көпшилил затлар ушын $T = 200 - 500$ К температураларда α ның мәниси $10^{-5} \cdot 1/T$ этирапында болады. Айрым затлар ушын (темир-никель құймаларында, инварлық деп аталатуғын құймаларда) α шамасының мәниси жүдә киши болады. Олар $T = 200 - 500$ К температураларда температураның өзгериүи менен геометриялық параметрлерин жүдә киши шамаларға өзгереттүғын (мысалы саатлардың маятниклерин соғыў ушын) затлар сыпатында техникада кеңнен қолланылады. Айрым затлардың (тийкарынан металлардың) сызықлы жыллылық кеңейиүи коэффициентлері төмендеги кестеде берилген.

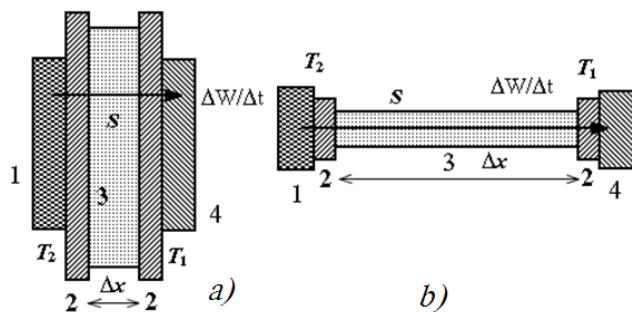
Өжире температураларына жақын температуралардағы сызықлы жыллылық кеңейиүи коэффициентлері

Затлар	$\alpha \cdot 10^{-6}$, град $^{-1}$.	Затлар	$\alpha \cdot 10^{-6}$, 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 өткизгишилигі. Денениң жыллылық өткизгишилик коэффициенти деп денениң бетиниң майданының бир бирлиги арқалы бир ўақыт бирлигинде ҳәм температуралың градиенти бир бирликке тең болғанда өтетуғын жыллылық энергиясының муғдарына айтады. Жыллылық өткизгишилик коэффициентин K арқалы, бир бирлик бет арқалы өткен жыллылық энергиясын ΔW арқалы, температура градиентин dT/dx арқалы белгилеймиз (3.14-сүйрет). Нәтийжеде төмендеги формуланы жазамыз (анықлама тийкарында):

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

Бул формула денелердин жыллылық өткизгишилигин экспериментте анықлағанда да пайдаланылады. Буның ушын K ны есаплау ушын керек болатуғын барлық шамалар өлшенеди. Жыллылық сыйымлығын өлшейтуғын дүзилистердин схемалары 3.14-сүйретте көлтирилген.



3.14-сүйрет.

Жыллылық өткизгишилигин өлшейтуғын дүзилистиқ схемасы.

- a) киши жыллылық өткизгишиликке ийе үлгилер ҳәм b) үлкен жыллылық өткизгишиликке ийе заттар ушын.

Диэлектриклерди изертлегендеге алынган эксперименталлық мағлыўматлар температура абсолют нолден үлкейгенде K шамасының үлкейетуғынлығын көрсетеди.; 3- 50 К температурада K созылған түрдеги максимумға ийе, ал температуралың буннан кейинги жоқарылауы менен K ның шамасы кемейеди. Салыстырмалы жоқары температуralарда (шама менен Дебай температуralарында) жыллылық өткизгишилик коэффициентиниң мәниси $1/T$ ға пропорционал кемейеди.

Бундай ғәрзеликти теориялық түснидириў төмендеги жағдайға тийкарланған: диэлектриклерде жыллылықты фононлар алып жүреди, олар серпимли толқынлар сыпатында идеал пәнжереде еркин қозғалады ҳәм кристаллық пәнжерениң дефектлери менен тәсир етискенде ғана өзлериниң қозғалыс бағытларын өзгертерди. Бундай дефектлер қатарына дәнешелер менен кристаллық блоклар арасындағы шегаралар, кристаллық пәнжерениң басқа да дефектлерин киргизиўге болады. Соның менен бирге кристаллық пәнжерениң модуляциясына алып келетуғын кристаллық пәнжерениң бир текли емес деформациялары да фононлардың кристал бойынша тарқалығына тәсирин тийгизеди. Бундай модуляциялардың тутқан орнын айрықша түрде айтап өтийге туұры келеди. Себеби сол модуляциялардың жәрдеминде фононлардың бир бири менен тәсирлесиў механизмлери түснидириледи.

Биз жоқарыда кристалды бир бири менен тәсирлеспейтуғын осцилляторлардың жыйнағы сыпатында қарап өттік. Бул жағдай кристалдың жыллылық қәсийетлерин түснидириў ушын Бозе-газ теориясын пайдаланыўға мүмкіншілік берди. Егер тең салмақтың орнынан аүысқан атомларды кейинге қайтарыўшы күшлердин шамасы аүысыў менен сзызықты түрде байланысқан болса (яғни кристалдың серпимли константалары атомлардың аүысыўына байланыслы емес болған жағдай) тап сондай жақынласыўды пайдаланыў мүмкін. Бирақ бундай жақынласыў (бундай жақынласыўды гармоникалық жақынласыў деп атайды) жууық түрде орынланады. Гармоникалық жақынласыў жууық түрде орынланғанда ғана еки фонон арасындағы тәсирлесиўдин физикалық механизмлерин түснидириў мүмкін. Сзызықты бир текли орталықтарда серпимли

толқынлардың тарқалың теориясы бойынша фононлардың бир бири менен тәсир етиспөүи керек.

Еки фононның бир бири менен тәсир етисиүиниң мүмкіншилиги төмендегише түсіндіріледі. Мейли кристал бойынша фонон тарқалатуғын болсын. Ол кристалды өзиниң толқын узынлығы λ шамасына тең дәйір менен деформациялайды. Бундай жағдайда жоқарыда атап өтилгенде кристалда серпимли турқылардың модуляциясы пайда болады. Бул модуляция «дифракциялық пәнжере» ни еске түсіреді. (бундай жағдай 3.1-сүйретте келтирилген). Екинши фонон усындағы «дифракциялық пәнжере» де қозғалып дифракцияға ушырауы мүмкіншилигине ийе болады. Нәтийжеде ол өзиниң қозғалыс бағытын өзгертереді. Буның себеби өзине тән дифракциялық пәнжерени пайда еткен бириńши фонон болып табылады. Бундай жағдайда еки фононның тәсир етисиўи, соқлығысыұры ҳаққында гәп етеді. Усындағы соқлығысыұдың зәрүрли шәрти «сызықлы емес эффект» - фонон өткенде кристаллық пәнжерениң серпимли қәсийетлериниң өзгериўи болып табылады. Соныңтан фононлардың соқлығысыұры процесслери кристаллардағы тәсир етисиўлердин «ангармоникалық, сыйықлы емес» қәсийетлериниң көриниўи болып табылады.

Фононларды бир бири менен сийрек тәсир етисетуғын дерлик идеал Бозе-газ деп қараў жәрдемінде жыллылық өткизгишлик коэффициентин есаплағанда идеал газ ушын алғынған формуланы пайдаланыуға имканият береди:

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

Бул формулада C_V арқалы турақты көлемдеги газдин бир бирлик көлеминиң жыллылық сыймалығы (биз қарап атырған жағдайда Бозе - газдин), ν вркалы газ молекулаларының орташа тезлигі, l_{eff} арқалы газ молекуласының (биз қарап атырған жағдайда бозонлардың) еркин жүрий жолының эффективлик узынлығы белгиленген.

l_{eff} шамасы жыллылықты алып жүрийшилердин бир бири менен соқлығысыұры жийилигинен ҳәм ең бағытынан сол соқлығысыұлардың берилген түриниң жыллылық «алып жүрийшилериниң» энергияны алып жүрий картинасына қалайынша тәсир ететуғынлығына байланыслы. Энергия тасыушы бөлекшелердин қозғалыс бағытын киши шамаларға өзгертуғын соқлығысыұлар энергияның алып жүрилиүине ҳәм l_{eff} шамасына әззи тәсир ететуғынлығы өз-өзинен түсінкли (3.15 а сүйрет). Ал жыллылық алып жүрийшилериниң бағыттарының құшлы өзгериси энергияның алып жүрилиүине ҳәм l_{eff} шамасына үлкен тәсир жасайды (3.15 б сүйрет).

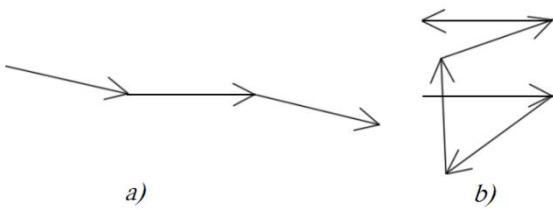
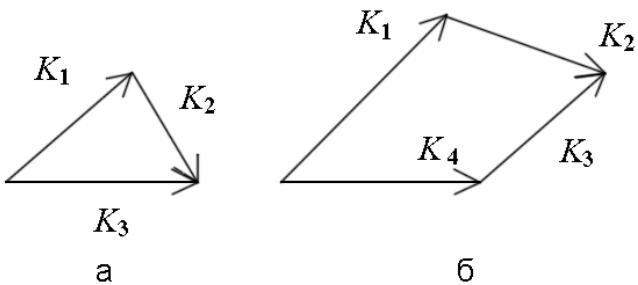


Рис. 3.15.
Соқлығысыұлардың ақыбетинде қозғалыс бағыты киши мүйешлерге (a) ҳәм үлкен мүйешлерге (b) өзгеретуғын бөлекшениң қозғалысының схемасы.

Энергия менен импульстидің сақланыу ғылыми нызамлары орынланатуғын фононлардың $k_1 + k_2 \rightarrow k_3$ ҳәм $k_1 + k_2 \rightarrow k_3 + k_4$ түріндеги соқлығысыұлар да жыллылық өткизгишлик коэффициенти K ның жудә аз өзгериүине алып келеді (3.16-сүйретти де қараңыз). Бундай процесслерди нормал процесслер (яmasa N-процесслер) деп атайды.



Фононлардың соқлығысынаның нормал процесси деген атама фононлардың имульсларының қосындысы болған $k_1 + k_2$ шамасының өзгермей қалыбы менен байланыслы. Бундай процессте соқлығысатуын фононлар коллективиниң қозғалыс бағыты да, усы процесс пенен байланыслы болған жыллыштың көшиү бағыты да сақланады.

Кристалларда $k_1 + k_2 \rightarrow k_3 + G$ түрindеги соқлығысынанардың да орын алғыы мүмкін (3.17-сүйретте келтирилген). Бул аңлатпада G арқалы кери пәнжере векторы белгиленген. Демек $k_1 + k_2 \rightarrow k_3 + G$ түрindеги соқлығысында кери пәнжере векторы G есапқа алынбайтуын болса әдеттеги түрдеги жазыўларда импульстиң сақланыў нызамы орынланбайды..

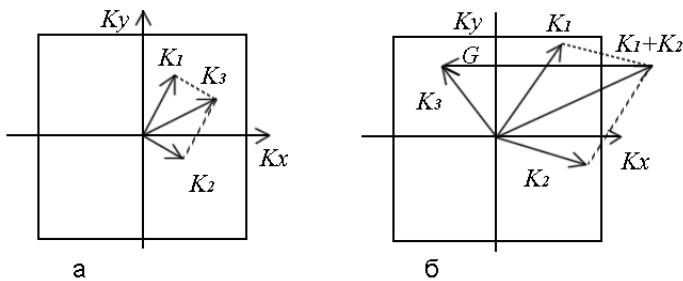


Рис. 3.17.
Схема процесста переброса

Бундай соқлығысынанарда фононлардың қосынды импульси болған $k_1 + k_2$ шамасының мәниси Бриллюэнниң биринши зонасының шегарасының арғы таманында жайласқан болыбы керек хәм фононлар системасының импульсіне кристаллық пәнжереден 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 иие болады. Бир соқлығысынанар фононлар системасының қозғалыс бағыты күшли өзгеретуғын тап усындай процесслер хәм усы процесслер менен байланыслы болған жыллыштық энергиясының көшийиниң бағытының өзериүи жыллыштық өткізгишилкке үлкен тәсірин тийгизеди. Бундай процесслерди ылактырыў процесслери (орыс тилинде процессы переноса) ямаса U-процесслери деп атайды.

Ылактырыў процесслериниң жүзеге келиўи ушын k_1 хәм k_2 шамаларының үлкен, олардың сан шамасының $G/4$ шамасына барабар ямаса оннан үлкен болыбы тийис. Бундай процесслер жеткиликли дәрежедеги жоқары температураларда орын алады. Бундай температураларда энергиясы да, толқын векторы да үлкен болған фонондың ушыратыўдың итималлығы жоқары.

Жыллыштық өткізгишилк коэффициентиниң жоқары температуралардағы термпературадан ғәрзелигиниң шамасын баҳалаймыз. Бундай жағдайда C_V шама менен турақлы мәниске иие хәм $k > G/4$ шәрти орынланатуғын фононлардың саны жеткиликли дәрежеде үлкен. Бундай жағдайда еркін жүриў жолының узынлығы жоқарыда айтылған фононлар менен соқлығысынанардың итималлығына кери пропорционал. Усындай итималлық болса олардың санына ямаса температура T ға пропорционал

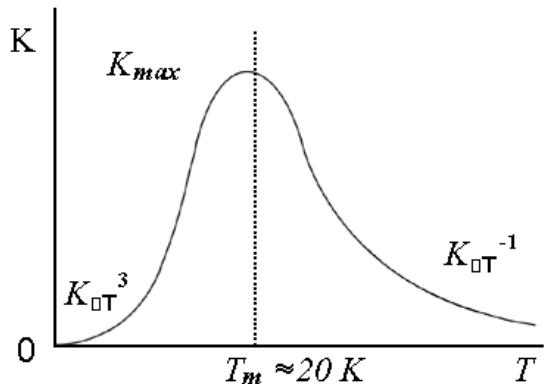
3.16-сүйрет.

Энергия менен импульстиң сақланыў нызамлары орынланатуғын фононлардың $k_1 + k_2 \rightarrow k_3$ хәм $k_1 + k_2 \rightarrow k_3 + k_4$ түрindеги соқлығысынанарының схемасы.

(жоқарыда биз фононлардың санының температураға пропорционал екенлиги ҳақында гәп еткен едик). Нәтийжеде $K T = \text{const}/T$ ғәрзелигине ийе боламыз. Бундай ғәрзелик экспериментте бақланады.

Жыллылық өткизгишлик коэффициентиниң төменги температуралардағы температуралық ғәрзелигиниң шамасын баҳалаймыз. 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 ҳәм $T \rightarrow 0$ шегинде нолге умтылады. Бундай жағдайда l_{eff} шамасының мәниси шексизликке умтылығы керек. Бирақ l_{eff} шамасының шексизликке умтылығы орын алмайды. Себеби фононлардың ҳәр қыйлы структуралық дефектлерде шашыраўы өзинң тәсирин тийгизеди. Бундай жағдайда l_{eff} ның шамасы температурадан ғәрзесиз болған дефектлердин концентрациясы бойынша анықланады. Усы жағдайларға байланыслы l_{eff} шамасын температурадан ғәрзели емес, ал C_V ның шамасы T^3 ке пропорционал деп есаптай аламыз. Демек жыллылық өткизгишлик коэффициенти $K T$ температураның кубына пропорционал деп жуўмақ шығарамыз. Бул жағдайдың дұрыслығы экспериментлерде анық тастайықланады.

Солай етип жыллылық өткизгишлик коэффициенти $K T$ ның температурадан ғәрзелигин теориялық жоллар менен түсіндіриў мүмкін. Бул ғәрзелик 3.18-сүйретте келтирилген. Бул сүйретте $K T$ ның 20-50 K температурада максимумға ийе болатуғынлығы ҳәм төменги температураларда да, жоқары температураларда да кемейтуғынлығы көринип тур.

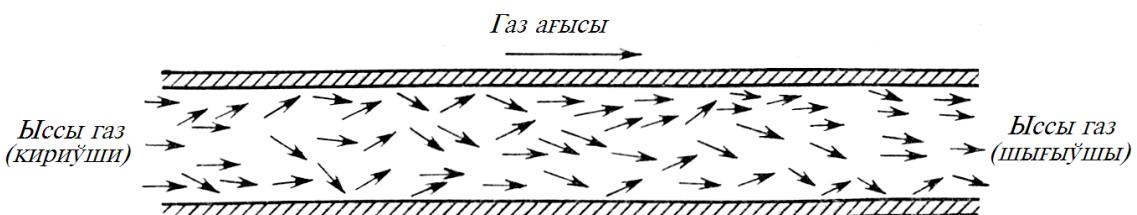


3.18-сүйрет.

Кристаллық диэлектриклер ушын жыллылық өткизгишлик коэффициентиниң температурадан ғәрзелигиниң схема түринде көрсетилий.

Биз жоқарыда фононлардың жыллылық өткизгишлик процессине қосатуғын үлесин қарап өттік. Ал жыллылық энергиясын өткизгишлер деп аталатуғын затлардағы еркин электронлар да алып жүре алады. Әдетте еркин электронлар өткизгишлерде жыллылық өткизгишликке фононларға салыстырғанда әдеўір үлкен үлес қосады.

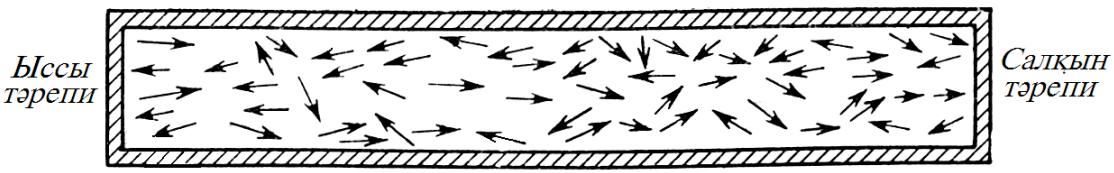
Биз төменде көргизбелилік мақсетінде фононлар тәрепинен жыллылықтың алып жүрилийи бойынша бир неше сүйретлерди келтиремиз (Фн-1 - Фн-4 сүйретлер).



Фн-1 сүйрет.

Газ молекулаларының узын ҳәм ушлары ашық най арқалы ағыўы (най дийўалларында сүйкеліс болмайды деп есаптаймыз). Газ молекулаларының бир бири менен серпимли соқлығысыулары толық импульсти ҳәм ағыстың энергиясын өзгертпейди. Себеби ҳәр бир

соқлығысыўда соқлығысыўшы бөлекшелердин массалар орайының тезлиги ҳэм олардың толық энергиясы өзгериссiz қалады. Соныктан температураның градиенти болмаған жағдайда да найдың шеп тәрепинен он тәрепине энергияның ағысы орын алады. Демек жыллылық қарсылығы нолге тең, ал жыллылық өткізгішликтиң шамасы шексиз үлкен.



Фн-2 сұйрет.

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

Соқлығысыўшы молекулалардың температуралар градиенти бар болған жағдайда массалар орайының тезлиги орташа тезликтен жоқары болған молекулалар шеп тәрепке, ал массалар орайының тезлиги орташа тезликтен төмен болған молекулалар шеп тәрепке қарай қозғалыў тенденциясына ийе болады. Он тәрепте үлкен болған концентрацияның үлкен емес градиенти массаның қосынды көшийінин нолге шекем кемейиүин, ал найдың ыссы тәрепинен салқын тәрепине қарай энергияның көшийін тәмийинлейди.



Фн-3 сұйрет.

Фононларды узын кристалдың бир ушында пайда етиў мүмкін (мысалы шеп тәрептеги ушын «фононлық» лампа менен жақтыландырсақ). Усының нәтийжесинде кристалдың шеп тәрепинен он тәрепине қарай фононлар аға баслайды. Егер кристалда шашыраўдың тек әдеттеги (нормал) процесси (яғни N-процесс) орын алса (бундай процессте $k_1 + k_2 \rightarrow k_3$ ямаса $k_1 + k_2 \rightarrow k_3 + k_4$ тенликлери орынланады) соқлығысыўларда фононлар ағысы толық импульсін саклайды ҳэм фононлардың бир бөлеги кристалдың барлық узынлығы бойынша ағып өтеди. Шеп тәрептеги кристалдың ушына келип жеткен фононлардың (принципинде) нурларға айландырыў мүмкін. Усының нәтийжесинде фононлардың ағысы тамам болады (орысшасы «сток фононов»). Бул жағдайда да Фн-1 сұйреттеги жағдай орын алады ҳэм жыллылық қарсылығы нолге тең.



Фн-3 сұйрет.

$k_1 + k_2 \rightarrow k_3 + G$ тенлиги орын алатуғын ылактырыў процесси (U-процесслер) орын алатуғын болса ҳәр бир шашыраў актинде фононлардың импульси күшли өзгереди. Он тәрепке қарай қозғалыўшы фононлар дәстеси тез ыдырайды. Кристалдың ушлары «дереклер» болып та, фононлардың ағысы «жоғалатуғын» (сток) орын болып та хызмет етеди. Температуралар градиенти болған жағдайда энергияның көшийі Фн-2 сұйреттеге көрсетилген жағдайдағыдан болады.

Кристаллардың электрлик қәсийетлери

Кристаллық денелер бир бириңен электрлік қәсийеттери бойынша күшли айрылады. Мысалы металлар электр тоғын жақсы өткереди. Соныңтан оларды өтизгишлер деп атайды. Ал айрым кристаллар электр тоғын пүткиллей өткермейди. Оларды изоляторлар деп атайды. Қатты денелер арасында ярым өткизгишлер деп аталатуғын заттар да бар. Олар электр өткизгишилигі бойынша көпшилик жағдайларда металлар менен ярым өткизгишлердин арасын ийелейди. Электр өткизгишиликтиң бундай үлкен айырмасы кристалды пайда етиші атомлардың электронларының энергиялық қәддилер бойынша тарқалығына байланыслы. Бундай тарқалығының түрине затты қураушы атомлардың кенисликтегі дәүирли жайласыўлары күшли тәсир жасайды. Бул атомлар кенисликте үш өлшемли дәүирли потенциал пайда етеди, ал бул потенциалдың майданында электронлар қозғалады. Электронлардың қозғалысына кристаллық пәнжередеги олардың дифракциясы күшли тәсир етеди. Бундай дифракцияның нызамлықлары хақында жоқарыда толық айтылып өтилди.

Енди биз электронлардың кристаллық пәнжерениң дәүирли потенциалындағы қозғалысын үйрениүге өтемиз. Бул қозғалыс кристаллардың электрлік қәсийеттерин түсіндіре алады. Айрықша дыққат ярым өткизгишлердеги процесслерди көріп шығыўға арналған. Соның менен бирге ярым өткизгишлер техникасы ушын әхмийетли болған дүзилислердин ислеў принциплері қарап өтиледи.

Қатты денелердеги электронлық ҳаллар

Қатты денелердеги электронлық ҳалларды қалай есаплайды? Кристадағы ҳәр бир электрон атом ядролары ҳәм басқа электронлар тәрепинен дөретилген қурамалы майданда қозғалады. Бундай жағдайда кристал ишиндеңде электрон ушын Шредингер теңлемесин шешиү ҳәм усының нәтийжесинде электронның энергиялық ҳалларының системасын табыў шешимиўи қыйын болған мәселелердин бири болып табылады. Бундай теңлемени ҳәзирги үақытларға шекем шешиүдин мүмкіншилиги жоқ. Соныңтан усындағы мәселени шешиү ушын әпиүайыластыратуғын ҳәр қыйлы жақынласыўлардан пайдаланады.

Бириңишен, атомлардың ядросы ҳәм ишкі қабықларда жайласқан электронлар қабықларын өз ишине алатуғын ионлардың тулғалары потенциалындағы сыртқы электронлардың қозғалысын ғана қарайды. Бундай жағдайда ионлардың тулғаларының әдеўир әззи потенциалындағы электронлар ушын Шредингер теңлемеси шешиледи. Мәселе әдеўир әпиүайыласады. Бирақ усы усылдың жәрдемінде де электронның сондай қозғалыслары ушын жұдә әпиүайыластырылған (тийкарынан үш өлшемли емес, ал бир өлшемли) мәселелерди шешиүдин сәти тұсти. Төменде дәүирли потенциалдағы электронның бир өлшемли қозғалысы ҳақындағы шешимнин (Крониг-Пенни модели) нәтийжелерин қарап шығамыз.

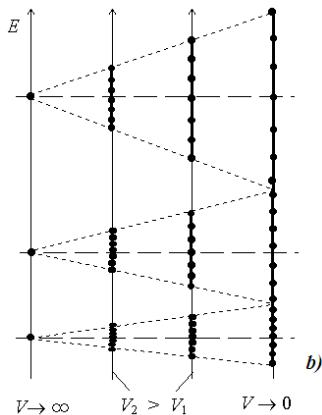
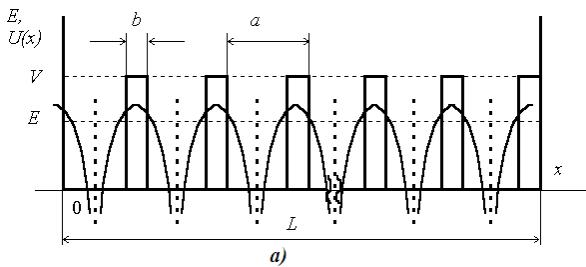
Екиншиден, дара жағдайдардың кең тарқалған төмендегидей еки түрін қарайды: 1) күшли байланыс жақынласыўы ҳәм 2) дерлик еркін электронлар жақынласыўы.

Күшли байланыс жақынласыўында электронның өзиниң атомы менен тәсир етисиў энергиясы басқа атомлар менен тәсир етисиў энергиясынан көп есе үлкен деп есапланады. Басқа сөз бенен айтқанда электронлар өзлериниң атомлары менен күшли байланысқан, ал сол өзлериниң атомларына басқа атомлар электромагнит майданлары менен әззи тәсир етеди. Бирақ сол электромагнит майданлары атомның энергиялық қәддилерин бир неше қәддилерге ажыратады. Усындај жоллар менен атомның энергия қәддилери сырттан түсирилген магнит майданының тәсиринде де бир неше қәддилерге ажыралады. Бундай қубылысты Зееман эффекти деп атайды. Бундай жағдайда атомлардың бир бири менен тәсирлесиўи изоляцияланған атомның энергиялық қәддилеринин сүйретин шамалы ғана өзгертеди.

Дерлик еркин электронлар жақынласыўында электронларды ион тулғаларының әззи потенциалында дерлик еркин қозғалады деп есаптайды. Ал ионлардың тулғаларының әззи потенциалын киши тұрткі (возмущение) деп қараў қабыл етилген. Бундай жағдайда электронның кинетикалық энергиясының мәниси ион менен тәсирлесій энергиясының мәнисинен үлкен болады. Бул илимий көз-қарастан да, методикалық көз-қарастан да ең сәтли болып шыққан усыл ҳәзирги ўакытлары тәжирийбелерде бақланып жүрген дерлик барлық нызамлықтар менен эффектлерди көрсетпели етип түсиндирмекте.

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

Крониг-Пенни усылы. Крониг-Пенни усылында әпиўайы формаға иие дәйирил потенциалдағы электронның бир өлшемли қозғалысы үйрениледи: кеңлиги L ге тең, бир биринен a қашықтығында жайласқан бир өлшемли потенциал шуқырлар арасында туры мүйешли барьерлер жайласқан. Олардың ҳәр қайсысының бийиклиги V шамасына, ал кеңлиги b шамасына тең (4.1-сүүретке қараңыз). 4.1-сүүретте тутас жиңишке сыйықтар менен белгилендеги ионлық тулғалардың ҳақыйкый потенциалы менен туры мүйешли потенциаллық барьерлер арасында үлкен айырманың бар екенligин өз-өзинен түснікли. Бирақ усындағы туртайы модель кристалда қозғалатуғын электронлардың энергиялық спектриндеги нызамлықтарды түснідирип бере алады.



4.1-а сүүрет.

Крониг-Пенни моделиндеги потенциал энергияның түри (a) ҳәм энергия E ниң потенциал $U(x)$ тың бирликлериндеги рұқсат етилген мәнислериниң тарқалыўының схемасы (b).

4.1-б сүүрет.

Крониг-Пенни моделиндеги потенциал энергияның түри (a) ҳәм энергия E ниң тарқалыўының схемасы (b).

Жоқарыда көрсетилгендей потенциал шуқырдағы Шредингер теңлемесин жуўық түрде шешиў методлары көпшиликтегі белгилі. Теңлемени шешиўдің нәтийжесинде электронның энергиясы E ниң қәлелеген мәниске емес, ал айырым рұқсат етилген ҳәм қадаған етилген мәнислериниң бар болатуғынлығын көриүге болады (4.1-сүүретке қараңыз). E шкаласындағы усы E шамасының рұқсат етилген мәнислериниң болмайтуғын участкасын қадаған етилген энергиялық зона деп атайды (гейде қадаған етилген энергиялық жолақ деп те атайды). Ал E ниң рұқсат етилген мәнислері жайласқан зонаны рұқсат етилген энергиялық зона деп атайды (ямаса рұқсат етилген энергиялық жолақ деп атайды).

4.1-(а) сүүретте келтирилген потенциаллық барьерлердин бийиклиги менен кеңлиги өзгергенде электронлардың қәддилер бойынша тарқалыўының өзгерислерин анықлау қызықты мәселелердин бири болып табылады.

Барьерлер болмағанда мәселе кеңлиги L болған бир өлшемли потенциал шуқырдағы электронның қозғалысы хақындағы мәселеге айланады. Бундай жағдайда толқын функциясы Ψ ушын дәүири шегаралық шәрт сайлап алынады. Электронның энергиясының мәнислери 4.1 (b) сүүретте келтирилген. Энергияның рұқсат етилген мәнислери шкала бойынша толтырылмаган айтартылған үлкен орынларға ийе емес.

Егер барьерлер бийик ҳәм кең болса олар арқалы электронлардың туннеллениүин есапқа алмау мүмкін. Бундай жағдайда мәселе электронның кеңлиги $a - b$ болған бир өлшемли потенциал шуқырдағы қозғалысы хақындағы мәселедей мәселеге ийе боламыз. Электрон бул киши потенциал шуқырда локалланған болады (тап «өзинин» атомында локалланған сыйқы). E шкаласындағы электронның энергиясының мәнислериниң тарқалыуы 4.1-b сүүретте келтирилген. Энергияның рұқсат етилген мәнислери бир бириңен изоляцияланған.

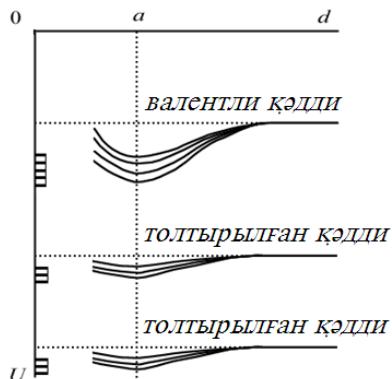
Барьерлердин бийиклиги менен кеңликлери аралықтың мәнислерге ийе болса (яғни жүдә үлкен де, жүдә киши де болмаса) энергия E ниң мәнислерин жууық усыллардың жәрдеминде есаплайды. Бул жағдайдағы энергияның рұқсат етилген мәнислери 4.1 b сүүретте көрсетилген жағдайдағыдан болады. Бул сүүретте барьерлердин бийиклиги үлкейгенде рұқсат етилген ҳәм қадаған етилген энергия зоналарының шегаралары орналасқан орынлар өзгериске ушырайды. Атап айтқанда қадаған етилген зоналар рұқсат етилген зоналардың есабынан кеңейеди. Потенциал барьерлер арқалы өтиў дерлик мүмкін болмай қалған жағдайларда зонаның кеңлиги бир қәддиниң кеңлигине (бир сзықтың кеңлигине) шекем киширеяди. Бундай ситуация изоляцияланған атомлар ушын тән, электрон өз атомының дөгерегинде локализацияланған. Бул құшлы байланыс жақынласыўына сәйкес келеди.

Күшли байланыс жақынласыўы. Бул жақынласыўда берилген атомдағы электронның байланыс энергиясы бул электронның басқа атомлар тәрепинен пайда етилген майданлар менен тәсир етисіү энергиясынан жоқары деп есапланады. Бундай жағдайда конденсацияланған заттағы (кристаллардағы ҳәм сүйиқтылардағы) электронлық ҳаллар изоляцияланған атомлардағы электронлық ҳалларға уқсас болады. Себеби бундай жағдайларда атомлардың бир бири менен тәсирлесіүлери атомының электронлық ҳалларын өзгерте алмайды.

Күшли байланыс жақынласыўы өзлериниң электронларын беккем услап турыўшы атомлардағы (ионлық ҳәм ковалентли кристаллардағы атомлар) электронлардың энергия қәддилериниң системасын жақсы тәриплейди. Қәддилер системасының түрин былайынша анықтаймыз: атомлар өзлери пайда еткен электр ҳәм магнит майданлары арқалы басқа атомларға тәсир етеди, бул майданлар басқа атомдағы энергияның бир қәддин бир неше қәддилерге ажыралыуын болдырады. Демек биз қарап атырған жағдайда конденсацияланған заттағы изоляцияланған атомлардағы энергияның бир қәдди орнына энергияның базы бир диапазонында жайласқан көп санлы қәддилер жыйнағы пайда болады. Бундай жыйнақты энергиялық жолақ ямаса рұқсат етилген энергиялық зона деп атайды.

Дәслеп бир бириңен үлкен қашықтыларда жайласқан N дана атомларды қараймыз. Бундай жағдайда атомлар арасындағы тәсирлесіүди есапқа алмауға болады ҳәм олардың ҳәр қайсысын өз алдына алып қараў керек. Атомлардың барлығы да бирдей энергиялар қәддилерге ийе. N дана атомнан туратуғын системаның қәддилери $2N$ есе айныған болып шығады. Бул жерде 2 саны спинди есапқа алғанда пайда болады. Атомлар бир бирине жақынласқанда тартысыўдың салдарынан атомлардың энергиясының төменлеүинин ақыбетинде энергия қәддилери төменлейди. Усының менен бир қатарда атомлар бир бири менен қанша жақын жайласса энергия қәддилериниң де соншама бөлеклерге бөлинүйи күшнейеди (расщепление). Себеби атомлар бир бирине жақын келгенде олар пайда еткен майданлар үлкейеди. Атомлар кристаллық пәнжерениң дәүириндегі аралыққа шекем жақынласқанда қәддилер энергиясының минимумының орын алыўы керек. Себеби бир бирине буннан былай жақынласқанда атомлар бир бири менен ийтерисе баслайды ҳәм

тәсирлесиў энергиясының мәниси кескин түрде өседи. Бундай жағдайда атомлардың қәддилеринің энергиясының атомлар арасындағы қашықтыққа қатнасы 4.2-сүйретте схема түрінде көрсетілгендей болады. Әлбетте сыртқы валентлик электронлар турған қәддилер ең көп санлы бөлеклерге бөлинеди.



4.2-сүйрет.

Атомлар қәддилеринің энергиясының олар арасындағы қашықтық d ға байланысы.

4.2-сүйретте айнымаған қәддиге жуўап беретуғын ҳәм N дана изоляцияланған да, кристалды пайда еткен де атомларға тийисли болған электронлардың ҳалларының улыўмалық санларының $2N$ ге тең болатуғынлығын көрсетеди (2 саны электронның спинин есапқа алышындағы нәтийжесинде пайда болады, ҳәр бир айнымаған қәддиге электронның спининиң ҳәр қыйлы бағытларына сәйкес келетуғын еки ҳал туўры келеди). Солай етип бир зонадағы ҳаллардың саны $2N$ ге тең болады деген сөз.

Изоляцияланған атомның бир қәддине жуўап беретуғын ҳаллардың саны тек екіге тең емес, ал бул қәдди айныған болса ҳаллардың санының көп болыўы мүмкін (бундай жағдай водород атомының р ҳалы ушын орын алады). Бундай жағдайда ҳаллардың улыўмалық санын $2N$ ге изоляцияланған атомның бул қәдди ушын айныўдың ретлигине (кратность) көбейтиў жолы менен табамыз.

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

Дерлик еркін электронлар модели. Атомларының сыртқы электронлары орталыққа берилетуғын ҳәм усының нәтийжесинде олардың кристал бойлап еркін қозғалыў мүмкіншилигине ийе кристаллық заттардың үлкен топары белгіли. Бундай топарға бириңиши гезекте металлар киребі. Бундай заттар ушын дерлик еркін электронлар модели сәтли түрде испел шығылған моделлердин бири болып табылады. Бул модель шеклеринде электронлар кристалларда өлшемлери кристалдың өлшеми менен бирдей болған потенциал шуқырда дәйирли түрде жайласқан ионлық тулғалардың әззи майданында қозғалады. Бул әззи майдан киши қозғалаң (малое возмущение) түрінде есапқа алынады.

Ең бириңи жақынласыў сырттында кристаллардағы электронлардың қандай қәсийетлерди көрсететуғынлығын тәриплей ушын электронлық Ферми-газ модельинен пайдаланады. Бул модельдин айрықша әхмийетине байланыслы бул теорияның тийкарғы нәтийжелерин қарап шығамыз. Оларды қысқаша еркін электронлар жақынласыўы деп те атайды.

Электронлардың толқын векторлары кеңислигидеги электронлық ҳаллар системасын қабырғасының узынлығы L ге тең куб формасына ийе үш өлшемли қублық потенциал куты ушын Шредингер теңлемесин шешиў жолы менен алады. Ψ толқын функциясы ушын дәйирли шегаралық шәртлер берилгенде электронлық ҳаллар системасы $k = (k_x, k_y, k_z)$ толқын векторларының төмендегидей мүмкін болған мәнислері 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 арқалы пүтин санлар белгиленген. L шамасының үлкен екенлигине байланыслы k_x, k_y, k_z шамаларының өзгериў адымларының киши болатуғының аңғарамыз. Соныңтан $k = (k_x, k_y, k_z)$ шамасына тәрелли болған функцияларды k векторының үзлиksiz функциялары сипатында қаралады.

Электронлардың толқын функциясы мынадай түрге ийе болады:

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

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

Электронлардың кинетикалық энергиясы тәмендеги формуланың жәрдеминде есапланады (олардың потенциаллық энергиясы нолге тең):

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

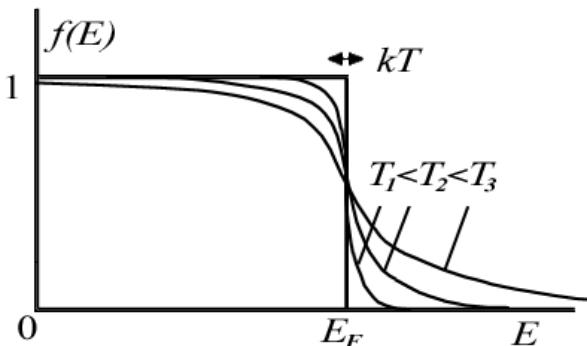
$T = 0$ температурада барлық N электрон Паули принципине бағынған ҳалда (хәр бир ҳалда 1 ден артық емес электрон) E ниң ең киши мәнислерине ийе болған ҳалларды ийелейди. Бундай жағдайда k -кеңисликте барлық ийеленген ҳаллар радиусы k_F болған сфераның (шардың) ишинде болады. Бундай шардың бетин Ферми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

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

Температура жоқарылағанда ҳаллардың электронлар менен толық итималлығы тәмендегидей түрге ийе болған ҳаллардың толтырылыў функциясы арқалы есапланады:

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

Бул функцияның хәр қыйлы температуралардағы графикилері 4.3-сүйретте келтирилген.



4.3-сүйрет.
Ферми-газ электронларының хәр қыйлы температуралардағы ҳалларды толтырыў функциясы.

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

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

Солай етип температураның жоқарылауы к-кеңисликтеги Ферми бетинин азмаз жайылышына алып келеди екен.

Дерлик еркин электронлар моделиндеги ионлық тулғалар потенциаллары дәүири кристаллық пәнжерениң параметрлерине сәйкес келетуғын дәүирли функция түринде қабыл етиледи. Бундай дәүирли функция ушын төмөндегидей 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 киши областта ғана үлкен мәниске ийе болады деп есаплаймыз. Бул ядролардың зарядын ионлық тулғалардың электронлары тәрепинен экранлаудың ақыбетинде жүзеге келеди. Соныңтан ионлық тулғалардың потенциалларын киши қозғалаң сипатында есапқа алаңыз.

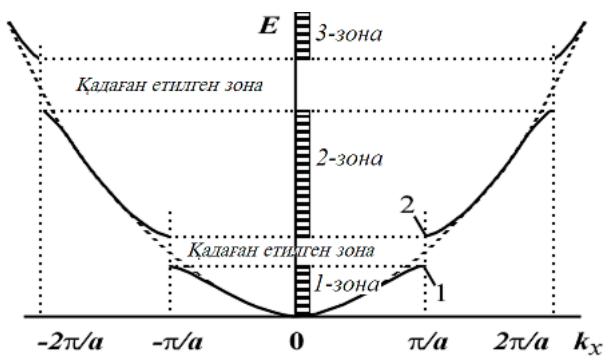
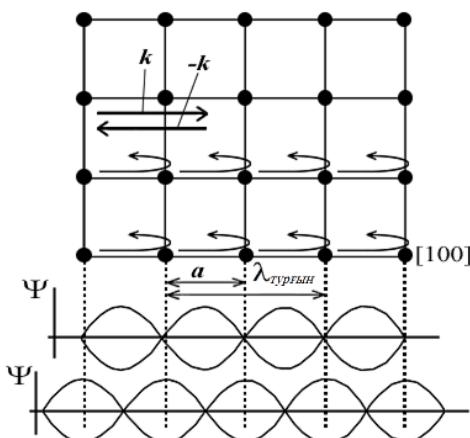
Блох теоремасын пайдаланамыз. Бул теорема бойынша потенциал энергиясы (4.7) түрине ийе болған дәүирли майдан болған жағдайда (4.2)-толқын функциясының түримина формулаға сәйкес өзгереди:

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

Бул аңлатпада $u_k(r)$ арқалы k ҳәм r шамаларынан ғәрэзли болған дәүирли функция белгиленген. Оның дәүири ионлық тулғалардың потенциалы болған $U(r)$ потенциалының дәүирине тең. Дерлик еркин электронлар жақынласыуында кристалдың ишиндеги барлық кеңисликте $u_k(r)$ шамасының мәнисин бирге жақын деп есаплады. Тек ионлық тулғалардың ишиндеги «киши» областларда ғана оның мәниси бирден азмаз парық қылады.

Дерлик еркин электронлар модельинде ионлық тулғалардың дәүирли майдынын есапқа алыў энергияның толқын векторынан ғәрэзлигине (мысалы оның кристалдағы бағытынан) алып келеди. Усының салдарынан Ферми бети сфералық бет болып қалмай, ол қурамалы формаға ийе болады. Бирақ Ферми бети сфералық симметрияға ийе болып қала береди. Себеби кристалда электронның энергиясының k векторынан ғәрэзлигинде $E(k) = -E(-k)$ теңлиги орынланады.

$E(k)$ функциясының Бриллюэн зонасы қасындағы ең әхмийетли өзгешеликлерин көрсетемиз. Көрсетпелилік ушын дәүири a ға тең болған әпиүайы кублық пәнжерени қараймыз. Мейли электрон [100] бағытында қозғалсын ҳәм $k = (k, 0, 0)$ толқын векторына ийе болсын. (4.4 а сүрүрет). Егер биз ионлық тулғалардың майданларын есапқа алмасақ энергияның толқын векторынан квадратлық ғәрэзлигин алған болар едик. Бул жағдай 4.4 (b) сүүртте келтирилген.



a)

b)

4.4-сүрет. Дәүири *a* болған кристаллық кублық пәнжереде электронлық толқынлардың тарқалыуының ҳәм усы пәнжереде турғын толқынлардың пайда болыуының схемасы (а).

Еркин электронлар ҳәм дерлик еркин электронлар моделлеридеги электронның энергиясының оның толқынлық векторынан ғәрзелиги (б)

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

Турғын толқынлар кублық пәнжерениң түйинлеринде ямаса түйинлердин дәл орталарында «дөңесликлерге» ийе болады (4.4 а сүретте көрсетилген). Усындай дөңесликлердин басқа орынларында пайда болыуының мүмкін емес екенлигин аңсат аңғарыўға болады. Себеби егер бундай болмағанда кристаллық пәнжереге салыстырғанда электронлық бултлардың дөңесликлериниң жайласыўларындағы симметрия бузылған болар еди.

Толқын функциясының модулинин квадраты менен электронды табыудың итималлығының тығызлығы менен кристалдағы орташа электронлық тығызлықтың байланыслы екенлиги мәлім. Турғын толқынның кенейген орынлары (бул орынларда электронның толқын функциясы да, электронлық тығызлықтың максимумы да үлкен мәнислерге ийе) кристаллық пәнжерениң ионларына сәйкес келсе терис зарядланған электронлық булт пенен он зарядлы ионлар арасындағы тәсир етисиүге жуўап беретуғын Кулон энергиясының мәнисинин киши болатуғынлығы түснікли. Солай етип $k = \pi/a$ шәрти орынланғанда $E(k)$ ның бир емес, ал еки ҳәр қыйлы болған мәниси болады. $E(k)$ шамасының k ның басқа мәнислеринде ұзликсизлигин есапқа алып $E(k)$ ның ғәрзелигин 4.4b сүреттегидей етип көрсетиў мүмкін.

Бул нәтийжени толқын векторы [100] бағытына параллель емес болған жағдайлар ушын да улыўмаластырыў мүмкін (4.4 а сүрет). k векторының ушы Бриллюэн зонасының шегарасына түскен жағдайда (1.20)-аңлатпаға сәйкес Вульф-Брэгг шәрти орынланады ҳәм интенсивли шағылысқан толқын пайда болады. Бул жағдайда да жоқарыда қарап өтилген жағдайдағыдан турғын толқынлардың пайда болыуы жүзеге келеди. Бул жағдай болса өз гезегинде $E(k)$ шамасының ұзилиске түсиүин тәмийинлейди. Солай етип Бриллюэн зоналарының шегараларында $E(k)$ ғәрзелигинде ұзилис орын алады.

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

4.4 b сүреттеги 1 ноқатына ионлық тулға қасында электронлық тығызлығы ең жоқары болған электронлардың ҳалы, ал усындай формаға жақын формаға изоляцияланған атомлардың салыстырғанда 2 ноқатына ионлық тулғаның қасында ең киши электронлық тығызлыққа ийе электронның ҳалы, ал усындай формаға жақын формаға изоляцияланған атомлардың р-электронларының ҳаллары жақын. $E(k)$

функциясының үзилиске түсіү нοқатына с ҳалларды еске түсиретуғын ҳаллардың толтырылыуының тамам болыұы ҳәм р ҳалларына сәйкес келетуғын ҳаллардың толтырылыуы басланады деп есаплайды. Бул ҳаллардың энергиялары бир бириңен сезилерліктей айырмаса ийе болыұы керек.

Солай етип күшли байланыс моделиндегидей, дерлик еркин электронлар моделинде де электронлардың энергияларының шкаласында энергияның руқсат етилген ҳәм қадаған етилген участкалары бар болады екен. Бундай участкаларды руқсат етилген ҳәм қадаған етилген зоналар деп атайды. Ҳәр бир руқсат етилген зонадағы ҳаллардың саны кристалдағы атомлардың санына еки есе көп. Толқын векторлары кеңислигінде k векторының руқсат етилген бир мәнисине нοқатлар сәйкес келеди, ал (4.3) ке сәйкес сол нοқатлар қабыргаларының узынлығы $2\pi/L$ болған кублық кутышаларды толтырады. Кристалдың өлшемлери үлкен болғанда бул нοқатлар жүдә тығыз жайласқан болады. Соныңтан электронлық ҳалларды қарағанда бундай дискретлікти есапқа алмайды: Ферми бетин тегис бет, ал ҳаллар тығызылығы функциясын тегис (басқышларға ийе емес) деп есаплайды.

Кристаллық пәнжередеги электронлардың динамикасы. Кристаллық пәнжерениң дәүирли потенциалы есапқа алынганда да электронның кристаллық пәнжере бойынша қозғалысы менен электронның еркин кеңисликтеги қозғалысы арасында айтарлықтай айырманың болмайтуғының келип шығады. Бул квант теориясының әхмийетли ҳәм күтилмеген нағайжелеринң бири болып табылады. Бул жағдайды қарап өтемиз.

Электронның кристалдағы қозғалысын үйренгенде анықсызлық қатнасын пайдаланыў 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 кириўши электронды кеңисликтин δx областында табыўдың итималлығы ҳаққында гәп етиледи. Импульс пенен байланыслы болған электронның толқын векторы да $\delta k \approx 1 / (2\delta x)$ шамасындай анықсызлыққа ийе болады.

$$\Psi = A \exp(ikr) , \quad (4.10)$$

түриндеги теңлеме еркин электронның толқын функциясы болғанлықтан базы бир диапазонда δk мәнисине ийе электронға толқын пакети сәйкес келеди. Толқын пакетинин 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 ҳәм усы пакет пенен байланыслы болған областтың кеңисликтеги орын алмастырыў тезлигин тәриплейди. Кеңисликтин белгілі болады. 4.4-сүйретте группалық тезлик $E(k)$ ғәрэзлигине түсірилген урынбаның қыялышының тангенсine тен (тезликти табыў ушын оны \hbar қа көбейтіў керек). Бриллюэн зонасының шегарасында турғын толқын пайда болады ҳәм энергияның көшийи орын алмайды, группалық тезлик нолге тен. Соныңтан $k = \pi/a$ нοқатында $E(k)$ функциясы горизонт бағытындағы урынбаға ийе. Бундай жағдайда $E(k)$ функциясы кеминде бир пергіб нοқатына ийе болыұы керек (4.4 б сүйрет).

Топарлық тезлик түсіниги ҳаллардың үш өлшемли тарқалыуы ушын да улыўмаластырылады: үш өлшемли k кеңислигінде группалық тезлик векторы $E(k)/\hbar$ функциясының градиенти түринде бериледи. Оның бағыты Ферми бетине перпендикуляр.

Электронды классикалық бөлекше деп қараймыз ҳәм оның F күшинин тәсириндеги қозғалысын қараймыз. Группалық тезлик v_g шамасының қалай өзгеретүгіншілігін үйренемиз. Буның ушын v_g шамасынан ўақыт бойынша туғынды аламыз (классикалық механикадағы тезлениүдің аналогы). F күши менен группалық тезлик v_g векторлары өзара параллель деп есаптаймыз (яғни бир туғынды бойында бир көшер бағытында жайласқан). Бундай жағдайда F пенен v_g шамаларының усы көшерге түсірілген 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 мүмкін:

$$\frac{\partial v_g}{\partial t} m_* = F \quad (4.13)$$

Егер

$$m_* = \hbar^2 / \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right) \quad (4.14)$$

деп есапласақ биз Ньютоның екинши нызамына үқас 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 дәүирли потенциалының тәсири жанапай түрде есапқа алынған. Демек күтилмеген нәтижеге ийе болдық: кристаллық дәүирли майдан вакуумге салыстырғанда электронның қозғалыс картинасына өзиниң күшли тәсирин тийгизбейди, ал электронның тек эффективли массасын өзгертеди екен.

Электронның эффективлик массасы электронның кестелерде берилген массасынан әдеүир айырмаға ийе. (4.14)-формула бойынша эффективлик масса электронның ҳәр қыйлы толқын векторы ушын ҳәр қыйлы мәнислерге ийе болады. $E(k)$ функциясының екинши тәртипли туғындысы жәрдеминде 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 түсірілген күш электронды тезлендирмейди, ал тормозлайды. Бундай тормозланыў электронның қозғалысына кристалдың дәүирли потенциалының тәсири менен байланыслы. Бундай электронлар сырттан түсірілген электромагнит майданында массасы терис, ал заряды оң болған бөлекшелердин қәсийетлериндей қәсийетлерге ийе болады. Бундай бөлекшени массасы терис мәниске ийе ямаса заряды оң мәниске ийе бөлекше деп қараў мүмкін. Себеби сырттан түсірілген электромагнит майданда бөлекшениң тезлениўи өзиниң белгисин массасының белгиси өзгергенде ямаса зарядының белгиси өзгергенде өзгертеди. Бундай

оң зарядланған бөлекшелерди тесикшелер (дыркалар) деп атаў қабыл етилген. Тесикшелердин қозғалысы хаққында төменде гәп етиледи.

4.4 (b) сүйреттеги перегиб ноқаты (4.14)-аңлатпаға сәйкес шексиз үлкен (ямаса оғада үлкен) эффектив массаға сәйкес келеди. Бундай электрон өзинин тезлигин сырттан тусирилген күшлердин тәсиринде өзгерте алмайды.

Электронлардың көпшилиги ушын эффектив массаның мәниси оң. Мысалы ярымы ямаса оннан да кеми толтырылған зоналардағы электронлар оң мәнисли эффектив массаға ие (4.4 b сүйретте келтирилген). Терис мәнисли эффектив массаға Бриллюэнниң биринши зонасының шегарасы қасындағы ҳалларда турған электронлар ие.

Мәселе. Эпиүайы кублық кристаллық пәнжереге ие, пәнжере турақтысы 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 турақтысы 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 күтішшаның көлемі сәйкес келеди. Де-Бройль толқынының минималлық узынлығына ($\lambda_{B/min}$ шамасына) электронның максималлық импульси сәйкес келеди ҳәм электронның максималлық энергиясы Ферми энергиясы болып табылады. Буннан (4.3)-аңлатпа тийкарында мына шамаларды анықлау мүмкін: $\lambda_{B/min} = \frac{2\pi\hbar}{p_F} = 2\pi\hbar / \sqrt{2mE_F}$. a менен $\lambda_{B/min}$ шамалары бир бирине барабар болып шығады. Ферми-газ теориясына сәйкес Ферми-газ электронлары ушын ҳаллардың тығызлығы функциясы мына түрге ие болады:

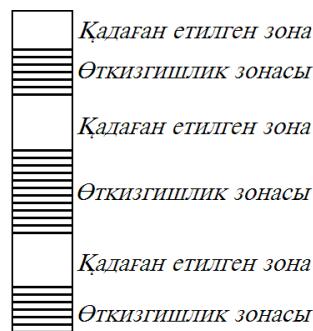
$$g(E) = V(\sqrt{2m^{23}} / \hbar^3 \pi^2) E^{1/2} = Const \cdot E^{1/2}$$

$dN = g(E)dE = g(\lambda)d\lambda$ аңлатпасын ҳәм $\lambda = 2\pi\hbar / \sqrt{2mE}$ формуласын пайдаланып электронлардың де-Бройль толқыны узынлықтары бойынша тарқалыу функциясын алыу мүмкін. Соңғы формуланың жәрдемінде E, g, E, dE шамаларын λ арқалы аңлатып, буннан кейин барлық аңлатпаларды dN ушын жазылған аңлатпаға қойып $g(\lambda)$ функциясын алыу мүмкін.

Диэлектриклер ярым өткізгишлер ҳәм өткізгишлер

Зоналардың электронлар менен толтырылыу харakterи затлардың электр өткізгишлик механизмдерин анықтайтын ҳәм затлардың диэлектриклерге, ярым өткізгишлерге ҳәм өткізгишлерге бөлинійін түсіндіреди.

Ең дәслеп ең киши энергиялы зоналардың толтырылатуғынлығына итибар беремиз. Олар электронларға толығы менен толтырылады. Толық толтырылған, бирақ ең үлкен энергияға ие зонаны валентли зона деп атайды. Буннан кейинги өткізгишлик зонасы деп аталатуғын зона толтырылмаған болыу да, шала толтырылған болыу да мүмкін (4.5-сүйрет). Толтырылмаған зона ярым өткізгишлерде ҳәм диэлектриклерде, ал толық толтырылмаған (биз оны шала толтырылған деп атадық) зоналар өткізгишлерде болады. Бул еки жағдайды толық түрде қарап шығамыз.



4.5-сүйрет.
Затлардағы энергиялық зоналардың толтырылыу схемасы

Өткізгішлер. Егер өткізгішлик зонасы толық емес толтырылған болса, онда электронлар менен ийеленген ҳаллар Ферми бетининде жайласады, ал Ферми бети болса симметрия орайына ийе. Бундай жағдайда қәлекен k толқын векторына ийе электронға толқын векторы $-k$ болған электрон сәйкес келеди. Бул еки электронның импульслериниң қосындысы нолге тең (яғни тезликлериниң қосындысы да нолге тең). Соныктан олар зарядтың көшийине (перенос заряда) ҳәм электр тоғының пайда болыуына үлес қоспайды (4.6-сүйрет). Егер сырттан электр майданын ҳәм оған байланыслы болған F күшин түсірсек, онда ситуация өзгереди (4.6-сүйрет): толқын векторы k шамасының F векторының бағыты менен бағытлас болған 1 электронның ҳалы толқын векторы k шамасының F векторының бағытына қарма-қарсы болған 2 электронның ҳалына қарағанда энергиялық жақтан утымлы болмайды. Бундай жағдайда электронлар ушын қайтадан топар дүзүй утымлы болады ҳәм Ферми бетинин астындағы А ҳалын босатады ҳәм Ферми бетинин үстиндеғи В ҳалын ийелейди (4.6-сүйрет). Электронлардың бундай тарқалыуында қосынды (суммалық) тезлик нолге тең болмайды ҳәм электр тоғына үлес қосады. Өткізгіш деп аталатуғын бундай зат электр тоғын жақсы өткизеди. Бул жағдай сыртқы электр майданында электронлардың ҳаллар бойынша қайтадан бөлистирилий (тарқалыў) мүмкіншилигинин бар екенлегиниң салдарынан жүзеге келеди.

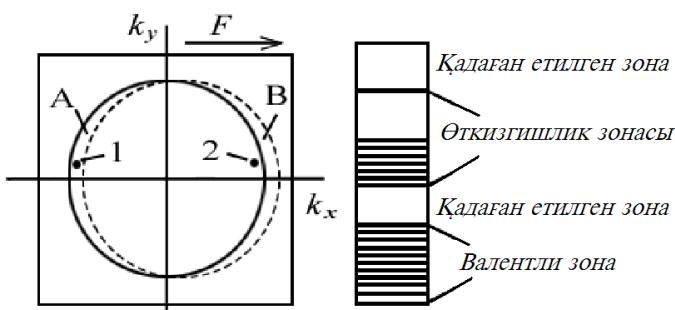


Рис. 4.6.
Сырттан түсирилген электр майданының тәсиринде электронлардың ҳаллар бойынша қайтадан бөлистирилий (тарқалыў).

Диэлектрикler. Егер өткізгішлик зонасы толық толтырылған болса, онда зонадағы ийеленген ҳаллардың барлығы Бриллюэн зонасын толтырады. Бул зона симметрия орайына ийе. Ең жақын жайласқан ийеленбекен ҳаллар енді келеси зонада жайласқан ҳәм бул зона толық толтырылған зонадан E_g кашықтықта жайласқан болады (4.7-сүйрет). Бундай жағдайда да (өткізгішлердеги жағдайдай) қәлекен k толқын векторына ийе электронға толқын векторы $-k$ болған электрон сәйкес келеди. Бул еки электронның импульсларының қосындысы нолге тең ҳәм соныктан олар зарядтың көшийине ҳәм электр тоғының пайда болыуына үлес қоспайды (4.7-сүйрет).

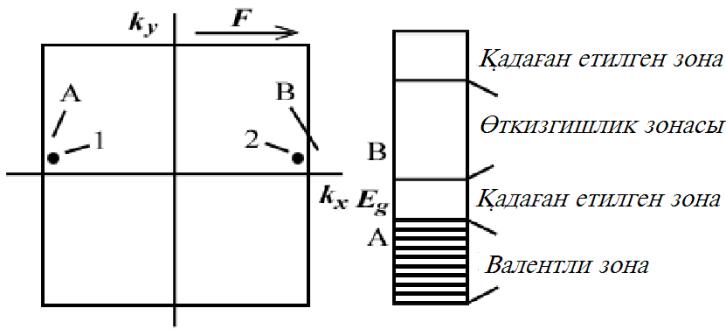


Рис. 4.7.

Толық толтырылған зона жағдайында сырттан түсирилген электр майданының тәсиринде электронның қайтадан бөлистирилиүинин мүмкін емес екенлигі (диэлектрикте орын алатуғын ситуация)

Егер сырттан электр майданы ҳэм оның менен байланыслы болған F күши түскен жағдайда да ситуация өзгермейди (4.7-сүйрет). 4.6-сүйретте келтирилген жағдайдағыдан электронлар қайтадан топарласа алмайды. Буның ушын А ҳалын таслап кетип энергиясы E_g шамасына үлкен болған В ҳалына өтийи керек. Жылдылық қозғалысларының энергиясы kT буның ушын (электронлардың қайтадан топарласыўы, яғни перегруппировкасы ушын) жетпейди. Соныңтан электр тоғының пайда етийин тәмийинлейтуғындай электронлардың қайтадан топарласыўы орын алмайды ҳэм соған сәйкес толтырылған зона заттың электр өткізгішлігіне үлесин қоса алмайды. Диэлектриклер деп аталауғын бундай заттар электр тоғын жүдә жаман өткизеди

Ярым өткізгішлер. Егер диэлектриклерде қадаған етилген зонаның кеңлеги онша үлкен болмаса (мысалы шама менен $10kT$ да тең болса), онда айырым электронлардың толық толтырылған зонадан өткізгішлик зонасына өтийи мүмкін. Бундай жағдайда валентлик зонада бос ҳаллар (тесикшелер), ал өткізгішлик зонасында электронлар менен ийеленген ҳаллар пайда болады. Сырттан электр майданы түсирилгенде бундай электронлар өткізгішлик зонасында да, валентли зонада да жаңадан топарласа алады (бундай жағдайды 4.6-сүйретте көрдик). Бирақ өткізгішлик зонасында электронлар, ал валентли зонада тесикшелер аз болғанлықтан бундай заттар электр тоғын салыстырмалы жаман өткизеди. Бундай заттарды ярым өткізгішлер деп атайды.

4.8-сүйретте өткізгішлердеги, диэлектриклердеги ҳэм ярым өткізгішлердеги энергиялық зоналардың электронлар менен толтырылыуының схемасы келтирилген.

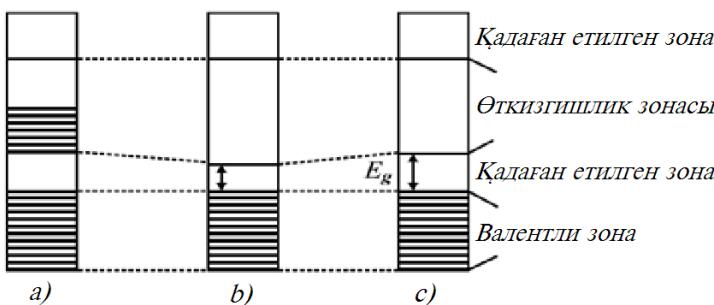


Рис. 4.8.

Өткізгішлердеги (a),
диэлектриклердеги (c) ҳэм ярым
өткізгішлердеги (b) энергиялық
зоналардың электронлар менен
толтырылыуы

Енди қандай заттардың өткізгіш, ярым өткізгіш ҳэм диэлектрик бола алатуғынлығын қарап өтемиз.

Силтили ҳэм қымбат баҳалы (благородные) металлардың атомлары бир валентли электронға ийе. Оларда ең үлкен энергияға ийе зонаның ярымы толтырылған. Бул 4.6- ҳэм 4.8 а сүйретлердеги схемаларға сәйкес келеди. Бундай металлар электр тоғын жақсы өткереди.

Төрт валентли углерод (алмаз) толық толтырылған валентли зонаға ийе. Бул зона менен өткізгішлик зонасы арасындағы қашықтық жуұық түрде 5 эВ шамасын қурайды. Соныңтан алмаз жақсы изоляторлар қатарына киреди. Диэлектриклер болып табылатуғын ионлық қристаллар валентли зоналары толық толтырылған атомлардан турады.

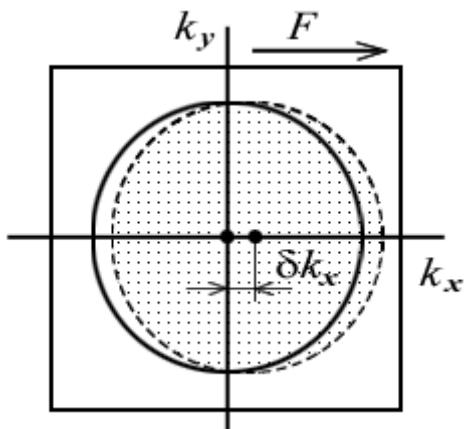
Төрт валентли кремний менен германий толық толтырылған валентли зонаға ийе. Бул валентли зона менен өткізгишлик зонасы арасындағы қашықтық сәйкес 1,2 и 0,7 эВ шамаларына тең (яғни өжіре температураларында шама менен $10kT$ ны қурайды). Бундай жағдайда электронлар валентли зонадан өткізгишлик зонасына өте алады. Усының салдарынан кремний менен германий ең көп тарқалған ярым өткізгишлер болып табылады. Температура жоқарылағанда германийдин электр өткізгишлігі кремниийдин электр өткізгишлігіне салыстырғанда тезирек үлкейеди. Себеби германийдин қадаған етилген зонасының көзлигі кремниийдин қадаған етилген зонасының көзлигинен киши.

Силтили жер элементлери еки валентли электронға ийе. Усыған байланыслы оның зоналары толығы менен толтырылған болыўы керек. Бирақ бундай металларда зоналар бириңин үстине бири түседи ҳәм нәтийжеде «көп салындырылған» зона пайда болады. Соныңтан ең үлкен энергияға ийе зона толығы менен толтырылмаған, ал силтили жер элементлери өткізгишлер болып табылады.

Откізгишлердин электр өткізгишлігі

Откізгишлердин электр өткізгишлігін квант механикасы позицияларында турып қараған мақул болған болар еди. Бирақ бул әдеүір қурамалы мәселе. Соныңтан откізгишлердин электр өткізгишлігін есаплау ушын ярым классикалық көз-қарастан ұрекет етемиз

Сырттан электр майданы түсирилмегендегі k кеңисликтегі электронлар менен толтырылған ҳаллар Ферми бети менен шекленген өткізгишты қараймыз. Әпиүайылық ушын Ферми бетин сфера және бул бетті Бриллюэнниң бириңи зонасының шегарасы менен кесилиспейді деп есаптаймыз (4.9-сүйрет).



4.9-сүйрет.

Электр майданы тәрепинен сырттан күш тәсир еткенде электронлардың ҳаллар бойынша бөлистирилиүинин (тарқалыўының) өзгериүи.

Сыртқы E электр майданы пайда болғанда электронларға $F = eE$ күши тәсир етеди. Нәтийжеде Ньютоның екінши нызамына сәйкес электронлар тезлене баслады:

$$\frac{dv}{dt} = F = eE. \quad (4.16)$$

Базы бир τ ўақыты өткеннен кейин электронлар:

$$v = \frac{eE\tau}{m}. \quad (4.17)$$

тезлигине ийе болады. Бул аңлатпада m арқалы электронның массасы белгиленген.

4.9-сүйретте келтирилген электронлардың ҳаллар бойынша бөлистирилиүи базы бир қашықлыққа жылысады деп есаплаўға болады. Жеткиликли дәрежедеги үлкен ўакыттан кейин электронлардың тезлиги менен электронлардың тарқалыўының жылжыўы (аўысыўы) үлкен мәнислерге ийе болады (бул өз-өзинен түснүксли). Бирақ электронлардың бир бири менен, баска да тосқынлықтар менен соқлығысыўларын есапқа алыў зәрүр

Жетилискең кристаллық пәнжерениң (яғный дефектлери жоқ кристаллық пәнжерениң) Бриллюэн зонасының шегарасына түсетуғын толқын векторы жоқ электронлардың қозғалыўына кесент жасамайтуғынлығын биз жоқарыда көрген едик. Электрон тек басқа электрон ямаса кристаллық пәнжерениң дефектлери менен соқлығыса алады. Жоқарыда еслетип өткенимиздей, кристаллық пәнжерениң дефектлерин динамикалық ҳәм статикалық деп екиге бөлемиз.

Динамикалық дефектлерге мысал ретинде фононларды ҳәм магнонларды келтире аламыз. Олар менен электронның тәсир етисиўи қозғалыўшы бөлекше менен соқлығысыўларды еске түсиреди. Ал ҳақыйқатында фонон кристаллық пәнжерени майыстырады, ал электрон болса майысқан участкада қозғалыс бағытын өзгертерди.

Статикалық дефектлерди биз жоқарыда көрип өттик. Электронлардың сондай дефектлер менен тәсир етисиўи электронлардың тыныш турған (статикалық) бөлекше менен соқлығысыўын еске түсиреди. Динамикалық дефектлердин концентрациялары температуралың жоқарылаўы менен жоқарылайды, ал статикалық дефектлердин концентрациялары шама менен турақлы болып қалады (биз бул жерде ноқатлық дефектлерди нәзерде тұтып атырғанымыз жоқ).

Соқлығысыўлар орын алғанда электронлар орташа т ўакыты ишинде тезлениў менен қозғалады. Бундай ўақытты релаксация ўақыты деп атайды. Релакциация ўақыты өткеннен кейин электронның дефект пенен соқлығысыўы орын алады. Нәтийжеде электронның тезлиги тосяннан өзгериске ушырайды ҳәм орташа нолге тең болады. Соқлығысыўға шекем электрон базы бир орташа тезликке ийе болады. Бундай орташа тезликти дрейфлик тезлик деп атайды ҳәм оның шамасы мынаған тең:

$$\nu = \frac{Ee\tau}{2m}. \quad (4.18)$$

Бул тоқтың төмөндегидей тығыздылығының пайда болыўына алып келеди:

$$J = n \nu e = \frac{Ee^2n\tau}{2m}. \quad (4.19)$$

Ом нызамын еске түсиремиз. Ол $J = \sigma E$ түринде жазылады. Соныңтан σ электр өткізгішлик коэффицинети ушын мынадай аңлатпа аламыз:

$$\sigma = \frac{e^2n\tau}{2m}. \quad (4.20)$$

Ал салыстырмалы қарсылық ушын

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{2m}{e^2n\tau} = \frac{2mv}{e^2n} \quad (4.21)$$

аңлатпасын аламыз. $v = 1/\tau$ арқалы электронның соқлығысыўларының орташа жийилиги белгиленген.

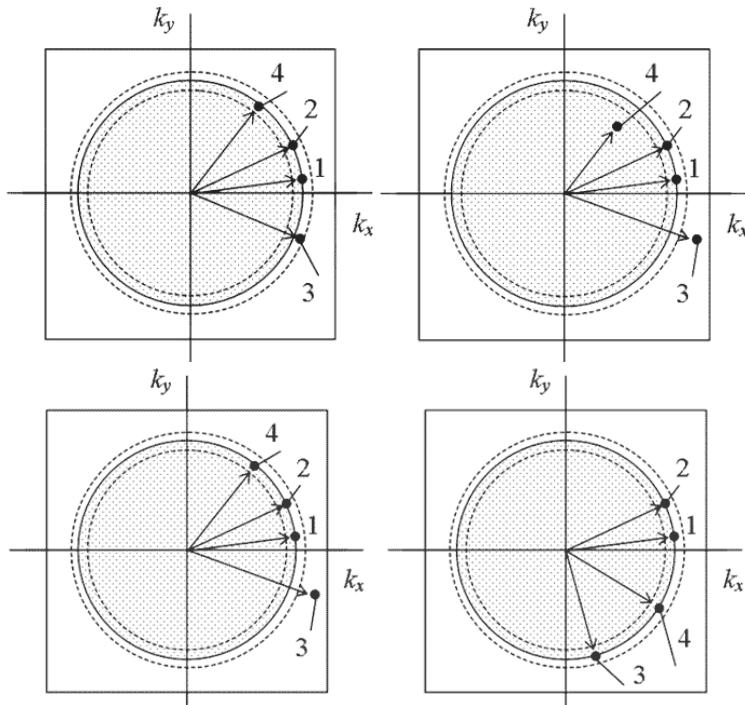
$\rho(T)$ ғәрзлигин таллаў ушын $v = 1/\tau$ шамасының температура менен дефектлердин концентрациясынан ғәрзлигин таллаўымыз керек.

Концентрациялары онша үлкен болмағанда динамикалық дефектлер де, статикалық дефектлер де қозғалыўшы электронларға бир бириңен ғәрезсиз тәсир етеди деп есаплаўға

болады. Бундай жағдайда электронның дефектлер менен соқлығысы ў жийилигин есаплау мүмкіншілігіне ийе боламыз ҳәм бул жийилик төмендегидей еки жийиликтің қосындысынан турады:

$$v = v_{stat} + v_{dinam}. \quad (4.22)$$

Биринши қосылыұшы температурадан ғәрэзли емес. Екинши қосылыұшы бириңиден фононлардың концентрациясынан ҳәм электронлардың фононлар менен соқлығысы ў механизмдеринен; екиншиден электронлардың бир бири менен соқлығысы ўларынан ғәрэзли.



4.10 а сұйрет.

Еки электронның бир бири менен соқлығысы ўның схемасы. Стрелкалардың жәрдемінде еки электронның 1 ҳәм 2 соқлығысқанға шекемги, 3 ҳәм 4 соқлығысқаннан кейингі толқын векторлары белгиленген.

4.10 б сұйрет.

Еки электронның бир бири менен соқлығысы ўның схемасы. Стрелкалардың жәрдемінде еки электронның 1 ҳәм 2 соқлығысқанға шекемги, 3 ҳәм 4 соқлығысқаннан кейингі толқын векторлары белгиленген.

Электронлар бир бири менен соқлығысқанда энергия менен импульстың сақланыұ нызамларын ҳәм Паули принципин есапқа алыу керек. Паули принципи электронлардың соқлығысқаннан кейингі толқын векторларына қосымша шеклерди қояды: электрон басқа электронлар менен ийеленбegen ҳалды ийелеуі керек. Жоқарыда атап өтилгенидей, откizгишлерде балқыу температурасына шекемги барлық температураларда Ферми энергиясынан төменинде kT қашықтығында жайласқан дерлик барлық ҳаллар ийеленген. 4.10-сұйретте келтирілген ең киши сфераның ишинде жайласқан усындан ийеленген ҳаллардың саны жүдә көп ҳәм тап усы ҳалларда электрон соқлығысқаннан кейин жайласа алмайды (хәтте энергия менен импульстің сақланыұ нызамына қайшы келмесе де).

4.10-а сұйреттеги шеп тәрепте келтирілген процесслердин жүрийі мүмкін. Себеби олар ушын энергия менен импульстің сақланыұ нызамлары ҳәм Паули принципинин талаплары орынланады. 4.10-а сұйреттеги оң тәрептеги процесстің жүрийі мүмкін емес. Себеби 4 ҳалы ийеленген ҳәм электрон соқлығысқаннан кейин ол ҳалда тұра алмайды. 4.10 –б сұйреттің шеп тәрепіндегі келтирілген процесслер де 3 ҳәм 4 ҳаллары бос болса да жүдә киши итималлықта ийе. Бундай процесстің жүзеге келийи ушын kT шамасынан әдеүір үлкен энергия талап етиледи (3 ҳәм 4 ҳалларында жайласқан электронлардың энергияларының қосындысы 1 ҳәм 2 ҳалларындағы электронлардың энергияларының қосындысынан үлкен). Сонықтан соқлығысы ў процесслерине толқын векторлары Ферми бетинің қасындағы жуқа қатламның ишинде жайласқан электронлар ғана қатнаса алады (4.10-а шептеги сұйрет). Ал импульстің сақланыұ нызамы усы көп емес санлы электронлардың барлығының соқлығысы ўға қатнасы ўнына шек қояды. Мысалы 4.10 б

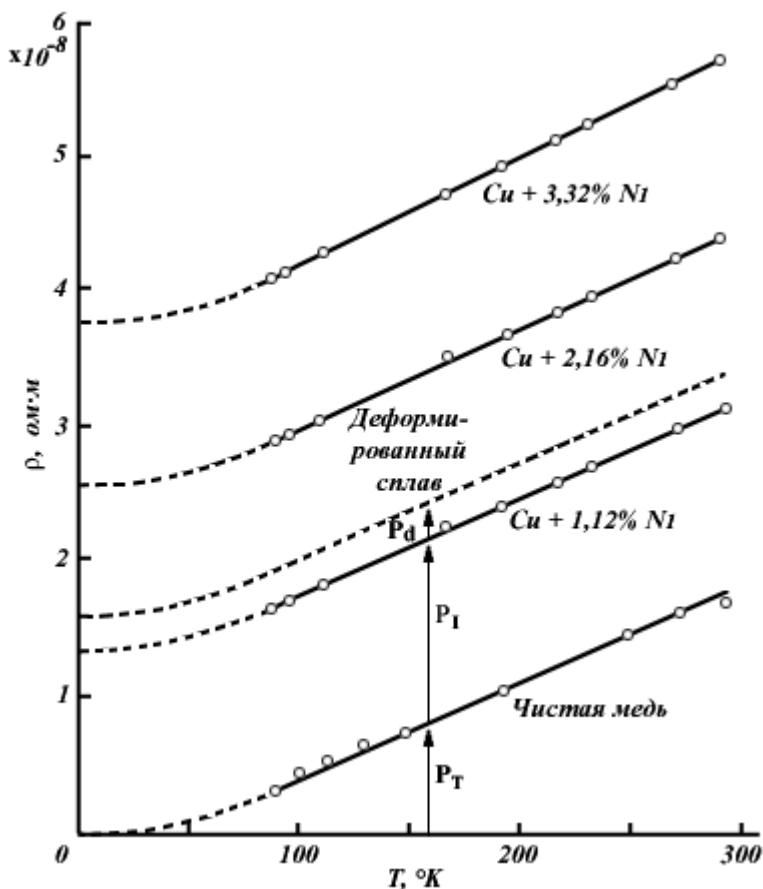
сүүреттин оң тәрепинде белгиленгенип өтилген толқын векторына ийе электронлардың соқлығысыұын импульстың сақланыў нызамы қадаған етеди. Усындаған себеплерге байланыслы бир бирине атомлар арасында аралыққа қашықласқан ҳәм үлкен тезликлер менен қозғалатуғын электронлар бир бири менен жұдә сийрек соқлығысады. Усының нәтийжесинде электронлардың өткізгишлердеги еркин жүриў жолының узынлығы онлаған ҳәм жүзлеген мың атомлар арасындағы қашықлыққа жетеди. Есаплаўлар ҳәм тәжирийбелерде алынған мағлыўматларды таллаў электронлар менен электронлардың соқлығысыұы электронлардың фононлар менен соқлығысыұына салыстырғанда жұдә сийрек болатуғынлығын көрсетеди.

Жоқарыда айтып өтилген жағдайларға байланыслы электронлардың фононлар менен соқлығысыұын қарап шығамыз. Бундай соқлығысыўлар өткізгишлердин электр өткізгишлигине тийкарғы үлести қосыўы керек. Өжире температураларына жақын температураларда фононлардың саны температураға туýры пропорционал. Соныңтан электронның фононлар менен соқлығысыұының жийилиги де температураға туýры пропорционал болыўы керек. (4.22)-анлатпаға сәйкес динамикалық дефектлердин электр қарсылығына қосатуғын үлеси де температураға пропорционал болып шығады. Эксперименталлық мағлыўматлар бул жуўмақты тастыыйқлады (4.11-сүүретти қараңыз).

Салыстырмалы қарсылықтың температурадан ғәрзелигин қарсылықтың температуралық коэффициентинің шамасы менен харakterлейди. Бул коэффицент

$$\alpha = \frac{1}{\rho(T)} \cdot \frac{\partial \rho(T)}{\partial T}$$

түринде жазылады. 3.11-сүүреттен температуралың бирдей мәнисинде ҳәр қыйлы қурамдағы құймалар ушын α ның мәниси ҳәр қыйлы болып шығатуғынлығын аңгарыўымыз керек. Себеби 4.11-сүүреттеги мағлыўматлар тийкарында есапланған α ның мәниси $\rho(T)$ иймеклигинин қыялышының (қыялыш барлық құймалар ушын дерлик бирдей) тангенсииң $\rho(T)$ шамасына қатнасына тең. Усы себеплерге байланыслы салыстырмалы қарсылыққа статикалық дефектлердин үлеси үлкен болған құймаларда α ның шамасы жұдә киши болады.



4.11-сүйрет.

Мыс пенен мыс-никель қуймаларының салыстырмалы қарсылығының температурадан тәрэзлиги.

4.11-сүйретте сәүлелендірилген иймекликлер бойынша динамикалық ҳәм статикалық дефектлердин өткізгіштің салыстырмалы қарсылығына үлеслерин аддиив шамалар деп қараўға болады. Статикалық дефектлердин концентрациясы ҳәм оған байланыслы болған салыстырмалы қарсылықтың шамасы абсолют нол температураға жакын температураларда қосымта атомлардың концентрациясына пропорционал.

Техникада салыстырмалы қарсылығы жүдә үлкен ҳәм жүдә киши болған материаллар кең түрде колланылады. Салыстырмалы қарсылығы жүдә киши болған материаллар компактлы ҳәм экономиялы сымларды соғыў ушын, ал салыстырмалы қарсылығы үлкен болған материаллар ҳәр қылыштың қыздырығыштарды соғыў ушын пайдаланылады.

Мәселелер:

1. 4.11-сүйретте берилген мағлыўматлар тийкарында қурамындағы никель 0 ҳәм 3 процент болған мыс-никель қуймасының 100 ҳәм 400 К температуралардағы қарсылығының температуралық коэффицинетин анықлаңыз.

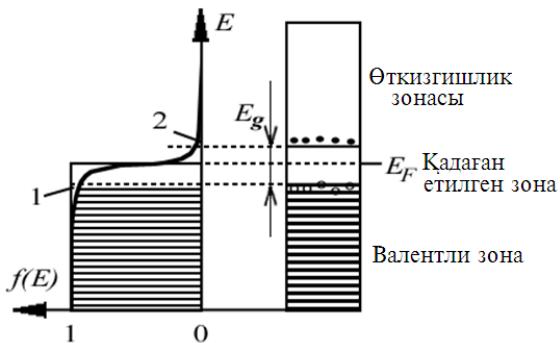
Көрсетпес: Қарсылықтың температуралық коэффицинетинин мәнислерин есаплағанда $\alpha = \frac{1}{\rho(T)} \cdot \frac{\partial \rho(T)}{\partial T}$ формуласынан пайдаланыңыз.

2. Мыстың 20 K температурадағы салыстырмалы қарсылығы ρ болса ондағы электронның еркин жүриў жолының узынлығын бағалаңыз. Валентли электронлардың саны берилген ҳәм n ге тең деп есапланыңыз. Мыста валентли электронлар Ферми энергиясы E_F ке тең болған электронлық Ферми-газ модели тийкарында тәриплениди

Шешими. Еркин жүриў жолының узынлығы $l = v_F \cdot \tau$ формуласының жәрдеминде есапланады. τ дың мәнисин (4.21)-формула, ал v_F тиң мәнисин $E_F = \frac{mv_F^2}{2}$ формуласының жәрдеминде есаплайды.

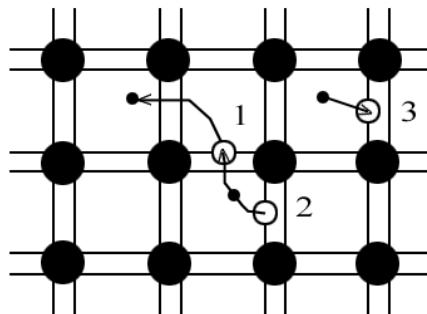
Ярым өткизгишлердин электр өткизгишилиги

Ярым өткизгишлердин электр өткизгишилигин классикалық механика көз-қараслары менен қарап шығыў мүмкин. Бундай жағдайда электронлардың да, тесикшелердин де координаталары да, импульслери де бир ўақытта өлшенеди, ҳәр бир электрон менен тесикшениң қозғалысын бақлап барыў мүмкин. Буны (4.5)-аңлатпадағы ҳаллардың толтырылыў функциясын салыстырмалы енсиз қадаған етилген зона жағдайында қарап шығыў арқалы амелге асырыў мүмкин (4.12-сүйрет). Бул сүйретте штриховка жәрдеминде электронлар менен толған ҳаллар белгиленген. 4.12-сүйретте келтирилген еки ғәрэзликти таллап еки жуўмақ шығарыў мүмкин.



4.12-сүйрет.

Ярым өткизгишлердеги электронлардың ҳаллар бойынша тарқалыўы.



4.13-сүйрет. Ярым өткизгишлердеги электронлар менен тесикшелердин пайда болыўы ҳәм қозғалысы.

Бириңиси. Өткизгишлик зонасындағы электронлардың саны менен валентли зонадағы тесикшелердин саны бир бирине тең болыўының кереклигинен 1 ҳәм 2 арқалы белгиленген майданлар шама менен өз-ара тең болыўы керек (бул жерде электронлар менен тесикшелердин эффективлик массасына берилетуғын дүзетиўлерди ҳәм толқын векторлары кеңислигидеги ҳаллардың үш өлшемли тарқалыўын есапқа алғанда). Бул жағдай Ферми қәдди қадаған етилген зонаның дәл ортасында жайласқан жағдайда орын алады. Бул тастыйықлауды математикалық жақтан келтирип шығарыў да мүмкин.

Екиншиси. $E - E_F \gg kT$ болғанлықтан электронды өткизгишлик зонасында ушыратыўды итималлығын беретуғын (4.5)-формула Больцман тарқалыў функциясына айланады:

$$\begin{aligned} f(E) &= 1 / \{ \exp((E - E_F) / kT) + 1 \} \approx \\ &\approx \text{Const} \cdot \exp(-(E - E_F) / kT). \end{aligned} \quad (4.23)$$

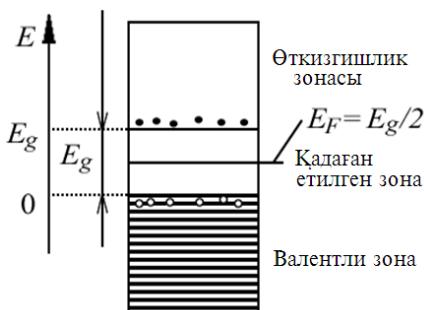
Бул электронлар менен тесикшелердин ярым өткизгишлердеги қәсиеттерин тәриплөў ушын классикалық усылларды пайдаланыўдың мүмкин екенligин көрсетеди. E шамасын валентли зонаның ең үстинги шетинен басласап есаплаған қолайлы. Буннан кейинги таллаулырымызда биз тап усындай жоллар менен жүремиз.

Қосымталары жоқ ярым өткизгишлер. Ярым өткизгиш болған кремнийди қараймыз. Ол алмаз типиндеги кристаллық пәнжереге ийе. Бундай пәнжереде ҳәр бир атом қоңылас атомлар менен төрт валентли байланыс арқалы байланысқан. $T = 0$ К температурада барлық байланыслы электронлар менен толтырылған. Сонықтан валентли зона толығы менен толтырылған, ал бул зонадан 1,1 әВ қашықтықта жайласқан өткизгишлик зонасы пүткиллей бос. Температураны шама менен 200-300 К ге көтерсек базы бир электронлар валентли зонадан өткизгишлик зонасына өте алады. Бул электронның ковалентлик байланыстан кетиүине ҳәм электронның «кристал бойынша еркин қозғалып жүре алатуғын» электронға айланыўына сәйкес келеди (4.13-сүйрет).

Бос калған коваленттік байланыс орнында тесикше қалады. Тесикше электрон таслап кеткен «үзилген» коваленттік байланыс болып табылады. Қоңылас байланыстағы электрон сол «тесикше» ге «секирип» өтийі мүмкін. Усының салдарынан тесикше жаңа орынға көшеди (4.13-сұйретте жаңа орын 2 арқалы белгиленді). Электронлар менен тесикшелер жубы менен пайда болғанлықтан биз карап откен жағдайдағы тесикшелер саны электронлар санына тең.

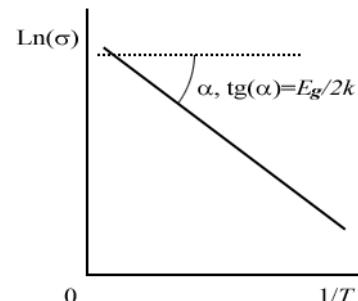
Еркін электронлардың бири тесикшелердин биреүин ийелеүі мүмкін. Усының салдарынан олардың екеуі де жоғалады. Бундай процессті тесикше менен электронның рекомбинациясы деп атайды (4.13 (3) сұйрет). Рекомбинацияның итималлығы электронлар менен тесикшелердин концентрацияларына туýры пропорционал. Электрон-тесикше жубының пайда болыў итиаллығы ярым өткізгиштиң температурасына ғәрэзли. Вероятность зарождения пары электрон - дырка зависит от температуры полупроводника. Соның менен бирге ярым өткізгишти нурландырғанда да электрон-тесикше жупларының пайда болыў итималлығы жоқарылайды. Ал бул итималлықтың мәниси ярым өткізгишке келип түсіүши толқынның интенсивлігіне пропорционал.

Ярым өткізгиштиң өткізгішлигінің температурадан ғәрэзлигин алыўға болады. Минималлық энергияға ийе электрон-тесикше жубының пайда болыўының итималлығы (4.23)-аңлатпаға сәйкес максималлық мәниске ийе болады (егер өткізгишлик электроны ең киши энергияға, ал тесикше ең үлкен энергияға ийе болса усындағы жуп алынады). Тап усындағы жуплар шама менен $10kT$ шамасына тең температурада пайда болады ҳәм еркін заряд тасыўшылардың концентрациясы неге тийкарғы үлес қосады.



4.14-сұйрет.

Қосымталары жоқ ярым өткізгиштеги энергия қәддилери.



4.15-сұйрет.

Қосымтасы жоқ ярым өткізгиштин өткізгішлигінің логарифмінің температурадан ғәрэзлигі.

Бундай жағдайда жуўық 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 өткізгишлик еркін заряд тасыўшылардың концентрациясына пропорционал болғанлықтан, тап сондай формууланы ярым өткізгиштин өткізгішлигі ушын да жаза аламыз:

$$\sigma(T) = \sigma_0 \exp(-E_g/2kT) \quad (4.25)$$

Бул нызам экспериментте тастыйқланады (4.15-сұйрет). Усы сұйреттеги туýры сзызыктың қыялығының тангенсі араласпасы жоқ ярым өткізгиштин қадаған етилген зонасының кеңлигі менен байланысқан.

Электр тоғын алып жүриўшиниң жылжығышлығы. Солай етип ярым өткізгішлерде электронлар менен тесикшелер электр тоғын тасыўшылар болып табылады екен. Олардың концентрацияларын сәйкес n_e ҳәм n_h арқалы белгилеймиз. Бундай

жағдайда E электр майданына жайластырылған ярым өткізгиштеги тоқтың тығыздығы 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 тесикшелердин дрейфлик тезликлери белгиленген. Дифференциал формада жазылған Ом нызамын ($j = \sigma E$) (4.26)-хәм (4.19)-формулалар менен салыстырып v_e менен v_h шамаларының электр майданының кернеўлиги E ге пропорционал екенligине ийе боламыз. Электр тоғын тасыўшысының жылжығышлығы деп аталатуғын ҳәм μ арқалы белгиленетуғын жаңа шаманы киргизген қолайлыш:

$$\nu = \mu E. \quad (4.27)$$

Бул аңлатпадан жылжығышлықтың электр майданының кернеўлиги E ниң шамасы бирге тең болғандағы ток тасыўшының дрейфлик тезлигине тең екенлигин көремиз.

Ток тасыўшылардың жылжығышлығы түснеги ярым өткізгишлер физикасындағы ең әхмийетли түснеклердин бири болып табылады. Жылжығышлық түснегинин жәрдеминде ярым өткізгишлер физикасының көп қурамалы аңлатпалары әпиўайыласады (биз төменде Холл эффектин үйренгенимизде бул сөзлердин дұрыслығына исенемиз). Мысал ретинде (4.26)-аңлатпаны былайынша көширип жазыўға болады:

$$\vec{j} = (n_e \mu_e + n_h \mu_h) e \vec{E}. \quad (4.28)$$

Әдетте электронлардың жылжығышлығы тесикшелердин жылжығышлығынан әдеўир үлкен болады. Себеби тесикшениң жылжыўы қурамалы процесс болып, ол көп сандардың электронлардың секирип өтиўлери менен байланыслы.

Ярым өткізгишлердин қосымталы өткізгишлігі. Айырым қосымталарды ярым өткізгишке жүдә аз муғдарда қосса да оның өткізгишигин күшли өзгертереди. Бундай қосымталар артық еркин электронлардың ямаса тесикшелердин пайда болыўына алып келеди. Оларды донорлық қосымталар (электронларын береди) ямаса акцепторлық қосымталар (электронларын өзине бириктирип алады) деп атайды.

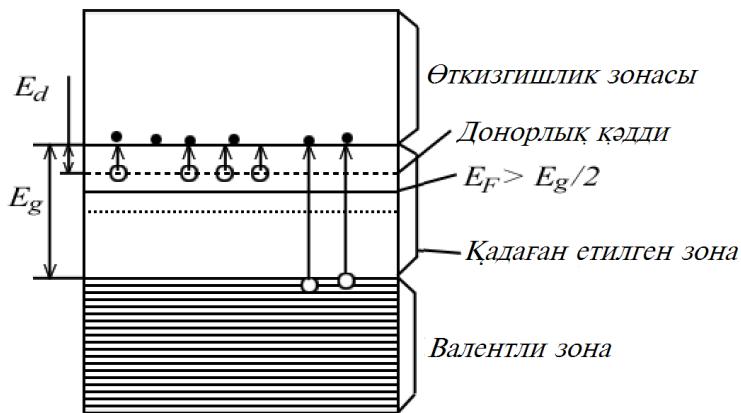
Донорлық қосымталар киргизилген ярым өткізгишлерди донорлық ярым өткізгиш деп атайды. Бундай ярым өткізгишті электронлық өткізгиш (себеби оларда артық электронлар көп) ямаса n типиндеги ярым өткізгиш деп атайды. n белгисиниң пайда болыўы negative сөзинен келип шыққан болып, ол еркин заряд тасыўшылардың атрықмашлығын билдиреди.

Акцепторлық қосымталарды киргизгеннен кейин ярым өткізгишті акцепторлық ярым өткізгиш деп атайды. Оны тесикшелик ярым өткізгиш (себеби ондағы артық тесикшелердин саны көп) ямаса p типиндеги ярым өткізгиш деп те атайды (бул аңлатпа positive – он деген сөзден келип шыққан, себеби бундай ярым өткізгиште он зарядлы тоқты тасыўшылардың саны артық).

Егер ярым өткізгишке электроны жеңил «кажыратып алынатуғын» қосымта атомлар киргизилсе оны донорлық ярым өткізгиш деп атайды. Мысалы, егер төрт валентли кремнийге (ямаса германийге) бес валентли мышьяқ ямаса фосфор атомлары киргизилсе, олар өзлериниң 4 валентли электронларын кристаллық пәнжередеги 4 валентли байланыс дүзиў ушын жумсайды, ал бесинши валентли электрон артық (аўысық) болып қалады. Бундай электрон атомнан аңсат ажыралып шығып кетеди ҳәм ол кристал бойынша еркин қозғалып жүриў мүмкіншилигин алады. Нәтийжеде кристалда артық еркин электронлар пайда болады. Әлбетте қосымталар киргизилген ярым өткізгиште де электрон-тесикшес жубының пайда болатуғынлығын умытпаўымыз керек. бирақ буның ушын әдеўир үлкен болған энергия талап етиледи ҳәм соңлықтан өжире температураларында бундай

процесстин жүрийиниң итималлығы (4.23)-аңлатпаға сәйкес жұдә аз. Донорлық ярым өткізгіштеги электронларды тийкарғы заряд тасыўшылар, ал тесикшелерди тийкарғы емес заряд тасыўшылар деп атайды.

Зоналық теорияның тилинде «жекелі бөлиніп шығатуғын» электронлардың пайда болыўы қадаған етилген зонада донорлық қәддиниң пайда болыўына сәйкес келеди. (4.16-сүйрет). Бундай қәддиден өткізгішлик зонасына өтиў ушын электронға валентли зонадан өткізгішлик зонасына өтиў ушын талап етилетуғын энергияға салыстырғанда әдеўир кем энергия талап етиледи. Бул электронның әдеттеги ковалентли байланыстан кетиўине сәйкес келеди.



4.16-сүйрет.

Донорлық ярым өткізгішлердеги электронлық ҳаллардың схемасы.

Әжире температураларына жақын температураларда ярым өткізгіштиң өткізгішлігіне тийкарғы үlesti донорлық қәддиден өткізгішлик зонасына өткен электронлар қосады. Ал бундай температураларда валентли зонадан өткізгішлик зонасына электронлардың өтийиниң итималлығы жұдә аз болады.

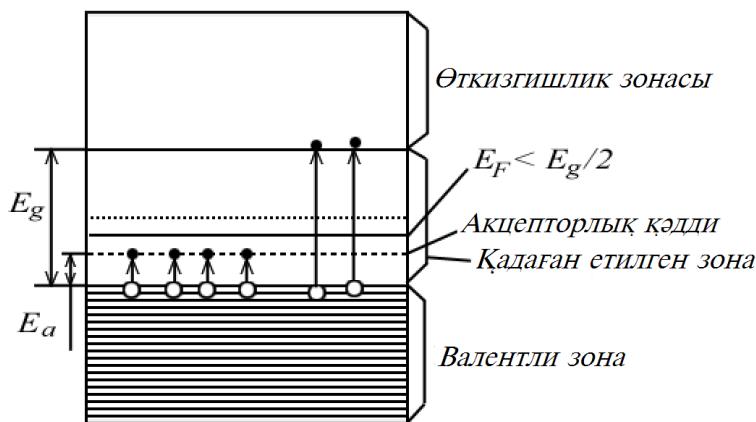
Температура жоқарылағанда электронлардың бир бөлими аз санлы донорлық қәддилерден өткізгішлик зонасына өтеди. Усының менен бир қатарда валентли зонадан өткізгішлик зонасына электронлардың өтийиниң итималлығы әдеўир үлкейеди. Валентлик зонадағы қәддилердин саны қосымта атомлар пайда еткен қәддилердин санының көп есе артық болғанлықтан температураларың жоқарылауы менен электронлар менен тесикшелердин концентрациялары арасындағы үлкен айырма дерлик пүткіллей жоғалады. Айырманың шамасы донорлық қәддилердин концентрациясына тең. Ярым өткізгіштиң өткізгішлігіниң донорлық характеристері кем-кемнен жоғала баслады. Ең ақырында температура және де жоқарылағанда ярым өткізгіштеги заряд тасыўшылардың концентрациялары үлкен болып, донорлық ярым өткізгіш дәслеп қәсийетлери бойынша қосымтасыз ярым өткізгіш пенен дерлик бирдей болып қалады, ал буннан кейин ол өткізгішлик зонасында көп электронларға ииे өткізгіштиң қәсийетлеріндегі қәсийеттерге ииे болады.

Донорлық ярым өткізгіштеги Ферми қәдди энергия шкаласында жоқарыға карай жылжыйды. Жылжыўдың шамасы төменги температураларда үлкенирек (бундай температураларда еркин электронлардың концентрациясы тесикшелердин концентрациясынан әдеўир үлкен). Температура жоқарылағанда ярым өткізгіштиң донорлық характеристериниң сезилийи кем-кемнен төменлейді, ал Ферми қәдди қадаған етилген зонаның ортасына жылжыйды (қосымтасыз ярым өткізгіштегидей).

Акцепторлық ярым өткізгішти алғаш ушын ярым өткізгішке усы ярым өткізгіштиң атомларының электронлары аңсат түрде өзине ала алатуғын атомларды киргизеди. Мысалы, егер төрт валентли кремнийге (ямаса германийге) үш валентли индийди косса, онда индий атомлары өзиниң үш валентли электронын кристаллық пәнжередеги үш валентли байланыс дүзій ушын жумсайды, ал төрттінши байланыс болса электронсыз қалады. Консылас байланыслардан электрон бул бос орынға келе алады ҳәм усының

нәтийжесинде кристалда тесикше пайда болады (4.13-сүүрет). Бул жағдайда кристалда аўысық тесикшер пайда болады. Акцепторлық ярым өткизгиштеги тесикшер тийкарғы заряд тасыўшылар, ал электронлар тийкарғы емес заряд тасыўшылар болып табылады.

Зоналық теория тилинде электронның толық ковалентлик байланыстан электрон жетпейтуғын байланысқа өтийи қадаған етилген зонада өткизгишлик зонасының төменги шетиниң төменинде акцепторлық қәддилердин пайда болыўына сәйкес келеди (4.17-сүүрет). Электрон ушын валентли зонада акцепторлық қәддиге бундай өтий ушын валентли зонада өткизгишлик зонасына өтиўдегиге салыстырғанда әдеўир кем энергия талап етиледи (бундай жағдайда электрон бир ковалентлик байланыстан дерлик сондай байланысқа өтеди).



4.17-сүүрет.
Акцепторлық ярым
өткизгиштеги электронлық
халлардың схемасы.

Өжире температураларына жақын температураларда ярым өткизгиштин электр өткизгишигіне тийкарғы үлесті валентлик зонадағы тесикшер береди (бул тесикшерлердин электронлар акцепторлық қәддиге өткенде пайда болғанлығын умытпаймыз). Ал электронлардың валентли зонадан өткизгишлик зонасына өтиў итималлығы жұдә аз.

Температура жоқарылағанда аз сандағы акцепторлық қәддилердин басым көпшилиги электронлар менен толады. Соның менен бир қатарда электронлардың валентлик зонадан өткизгишлик зонасына өтийиниң итималлығы жоқарылайды. Қосымталар пайда еткен қәддилердин санынан валентлик зонадағы қәддилердин саны көп есе үлкен болғанлықтан температураның жоқарылауы менен электронлар менен тесикшерлердин үлкейип атырған концентрациялары арасындағы айырма жоғала баслайды. Себеби олар бир бириңен аз шамаға – акцепторлық қәддилердин концентрациясына айрылады. Температура жоқарылаған сайын ярым өткизгиштин акцепторлық еkenligi дерлик сезилмейди. Температура және де жоқарылағанда ярым өткизгиштеги заряд тасыўшылардың концентрациялары жұдә жоқары болады ҳәм акцепторлық ярым өткизгиш пенен қосымтасыз ярым өткизгиш арасындағы айырма жоғалады, ал температура және де жоқарыласа ярым өткизгиш өткизгишке айланады.

Акцепторлық ярым өткизгиштеги Ферми қәддиниң энергия шкаласы бойынша төменге карай жылжытуғынлығын көрсетиүге болады. Бул аўысыў төменги температураларда көбірек мәниске ийе (бундай температураларда тесикшерлердин концентрациясы еркин электронлардың концентрациясынан әдеўир үлкен). Температура жоқарылағанда ярым өткизгиштин акцепторлық еkenligi дерлик сезилмейди ҳәм Ферми қәдди араласпасыз (қосымтасыз) ярым өткизгиштеги сыйқылды қадаған етилген зонаның дәл ортасына карай жылжыйды.

Солай етип температура әсте-ақырын жоқарылағанда донорлық ҳәм акцепторлық ярым өткизгишлердин араласпасыз сыйқылды ярым өткизгишке, буннан кейин әдеттеги өткизгиштин өткизгишигіндегі өткизгишликке ийе ярым өткизгишке айланады.

Сонлықтан ҳәр қылыш типтеги ярым өткизгишлерден соғылған дүзилислердин қызып кетиүинен саклау лазы. Температураның жоқарылауы менен ҳәр қылыш областлар арасындағы айырма жоғалады ҳәм көп санлы ярым өткизгишлерден соғылған дүзилис тоқты жақсы өткеретуғын монолит (бир путин) ярым өткизгишке айланады.

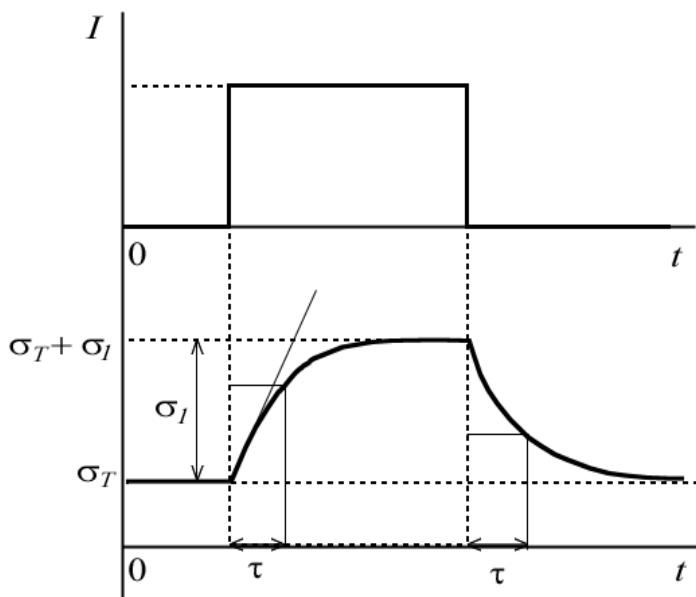
Ярым өткизгишлердин фото өткизгишлігі. Егер ярым өткизгишке электромагнит нурланыуының ағысы келип түссе ҳәм бул нурланыудың квантларының энергиясы $\hbar\omega$ қадаған етилген зонаның кеңлигі E_g шамасынан үлкен болса ярым өткизгиште ишки фотоэффект кубылысының бақланыуы мүмкін. Ишки фотоэффект кубылысы деп нурланыу кванттың жутқан электронның валентли зонадан өткизгишлик зонасына өтийин айтамыз. Усының салдарынан өткизгишлик зонасындағы электронлардың, валентли зонадағы тесикшелердин саны артады ҳәм ярым өткизгиштиң өткизгишлігі жоқарылайды. Ярым өткизгишлердин сырттан түсирилген нурлардың тәсиринде өткизгишигинин жоқарылауы кубылысын ярым өткизгишлердин фотоөткизгишлігі деп атайды.

Бул қубылыс физика ушын жүдә әхмийетли. Себеби фотоөткизгишліктиң жәрдемінде ярым өткизгишлердеги қадаған етилген зонаның кеңлигін ҳәм заряд тасыўшылардың (ток тасыўшылардың) орташа жасаў ўақытын анықлау мүмкін.

Қадаған етилген зонаның кеңлигін ишки фотоэффекттің қызыл шегарасы бойынша анықлады. Фотоэффекттің қызыл шегарасына фотоэффектті бақлау мүмкін болған максималлық толқын узынлығы λ_K сәйкес келеди. Оны былайынша табамыз:

$$E_g = \hbar\omega_K = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda_K}.$$

Ярым өткизгишлердеги ток тасыўшылардың орташа жасаў ўақытын табыу ушын жақтылық пенен нурландырғанда ярым өткизгиштиң өткизгишигинин өзгерислеринин экспериментлерде алынған нәтийжелерин пайдаланады. (4.18-сүйрет). Өжире температураларындағы араласпасы (қосымталары) жоқ ярым өткизгишти қараймыз. Жақтылық нурлары түсирилмегендеге заряд тасыўшылардың тең салмақлық концентрациясы n_T , ал усы заряд тасыўшылар менен байланыслы болған өткизгишлик σ_T шамасына тең болады (4.18-сүйрет).



4.18-сүйрет.

Заряд тасыўшылардың тең салмақлық концентрациясы $n = n_T + n_I$ менен сол заряд тасыўшылар менен байланыслы болған өткизгишлик $\sigma = \sigma_T + \sigma_I$ шамаларының ярым өткизгишти жақтыландырыудан ғәрэллигі.

Ярым өткизгишти жақтыландырғанда электрон-тесикше жубы пайда болады. Бул процесс электронлар менен тесикшелердин рекомбинациясы менен тез ўақыттың ишинде тенлеседи. Ал рекомбинацияның итималлығы электронлар менен тесикшелердин концентрацияларының артыуы менен артады. Базы бир ўақыттан кейин рекомбинацияның

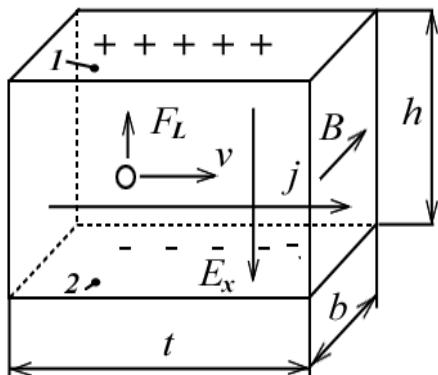
тезлиги электронлар менен тесикшелердин туўылыў тезлиги менен теңлеседи. Нәтийжеде ярым өткизгиштеги электронлар менен тесикшелердин концентрацияларының жаңа мәниси орнайды. Оны $n = n_T + n_I$ арқалы белгилеймиз (4.18-сүйрет). Егер жақтылықты өширсек электронлар менен тесикшелердин концентрациялары рекомбинацияның ақыбетинде ярым өткизгишке жақтылық түсирилмesten бурын алынған n_T шамасына шекем төмөнлейди. Тап сол сыйақлы болып ярым өткизгиштиң электр өткизгишлигі де өзгереди. Ярым өткизгиштин жақтылық түсирилгенде пайда болған өткизгишлігінин 2,7 есе (е есе) кемейтуғын ўақыт ярым өткизгиштеги электронлар менен тесикшелердин орташа жасаў ўақыты деп аталады. Ярым өткизгишлердин өткизгишлігінин тез өзгерисин осциллографтың экранында бақлау мүмкін.

Ярым өткизгишлердин фотоөткизгишлигі қубылысы техника ушын оғада әхмийетли. Себеби фотоөткизгишлик қубылысы тийкарында ислейтуғын жақтылықтың, электромагнит толқынларының басқа да түрлеринин ярым өткизгишли датчиклерин (көрсеткишлерин) соғыу мүмкін.

Хәзирги ўақытлары ярым өткизгишли датчиклер (көрсеткишлер) жақтыландырылғанлық (освещенность) өлшеў ушын да, жақтылық ағымының импульслеринин санын анықлаў ушын да қолланылады. Мысалы датчиклер машиналардың валларының айланыў тезлигин, станоклардың бөлимдеринин қанша шамаға қозғалғанлығын (орын алмастырғанлығын), компакт дисклердеги (CD ямаса DVD дисклердеги) информацияларды оқыў ушын кеңнен қолланылмақта. Биз ҳәзир компакт дисклердеги информацияларды оқыў мәселесинде тоқтап өтемиз.

Компакт дисклерди оқытудук дүзилис ярым өткизгишли жақтылық датчикинин жәрдеминде айланып турған компакт дисктиң бетине фокусланған лазер нұрының интенсивигинин өзгерислерин өлшайды. Бул датчик информацияны оқыўдың жүдә жоқары тезлигин тәмийинлейди (секундына шама менен 10^8 импульс). Бундай жоқары тезликтерде информацияларды оқыў ушын датчиктеги ярым өткизгиштеги электронлар менен тесикшелердин жасаў ўақыты жүдә киши болыўы шәрт (шама менен 10^8 секунд).

Ярым өткизгишлердеги Холл эффекти. Туўры мүйешли паралелопипед формасындағы ярым өткизгиш үлгини қараймыз. Оның l қапталы бойынша J тығызлығында тоқ өтип турған болсын (4.19-сүйрет). Үлгинин b тәреши бағытында B магнит индукциясы түсирилген болсын. Холл эффекти үлгинин жоқары ҳәм төменги ноқатлары арасында бириңін үстинде бири турған еки ноқат арасында Холл потенциаллар айырмасы деп аталатуғын потенциаллар айырмасының пайда болыўынан ибарат (4.19-сүйреттеги 1 ҳәм 2 арқалы белгилендеген ноқатлар арасында). Төменде Холл эффектинин жүзеге келийин қарап өтемиз.



4.19-сүйрет.
Акцепторлық ярым өткизгиштеги бетлик зарядлардың ҳәм электро майданының Холл кернеўлигинин пайда болыўы.

Дәслеп акцепторлық ярым өткизгиштеги қарап өтемиз. Тоқтың тығызлығы J шамасы менен заряд тасыўшылар болған тесикшелердин дрейфлик тезлиги v_h байланыслы. Ал магнит майданында қозғалыўшы e зарядына электродинамикадан белгилі болған Лоренц күши F_L тәсир етеди. 4.19-сүйретте бул күштин бағыты жоқары қарай бағытланған:

$$\vec{F}_L = e[\vec{v}_k \times \vec{B}] \quad (4.29)$$

F_L күшинин тәсиринде тесикшелер жоқары қарай қозгалады ҳәм үлгининкүшінде топланады. Ал үлгининкүшінде тесикшелердин саны азаяды. Бул зарядлар E_x электр майданын пайда етеди. Бул майдан тесикшелерге eE_x . Зарядлардың топланыуы менен eE_x күши үлкейеди ҳәм оның мәниси Лоренц күшине тең болғанда зарядлардың жыйналыуы процесси тоқтайды ҳәм v_h пенен B шамаларына жуўап беретүғин E_x шамасы орнайды. Тең салмақтың шәрти $F_L = eE_x = e v_h \times B$. Бул аңлатпадағы v_h шамасын (4.28)-аңлатпа жәрдеминде J ға алмастырып экспериментлер өткериүү ушын қолайлыш болған

$$\vec{E}_x = \frac{[\vec{j} \times \vec{B}]}{en_h} = R[\vec{j} \times \vec{B}] \quad (4.30)$$

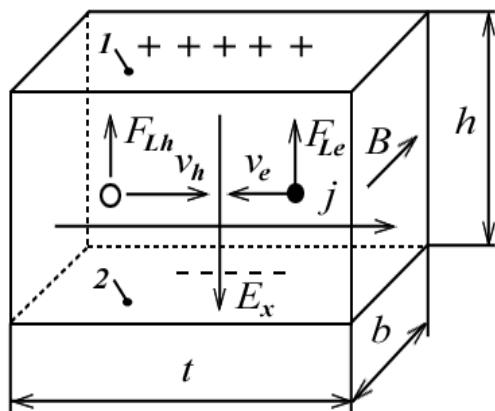
аңлатпасын аламыз.

Бул формулаға кириўши барлық шамалардың өлшенийи мүмкін. R шамасын Холл турақтысы деп атайды. Тап сол сияқты формуланы донорлық ярым өткизгиш ушын да аламыз ҳәм R шамасының белгисинин заряд тасыўшылардың белгиси менен сәйкес келетүғынлығына көз жеткеремиз.

(4.30)-аңлатпаны пайдаланыуы менен заряд тасыўшылардың концентрациясын ҳәм олардың белгисин анықтау мүмкін.

Техникада Холл эффектин магнит индукциясы B ның шамасын өлшеү ушын қолланады. буның ушын 4.19-сүйретте көрсетилгендей датчик - ярым өткизгиш үлгі қолланылады. E_x ҳәм J шамалары өлшенеди ҳәм буннан кейин Холл турақтысының белгили мәнисин пайдаланып B ның шамасын есаптайтынын. Өлшеү процесслерин аңсат түрде автоматластырыўға болады. Бундай жағдайда өсбап B ның мәнисин бирден береди.

Енди ярым өткизгиште электронлар менен тесикшелердин концентрациялары шама менен бирдей болған жағдайды қараймыз. Мейли туўры мүйешли паралелопипед формасындағы ярым өткизгиш үлгидеги электронлар менен тесикшелердин концентрациялары сәйкес n_e ҳәм n_h шамаларына, ал олардың жылжығышлығы сәйкес μ_e ҳәм μ_h шамаларына тең болсын (4.20-сүйрет).



4.20-сүйрет.

Электронлар менен тесикшелердин концентрациялары бир бири менен барабар болған ярым өткизгиштеги бетлик зарядлардың ҳәм электромайданының Холл кернеўлигинин пайда болыуы.

E_l электр майданының тәсиринде электронлар ҳәм тесикшелер тәрепинен J тоқтың тығызылығы пайда болады. Мейли бул тоқ l бағытында бағытланған болып (4.28)-аңлатпаның жәрдеминде берилсін:

$$\vec{j} = (n_e \mu_e + n_h \mu_h) e \vec{E}_l \quad (4.31)$$

Бағытында бизден арман қарай B магнит индукциясы түсирилген болсын. Бул майдан тәрепинен электронға да, тесикшеге де жоқары қарай бағытланған Лоренц күши түседи. Бул күштиң тәсиринде электронлар менен тесикшелер жоқарыға қарай қозгала баслайды ҳәм жоқарғы қапталда топланады. Бул жерде олар рекомбинацияға ушырайды. Мейли анықтық ушын жоқарғы қаптал бетке тесикшелер электронларға салыстырғанда көбірек топланатуғын болсын. Бундай жағдайда жоқарғы бетте электронға салыстырғанда тесикшелер, ал төменги бетте тесикшелерге салыстырғанда электронлар көплеў болады. Бундай жағдайда төменге қарай бағытланған электр майданының Холл кернеўлиги E_x пайда болады. Бул майдан тесикшелердин қозғалысына тосқынлық қылады, ал электронлардың жоқары қарай қозғалысына жәрдем береди. 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 төнгеседи, жоқарғы қаптал бетте зарядлардың топланыўы ҳәм E_x шамасының өсіүи тоқтайды. Тең салмақтық шәртин вертикальқа бағытқа түсирилген 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 алғып векторлардың модуллери ушын төмендегидей аңлатпа жазамыз:

$$n_h \mu_h (E_i \mu_h) Be - n_h \mu_h E_x e = n_e \mu_e (E_i \mu_e) Be + n_e \mu_e E_x e. \quad (4.33)$$

Бул аңлатпадан E_x/E_i қатнасы ушын

$$E_x / E_i = B(n_h \mu_h^2 - n_e \mu_e^2) / (n_h \mu_h + n_e \mu_e). \quad (4.34)$$

Аңлатпасын аламыз. Бул аңлатпада (4.29)- ҳәм (4.30) аңлатпалардан $R = E_x/jB$ шамасы ушын төмендегидей формула аламыз:

$$R = (n_h \mu_h^2 - n_e \mu_e^2) / \{(n_h \mu_h + n_e \mu_e)^2 e\}. \quad (4.35)$$

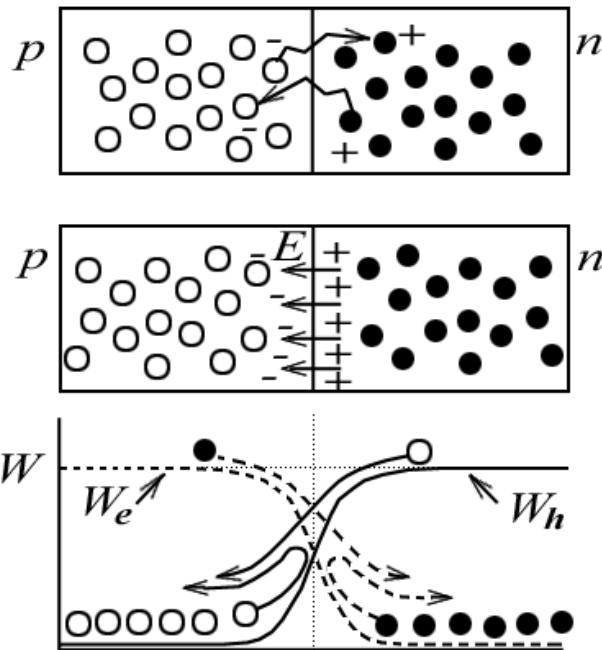
Ярым өткизгиште қосымталар болмаса (4.34)- ҳәм (4.35)-аңлатпалар әпиўайыласады. Бундай ярым өткизгиш ушын $n_h = n_e$:

$$E_x / E_i = B(\mu_h - \mu_e) \quad (4.36)$$

Нәтийжеде араласпасы жоқ ярым өткизгиш ушын (4.36)-аңлатпа тийкарында электронлар менен тесикшелердин жылжығыштықтарының айырмасын табыў мүмкин.

Ярым өткизгишли р-п- өтиўи

Ярым өткизгишли р-п- өтиўи деп акцепторлық ҳәм донорлық типтеги еки ярым өткизгиштиң контакты областындағы жуқа қатламға айтамыз (4.21-сүйрет). Ярым өткизгиштиң сүйретте көрсетилген еки области да электрлик жақтан нейтрал. Себеби ярым өткизгиш материалдың өзи де, қосымталар да зарядланған емес. Олар арасындағы айырма соннан ибарат, оның шеп тәрепинде еркин қозгалатуғын тесикшелер, ал он тәрепинде еркин қозгалатуғын электронлар бар.



4.21-сүйрет.
p-n өтиўи областындағы электр зарядларының тарқалыуы.

Хаотикалық жылдылық қозғалыслардың салдарынан p областындағы тесикшелердин бири оң тәрептеги n типтеги областқа өте алады. Нәтийжеде ол электронлардың бири менен дәрхәл рекомбинацияға ушырайды. Усының салдарынан оң тәрепте аўысық оң заряд, ал шеп тәрепте аўысық терис заряд пайда болады (4.21-сүйрет). Тап сол сыйқыл жылдылық қозғалысларының салдарынан электрон шеп тәрептеги областтан оң тәрептеги областқа өтип дәрхәл тесикше менен рекомбинацияға ушырайды. Нәтийжеде бул жағдайда да оң тәрепте артық оң заряд, ал шеп тәрепте артық терис заряд пайда болады.

Бул зарядлардың пайда болыуы ярым өткізгишлердин шегаралық областында E электр майданының пайда болады. Бул майдан p типтеги областтан тесикшелерди ярым өткізгишлерди айырып түрған шегарадан шеп тәрепке, ал n типтеги областтан электронларды усы шегарадан оң тәрепке қарай ийтереди. E электр майданы менен областлардағы электронлар менен тесикшелердин потенциал энергиясын байланыстырыу мүмкін (4.21-сүйрет). p областтан n областқа өтиў ушын тесикшеге бийиклиги W шамасына тең потенциал табалдырықтан атлап өтиў керек болады. Ал электрон ушын n областтан p областқа өтиў ушын тап сондай табалдырықтан өтиўге туұры келеди. Усындай өтиўдин итималлығы Больцман көбейтиўшисине пропорционал::

$$P = P_0 \exp(-W/kT) \quad (4.37)$$

Жоқарыда қарап өтилген тийкарғы заряд тасыўшылардың өтиўлери p-n өткели арқалы тийкарғы тоқ тасыўшылардың тоғының тығыздығын пайда етеди:

$$j_{\text{оч}} = j_0 \exp(-W/kT) \quad (4.38)$$

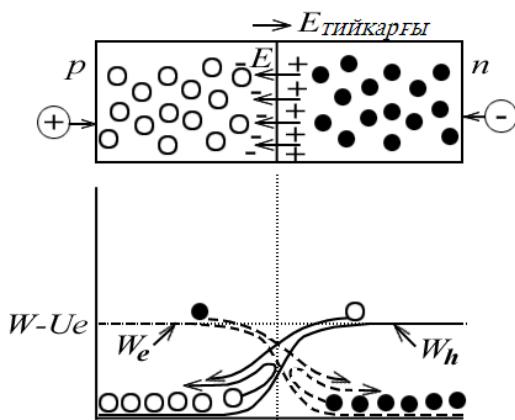
Тең салмақтың ҳалында бул тоқ тийкарғы емес тасыўшылар пайда еткен тоқ тәрепинен компенсацияланады (тийкарғы емес тасыўшыларға p областтағы электронлар менен n областтағы тесикшелер киребиди). Бирақ тийкарғы емес тасыўшылардың саны оғада аз, сонлықтан олар пайда еткен тоқтың шамасына шек қойылады (E майданы бул тоқтың өтиўине «жәрдем берсе» де).

Егер p-n өткелине сырттан 4.22 (a) сүйреттегидей U потенциаллар айырмасы түсирилсе (буны p-n өткелди туұры тутастырыу деп атайды), онда сырттан түсирилген E

майданы кристалда бар болған E майданын ҳәлсиретеди, 4.22-сүйретте келтирилген табалдырықтың бийиклиги киширейеди ҳәм тийкарғы тасыўшылардың тоғы

$$j_{\infty} = j_0 \exp(-(W - Ue) / kT) \quad (4.39)$$

формуласына сәйкес өседи. Тийкарғы емес тасыўшылар тоғы дерлик өзгермей қалады, себеби оның шамасы аз сандағы тийкарғы емес тасыўшылар тәрепинен шекленген. 4.23-сүйретте сырттан түсирилген кернеў У дың шамасына тийкарғы ҳәм тийкарғы емес тасыўшылар тоғының ғәрэзлиги және вольтамперлик характеристиканың (вольтамперлик характеристика сөзин кысқартып көбинасе ВАХ деп жазады) бир участкасы келтирилген ($U \geq 0$ ушын).



4.22-а сүйрет.

Сыртқы кернеўди туұры ҳәм кери бағытларда түсиргендеги р-п өткели жаңындағы потенциал табалдырықтар.

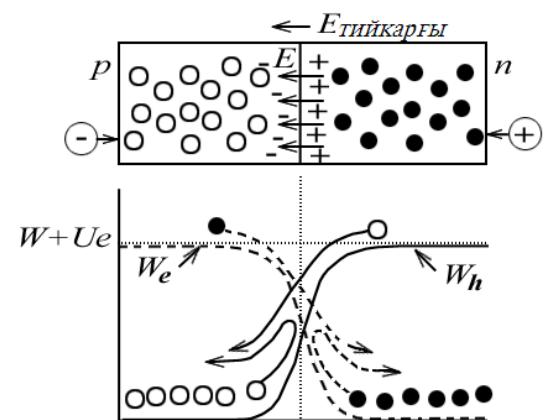
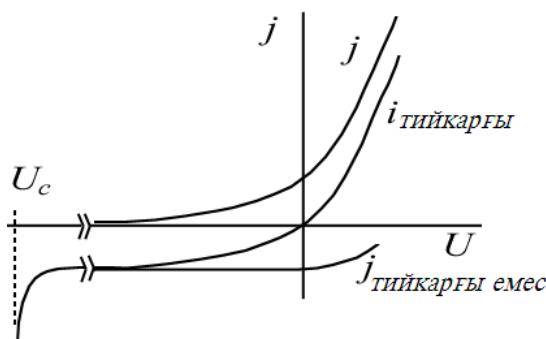


Рис. 4.22б.

Сыртқы кернеўди туұры ҳәм кери бағытларда түсиргендеги р-п өткели жаңындағы потенциал табалдырықтар.

Егер р-п өткелге түсирилген сыртқы потенциаллар айырмасының бағытын өзгертsek (бул жағдай 4.22 б сүйретте келтирилген, бул жағдайды р-п өткелди кери жалғаў деп атайды), онда сыртқы E майданы шегара дағы E майданын күшайтеди ҳәм 4.21-сүйреттеги 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-сүйретте сыртқы U кернеўди «кери» бағытта түсирген жағдайдағы тийкарғы ҳәм тийкарғы емес тасыўшылар тоқларының кернеўден ғәрэзлиги ҳәм $U \geq 0$ болған жағдайдағы вольт-амперлик характеристиканың участкасы келтирилген.

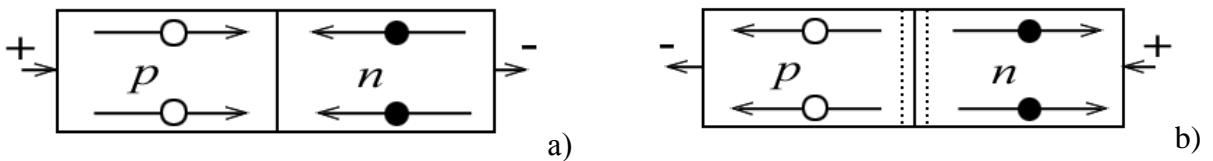


4.23-сүйрет.
р-п өткели арқалы өтип атырған тийкарғы ҳәм тийкарғы емес тасыўшылар тоқларының усы өткелге түсирилген кернеўден ғәрэзлиги, р-п өткелиниң вольт-амперлик характеристикасы (ВАХ).

p-n өткелиндеги пробой (ескертиүү: орыс тилиндеги пробой сөзи қарақалпақ тилинде эддете «тесик» деген мәнисти аңғартады). Кери полярлықка ийе кернеүди үлкейте берсек, онда базы бир U_c кернеүинде (кернеүдин бундай мәнисин пробой кернеүи деп атайды) p-n өткелинде пробой орын алады. Бул жабық халда p-n өткелине түсирилген кернеүдин тек жуқа шегаралық қатламға түссетүгүнлүгина байланыслы. Соныктан бундай жуқа қатламда электр майданының үлкен кернеүлиги пайда болады. Ал бул кернеү электронды киши аралық ишинде оның энергиясы ковалентлик байланыста бир электронды урып шығара алатуғында етип тезлendiridi. Буннан кейин сол еки электрон да тезленеди ҳэм олар да өз гезегинде ковалентлик байланыстағы электронларды ушып шығарады. Процесс усындау избе-изликтө дауам етеди. Электронлық лавинаны көз алдыға елеслететуғында жағдай жүз береди. Пробойға ВАХ тағы U_c участкасы сәйкес келеди (4.23-үүретке қараңыз). $U < U_c$ шәрти орынланғанда бул участкада тоқтың әстелик пенен өсиюи орын алады. Ал бундай жағдайды пробой құбылысын кернеүди стабилизациялау ушын қолланыўға мүмкиншиликтен көрсөтілді.

p-n өткелдиң вольт-амперлик характеристикасы сымметриялы емес, ал ең баслысы симметриялы емес: p-n өткел бир тәрепке қарай тоқты жақсы өткизеди, ал екинши тәрепке қарай тоқты жаман өткизеди.

p-n өткелиниң ҳәр қылышы бағыттарда тоқты ҳәр қылышы етип өткериүиниң себебин әпиүйай ҳәм көргизбели етип түсндириү мүмкин. 4.24-сүүретке итибар беремиз.



4.24-а сүүрет. p-n өткелди туўры (а) ҳәм кери (б) бағытта тутастырғандағы электронлар менен тесикшелердин қозғалыс схемасы

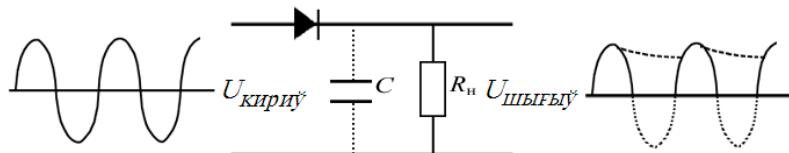
p-n өткелди шынжырға туўры бағытта тутастырса (4.24-а сүүрет) шеп тәрептеги областтағы тесикшелер еки типтеги ярым өткизгишлердин шегарасына қарай, ал он тәрептеги областтағы электронлар да сол шегара бағытта қозғалады. Шегарада олар рекомбинацияланады. Шынжырдың барлық участкаларында тоқ тийкарғы тасыўшылар менен тәмийинленеди, ал p-n өткелдин өзи тоқ тасыўшылар менен тойынған. Соныктан p-n өткелиниң өткизгишлігі жүдә үлкен болады.

p-n өткелди шынжырға кери бағытта тутастырса (4.24-б сүүрет) шеп тәрептеги областтағы тесикшелер шегарадан кери бағытта, ал он тәрептеги участкадағы электронлар да шегарадан кери тәрепке қарай қозғалады. Бөліп турған шегарада тоқты тийкарғы тасыўшылар қалмайды. Бул шегарадағы тоқты жуқа p-n өткелдеги аз сандағы тийкарғы емес тоқ тасыўшылар тасыйды. Нәтижеде p-n өткелиниң өткизгишлігі аз болады ҳәм вольт-амперлик характеристика 4.23-сүүреттегидей симметриялы емес характерге ийе болады.

Техникада p-n өткелди жийи қолланады. Олардың айырымлары ҳаққында айтып етемиз.

Тоқты туўрылау ҳәм сигналларды детекторлау. Бундай мақсетлерде ең бас бөлими p-n өткел болған ярым өткизгиш диодларды пайдаланады. Диодты шынжырға тутастырыудың схемасы 4.25-сүүретте көлтирилген. Егерде шынжырдың кириў бөлимине синусоида тәризли сигнал берилсе, онда диод өзи арқалы синусоиданың тек он мәнисли ярым толқынларын ғана өткөреди. 4.25-сүүретте диод арқалы өткен тоқ өтетуғын карсылықтың ушындағы сигналдың түри көлтирилген. Синусоиданы «тегислеў» мақсетинде қосымша С конденсаторы пайдаланылады. Бул конденсатор зарядланыў ҳәм разрядланыў арқалы «сүйир» ярым толқынларды тегислейді. Усындау схема тийкарында кернеүдин ең әпиүйай туўрылаўшылары ислейді. Бул туўрылаўшылар өзгермелі тоқты

турақлы тоққа айландырады. Тап усындағы схема бойынша ислейтуғын сигналлар детекторлары болса жоқарғы жийиilikli сигналлардың пайдалы информацияларды алып жүретуғын керекли бөлімнен кесип алғыға мүмкіншилик береди.



4.25-сүйрет.

p-n өткелди тоқларды туурылау ҳәм сигналларды детекторлау ушын жалғаудың схемасы.

Кернеў стабилизаторлары. p-n өткелдин пробойы құбылысын кернеўди стабилизациялау ушын пайдаланады. Буның ушын орнықлы емес (стабильный емес) $U_{\text{кириү}}$ кернеў дерегине резистор менен стабилитроннан туратуғын шынжыр тутастырады. Стабилитрон болса p-n өткелинен турады. Стабилитрон кери бағытта тутастырылады ҳәм берилген кернеўге есапланған болады (4.26-сүйрет). Егер стабилитрондағы кернеўдин мәниси критикалық мәнистен үлкен бола басласа ол ҳәм R резисторы арқалы өтиші тоқтың шамасы үлкейеди ҳәм резисторға түскен кернеў де үлкейеди. Усының салдарынан стабилитронға түскен кернеў пробой құбылысы басланатуғын критикалық мәнистен үлкен бола алмайды. Бундай жағдайда стабилли емес кернеў еки кернеўдин қосындысынан турады: резистордағы стабилли емес кернеў ҳәм стабилитрон менен нагружкадағы стабилли кернеў (4.26-сүйрет).

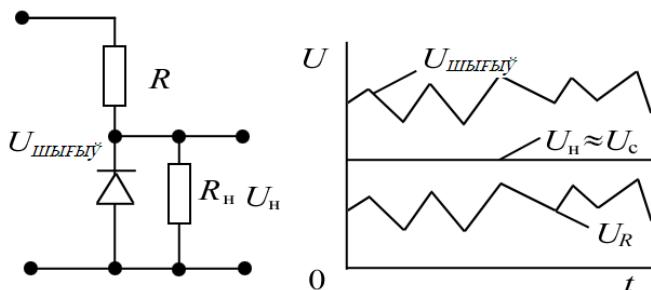
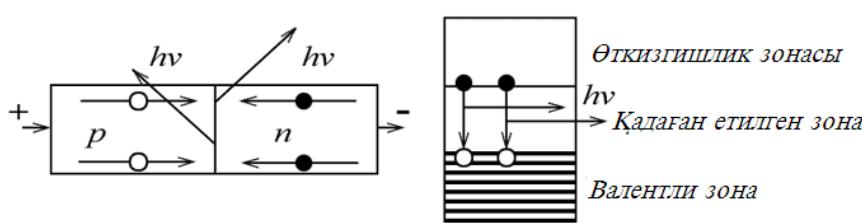


Рис. 4.26.
p-n өткелди кернеўди стабилизациялау
ушын тутастырыў схемасы.

p-n өткели тийкарында ислейтуғын стабилитронларды ҳәр қылыш кернеўлер ушын арналған етип сәйкес санаат тараўлары көп санда ислеп шығарады. Олар үш вольттан жүзлеген вольтлардағы диапазонларда ислейді.

Жақтылық шығарыўшы диодлар. Жақтылық шығарыўшы диодлар электр тоғының энергиясын жақтылық энергиясына айландырады. Оның ислеў принципин 4.24- ҳәм 4.27-сүйретлерде көлтирилген схемалар тийкарында түсиниў мүмкін. Бул схемаларда p-n диодлар тууры бағытта жалғанған. Шегарарада р областтан келген тесикше n областтан келген электрон менен рекомбинацияға ушырайды. Бул электронның өткизгишлик зонасынан валентлик зонаға өтийине эквивалент. Соныңтан бундай өтийүэлектромагнит нурлардың кванттың шығарыў менен жүрийи керек. Ал ярым өткизгиште болса қадаған етилген зонаның кеңлигин инфрақызыл областтан ультрафиолет областқа шекемги квантлар шығатуғындай етип сайлап алғыға болады.



4.27-сүйрет.

Жақтылық

a) шығаратуғын (a) ҳәм



лазерлик диодтың (b)
жұмыс ислеү схемасы

b)

Жақтылық шығаратуғын диодлардың пайдалы тәсир коэффициенти жүдә жоқары болып, оның мәниси 80 процентке шекем жетеди. Ал ең жақсы қыздырыў лампаларының пайдалы тәсир коэффициенти оннан он еседей киши. Ҳақыйқатында да сәтли түрде соғылған жақтылық шығарыўшы диодта сол диод арқалы өтиўши тоқты пайда ететуғын ҳәр бир электронның тесикші менен рекомбинацияға ушырап нурланыў кванттың шығарыўы керек. Бундай жағдайда энергияның аз муғдардағы жоғалыўы нурландырылған кванттың диодтың материалы тәрепинен жутылып, оның жыллыштық энергиясына айланыўына байланыслы. Жақтылық шығаратуғын диодлердың өмири жүдә узак. Себеби бундай диодларда тез арада истен шығатуғын қызыўшы сымлар, катодлар ҳәм сол сыйқыл болимлер болмайды.

Жақтылық шығарыўшы диодлар экономлы миниатюралық жақтылық дереклері сипаттында кең түрде қолланылады. Олар берилген жийилик диапазонында жақтылық шығарады. Сонықтан бундай диодлар әдеттегидей электр лампаларын алмастыра алады, жақтыландырыў дүзилислеринде жақтылық дереги сипаттында пайдаланылады.

Лазерлик жақтылық шығарыўшы диодлар. Лазерлик жақтылық шығарыўшы диодлардың ислеў принципи жақтылық шығарыўшы диодлардың ислеў принципи менен дерлик бирдей. Бирак бир қатар шеклерди есапқа алғуымыз шәрт. Бул диодлarda ҳаллардың инверсиялық толтырылыўын жүзеге келтириўимиз керек (яғни қозған ҳалда электронлар көп, ал тийкарғы ҳалда электронлар аз). Бундай жағдайда p-n өткели областтында жүзеге келтириў мүмкін. Өткізгішлик электронларының үлкен концентрациясы (олар лазердин қозған ҳалына сәйкес келеди) n областтан келген электронлар тәрепинен тәмийин етиледи (4.27-б сүйрет). p областтан келиўши тесикшелердин үлкен концентрациясы өткелдеги тийкарғы ҳалда турған электронлардың аз (N_1) санына сәйкес. Бундай жағдайда ҳаллардың толтырылыўының инверсиясын пайда етиў мүмкін (p-n өткели областтында қозған ҳалдағы электронлардың концентрациясы N_2 , тийкарғы ҳалдағы электронлардың концентрациясы N_2 дең үлкен). Лазерлик резонатордың айналары сипаттында ярым өткізгіш материалдың тегисленген қанталлары хызмет етеди (4.27-сүйретте келтирилген). Бул тегисленген қанталлардың бириң ярым мөлдир етеп ислеиди ҳәм бул бет арқалы лазер нұры шығады (4.27-б сүйрет).

Лазерлик диодлар миниатюралық, экономлы диодлар болып, оның узынлығының шамасы 1 см дең көп емес. Бундай диодлар жүдә күшли жақтылық дәстесин бере алады ҳәм сонықтан оларды информациаларды жазыў ушын полимер пленкалардың зәрүрли болған орынларын қүйдіриў ушын жийи пайдаланады. Лазерлик диодларды информацияны жазыў ҳәм оқыў ушын соғылған оптикалық дүзилислерде, лазерлик принтерлерде, информациаларды шийше талшықлы кабеллер арқалы жеткерип бериўши системаларда кең түрде қолланады.

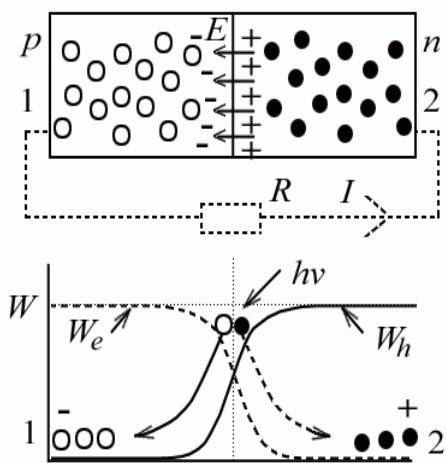
p-n өткелиндеги тоқ дереклері. Ҳәзирги ўақытлары электр тоғының генераторлары сипаттында p-n өткелиндеги тоқ дереклері кеңнен қолланылады. Бундай өткеллердеги тоқ дереги болып төмендегилер хызмет етеди:

1) p-n өткелине түсіўши электромагнит нурланыўы энергиясы. Бундай дүзилислерди ярым өткізгішли Қуяш элементлери деп атайды;

2) p-n өткелине алып келинетуғын жыллыштық энергиясы. Бундай дүзилислерди ярым өткізгішли жыллыштық элементлери деп атайды.

Ярым өткізгішли Қуяш элементлери. Ярым өткізгішли Қуяш элементлеринин ислеў принципи 4.28-сүйретте келтирилген схемада көрсетилген. Бул схемадағы p-n

Етийинде жоқарыда атап өтилген процесслердин нәтийжесинде электр майданы пайда болады хәм электронлар менен тесикшелердин энергияларының тарқалығы тоқты пайда етий ушын жумсалады. p-n өткели областында жутылған квант тесикше-электрон жубын пайда етеди, электр майданы тесикшени p областқа, ал электронды n областқа ысырады. Бундай жағдайда жақтылық нурларының тәсиринде тесикшелер p, ал электронлар n областқа жыйналады. Усының нәтийжесинде 1 ҳәм 2 ноқатларын бир бири менен тутастырақ тоқ өтеди ҳәм бул тоқты пайдаланыў мүмкиншилигине ийе боламыз.



4.28-сүйрет.

Ярым өткизгишли Қуяш элементинин конструкциясы ҳәм жумыс ислеўинин принципи.

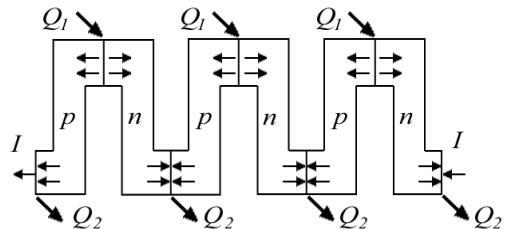


Рис. 4.29.

Ярым өткизгишли областларды жыллылық элементтери батареясына тутастырыў. Электрон-тесикше жубының туўылығы жыллылықтың жутылығының салдарынан жүзеге келеди. Соныктан сүүреттиң жоқарысындағы p-n областты қыздырыў керек болады. Электрон-тесикше жубының рекомбинациясының салдарынан жыллылық бөлиніп шығады, соныктан сүүреттиң төменинен жыллылықты алып кетиў керек болады.

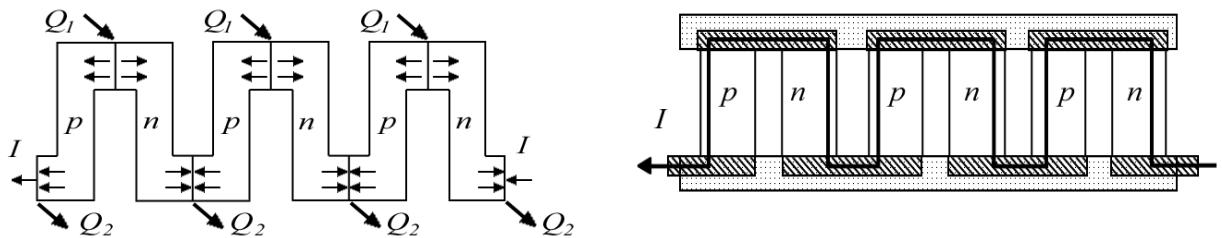
Ярым өткизгишли Қуяш элементлерин p типиндеги ярым өткизгишиң пластинкасы түринде алады. Бул пластинкаға металдың жуқа мөлдир қатламын отырғызыады, ал бул өткизгишиң n типиндеги ярым өткизгиш сырттында қараў мүмкін. Буннан кейин металл қатламды қорғап тұрышы мөлдир материал менен жабады. Бул қатлам арқалы өткен жақтылық квантлары металлдың жуқа қатламынан өтип p-n областында жутылады. Тоқты ярым өткизгишли пластинкадан ҳәм жуқа қорғап тұрышы қатламнан «алып кетеди». Бундай элементтиң ушларында пайда болған потенциаллар айырмасы вольттен әдеўир киши, ал тоқтың шамасы бир неше миллиамперди қурайды. Әдетте элементлерди батареяға тутастырады (бұны Қуяш батареясы). Ал элементлерди бир бири менен избе-изде параллел де тутастырыўға болады.

Ярым өткизгишли жыллылық элементтери. Ярым өткизгишли жыллылық элементлеринин жумыс ислеў принципи Қуяш элементлеринин жумыс ислеў принципине үксас. Тийкарғы айырма соннан ибарат, p-n областында электрон-тесикше жубы бул жағдайда жыллылықтың тәсиринде пайда болады.

Ярым өткизгишли жыллылық элементлерин әдетте 4.29-сүйретте көрсетилгенде өтип батареяға тутастырады. Бундай жағдайда қандай да бир жыллылық дереги тәрепинен қыздырылатуғын p-n өткеллери конструкцияның бир тәрепин, ал әдетте суў ямаса ҳаўа ағысы менен қыздырылатуғын p-n өткели конструкцияның екинши бөлегин қурайды.

Ярым өткизгишли салқынлатқыштар. Ярым өткизгишли салқынлатқыштар сондай дүзилис болып табылады, электр тоғы өткерилигенде бундай дүзилистиң бир тәрепи салқынлайды, ал екинши тәрепи қызады. Оның схемасы 4.30-сүйретте көрсетілген. p ҳәм n областларын шынжыр тәризли өтип тутастырады ҳәм бул шынжыр арқалы тоқ өтеди. Жуп номерлерге ийе областларда электронлар менен тесикшелердин рекомбинациясы орын алады ҳәм бул областлардан жыллылық бөлиніп шығады. Ал тақ номерлары областларда электрон-тесикше жуплары пайда болады ҳәм соныктан бундай областларда

энергия жутылады. Ярым өткизгишлердин қадаған етилген зоналарының кеңлигин ҳәм басқа да характеристикаларын таңлап алыў арқалы жылдылық энергиясының жутылыўы менен шығарылыуының жүзеге келийин әмелге асырыў мүмкін. Егер тутастырылған орынлардан жылдылық алып кетилетуғын болса салқынлатқыш машина (салқынлатқыш машина жылдылықты салқын денеден температурасы жоқары болған денеге алып береди) алынады. Әдетте ҳәр қыйлы типтеги ярым өткизгишлерди 4-30-б сүйретте келтирилген схема бойынша жалғастырады. Бундай жалғастырыўда «салқын» жағы бир тәрепте, ал ыссы жағы екинши тәрепте жайласады. Усындағы дүзилистиң жәрдеминде 30-50 градуслық температураалар айырмасын алады.



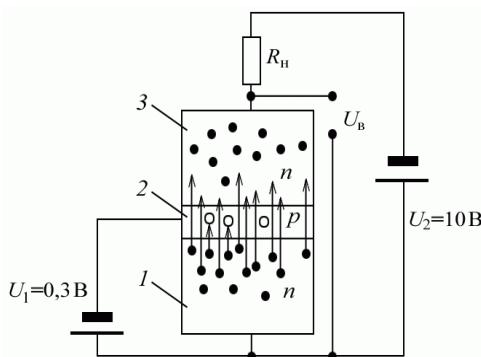
4.30-а ҳәм b сүйретлер.

Салқынлатқыштағы ярым өткизгиш областлардың бир бири менен жалғаныўы.

Электрон-тесикше жубының пайда болыўы жылдылықтың жутылыўы менен жүреди. Соныңтан р-п өткелдин жоқарыдағы областлары менен олар менен тутасқан диэлектрик пластинка салқынлайды. Электрон-тесикше жубының рекомбинациясы жылдылықтың шығарылыўы менен жүреди, бул жылдылық р-п өткелдин тәменги тәрепиндеги областлардан диэлектрик пластинкалардың жәрдеминде алып кетиледи.

Ярым өткизгишли салқынлатқышлар миниатюралық жеңіл салқынлатқышлар талап етилестүгін техниканың тараулырында кең түрде қолланылады. Бундай салқынлатқышлардың жәрдеминде инфракызыл нурланыуының датчиклерин, ярым өткизгишли лазерлерди ҳәм тағы басқалар салқынлатылады.

Ярым өткизгишли транзистор. Егер ярым өткизгиштин үш областын 4.31-сүйретте көрсетилгендей етип тутастырса ярым өткизгиш транзистор деп аталатуғын әсбап алынады. Бундай транзистордың жәрдеминде сигналларды, тоқларды, кернеўлерди күштейтіў мүмкін. Ярым өткизгиштин ҳәр қыйлы типлеринин избе-излигине байланыслы транзисторлар р-п-р ҳәм n-p-n типинде болады (транзисторлардың тек еки типи бар).



4.31-сүйрет.
n-p-n типиндеги транзисторды тутастырыў
схемасы.

n-p-n транзистордың жумыс ислеў принципин қарап өтемиз. 2 арқалы белгиленген ортадағы областтың жүдә жуқа болыўы әхмийетке ииे. Себеби 1 ҳәм 2 областларынан келген электронлардың көпшилигинин тесикшелер менен 2 областында рекомбинацияға ушырамай жоқарыдағы 3 областына келип жетиўи талап етиледи. Бул принципиаллық талап. 1, 2 ҳәм 3 областлары транзистордың сәйкес эмиттери, базасы ҳәм коллекторы деп аталады. Оларға өткизгишлер жалғанады. Бул өткизгишлерди де радиотехникада транзистордың эмиттери, базасы ҳәм коллекторы деп аталады.

Эмиттер менен базаға жалғанған өткизгишлерге шама менен 0,3 вольт кернеў түсириледи. Демек эмиттер-база өткели азмаз ашылған деген сөз. Коллектор хәм эмиттерге шама менен 3 – 30 вольт кернеў түсириледи. Демек коллектор-база өткели жабық деген сөз. Бирақ эмиттер областынан келген электронлардың айрыымлары ғана база областында тесикшелер менен рекомбинацияға ушырайды (шама менен 20-100 электронның биреүі). Қалған электронлардың барлығы да рекомбинацияға ушырауға «ұлгермей» коллектор областына «секирип» ете алады..

Эмиттер-базадағы кернеўдин қиши өзгериси эмиттер-база арасындағы р-п өткели арқалы өтетуғын тоқтың ұлken шамаларға өсиүин, ал бул өз гезегинде коллектор областындағы тоқтың өсиүин тәмийинлейди. Бундай жағдайда нагрузка қарсылығында кернеўдин күшли өзгериси жүзеге келеди. Солай етип эмиттер менен база арасындағы кернеў менен тоқтың қиши өзгерислері транзистордың база менен коллекторы арасындағы кернеўдин ұлken шамаларға өзгерисин болдырады. Транзистор тоқ пенен кернеўди күштетуғын компактлы әсбап болып табылады. Оның жумыс ислеўине үш электродлы вакуумлы радиолампандың жумыс ислеўине уқсас.

Радиолампаларға салыстырғанда транзисторлар компактлы (хәзирги ўақытлары микросхемалардың қурамына кириўши транзисторлардың өлшемлери бир микрометрден аспайды, ал бир микросхема өз ишине 10^6 - 10^8 шамасына шекем транзисторларды ала алады). Транзисторлар беккемлиги жақтан радиолампаларға салыстырғанда әдеўир жоқары (себеби транзисторларда торлар, шийше бөлімлер, қызатуғын катод болмайды), радиолампаларға салыстырғанда әдеўир узақ ўақыт ислейди (себеби күшли қызатуғын деталлары жоқ) хәм технологиялық жақтан жудә жоқары әхмийетке иие [шаңландырыў (напыление) хәм қыздырыў (отжиг) жолы менен бир кристалда дөретилген микросхемалардың қурамына кириўши транзисторлардың бирден 10^5 - 10^8 данасын алады].

Ярым өткизгишлерден соғылған транзисторлардың хәм басқа да ярым өткизгишли әсбаплардың кемшилиги сыпатында бириңи гезекте олардың қызыға, радиацияға айрықша сезгирилгін атап өтиў керек. Соңықтан күшли радиация бар орынларда ярым өткизгишли әсбапларды табыслы түрде пайдаланыў мүмкін емес хәм соңықтан сондай орынларда усы күнлөргө шекем радиолампалары бар әсбап-үскенелер пайдаланылады.

1956-жылы Уильям Брэдфор Шокли, Джон Бардин хәм Уолтер Хаузер Браттейнлер ярым өткизгишлерди изертлеў бойынша жумыслары хәм транзисторлық эффектті ашқанлығы ушын Халық аралық Нобель сыйлығын алғыға миясар болды.

Ярым өткизгишли транзисторлардың пайда болыўы XX әсирдеги ең ұлken техникалық революцияны болдырыды. Компьютерлик, басқа да электронлық техниканың компактлы хәм исенимли элементлерин дөретиў мүмкиншилиги жүзеге келди.

Қатты денелердин магнитлик қәсийетлери

Белгили болған барлық заттар өзлериниң магнитлик қабыллағышлығының белгиси бойынша диамагнетиклер хәм парамагнетиклер болып еки ұлken топарға бөлинеди. Парамагнитлик затлардың арасындағы магнитлик жақтан тәртиплескен затларды айырып көрсетеди. Бундай затларда қоңылас атомлардың магнит моментлери бағытлары бойынша тәртиплескен. Мысалы ең әпиўайы жағдай ретинде ферромагнетиклерди алып көрсетиў мүмкін. Оларда барлық атомлардың магнит моментлери бир бири менен параллель. Магнит моментлериниң тап усындай болып тәртиплесиў затлардың тек магнитлик қәсийетлериниң емес, ал басқа да көплеген физикалық қәсийетлериниң (мысалы жыллылық сыйымлығын) қәлиплесиўине тәсир жасайды. Биз төменде магнитлик жақтан тәртиплескен затлардың физикалық қәсийетлерин қарап өтемиз.

Магнитлик тәртиплесиўдин тәбияты

Атомлардың магнит моментлериниң тәртиплескен түрде жайласыўлары электростатикалық тәбиятка ийе хәм электронлардың толқын функцияларына Паули принципи тәрепинен қойылатуғын шеклер менен байланыслы. Буны төменде келтирилген еки электронның толқын функциясының түри хақындағы таллаудың жәрдеминде көрсетиў мүмкін. Бул таллауды көп санлы электронлар ушын да улыўмаластырыў мүмкін.

Еки электронның толқын функциясы $\Psi_{r_1, r_2, S_1, S_2}$ арқалы белгилеймиз. Егер бул толқын функциясының спинлик бөлими S_1, S_2 оның координаталық бөлими r_1, r_2 дең ғәрэзсиз 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 түринде көрсетиў мүмкін. Квант механикасында спинорбиталық тәсирлесиў киши болған жағдайда бундай жақынласыў дурыс нәтийжелерди береди деп есаплайды. Электронлардың толқын функциясының антисимметриялығы еки жағдайда жүзеге келеди:

1) толқын функциясының спинлик бөлими антисимметриялы (бул спинлердин қарама-қарсы бағытларына сәйкес келеди), ал оның координаталық бөлими симметриялы ямаса симметриялы емес,

2) толқын функциясының спинлик бөлими симметриялы (бул сипинлердин бағытлас болыўына сәйкес келеди), координаталық бөлими болса антисимметриялы.

Симметриялық толқын функциясының координаталық бөлими мынадай түрге ийе:

$$\Psi_r(\vec{r}_1; \vec{r}_2) = \Psi_{r1}(\vec{r}_1) \cdot \Psi_{r2}(\vec{r}_2) + \Psi_{r1}(\vec{r}_1) \cdot \Psi_{r2}(\vec{r}_2),$$

Ал антисимметриялық толқын функциясының координаталық бөлими мынадай түрге ийе:

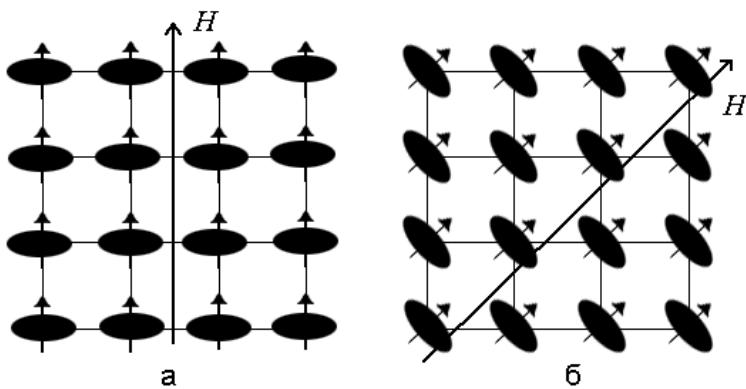
$$\Psi_r(\vec{r}_1; \vec{r}_2) = \Psi_{r1}(\vec{r}_1) \cdot \Psi_{r2}(\vec{r}_2) - \Psi_{r1}(\vec{r}_1) \cdot \Psi_{r2}(\vec{r}_2).$$

Солай етип спинлердин бир бирине салыстырғандағы бағытлары (ориентациялары) электронлардың толқын функцияларының түрин өзгертеди екен. Бул жағдай электронлар қабықларының ҳәр қыйлы формалары хәм электростатикалық энергияның ҳәр қыйлы мәнислери менен байланыслы. Сpinлердин антипаралель ҳәм параллель болған жағдайларына сәйкес келиўши (ямаса толқын функциясының координаталық бөлимдерин симметриялық ҳәм антисимметриялығына сәйкес келиўши) энергияның мәнислеринин айырмасы алмасыў энергиясы деп аталады ҳәм U_{alm} арқалы белгиленеди. Квант механикасында U_{alm} шамасының $2J S_1, S_2$ шамасына тең екенligи дәлилленеди, яғни $U_{alm} = 2J S_1, S_2$. J шамасы алмасыў интегралы деп аталады ҳәм оның мәниси электронлар бултының формасына, ең баслысы олардың бир бири менен қалайынша қосылысадатуғынлығына байланыслы.

J шамасының ең үлкен мәниси толтырылмаған ишкі электронлық қабықларға ийе атомларда бақланады. Мысал ретинде темирди, хромды, марганецти, кобальтты, никельди, жерде сийрек ушырасатуғын ҳәм трансуран элементлерин көрсетиў мүмкін. Алмасыў интегралының белгиси де, мәниси де атомлар арасындағы қашықлықтан ғәрэзли. Сонықтан J шамасының мәниси ҳәр қыйлы химиялық бирикпелерге кириўши атомлардың бирдей жубы ушын ҳәр қыйлы мәнислерге ийе бола алады. Бул жағдай өз гезегинде магнитлик тәртиплесиўдин көп санлы типлерин пайда етеди.

Атомлардың магнит моментлері тәртиплескенде энергиялық жақтан бир қанша утады. Бул утыстың шамасы атомлар қайтадан тәртиплескендеги химиялық байланыстағы энергияның утысындай мәниске ийе. Усындағы себеплерге байланыслы атомлардың магнит моментлеринин тәртиплесиўи құймадағы атомлардың қайтадан топарларға бөлинүүин, ҳэтте қурамы бир текли болған қуйманың бир неше фазаларға ажыралыўын болдыра алады (бир фаза магнит моментлері күшли түрде тәртиплескен элемент пенен бай, екиншиси «қалған» элементлерге бай фазалар).

Магнитлик анизотропия. Кристалда магнитлик тәртипесиү өнергиясы кристаллографиялық көшерлерге салыстырғандағы атомлардың магнит моментлеринин ҳәм усыған байланыслы электронлық қабықлардың бағыты менен байланыслы. 5.1-сүүретте магнит моментлеринин бағытларының, оның менен байланыслы болған атомлардың электронлық қабықларының кристаллографиялық көшерлерге салыстырғандағы еки түрли болып бағытланыуы келтирилген. Электронлық қабықлардың бир бири менен бетлесиү ҳәр қыйлы болғанлықтан сүүретте келтирилген қабықлар ушын өз-ара тәсирлесиүдин ҳәр қыйлы энергиясы сәйкес келеди. Бундай жағдайларда магнит моментлеринин берилген H майданында [100] ямаса [110] бағытларындағы энергиялары ҳәр қыйлы мәнислерге ийе болады. Бул энергияны магнит анизотропиясы энергиясы деп атайды. Бундай энергияның көлемлик тығыздығы ω_m шамасын ярым феноменологиялық формулалар жәрдеминде есаплайды.



5.1-сүүрет.

Атомлардың магнит моментлеринин ҳәм H майданының ҳәр қыйлы ориентацияларындағы атомлардың электронлық қабықларының бир бириң жабыуы.

Мысал келтиремиз. кублық пәнжереге ийе кристалдағы ω_m шамасын кристалдың [100] типиндеги бағытына салыстырғандағы магнитлениү векторының бағытлауышы косинуслары (α, β, γ) лардың функциясы деп есаплайды. Бул функцияның мәниси косинуслардың белгисинен ғәрзели болмауы ҳәм косинуслардың орынларын алмастырыуға қарата симметриялы болыуы шәрт. Себеби кублық пәнжереде берилген вектордың бағыты менен оған қарама-қарсы бағыт, соның менен бирге барлық үш дана [100] типиндеги көшерлер эквивалент. Усындағы 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 женил магнитлениү бағыты деп атайды. Мысалы КОК структураға ийе темир ушын [100] типиндеги, ҚОК структураға ийе никель ушын [111] типиндеги, гексагоналлық пәнжереге ийе кобальт ушын [0001] бағыты жәнел магнитлениү бағыты болып табылады. Жаңа магнитлик материалларды дөреткенде ҳәм оларды техникада пайдаланғанда магнитлик анизотропияны есапқа алыу зәрүр. Магнитлик анизотропия турақлы магнитлер соғыў ушын пайдаланылатуғын көплеген материаллардың ең жоқары характеристикалары болып табылады.

Магнитострикция. Атомлардың магнит моменттери менен олардың электронлық қабықларының бағытлары бир бағытқа қарай өзгергенде (5.1-сүүрет) ҳәр қыйлы бағытлардағы атомлардың тең салмақлық ҳалларының өзгериүі керек. Себеби асимметриялық электронлық қабықлар ҳәр қыйлы бағытларда бир бири менен ҳәр қыйлы болып тәсирлеседи. Усының салдарынан кристалдың геометриялық өлшемлери өзгерислерге ушырайды: айырым бағытлар бойынша қысқарады, ал айырым бағытлар бойынша ұлкейеди. Бул құбылыш магнитострикция деп аталады.

Магнитострикцияны тойының магнитострикциясы константасы менен характерлайди. Бул константасын мәниси барлық моментлерди толық бура алатуғын күшли H магнит майданындағы кристалдың узынлығының салыстырмалы өзгерисине тең. Көпшилик заттар ушын бул константасын мәниси 10^{-4} - 10^{-5} шамасында. Бирақ константасын мәниси 10^{-3} ке шамалас гигант магнитострикцияга ийе сиерек жер элементлериниң бирикпелери де бар.

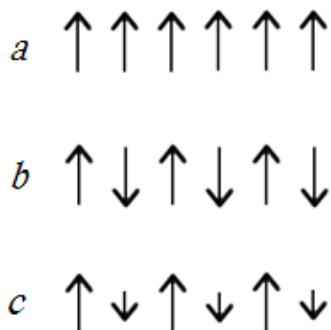
Магнитострикцияны сести ҳәм ультрасости генерациялаушы дүзилислерде кең түрде қолланады. Магнитострикция коэффициенти үлкен болған материалдан соғылған сердечники жийилиги ω болған өзгермели синусоидалық тоқ пенен магнитлайди. Усының салдарынан сердечниктиң узынлығы 2ω жийилиги менен өзгереди. Ал усындай сердечник мембранаға тутастырылған болса ол этираптағы орталықты тербелтиң мүмкіншилигине ийе болады.

Магнитострикцияға кери болған қубылыс та бар. Бундай жағдайда кристалдың деформациясы электронлық қабықлардың бағытларының, солар менен бирге атомлардың магнит моментлериниң анизотропиялық бағытланыўына алыш келеди (5.1-сүүретте көлтирилген). Демек кристалды деформациялау оның магнитленијине алыш келеди деген сез. Бул қубылысты да техникада тербелислер менен вибрацияларды өширеүтүүн дүзилислердеги материалларда кең түрде қолланады (мысалы $Fe - Cl$ ямаса $Fe - Al$ қуймаларында). Бундай конструкцияларда серпимли тербелислер магнит материал кристаллын (көпшилик жағдайларда поликристаллын) деформациялады. Усының салдарынан бундай материал қайтадан магнитленеди ҳәм буның ушын қосымша энергия талап етиледи. Бул қосымша энергия тербелмели процесслерден алынады ҳәм нәтийжеде тербелис амплитудасы кемейеди. Вибрацияның бир неше есе кемейиўи ушын бүйімнен тек айырым деталларын усындай материалдан соғыў жеткиликли.

Магнитлик тәртиплесиўдің типлери

Қатты денелердеги атомлардың магнит моментлериниң бағытлары бойынша тәртиплесип жайласыўларының көплеген типлери бар. Бул жағдай алмасыў интегралының бир бири менен тәсирлесиўши атомлардың құрылышынан, олар арасындағы қашықтықтардан, үш өлшемли кристаллық пәнжередеги олардың бир бирине салыстырғандағы жайласыўларынан ғәрзелигинин ақыбети болып табылады. Биз дәслеп бирдей типтеги атомлардан туратуғын кристаллық денелерди қарап шығамыз

Жақын қоңылас атомлар ушын алмасыў интегралының мәниси оң шама бола алады. Бундай жағдайда спинлер бир бирине параллель жайласады ҳәм ферромагнетизмге сәйкес келеди (5.2-а сүүрет). Егер алмасыў интегралының мәниси нолден киши болса спинлер антипараллель жайласады. Бул жағдай антиферромагнетизмге сәйкес келеди (5.2-б сүүрет). Ферромагнетиклер менен антиферромагнетиклер магнитлик жақтан тәртиплескен затлардың ең эпиўайылары болып табылады. Ең белгili ферромагнетиклер қатарына КОК пәнжереге ийе темир менен ҚОК пәнжереге ийе никель, ал ең белгili антиферромагнетиклер қатарына хром менен марганец киреди. 5.2- (а, б) сүүретлерде ферромагнетикиң магнитленгенлиги жүдә үлкен, ал антиферромагнетикиң магнитленији нолге жақын шама екенлиги көринип түр.



5.2-сүйрет.

Спинлердин тәртиплесиүиниң типлери:

- a) ферромагнетик ушын,
- b) антиферромагнетик ушын,
- c) ферримагнетик ушын.

Егер атомлар ҳәр қылыш магнит моменттерине иие болса, онда айырым атомлардың магнит моменттери антипаралель бағытланыуы мүмкін (5.2-сүйрет). Бул жағдай ферримагнетизмге сәйкес келеди. Феррит деп аталауғын ферримагнетикиң магнитленгендиги әдеттеги ферромагнетиклердеги жағдайға салыстырғанда киши, бирақ әдеүир үлкен шаманы курайды

Айырым химиялық бирикпелерде атомлардың магнит моменттериниң қурамалы түрде жайласыуы да бақланады. Мысалы магнит моменттериниң спираль тәризли болып тәртиплесиүи мүмкін.

Құймаларда ҳәр қылыш магнит моменттерине иие атомлар тәртипсиз түрде араласқан. Соның ушын бундай материалларда магнитлик тәртиплесиүдин типи қуйманың химиялық қурамы өзгергенде өзгереди. Себеби бул жағдайда бирдей типтеги атомлар арасындағы орташа қашықтық ҳәм усы қашықтық пенен байланыслы болған алмасыуы интегралының мәниси өзгереди. Мысал ретинде $Mn - Al$ қуймасын көрсетиү мүмкін. Таза марганецтеги Mn атомлары арасындағы орын алатуғын қашықтықтар ушын алмасыуы интегралының мәниси нолден киши (яғни терис шама). Сонықтан ол антиферромагнетик болып табылады. Марганецке алюминийди қосқанда Mn атомлары арасындағы қашықтық үлкейеди. Усының салдарынан Mn атомлары арасындағы қашықтық белгили бир мәниске жеткенде (яғни Al атомларының белгили бир концентрациясында) алмасыуы интегралының мәниси нолден үлкен болады. Бундай жағдайда Mn атомларының магнит моменттери ферромагнитлик типтеги тәртиплеседи.

Магнитлик тәртиплесиүди изертлеү усыллары. Кристаллардағы спинлердин бағыттарын (ориентацияларын) үйрениүдин ең исенимли усылы нейтронлардың шашырауы болып табылады. Нейтрон магнит моментине иие. Оның мәниси $\mu_n = 0,966237 \cdot 10^{-29}$ Дж/Тл. Сонықтан ол атомлардың магнит моменттери менен тәсирлесе алады. Соның менен бирге нейтронлар ядроларда өзлериниң энергияларын өзгертпей шашырай алады. Усы жағдайларға байланыслы нейтронлардың дифракциясын спинлердин бағыттарын үйрениү ушын пайдаланады.

Хәр бир атомның нейтронларды шашыратыү амплитудасы еки қосылышыдан турады: ядролық ҳәм магнитлик.

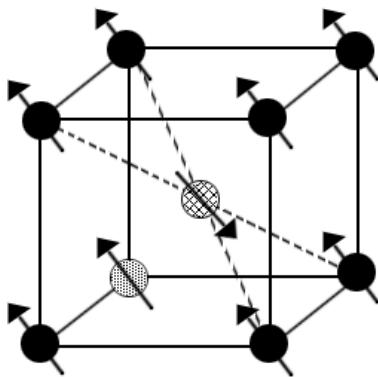
Бириншиси ҳәр бир изотоптың құрылышынан ғәрезли ҳәм ҳәр қандай изотоплар ушын ҳәр қылыш мәнислерге иие.

Екиншиси болса атомның магнит моменти μ дин шамасынан ҳәм бағытынан ғәрезли. Егер шашырау векторы G менен μ өз-ара перпендикуляр болса шашырау максималлық мәнисике, ал параллель болғанда нолге тең. Солай етип кристалды G бағытында магнитлел магнитлик шашырауды «жок» етиүгे болады деген сөз. G менен μ векторлары арасындағы мүйешлер ҳәр қылыш мәнислерге иие болған жағдайлар ушын дифракциялық картиналардың сериясы алынады. Бул картиналардың жәрдеминде «магнитлик» ҳәм «ядролық» системалардың үлеслери анықланады.

Ферромагнитлик тәртиплесиү жағдайында барлық атомлар бирдей шашырау амплитудасына ийе ҳәм сонлықтан нейтронлар менен рентген нурларының шашырау картинасы бирдей болады.

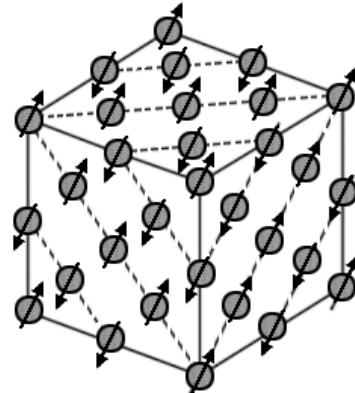
Антиферромагнитлик тәртиплесиүде қоңсылас атомлардың магнит моменттери бир бирине қарама-қарсы бағытқа ийе, ал шашыраған толқынның амплитудасына магнитлик үлестің белгилери ҳәр қыйлы болып қоңсылас атомлардың шашырау амплитудалары ҳәр қыйлы мәнислерге ийе. Нәтийжеде қосымша «магнитлик» шашыраулар пайда болады (атомлардың жайласыўларының тәртиплесиүи де тап усынданай «қосымша» шашырауларды пайда ететуғынлығын еске түсиремиз).

Енди қиялымызда базы бир гипотезалық структураларды аламыз ҳәм оларда нейтронлар шашырағанда қандай «магнитлик» шашыраулардың пайда болатуғынлығын қарап өтемиз. Бундай гипотезалық структуралар (курылыштар) ҳәм олардағы атомлардың магнит моментлеринин бағытлары 5.3-сүйретте көлтирилген. Сүйретте көлтирилген элементар күтышта көлемде орайласқан кублық (КОК). Бундай күтышада индекслердин қосындысы тақ болғанда шашырау орын алмайды (биз буны жоқарыда көргенбиз). Бирақ магнитлик көз-қарастан 1 ҳәм 2 атомлары ҳәр қыйлы, олардың шашыратыў амплитудаларының мәнислери де ҳәр қыйлы. Демек бундай жағдайда индекслеринин қосындысы тақ болған структурадан тыс (сверхструктурные) шашыраулардың пайда болыўы шәрт.



5.3-сүйрет.

Көлемде орайласқан кублық структуратаға ийе гипотезалық антиферромагнитлик кристалдағы атомлардың магнит моментлеринин өз-ара жайласыўлары.



5.4-сүйрет. Антиферромагнитлик тәртиплесиүгө ийе марганец окиси MnO кристаллындағы Mn атомларының магнит моментлеринин жайласыўлары.

Mn атомларының спинлери (111) типиндеги тегисликлердин биринде бирдей 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 моментлеринин тәртиплескен жайласыўы идеалластырылған жағдайлар болып табылады. Себеби биз атомлардың жыллылық қозғалысларын есапқа алғанымыз жоқ, ал жыллылық қозғалыслары болса магнит моментлеринин тәртиплескен жайласыўларындағы бузылыўлардың орын алыўына алып келеди. Салыстырмалы тәменги температураларда жыллылық қозғалысларының тәсирі күшли емес, бирақ температура жоқарылаған сайын жыллылық қозғалысларының тәсирі де күшегеди. Ең ақырында Кюри температурасы деп аталатуғын базы бир температурада (Кюри температурасын T_C арқалы белгилеймиз) атомлардың жыллылық қозғалыслары

магнит моментлериниң тәртиплесип жайласыўларын буза алады. Бундай жағдайда ферромагнетик парамагнетикке айланады. T_c шамасының мәниси атомлардың магнит моментлериниң бир бири менен байланысының беккемлигинен ғәрэзли. Егер ҳақыйқатында да беккем байланыс орын алса, онда T_c температурасының шамасы темир ушын 770°C , ал темир-кобальт құймалары ушын 1000°C дан жоқары. Көпшилик заттар ушын Кюри температурасының мәниси жоқары емес ҳәм шама менен өжире температураларын қурайды.

T_c ның экспериментте алынған мәнислери бойынша магнит моментлериниң бир бири менен тәсирлесиў энергиясы ω ны анықлау мүмкін. Тәртиплескен магнит моментлерин бузыў (қыйратыў) ушын шама менен $kT_c \approx \omega \approx 0,1$ эВ жыллыштық энергиясы керек. Бул үлкен шама. Оның мәниси диполлердин бир бири менен тәсирлесиў энергиясы менен магнит диполиниң B магнит майданындағы потенциал энергиясынан үлкен. Ҳақыйқатында да B магнит майданында турған дипольдин энергиясы $\omega_d \approx \mu B \approx 0,001$ эВ шамасына тең. Бул шама kT_c шамасынан әдеуир киши (жұз еседей киши). Демек ω_d ның шамасы T_c температураларында магнит моментлерин тәртиплескен ҳалда услап турыўға жетпейди. Сонлықтан электронлық қабықлардың электростатикалық тәсирлесиўи менен байланыслы болған магнит тәртиплесиўиниң кванттық түсиндирiliи бирден бир қанаатландырарлық ҳәм бәрше тәрептен мойынланған түсиндирли болып табылады. Бирақ усы жағдайға қарамастан классикалық моделлер де бар болып, олардың тийкарында магнитлик тәртиплесиўдин «таза магнитлик» тәбияты жатады. Бул моделлер толық корректли (қатаң түрде тийкарланған) болжаўларға тийкарланған болса да магнетикиң T_c температурасы әтирапындағы қәсийетлерин сәтли түрде болжай алады. Сонлай классикалық моделлердин ең сәтлилерин қарап өтемиз.

Орташа майдан модели. Ферромагнетиклердин көп қәсийетлерин сәтли түрде тәриплейтуғын базы бир моделлер электронлық қабықлардың электростатикалық тәсир етисиўиниң ҳәм оның менен байланыслы болған алмасыў интегралынан есапқа алыудың 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 баҳалау мүмкін. Бул моделлер бойынша алмасыў магнит майданы тәртиплесип жайласқан магнит моментлери тәрепинен пайда етиледи ҳәм усы магнит майданының өзи моментлердин тәртиплесип жайласыўын тәмийинлейди. Тап усындағы етип сайлап алынған Вейсс майданы экспериментлерде бақланып жүрген макроскопиялық майданлардан 10 – 100 еседей үлкен. Бундай жағдайдың принципинде кристаллардың айрыым ноқатларында орын алатуғынлығын атап өтемиз.

Жоқарыда атлары аталған ферромагнитлерди тәриплейтуғын моделлердин ишинdegи ең әпиүайысы **орташа майдан модели** болып табылады. Бул моделде ҳәр бир магнит моментине заттың магнитленгенлиги J шамасына туұры пропорционал болған B_E магнит майданы тәсир етеди:

$$\vec{B}_z = \mu_0 \lambda \vec{J}. \quad (5.2)$$

Бул аңлатпада μ_0 арқалы вакуумның магнит сициришилиги, ал λ арқалы пропорционаллық коэффициент белгиленген.

T_c менен λ арасындағы байланысты анықлау мүмкін. Буның ушын сыртқы майдан B_0 , салыстырмалы магнит сициришилиги χ_p , J ҳәм B_E шамалары арасындағы электродинамикадан белгили болған байланысты табамыз:

$$\mu_0 \vec{J} = \chi_p (\vec{B}_0 + \vec{B}_z). \quad (5.3)$$

Парамагнетизм теориясында Кюри нызамы деп аталауғын нызам бар. Усы нызамды температура T_C дан әдеүир үлкен болған жағдайлар ушын пайдаланамыз:

$$\chi_p = \frac{C}{T}. \quad (5.4)$$

(5.2)- ҳәм (5.4)-аңлатпаларды (5.3) ке қоямыз ҳәм $\chi = \mu_0 J / B_0$ 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 ғәрэзлик бақланады. Тап усы жағдайды пайдаланып $C\lambda = T_C$ деп жазады (C арқалы Кюри тұрақтысы деп аталауғын тұрақты шама белгиленген). Сонлықтан $\chi(T)$ ғәрэзлиги мынадай түрге ийе болады:

$$\chi = \frac{C}{T - T_C}. \quad (5.6)$$

Бул формула экспериментте жақсы тастыйықланатуғын Кюри-Вейс нызамы болып табылады. Тәжирийбелерде бул нызамнан үлкен емес айырмалар бақланады. Мысалы (5.6) бойынша есапланған T_C ның мәниси тәжирийбелердеги ферромагнетиктеги спонтан магнитлениүдің жоғалыў нокатынан бир неше градусқа жокары болып шығады. Буның себебин түсіндіриў мүмкін. Ҳақыйқатында да $T > T_C$ температураларда магнит моментлеринің жайласыўында бир неше тегисликлер аралық қашықтықтарға тең болған базы бир жақыннан тәртип орын алады. Бундай жағдайда T_C нокаты жаңында заттың парамагнитлик ҳалын магнит моментleri тек киши аралықтарда тәртиплескен ҳәм үлкен χ ға ийе ферромагнитлик ҳал деп есаплау мүмкін.

Егер парамагнетизм теориясындағы Кюри тұрақтысы C ушын белгили болған аңлатпаны пайдалансақ, онда λ ушын төмендегидей аңлатпа алынады:

$$\lambda = T_C / C = 3k / (ng^2S(S+1)(\mu_B)^2) \quad (5.7)$$

Темир ушын $T_C \approx 1043 K$. $B_E = \lambda \mu_0 J$. Линде факторы $g \approx 2$; $S = 1$; $\mu_0 J \approx 2Tn$. Буннан $\lambda \approx 500$ ҳәм $B_E \approx 1000$ 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 моделинің ҳақыйқатлыққа сәйкес келмейтуғынлығын билдиреди (ҳақыйқатлыққа магнитлик тәсирлесиүдің атомлардың бир бири менен магнитлик тәсирлесиүиниң нәтийжеси деп есаплау сәйкес келмейди). Бирақ усындағы жағдайларға қарамастан орташа майдан модели ферромагнетизм теориясында магнитленгенликтің температуралық ғәрэзлигин есаплағанда жийи пайдаланылады.

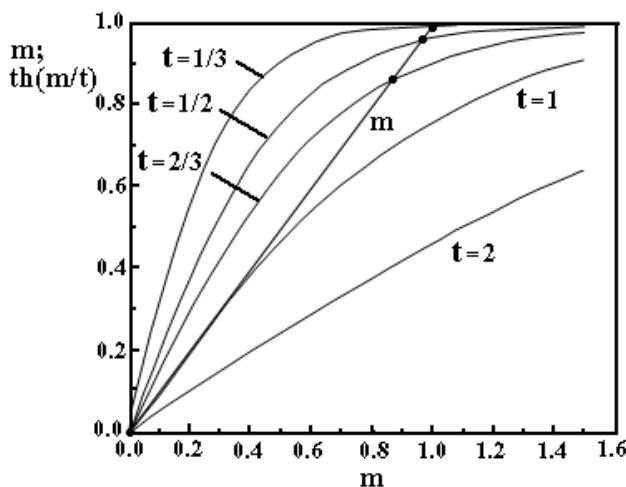
T_C температурасынан төменги температуралардағы магнитленгенлик. $T < T_C$ температуралардағы спонтан магнитленгенликтің температурадан ғәрэзлигин есаптаймыз. Әпиүайылық ушын $S = 1/2$ болған жағдайды қараймыз. Бундай жағдайда парамагнетизм теориясына мүшілік магнитленгенлик J шамасының B менен T дан ғәрэзлиги былайынша жазылады:

$$J = n\mu_s \cdot th(\mu_s B / kT) \quad (5.8)$$

Егер $B_E \gg B_0$ шәрти орынланатуғын болса, онда $B \approx B_E = \mu_S \lambda J$ ҳәм J ушын жазылған аңлатпа төмендегидей түрге ийе болады:

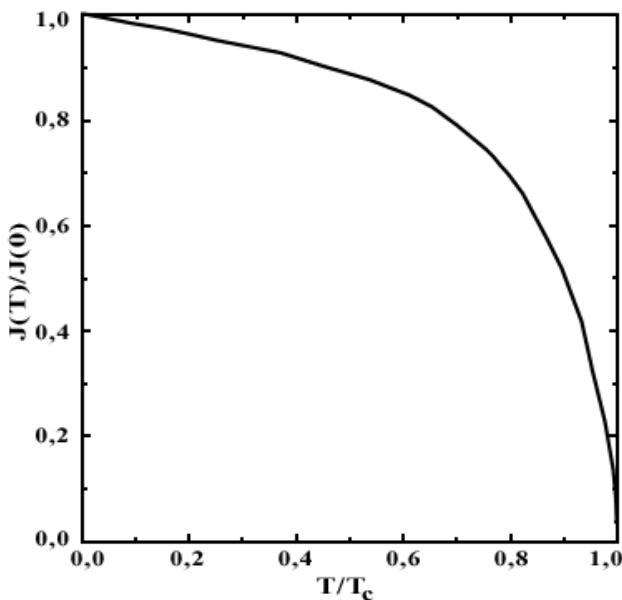
$$J = n \mu_S \cdot \text{th}(\mu_S \mu_0 \lambda J / kT) \quad (5.9)$$

Бул теңлемени J шамасына қарата аналитикалық шешиү қыйын математикалық мәселелер қатарына киреби (мысалы Mathematica 8.0 универсаллық математикалық программалау тилининде де теңлемени аналитикалық шешиү мүмкіншилиги болмады). Соның ушын (5.9)-теңлемени $\frac{1}{t} = \frac{\mu_S^2 \mu_0 n}{kT}$ ҳәм $m = \frac{J}{n \mu_S}$ белгилеўлерин қабыл етип санлы ямаса графикалық жоллар менен ғана шешеди (5.5-сүйртке қараңыз). Теңлеме $T < T_c$ шәрти орынланғанда ноллик емес шешимге ийе болады. Нәтийжелери 5.6-сүйретте көлтирилген.



5.5-сүйрет.

(5.9)-теңлемени графикалық жоллар менен шешиү нәтийжелери. 1 һәм 2 иймекликлери $(0,0)$ ноқатында кесилиседи, ал $T < T_c$ шәрти орынланғанда сүйреттің жоқарысындағы қара ноқатта да кесилиседи. Бул сыртқы майдан B_0 жоқ болған жағдайдағы ноллик емес магнитленгенникке сәйкес келеди.



5.6-сүйрет.

(5.9)-теңлемени графикалық жоллар менен шешкендеги алынатуғын $J(T)$ ғәрзелигі.

Температура Кюри температурасынан киши болғанда (яғни $T < T_c$ шәрти орынланғанда) T_c температурасы этирапында $J(T)$ ғәрзелигинин төмендегидей түрге ийе болатуғынлығын көрсетиү мүмкін:

$$J(T) \approx J_0 (1 - T / T_c)^{\nu/2} \quad (5.10)$$

Шама менен усындау $J(T)$ ғәрзелиги (дәрежеде $\frac{1}{2}$ емес, ал 0,33 болған ғәрзелик) көпшиликтік ферромагнетиклер ушын тәжирийбелерде де бақланады. $J(T)$ ғәрзелигинин T_c этирапында кескин өзгерисиниң орын алмауы ферромагнетиктиң параметрлерінде өтініші әүләд фазалық өтийлерине жатқарыуға тийкар береди.

$J(T) = J_0 - \Delta J(T)$ ғәрзелигинин абсолюттік нөлдиң жаңындағы өзгерислерин бақалаймыз. Бұның ушын $th a \approx 1 - 2 \exp(-2a)$ асимптоталық формуласынан пайдаланып (5.8)-аңлатпаны түрлендиримиз:

$$\Delta J(T) \approx 2J_0 \exp(-2(\mu\mu_0\lambda J / kT)) = 2J_0 \exp(-2T_c / T) \quad (5.11)$$

Экспериментлер болса $T \rightarrow 0$ шегинде $\Delta J(T)$ шамасының басқаша болған төмендегидей өзгерисин береди:

$$\Delta J(T) \approx J_0 C_{3/2} T^{3/2} \quad (5.12)$$

J_0 ҳәм $C_{3/2}$ турақтылары ҳәр қылыштың ферромагнетиклер ушын ҳәр қылыштың болып шығады.

Солай етип орташа майдан теориясы Кюри температурасы этирапындағы ферромагнетиклердин магнитленгенлигин қанаатландырлық дәрежеде, бирақ $\Delta J(T)$ шамасының $T \rightarrow 0$ шегиндеги өзгерислерин турпайы түрде тәріплейді. Спин толқынлары теориясы (5.12)-аңлатпадағы ғәрзеликтиң түсіндіриүгө мүмкіншілік береди. Бул жүдә курамалы болған теорияның ферромагнетиклер ушын алынған тийкарғы нәтийжелерин төменде қарап өтемиз.

Спин толқынлары ҳәм жылдылық сыйымлығына магнитлик үлес

Спин толқынлары. Спин толқынлары теориясы ферромагнетиклер тийкарғы ҳалда туратуғын төменгі температуралардағы атомлардың магнит моментлеринин қәсийетлерин үйренеди. Бундай температураларда спинлер бир бирине параллель жайласады. Биз ферромагнетиктиң магнитлик қәсийетлерине электронлардың орбиталық қозғалысларының айтарлықтай үлес қоспайтуғынлығын, ал сол магнитлик қәсийетлердин тийкарынан спин моментлері (спинлер) тәрепинен анықланатуғынлығын атап өтемиз. Әпиүайылық ушын N дана спиннен туратуғын сзызықты шынжырды қараймыз (5.7-а сүйрет). Ҳәр бир спин $\hbar S$ шамасына тен спин моментине ие. Шынжырда тек жақын қоңылар бир бири менен тәсирлеседи деп есаплайды. Бундай шынжырдағы спинлердин тәсирлесіү энергиясын былайынша жазыуға болады:

$$U = -2J \sum_{p=1}^N \vec{S}_{p+1} \cdot \vec{S}_p \quad (5.13)$$

Бул аңлатпадағы J арқалы алмасыу интегралы белгиленген (алмасыу интегралын J арқалы белгилеү дәстүрге айланған). Төменгі температуралардағы жылдылық қозғалыслары бул системаға «қозыўларды» енгизе алады. Мысалы спинлердин бири бағытын қарама-қарсы бағытқа өзгерте алады (5.7-б сүйрет).

a $\uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow$

b $\uparrow \uparrow \uparrow \downarrow \uparrow \uparrow$

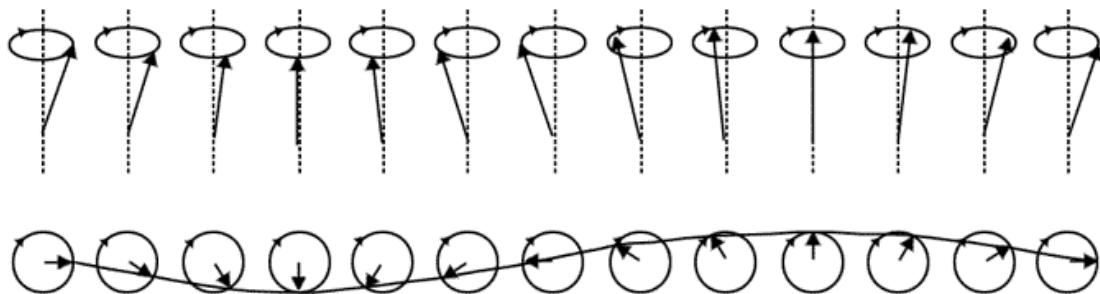
5.7-сүйрет.

Атомлардың сзызықты шынжырындағы спинлердин ориентациясы (бағыты): барлық спинлердин бағыттары бирдей (a), жылдылық қозғалысларының тәсиринде спинлердин бири бағытын қарама-қарсы тәрепке қарай бурған (b).

Бир спин өзиниң бағытын қарама-қарсы тәрепке бурса, онда еки жуп спинлер қарама-қарсы бағытланған болады ҳәм система қосымша энергияға ийе болады:

$$\Delta U = 8JS^2 \quad (5.14)$$

Бул энергияның шамасы салыстырмалы үлкен, 5.8-сүүретте схема түринде көрсетилген спинлер системасының энергиясы киширек мәниске ийе. Бул жағдайда бир спиннен екинши спинге өткенде ҳәр бир спинниң бағыты жүдә киши шамага өзгереди. Ал бағытлардың тарқалыуының өзи толқынды еске түсіреди. Сонықтан спин системасының тап усындағы қозыўларын спин толқынлары деп атаў қабыл етилген. Бундай қозыўлар квантланады. Сәйкес квантты магнон деп атайды. Магнонлар да фотонлар менен фононлар сыйқылдық квазибөлекшелер болып табылады. Ҳәр бир магнонның улыўмалық спиннин S_z қураўшысын бирге (1 шамасына) өзгертуғынлығын көрсетиүге болады.



5.8-сүүрет. Сpin толқыны жағдайындағы атомлардың сыйқылды шынжырындағы спинлердин бағытлары: барлық спинлер бир бири менен дерлик параллель. Спинлердин бағытларының тарқалыуы толқынды еске түсіреди.

Жоқарыда қарап өтилген шынжырдағы ямаса ҳақыйқый кристалдағы магнонлар ушын дисперсия назамын [бул ғәрзеликти $\omega(K)$ арқалы белгилеймиз] келтирип шығарыў мүмкин. Мысалы сыйқылды шынжыр ушын (5.7-сүүрет) төмендегидей дисперсия нызамы алынады:

$$\hbar\omega = 4JS \left(1 - \cos K\alpha\right). \quad (5.15)$$

Кублық пәнжерелер ушын тап усындағы жоллар менен дисперсия нызамын алыш мүмкин:

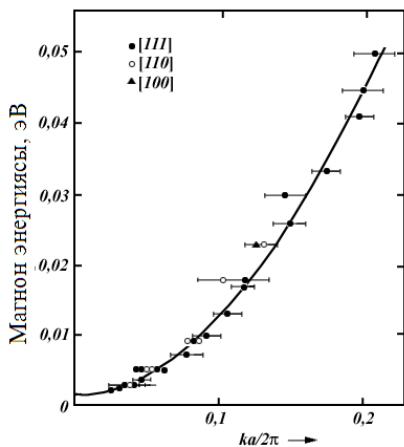
$$\hbar\omega = 2JS \left(z - \frac{\delta}{\cos(K\delta)}\right). \quad (5.16)$$

(5.6)-аңлатпа бойынша суммалауды пәнжерениң сайлап алынған түйинин барлық жақын қоңылар бойынша орынлайды.

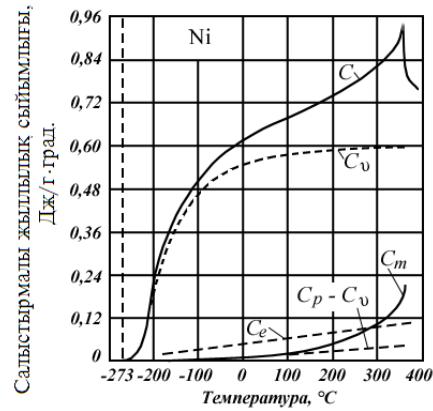
Киши K лар ушын барлық жағдайлар ушын $\omega(K)$ ғәрзелиги улыўмалық түрге ийе:

$$\hbar\omega = 4JS \left(1 - \cos K\alpha\right) = 8JS \sin^2 \frac{K\alpha}{2} \approx 2JS \left(\frac{K\alpha}{2}\right)^2. \quad (5.17)$$

Магнонның энергиясының (ямаса жийилиги $\omega(K)$ ның) толқын векторы K дан ғәрзелиги фононлар ушын пайдаланылған схемадай схема тийкарында анықланады. 5.9-сүүретте кобальт ушын $\omega(K)$ ғәрзелиги ҳәм салыстырыў мақсетинде (5.17)-аңлатпа тийкарында есапланған нәтийжелер келтирилген. Киши K ларда магнонның энергиясының K векторының бағытынан дерлик ғәрзели емес екенлиги көринип тур (бул спин толқыны теориясына толық сәйкес келеди).



5.9-сүйрет. Кобальт ушын K векторының [100], [110] және [111] бағыттарына сәйкес келиүши $\omega(K)$ ғәрзелиги.



5.10-сүйрет. Никельдин ҳәр қылыш температуралардағы моллик жылдылық сыйымлығына ҳәр қылыш үлеслердин температуралық ғәрзелиги.

Магнонлардың энергиясы $E(K)$ шамасын фононлар ушын пайдаланылған формулалар бойынша есаплау мүмкін. Себеби $E(K) = \hbar\omega(K)$. Магнонлар да бозонлар болып табылады және 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 алыўымыз керек. Соның менен бирге магнонлардың бир поляризацияға ийе болатуғынлығы атап өтемиз (фононлар үш поляризацияға, ал вакуумдағы фотонлар еки поляризацияға ийе болатуғын еди).

Тап сондай схемалар тийкарында магнонлардың кристаллардың ишкі энергиясына ҳәм ферромагнетикиң жылдылық сыйымлығына қосатуғын үлесин де есаптай аламыз. Бундай есаплаўлар тәменги температураларда қатты денелердин жылдылық сыйымлығына магнитлик үлестің температура T ның $3/2$ -дәрежесине (яғни $T^{3/2}$ ге) пропорционал болатуғынлығын көрсетеди. Бул экспериментте алынған нәтийжелерге толық сәйкес келеди.

Шама менен тап усынданай схема тийкарында тәменги температуралардағы $J(T)$ ҳәм $\Delta J(T)$ шамаларын да есаплау мүмкін. Бундай жағдайларда ҳәр бир магнонның ферромагнетикиң магнит моментин бирдей шамаға киширейтетуғынлығын есапқа алады. Нәтийжеде $\Delta J(T)$ шамасы берилген температурада ферромагнетикиң бир бирлик көлеминдеги магнонлардың улыўмалық санына пропорционал болады. Ал бул санды Бозе-Эйнштейн тарқалыўының жәрдемінде аңсат есаплаўға болады. Соның менен бирге $\Delta J(T) \approx J_0 C_{3/2} T^{3/2}$ екенлигин де аңсат көрсетиүге болады. Бул аңлатпада $C_{3/2}$ арқалы ферромагнетиктин структурасына байланыслы болған константа белгиленген.

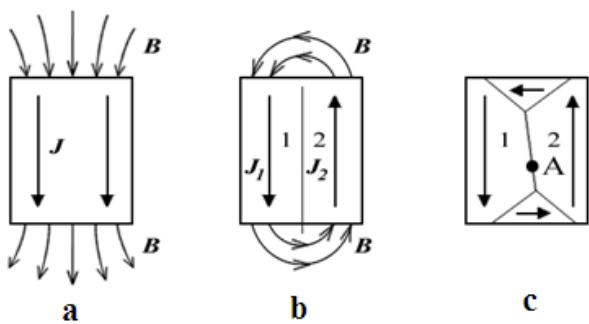
T_c температурасы этирапындағы ферромагнетиклердин жылдылық сыйымлығына қосылатуғын үлес. Көплеген ферромагнетиклерде жылдылық сыйымлығына қосылатуғын магнитлик үлестің шамасы кристаллық пәнжерениң тербелислери тәрепинен қосылатуғын үлестен де үлкен. Ал T_c температурасының этирапында болса жылдылық сыйымлығына магнитлик үлестің шамасы жылдылық тербелислери беретуғын үлестің шамасынан әдеўір үлкен. 5.10-сүйретте никелдин ҳәр қылыш температуралардағы моллик жылдылық сыйымлығына қосылатуғын ҳәр қылыш үлеслердин температурадан ғәрзелиги көлтирилген.

Кюри температурасы жаңында $C_V(T)$ шамасының температурадан ғәрзелиги T_c температурасының жаңында «тиске» ийе екенлиги көринип тур. Усынданай ғәрзелик тийкарында экспериментте T_c ның мәниси анықланады. Фазалық қурамы белгисиз болған көп фазалардан туратуғын системаларды изертлегендеге бул усыл жүдә пайдалы. Себеби экспериментте анықланған T_c ның мәниси бойынша құймалардың фазалық қурамы

хақындағы мағлыұматларды алыўға болады. Соның менен бирге бул усылды антиферромагнетиклерди изертлеў ушын да пайдаланыў мүмкін.

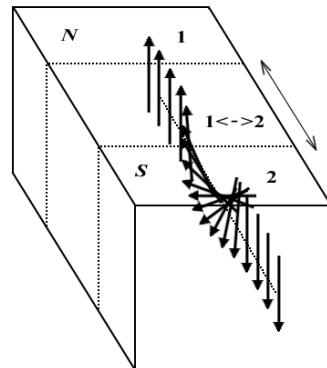
Доменлер, қайта магнитлениүү механизмлери ҳәм магнитлик қәсийетлер

Жоқарыда қарап өтилген магнит моментлериниң жайласыўларының пүтин кристал бойынша толық тарқалыўы жұдә сийрек ушырасады. Кристалларда көпшилик жағдайларда доменлер деп атала туғын областлардың ишинде бирдей бағытқа ийе болған магнит моментлери жайласады. Доменлердин сзықлы өлшемлери микрометрлерден артпайды. Кристалдың өзи көп сандағы доменлерден турады. Ал қоңсылас доменлердеги J векторының бағытларының бирдей болыўы шарт емес. Доменлердин пайда болыўы кристалдың мүмкин болғанынша киши еркін энергияға ийе болыўға умтылыўының нәтийжеси болып табылады. Егер кристал тек бир доменнен туратуғын болса, онда кристалдың сыртында әдеўир күшли магнит майданы пайда болған болар еди (5.11-а сүйрет). Усы майдан менен шамасы $B^2/2\mu_0$ ге тең магнит майданының энергиясының тығызлығы ҳәм әдеўир ұлken мәниске ийе магнит майданының энергиясы пайда болған болар еди. Егер кристал шама менен бирдей еки доменге ийе болса ҳәм бул доменлердеги J шамаларының бағыты қарама-қарсы болса, онда энергияның мәниси әдеўир кемейеди (5.11-б сүйрет). Төрт домен бар болған жағдайда энергияның мәниси оннан да киширейеди (5.11-сүйрет). Солай етип магнит майданының энергиясын киширейтиў көз-қарасында кристалдың доменлерге бөлинүйи утымлы процесс болып табылады. Нәтийжеде B векторының күш сзықлары кристалдың ишинде «түйікланады».



5.11-cvýpet.

191 Ферромагнетиктиң доменлерге бөлинүүинин схемасы.



5.12-сүйрет. Доменлер арасындағы дийўал
жанындағы магнит моментлериниң
тарқалыўының схемасы.

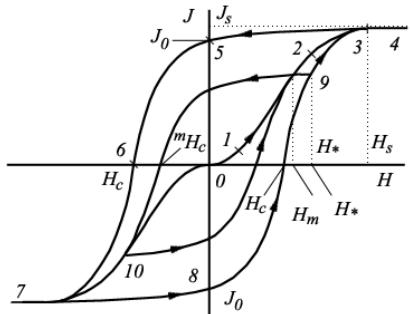
Қонсылас доменлер арасындағы шегара доменлик дийўалды пайда етеди. Оның қалыңлығы бир неше атомлар арасындағы қашықлыққа тең. Усындағы аралықтың ишинде магнит моментиниң бағыты толығы менен өзгереди (5.12-сүйрет). Магнит моментиниң бағытының усындағы болып өзгериүиниң қосымша энергия менен байланыслы болатуғынлығы анық. Бундай энергия магнитлик анизотропия энергиясы менен де, доменлик дийўал жанындағы дәл параллель емес магнит моментлериниң тәсирлесіўлери менен де байланыслы. Магнит анизотропиясы энергиясын минимумға алып келиўге тырысы ў доменлик дийўалдың қалыңлығының шамасын минимумға (1 атомлар арасындағы қашықлыққа) алып келиўди талап етеди. Себеби оның қалыңлығы үлкейгенде женил магнитлени ў бағытында бағытланбаған магнит моментлериниң саны да өседи. Бирак усының менен бирге алмасы ў тәсирлеси ў энергиясының мәниси де үлкейеди. Оның ушын магнит моментлериниң бағытларының 5.12-сүйретте көрсетилгендей болып

өзгериүи оптималлық характерге ийе. Усы еки үлестин минимумы шәртинен доменлик дийўалдың қалыңлығын есаплау мүмкін. [5-7].

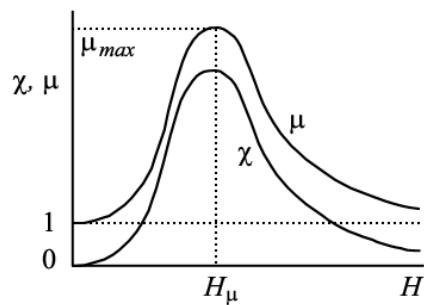
Жұдә майда доменлерге бөлиніү де энергиялық көз-қарастан утымлы емес. Себеби доменлер қаншама майда болған сайын доменлик дийўаллардың «бетлик» энергиясы да артады. Бетлик энергия менен макроскопиялық магнит майданы энергиясы арасындағы «конкуренция» доменлердин оптималлық өлшемлерин анықтайты. Көпшиликтік ферромагнитлик кристаллардың доменлердин оптималлық өлшемлеринің 1 мкм шамасында екенлигин жоқарыда айттып өткен едик. Соның менен бирге жудә майда доменлердин пайда болыуна кристаллық қурылыштың дефектлеринің де тәсир ететуғынлығын атап өтемиз.

Көп ферромагнетиклердин киши магнит майданларындағы қайтадан магнитлениүи доменлердин бар екенлиги менен түсіндіриледи. H майданы менен магнитленген, J векторларының бағытлары хәр қойлы болған бир неше доменлерден туратуғын ферромагнетикиң участкасын қараймыз (5.11-сүйрет). Әпиўайылық ушын доменлик дийўалдың қалыңлығын киши ҳәм атомлар арасындағы қашықлықтай шамаға тең деп есаптаймыз. 1 домени болса J бағыты бойынша утымлы бағытқа ийе (яғни H қа параллель), ал 2 домени болса утымлы емес бағытланған болсын. 2 доменинин 1 домениндей бағытқа ийе болыуы утымлы. Бирақ киши H тың мәнисинде магнит моментлеринің барлығының бирден бағытларын өзгертиүи энергиялық жақтан қыйын ҳәм статистикалық жақтан киши итималлыққа ийе. 2 доменинин ҳәр бир атомының H бағытында бағытын өзгертиүи ушын қоңсылас атомлар мүмкіншилік бермейди. Олар бурылышта кесент жасайды. Бирақ 1 ҳәм 2 доменлер арасындағы шегараға жақын 2 домендердегі А атом айрықша жағдайда түрліліктери. Оның утымлы да, утымлы емес те бағытларға ийе еки жақын қоңсысы бар. Соныңтан усы атомның магнит моменті өзинин бағытын утымлы емес бағыттан утымлы бағытқа салыстырмалы жеңил өзгерте алады ҳәм 1 доменине қосылады. Усының менен 1 домени үлкейеди, ал 2 домени киширейеди. Бундай өзгерислер доменлик дийўалдың атомлық аралыққа тең шамаға жылышқанлығы менен барабар. Егер доменлик дийўалдың қалыңлығының шекли екенлигин есапқа алатуғын болсақ та бизиң таллауларымыз өзинин дұрыс екенлигин сақтайты: атомлардың магнит моментлеринің избе-из бағытларын өзгертиүи ҳәм доменлик дийўалдың жылышсыз эффекти жүзеге келеди. Қайтадан магнитлениүидің усындағы механизмін доменлик дийўаллардың жылжыуы менен жүретуғын қайта магнитлениү деп атайды. Бундай қайтадан магнитлениү киши магнит майданларында жүреди.

Хәр қойлы болып бағытланған доменлердин доменлик дийўаллары шамалары ҳәр қойлы болған майданларда жүзеге келеди. Кристаллық қурылыштың ҳәр қойлы дефектлери де доменлик дийўаллардың қозғалысларына ҳәр қойлы иркиниш жасайды. Соныңтан ферромагнетиктиң ҳәр қойлы областлары ҳәр қойлы H майданларында қайтадан магнитленеди ҳәм ферромагнетиктиң тутасы менен алғанда J векторының ҳәр қойлы болып өзгериси орын алады. Усының салдарынан J H ғәрэзлиги (бундай ғәрэзликти магнитлениү иймеклиги деп атайды) курамалы түрге ийе болады (5.13-сүйрет). Салыстырмалы магнитлик қабыллағыштық $\chi = J/H$ пенен салыстырмалы сициргишилік $\mu = B / \mu_0 H$ шамаларының да H майданы арасында курамалы түрдеги байланыс орын алған (5.14-сүйрет).



5.13-сүүрет. Ферромагнетиктиң магнитлениү иймеклиги ҳәм гистерезис илмеги (толық ҳәм толық емес).



5.14-сүүрет. Салыстырмалы магнитлик қабыллағышлықтың ($\chi = J/H$) ҳәм салыстырмалы сициргишилк $\mu = B/\mu_0 H$ шамасының H тан ғәрэлигі.

Магнитлениү иймеклиги 4 түрли характерлы участкаға иие болады. 0-1 участкасы айрыым орынларда дефектлерге бекитилген доменлик дийўаллардың қайтымлы қозғалығы участкасы деп аталады. Бундай қозғалысларда доменлик дийўаллардың майданы менен энергиясы артады. H векторы киширейгенде дийўаллар өзлериниң энергиясының бетлик тығыздығын киширейтиүге тырысып өзлериниң дәслепки орынларына қайтып келеди (созылған пружина ямаса мембрана сыйқы). 1-2 участкасы доменлик дийўаллардың қайтымлы емес қозғалысларына сәйкес келеди. Бундай қозғалыслардың барысында доменлик дийўаллар қозғалысына тосқынлық жасайтуғын иркинишлер арқалы өтеди ҳәм сонлықтан H майданының киширейиүи олардың дәслепки орынларына қайтып келийине алып келмейди. Себеби бул жағдайда да доменлик дийўаллардың кери бағыттағы қозғалысына тосқынлық жасайтуғын иркинишлер арқалы екинши рет өтийине туўры келеди. 2-3 участкасы сәтли емес бағытланған доменлердин J векторларының бағытларын өзгертийиниң (айланыуының) есабынан қайтадан магнитлениү механизминиң жүзеге келийине сәйкес келеди. Бундай айланыўлар салыстырмалы күшли H майданларында бақланады. Бул жағдайда магнитлениү векторының айланығы механизми бойынша магнитлениү жүреди деп есаплады. 3-4 участкасы ферромагентиктиң барлық магнит моментлериниң H векторы бағытындағы бурылышына сәйкес келеди. Оған сәйкес келиўши J шамасы тойының магнитленгенлигі $J = J_s$, ал сол тойының магнитленгенликтеке сәйкес келиўши H майданының модулин тойының 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 тойының картинасына сәйкес келиўши магнит моментлериниң жайласыўлары бириңи жақынласыўды сақланады: ал ис жүзинде енди доменлердеги атомлардың магнит моментleri бир бири менен тәсирлесиўдин салдарынан сақлап турады. Сонлықтан $H = 0$ болған жағдайда J базы бир шекли мәниске иие болады. Бундай шекли мәниси J_r қалдық магнитлениү 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 магнитлениү процесси басланады. Майдан $H = H_s$ мәнисине жеткенде J_s дин 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 ҳәр қыйлы болып бағытланған доменлер болады, бирақ ферромагнетиктиң барлық магнит моментлериниң векторлық қосындысы нолге тең болады. H ты буннан кейин үлкейтсек

ұлғи қарма-қарсы бағытта қайтадан магнитленеди. $H = -H_S$ болғанда $J = J_S$ тойының орын алады (5.13-сүйреттеги 7 нокаты).

Егер H шамасын $-H_S$ тен $-H_S$ ке шекем ұлкейтсек, онда $J(H)$ ғәрзелигиниң 7-8-4 участкалары алынады. Нәтийжеде илмекти еске түсіретуғын ғәрзелик алынады ҳәм бул ғәрзелик гистерезис илмеги деп атайды.

8-4 участка бойынша 4 нокатына жетпей 9 нокатына шекем қозғалыў мүмкін. 9 нокатындағы майданды H_m арқалы белгилеймиз. 9 нокатынан H майданды H_m шамасынан $-H_m$ шамасына шекем киширейтемиз. Бундай жағдайда магнетикиң ҳалын беретуғын 9 нокаты 10 нокатына өтеди. H шамасын белгили түрде өзгертиў арқалы принципинде гистерезис илмегиниң ишиндеги қәлеген нокатқа барыў мүмкін. H шамасын H_m шамасынан $-H_m$ шамасына шекем цикллық түрде өзгертсек дара жағдайдағы гистерезис илмеги деп аталатуғын гистерезис илмеги алынады. Бул илмектеги максималлық майдан H_m болып табылады. Дара жағдайдағы гистерезис илмегиниң ушлары магнитлениң иймеклигиниң бойында жайласады.

Хәр қыйлы дүзилислерде $H_m = H_\mu$ теңлиги орынланатуғын қайта магнитлениңдиң дара циклери қолланылады. Бул теңликте H_μ арқалы максималлық сициргишилик μ майданы белгиленген. μ дин шамасы максималлық болғанда B майданын күшетиүде ферромагнетик эффективли түрде пайдаланылады.

$H - B$ координаталарында сзыылған гистерезис илмегиниң майданының ферромагнетикиң көлем бирлигин цикллық қайта магнитлеў ушын жумсалған энергияға тең екенлигин көрсетиүге болады.

Магнит материаллар. Хәр қандай техникалық мақсетлер ушын гистерезис илмеги ҳәр қыйлы болған ферромагнит материаллар зәрүрли. Солардың ишиндеги ең әхмийетлилери коэрцитивлик күшиниң шамасы 10^{-1} А/м шамасынан 10^6 А/м шамасына шекемги материаллар болып табылады. Әмелде H_C ның мәниси жүдә киши болған (магнитлик жақтан жумсақ материаллар) ҳәм айрықша ұлken болған (магнитлик жақтан қатты материаллар) қолланылады..

Магнитлик жақтан жумсақ материаллар киши магнит майданларында қайтадан магнитленетуғын дүзилислерде қолланылады. Олар: магнит жазыўларды оқытутуғын магнит майданының датчилери, трансформаторлардың сердечниклері ҳәм басқалар. Бундай мақсетлерде μ шамасы ұлken, ал H_C тиң шамасы және гистерезис илмегиниң майданы киши материаллар керек. Бундай материаллар ушын қайтадан магнитлегендеге доменлик дийўаллардың қозғалыўын максимал түрде жениллестирий, магнитлик анизотропия менен магнитострикцияның тәсирин киширейтиў талап етиледи. Буның ушын құймалардағы доменлик дийўаллардың қозғалысына кесент жасайтуғын дефектлердин санын азайтыў, магнитлик анизотропиясы менен магнитострикциясы әззи құймаларды пайдаланыў керек. Өзгермeli магнит майданларында магнитлик жақтан жумсақ материалларды қолланғанда магнетикиң электр тоғына қарсылығының ұлken болыўын тәмийинлеў лазып. Тап усындан талапларға ҳәзирги заманда кең түрде пайдаланып атырған материаллар жуўап береди. Олар ҳаққындағы мағлыўматлар төмендеги кестеде берилген:

Магнитлик жумсақ материаллар ҳәм олардың магнитлик қәсиетлери

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 құймалар	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 мүмкіншилиги болғанынша жақсы тазаланған темирди пайдаланды. Темирдин тазалығы дефектлердин концентрациясының кемейиүине алып келди. Буннан кейин кристаллитлердин өлшемлерин үлкейтиүге алып келетуғын қосымталарды тапты (кристаллитлердин үлкейиүи дефектлердин концентрацияларының әдеүир киширейиүине алып келеди). Кристаллитлердин үлкейиүинин барысында буйымның берилген бағытларында кристалдың женил магнитлениү бағытын қойыў мүмкіншилигин берди. Усындай жоллар менен трансформаторлық полат деп аталауғын полатларды алады. Оның курамы тийкарынан $Fe - Si$ құймасынан турады. Кейинирек $Fe - Ti$ тийкарындағы курамалы курамдағы магнитлик анизотропия менен магнитострикцияның мүмкін болған минималлық параметрлерине ийе құймаларды сайлап алды. Бул μ шамасының буннан да былай үлкейиүине алып келди (10^6 ҳәм оннан да көп есе). Келеси қәдем аморф ҳәм нанокристаллық (кристаллық дәнешелериниң 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 әдеүир 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 магнитлениү процесслеринде паразитлик үлкен Фуко тоқларының пайда болыўына алып келеди. Сонықтан тез-тезден қайтадан магнитленетуғын буйымлардағы магнитлик жақтан жумсақ болған материалларды жуқа бир бириңен изоляцияланған пластинка түринде соғады. Магнитлик жақтан жумсақ ферритлер болса жудә үлкен салыстырмалы қарсылыққа ийе ҳәм сонықтан 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 әдеүир 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 анықтайтуғын B_r , ҳәм 2) $(BH)_m$ көбеймесиниң максималлығы. Бундай шама H майданында жайласқан бир бирлик көлемге ийе магниттиң максималлық айланбалы моментин жууық түрде анықтайты. Жоқарыда атлары аталған параметрлердин стабиллігі менен олардың қанаатландырлықтай беккемлиги менен пластиклигине ийе болыў мақсетке муýапық келеди.

Кең тарқалған магнитлик жақтан қатты материаллар ҳәм 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 әдебиятлар 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 инострю лит-ры.- 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.

Студентлердин лабораториялық жұмысларды орынлауы ушин арналған материаллар

1. Рентген ҳәм электронлар толқынларының дифракциясының динамикалық теориясының айырым мәселелери

1-§. Кирисиү ҳәм мәселениң қойылышы

Катты денелер физикасы менен физикалық материалтаныўдың 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) ҳәм П.Книппинг (P.Knippung)] бундай объектлердеги атомлар менен молекулалардың белгили нызамлар бойынша тәртипли жайласқанлығы ҳақындағы бириńши эксперименталлық мағлұмматларды берди (Яғнай кристаллық денелер рентген нурлары ушын кристаллық пәнжерениң (решетканың) орнын ийелейди деген сөз.). Рентген нурлары дифракциясының бириńши ең эпиүайы теориясы (бул теорияны кинематикалық теория деп атайды) 1913-жылы Лауэ тәрепинен берилди. Усы жылы У.Л.Брэгг (W.L.Bragg) ҳәм Г.В.Вульф рентген нурларының дифракциясын кристалдаға бир бирине параллель болған атомлық тегисликтер системасындағы шашырауы деп интерпретациялады ҳәм Вульф-Брэгг шәрти деп аталатуғын рентгенографиядағы ең көп қолланылатуғын

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

формуласын келтирип шығарды. Бул аңлатпада d арқалы атомлық тегисликлер арасындағы қашықтық, ϑ арқалы дифракциялық мүйеш ҳәм λ арқалы рентген нурларының толқын узынлығы белгиленген. $n = 1, 2 \dots$ (пүтин санлар). (1)-тенлемени Вульф-Брэгг шәрти деп атайды (Көпшилил жағдайларда Вульф-Брэгг теңлемесинде дифракциялық мүйешти θ ҳәрипи арқалы белгилейди. Биз бул жумысымызда дифракциялық мүйешти ϑ арқалы белгилеймиз.).

1914-жылы Ч.Дарвин (Ch.Darvin) рентген нурларының дифракциясының динамикалық теориясының тийкарын дөретти. 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 дәүирли $\chi(r, \omega)$ болған орталықта тарқалыўының электродинамикалық мәселеси сыпатында шешіў менен шуғылланды.

Нәтийжеде XIX әсирдин екинши ярымында раўажланған физикалық кристаллография эксперименталлық тастыбықланыўға иие болды. Дәрхәл рентген дифрактометриясы, кейинирек рентген топографиясы қәлипести ҳәм тез пәтлер менен раўажлана баслады. Илимпазлар кристаллық денелердеги дифракцияға ушыраған нурлардың интенсивлигин үйрениў менен сол денелердин атомлардың қандай нызамлықтар менен жайласканлығын анықлау усылларын ислеп шықты. Дәслепки дәүирлерде кристарлық пәнжерениң орайласыўлары (көлемде, қатпалда, базада орайласқан кристаллық құрылыштар, крисладдық пәнжерелер), кейинирек қурамалы органикалық химиялық бирикпелердеги атомлардың элементар қутышалардығы координаталары анықлана баслады. Соңғы 10 жыл ишиндеги DNA молекуларының құрылышын анықлау бойынша орынланған жумыслар бул бағдардағы исленген жумыслардың ең жокарғы шыңы болып табылады деп есапланады.

Рентген нурларының дифракциясы тийкарында дөретилген барлық усыллардың жыйнағын (рентген пленкасында дифракциялық сүүретлердин алымы, рентген топографиясының көп санлы схемалары, рентген дифрактометриясы, параллель дәстелердеги ҳәм тарқалыўшы дәстелердеги рентген нурларының дифракциясы, кристаллардың электронлық тығызлықтардың изертлениўи, рентген нурларының дифракциясының кинематикалық ҳәм динамикалық теориялары ҳәм усыған сәйкес усыллар) биз бир сөз бенен кристаллар рентгенографиясы деп атамыз.

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 ҳәм ионлық проекторлар, растрлық электронлық микроскоплар дөретилди. Нәтийжеде адамзат айырым атомлардың сүүретлерин көриў мүмкиншилигине иие болды.

Рентгенография ҳәм электронлық микроскопияның және бир әхмийети ҳәр қылышының тәсирлердин тәсиринде (механикалық деформация, қыздырыў ҳәм салқынлатыў, электр ҳәм магнит майданларының, жақтылықтың, радиоактивли нурлардың) кристалларда болып өтетуғын структуралық айланысларды изертлеў менен байланыслы. Усының нәтийжесинде кристаллық денелердин физика-химиялық ҳәм технологиялық қәсийетлеринин олардың айқын атомлық-кристаллық және субструктуралық қәддидеги құрылышынан ғарезли екенлигин көрсетти. Нәтийжеде берилген атомлық-кристаллық құрылышқа ҳәм субструктуратаға, усыған сәйкес физикалық ҳәм технологиялық қәсийетлерге иие кристаллық денелер алыў проблемасы қәлипести. Бул бағдарда Жер жүзиндеги ең раўажланған елларинң (АҚШ, Англия, Франция, Германия, Россия, Япония ҳәм басқа да елдер) илимпазларының бирлесип бир бағдардағы тырысыўларының

нәтийжесинде (физикалық материалтаның, қатты денелер физикасы, ярым өткізгішлер физикасы ҳәм тағы басқалар) үлкен жетискенликтерге ерисилди. Усының нәтийжесинде ҳәзирги үақытларда космос техникасында, компьютерлер ҳәм басқа да электронлық абал-үскенелр соғыұды кеңнен пайдаланып атырған жаңа материаллар дөретилди.

2-§. Дифракцияға ушыраған рентген нурларының интенсивлиги (кинематикалық ҳәм 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 пәнжередеги үш шәрттің бир үақытта 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 ҳәм c лар кристалдың пәнжересиниң үш көшер бойынша дәйирлери, α_0 , β_0 ҳәм γ_0 арқалы кристалға келип түскен нурдың, ал α , β ҳәм γ лер арқалы дитфракцияғы ушыраған нурдың кристалдың пәнжересиниң көшерлери арасындағы мүйеш белгиленген. H , K ҳәм L арқалы атомлық тегисликтердиң кристаллографиялық системаларының индекслерине пропорционал болған путин санлар белгиленген. (2)-тенлемелерди Вульф-Брэгг шәрти түринде де жазыў мүмкін. α_0 , β_0 ҳәм γ_0 мүйешлери анық мәнислерге ийе болғанлықтан, ал α , β ҳәм γ шамалары бир бириңен ғәрезсиз болғанлықтан (2)-система жүдә аз путин санлық шешимлерге ийе болады. Басқа сөз бенен айтқанда қозғалмайтуғын кристалларға монохроматик нурлар түскенде дифракциялық максимумлардың саны жүдә аз болады.

Кристалдың шашыратыў қәбилетлиги оның өлшемлеринен ҳәм құрылышынан ғәрезли болады. Фрагментлериниң өлшемлери $l \leq 10^{-5}$ см болған идеал мозайкалық кристаллар ҳәм поликристалларда шашыраған нурланыўлар рентген нурларының дифракциясының кинематикалық жақынласыў (кинематическое приближение) жәрдемінде тәриплениди. Бундай шашырауды үйрения ислери тийкарыйнан 1950-жылларға шекем питкен ҳәм олар ҳәзирги үақытлары оғада сиyrек 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 көпшилиқ кристаллар ушын дұрыс екенлиги бәршеге анық. Классикалық электродинамикаға сәйкес нурдың электр майданы E_0 , жийилиги ω ҳәм толқын векторы \mathbf{k}_0 болған кристалға келип түсиўши толқын атомлардың өзгермeli диполлик моментин пайда етеди. Усының нәтийжесинде ҳәр 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 тәрепинен шашыратылған майданының электр майданының кернеўлилік векторы

$$E_j(s) = \frac{1}{R} \mathbf{k}_s \cdot \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_0 \cdot \frac{e^2}{m\omega^2} f(s) \exp(i(s \cdot \mathbf{r}_j)) \quad (3)$$

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 һәм p арқалы пүтин санлар, $\mathbf{s} = \mathbf{k}_s - \mathbf{k}_0$ арқалы шашыраў векторы белгиленген. $s = \frac{4\pi \cos \vartheta}{\lambda}$, 2ϑ арқалы \mathbf{k}_0 һәм \mathbf{k}_s векторлар арасындағы мүйеш, R аркалы шашыраў нокатынан бақлаў нокатына шекемги аралық белгиленген. ϑ мүйешин шашыраў мүйеши ямаса Брэгг мүйеши деп атайды. Қос векторлық көбейме поляризациялық ғәрзелик $\mathbf{E}_j s$ ти анықлады. Шашырағын толқынның толқынлардың амплитудасы $\mathbf{E} s$ кристалдағы барлық N дана атомдағы шашыраған толқынлардың амплитудаларының қосындысына тең: $\mathbf{E} s = \sum_{j=1}^N \mathbf{E}_j s$.

Бир бирлик денелик мүйеш ишиндеги шашыраған толқынлардың салыстырмалы интенсивлиги

$$\frac{I_s}{I_0} = |\mathbf{E} s|^2 R^2 d\Omega = \sigma_e P(\vartheta) f s^2 \prod_{j=1}^N \exp i(\mathbf{s}, \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k) \quad (4)$$

аңлатпасы жәрдеминде есапланылады. Бул аңлатпада I_0 арқалы кристалға келип түскен рентген нурының интенсивлиги, $\sigma_e = \frac{e^2}{mc^2}$ арқалы электрон тәрепинен шашыраў кесекесими (m арқалы электронның массасы, e арқалы заряды, c арқалы жақтылықтың тезлиги белгиленген), ал $P(\vartheta)$ арқалы поляризациялық еөбейтиұши аңлатылған. Поляризацияланған нурланыў ушын $P(\vartheta) = 1 + \cos^2 2\vartheta / 2$. $\sigma_e P(\vartheta) f s^2$ көбейтиұсиси атом тәрепинен шашыраў кесекесимине тең. (4)-аңлатпадағы экспоненталар j - һәм k -атомларда шашыраған толқынлар арасындағы фазалардың жылжыўын есапқа алады. Элементар қутышасында бир неше атомлар бар кристаллар ушын (4)-аңлатпадағы $f s$ ти структуралық фактор $F s$ пенен алмастырыў керек. Бундай жағдайда \mathbf{r}_j шамасы j – элементар қутышаның радиус-векторы болып табылады. Идеал кристаллар ушын (4)-аңлатпадағы суммалар геометриялық прогрессиялар болып табылады. Егер кристалл паралелопипед 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 суммалаў Лауэ интерференциялық функцияларына алып келеди:

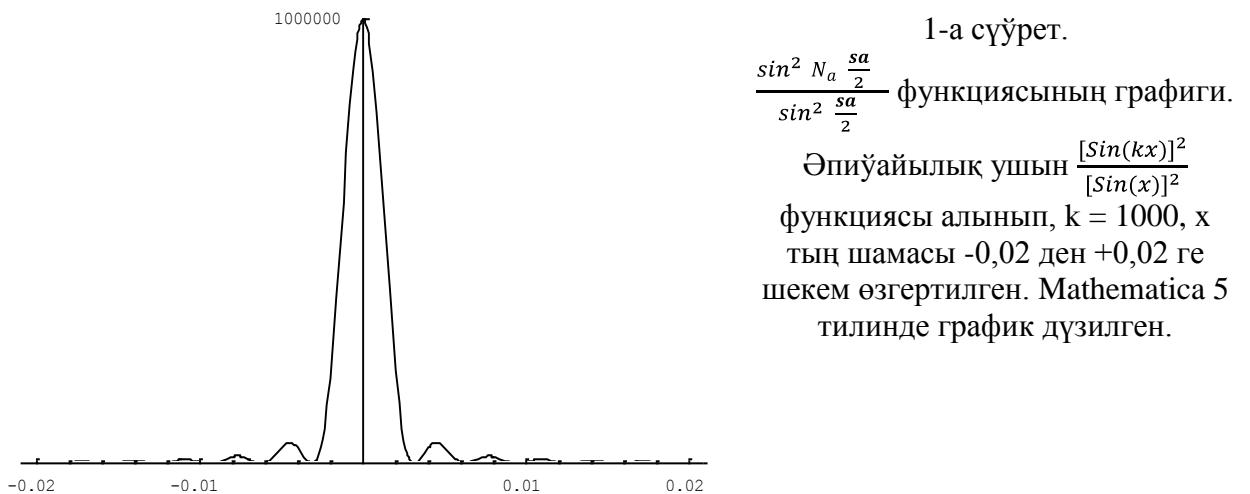
$$\frac{\sin^2 N_a \frac{\mathbf{s}\mathbf{a}}{2}}{\sin^2 \frac{\mathbf{s}\mathbf{a}}{2}} \cdot \frac{\sin^2 N_b \frac{\mathbf{s}\mathbf{b}}{2}}{\sin^2 \frac{\mathbf{s}\mathbf{b}}{2}} \cdot \frac{\sin^2 N_c \frac{\mathbf{s}\mathbf{c}}{2}}{\sin^2 \frac{\mathbf{s}\mathbf{c}}{2}} \quad (5)$$

Бул функцияның максималлық мәниси (дифракциялық максимумы) s, a, b, c лардың (2)-Лауэ шәртлерине эквивалент болған мәнислеринде: $\mathbf{s}\mathbf{a} = 2\pi H$, $\mathbf{s}\mathbf{b} = 2\pi K$ һәм $\mathbf{s}\mathbf{c} = 2\pi L$ болғанда $N_a N_b N_c$ шамасына, яғни кристалдың көлемі V^2 қа тең. Бىл шәртлер s шашыраў векторының мәнисинин кери пәнжере векторы \mathbf{g} ға тең екенligин билдиреди, яғни $\mathbf{k}_g = \mathbf{k}_0 + \mathbf{g}$. Түсіў тегислигиндеғи дифракциялық максимумлың мүйешлик кеңлигі $\frac{2\pi}{N_g}$ ға тең. Бул жерде N_g арқалы \mathbf{g} векторының бағытындағы кристалдың дәүирлериниң саны. Мысалы $N_g \sim 10^4$ болса, онда максимумлың мүйешлик кеңлигі $\sim 10^{-4}$ радианға тең болады. Кристалдың көлемі үлкейгенде бас дифракциялық максимумның интенсивлиги $\sim V^2$ шамасына туýры пропорционал өседи, ал олардың кеңлигі $\sim V^{-\frac{2}{3}}$ шамасына пропорционал өзгереди (1-сүйрет).

Кристалдың мүйешлер бойынша интеграллық шашыратыўшылық қәбилетлиги оннан өтиўши нурлары ушын кристалдың көлемі V ға пропорционал, яғни 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 шашыратыўшылық қәлибетлиги деп аталады, λ арқалы нурланыўдың толқын узынлығы, V_{el} арқалы элементар күтешаның көлеми белгиленген. K константасының мәниси интеграллық фактор $L \vartheta$ дифракцияның схемасы тийкарында анықланады. Мозайикалық кристаллардағы рентген нурларының дифракциясында екилеменши (вторичная) экстинкция құбылышы орын алады.



Дәүирлик қурылышында бузықлықтарға ийе, сондай-ақ аморф денелерде, шийшелерде хәм сүйкіліктарда Рентген нурларының кинематикалық дифракциясында интенсивлиktи атомлардың кеңисликтеги мүмкін болған барлық конфигурациялары бойынша (4)-аңлатпа бойынша орташалап табады. Ал атомлардың кеңисликтеги мүмкін болған барлық конфигурациялары $\omega_{r_{jk}}$ корреляция функциясы арқалы

$$\begin{aligned} & \frac{I_s}{I_0 \sigma_e P \vartheta f s^{-2}} = \\ & = N + N(N-1) \int_V \int_V \exp[i \cdot s, r_j - r_k] \frac{dv_j}{V} \frac{dv_k}{V} - \\ & - N(N-1) \int_0^0 \int_0^0 \omega_{r_{jk}} \exp[i \cdot s, r_j - r_k] \frac{dv_j}{V} \frac{dv_k}{V} \end{aligned} \quad (7)$$

аңлатпасы түринден есапланады. N ге пропорционал ағза N атомнан туратуғын тәрпитке салынбаған жыйнақтан нурланыўдың шашыраўын тәриплейди. Екинши ағза – кристалдың формасының фурье-образының модулиниң квадраты Фраунгофер дифракциясына сәйкес келеди (Фраунгофер дифракциясы – параллель нурлардың дифракциясы.).

Поликристаллық объектлер ушын $\omega_{r_{jk}}$ функциясы әдетте изотроп болып, сонлықтан дифракцияға ушыраған нурдың интенсивлиги объектке келип түсиўши нурға салыстырғанда аксиаллық симметрияға ийе. Дифракциялық максимумлар сақыйналар түrine ийе болады, олардың интенсивлиги ϑ мүйешинин үлкейиүи менен $f[\sin \frac{\vartheta}{\lambda}]^2$ шамасына пропорционал тез кемейеди.

Рентген нурларының дифракциясының кинематикалық жақынласыўы төменде келтирилген (9)-тенлемениң шешиминин Борнлық жақынласыўы болып табылады.

Кристалдың нурланың менен тәсирлесиүиниң дискрет (атомлық фактор $f(g)$ тийкарындағы) ҳәм континуаллық (полярланың $\chi(\mathbf{r}, \omega)$ тийкарындағы) тәрпилениңи $\chi_g = -4\pi \frac{e^2}{m\omega^2} \frac{1}{V_{el}} F(\mathbf{g})$ аңлатпасы менен көрсетиледи. Бул аңлатпадағы χ_g шамасы $\chi(\mathbf{r}, \omega)$ функциясын кери пәнжере векторы \mathbf{g} бойынша қатарға жайғандағы фурье-кураұшы (фурье-компонента). Бул қатнасты қолланып (6)-интеграллық шашыратыўшылық қәбилетлиktи мына түрде көрсетиүге болады:

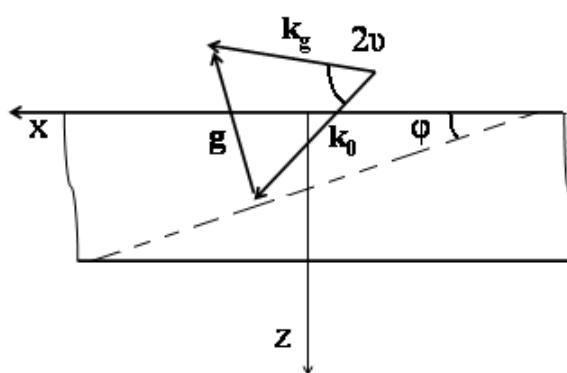
$$\frac{I_g}{I_0} = \pi^2 \frac{1 + \cos^2 2\vartheta}{2 \sin 2\vartheta} |\chi_g|^2 \frac{v}{\lambda}. \quad (8)$$

Егер идеал кристалдың сыйықлы өлшемлери $l > 10^{-5}$ см болса, онда кинематикалық жақынласыўды қолланыўға болмайды. Рентген нурларының дифракциясы бундай жағдайларда динамикалық теория жәрдеминде тәриplenеди. Бул теория бойынша идеал кристалдың салыстырмалы ҳәм интеграл шашыратыўшылық қәбилетлиги ҳәм оның көлеминдеги майданың қурылымы рентген нурларының дифракциясының кинематикалық теориясынан пүткіллей басқаша түрге ийе болады.

Рентген нурларының дифракциясының динамикалық теориясы дифракцияға ушыраған нурдың кристалға келип түсіүши нурға кери тәсириң есапқа алған ҳалда толқын тендеlemесин электр аўысыўы $\mathbf{D}(\mathbf{r}, \omega)$ векторы ушын толығырақ шешиўге тийкарланған [4-5].

$$\Delta \mathbf{D} + k^2 \mathbf{D} \approx -\text{rot rot } \chi \mathbf{D}. \quad (9)$$

Бул аңлатпаның оң тәреңи кристалда сыртқы тәсирде (рентген нурларының келип түсіүинде тәсириңде) қоздырылған екинши майдан болып табылады (Биз орыс терминологиясында қәлиплескен «вторичное поле» сөзин «екинши майдан» деп аударамыз.). (9) ды шешиўдин тийкарғы усылы Фурье усылы болып табылады. Бул усыл «дисперсиялық бет» түснегиге алып келеди [1, 3]. (9) ды шешиў ушын әстелик пенен өзгериүши амплитудалар усылы да қолланылады («Метод медленно меняющихся амплитуд» нәзерде тутылмақта.).



1-б сүйрет.

Кристаллық пластинкадағы еки нурлы дифракция. $2v$ арқалы кристалдан өтиўши \mathbf{k}_g ҳәм кристалға туўры келип түсіүши вектор \mathbf{k}_0 арасындағы мүйеш, ϕ арқалы x ҳәм шашыратыўшы атомлық тегислик (пунктир менен көрсетилген) арасындағы мүйеш белгиленген. \mathbf{g} болса дифракция векторы (кери пәнжере векторы).

Рентген нурларының дифракциясының динамикалық теориясының өзине тән өзгешеликтери еки толқын есапқа алынатуғын әпиўайы жағдайда айқын көринеди. Бул еки толқынның бириňши туўры өткен толқын (0), ал екиншиسى дифракцияға ушыраған толқын (\mathbf{g}) болып табылады. Ең әхмийетли жағдайлардың бири кристаллық пластинкадағы тегис толқынның дифракциясы болып табылады (1-б сүйрет).

(9)-тендеlemениң шешими кристалларда шашыраған толқынлар (Брэг шашыраўы, Бул жағдайда дифракциялық сүйрет рентген нурларының дереги менен кристалдың аралығына қойылған фотопленкада алынады.) ушын бир түрли, ал кристалл арқалы өткен дифракцияға ушыраған толқынлар (Лауэ өтиўи) ушын пүткіллей басқа түрге ийе болады

(Бул жағдайда кристалл дифракциялық сүйрет алынатуғын фотопленка менен рентген нурларының дереги арасына қойылады.). Биз бул жағдайларды қарап қарап шығыў менен шуғылланбаймыз.

Брэг шашырауы менен Лауэ өткериүи монокроматик ҳэм тегис параллель рентген нурларын алышу ушын кеңнен қолланылады.

Гамма нурларының нейтронлардың ҳэм электронлардың дифракциясы өзлерине тән өзгешеликлерге иие болады. Бул өзгешеликлер тәсирлесиў шамасы ҳэм толқын узынлықтары менен байланыслы. Динамикалық дифракция оптикалық диапазонда да холеристикалық ҳэм коллоидлық сыйық кристалларды изертлеў процессинде бақланады. Ендиги параграфта биз электронлардың дифракциясын қарап өтемиз.

3-§. Дифракцияға ушыраған электронлардың интенсивлиги

Электронлардың дифракциясы деп әдетте олардың кристаллардағы ямаса сыйықтылар менен газлердиң молекулаларындағы серпимли шашырауының келип түскен дәстеден базы бир мүйешке бурылған басқа дәстениң пайда болыўына айтады. Бул дәстениң келип түскен дәстеге салыстырғандагы бағыты, интенсивлиги шашыратыўшы объектттиң күрүлісінан ғәрэзли. 1927-жыды К.Дэвиссон (C.Davisson) ҳэм Л.Джермер (L.Germer) тәрепинен ашылған электронлардың дифракциясы Л. де Бройлдин (L. de Broglie) бөлекшелердин толқынлық қәсийеттери ҳаққындағы гипотезасын толық дәлилледи.

Биз дәслеп электронлар толқынларының узынлығын есаплаў менен шуғылланамыз ҳэм усы жерде белгили болған илимий әдебиятта усындей есаплаўлар жүргизгенде методикалық жақтан үлкен қәтелеклерге жол қойылып атырғанлығын атап өтемиз. Дерлик барлық әдебиятларда (мысалы электролық микроскопия бойынша көпшилике белгили П.Хирштың, А.Ховидиң ҳэм басқалардың «Электронная микроскопия тонких кристаллов» китабы [6], Физикалық энциклопедияның 1-томындағы «Дифракция электронов» атлы мақала [7]) массаның тезликтегі байланыслы деп есапладап аты шыққан (шайқымы жер жарған) $m = m_0 / \sqrt{1 - v^2/c^2}$ формуласынан пайдаланады. Бул формуланы тек есаплаўларды жеңиллестириў ушын ғана пайдаланыў мүмкін. Ал ҳақыйқатында масса релятивисттик инвариант болып, оның мәниси тезликтен ғәрэзли емес [8].
Де Бройлдың формуласы

$$\lambda = \frac{h}{p}. \quad (10)$$

Бул аңлатпада $h = 6,6260755 \cdot 10^{-34}$ эрг·с, ал импульс $p = \frac{mv}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$ формуласы жәрдеминде есапланылады. Демек тезликтин қәлеген мәниси ушын (10)-аңлатпаны былайынша жазыўымыз керек:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \sqrt{1 - v^2/c^2} \quad (11)$$

туринде жазыўымыз керек.

Катод пенен анод арасында электрон электр майданының тәсиринде $E = eU$ энергиясына иие болады. Бул аңлатпада U арқалы анод пенен катод арасындағы кернеў (анодтың кернеў), 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 ҳэм 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

$$\nu = c \frac{\sqrt{m^2c^2}}{1 - \frac{(eU + mc^2)^2}{(eU + mc^2)^2}} \quad (11)$$

аңлатпасын аламыз. (11)-аңлатпадағы тезликтің мәнисин (11)-аңлатпаға қойыўымыз керек. Бундай жағдайда бир қанша әпиўайыластырыўлардан кейин мынадай аңлатпаларға ийе боламыз:

$$\lambda = \frac{h}{mc} \frac{\frac{mc^2}{eU + mc^2}}{1 - \frac{m^2c^4}{(eU + mc^2)^2}} = \frac{hmc^2}{mc \frac{e^2U^2 + 2eUmc^2}{(eU + mc^2)^2}} \quad (12)$$

Егер электронның массасының, зарядының, Планк турақтысының, жақтылықтың вакуумдеги тезлигинин СГС системасындағы мәнислерин, сондай-ақ $1 \text{ см} = 10^{-8}$ ангстрем екенлигин (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 мәнислери вольтлерде берилүйи керек, ал нәтийже (көринип турғанында) ангстремлерде алынады.

Егер биз (12)- ҳәм (13)-формулаларға $U = 100000$ вольт мәнисин қойсақ, онда $\lambda = 0.0370444 \text{ \AA}$ толқын узынлығын аламыз. Бул арнаўлы кестелерде берилген толқын узынлығының мәнисине дәл сәйкес келеди.

Егер биз Интернационалық бирликлер системасынан (СИ) пайдаланатуғын болсақ, онда $m_e = 9,10938188 \cdot 10^{-31} \text{ g}$; $c = 2,99792458 \cdot 10^8 \text{ sm/c}$; $e = 1,602176462 \cdot 10^{-19} \text{ KI}$; $h = 6.62606876 \cdot 10^{-34} \text{ Dj} \cdot \text{s}$ [9] ҳәм (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 ҳәм үтирден кейинги 7-белгиге шекем дұрыс нәтийже береди. Биз электрон микроскопларында көп қолланылатуғын кернеўлер ушын ангстремдердеги электронлар толқынларының узынлықтарын беремиз:

Анодлық кернеў, вольтлерде	Электронлардың толқын узынлығы, \AA .
50 000	0,0535531
75 000	0,0432248
100 000	0,0370144
125 000	0,0327439
150 000	0,0295704

Солай етип биз дұрыс физикалық талқылаўлар тийкарында электрон микроскопындағы электронлар толқынларының узынлығын дәл мәнисин есаптайтуғын формулаларды келтирип шығардық.

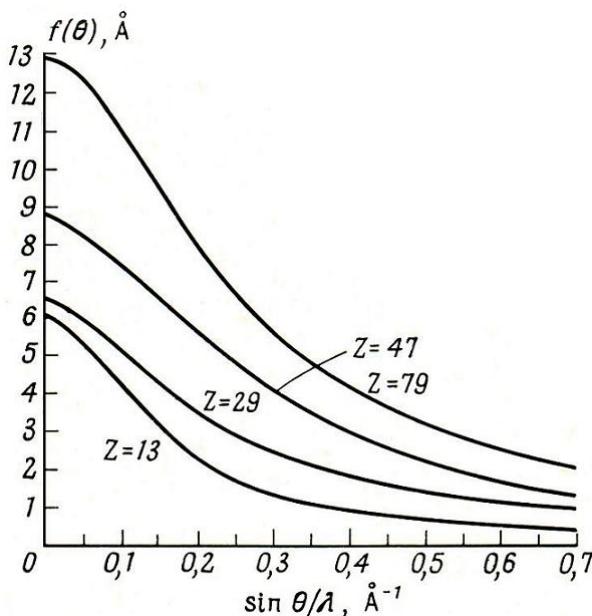
Енді электронлар дифракциясының теориясы менен шуғылланамыз.

Электронлардың кристаллық денелердеги дифракциясының теориясы рентген нурларының дифракциясы теориясына сәйкес дөретилди. Бирақ бул еки құбылыстың тәбиятлары пүткіллей басқаша. Рентген нурлары атомлардың электронлық тығыздыларында шашырайды. Ал зарядлары бар болғанлықтан электронлар он зарядларға ийе атом ядролары ҳәм атомлардағы электронлар пайда еткен электростатикалық майдан менен тәсирлеседи. Солай етип атомның шашыратыўшылық қәсийетилери атомлардың құрылышына байланыслы ҳәм сонлықтан ҳәр қыллы химиялық

элементлердиң электронларды шашыратыўшылық қәсийеттери хәр қыйлы. Санлық жақтан атомның электронларды шашыратыўшылық қәсийети $f_e(\theta)$ атомлардың номери Z тен ғәрзели 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 арқалы рентген нурлары ушын атомлық амплитуда белгиленген. θ ның мәнисиниң өсиюи менен f_e ның мәниси тез кемейеди. $f_e \sim (\sin \theta)^{-2}$ (бул жағдай 2-сүйретте келтирилген). Шашыраұдың атомлық амплитудасы шашыраған нурдың интенсивлигинің характерлайды, ал бул интенсивликтиң мәниси f_e^2 қатуұры пропорционал.



2-сүйрет.

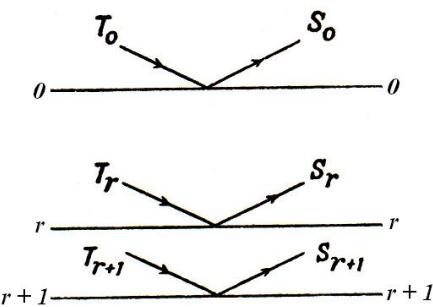
Электронлардың шашыраұының $f_e \theta$ атомлық амплитудалары [6]:

Al ($Z = 13$), Cu ($Z = 29$), Ag ($Z = 47$)
хәм Au ($Z = 79$) ушын берилген.

Электронлар атомлар менен рентген нурларына салыстырғанда миллионлаған есе күшлирек тәсирлеседи. Усыған байланыслы электронлардың шашыраў амплитудасы рентген нурларының шашыраў амплитудасынан мыңлаған есе, ал электронлардың шашыраған дастесиниң интенсивлиги рентген нурларының интенсивлигинен 1000 000 - 10 000 000 (миллион - он миллион) есе үлкен. Электронлар атомлар менен күшли тәсирлесетуғын болғанлықтан экспериментлерди жокары вакуумде өткөреди, ал изертленетуғын объектлерден етиўши электронлар дәстеси пайдаланылатуғын жағдайда (просвещивающая электронная микроскопия жағдайдарында) изертленетуғын объектлер сыпатында қалыңлығы шама менен 10 - 50 нм (100 - 500 Å) фольгалар (пластиналар) қолланылады. Жуқа кристаллық объектлер алыў проблемесынан күтылыў ушын изертлеушілер гейпара жағдайда объектлердин бетинен шашыраған электрон нурларын да пайдаланады. Бирак бундай жағдайдарда алынған дифракциялық сүйрет изертленилип атырған денениң қалыңлығы 1 - 10 нм болған бетинен ғана информацияларды ала алады (себеби 1 - 10 нм ден артығырақ теренеңдикте жайласқан областлардан дифракцияға ушыраған электронлар толқынлары сезилерліктегі интенсивлікте бақланбайды).

4-§. Рентген нурларының шашыраұының Дарвин бойынша теориясы

1914-жылы Ч.Дарвин (Ch.Darvin) шашыратыўшы кристаллографиялық тегисликтери кристаллық үлгинин (образецтің) бетине параллель болған идеал кристаллардағы рентген нурларының шашыраұын изертледи [10]. Усындай схемада бақланатуғын рентген нурларының дифракциясын Брэгг дифракциясы (Брэгг бойынша дифракция) деп атайды (1-параграфты қараңыз).



3-сүйрет.

ху тегислиги менен шекленген, кеңисликтиң ярымын толтырып туратуғын идеал кристалдың рентген нурларын шашыратыўы.

ху тегислиги менен шекленген, кеңисликтиң ярымын толтырып туратуғын идеал кристалдың рентген нурларын шашыратыўын қараймыз (3-сүйрет). Сүйреттеги туýрысызықтар шашыратыўшы тегисликлердин излерине сәйкес келеди. Бул тегисликтер 0, 1, 2, ..., r санлары жәрдемінде номерленген. Мейли кристалға алмплитудасы T_0 болған тегис толқын ϑ мүйеши менен келип түсетуғын болсын. Базы бир r тегислигине түсиўши толқынның амплитудасының усы тегисликтиң тиккелей үстіндеги мәнисин T_r арқалы белгилеймиз. Усыған сәйкес шашыраған толқынлардың амплитудаларын S_0 , S_r арқалы белгилеймиз

Бир атомлық тегислик тәрепинен шашыраў бағытындағы шашыратылған толқынның амплитудасының түсиўши толқынның амплитудасына қатнасы $\frac{A_p}{A_0} = -iq$ шамасына тең екенлигі белгили. Бул жерде

$$q = -\frac{Nd\lambda}{\sin \vartheta} F 2\vartheta \frac{e^2}{mc^2}. \quad (15)$$

Сол тегислик тәрепинен өткен нур бағытындағы толқын ушын $\frac{A_p}{A_0}$ қатнасының мәнисиниң $-iq_0$ екенлигі 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 жұтылыудың салдарынан тегисликтен өтип атырған нурдың амплитудасының жоғалыуының үлеси.

r тегислигінде шашыраған толқынның амплитудасын $-iqT_r$ түринде жазыў мүмкін. Бундай жағдайда толқын атомлық тегисликтер арқалы өткендеги фазаның өзгерисин ϕ арқалы белгилеп T_{r-1} , T_{r+1} , S_r ҳәм S_{r+1} лерди байланыстыратуғын теңлемелерпdi жазыўта болады. Ҳақыйқатында да T_{r+1} шамасы r тегислиги арқалы өтиўши T_r толқыннан, r менен r + 1 тегисликтери арасындағы жолдан, r тегислиги арқалы кери бағытта шашыраған S_{r+1} толқыннан қосылады. Бул толқын фазалар айырмасы 2 ϕ шамасына өзгеретуғын көс жолды өтеди. Бундай жағдайда

$$T_{r+1} = T_r 1 - iq_0 - \delta e^{-i\varphi} - iqS_{r+1}e^{-2i\varphi}. \quad (16)$$

T_r менен S_r лер ушын мынаны жазыўға болады:

$$T_r = T_{r-1} 1 - iq_0 - \delta e^{-i\varphi} - iqS_r e^{-2i\varphi}, \quad (17)$$

$$S_r = -iqT_r + S_{r+1} 1 - iq_0 - \delta e^{-i\varphi}. \quad (18)$$

Енди

$$e^{-i\varphi} = b, \quad 1 - iq_0 - \delta = a \quad (19)$$

белгилеўлерин киргиземиз. Бундай жағдайда (16)-(18) теңлемелер системасын мына түрде көширип жазамыз:

$$T_{r+1} = T_r ab - iqS_{r+1}b^2, \quad (20)$$

$$T_r = T_{r-1} ab - iqS_r b^2, \quad (21)$$

$$S_r = -iqT_r + S_{r+1} ab. \quad (22)$$

(20)-(22) теңлемелер системасынан S_r менен S_{r+1} шамаларын жоқ етемиз. Буның ушын үшинши теңлемени $b^2 - iq$ ға, ал екиншисин $-ab$ ға көбейтемиз ҳәм буннан кейин

оларды бир бирине қосамыз. Нәтийжеде T_r ушын мына түрдеги рекуррент теңлемени аламыз:

$$T_{r+1} - T_{r-1} ab = T_r \cdot 1 + a^2 b^2 + b^2 q^2. \quad (23)$$

T_r шамасы r дин өсиүи менен эсте-ақырын кемейеди. Соныктан шешимди $T_{r+1} = xT_r$ түринде излеймиз. Бул аңлатпадағы $x < 1$. x арқалы аңлатылған T_{r+1} менен T_{r-1} шамаларын (23)-аңлатпаға қойып

$$x^2 - \frac{1 + a^2 b^2 + b^2 q^2}{ab} x + 1 = 0 \quad (24)$$

теңлемесин аламыз. Бундай теңлемениң түбірлериниң (коренлериниң) $x_1 x_2 = 1$ қанаатландыратуғының билемиз. демек теңлемениң түбірлериниң бири 1 ден үлкен, ал екиншиси 1 ден киши. Түбірлердин 1 ден киши болғаны ғана физикалық мәниске ийе болады.

(20)- ҳәм (21)-аңлатпаларға $T_{r-1} = \frac{T_r}{x}$ ҳәм $T_{r+1} = xT_r$ шамаларын қойып $S_{r+1} = xS_r$ екенлигин дәрхәл билиүге болады. Бундай жағдайда (22)-теңлемеден мынаны аламыз:

$$\frac{S_r}{T_r} = \frac{-iq}{1 - abx} = \frac{S_0}{T_0}. \quad (25)$$

x тың мәнисин (24)-аңлатпадан, ал a менен b ның мәнислерин (19)-аңлатпадан алып $\frac{S_0}{T_0}$ дин шамасын есаптаймыз. Усының менен мәселе шешилди деп есаплауға болады. Бирақ буннан кейинги есаплаўлардың қолайлары болыўы ушын биз базы бир епиўайластырыўлар менен шуғылланамыз.

Бир тегисликтен екинши тегисликке өткенде орын алатуғын фазалар айырмасы $\frac{2d}{\lambda} d \sin \vartheta = m\pi + v$ шамасына тең. Бул аңлатпадағы v киши шама, себеби ϑ мүйешиниң мәниси Брэггтиң шашыраў мүйешинен аз шамаға айралады. Рентген нурлары жутылмайды деп есаптаймыз, яғни $\delta = 0$. x тың орнына $x = (1 - \xi)e^{im\pi}$ теңлиги орынланатуғындай етип жаңа ξ өзгериүшисин киргиземиз (бул өзгериүшиниң комплекс шама болыўы мүмкін). ξ, q, q_0 ҳәм v сыйқлы квадратлары киши болған шамаларды сақлап қаламыз. Бундай жағдайда (24)-аңлатпа мына түске енеди:

$$\xi^2 = q^2 - (q_0 + v)^2 \quad (26)$$

Бөліміндеги киши ағзалардың квадратларын есапқа алмай (25)-теңлемеден

$$\frac{S_0}{T_0} = \frac{-q}{q_0 + v \pm \sqrt{(q_0 + v)^2 - q^2}}$$

аңлатпасын аламыз. $q_0 + v = \varepsilon$ деп белгилесек, онда

$$\frac{S_0}{T_0} = \frac{-q}{\varepsilon \pm \sqrt{\varepsilon^2 - q^2}} \quad (27)$$

теңлемесине ийе боламыз.

(27)-теңлеме ε ниң киши болған $-q < \varepsilon < +q$ мәнислеринде $\frac{S_0^2}{T_0^2}$ қатнасының бирге тең екенлигин, яғни толық шағылысыўдың орын алатуғының көрсетеди. Ҳақыйқатында да (27)-формуланың бөлими комплексли шама ҳәм өзиниң түйинлесине көбейтилсе q ға айланады. ε ниң бул интервалдың еки тәрепинен де үлкейиўи менен шашыраў амплитудасы ҳәм оған сәйкес шашыраў интенсивлиги тез кемейеди. Егер $\varepsilon > +q$ болса, онда (27)-формулада плюс белгисин, ал $\varepsilon < -q$ да минус белгисин пайдаланыў керек.

Биз белгилеўлерде бир қанша анықтылар киргиземиз. q арқалы биз шексиз үлкен атомлық тегислик тәрепинен усы тегисликке келип түсетеуғын толқынның амплитудасы бирге тең, бул толқындағы E векторы толқынның түсіү тегислигине перпендикуляр болған жағдайдағы шашыраған толқынның амплитудасы. Егер (1)-теңлемедеги (Вульф-Брэгг теңлемеси) дифракциялық мүйешти ϑ_0 арқалы белгилесек, онда $\vartheta = \vartheta_0 + \varepsilon$ болып, қосымша жазылған киши мүйеш ε қосымша фазалар айырмасының пайда болыўына алып келеди. 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 түсійши толқынның амплитудасын 1 (бир) ге тең деп есапласақ, онда бир бирине параллель, ал ара қашықтығы d болған N дана тегислик тәрепинен 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 көремиз. 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 жәрдемінде есапланады (бул функцияға уқсас функцияның графиги 1-сүйретте келтирилген).

Егер усындағы пластинка ушын интеграллық шашыраў коэффициенти болған ρ шамасын есаптайтуғын 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 бирлигіндеги элементар қутышалар саны, F арқалы структуралық фактор, ал U арқалы кристалдың толық көлемі белгиленген.

(29)-аңлатпа идеал-мозайкалық кристаллар ушын кринематикалық теория тийкарында келтириліп шығарылған аңлатпа болып табылады. Бунда аңлатпа төменде динамикалық теория тийкарында алынған аңлатпа менен салыстырыў ушын керек болады [(30)-формула].

Биз енди есаплаўларымызды даўам ете аламыз.

Рентген нурларының кристалдың шегарасындағы сыныўын есапқа алмасақ ҳәм ϑ диң мәниси ϑ_0 ге тең болатуғын болса, онда онда анықлама бойынша ϑ нолге тең $\frac{2\pi}{\lambda} d \sin \vartheta = m\pi + \vartheta$ 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 алғыуға болады. Буннан

$$\vartheta - \vartheta_0 = \frac{\lambda}{2\pi d \cos \vartheta} \vartheta = \frac{\lambda}{2\pi d \cos \vartheta_0} \vartheta$$

аңлатпасын аламыз.

Интеграллың шағылысы ў ρ шағылысы ў иймеклиги астындағы майданға тең:

$$\rho = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{R} \vartheta d\vartheta = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{S_0}{T_0}^2 d\vartheta = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{S_0}{T_0}^2 d\varepsilon \frac{d\vartheta}{d\varepsilon}.$$

$\vartheta - \vartheta_1 = \Delta\vartheta = \frac{\lambda\varepsilon}{2\pi d \cos \vartheta_0}$ формуласынан $\frac{d\vartheta}{d\varepsilon} = \frac{\lambda}{2\pi d \cos \vartheta_0}$ екенлигине ийе боламыз. Интеграл ўш областқа бөлинеди:

бириңиши $\varepsilon < -q$;

екиншиши $-q < \varepsilon < +q$;

үшиншиши $\varepsilon > +q$.

Бундай жағдайда

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{S_0}{T_0}^2 d\varepsilon = 2q + 2 \int_q^{\infty} \frac{q^2}{\varepsilon + \frac{q^2}{\varepsilon^2 - q^2}} d\varepsilon \text{ ҳәм}$$

$$\int\limits_q^\infty \frac{q^2}{\varepsilon + \frac{q^2}{\varepsilon^2 - q^2}} d\varepsilon = \frac{1}{q^2} \int\limits_q^\infty \frac{2\varepsilon^2 - 2\varepsilon}{\varepsilon^2 - q^2} d\varepsilon = \\ = \frac{1}{q^2} \cdot \frac{2}{3} \varepsilon^2 - \frac{2}{3} \varepsilon^2 - q^2 \Big|_{q^2}^{\infty} - \varepsilon q^2 \Big|_{q^2}^{\infty} = \frac{1}{3} q.$$

Буннан түсіү тегислигіне перпендикуляр бағытта полярланған нурланыу ушын мына аңлатпаны аламыз:

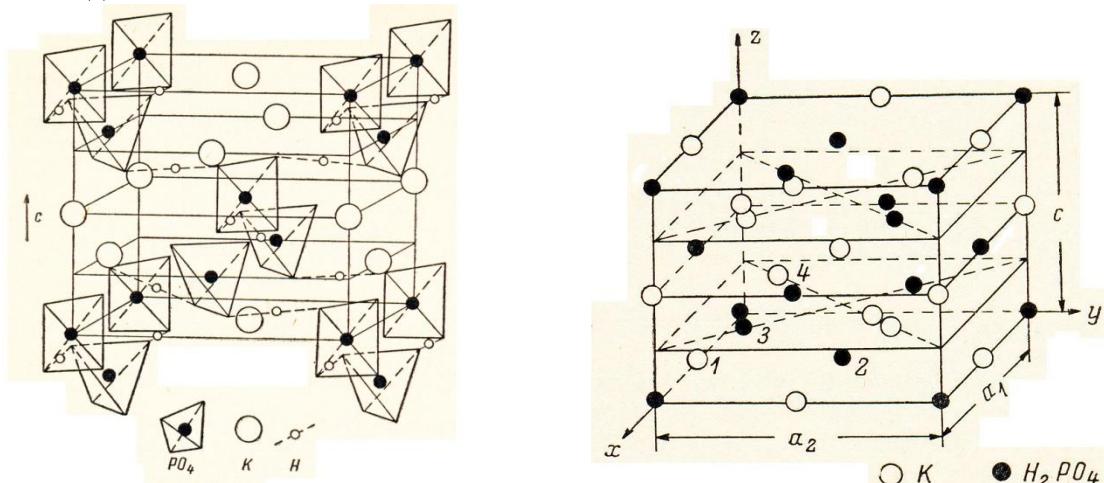
$$\rho = \frac{8}{3} q \frac{\lambda}{2\pi d \cos \vartheta} = \frac{8}{3\pi} \cdot \frac{N\lambda^2}{\sin 2\vartheta} \frac{e^2}{mc^2} F(2\vartheta) \quad (30)$$

Егер кристалларға келип түсійши нурдың поляризацияланбағанлығын есапқа алатуғын болсақ ҳәм оны поляризацияның еки қураўшыларына жайсақ, онда шашыраудың интеграллық интенсивлигі 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 Лауэнның кинематикалық теориясында идеал-мозайкалық кристалл ушын алынған (29)-формуладан үлкен айырмаға ийе. Идеал кристалл жағдайында ρ структуралық фактор $F(2\vartheta)$ тиң биринши дәрежесине туұры пропорционал, ал кинематикалық теорияда болса структуралық фактордың квадратына пропорционал. Мүйешлик көбейтиүшилер де, толқын узынлығына $\frac{e^2}{mc^2}$ шамасынан алынады.

Енди $\frac{e^2}{mc^2} = 2,8132 \cdot 10^{-13}$ см көбейтиүшиси ҳаққында мағлыұмат бері өтемиз. Бул шаманы электронның классикалық радиусы деп атайды. Бул шама $\frac{e^2}{R}$ шамасын (потенциал энергия) электронның тынышлықтағы mc^2 энергиясына теңлестириү жолы менен алынады.



4-сүйрет. KH₂PO₄ калий дигидрофосфаты кристалларының элементар қутышалары.

- (a) Кюри нокатынан жоқары температураларда (тетрагоналлық парафазада, курамалы модель) ҳәм (b) Кюри нокатынан төменги температураларда (ферроэлектриклик орторомбалық фазада, әпиүайыластырылған модель). 1 – 4 цифралары менен бир бирине эквивалент емес структуралық бирликлер белгиленген.

Енди айқын есаплаўларға өтемиз. Көпшиликтек белгили ферроэлектриклик калий дигидрофосфаты KH₂PO₄ кристаллары ушын алынған нәтийжелерди көремиз. Бул кристалл өжире температураларында паразелектрик (әдеттегидей сыйықты диэлектрик) болып тетрагоналлық құрылышқа ийе: $a = 7,45236 \text{ \AA}$, $c = 6,97298 \text{ \AA}$ (симметрияның кеңисліктері топары I42d). 121,3 – 122 K температараларда KH₂PO₄ кристалларында

ферроэлектриклик фазалық өтиў орын алып, усының салдарынан кристалл орторомбалық кристалға айланады. 105 K температурадагы кристаллық пәнжерениң турақтылары: $a = 10,54581 \text{ \AA}$, $b = 10,46634 \text{ \AA}$ ҳәм $c = 6,92241 \text{ \AA}$ (симметрияның кеңисликтеги топары $Fdd2$). Ферроэлектриклик фазалық өтиўдің салдарынан кристалдың элементар күтешасының көлеми сезилерліктей өзгөрмейді [$(6 - 10) \cdot 10^{-3}$ процент ғана].

Ферроэлектриклик фазалық өтиўде кристалда полидоменлик қурылымы пайдаланады. Нәтийжеде атомлық-кристаллық қурылымы жетилискең үлгилер полидоменлик кристалларға айланады. Усыған байланыслы паразелектриклик халдағы KH_2PO_4 кристалларын жетилискең атомлық-кристаллық қурылымыңа ийе, соңықтан олар ушын рентген нурларының дифракциясының динамикалық теориясын пайдаланыўға болады, ал ферроэлектриклик халға өткен кристаллардың қурылымы дефектли, соңықтан оларды идеал-мозайкалық кристалл деп қараўымызға болады ҳәм соңықтан рентген нурларының дифракциясының кинематикалық теориясын пайдаланыўғап болады деп болжаймыз. Усы болжаўдың дұрыс ямаса дұрыс емес екенligin санлы баҳалаў ушын KH_2PO_4 кристалларының еки модификациясы ушын структуралық фактордың мәнислерин есаплаймыз.

Структуралық фактордың

$$F_{hkl} = \sum_{k=1}^N f_k e^{i2\pi(hx_k + ky_k + lz_k)} \quad (32)$$

формуласы жәрдеминде есапланатуғынлығы кеңнен мәлім. Егер кристалл симметрия орайына ийе болатуғын болса (32)-аңлатпа әпиўайыласады ҳәм

$$N/2 \quad (33)$$

$$F_{hkl} = 2 \sum_{k=1}^N f_k \cos 2\pi(hx_k + ky_k + lz_k)$$

турине енеди. Солай етип калий дигидрофосфаты кристалдың тетрагоналлық паразелектрик фазасы ушын структуралық фактор (33)-формула менен, ал ферроэлектриклик орторомбалы фазасы ушын (32)-формула тийкарында есапланыўы керек. Бул формуландыбылайынша да жаза аламыз:

$$F(h, k, l)^2 = \sum_{j=1}^N f_j \cos 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j) + \sum_{j=1}^N f_j \sin 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j) \quad (34)$$

Бул ҳақыйқый функция болып табылады (квадратқа көтериў менен комплексли структуралық фактордан күтүлдік).

Структуралық факторды есапқа алыў менен (яғнайын элементар күтешадағы атомлардың координаталарын есапқа алыў менен) биз қәлеген hkl шашыраўының (шағылысыўының, hkl индексли дифракцияға ушыраған нурдың) салыстырмалы интенсивлігін анық айта алады екенбиз. Бул жуўмақ электронлар толқынларының кристаллық денелердеги дифракциясы ушын да дұрыс.

Калий дигидрофосфаты ушын структуралық амплитуда былайынша есапланады (төрт түрли атомлардың структуралық амплитудаларының амплитудаларының қосындысы):

$$F = K + P + O + H. \quad (35)$$

Бул аңлатпаларда K калий бойынша, P фосфор бойынша, O кислород бойынша ҳәм H водород бойынша структуралық амплитуда.

Фосфор бойынша структуралық амплитуда былайынша есапланады:

$P = \frac{1}{4} f_P \sum_{j \in I} \exp(hx_j + ky_j + lz_j)$ ҳәм тағы басқалар. Бул аңлатпада f_P арқалы фосфор ушын атомлық фактор белгиленген.

Фосфор атомларының элементар күтешадағы 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:

$$\sum_{j \in I} \exp(hx_j + ky_j + lz_j) = 1 + e^{i\pi(h+k+l)} \frac{1 + e^{i\pi(k+l/2)}}{1 - e^{i\pi(k+l/2)}}.$$

Усы аңлатпаларды есапқа алған ҳалда сөниўлерди табамыз:

(h,0,0) дифракциялық максимумлары арасында $h = 2n$ ҳәм $P = f_P$.

(h,h,0) дифракциялық максимумлары арасында $h = 2n$ ҳәм $P = f_P$.

(0,0,l) дифракциялық максимумлары арасында $l = 4n$ ҳәм $P = f_P$.

Калий атомлары ушын сәйкес мына байланысларды аламыз:

(h,0,0) дифракциялық максимумлары арасында $h = 2n$ ҳәм $K = f_K$.

(h,h,0) дифракциялық максимумлары арасында $h = 2n$ ҳәм $K = f_K$.

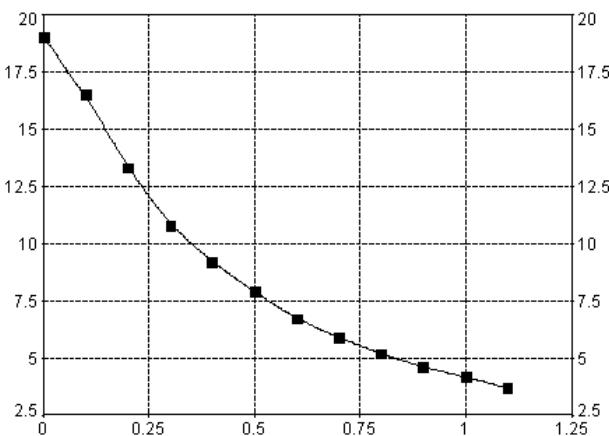
(0,0,l) дифракциялық максимумлары арасында $l = 4n$ ҳәм $K = f_K$.

Калий, фосфор, водород ҳәм кислород атомлары ушын рентген толқынларының атомлық шашырауының $\sin\theta/\lambda$ ден ғәрэзлигин табыу қыйынлық пайда етпейді. Ҳақықатында да қолда бар әдебияттарда бул атомлар ушын мынадай атомлық факторлардың мәнислерин береди:

$\sin\theta/\lambda$	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 мағлыұматларды аналитикалық аңлатпаға айландырыў болып табылады (математикалық тил менен айтқанда аппроксимация менен шүғылланыўымыз керек).

Мәселени шешиў ушын биз SYSTAT TableCurve 2D 5.01 программасынан пайдаланамыз. Бул математика илиминин ҳәр қайлы тараулерынан алғынған 3665 функцияның жәрдеминде экспериментте алғынған нәтийжелерди автоматластырыўға мүмкиншилик береди. Келеси сүретте усы программа жәрдеминде калий ушын жоқарыдағы кестеде берилген мағлыұматлар ҳәм қайта ислеудиң нәтийжесинде алғынған аппроксимациялық иймеклик берилген.



Шашыраудың атомлық факторының калий ушын алғынған аппроксимациялық иймеклиги. Абсциссада $\sin\theta/\lambda$ ның, ал ординатада шашыраудың атомлық факторының мәниси берилген. Төрт мүйешликлер жоқарыда көлтирилген кестедеги мағлыұматларға сәйкес келеди.

Биз структуралық факторды «Mathematica 7» программалаў тилинде есаплаўды әмелге асырдық ҳәм усыған байланыслы есаплаўлар алгоритмин бере аламыз. Есаплаў схемасы төмендегилерден ибарат:

- Изертленип атырған кристаллық объектке кириўши химиялық элементлердин атомлық факторының дифракциялық мүйешке ғәрэзлигиниң жууық түрдеги аналитикалық аңлатпасын алыў (бизиң жағдаймызыда калий, фосфор, водород ҳәм кислород ушын). Бул кейинирек электронлар толқынлары ушын көрсетиледи.
- Элементар құтышалардағы атомлар ииетеп турған ноқатлардың дәл

координаталарын билий.

3. Структуралық фактор ушын (35)-формулаға сәйкес келиўши толық аңлатпа жазыў.

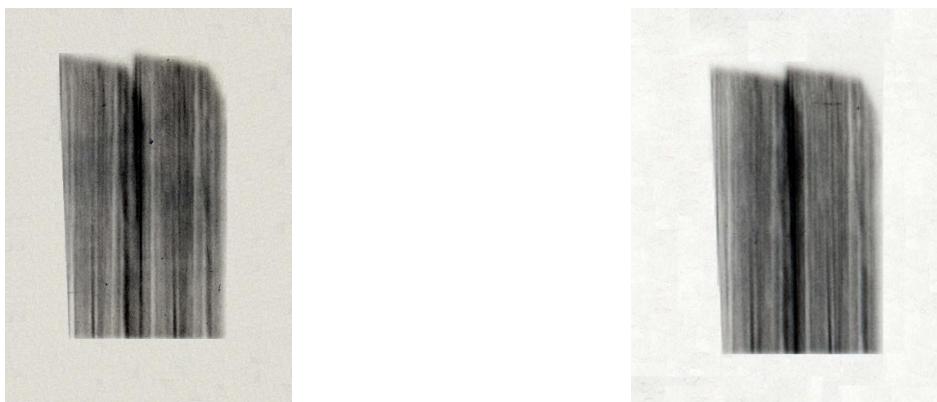
4. Рентген нурларының өшиў нызамлықтарын (условия или законы погасания) билий ҳәм булл нызамлықтар орынланатуғын кери пәнжере түйинлерин есаплаўлардан алыш таслау.

5. Пайдаланылатуғын рентген толқынларының толқын узынлықтарына сәйкес поляризацияланбаған нурлар ушын структуралық фактордың өзиниң дәл мәнислерин есаплаў ҳәм алынған нәтийжелерди экспериментте өлшеген нәтийжелер менен салыстырыў.

Водород ҳәм 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 рентгентопографиялық изертлеўлер барысында рентген толқынларының дифракциясының динамикалық ҳәм кинематикалық теорияларын бир бири менен салыстырып көриў мүмкиншилигі тууылады.



5-сүрет. Ферроэлектриклик KH_2PO_4 кристаллынан алынған рентгентопографиялық сүреттер [кристаллық үлгинин бети тетрагоналлық фазалағы (110) кристаллографиялық бетке параллель, **c** көшери вертикал бағытта бағытланған, рентгентопографиялық мүйешлик сканнерлеў методы (усылы)].

KH_2PO_4 кристалларында ферроэлектриклик фазалық өтиўлерде полидоменлик күрүліс пайда болып, бул күрүліс еки доменлер системасынан туралды. Структуралық доменлердин пайда болыўы кристалдың сезилерліктер майысыўына алыш келмейди. Бирақ полидоменлик комплекслер арасында кристалл күшли майысады ҳәм идеал-мозаикалық кристаллардың моделин береди. 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-сүретте ферроэлектриклик KH_2PO_4 кристаллынан алынған рентгентопографиялық сүрет келтирілген [кристаллық үлгинин бети тетрагоналлық фазалағы (110) кристаллографиялық бетке параллель, **c** көшери вертикал бағытта бағытланған, рентгентопографиялық мүйешлик сканнерлеў усылы]. Сүреттеги [001] көшерине параллель болған жолақтар полидоменлик комплекслердин излери болып табылады. Бизиң мәселемиз [001] көшерине перпендикуляр бағытта (яғни [110] көшери бағытында) фотопленканы фотометрлеў (яғни дифракцияға ушыраған рентген нурларының

интенсивликлерин өлшеү) болып табылады. Бул жағдайда да шама менен $\frac{F_{hkl\ kin}}{F_{hkl\ din}} \approx 4$ мәниси алынды.

Солай етип биз рентген толқынларының дифракциясының кинематикалық ҳэм кинематикалық теорияларын бир объектке қолланыў мәселесин бир объектти изертлеў барысында шеше алады екенбиз. Биз алған нәтийжелер KH_2PO_4 кристалларының идеал-мозаикалық та емес, идеал да емес екенлигин көрсетеди.

Енди ρ ның жоқарыдағы (29)- және (31)- еки формула менен есапланған ҳэм экспериментте алынған мәнислерин салыстырып көриў ушын беремиз.

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 кестелердеги мағлұмалар Al менен $CaCO_3$ кристалларының да идеаллық-мозаикалық ямаса идеал емес екенлигин көрсетеди.

5-§. Рентген нурларының шашырауының Эвальд бойынша теориясының элементлери

Рентген нурларының дифракциясының Эвальд бойынша (динамикалық) теориясында кристаллық кеңисликтеги электромагнитлик толқынның тарқалыўы қарап шығылады ҳэм электромагнит толқынлардың орталық пенен динамикалық тәсирлесиўи есапқа алынады. Пәнжереде оң заряд кеңисликтиң ҳәр бир ноқатындағы электронлық тығызлығына тендей тығызлық пенен тарқалған ҳэм олар қозгалмайды деп есапланады. Бундай жағдайда орталық еркін зарядқа ийе емес система деп қабыл етиледи. Бирақ бул заряд пәнжереде дәүирилк түрде өзгереди (өзгериў дәүири кристаллық пәнжерениң дәүирине тен).

Бундай орталықтардағы электромагнитлик толқынлардың тарқалыўы ҳақындағы мәселени шешкенде индукция векторы $D||E$ деп есапланады (яғни кристаллардағы анизотропия есапқа алынбайды). Бундай болжаў рентген нурлары ушын сыныў көрсеткиши $n = \frac{1}{\epsilon}$ шамасының шама менен бирге теңлигінде (биден 10^{-6} - 10^{-7} шамасына айрылады).

Усынданай болжаўлар тийкарында

$$D \ r = A \ r e^{2\pi i(vt - K_0 r)} \quad (35)$$

аңлатпасы менен тәріплепетуғын тегис толқынлар түриндеги стабилли (үақытқа ғәрэзли емес) шешимлер изленеди. Толқынның амплитудасы A үақыттан ғәрэзли емес, ал координатадан ғәрэзли болыўы мүмкін. Себеби электронлар тарқалыўшы толқынлардың тәсиринде тербеледи ҳэм сонлықтан олар (электронлар) тәрепинен тарқалатуғын толқынлар бир бири ҳәм келип түсіүши толқын менен интерференцияға ушырайды. Нәтийжеде амплитудасы кеңисликте дәүирили түрде өзгеретуғын базы бир турақты электромагнит толқын пайда болады. Бул дәүирилк пәнжерениң дәүириндей болыўы керек, яғни $A \ r$ үш бағыт бойынша дәүирилкке ийе функция болып табылады. Бул функцияны пәнжерелик сумма (қосынды) түринде көрсетиў мүмкін:

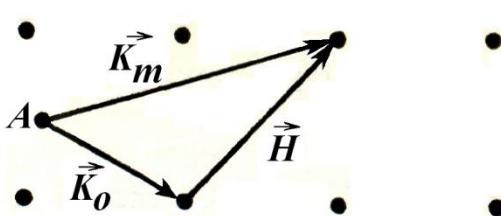
$$A \ r = \sum_m D_m e^{-2\pi i(r, H_m)} \quad (36)$$

Бул аңлатпадағы H_m кери пәнжерениң векторы. Бундай жағдайда шешим бир катар тегис толқынлардың m суммасы сыйпатындағы шешимге ийе болады:

$$D = \sum_m D_m e^{-2\pi i[v t - K_0 + H_m r]} = \sum_m D_m e^{-2\pi i[v t - K_m r]}. \quad (37)$$

(37)-аңлатпада $\mathbf{K}_m = \mathbf{K}_0 + \mathbf{H}_m$.

Егер мәселени әпіүайыластырсақ хәм зарядларды пәнжерениң түйинлеринде жайласқан деп есапласақ, онда шешимниң түриниң қандай болатуғының анық болады. Ҳақықатында да, егер зарядлар координаталары $\mathbf{r} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}$ болған пәнжерениң түйинлеринде жайласқан болса, онда $\mathbf{r}, \mathbf{H} = hm + kn + lp$ шамасына тең болып, барлық үақытта да пүтин мәниске ийе болады. Бундай жағдайда (35)-теңлемедеги \mathbf{K}_0 ди $\mathbf{K}_0 + \mathbf{H}$ ка алмастырыў мүмкін хәм \mathbf{H} қа парық кылатуғын барлық толқын векторларын бир бириңе эквивалент деп есаплаўга болады. 6-сүйретте кери пәнжере көрсетилген. \mathbf{K}_0 векторы (000) түйинине қарай бағытланған. А ноқатынан кери пәнжерениң қәлеген түйинине қарай бағытланған қәлеген векторды Максвелл теңлемелериниң шешимине киришши қәлеген вектор деп қараўға болады.



6-сүйрет.

Кери пәнжерениң бир тегислигинин фрагменти. \mathbf{K}_0 векторы (000) түйинине қарай бағытланған.

Орталықта тарқалыўшы электромагнит майданы ушын Максвелл теңлемелерин жазамыз:

$$\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = c \operatorname{rot} \mathbf{H}; \quad \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = c \operatorname{rot} \mathbf{E} = c \operatorname{rot} \frac{\mathbf{D}}{\epsilon}. \quad (38)$$

Буннан

$$\frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} = -c^2 \operatorname{rot} \operatorname{rot} \frac{\mathbf{D}}{\epsilon}. \quad (39)$$

тенлемесине ийе боламыз.

Диэлектриклик сициргишилігі ϵ болған орталықта \mathbf{D} , \mathbf{E} хәм \mathbf{P} векторлары былайынша байланысқан:

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P} = \epsilon\mathbf{E}. \quad (40)$$

Буннан

$$4\pi\mathbf{P} = \mathbf{D} - \mathbf{E} = \epsilon - 1 \mathbf{E} = \chi\mathbf{E}$$

тенлемесине ийе боламыз. Бул теңлемеде χ арқалы орталықтың поляризацияланыўшылығы белгиленген.

Диэлектриклик сициргишилік ϵ үш бағыт бойынша дәйирли түрде өзгеретуғын болғанлықтан (дәйирлери a, b хәм c , элементар құтышалардың дәйирлери) χ да үш бағыт бойынша дәйирли өзгереди. Оны қатарға жайып мына түрде көрсетиүге болады:

$$\chi = \chi_h e^{2\pi i(\mathbf{H}_h, \mathbf{r})}$$

Қатарға жайыўдың χ_h коэффициентлери бойынша аңлатпаны женил түрде табыўға болады. Ҳааыйкатында да, егер электрон базы бир ноқатта жайласқан болса, онда электромагнит толқынының тәсириндеги 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 береди:

$$x = \frac{e}{m} \frac{E_0 e^{i\omega t}}{\omega_0^2 - \omega^2 + i\omega t}.$$

Кеңисликтиң берилген ноқатындағы көлем бирлигидеги поляризация P ның мәниси $P = \frac{ex}{\Delta\nu}$ шәртинен анықланады. Суммалаў базы бир $\Delta\nu$ көлеминдеги барлық зарядлар бойынша жүргизиледи.

Рентген нурлары ушын әдетте $\omega^2 \gg \omega_0^2$. Соныңтан P ны былайынша жазамыз:

$$4\pi P = -\frac{4\pi e^2}{m\omega^2} \frac{\Delta N}{\Delta\nu} E_0 e^{i\omega t} = -\frac{e^2}{m\pi\nu^2} \rho E_0 e^{i\omega t}.$$

Демек

$$\chi = -\frac{e^2}{m\pi\nu^2} \rho = -\frac{e^2\lambda^2}{m\pi c^2} \rho = -\frac{e^2\lambda^2}{m\pi c^2} \frac{1}{\nu} \sum_{hkl} F_{hkl} e^{2\pi i(\mathbf{H}_{hkl}, \mathbf{r})}. \quad (41)$$

Усыған байланслы

$$\chi = -\frac{e^2\lambda^2}{m\pi c^2} \frac{F_h}{\nu}. \quad (42)$$

Бул аңлатпада ν арқалы элементар құтышаның көлеми белгиленген.

Структуралық амплитудадағы дисперсиялық дүзетиўлерди ($ik\omega$ ны) есапқа алғанда атомлық фактордың жормал ағzasы $i\Delta f''$ пайда болады. Бундай жағдайда χ_h менен χ_h шамалары комплексли түйинлес шамалар болыўдан қалады ҳәм χ шамасы комплекс шамаға айланады. Соның менен бирге ε ниң шамасы 1 (бир) деңиз аз шамаға айрылатуғын болғанлықтан, онды мына аңлатпаны жазыў мүмкіншилигине ииे боламыз:

$$\chi = \varepsilon - 1 \approx \frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon} = 1 - \frac{1}{\varepsilon}.$$

Усы жағдайларга байланыслы (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 ҳәм $\operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{D} = \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{D} - \nabla^2 \mathbf{D}$ болғанлықтан ҳәм еркин зарядлардың жоқ екенлиги шартинен $\operatorname{div} \mathbf{D} = 0$ (39)-теңлемениң ең ақыргы түрін 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)- ҳәм (41)-формадағы D менен χ ниң мәнислерин есапқа алып $\chi \mathbf{D}$ көбеймесин мына түрде есаплап шығарыўға болады:

$$\begin{aligned} \chi \mathbf{D} &= \sum_n \sum_q \psi_h D_n \exp[2\pi i(\nu t - K_n + H_k, r)] = \\ &= \sum_n \sum_q (\chi \mathbf{D})_m \exp[2\pi i(\nu t - K_n + H_k, r)]. \end{aligned} \quad (44)$$

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 ҳәм алынған теңлемени шешемиз. Буның ушын егер вектор $\mathbf{u} = \mathbf{u}(r, t) = \mathbf{A} e^{2\pi i(\nu t - \mathbf{K} \cdot \mathbf{r})}$ берилген болса, онда

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{u} &= -2\pi i \mathbf{K} \cdot \mathbf{u}, \\ \nabla^2 \mathbf{u} &= -4\pi^2 \mathbf{K}^2 \mathbf{u}, \\ \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} &= -4\pi^2 \nu^2 \mathbf{u}, \\ \operatorname{rot} \mathbf{u} &= -2\pi i \mathbf{K} \times \mathbf{u}, \\ \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{u} &= 4\pi^2 \mathbf{K}^2 \mathbf{u} - \mathbf{K}(\mathbf{K}, \mathbf{u}) = 4\pi^2 \mathbf{K}^2(\mathbf{u})_K \end{aligned}$$

екенлигин еске аламыз. Бул теңлемедеги $(\mathbf{u})_K$ арқалы \mathbf{K} векторына перпендикуляр болған \mathbf{u} дың қураўшысы белгиленген (теңлемени толық шешиўди биз бул текстке киргизбеймиз) Бундай жағдайда (43)-теңлемениң шешимин

$$\frac{K_m^2 - K^2}{K_m^2} \mathbf{D}_m = \sum_n \chi_{m-n} (\mathbf{D}_n)_m \quad (45)$$

теңлемелер системасы түринде аламыз. Бул аңлатпада $(\mathbf{D}_n)_m$ арқалы \mathbf{D}_n векторының \mathbf{K}_m векторының бағытындагы проекциясы болып табылады. \mathbf{K} болса толқын векторының бослықтағы мәниси.

(45)-тәнлемелер сыйықлы тәнлемелер системасы болып табылады. Бул тәнлемелердин саны индукциясы D_m болған толқынлар санына тең. Поляризацияланбаған толқын ушын поляризацияның еки ҳалы бир биринен ғәрзесиз болғанлықтан D_m ниң n мәниси ушын $2n$ тәнлемеге ийе боламыз.

(45)-тәнлемелер системасы принципинде шексиз көп тәнлемелер системасынан тұрыўы мүмкін. Бирақ булл тәнлемелер системасын дыққат пенен үйрениү $K_m^2 - K^2$ айырмасының өсіүи менен D_m шамаларының санының жүдә кемейип кететуғынлығын көрсетеди. Ҳақыйқатында да (45)-системаның оң тәрепи булл системадағы бир тәнлемеден екинши тәнлемеге өткенде үлкен шамаға өзгере алмайды, яғни $K_m^2 - K^2$ айырмасының мәниси киши болса D_m ниң мәниси үлкен болады. Бундай жағдайда тәнлемелер системасындағы тәнлемелер саны кемейеди.

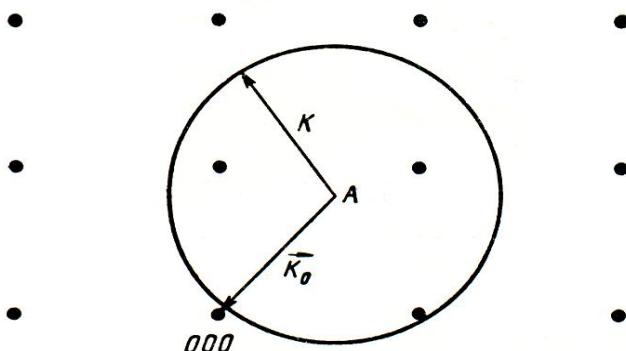
$K_m^2 - K^2$ айырмасы киши болғанлықтан (45)-тәнлемени былайынша көширип жаза аламыз:

$$2\varepsilon_m D_m = \chi_{m-n} (D_n)_m \quad (46)$$

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 мүмкін.). Бирақ (45)-тәнлеме жоқарыда айтылғанларға қосымша $|K_m|$ ниң $|K|$ ға тең бола алмайтуғынлығын да көрсетеди. Демек кристалл ишинде толқынның тарқалыў тезлиги бослықтағы толқынның тарқалыў тезлигине тең болмайды деп жуўмақ шығарамыз. Ҳақыйқатында да ε шамасының нолге тең болыўы D_m шамасы ушын шексизликти береди. Ал бундай жағдай физикалық мәниске ийе бола алмайды. Бул ε шамасы резонанслық қәтелек атамасына ийе болды.

Жоқарыда айтылып өтилгениндей K_m ниң бир неше мәниси ушын ε_m лердин мәнислері киши болса (ε_m ниң мәнислері ҳақыйқатында да киши шама ҳәм 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 мүмкіншилигин береди. Тап усындан әпиўайы жоллар менен кинематикалық теорияда дифракцияға ушыраған нурлардың бағытын анықлады.

Мейли кери пәнжереде толқын векторы K_0 болған толқын тарқалатуғын болсын (демек бул вектордың узынлығы да, бағыты да белгилі деген сөз, 6-сүйрет). Дифракцияға ушыраған толқынлардың шашыраў орайын A арқалы белгилеймиз ҳәм усы ноқаттан (000) түйинине K_0 векторын жүргиземиз [A ноқаты менен (000) түйинине шекемги кашықтық K_0 векторының узынлығына тең деген сөз]. А ноқаты орайы ҳәм 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) ноқаты 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 баска түйини Эвальд сферасына жақын жайласқан болса, онда оның ушын ε_m шамасы киши, бирақ D_m ниң шамасы үлкен болады.



7-сүйрет.

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 алатуғының айқын көрсетеди. Айырма соннан ибарат, кинематикалық теорияда (000) ноқатынан \mathbf{K}_0 векторы емес, ал \mathbf{K} векторы жүргизиледи.

6-§. Электронлар толқынлары ушын динамикалық теорияның қолланылығы

Электронлардың дифракциясының кинематикалық теориясы электронлық-микроскопиялық сүретлерди интерпретациялау ушын сапалық жақтан пайдалы теория болып табылса да, бул теорияны дифракцияға ушыраған толқынның амплитудасы q_g кристалға келип тусиўши толқынның амплитудасы q_0 дан киши болған жағдайда ғана табыслы түрде пайдаланыў мүмкін. Қалыңлығы т болған жетилиспеген кристалдағы z теренлигингеде атомлардың айысыўлары $R(z)$ болсын. Бундай жағдайда изертленишши кристаллық фольганың төменги бетиндеги дифракцияға ушыраған толқынның амплитудасы q_g мына шамаға тең:

$$q_g = \frac{\pi i}{\xi_g} q_0 \int_0^t e^{-2\pi i s z - 2\pi i \mathbf{g} \cdot \mathbf{R}(z)} dz. \quad (47)$$

Бул аңлатпада ξ_g арқалы экстинкциялық узынлық, ал s арқалы дәл Брэгг аұхалынан айысыў белгиленген. \mathbf{g} болса кери пәнжерениң векторы. Бул теңлеме айырым атомлар тәрепинен шашыратылған толқынлардың амплитудаларын фазаны есапқа алған ҳалда қосыўдың жәрдеминде алынған. Бирақ, егер дифракцияға ушыраған толқынның амплитудасы ξ_g үлкен мәниске ийе болса, онда дифракцияға ушыраған толқынлардың өзлеринин атомлардағы шашырауын есапқа алыўымыз керек болады. Кинематикалық теорияның бул шекленгендеги әсиресе s тиң мәниси жүдә киши болғанда (Брэгг шәрти дәл орынланғанда) айқын көринеди. Бул жағдай (47)-аңлатпада келип тусиўши толқынның амплитудасы $q_0 = 1$ болғанда анық көринеди:

$$q_g^2 = \frac{\pi^2}{\xi_g^2} \frac{\sin^2 \pi ts}{(\pi s)^2}. \quad (48)$$

Бул аңлатпа $s = 0$ шәрти орынланғанда

$$q_g^2 = \frac{\pi t}{\xi_g}^2.$$

Бул аңлатпадан дифракцияға ушыраған толқынның интенсивигинин кристалға келип тусиўши толқынның интенсивигинен үлкен болып шығыў мүмкіншилиги пайда болады. Ҳақыйқатында да т ның мәниси $\frac{\xi_g}{\pi}$ ден үлкен болса $q_g > q_0$ болып шығады. Электрон микроскопларында изертленетуғын кристаллық денелердин қалыңлығы әдетте $10\xi_g$ ден үлкен болмайды. Демек бундай жағдайдарда кинематикалық теория дұрыс нәтийжелерди бермейди. Сонықтан кристалдағы атомларда шашыраған барлық толқынлардың (изертленетуғын кристаллық денеге конденсорлық линзадан келип тусиўши, дифракцияға ушыраған толқынлардың) фазаларын есапқа алыў менен қосыў зәрүрлиги пайда болады. Усындаған жағдайдарды есапқа алып кристалларда дифракцияға ушыраған толқынлардың интенсивигин есаптайтуғын теорияны динамикалық теория деп атайды.

Динамикалық теория электронлар толқынларының кристаллық денелердеги дифракциясын изертлеў барысында пүткиллей құтилмеген жаңа кубылыслардың орын алатуғының да көрсетеди. Бундай қубылыслар қатарына адсорбциялық деп аталауғын физикалық эффектлер киребиди. Сонықтан биз кинематикалық теорияның әпиүйайылығы оның ең үлкен артықмашлығы болып есапланса да, оның кемшиликлери рентген

нурларының кристаллық денелердеги кинематикалық дифракциясынан әдеүир үлкен орны ийелейди ҳәм электронлардың дифракциясында динамикалық теория тийкарғы орынды ийелейди.

Биз жоқарыда электронлар толқынларының толқын узынлығының рентген толқынларының толқын узынлығынан әдеүир киши болатуғының көрген едик. Олардың толқын узынлықтарын ҳәм ZnS кристалларындағы (220) тегисликлер семействосында $d_{220} = \frac{a}{8} = \frac{5,4145}{8} = 1,91431$ қандай дифракциялық мүйешке бурылатуғының мына кесте жәрдемінде беремиз:

Толқын	$d, \text{\AA}$	$2\theta = \text{arc sin } \frac{\lambda}{2d}$, мүйешлик градус
Рентген толқыны (Си анодының α -спектри).	1.5418	49,5
Электронлар толқыны, анодлық кернеү 100 кВ болғанда.	0,0370144	1,10787

Солай етип әдеттеги рентгенографиядағы 50 градуслық дифракциялық мүйештиң орнына электрон микроскопиясында шама менен 1 градуслық мүйеш сәйкес келеди. Сонықтан электронлар кристалдың бетине дерлик перпендикуляр жайласқан атомлық тегисликлерде дифракцияға ушырайды ҳәм дифракцияға ушыраған толқынларды кристалдың ишинде оның бетине перпендикуляр етип алғынған жиңишке колонка арқалы тарқалады деп есаплауға болады (8-сүйрет).

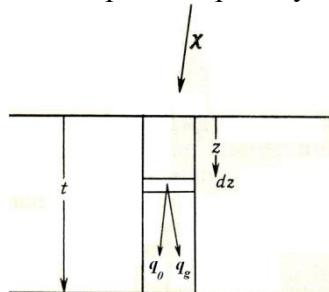
Биз кристалда тарқалатуғын еки толқынды есапқа аламыз. Олардың бириňшиси кристалға келип түсетеуғын толқын [амплитудасы $q_g(z)$], екиншиси кристалда дифракцияға ушыраған толқын [амплитудасы $q_0(z)$], z арқалы кристалдың бетине перпендикуляр бағыттағы координата белгиленген. Бундай жағдайда электронлар

$$\psi(z) = q_0(z) \exp(2\pi i \chi \cdot r) + q_g(z) \exp(2\pi i \chi' \cdot r) \quad (49)$$

Бул аңлатпада χ арқалы энергиясы eU болған электронлардың толқын векторы белгиленген (яғни $\frac{\hbar^2 \chi^2}{2} = eU$). χ' болса узынлығы χ ның узынлығындағы болған шашыраған (дифракцияға ушыраған) толқынның толқын векторы. Кинематикалық теориядағыдан мына аңлатпаны жазамыз:

$$\chi' = \chi + \mathbf{s}. \quad (50)$$

Бул аңлатпада \mathbf{s} арқалы Брэгг аўхалынан аўысыўды анықтайтуғын киши вектор.



8-сүйрет.

Кристалдағы колонка ишинде тарқалыўшы туўры түсіүши q_0 ҳәм дифракцияға ушыраған q_g толқынлары

Электронлардың дифракциясының кинематикалық теориясында түсіүши нурдың амплитудасы q_0 турақлы шама деп есапланады. Бирақ кристалдың ишинде бул толқынның атомларда (атомлық тегисликлерде) көп қайтара шашырағаны себепли бул шаманы да, дирақцияға ушыраған толқынның амплитудасы болған q_g шамасын да турақлы деп есаптай алмаймыз. Олар кристалдың теренлиги z ке байланыслы өзгереди (кемейеди, 8-сүйретті қараныз).

Әлбетте фольгадағы (изертленетуғын жуқа кристаллық денедеги) атомлар түсіүши толқында да, дифракцияға ушыраған толқынды да барлық бағыттарда шашыратады.

Бирақ биз көпшилик бағытларда шашыраған толқынлардың интерференцияның салдарынан бир бириң сөндиретуғынлығын есапқа аламыз (Френельдин ярым дәйирлик зоналарын еске түсіремиз.). Биз еки бағыттың бар екенлигин ҳәм усы бағытларда толқынлардың бир бириң күшететуғынлығын билемиз. Олардың бириңшиси туры бағытта тарқалатуғын нурлар, бул нурлар $\chi \rightarrow \chi, \chi' \rightarrow \chi'$ бағытларда фазалас (бидей фазада) тарқалады. Екиншиси Брэгг мүйешинде тарқалатуғын нурлар, яғни $\chi \rightarrow \chi', \chi' \rightarrow \chi$ нурлары бир бири менен s шамасының мәнисли байланыслы фазада болады. Соныңтан дифракцияға ушыраған толқынның қалынлығы dz болған кристалл арқалы өткендеги 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 бириңши ағза туры бағыттағы шашырауға үлес, ал екинши $q_0 z$ ке пропорционал ҳәм әдеттегидей фазалық көбейтишіге ийе ҳәм кинематикалық теорияда қолланылатуғын ағза Брэгг шашырауының қосқан үлеси болып табылады. Еки ағза да пластинканың қалынлығы dz ке пропорционал ҳәм еки ағза да і көбейтишисине ийе. Бул жағдай шашыраған толқынлардың амплитудасының пластинканың төменги бетиндеги мәнисин алғанымызды, бул жерде олардың фазасының туры түскен толқынның фазасынан 90^0 қа ажыралатуғынлығын билдиреди. (51)-теңлемедеги ξ_0 ҳәм ξ_g шамалары $f(0)$ ҳәм $f(20)$ шамаларына кери пропорционал (бул шамалар атомлық шашырау амплитудалары болып табылады). Ҳақыйкытында ξ_g шамасы экстинкциялық узынлық болып табылады. Бирақ биз ҳәзир ол шамаларды фундаменталлық физикалық тұрақтылар арқалы аңлатпаймыз. Енди туры туришті 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 ҳәм s векторының z көшери бағытындағы вектор екенлигин есапқа алып биз (51)- ҳәм (52)- тенлемелерди

$$\begin{aligned} \frac{dq_0}{dz} &= \frac{\pi i}{\xi_0} q_0 + \frac{\pi i}{\xi_g} q_g \exp 2\pi i s z, \\ \frac{dq_g}{dz} &= \frac{\pi i}{\xi_0} q_g + \frac{\pi i}{\xi_g} q_0 \exp -2\pi i s z \end{aligned} \quad (53)$$

түрине алып келемиз.

q_0 ҳәм q_g амплитудаларын бир бири менен байланыстыратуғын бул бириңши тәртипли дифференциал теңлемелер жубы динамикалық теориядағы тийкарғы теңлемелер системасы деп есапланады.

(53)-теңлемелерди құрылышында бзыбылдықтар (дефектлер) болған (құрылышы жетилспеген) кристаллар ушын жәніл түрде улғымаластырыў мүмкін. Биз бул жерде кристаллардың құрылышындағы бзыбылдықтардың атомлардың дұрыс орынларынан R аұысыўына алып келетуғынлығын еске түсіремиз (Басқа сөз бенен айтқанда кристалдағы бзыбылдықтар (структуралық дефектлер) кристалдың айрым областларының майысыўына, яғни атомлардың аұысыўына алып келеди). 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 туры өтишши ҳәм кристалда шашыраған (дифракцияға ушыраған) толқынлардың амплитудаларының қандай жоллар менен есапланатуғынлығын көрсетеди. Соның менен бирге кристалдағы дефектлердин

электронлар толқынларының дифракциясы ушын тек атомлардың өз орнынан айысыяны R менен ғана көринетүгіншілігін аңғардық.

Айқын кристаллар ушын (53)- ҳәм (54)-тәңлемлер системасын дәл шешиў ҳәзиригі ўақытлары ҳеш кандай қызыншылықты пайда етпейди. Себеби бизиң күнделіккі турмысымызда кеңиен қолланылып жүрген «Mathematica 5» сияқты программауда тиллери дифференциаллар тәңлемелерин санлы түрде шешиўде бизге оғада жақсы имканияттарды жаратып береди.

Пайдаланылған әдебиятлар дизими

1. Р.Джеймс. Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей. Перевод с английского Г.А.Гольдера и М.П.Шаскольской. Под редакцией В.И.Ивероновой. Издательство Иностранный 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. Рентгendifракционные 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 физика. 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 ҳәм айырым мәселелерди шешиў ушын қолланыў

Кирисиў

Кристаллар (металлар ямаса қатты денелер) рентгенографияның тийкарғы мәселеси рентген нурларының кристаллық денелердеги дифракциясының жәрдемінде структуралық анализдин (таллаудың) тийкарғы мәселесин шешиў болып табылады. Рентгенографиялық усыллар менен кристаллардың атомлық-кристаллық, субструктурасын анықлаў мәселеси менен рентгенструктуралық анализ (рентгendifракциялық анализ) шуғылланады. Ал структуралық анализдин физикалық тийкарды болса кристалдың, аморф денениң, сыйықтың, ҳәм заттың басқа да

конденсацияланған ҳалларындағы заттық объекттиң (атомлар менен молекулалардың) микробөлистирилийнин белгисиз болған функциясын, олардың жайласыуындағы симметрияны, кристаллық пәнжерениң параметрлерин, фазалық қурамды ҳэм соған усаған жағдайларды эксперименталлық жоллар менен анықлау болып табылады. Кристаллардағы рентген нурларының шашырауы микротарқалыудың Фурье-анализинин дүзилийне алғып келеди. Кери математикалық операция болған Фурье-синтездин жәрдеминде изленип атырған микротарқалыу функциясын табыу мүмкін.

Рентгенструктуралық анализдин жәрдеминде төмендегилерди анықлау мүмкін:

а) кристалдың атомлық-молекулалық құрылышының дәүирли системасын, оның ноқатлық ҳэм трансляциялық симметриясын, элементар күтышадағы атомлар менен молекулалардың координаталарын;

б) кристаллардағы дефектлерди - нол өлшемли – ноқатлық дефекттер ҳэм олардың концентрациясы, бир өлшемли дислокациялар (сүүрети ҳэм концентрациясы), дислокациялар әтирапындағы кернөүлер майданы дефекттер (динамикалық ҳэм статикалық), еки өлшемли дефектлер - жайласыўлар дефектлері менен кристаллық блоклар, егизлер арасындағы шегаралар, жайластырыу дефектлеринин концентрациялары), үш өлшемли дефектлерди (поликристаллық денелердеги дәнешелер арасындағы шегаралар, бул шегаралардың сыртқы механикалық тәсирлердеги жылышыўлары ҳэм басқалар);

в) аморф денелер менен сүйкіліктердеғи жақын аралықтарда орын алатуғын тәртиптер;

г) газ молекулаларының құрылышы;

д) затлардың фазалық қурамы.

Интернет тармағындағы Википедия универсаллық энциклопедиясында рентгенструктуралық анализ ҳақында төмендегидей мағлыўматтар көлтирилген:

Рентгенструктуралық анализ (рентгендифракциялық анализ) – затлардың құрылышын изертлеудин дифракциялық усылларының бири. Бул усылдың тийкарында рентген нурларының үш өлшемли кристаллық пәнжередеги дифракция құбылышы жатады.

Кристаллардағы рентген нурларының дифракциясы құбылышы Лауэ тәрепинен ашылды, бул құбылышқа теориялық тийкарды Вульф-Брегглер берди (Вульф-Брегг шәрти). Затлардың құрылышын изертлеў усылы сипатында рентгенструктуралық анализ Дебай (Peter Debye) ҳэм Шерер (Paul Scherrer) тәрепинен ислеп шығылды.

Усыл затлардың атомлық құрылышын анықлауға мүмкіншиликтен береди ҳэм ол өз ишине элементар күтышаның симметриясының көнисликтеги топарын, оның өлшемлери менен формасын, соның менен бирге кристалдың симметриясының топарын анықтайтынын.

Рентгенструктуралық анализ әпиүайылығы ҳэм салыстырмалы арзанға түсетеуынлығына байланыслы усы күнлөргө шекем затлардың құрылышын анықтайтуғын ең көп тарқалған усыл болып табылады.

Усылдың (рентгенструктуралық анализдин) түрлери:

Лауэ усылы монокристаллар ушын қолланылады. Изертленетуғын кристаллық үлги рентген нурларының үзлиksiz спектринин жицишке дәстеси менен нурландырылады, дәсте менен кристалл арасындағы бағыт өзгермейди. Дифракцияға ушыраған нурланыудың мүйешлик тарқалыуы айырым дифракциялық дақтар түрине ийе (лауэграмма).

Рентгенгониометрия (рентген нурларының жәрдеминде кристаллардың құрылышына байланыслы болған мүйешлердин мәнислерин өлшеу).

Дебай-Шеррер усылы поликристалларды ҳэм олардың араласпаларын изертлеў ушын қолланылады. Кристалға келип түсиўши монохромат рентген нурларының бағытына салыстырғанда үлгидеги кристаллардың тәртипсиз (хаотикалық) жайласыўлары дифракцияға ушыраған нурларды көшери үлгиге келип түсиўши рентген нурлары дәстеси болған каоссиаллық конуслардың семействосына айландырады. Олардың рентгенограмалардағы (фотопленкадағы ямаса дебаеграммадағы) сүүрети концентрлик

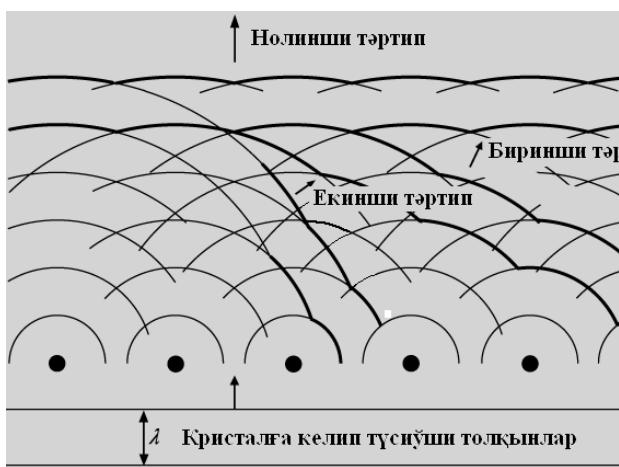
сақыйналар түринде пайда болып, олардың интенсивликтери изертленип атырған заттың курамы ҳақында мағлыұматларды береди.

Кристаллар рентгенографиясының анализдин физикалық тийкарлары

1-§. Рентгенструктуралық анализ

Рентгеноструктуралық анализ затлардың атомлық-молекулалық құрылышын изертлеү усылы болып табылады. Бул усылда кристаллық денелердин атомлық-кристаллық құрылышын изертлеү тийкарынан рентген нурларының усындағы кристалларда дифракцияға ушырауы пайдаланылады. Солай етип рентгенструктуралық анализ кристаллық, аморф, сұйық ҳәм газ тәрэзли денелердеги рентген толқынларының дифракциясын пайдаланады екен.

Рентген нурлары 1995-жылы немис физиги Рентген (немисше Wilhelm Conrad Röntgen) тәрепинен ашылды. Бул нурлардың тәбияты белгисиз болғанлықтан оларды дәслеп X нурлары деп атады (рауажланған шет ел илимий әдебиятында бул термин ҳәзирге шекем пайдаланылады). Рентген нурларының электромагнит толқынларының бир түри екенligин тексерип көриў ушын M. Laue (von Laue M.) 1912-жылы өзиниң қарауында ислеўши илимий хызыметкерлер Фридрих (Friedrich W.) ҳәм Книппингке (Knipping P.) сол нурларды кристаллар арқалы өткериپ, алынған нәтийжелердин қандай болатуғының тексерип көриўди усынды [1]. Тәжирийбе қүтилгендей нәтийжелерди берди. Бул тәжирийбениң тийкарында әдеттеги оптика курсынан белгилі болған дифракция құбылышы менен аналогия жатқан еди. Егер жақтылық дәстеси бир бириңен жақтылық толқынларының узынлығындағы қашықтықтарда жайласқан саңлақлар арқалы өтсе экранда жақтылық ҳәм қараңғы областлардың избе-излигинен ибарат болған интерференциялық (биз «интерференциялық» ҳәм «дифракциялық» сөздерин бир мәнисте қолланамыз) сүүрет алынады. Рентген нурлары жағдайында олардың толқын узынлықтары кристалдағы атомлар арасындағы қашықтықтар менен бирдей. Сонынан кристаллық денелерге рентген толқынлары келип түскенде фотопластинкада дифракциялық сүүрет пайда болады.

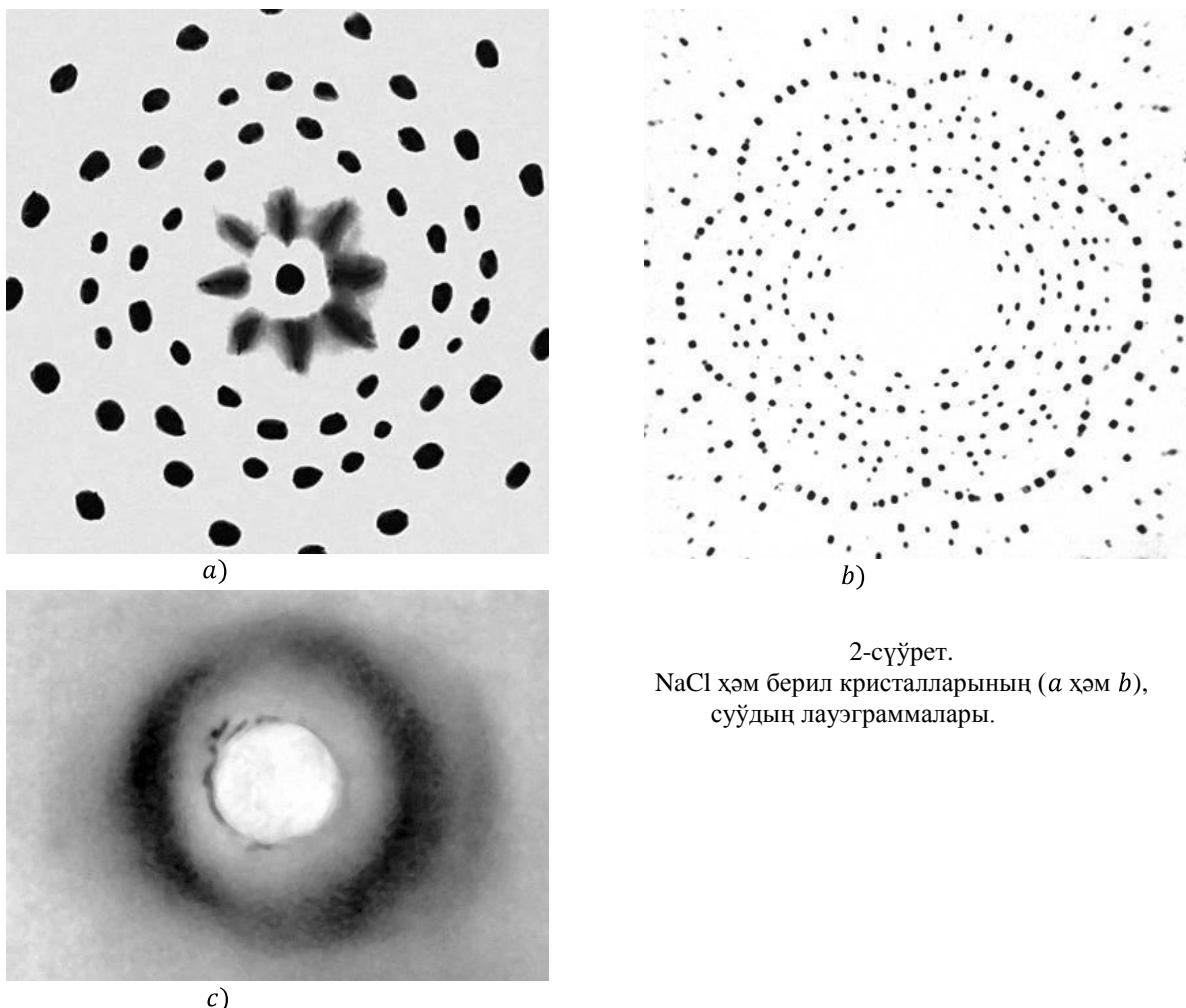


1-сүүрет.

Рентген нурларының кристаллық денелердеги дифракциясы құбылышының мәнисин түсіндіриўге арналған схема.

Дифракция құбылышының физикалық мәниси 1-сүүретте берилген. Бул жерде шашыратыўшы орайлар қатарына келип түсиўши тегис толқынлар сәүлеленген. Келип түсиўши толқынлардың тәсиринде усындағы ҳәр бир орай өзинен сфералық толқынларды нурландырады, бул нурлар бир бири менен интерференцияланады, нәтийжеде тек келип түсиўши толқынның бағытында емес, ал басқа бағыттарда да тарқалатуғын толқын фронтлары пайда болады. Laue дифракциясы (лауэграммма) деп аталатуғын дифракциялық

сүйрет жуқа кристаллық пластинка арқалы рентген нурлары өткенде пайда болады. Лауэграммаларға мысаллар 2-сүйретте берилген.



2-сүйрет.
NaCl ҳәм берил кристалларының (а һәм б),
суýдың 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 кеңисликтеги топары P6/mcc (P6/m 2/c 2/c), кристаллық пәнжерениң турақтылары $a = 9.21\text{\AA}$ ҳәм $c = 9.19\text{\AA}$] лауэграммада алтыншы тәртипли симметрия көшери анық көринеди. Усы тийкарда рентгендифракциялық сүйрет кристалдың құрылышы ҳақында әхмийетли мағлыўматларға иие болады деп айта аламыз. Бул құбылыс 1912-1913 жыллары әкели-балалы У. Брэгг ҳәм У. Брэглер (баласы William Lawrence Bragg, әкеси William Henry Bragg) тәрепинен муқыятлы түрде изертленди [2]. Усының нәтийжесинде олар кристаллардың рентгенструктуралық анализинин баҳалы эксперименталлық методын ислеп шықты. Олардың жұмыслары ҳәзирги заман рентгенструктуралық анализинин раýажланыўының басламасы болып табылады. Компьютерлер менен биргеликтө ислейтуғын жана рентген әсбап-ұсқенелери ушын қурамалы кристаллардағы атомлардың координаталарын анықлау жұмыслары әдеттеги жұмысларға айланды.

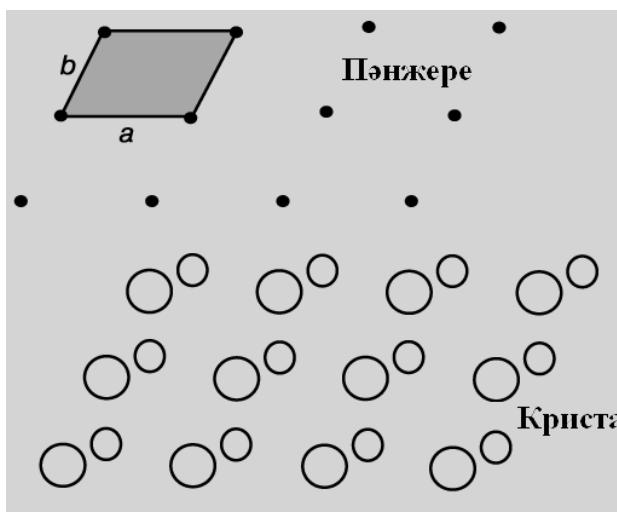
Рентгенструктуралық анализдин жәрдеминде кристаллардың құрылышы ҳақында қандай информацияларды алыў мүмкін деген сораў бериледи. Рентген нурлары электромагнит нурлары болып, бул нурлардың электр майданлары денелердеги атомлар ҳәм электронлар менен тәсирлесиўди. Электронлардың массалары атомлардың массаларынан әдеўир киши болғанлықтан рентген нурлары электронларда эффективли түрде шашырайды. Солай етеп рентгенограмма электронлардың тарқалыўы ҳақында мағлыўматларды береди. Нурланыў дифракцияға ушыраған бағытлары билип кристалдың

симметриясының типин ямаса кристаллық классы, соның менен бирге кристаллық пәнжере турақтыларының мәнислерин өлшеу мүмкін. Дифракциялық максимумлардың салыстырмалы интенсивликтери бойынша элементар кутышалардағы атомлардың координаталарын (ийелеген орынларын) анықлау мүмкін.

Өзиниң физикалық мағанасы бойынша дифракциялық сұйерет кристалдағы электронлардың тарқалығының математикалық жақтан қайтадан түрлендирилген сұйерети, яғни фурье-образы болып табылады. Демек дифракциялық сұйерет атомлар арасындағы химиялық байланыслардың қурылышы ҳақында да мағлыұматларға ийе деген сез. Соның менен бирге бир дифракциялық максимумдағы интенсивликтің тарқалығы кристаллитлердің өлшемлери, пәнжерениң дефектлері, механикалық кернеўлер хәм кристаллық қурылыштың басқа да өзгешеликтери ҳақында мағлыұматларға ийе болады.

2-§. Кристаллық қурылыш ҳәм дифракция

Кристал бөлекшелердин үш өлшемли дискрет дәйирили көлемлик системасы болып табылады. Макроскопиялық жақтан бул жағдай кристалдың бир теклилігінде, олардың қаптал тәреплери арасындағы мүйешлердин усы кристал ушын тән екенliginde, соның менен бирге көпшилик жағдайларда кристаллық денелердің белгили бир тегислик бойынша сынатуғынлығында көринеди. Микроскопиялық жақтан кристалды кристаллық пәнжере сыпатында тәриплей аламыз. Кристаллық пәнжереде нокатлар (кристалды пайда етиуші бөлекшелердин салмақ орайлары) системасы дәйирили түрде қайталанады. Бул дәйирилиліккомпланар емес үш көшерли трансляция ҳәм олар арасындағы үш мүйешпенен характерленеди. Кристал менен кристаллық пәнжере схема түринде 3-сұйерете келтирилген.

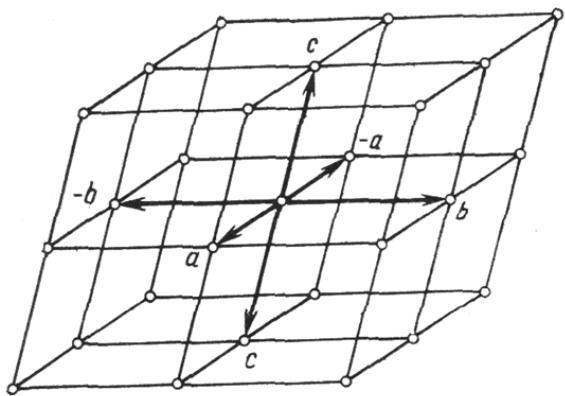


3-сұйерет.

Кристал (төменде) ҳәм кристаллық пәнжере (жокарыда).

Кристал айқын атомлардан ямаса молекулалардан, ал пәнжере болса нокатлардан (пәнжере түйинлеринен) турады.

Кристаллық пәнжереде алынған трансляциялық қутыша ҳәм трансляциялар дәстеси 4-сұйерете келтирилген.

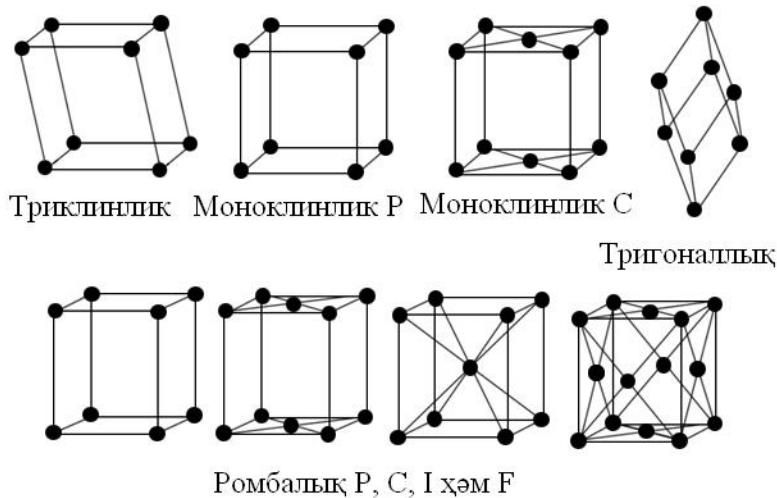


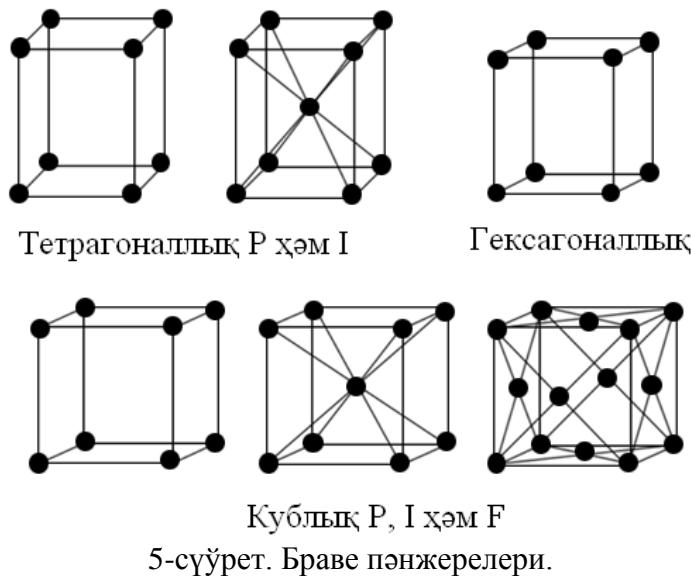
4-сүйрет.
Трансляциялық қутыша ҳәм трансляциялар
дәстеси.

Шамасы бойынша бир бирине тең ҳәм бир бирине тең емес трансляцияларды, бир бирине тең ҳәм тең емес олар арасындағы мүйешлерди айырып барлық кристаллық пәнжерелерди жети сингонияға төмөндегише бөлиү мүмкін:

Триклиниллик	$a \neq b \neq c, a \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma, \alpha \neq \gamma$
Моноклиниллик	$a \neq b \neq c, a \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$
Ромбалық	$a \neq b \neq c, a \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Тригоналлық	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
Татрагоналлық	$a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Гексагоналлық	$a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
Кублық	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

Егер трансляциялық симметрияны есапқа алатуғын болсақ, онда 14 трансляциялық топар пайда болады ҳәм олардың ҳәр бири Браве пәнжересин пайда етеди (5-сүйрет)[4].





Браве пәнжерелери бир ноқатты трансляциялық қайталау жолы менен алынатуғын ноқатлардың шексиз системасы болып табылады. Кристалдың қәлеген қурылышы Бравениң 14 пәнжересиниң бириниң жәрдеминде көрсетилийи мүмкін. Кристаллық денелер киши тезликлер менен пайда болғанда ҳәм өскенде ири монокристаллар пайда болады. Бундай монокристаллар сыйпатында минералларды көлтириүге болады. Кристаллар үлкенирек тезликлер менен өскенде поликристаллық конгломерат пайда болады. Бундай поликристалларға металлар менен құймалар киреди. Кристалларға тән болған узақтан тәсирлесіү (узақтан тәртиплесіү) аморф денелер менен сүйықтықтарға өткенде жоғалады. Бундай денелерде (материалдарда) атомлар менен молекулалардың жайласыўында тез жақыннан тәртиплесіү орын алады.

Браве пәнжересиндеи элементар қутышалардың радиусы векторын былайынша жазыуымыз мүмкін:

$$R = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3.$$

Бул формулада a_1 , a_2 ҳәм a_3 арқалы кристаллық пәнжередеги трансляциялыр, ал n_1 , n_2 ҳәм n_3 арқалы пүтин санлар белгиленген. Бул пүтин санлардың мәниси ушын шек қойылмағын. Сонықтан биз элементар қутышалардың санының шексиз көп болатуғынлығын атап өтемиз.

Рентгенструктуралық анализдин артықмашлығы оның жоқары сайлап алышылығында. Егер монохромат рентген нурларының дәстеси монокристалға қәлеген бағытта түсетеуден болса, онда тап сол бағыттағы кристалдан шығыушы дәстени де бақлауға болады. Бул дәсте дифракцияға ушыраған дәсте емес. Дифракцияға ушыраған дәстелер кристаллографиялық көшерлерге ҳәм келип түсіүши рентген нурлары дәстесиниң бағытына салыстырғанда дискрет мәнисеги белгили бир мүйешлерге бурылған болады. Бул шәрт кристаллар рентгенографиясындағы айланыў усылының тийкарында жатады. Бул усылда кристал белгили бир көшердин дөгерегинде айланыста болады ҳәм дифракция қубылышы бақланатуғын бағытлар дәл анықланады.

Басқа рентгенографиялық экспериментлерде унталған кристаллар ямаса поликристаллар пайдаланылады. Бул усыл Дебай-Шерер усылы деп аталады (бир катар жағдайларда Дебай усылы деп те аталады). Бундай экспериментлерде айырым кристаллиттердин ориентацияларының үзлиksiz спектрине иие боламыз. Бирақ бақланыўы мүмкін болған интенсивли дифракциялық дәстелерди белгили бағытларға иие кристаллиттер береди. Унталған кристаллар (поликристаллар) усылы ири монокристалларды өсириүди талап етпейди ҳәм сонықтан Лауэ ҳәм айланыў усылларының алдында гейпара артықмаштықтарға иие болады. Лауэ усылында монокристал ҳәм рентген нурларының үзлиksiz спектри қолланылады. Усының

салдарынан кристалдың өзи дифракциялық сүүреттиң пайда болыуы ушын зәрүрли болған толқын узынлықтарын сайлап алады.

Солай етип рентгенструктуралық анализдин тийкарғы формуласы Вульф-Брэгг теңлемеси болып табылады [5]:

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

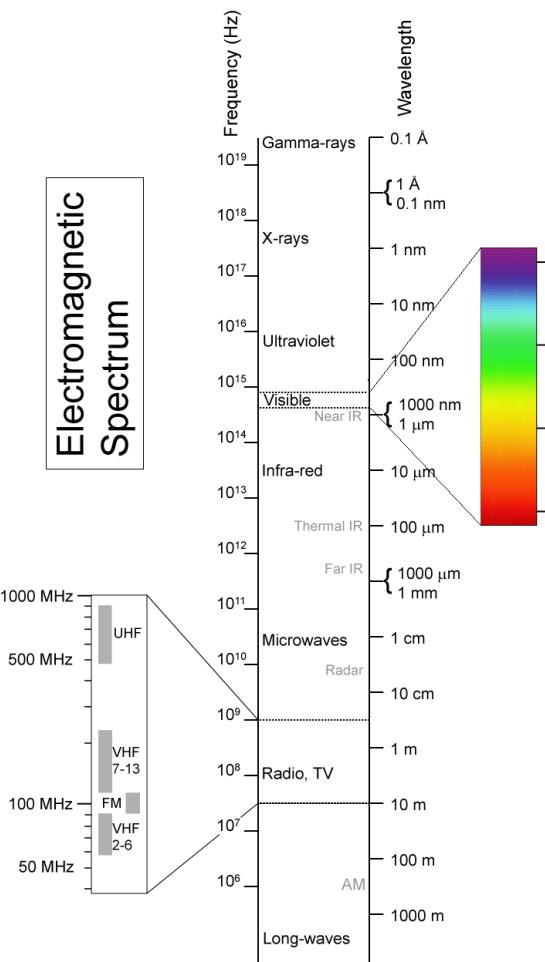
Бул формулада d арқалы кристаллографиялық тегисликлер арасындағы қашықлық, θ арқалы дифракциялық мүйеш, ал λ арқалы рентген толқынлары ушын толқын узынлығы белгиленген. Рентгенографиялық усылларда сол үш физикалық шамалардың биреүи турақты етип алынады.

1-кесте.

Турақты шама	Өзгермели шамалар	Рентгенографиялық усыл
θ	d ҳәм λ (d шамасының ҳар бир мәнисине анық λ сәйкес келеди)	Лауэ усылы
d	θ ҳәм λ	Дебай-Шерер усылы.
λ	θ ҳәм d	Айланыў (тербелий) усылы.

Полихромат рентген нурланыўы Лауэ усылында дифракциялық сүүретти береди (λ шамасы өзгермели). Дебай-Шерер усылында үзлиksiz полихромат нурланыў рентгенограммада фон пайда етеди, ал айланыў (тербелий) усылында болса θ дифракциялық мүйешиниң өзгериў бағытында рефлекслерди созады. Соңықтан Дебай-Шерер ҳәм айланыў (тербелий) усылларында монохромат рентген нурларын пайдаланыў мақсетке сәйкес келеди.

Рентгенструктуралық анализ қатты денелерди атомлар қәддинде үйрениўдің ески усылларының бири болса да (рентгенструктуралық анализдин пайда болғанына дерлик 100 жыл болғанлығын еске алып өтемиз) оның усыллары рајағланып ҳәм жетилисип атыр. Мысалы ҳәзирги ўақытлары рентгенструктуралық анализ рентген нурларының қуýатлы дереклериниң бири болған синхротронлық нурланыўды пайдаланбақта. Синхротрон болса электронларды жүдә үлкен тезликлерге шекем тезлетиўши тезлеткиш болып табылады. Бундай үскене әдетте ядролық физикада колланылады. Электронлар ультрафиолеттен рентген нурларына шекемги диапазонда электромагнит нурланыў пайда етеди. Бул қуýатлы (үлкен интенсивликке ииे) нурланыўдың жәрдеминде қатты денелердин курылышы бойынша көп санлы мағлыўматларды алыў мүмкін [6].



6-сүрет.

Рентген нурларының электромагнит толқынлары спектринде ийелеген орны (Internet тармағындағы Википедия универсаллық энциклопедиясынан алынған сүрет).

Рентген нурларының электромагнит толқынлар спектриндеги ийелеген орны 6-сүретте көлтирилген.

3-§. Рентген нурларының затлар менен тәсирлесіүи

Затлар арқалы өткенде рентген нурларының бир бөлими қандай да бир дәрежеде затларда жутылады. Екинши бөлими затлар арқалы өтеди. Жутылған рентген нурларының мұғдары затлардың қалыңлығына, рентген нурларының толқын узынлығына хәм затлардың жутыўшылық қәсийетлерине байланыслы. Рентген нурлары затлар арқалы өткенде төмендегидей еки процесске байланыслы өзиниң энергиясын жоғалтады (хәлсирейди ямаса интенсивлиги кемейеди):

1. Ҳақыйқый жутылыў. Бундай жағдайда рентген нурлары фотонларының энергиялары энергияның басқа түрлерине айланады;

2. Рентген нурларының затлардағы шашырауы. Бундай жағдайда затқа келип түсиўши рентген нурларының тарқалыў бағыты өзгереди.

Нурларды жутыўшы затлардағы бир текли нурлардың ҳәлсиреүин санлы түрде анықтайтуғыны нызамды былайынша көлтирип шығарыў мүмкін: бир текли заттың бирдей қалыңлықтарында нурланыўдың бирдей мұғдардағы энергиялары жутылады. Егер затқа келип түсиўши нурлардың интенсивлигин I_0 арқалы белгилесек, ал қалыңлығы t болған пластиинка (қалыңдық) арқалы өткен нурдың интенсивлигин I_t арқалы 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 жутыўшы денениң физикалық қәсийетлеринен ғәрэзли болған пропорционаллық коэффициент белгиленген. Оның санлық мәниси $\mu = \ln \frac{I_0}{I_{t=1}}$ шамасына (нурлар бир бирлик қалыңдық арқалы өткенде интенсивлигинин салыстырмалы өзгерисинин логарифмине) тең. Рентгенографияда μ коэффициентин ҳәлсиреүдин нурларды жутыўдың толық сзықтық коэффициенти ямаса заттың массалық жутыў коэффициенти деп атайды [7]. Сзықтық жутылыў коэффициенти μ ρ шамасына тең (р арқалы заттың тығызлығы белгиленген).

Айырым затлардың массалық жутылыў коэффицентлеринин мәнислери төмендеги кестеде берилген.

Кесте. Айырым массалық жутылыў коэффицентлеринин мәнислери $\frac{\mu}{\rho}$

(Комптон ҳәм Аллисонлар бойынша [8])

Элемент	Толқын узынлығы, Å						
	0,200	0,498	0,632 <i>Mo K_β</i>	0,711 <i>Mo K_α</i>	1,542 <i>Cu K_α</i>	1,948 <i>Fe K_α</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 тәсирлесиүин, кристаллық денелердеги олардың дифракциясының орын алатуғынлығын айтып өттік. Рентген нурларының кристаллық денелердеги дифракциясының тийкарында электромагнит толқынларының зарядланған бөлекшелердеги шашыраўы құбылысы жатады. Электронлардың массасының атом ядролары массасына салыстырғанда онлаған мың есе киши болғанлықтан рентген нурлары тийкарынан атомлардағы электронларда шашырайды. Бундай шашыраўларда атомлардағы электронлар еркин бөлекшелер сыпатында қатнасады. Усы жағдайларға байланыслы рентген нурлары қатты денелердин атомлық-кристаллық курылышын изертлеудеги ең тийкарғы изертлеў қуралы болып табылады.

Рентген нурларының толқын узынлықтарының атомлардың сзықтық өлшемлери менен барабар болғанлықтан бул нурлардың кристаллардағы дифракциясы орын алады. Элбетте кристаллық денелерде электронлардың да, нейтронлардың да дифракцияға ушыраўы мүмкін. Бул құбылысларға тийкарланған затлардың атомлық-кристаллық курылышын изертлеўши усылларды сәйкес электронография менен электронлық микроскопия ҳәм нейтронография деп атайды. Бириңи жағдайда затлардың курылышы электронлық микроскоптың жәрдемінде (электронлық микроскопта электронограммалар да, электронлық микроскопиялық сүйретлер де түсириледи) изертлениледи. Электронлар зарядланған бөлекшелер болғанлықтан электромагнит майданларында қозғалыс бағытын өзгертерди, яғни электрон дәстелери сынады. Ал рентген толқынлары болса фотонлардың ағымы сыпатында жүдә киши сыныў көрсеткишине ийе болады. Соныңтан кристаллық денелердин сүйретлерин онлаған-жүзлеген есе үлкейтетуғын рентген микроскопы болмайды. Бирақ бул жағдай рентгенографияның қатты денелер физикасында ҳәм физикалық материалтаныўдағы тутқан орнының әхмийетин төменлетпейди.

Рентгенструктуралық анализ ең кең таркалған ҳәм терең изертленген атомлық-кристаллық курылышты изертлеў усылларының бири болып табылады.

Соңғы жигирма-отыз жыл ишинде рентгеноструктуралық анализге персоналлық компьютерлердин терең түрде кирип келийі нызамы процесс болып табылады. Ҳәзирги үақытлары компьютерлердин жәрдеминде рентгendifракциялық сұйретлер расшировкаланады, көплеген рентгendifракциялық экспериментлер компьютерлердин жәрдеминде басқарылады (мысалы автомат дифрактометрлерде), есаплаў жолы менен теориялық рентгendifракциялық сұйретлер, иймекликлер, рефлекслер алынады. Бул жағдайлардың барлығы да компьютерлерди рентгendifракциялық экспериментлерде кең түрде қолланыў мәселесин бизин алдымызға қояды. Сонықтан бул питкеріў қәнигелик жумысы бириňши гезекте ҳәзирги заман рентгенографиясының тийкарғы усылларының (Лауэ, айланыў ямаса тербелиў, унталған кристаллар ямаса поликристаллар усылларының физикалық тийкарларын терең түрде үйрениў, ҳәзирги заман математикалық программалаў тиллери болған Delphi 7.0 ҳәм Mathematica 7.0 тиллериниң жәрдеминде рентгенструктуралық анализдин әпиўайы мәселелерди шешиў, компьютерлик программа болған PowderCell 2.4 программысын дәслеп атомлық-кристаллық курылышы белгили болған кристаллар ушын сынап көриў ҳәм алынған нәтийжелер тийкарында $Gd_xBi_{1-x}FeO_3$ бирикпелеринин $x = 0,05; 0,1; 0,15; 0,2$ болған a ҳәм c шамаларының мәнислерин жоқары дәллікте анықлаў мақсетинде орынланды.

Кристалларды изертлеўде қолланылатуғын рентгенографиялық усыллар ҳәм компьютерлик программалар

5-§. Рентгенструктуралық анализ усыллары

Рентгенструктуралық анализде тийкарынан тәмендеги усыллар қолланылады:

1. **Лауэ усылы.** Бул усылда полихромат рентген нурлары дәстеси қозғалмайтуғын монокристал үлгиге келип түседи. Үлгинин өлшемлери әдетте 1-2 мм дең үлкен болмаўы керек. Дифракциялық сұйрет қозғалмайтуғын фотопленкада түсириледи. Лауэ камерасы 7-а сұйретте келтирилген.

2. **Айланыў (тербелиў) усылы.** Монохромат рентген нурлары дәстеси базы бир кристаллографиялық көшер дөгерегинде айланыушы (ямаса тербелиўши) кристалға келип түседи. Сол кристаллографиялық бағыт камераның айланыў (тербелиў) бағытына дәл параллель етип алынады. Дифракциялық сұйрет цилиндр тәризли қозғалмайтуғын фотопленкада алынады. Айырым жағдайларда фотопленка үлгі менен синхронлы рәүиште айланыс жасайды; айланыў усылының бундай түрин қатламлық сыйықтарды тусирип алыў усылы деп атайды (7-b сұйрет).

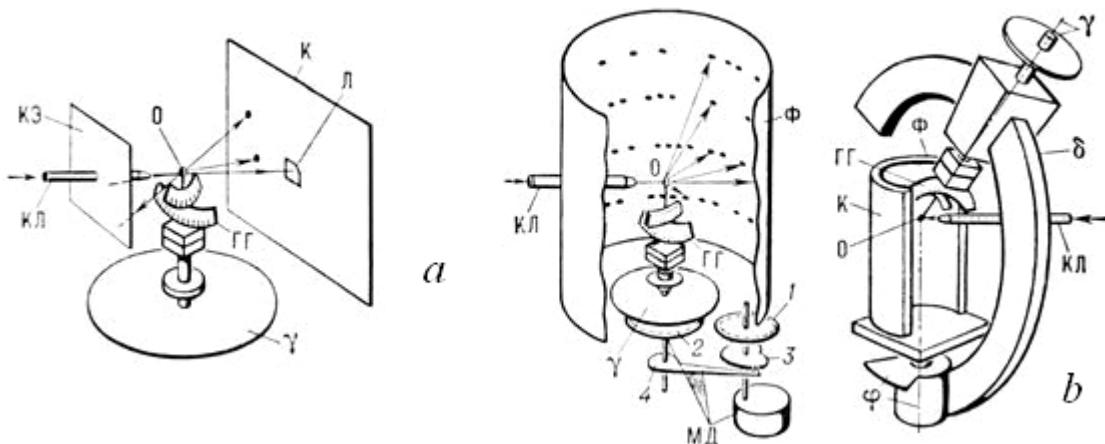
Айланыў усылында монохромат рентген нурлары емес, ал әдетте полихромат рентген нурлары пайдаланылады (себеби интенсивли монохромат рентген нурларын алыў аңсат емес). Фотопленкадағы дифракциялық сұйрет болса тийкарынан характеристикалық нурланыудың есабынан қәлиплеседи. Ал үзлиksiz спектр болса рентген рефлекслеринин әтирапында белгили бир бағытлардағы фонды пайда етеди.

3. **Унталған кристаллар (ямаса поликристаллар) усылы (Дебай-Шерер усылы).** Бул усылда да монохромат рентген нурларын пайдаланыў керек. Изертленетуғын үлгі поликристал ямаса унталған кристал болып табылады. Унталған кристалды шийше ийнеге рентген нурларын кем шашырататуғын желимнин жәрдеминде жабыстырады.

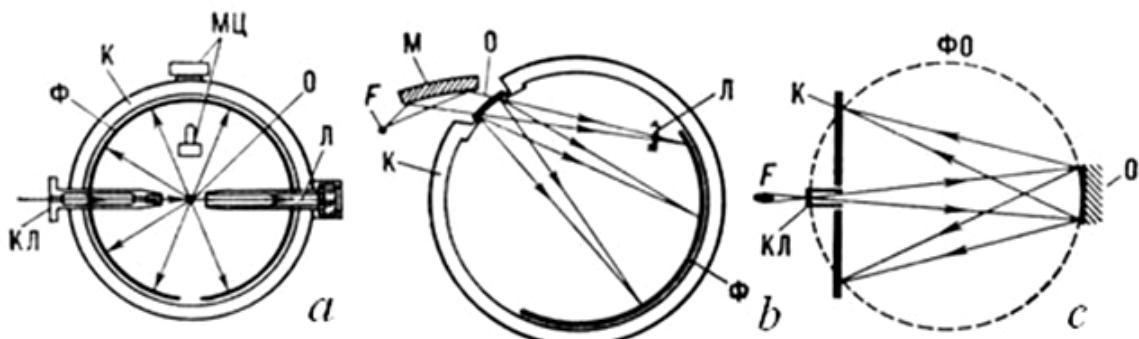
Лауэ усылы. Бул усыл кристаллардың атомлық-кристаллық курылышын изертлеўдин ең басланғыш этапында қолланылады. Лауэ усылының жәрдеминде кристаллардың сингониясы ҳәм Лауэ классы анықланады. Фридель нызамы (Friedel and Bijvoet mates, қараңыз http://en.wikipedia.org/wiki/Laue_diffraction#Friedel_and_Bijvoet_mates) бойынша

лауэграмма (барлық рентгенограмма) жәрдеминде кристаллардағы симметрия орайының жоқ екенлигин анықлауға болмайды (барлық рентгенограммаларда симметрия орайы орын алды). Соныңтан 32 ноқаттық топарға симметрия орайын қосыў олардың санын 11 ге шекем кемейтеди. Соныңтан 11 Лауэ классы бар деп есаплайды.

Лауэ усылы монокристалларды, полидомени монокристалларды хәм ири кристаллитликүгилерди изертлеў ушын қолланылады. Жоқарыда айтылып өтилгениндей бул усылда қозғалмайтуғын кристаллық үлгиге диаметри 1-2 мм болған үзликсиз спектрге ийе полихромат рентген нұры келип түседи.



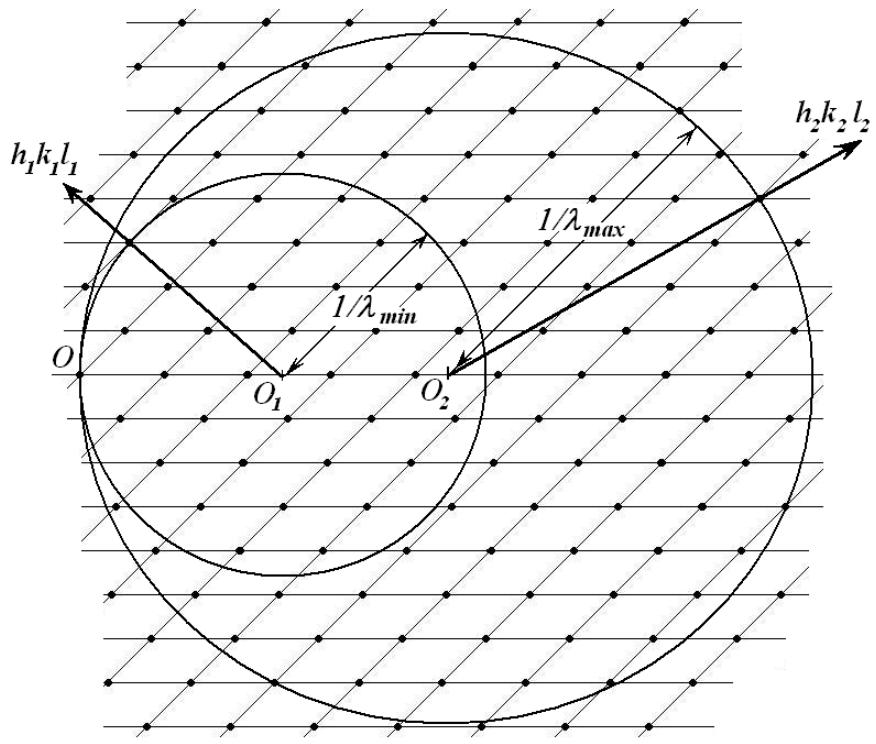
7-сүйрет. Монокристалларды изертлеў ушын арналған рентген камераларының тийкарғы схемалары: *a* — Лауэ усылы менен қозғалмайтуғын кристалларды изертлеў камерасы; *b* — айланыў (тербелий) камерасы. Фотопленкада қатламлық сзыықлардың бойында жайласқан дифракциялық максимумлар көринип тур; егер толық айланыұды белгили бир мүйешлик интервалдағы тербелий менен алмастырсақ (айланыў усылында изертленетуғын кристал камера көшери дөгерегинде айланыста болады хәм экспозиция барысында бир неше рет айланып шығады, ал тербелий усылында кристал экспозиция барысында камера көшери дөгерегинде белгили бир мүйешлик интервалда ғана алдыға хәм кейинге бир неше рет бурылады), онда тербелий интервалының мәнисине байланыслы қатламлық сзыықлардағы рефлекслер саны кемейеди. Үлгинин айланыұы 1- ҳәм 2- тислердин жәрдеминде әмелге асырылады, тербелис болса 3 пенен 4-рычаг жәрдеминде жүзеге келеди. *c* — элементар қутышаның формаларын хәм өлшемлерин анықлау камерасы. О — үлгі; ГГ — үлгі орналастыратуғын гониометрик дүзилис; γ — лимб ҳәм үлгі орналастыратуғын гониометрик дүзилистиң бурылыў көшери; КЛ — коллиматор; К болса Ф фотопленкасы бар кассета; КЭ арқалы эпиграмма түсириў ушын арналған фотокассета көрсетилген (кери бағытта сүйретке алыў); МД арқалы үлгини айланыратуғын ямаса тербелетуғын механизм көрсетилген.; φ — лимб ҳәм үлгинин тербелис көшери; δ — гониометрик дүзилистиң көшерин доға түриндеги бағытлағыш.



8-сүйрет. Поликристалларды (ямаса унталған кристалларды) изертлеў ушын арналған рентген камераларының тийкарғы схемалары: *a* — Дебай камерасы; *b* — иймейтилген кристалл-монохроматорға ииे фокуслаушы камера, бул камера изертленетуғын үлги арқалы етишши нурларда, яғни киши дифракциялық мүйешлерде ислейди; *c* — кери бағытта (улкен дифракциялық мүйешлер) тегис кассетада сүйрет алатуғын фокуслаушы камера. Стрелкалар жәрдеминде үлгиге тууры келип түссетуғын ҳәм дифракцияға ушыраған нурлардың бағытлары көрсетилген. О — үлги; *F* — рентген трубкасының фокусы; *M* — кристалл-монохроматор; *K* — фотопленкасы бар кассета; *L* — пайдаланылмаған рентген нурын услап қалышы; *ФО* — фокусланыў шеңбери (дифракциялық максимумлар жайласатуғын шеңбер); *КЛ* — коллиматор; *МЦ* — үлгини орайға алып келиўге жәрдем беретуғын механизм.

Рентген трубкасынан шықкан ең киши толқын узынлығы трубкадағы анод пенен катод арасына түсken кернеўдин мәнисинен ғәрэзли. Ҳақыйқатында да $eU = h\nu = \hbar\omega = 2\pi\hbar\frac{c}{\lambda}$. Бул формулада *e* арқалы электронның заряды, *U* арқалы анодтың кернеўдин мәниси, *h* арқалы Планк турақтысы ($h = 2\pi\hbar$), *v* арқалы рентген толқынының жийилиги, ω арқалы толқынның цикллик жийилиги, сарқалы жақтылықтың вакуумдеги тезлиги, ал λ арқалы рентген толқынның толқын узынлығы белгиленген. Буннан λ менен *U* арасындағы байланысты ансат табамыз: $\lambda = \frac{2\pi\hbar c}{eU}$. Егер биз анодтың кернеўди киловольтлерде беретуғын, ал толқын узынлығын ангстрөмдерде есаптайтуғын болсақ, онда кеңнен мәлім болған $\lambda_{min} = \frac{12,3}{U}$ формуласына ииे боламыз. Бундай жағдайда анод кернеўиниң мәниси 36 киловольт болғанда (мыс аноны бар рентген трубкасында усындаі кернеўде ислеў усынылады) $\lambda_{min} = 0,344 \text{ \AA}$ шамасына иие боламыз. Дифракциялық сүйретти пайда етиүге қатнасадатуғын рентген толқынның максималлық узынлығын табыў ушын қәдди фонның қәдінен кеминде 5-10 % жоқары болған толқынның узынлығын аламыз. Мыс аноны (антикатоды) ушын бул толқынның узынлығы шама менен 3 ангстрөмнен үлкен емес. Усыған байланыслы мыс анонда пайда болған (қозған) үзликсиз рентген спектринде лауэграммаларды пайда етиў ушын узынлығы шама менен 0,3 ангстрөмнен 3 ангстрөмге шекемги узынлықтағы рентген толқынлары қатнасады деп есаптаймыз. $\lambda_{max} - \lambda_{min}$ 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-сүйретте келтирилген.

Қызығы соннан ибарат, лауэграммада пайда болған рефлекслердин саны $\lambda_{max} - \lambda_{min}$ айырмасынан ғәрэзли. Усы ғәрэзиликтийкынластырыў ушын компьютердин жәрдеминде Delphi программалық тилинде теориялық лауэграммалар сериясы дүзилди. 10-асүйретте $\lambda_{min} = 0,36 \text{ \AA}$ ҳәм $\lambda_{max} = 3 \text{ \AA}$. 10- *b* сүйретте болса $\lambda_{min} = 0,036 \text{ \AA}$ ҳәм $\lambda_{max} = 30 \text{ \AA}$. Бул сүйретлерде $\lambda_{max} - \lambda_{min}$ айырмасының лауэграммалардың рефлекслериниң пайда болыўына қандай тәсирин тийгизетуғынлығы анық көринип тур.

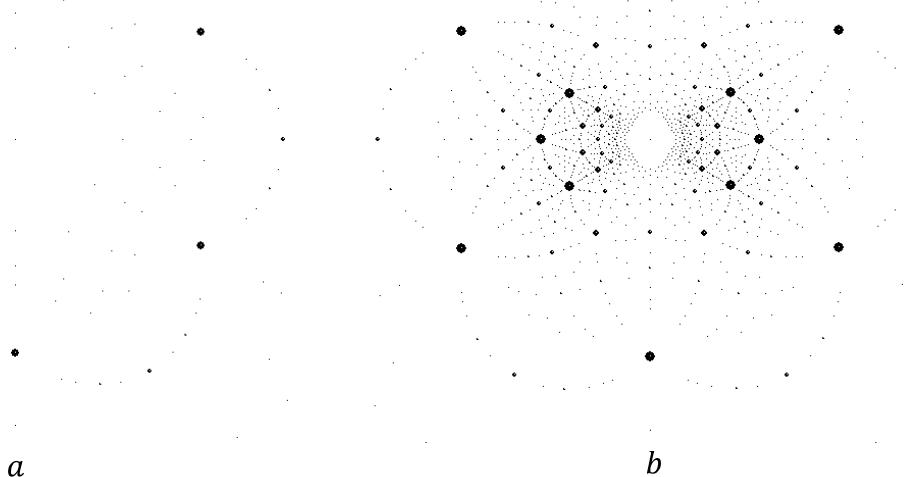


9-сүйрет.

Лауэграмманың пайда болыўын сәўлелендертуғын схема. Фотопленкадағы дифракциялық дақларды радиуслары $1/\lambda_{\min}$ жәм $1/\lambda_{\max}$ болған Эвальд сфералары арасында жайласқан кери пәнжерениң түйинлери береди. Вульф-Брэгг шәртининде орынланағы ушын кери пәнжерениң түйининиң Эвальд сферасының бети менен кесилисійүй керек. Соныңтан ҳәр бир түйин ушын белгилі бир радиусқа ие (яғни белгилі бир тоқын узынлығына сәйкес келиўши) Эвальд сферасы сәйкес келеди. Демек ҳәм бир d (кристаллографиялық тегисликлер арасындағы кашыктық) өзине сәйкес толқын узынлығын сайлап алады деген сөз (1-кестени қараңыз). Соның менен бирге индекслері hkl , $2h2k2l$, $3h3k3l$, ... болған бир түйинлер туұрысының бойынша жайласқан түйинлер ушын дифракциялық мүйеш θ ның мәнислері бирдей болады ҳәм олардың барлығы да фотопленканың бир нокатында дифракциялық дақ пайда етеди. Соныңтан лауэграммалардағы рентген рефлекслері «реңли» болыўы керек (яғни бир рефлексти пайда етиў ушын ҳәрқайылды узынлықтағы толқынлар қатнасады).

Лауэграммалар түсириў ушын Лауэ камерасы (РКСО камерасы) пайдаланылады. РКСО камерасының фотосүйрети 7-сүйретте көлтирилген.

Айланыў (тербелий) усылы. Бул усыл кристаллардың атомлық-кристаллық қурылышын анықлаудағы тийкарғы усыллардың бири болып табылады. Айланыў (тербелий) усылның жәрдеминде элементар қутышаның өлшемлерин, бир қутышаға сәйкес келиўши атомлардың ямаса молекулалардың санын, рентген нурларының өший нызамларын анықладап, кристаллардың симметриясының кеңисликтеги топарын анықлауға шекемги мәселелер шешиледи. Соның менен бир қатарда бул усылдың жәрдеминде кристаллардағы структуралық доменлердин қурылышы, структуралық доменлер арасындағы ориентациялық қатнаслар, қатты денелердеги фазалық өтиўлерди изертлеў мүмкин [9-12].



10-сүйрет. Лауэграммадағы рефлекслер санының ҳәм олардың интенсивилигиниң $\lambda_{max} - \lambda_{min}$ айырмасынан ғәрзели екенлигин иллюстрациялаушы есаптау жолы менен алынған сүйретлер. *a* сүйретте $\lambda_{min} = 0,36 \text{ \AA}$ ҳәм $\lambda_{max} = 3 \text{ \AA}$. *b* сүйретте $\lambda_{min} = 0,036 \text{ \AA}$ ҳәм $\lambda_{max} = 30 \text{ \AA}$. Оң тәрептеги

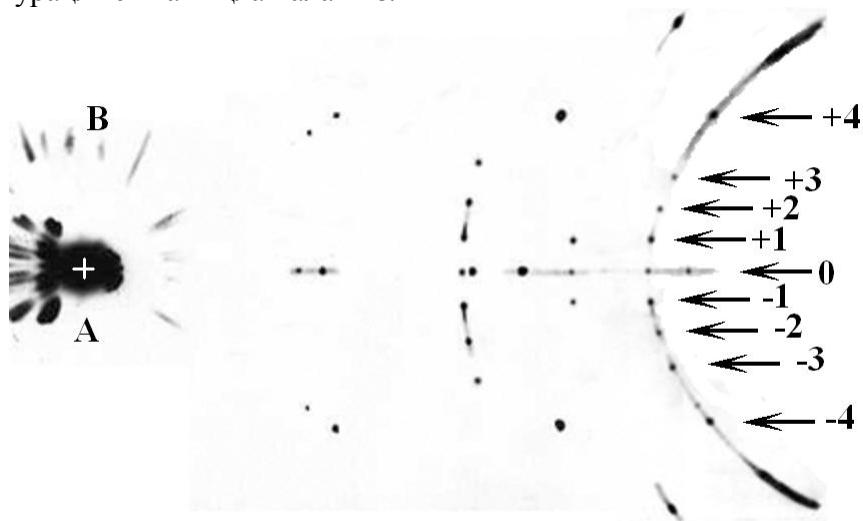
Рентгенограммаларды айланыў (тербелис) усылы менен түсиргенде кристал белгили бир кристаллографиялық бағыт этирапында айландырылады ямаса белгили бир мүйеш интервалында мүйешлик сканнерленеди (мысалы рентген камерасында 210 градустан 225 градус аралығында арман-берман бурылады). Кристалға монохромат рентген нурлары ямаса полихромат рентген нурлары түсириледи. Рентгенограммалардағы дифракциялық рефлекслер (даклар) характеристикалық рентген нурларының дифракциясының салдарынан алынады.

Рентген трубкасынан шыққан (трубканың фокусының нокатлық болғаны мақсетке муýапық келеди) рентген нурлары узын коллиматор арқалы изертленетуғын кристалға келип түседи. Коллиматордың еки ушында диаметри 0,5-22 миллиметрлик дөңгелек тесиклер болып, бул тесиклер кристаллық үглиге дөңгелек формадағы рентген нурының түсініктемесін көрсеткендегі кристалдың [100], [010], [001] ямаса басқа да бизиң ушын мақсетке муýапық болған бағыттарын рентген камерасының айланыў (тербелій) көшерине дәл параллель етип қойыуға мүмкіншилик береди. Айланыў рентгенограммалары әдетте диаметри 86,6 мм болған цилиндр формасына иие фотокассета ишиндеғи фотопленкада пайдаланады.

Жоқарыда айтылып өтилгениндей, айланыў рентгенограммасында рефлекслер қатламлық сыйықтар деп аталатуғын сыйықтар бойлап жайласады (11-сүйрет).

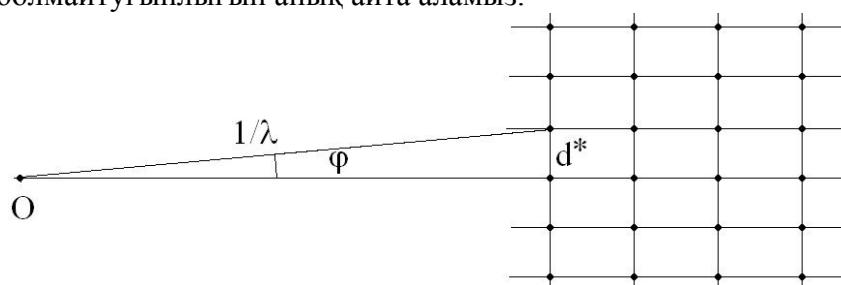
Нолинши қатламлық сыйықтан бириңиши (ямаса минус бириңиши) қатламлық сыйыққа шекемги аралықты l арқалы белгилейик. Бундай жағдайда l аралығына кери пәнжереде d^* сәйкес келеди (12-сүйрет). Анықтама бойынша туұры пәнжередеги тегисликлер семействосы арасындағы қашықтық болған d шамасы $1/d^*$ шамасына тең. Олай болса $\frac{l}{R} = \tan \varphi$. Бул аңлатпада R арқалы цилиндр тәрезли рентген пленкасының радиусы белгиленген. Екинши тәрептен $\frac{d^*}{R_E} = \tan \varphi = \frac{l}{R}$. Бул аңлатпада $R_E = \frac{1}{\lambda}$ арқалы Эвальд сферасының радиусы белгиленген. Бул аңлатпалардан $d = \frac{R}{l} \lambda$ формуласына иие боламыз.

Солай етип айланыў (тербелис) рентгенограммалары жәрдеминде биз айланыў көшери бағытындағы кристаллық пәнжерениң трансляция векторының узынлығын – кристаллық пәнжерениң турақлысынанықлай аламыз.



11-сүйрет. ZnS кристалларының 6H политипинен алынған тербелис рентгенограммасының фотосүйреті. Стрелкалар менен қатламлық сзықтар, ал санлар менен олардың қатар саны белгиленген. А арқалы үлгиге түйры келип түскен рентген нұрының изи, ал В арқалы рентген спектриниң полихромат бөлегинин рентген пленкасында пайда еткен дақлары көрсетілген. Айланыў (тербелий) көшери [0001] бағытына сәйкес келеди ҳәм ол вертикаль бағытта. Сонықтан сүйреттеги рентгенограмма кристалдың [0001] бағыттағы турақлысын анықлауға мүмкіншилік береди.

Тербелис рентгенограммаларын индекслеу (яғни ҳәр бир рефлекске сәйкес келиүши кристаллографиялық тегисликлер семействосының кристаллографиялық индекслерин анықлау) арқалы изертленип атырған кристаллық үлгиниң симметриясының кеңисликтеги топарын анықлау мүмкін. Биз усы жерде рентгенограммаларда бәрқулла симметрия орайының катнасатуғының еслетип өтемиз (Фридель нызамы). Сонықтан рентгенографияда биз кристалда симметрия орайының бар ямаса жоқ екенligин анықтай алмаймыз. Бундай жағдайда мәселениң бир мәнисли шешимиүи ушын кристалдың басқа да физикалық қәсийетлери ҳаққындағы мағлыұматлардың зәрүрлиги пайда болады. Мысалы кристал пироэлектрикlik қәсийетке ийе болса симметрия орайының бундай кристалларда болмайтуғының анық айта аламыз.



12-сүйрет. Айланыў (тербелий) рентгенограммалары жәрдеминде айланыў (тербелий) көшери бағытында кристаллық пәнжерениң трансляция векторының узынлығын анықлау ушын сзылған схема.

Кристаллардың симметриясының кеңисликтеги топарын анықлау кристаллардағы рентген нурларының өшиў нызамын тексерип көриў менен әмелге асырылады. Кеңисликтеги ҳәр бир топар белгили бир өшиў нызамы менен тәриплениди. Өшиў нызамы кристаллографиялық индекслердин белгили бир топары ушын структуралық фактордың нолге тең екенлигі менен байланыслы. Өшиў нызамы 230 топардың ҳәр бир ушын тән

хәм бул жағдай «Рентген кристаллографиясының халық аралық кестелеринде» толық түрде берилген[13].

Айланыў ямаса тербелиў усылы тийкарында алынған рентгенограммаларды индекслеў процессинде Бернал сеткасы кеңен пайдаланылады [13-14]. Бернал сеткасын ислеп шығыў бойынша рентгенструктуралық анализде мәселе де бар (81-санлы мәселе) [15]. Бирақ ҳәзирги ўақытлары персоналлық компьютерлер жақсы раўажланған дәүирлерде Бернал сеткасын жаңаша қурыў мәселеси пүткіллей жаңа мәселелердиң бири болады. Бул мәселени шешиў менен шуғылланамыз.

Бириńши гезекте кери пәнжере координаталарынан цилиндр тәризли фотопленкадағы (Бернал сеткасындағы) рефлекслердин координаталары арасындағы байланысты қарап шығамыз. Кери пәнжерениң түйинлериниң координаталарын ζ ҳәм ξ арқалы белгилеймиз. Ал фотопленкадағы (Бернал сеткасындағы) сәйкес координаталарды x ҳәм y арқалы белгилейик. Бундай жағдайда төмөндегидей формулаларға иие боламыз:

$$y = R \frac{\zeta}{\sqrt{1 - \zeta^2}},$$

$$x = R \cdot \text{ArcCos} \left(\frac{2 - \zeta^2 - \xi^2}{2 \sqrt{1 - \zeta^2}} \right).$$

Бул аңлатпаларда R арқалы рентген камерасының радиусы белгиленген.

Тегис рентген пленкасы ушын жоқарыдағы формулалар

$$y = D \frac{2\zeta}{2 - \zeta^2 - \xi^2},$$

$$x = D \tan \text{ArcCos} \left(\frac{2 - \zeta^2 - \xi^2}{2 \sqrt{1 - \zeta^2}} \right)$$

түрине иие болады.

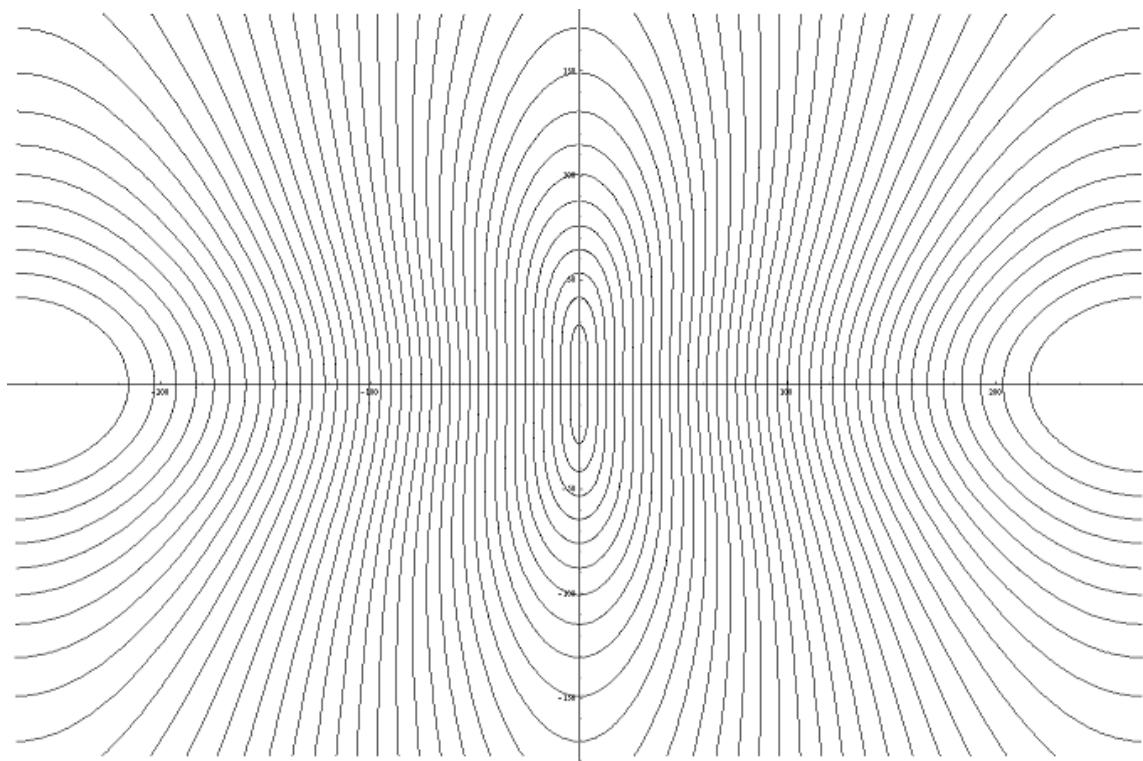
Жоқарыда келтирилген формулалар бойынша есаплаўлар ҳәм сәйкес графикти сыйыў Mathematica 6 программалаў тили жәрдеминде орынланды. Цилиндр түриндеги фотопленка ушын алынған Бернал сеткасы 13-сүүретте, ал тегис фотопленкада ушын құрылған Бернал сеткасы 14-сүүретте келтирилген ($R = 86,6$ мм деп есапланды). Сетканың бир сыйығын сыйыў ушын арналған сәйкес математикалық программа

```
R=86; x=0.05; ParametricPlot[{ {R*ArcCos[(2-y^2-x^2)/ 2 Sqrt[1-y^2 ]],R y/ 2 Sqrt[1-y^2 ]}, {y,-0.7,0.7}, PlotStyle → Directive[Opacity[3], Black], ImageSize→1400]
```

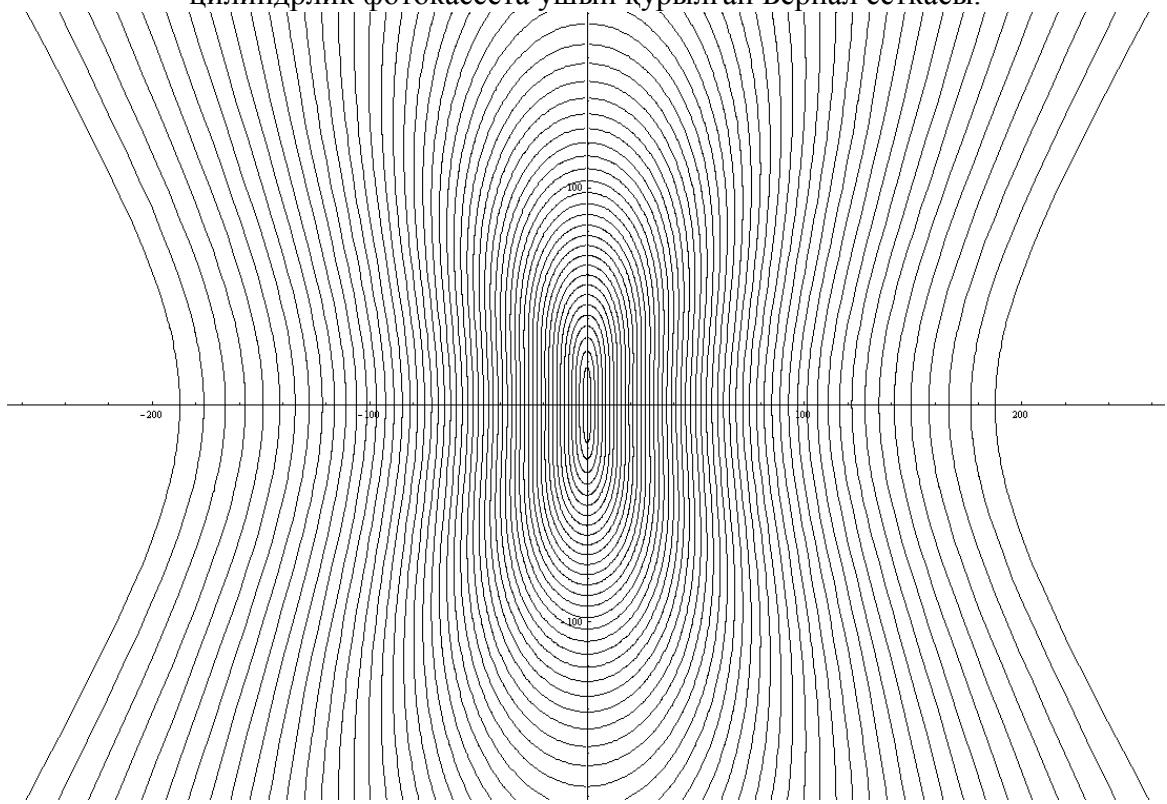
(цилиндрилік фотопленка ушын) ҳәм

```
R=86; x=0.05; ParametricPlot[{ {R*Tan[ArcCos[(2-y^2-(x)^2)/(2 Sqrt[1-y^2 ] )]], R (2 y)/(2-y^2-(x)^2)}, {y,-0.9,0.9}, PlotStyle → Directive [Opacity[3], Black], ImageSize→1600]
```

(тегис фотопленка ушын) түрине иие болады. x бойынша адым 0,05 ке тең етип алынды.



13-сүйрет. Персоналлық компьютерде Mathematica 6 программаһау тиلى жәрдеминде цилиндрлик фотокассета ушын құрылған Бернал сеткасы.



14-сүйрет. Персоналлық компьютерде Mathematica 6 программаһау тиلى жәрдеминде тегис фотокассета ушын құрылған Бернал сеткасы.

Унталған кристаллар усылы (порошок усылы). Поликристаллық материалларды ямаса унталған кристаллық затларды изертлейтуғын әдеттеги әпиүайы усылда үлгі рентген нурларының жицишке дәстеси менен нурландырылады. Монохромат рентген нурларын алышу үлкен машқалаларды пайда ететуғын болғанлықтан басым көпшиликті жағдайларда рентген трубкасынан шыққан полихромат рентген нурлары қолланылады.

Рентгенограммалардағы рефлекслер спектрдин 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 бириңшилер қатарында пайда болған усылларының бири).

Дифракциялық сүйрет әдетте цилиндрлик бетке орнатылған ени киши болған рентген пленкасыннатусириледи ҳәм оны дебаеграмма деп атайды. Цилиндрдин орайында изертлениүшиулги жайластырылады (8-сүйрет). Гейпара жағдайларда дебаеграмма тегис фотопленкаға да түсириледи.

Поликристаллардағы кристаллитлердин бағытлары, соның менен бирге унталған кристаллардағы майда кристаллардың бағытлары кеңисликте теңдей итималлық пенен тарқалған. Соныңтан бундай үлгиге рентген нұры келип түскенде Вульф-Брэгг шәртин (дифракция шәртин) канаатландыратуғын жағдайда көплеген кристаллитлердин ямаса майда кристаллардың түрүйі мүмкін. Бундай кристаллитлер өзине келип түскен нурларды конуслық бетте жайласқан бағытлар бойынша дифракцияға ушыратады ҳәм тегис фотопленкада бир дақ емес, ал дөңгелек дифракциялық рефлекс пайда болады. Бул дөңгелек рефлекстин радиусын r арқалы белгилейик. Үлги менен фотопленка арасындағы қашықтық R шамасына тең болсын. Бундай жағдайда $\frac{r}{R} = \tan 2\theta$ шамасына тең болады (θ арқалы дифракциялық мүйештиң мәниси белгиленді). Ал дифракциялық мүйеш θ болсын Вульф-Брэгг теңлемеси бойынша кристаллографиялық семействодары тегисликтер арасындағы қашықтық d_{hkl} шамаларын анықлауға мүмкіншилік береди.

Солай етип Дебай-Шерер усылында кристаллографиялық тегисликтер арасындағы қашықтықтар тиккелей анықланады екен. Егер бир сол тегисликтер арасындағы қашықтықтардың дизимин дүзетуғын болсақ ҳәм бул тегисликтер ушын кристаллографиялық индекслерди анықласақ, онда биз кристалдың симметриясының кеңисликтеги топары ҳаққында тиккелей гәп ете аламыз.

Дебай-Шерер усылының жәрдеимнде кристаллық пәнжере турақтыларының мәнисин дәл анықлау мүмкіншилігіне ийе боламыз. Ҳақыйқатында да Вульф-Брэгг теңлемесинен салыстырмалы қәтелік ушын

$$\frac{\Delta d}{d} = -ctg \theta \cdot \Delta \theta + \frac{\Delta \lambda}{\lambda}$$

аңлатпасын аламыз. Әдетте $\Delta \lambda = 0$ деп қабыл етиледи. Дифракциялық мүйеш θ ның мәниси 90^0 қаумтылғанда бул салыстырмалы қәтеліктиң мәниси нолге умтылады. Бирақ бундай үлкен дифракциялық мүйешлерде дифракциялық максимумларды алыў үлкен кийиншіліктердің пайда етеди. Соның менен бирге бундай үлкен мүйешлерде Дебай сақыйналарының (рефлекслеринин) ени әдеўір үлкейеди. Соныңтан Дебай-Шерер усылында кристаллық пәнжерениң турақтыларының мәнислерин дәл есаплау ушын $\theta \rightarrow 90^0$ қа карай экстраполяциялады.

Әмелде көпшиликтің жағдайдарда Нельсон-Райл экстраполяциялық функциясы колланылады:

$$F(\theta) = \frac{1}{2} \frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} + \frac{\cos^2 \theta}{\theta}$$

Бул функция экстраполяциядағың жақсы сызықтықты тәмийинләйди.

Биз төменде дебаеграммалардан емес, ал сәйкес дифрактограммалардан пайдаланамыз.

6-§. Элементар құтышалардың параметрлерин анықлауға арналған компьютерлік программалар

Элементар қутышалардың параметрлери (турақтыларын) дәл анықлауға жәрдем беретуғын компьютерлик программалардың санын жүзден аслам деп айтыў мүмкін. Бул питкеріў жумысында сол көп санлы компьютерлик программалар ишинде жумыс ислеўге қолайлы ҳәм көп санлы әмелій функцияларға ийе PowderCell компьютерлик программасының 2.4 версиясын қараймыз. Бул программа Материалларды изертлеў ҳәм тексеріудың Федераллық Институты (Берлин қаласы) хызметкерлері докторлар Герт Нольце (Gert Nolze) ҳәм Вернер Краус (Werner Kraus) тәрепинен ислеп шығылған. Бул программа кристаллық құрылымдар менен ислеўге арналған болып, поликристаллық үлгилер ушын сәйкес рентгенограммаларды ҳәм нейтронограммаларды есаплауға мүмкиншиликтен береди.

Кристалдың қабыл етилген моделинин ҳәм усы модель тийкарында өткериленген есаплаулардың дұрыслығының критерий экспериментте алынған рентгенограммаларға сәйкес келийнде. Бул жағдай рентген нурларының кристаллардағы дифракциясын дәл өлшеуди (прецизиялық өлшеүлерди) талап етеди. Эксперименталлық дифрактограмма менен теориялық рентгенограмма арасындағы айырма қабыл етилген ҳақыйқый структуралың моделинин жарамсыз екенлигин көрсететуғын тийкаргы себеп болып табылады. Программа эксперименттиң параметрлери болған пайдаланылған нурланыў, эксперименттиң геометриясы, рентген нурларының аномаллық дисперсиясы, өзгермейтуғын ҳәм өзгертилетуғын сандықтардың өлшемлері, рентген нурларының интенсивліктериниң ҳәр қылышы коррекциялары, фонды есапқа алыў, нурланыў сызығының дублетлигин есапқа алыў ҳәм басқа да параметрлерди есапқа алыўға мүмкиншиликтен береди [14-15].

PowderCell программасының жәрдемінде төмендегидей мәселелерди шешиў мүмкін:

Структуралық мағлыўматлардың ҳәр қылышы форматларын пайдаланыў мүмкін (ICSD, SHELX, POWDER CELL);

Симметрияның кеңисликтеги топарының 750 ден аслам болған дүзилислерин пайдаланып кристаллық структураларды визуал түрде көрсетиў мүмкін;

Структуралың (кеңисликтеги топардың) ҳәр қылышы дүзилислерин моноклинлик, орторомбалы ҳәм ромбоэдрик сингониялар ушын бир түрден екинши түрге трансформациялау мүмкін;

Лауэ классларын ҳәм трансляциялық подгруппаларды генерациялауға мүмкиншиликтен береди. Бул симметрияның төменлеўи менен жүретугын фазалық өтиўлерди, басқа да структуралық эффектлерди таллау ушын зор қурада болып табылады;

Кристаллық құрылымстағы сайлап алынған атомның ямаса молекуланың айланыўы менен трансляциясын пайдаланып элементар қутышаның ишинде структуралың вариациясын әмелге асырыў көзде тутылады;

Жоқарыдаға мәселелерди шешиў менен бир ўақытта сәйкес дифрактограмманы (унталған кристаллар ямаса поликристаллар дифрактограммасын) ҳәм нейтронограмманы показывать көрсетеди%

Дифракцияның ҳәр қылышы шәртлери имитация қыла алады. Мысалы: нурланыў ушын толқын узынлығы, эксперименттиң геометриясын, пайдаланылған сандықтардың (диафрагмалардың) өлшемлерин, аномаллық шашырауды ҳәм басқа да параметрлерди өзгертиў мүмкін;

Ҳәр қылышы свертка функциясын (дифракциялық максимумлардың ҳәр қылышы болған профиллери) пайдаланыўға мүмкиншиликтен береди;

Теориялық (есаплау жоллары) жоллар менен алдынған ҳәм экспериментте алдынған рентгенограммаларды салыстырыўға мүмкиншиликтен береди;

Кристаллық құрылымын есапланған дифрактограммаларды ҳәр қылышы графикалық форматларға экспорттай алады (мысалы WindowsMetafile, PostScript, POVRay),

Структуралың манипуляциясы менен сәйкес дифрактограмма арасындағы өз-ара байланысты көрсетеди. Анимация ушын POV Ray программасын пайдаланыў мүмкін.

Басқа да Windows программаларға графика менен кестелерди өткериү (экспортлаў) ушын clip board тан пайдаланыўға мүмкиншилик береди; PowderCell программасының толық тәриплемеси төменде берилген.

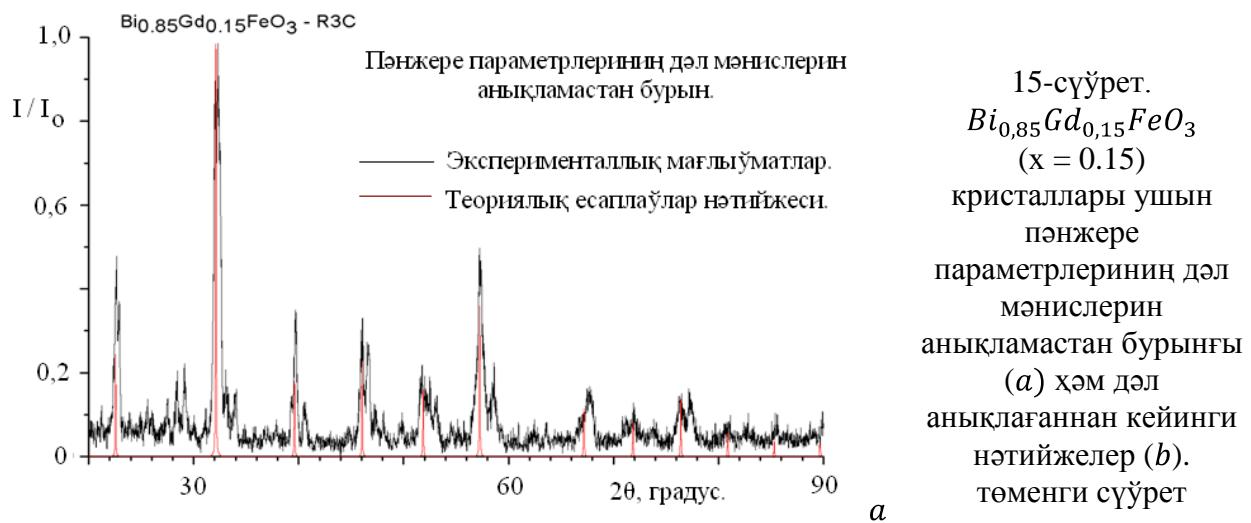
7-§. $Gd_xBi_{1-x}FeO_3$ бирикпесиниң элементар қутышасының структуралық характеристикалары

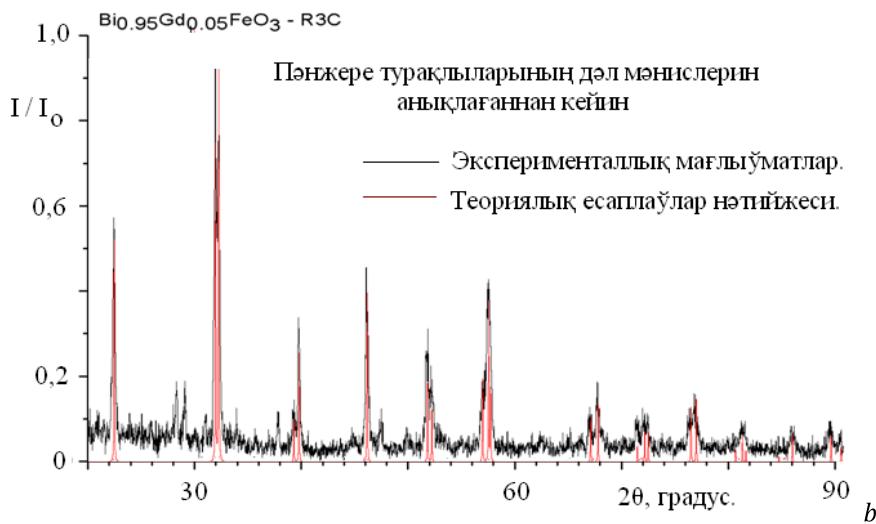
Рентгенографияда элементар қутышаның параметрлериниң дәл мәнисин билиў эхмийетли орынды ийелейди. Себеби бул параметрлер ҳәр қыйлы затлардың дәл зоналық құрылышын, диэлектриклик параметрлерин есаплаў ушын керекли болады.

Дәслеп сынап көриў мақсетинде PowderCell программасын $NaCl$, ZnS һәм $ZnSe$ сияқты кристаллық пәнжерелериниң турақтылары дәл белгили болған кристаллар мысалында тексерип көрилди ҳәм эксперименталлық мағлыўматлар менен теориялық есаплаўлар арасында толық сәйкесликтің бар екенлеги анықланды. Буннан кейин PowderCell құрылышы еле изертленбegen кристаллар, атап айтқанда $Gd_xBi_{1-x}FeO_3$ (концентрациялардың муғдарлары $x = 0.05, 0.1, 0.15, 0.2$ болған жағдайлар ушын) кристалларының атомлық-кристаллық құрылышын дәл анықлаў мақсетинде пайдаланылды.

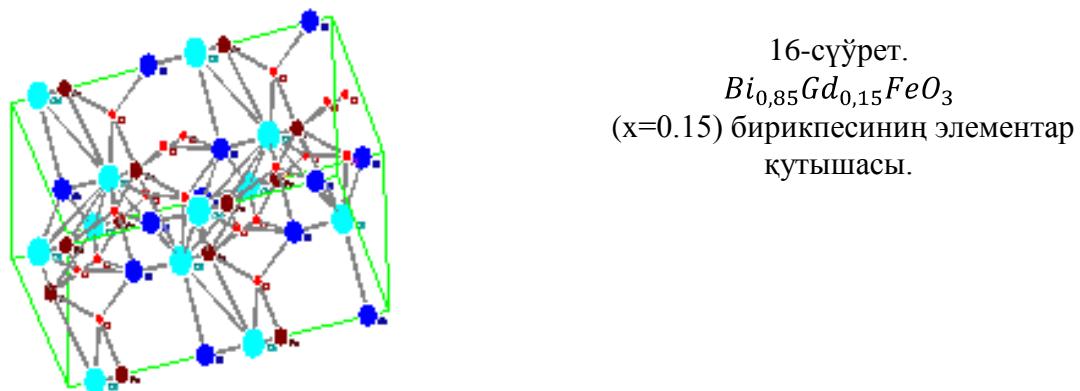
$Gd_xBi_{1-x}FeO_3$ кристаллары ушын 161-санлы симметрияның кеңисликтеги топарына сәйкес ($R3c$) рентгенограммалар есапланды. Бул кристаллық заттың синтезине байланыслы ҳәр қыйлы кеңисликтеги топарларға кириўи мүмкин.

$Bi_{0.85}Gd_{0.15}FeO_3$ бирикпеси ($x = 0.15$) ушын дүзилген алынған теориялық дифрактограмманы ҳәм экспериментте алынған дифрактограмманы салыстырыў төмендеги нәтийжелерди берди:

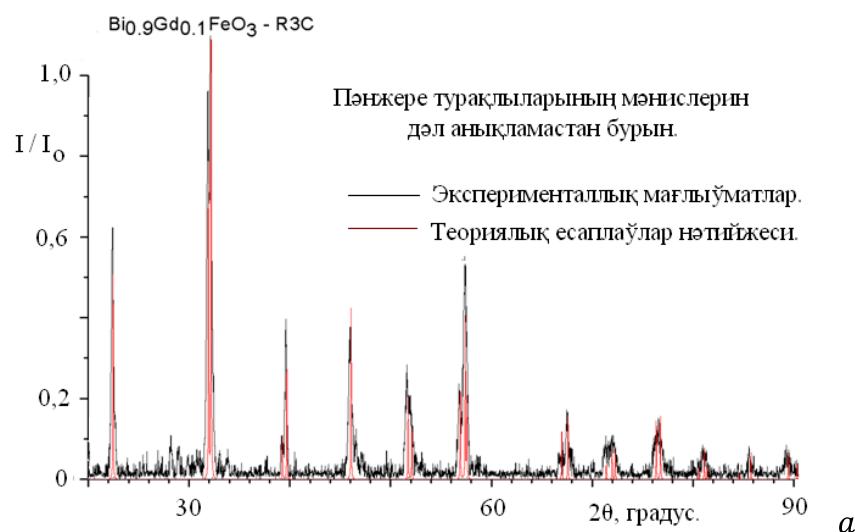




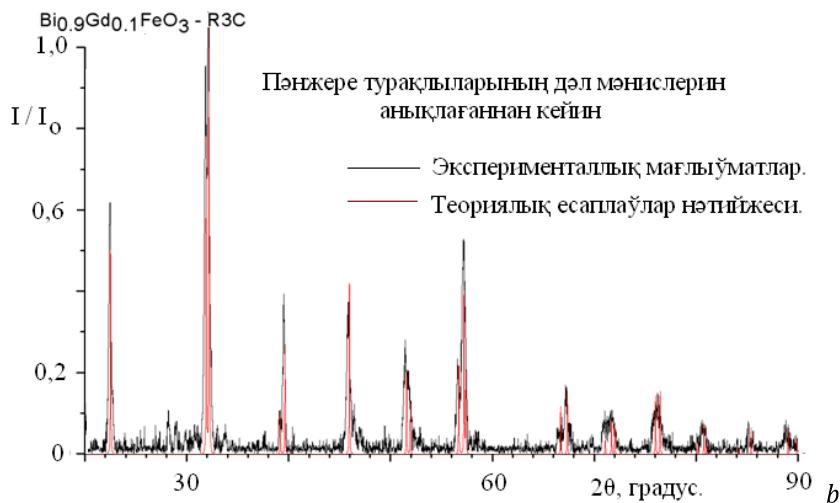
Есапланған хәм эксперименталлық дифрактограммалардың тийкарында алынған мағлыұматтар бойынша PowderCell 2.4 программасы жәрдемінде $\text{Bi}_{0.85}\text{Gd}_{0.15}\text{FeO}_3$ бирикпесинин $x = 0.10$ концентрациясына сәйкес келиүши элементар кутышасының сүйрети алынды. Ол төмендеги 16-сүйретте берилген.



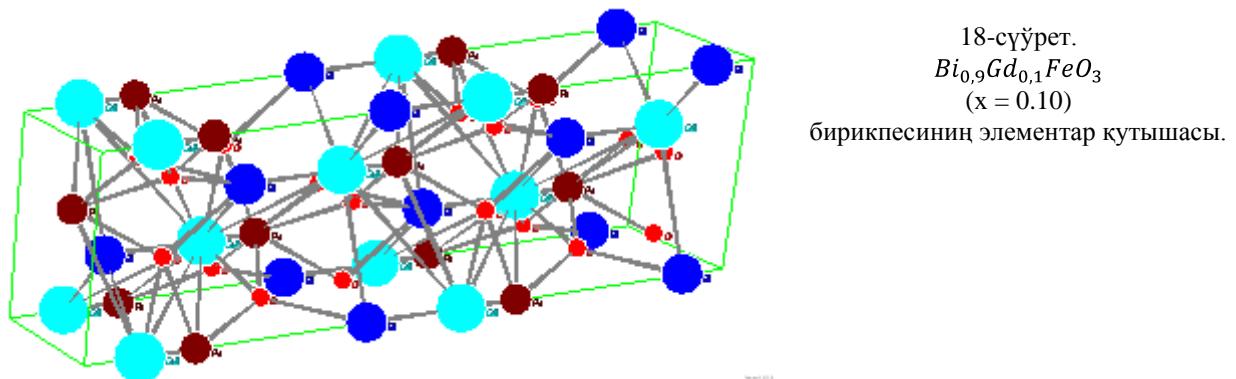
Енди $\text{Bi}_{0.9}\text{Gd}_{0.1}\text{FeO}_3$ бирикпесинин $x = 0.10$ болған концентрациясы ушын алынған дифрактограммаларды салыстырғанда исленген жұмыслардың нәтийжелерин көрсетемиз (18-сүйрет):



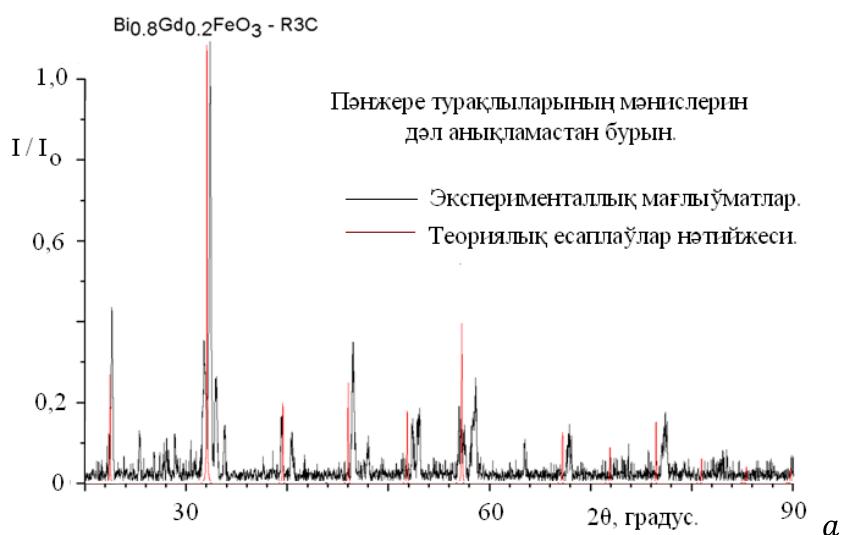
17-сүйрет.
 $\text{Bi}_{0.9}\text{Gd}_{0.1}\text{FeO}_3$
($x = 0.10$)
кристаллары ушын
пәнжере
параметрлеринин дәл
мәнислерин
анықламастан бурынғы
(a) хәм дәл
анықлағаннан кейинги
нәтийжелер (b).



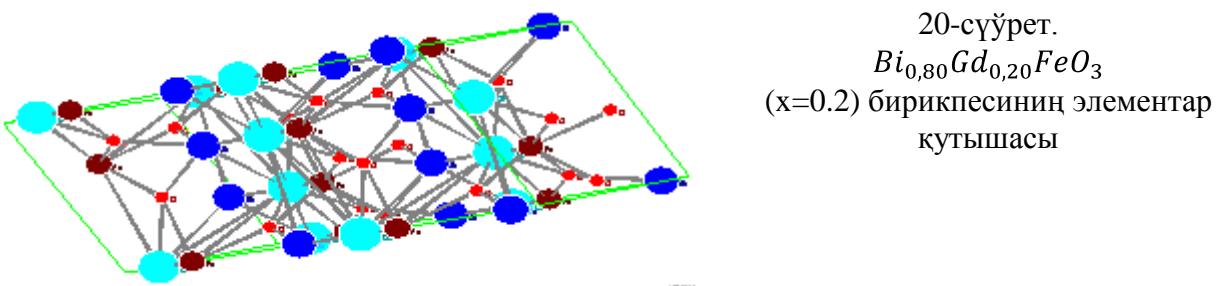
Сәйкес элементар қутыша 18-сүйретте берилген.



Енди x = 0,20 болған концентрацияға ииे Bi_{0,80}Gd_{0,20}FeO₃ кристалларын изертлеўдин барысында алынған нәтийжелерди көлтиремиз (19-сүйрет):



Бул нәтийжелер тиімдегінде Bi_{0,80}Gd_{0,20}FeO₃ бирикпесиниң кристаллық пәнжересиниң элементар қутышасының сүйрети салынды. Бул 20-сүйретте көлтирилген.



$x = 0,05; 0,1; 0,15; 0,2$ концентрациялары ушын $Gd_xBi_{1-x}FeO_3$ бирикпесинин кристаллық пәнжерениң турақтыларының PowderCell 2.4 программасының жәрдеминде алынған дәл мәнислерин төмөндеги кесте түринде беремиз:

$Gd_xBi_{1-x}FeO_3$	Әдебияттан алынған мағлыұматлар, пәнжере параметрлери, Å	Есаплаўлардың жәрдеминде 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 Klasse 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., Саков Ю.А., Иванов А.Н., Растворгувев Л.Н. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия. М.: Металлургия, 1982, 632 с.
4. Bravais, A. (1850). "Mémoires 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. 672с. (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. The memory effect in Lead Orthovanadate Crystals (Эффект структурной памяти в кристаллах ортованадата свинца). *Uzbek J. Phys* 2, 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 Program for the Representation and Manipulation of Crystal Structures and Calculation of 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. Мүйешлик сканнерлеў усылында жуқа монокристалл арқалы өтиўши рентген нурларының топографиялық сұйретинин қәлиплесиүй

Кирисиў

Бизиң күнлеримиздеги қатты денелер физикасы менен физикалық материалтаныўдағы ең көзге түсерлік жағдай кристаллық денелердин ҳақыйқый қурылышын теренирек изертлеў болып табылады. Кристаллардың ҳақыйқый структурасы олардың тийкарғы физикалық ҳәм физикалық-технологиялық қәсийетлерин толығы менен анықлады. Рентген нурларының ашылыўы, Жер жүзиндең көп санлы мәмлекеттерди жемисли түрде жумыс ислеп атырған илимпазлардың мийнетлериниң нәтийжесинде кристаллық денелердин қурылышын изертлеўдин көп санлы усыллары ашылды. Бул усыллар дифракциялық сұйретлердин қәлиплесиүинин геометриясы, пайдаланылатуғын нурланыўдың спектрлери ҳәм пайдаланылыўы бойынша бир бириңен айрылады.

Хәзирги заман рентгенографиясы қатты денелер физикасы менен физикалық материалтаныўдың ең зор қуарларының бири болып табылады. Көплеген жулар даўымында кристаллық қурылыштың хәр қылыш дефектлери болған дислокацияларды, суб дәнешелер арасындағы шегараларды, жайластырыў дефектлерин, ноқатлық дефектлерди үйрениў бойынша кең түрде жумыслар алып барылмақта. бирақ усы жағдайларға қарамастан рентгенографияны теренирек изертлеў, жаңа әсбап үскенелердин, солардың ишинде рентген нурларының ноқатлық дереклеринин пайда болыўы пайдаланылып жүрген рентгенографиялық усылларды жетилистириўдин мүмкіншиликтеринң бар екенлигин көрсетеди. Усындаі талқылаулар кристаллық денелердеги рентген нурларының дифракциясының жаңа схемаларын усыныў мүмкіншиликтерин береди. Усы айтылғанларға байланыслы бол питкериў қәнигелик жумысы мүйешлик сканнерлеў, Фудживара (Takeo Fujiwara), Ланг (A.R.Lang) усылларына тийкарланған жаңа экспресс

(нәтийжени тез ўақытлар ишинде беретуғын) рентгентопографиялық усылды усыныўға байланыслы орынланды. Бул топографиялық экспресс усылды кристалл арқалы өтийге тийкарланған рентгентопографиялық мүйешлик сканнерлеў усылы деп атаймыз (зәрүрги болмаған жағдайларда биз текстти қурамаластырыў мақсетинде тек мүйешлик сканнерлеў усылы деп те атаймыз). Жумыстың әхмийети соннан ибарат, усы ўақытларға шекем жаңа рентгенографиялық экспресс усыллар кристаллардың атомлық-кристаллық кураласын үйренийде, қадағалаўа ҳәм оның өзгерислерин бақлауда тийкарғы орынды ийелейди.

КРИСТАЛЛАР РЕНТГЕНОГРАФИЯСЫНДАҒЫ РЕНТГЕНТОПОГРАФИЯЛЫҚ УСЫЛЛАР

1-§. Шульц ҳәм Фудживара усыллары

Полихроматлық Шульц (L.G.Schulz) усылы монокристаллық денелердин курылышын изертлеў ушын қолланылады [1]. Бул усылды қолланғанда оның жақсы мүйешлик айыра алышылық қәбилетлиги айрықша орынды ийелейди. Бул усылда сүүреттиң қәлиплесиүи 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 көлтирилген. Полихромат рентген нурларының ноқатлық дереги S кристалдың бетинен D қашықлықта жайласқан. Кристалдың бетине келип түскен рентген нурлары Вульф-Брегг шәрти деп аталатуғын

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

көпшиликтегі белгилі 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 етийши пүтиң сан белгиленген.

(1-1)-формула бойынша ҳәр бир λ толқын узынлығына кристалдың бетиндеги бир сызық бойынша шағылысыў (дифракция) сәйкес келеди. Фотопленка бетиндеги сүүрет усындай сызықтар кесиндилеринен турып, сол кесиндилер бойында толқын узынлығы турақты мәниске иие болады. Усындай сызықтардың теңлемеси [3] жумыста кеңнен тарқалыўшы рентген нурлары усылы ушын көлтирилип шығарылған еди. Бул усылда фотопленка кристалдың бетине параллель рәүиште кристалдың бетинен A аралығында жайластырылады. Теңлеме мына түрге иие:

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

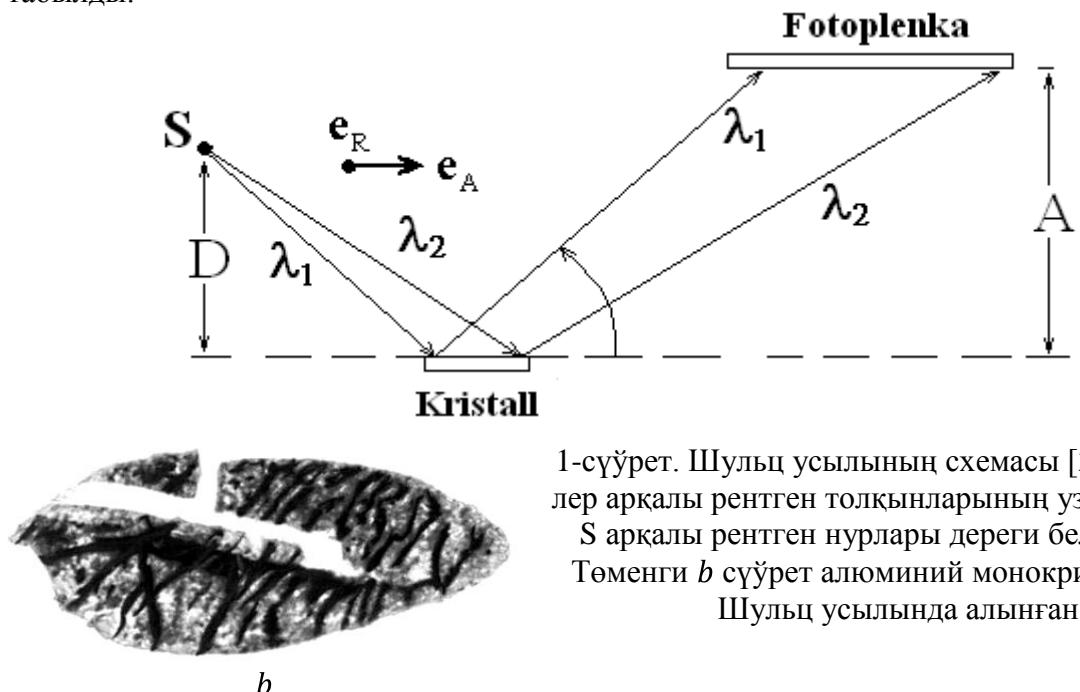
Бул теңлемеде $\theta_1 = \arcsin(\sin \alpha \cos \varphi)$, α арқалы шашыратыўшы тегисликлер менен кристалдың бети арасындағы мүйеш, $R(\theta, \varphi)$ ҳәм φ арқалы фотопленка бетиндеги дифракциялық сызықтың поляр координаталары белгиленген. Координата басы болған O ноқаты пленка тегислигі менен шашыратыўшы тегисликлерге тусирилген нормалдың кесилисіүи ноқатында жайласқан. φ мүйешиниң мәниси бул нормалдың пленкаға тусирилген проекциясынан басласап есапланады.

Шульц усылында кристалды зонасының көшери азимуталлық бағытта жайласқан тегисликлерден шашыраў алынатуғындей етип жайластырады.

Биз бул жерде азимуталлық ҳәм радиаллық бағытлар тууралы мыналарды атап өтемиз: фотопленкадағы радиаллық бағыт (e_R) деп кристалға келип түсіүши ҳәм кристалда шағылысқан бағытлар жататуғын тегисликтеги бағытты, ал азимуталлық (e_A) бағыт деп оған перпендикуляр болған бағытты түсінемиз. Фотопленкадағы радиаллық бағыт О координата басынан басланатуғын $R \theta, \varphi$ бағытына сәйкес келеди.

Әдетте кристалдың өлшемлери $R \theta, \varphi$ қашықтырғанда киши. Егер кристалдың ориентациясын есапқа алсақ ҳәм кишилиги бойынша екинши тәртипли ағзаларды есапқа алмасақ, онда (10-1)-формула тийкарында $R \theta, \varphi$ шамасын φ мүйешинен ғәрәзсиз деп есаптай аламыз (әдетте $\varphi \ll 1$ ҳәм $\theta_1 = \alpha$), ал φ турақты болып қалатуғын жағдайлардағы сызықлардың кесиндерлері α мүйешинин қәлеген мәнисиндеғи шенберлердин кесиндерлері болып табылады.

Усындаған болжайлар орын алған жағдайлар ушын [2] ниң авторлары тәрепинен кристалдың бетиниң элементтери менен фотопленкадағы сүйрети арасындағы байланыс табылды.



1-сүйрет. Шульц усылының схемасы [2]. λ_1 ҳәм λ_2 лер арқалы рентген толқынларының узынлықтары, S арқалы рентген нурлары дереги белгиленген. Төменги b сүйрет алюминий монокристалданан Шульц усылында алынған.

(1-2)-формуласын пайдаланып радиал ҳәм азимутал бағытлардағы усылдың үлкейтий қоэффициенттери P_R ҳәм P_A шамаларын есаптаймыз. Усындаған мақсетте сүйреттеги кесиндинин кристалдағы сәйкес кесиндинин узынлықтарының 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 шашыратыұшы тегисликлер менен үлгиниң бети арасындағы мүйеш белгиленген. $\alpha \neq 0$ болған жағдайларда P_R ҳәм P_A қоэффициенттери ҳәр қылыш ҳәм θ мүйешинин үлкейиүи менен радиаллық бағытта өседи. Усының нәтийжесинде топограммадағы кристалдың сүйрети кристалдың өзинин формасына усамайды (яғни рентгентопографиялық сүйрет майысқан болып шығады).

Солай етип Шульц усылында турақты λ ге иие шенбердин кесиндерleri тәрепинен қәлиплеседи екен. $\alpha \neq 0$ болған жағдайларда кристалдың бетиниң элементлеринин

формасы сүүретте майысқан. Сүүретте кристалдағы бағытлар арасындағы мүйешлер сақланбайды.

Шульц усылында кристаллық үлгиниң бир бирине салыстырғанда бурылған бөлеклери айырым сүүретлерди пайда етеди. Кристаллық блоклар арасындағы шегаралар жақтылы (егер қонысылас блоклардың сүүретлери бир бириң үстине түсетуғын болса) ямаса караңғы (егер қонысылас блоклардың сүүретлери бир бириң базы бир қашықтықта пайда болса) жолаклар түринде пайда болады. [2] де келтирилген сүүреттиң пайда болыўын таллау үсындағы сүүретлер арасындағы қашықтықтар 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 ҳәм b_A арқалы радиаллық ҳәм азимуталлық бағытлардағы сүүретлер арасындағы қашықтық, δ_R менен δ_A арқалы радиаллық ҳәм азимуталлық бағытлардағы кристаллық блоклар арасындағы мүйешлер белгиленген.

[2] ниң авторлары тәрепинен Шульц усылында топографиялық сүүреттиң пайда болыўы тольк талланған. Бул жумыста топограммадағы кристалдың бетиниң сүүрети бойынша кристаллық блоклардың формаларын, өлшемлерин ҳәм бир бирине салыстырғанда қандай мүйешлерге бурылғанлығын анықлаудың мүмкін екенлиги көрсетилген. Субдәнешелер арасындағы мүйешлерди анықлау үсынылған. Басқа топографиялық үсыллар Шульц усылынан топограмма алғыудың геометриясы менен анықланатуғынлығы, үсыған байланыслы кристалдың сызықлы ҳәм мүйешлик өлшемлерин анықтайтуғын формулалардың басқа түрге ийе болатуғынлығы атап өтилген. Фудживара, Берг-Баррет (W.Berg - C.S.Barrett [4]) ҳәм басқа да үсылларды пайдаланғанда алынатуғын нәтийжелерди жоқарыда келтирилген таллаулар тийкарында қайта көріп шығыўдың зәрүрлиги дәлиленген.

Япониялы физик Т.Фудживара (T.Fujiwara) тәрепинен үсынылған рентгентопографиялық үсылда жуқа монокристаллық үлги арқалы өтиўши рентген толқынларының дифракциясы пайдаланылады [5]. Бул үсылда рентген нурларының ноқатлық дерегинен шыққан кең тарқалыўшы нурлардың көшерине изертленилетуғын монокристаллық үлгини де, фотопленканы да перпендикуляр етіп жайластырады. Бул жағдай 2-сүүретте келтирилген. Әлбетте кең тарқалыўшы дәстениң көшериниң фотопленканы кесип өтиўи мүмкін емес. Себеби туўры түскен рентген нурлары фотопленкада қара дақты пайда етеди. Бул үсыл ренгенографиядағы Лауэ үсылын еске түсіреди. Айырма соннан ибарат, Лауэ үсылында полихроматик рентген нурларының диаметри 1-2 мм болған тегис-паралель дәстеси пайдаланылады. Ал Фудживара үсылында болса ноқатлық деректен барлық тәреплерге тарқалыўшы полихроматик рентген нурлары қолланылады. Сонықтан фотопленкада ноқатлық емес Лауэ дақларынан туратуғын сүүрет пайда болады. Айырым дақларда харakterистикалық рентген нурларының излериниң де көриниўи мүмкін (биз үсынайын деп атырған үсылда сол излер пайдаланылады). Ҳәр бир рефлекс (дақ) шашыратыўшы тегисликлердин бағытына сәйкес келиўши кристалдың құрылышының топографиялық сүүретин сәүлелендіреди. Егер изертленип атырған монокристаллық үлги бир бирине салыстырғанда базы бир мүйешлерге бурылған субдәнешелерден (ямаса кристаллық блоклардан) туратуғын болса, онда топограммадағы рефлекс (сүүрет) қурамалы құрылышқа ийе болады ҳәм ҳәр бир блоктың сүүретлериниң қосындысынан турады. Бул дақлардың құрылышы бойынша субструктуралың элементлериниң сызықтық өлшемлери ҳәм олар арасындағы бир бирине салыстырғандағы бурылыш мүйешлери анықланады. Егер бир ўақытта бир неше

тегисликлерден топографиялық сүйрет алынатуғын болса, онда изертленип артырған кристалдағы субструктуралардың үш өлшемли кенисликтери жайласыуы ҳаққындағы толық информацияларға иие болыу мүмкін.

Фудживара усылында азимуталлық бағыттағы блоклар арасындағы мүйешти анықлау 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 иие боламыз:

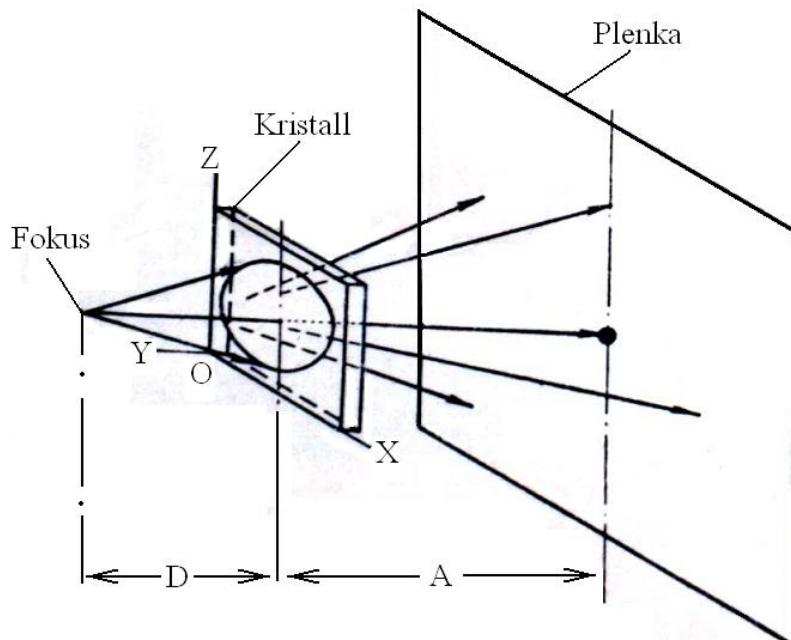
$$\delta_R = \frac{m_R (\cos 2\theta)^2}{A + D}. \quad (1-8)$$

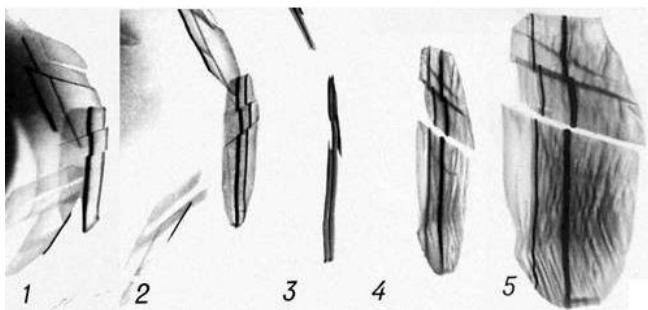
Бул аңлатпаларда m_A менен m_R арқалы ҳәр қылыш субдәнешелерде шашыраған характеристикалық рентген нурларының бир бириңен сәйкес азимуталлық ҳәм радиаллық бағыттардағы аүйысыуы белгиленген (3-сүйретті қаранды). γ_A ҳәм γ_R арқалы түсіүши дәстениң жыйнақтылық мүйеши. Бул белгилеуди түсіниү ушын $\gamma = \frac{f}{D}$ екенлигин атап өтемиз. Бул жерде f арқалы рентген трубкасының фокаллық дагының сызықты өлшеми, ал D арқалы кристаллық үлги – фокус арасындағы қашықтық белгиленген.

Фудживара усылының жәрдеминде субструктуралардың элементтеринин бир бириңе салыстырғанда перпендикуляр болған үш көшер менен жасайтуғын мүйешлерин анықлауға мүмкіншілік береди. OZ көшери дөгерегендеги субдәнешениң бурылыш мүйеши фотопленкадағы сәйкес сүйретлер арасындағы шегаралық жолақтың радиаллық бағыттағы кеңлигі менен төмендеги формуланың жәрдеминде анықланады (3-сүйретті қаранды).

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

Бул мүйешлердин мәнислерин усы дифракциялық дақтағы характеристикалық рентген нурлары берген сызықтардың аүйысыуы бойынша да анықлауға болады [(1-8)-формула].





2-сүйрет. Фудживара усылы бойынша сүйретке түсириў схемасы [6] (бул сүйрет <http://vseslova.com.ua/word> сайтында берилген). Алюминий монокристаллының сүйрети төмөнде келтирилген.

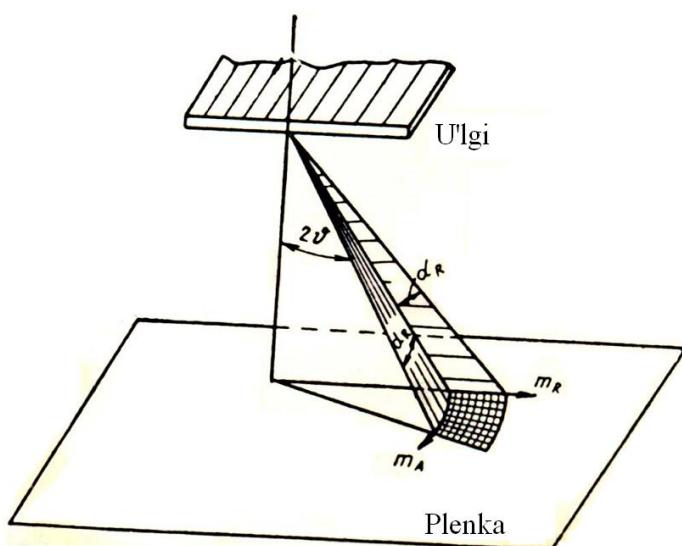
OX көшери дөгерегиндеги субдәнешелердин бир биринен бурылыў мүйеши характеристикалық сызықтың аўысыўына ямаса пленканың вертикаллық диаметриндеги интерференциялық дақтағы горизонт бағытындағы шегаралық жолақлардың пайда болыўына алып келеди. Бул аўысыўдың шамасы бойынша ямаса сәйкес шегаралық областтың кеңлигі бойынша бурылыў мүйешинин мәниси есапланады [(1-8)- ҳәм (1-9)-формулалар].

Субдәнешелердин OY көшери дөгерегиндеги бурылыўлары фотопленкада радиал бағыттағы шегаралық жолақты пайда етеди. Бул жолақлардың кеңлигі бойынша бурылыў мүйеши анықланады [(1-7)-формула]. (1-7)-формула жәрдеминде алынған бурылыў мүйешинин мәнисинен шашыратыўшы тегисликтиң OZ (вертикал бағыттағы диаметрде жайласқан рефлекслер ушын) ямаса OX (горизонт бағытында жайласқан рефлекслер ушын) көшерине перпендикуляр емес екенлигинен келип шығатуғын шаманы (дүзетиўди) алып таслаў зәрүрлиги пайда болады.

Вертикаллық диаметрде жайласқан рефлекслер ушын бундай дүзетиўдің шамасы $\delta_Z \sin \varphi$, ал горизонт бағытындағы диаметрде жайласқан дақлар ушын $\delta_X \sin \psi$. Бул дүзетиўлерде φ менен ψ арқалы шашыратыўшы тегисликтердин XOY ҳәм ZOY тегисликтерине салыстырғандаты бурылған мүйешлери белгиленген. δ_Z пенен δ_X болса субдәнешелердин сәйкес OZ ҳәм OX көшерлери дөгерегиндеги бурылыў мүйешлери.

Солай етип Фудживара усылында кристаллық үлгинин бир ўақытта көп санлы топографиялық сүйретлери алынады. Кристалдың сүйретлерин таллаудың барысында субдәнешелер арасындағы мүйешлер ҳәм сол дәнешелердин өлшемлери анықланады.

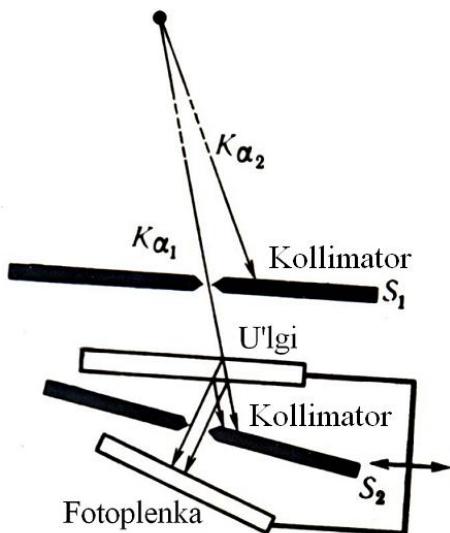
Бул айтылғанлардың барлығы да субдәнешелердин өлшемлери рентген трубкасының фокусының өлшеми болған f шамасынан үлкен болған жағдайларда ғана орынланады.



3-сүйрет. Фудживара усылы менен сүйретке түсириўде кристаллық блоктар арасындағы бурылыў мүйешин анықлаў ушын арналған схема [6] (бул сүйрет <http://vseslova.com.ua/word> сайтында да берилген).

2-§. Ланг усылы

Кристаллар рентгенографиясында кең тарқалған хәм монохромат рентген нурлары пайдаланылатуғын Ланг усылы салыстырмалы жуқа кристаллардағы кристаллық құрылыштардың дефектлерин үйреништік ушын қолланылады [7-8]. Бундай жуқа кристаллар ушын $\mu t < 1$ шәртиниң орынланыштық лазым. Бул теңсизликте μ арқалы кристалдың сыйықтық жутыштық коэффициенти, ал t арқалы оның қалындығы белгиленген. Бул усылда рентгентопографиялық сүйретке түсириштік схемасы 4-сүйретте берилген. Сыйықтық рентген нурлары дерегинен (4-сүйретте бул сыйық схема тегислигине перпендикуляр) шықкан рентген нурлары шашыратыштық аүхалына қойылған кристалға келип түседи. Брэгг (Брег) бағытында үлкен айыра алыштырылған жетиүүштік ушын нурланыштың тек $K\alpha_1$ кураушысы ғана пайдаланылады. Бул $K\alpha_1$ кураушысын спектрдин басқа бөлімдеринен айырып алыштық ушын рентген трубкасынан келишілік нурлар алдына S_1 санлағын қояды. Бул санлақтың кеңлигин сайлап алғанда рентген нурларының дәстесиниң жайылыштық мүйеші $K\alpha_1$ менен $K\alpha_2$ дублеттери арасындағы қашықтықтан киши болыштық керек. Фотопленка алдындағы S_2 санлағы болса тек дифракцияға ушыраған нурды ғанан өткөреди хәм пленканы трубкадан туруры келип түсириштік рентген нурларынан коргайды. Кристалдың үлкен областынан топографиялық сүйрет алыштық ушын үлгі менен пленкаға усы пленканың бетине параллель бағытта қайталанбалы-илгерилемелі қозғалыс (сканнерлеү) бериледи. Усының салдарынан кристалдың бетиниң үлкен бөлімдериниң ямаса беттин барлық бөлімдериниң үзликтік сүйреті алынады.



4-сүйрет.
Ланг усылы бойынша
рентгентопографиялық сүйрет алыштың
схемасы [9] (бул сүйрет
<http://vseslova.com.ua/word> сайтында да
берилген).

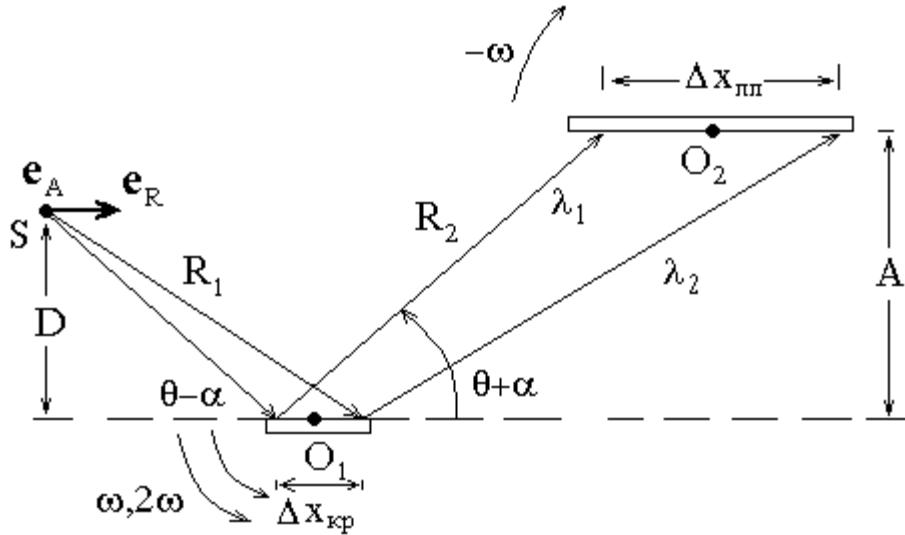
Алынған топограммаларда үлгидеги структуралық дефектлерди (мысалы дислокацияларды) қоршап түрған орталықтың сүйреті жоқарылған интенсивлікке ийе участкалар түрінде қөлиплемеди. Дислокациялардағы контрасттың пайда болыштының теориясы [10-13] жумысларда раёуажландырылған. Бул жумысларда дислокация сыйықтары әтирапындагы кристалды мозайкалық кристалл сырттында қарайды. Ал мозайкалық кристалларда болса рентген нурларының шашырауының кинематикалық теориясы орынлы болады хәм бундай үлгилерде биринши экстинкция бақланбайды [14-15]. Соныңтан бундай участкаларда шашыраған рентген нурлары дислокациялар жоқ орынлардағы шашыраған нурларға салыстырғанда үлкенирек интенсивлікке ийе болады. Соныңтан дифракциялық сүйреттеги бундай контрастты әдетте экстинкциялық контраст деп атайды.

Ланг усылында айырмамен дислокацияларды бақлау мүмкін. Бирақ бундай бақлаулар жүргизилетуғын кристаллық денелерде дислокациялардың тығыздығы 10^6 см^{-2} шамасынан үлкен болмашы керек [6].

3-§. Мүйешлилік сканнерлеү усылы

Ноқатлық деректен шыққан полихроматик рентген нурлары қолланылатуғын Шульц, Фудживара ҳәм монохромат рентген нурлары қолланылатуғын Ланг усылларының ең көзге түсетеуғын кемшиликлериниң бири үлкен экспозиция ўақыты болып табылады. Бул усыллар менен бир топографиялық сұйрет онлаған saat ўақыт керек болады.

Рентгентопографиялық усыллардың экспрессслигин (киши ўақыттар ишинде топографиялық сұйретлер алыў) арттырыў мақсетинде кристаллардың топографиялық сұйретин алыўды нурланыўдың характеристикалық спектрин қосымша түрде пайдаланыў усынылды [16-18]. Бундай усылдың оптикалық схемасы 5-сұйретте берилген.



5-сұйрет. Мүйешлик сканнерлеў усылының схемасы [16].

S арқалы рентген нурлары дереги, e_R ҳәм e_A арқалы сәйкес радиаллық ҳәм азимуталлық бағатылар (кейингиси сұйрет тегислигине перпендикуляр), R_1 ҳәм R_2 арқалы сәйкес дерек-үлгі ҳәм үлги-фотопленка қашықлықтары белгиленген.

S арқалы белгиленген ноқатлық рентген нурлары дерегинен рентген гониометрии көшерине орнатылған үлгиги келип түседи. Кристаллық үлгиден A қашықлығына жайластырылған фотопленкада Шульц усылындағы жағдайдағыдан ҳәр бир ўақыт моментинде кристалдың бетинин топографиялық сұйрети қәлиплеседи. Экспозиция барысында кристалл O_1 көшеринин дөгерегинде $\Delta\phi$ мүйешлик интервалында ω мүйешлик тезлиги менен сканнерленеди (бұны мүйешлик сканнерлеў деп атайды). Ал пленка болса курамалы түрде қозғалыўы керек. Ол O_1 көшери дөгерегинде 2ω мүйешлик тезлиги, ал O_2 көшери дөгерегинде $-\omega$ тезлиги менен қозғалады. Бундай қозғалыста фотопленканың бети қрнисталдың бетине параллель болып қалады, ал O_1 ноқатында дифракцияға ушыраған нур O_2 ноқатына келип түседи. Кристалдың ҳәр бир участасының топографиялық сұйрети ҳәр қыйлы ўақыт моментинде ҳәр қыйлы узынлықтағы толқынлар тәрепинен пайда етиледи. Бундай геометрияда сұйретке түсиргенде бир бириңен үстине түседи. Соныңтан сұйретти пайда етиўши толқын узынлықтары интервалына характеристикалық спектр сызығы киретуғын болса топограмма алыў ушын кететуғын ўақыт Шульц усылында топограмма алыў ушын керек болған ўақытқа салыстырғанда әдеўир кемейеди.

Кристалдың фрагментлериниң сұйреттеги үлкейиў коэффициентлері (1-3) ҳәм (1-4) формулалар жәрдеминде есапланады [18].

Егер дерек-үлгі ҳәм үлги фотопленка қашықлықтары R_1 ҳәм R_2 (яmasa A ҳәм D) изертленетуғын кристаллық үлгиниң сызықлы өлшемлерине салыстырғанда әдеўир үлкен болса, онда кристалдың ҳәр қыйлы ноқатлары арасындағы қашықлықтар R'_1 ҳәм R'_2 шамаларының өзгерисин аз деп есаплаўға, соның менен бирге бул қашықлықтарды R_1 ҳәм

R_2 қашыктықтарына тең деп қабыл етиў мүмкин. Бул усылда R_1 ҳәм R_2 шамалары өзгерисиз қалады, ал кристалдың сүүретин пайда етиўге қатнасатуғын толқын узынлықтары ушын θ мүйеши хәр қылыш мәнислерге иие болады. $\alpha \neq 0$ ҳәм $\alpha \neq \frac{\pi}{2}$ болған жағдайларда $P_R = P_R(\theta)$ ҳәм усыған сәйкес кристалдың сүүрети хәр бир толқын узынлығында өзине сәйкес P_R үлкейтиў коэффициенти менен бериледи. Усындай аүхалдың кесириңен мүйешлику сканнерлеў усылының сыйықлы ҳәм мүйешлик ажыраты алыўшылық қәбилетликтери Шульц усылының айыра алыў қәбилетликтеринен төмен болады.

Солай етип мүйешлик сканнерлеў усылы Шульц усылының дәл аналогы болып табылмайды. Бул усылдың ажыраты алыў қәбилетлиги үлгини сканнерлеў интервалы $\Delta\varphi$, θ , а мүйешлериниң функциялары болып табылады.

[18]-жумыста $\Delta\varphi \leq 2 - 3^0$ болған жағдайларда экспозиция ўақтының (топограмманы алыў ушын кететуғын ўақыт) Шульц усылындағы экспозиция ўақытытна салыстырғанда 5-10 есе кем болатуғынлығы көрсетилди.

Мүйешлик сканнерлеў камерасын изертленетуғын кристаллық үлги менен есаплағыштың тезликтери сәйкес ω ҳәм 2ω болған қәлеген рентген гониометрии тийкарында соғыў мүмкин. Бул питкериў қәнигелик жумысын орынлаў ушын ГУР-4 (УРС-50 аппараты), ГУР-5 (ДРОН-2 аппараты) ҳәм ГУР-8 (ДРОН-2 аппараты) рентген гониометрлері қолланылды.

4-§. Гейпара жуўмақтар

Биз жоқарыда рентген топографиясы усыллары болған Шульц, Фудживара, Ланг ҳәм мүйешлик сканнерлеў усылларының оптикалық өзгешеликтерин, өзлерине тән мүмкиншиликтарин көрип өттік. Шульц ҳәм Фудживара усыллары полихроматлық, Ланг усылы болса монохроматлық усыллар болып табылады. Мүйешлик сканнерлеў усылында кристаллық үлгиниң бетиниң топографиялық сүүретин алыў ушын характеристикалық рентген нурлары қолланылатуғын болса да сүүретти пайда етиў ушын көп сандағы толқын узынлықтары қатнасады.

Жоқарыд келтирилген рентгентопографиялық усыллардың жәрдеминде төмендегидей монокристаллардың курылышының төмендегидей структуралық дефектлерин, атап айтқанда кристалдың субструктурасының элементтеринин (кристаллық блоктар, олар арасындағы шегаралар жайластырыў дефекттери, дислокациялар ҳәм басқалар) формасы, өлшемлері, бир бирине салыстырғанда қандай мүйешлерге бурылғанлығын изертлеў мүмкин. Себеби рентгентопографиялық сүүретти кристаллық областтың фотопленка ямаса фотопластинкадағы сәүлеленийи деп қараў мүмкин [20]. Кристалдың топографиялық сүүрети майысқан болса, онда бундай унамсыз жағдайларды дифференциал геометрия принциптери тийкарында жоқ етиў мүмкин.

Шульц схемасы тийкарында топографиялық сүүретлер пайда ететуғын сыйлардың тийкарында экспресс болған мүйешлик сканнерлеў усылы ислеп шығылды. Мүйешлик сканнерлеў усылы Шульц усылының аналогы деп есаплаўымыздың себеби мүйешлик сканнерлеў усылында алынған топограммаларды Шульц бойынша алынған топограммалардай етип интерпретациялаудың мүмкинligинде. Жоқарыда айтылғанындей, соның менен бирге [20]-жумыстың авторларының көрсеткениндей, мүйешлик сканнерлеў усылында полихроматлық усылларға қараганда экспозиция ўақыты әдеўир кем, топограммалар бир текли ҳәм олар жоқары контарстылықта иие болады.

Жоқарыда келтирилген таллаўлар тийкарында төмендегидей жаңа мәселениң қойылышы мүмкин: Фудживара ҳәм мүйешлик сканнерлеў усыллары тийкарында жаңа рентгентопографиялық усылды ислеп шығыў мүмкин емес пе екен? Бундай жағдайда Ланг усылындағыдан қурамалы аппаратура жәрдеминде алынатуғын топограммаларды әпиўайы жоллар менен алыў мүмкин болар еди 1-, 4-5 сүүретлерди салыстырып көриў

керек). Бундай усылда кристаллық ұлғи, фотопленка мүйешлик сканнерленеди (Ланг усылында мүйешлик сканнерлеу жок), ал топографиялық сұйретлер болса ұлғи арқалы өткен дифракцияға ушыраған нурлар тәрепинен алынады.

Мүйешлик сканнерлеу усылында кристалдан өтиўши рентген нурлары тәрепинен топографиялық сұйреттиң қәлиплесиүи

5-§. Пайдаланылған эксперименталлық әсбап-ұскенелер

Оабораториялық жұмысты орынлауда пайдаланылған рентген нурларының дереклері. Экспериментлерди өткериү барысында өткір фокуслы БСВ-5 ямаса БСМ-1 рентген трубкасына ииे УРС-0,02 аппараты пайдаланылды. Бул аппарат еки блоктан туралы: турақты жоқары кернеўли дерек пенен басқарыў пульти ҳәм қорғаўшы қапқа иие штатив. Блоклар бир бири менен узынлығы 2 м болған жоқары кернеўли кабель менен тутастырылған. Корғаўшы қап рентген трубкасын салқынлатыўшы май орталығында орналастырыў ушын пайдаланылады.

Рентген трубкасы орнатылған қорғаўшы қап арнаўлы бағанаға (стойкаға) бекитиледи. Бул бағана рентген нурлары дегеринин жоқары көтерилиүин ямаса төмен түсирилиүин, сондай-ақ оның оң ҳәм шеп тәреплерге еркин түрде бырылыўын тәмийинләйді. Қорғаўшы қапты бағананың дөгерегинде ҳәм өзинин көшеринин дөгерегинде қәлеген мүйешке бурыў мүмкін.

Электр энергиясын жеткериip бериў ҳәм басқарыў блогы жоқары вольтли трансформатордан, кернеў стабилизаторынан ҳәм басқарыў панелинен туралды.

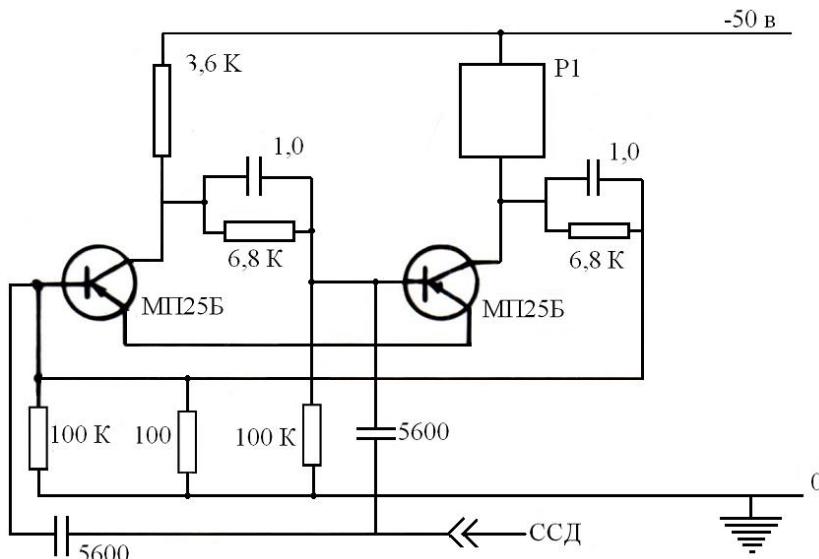
Рентген трубканың анодындағы кернеўдин максималлық мәниси 45 кв шамасына тең, ал анаод тоғының максималлық мәниси 450 микроампер (ма). Пайдаланыў қуýатлығы 140 вт шамасынан көп емес.

МАРС-2 аппараты (оны УРС-0,1 деп те атайды) рентгеноструктуралық анализ ушын арналған болып, қуýатлығы 0,1 кват, микрофокуслы рентген трубкасына (БСВ-7 типидеги) иие. Оның анодының өлшемлери $0,1 \times 0,1$ мм. Максималлық анод кернеўи 50 кв, анод тоғының шамасы 4,5 маға шекем.

Гониометрик дүзилис. Жоқарыда гәп етилгениндеги питкериү қәнигелик жұмысын орынлау ушын ушын ГУР-4 (УРС-50 аппараты), ГУР-5 (ДРОН-2 аппараты) ҳәм ГУР-8 (ДРОН-2 аппараты) рентген гониометрлері колланылды. Бул рентген гониометрлері (ГУР-5 ҳәм ГУР-8) жаңа типтеги рентген гониометрлері болып, кең мүйешлик интервалында (-90° тан 170° қа шекем) рентген дифракциялық сұйретке алыўды, рентгendifрактометриялық изертлеўлер жүргизиўге мүмкіншилик береди. Дифракциялық мүйештиң мәнисин $\pm 0,1^{\circ}$ дәллігінде анықлауға мүмкіншилик береди.

Экспериментлерди орынлау барысында ГУР-4 гониометри (басқа гогиометрлер де) мүйешлик сканнерлеу усылында рентген топограммаларын түсириў ушын қолланылды.

ГУР-4 гониометринде цикллық мүйешлик сканнерлеуди әмелге асырыў. Ең әпиўайы ГУР-4 рентген гониометринде цикллық сканнерлеуди әмелге асырыў ушын б-сұйретте көрсетилген электрлік схемасы тийкарында ислеўши электр әсбапы пайдаланылды. Бул схема еки ярым өткізгишли МП 25 Б триггеринен ҳәм Р₁ релесинен туралы: Әсбаптың кириў каналынан ССВ регистрациялауышы аппаратынан белгили бир үақыт аралықтарынан сына сыйқылы сигнал берилди. Усының салдарынан Р₁ релеси иске түсирилди ҳәм ГУР-4 гониометриниң айландырыўшы магнит майданының бағыты өзгертилди. Усының нәтийжесинде изертлениўши кристаллық үлгинин ҳәм фотопленканың айланыў бағыты өзгертилди.



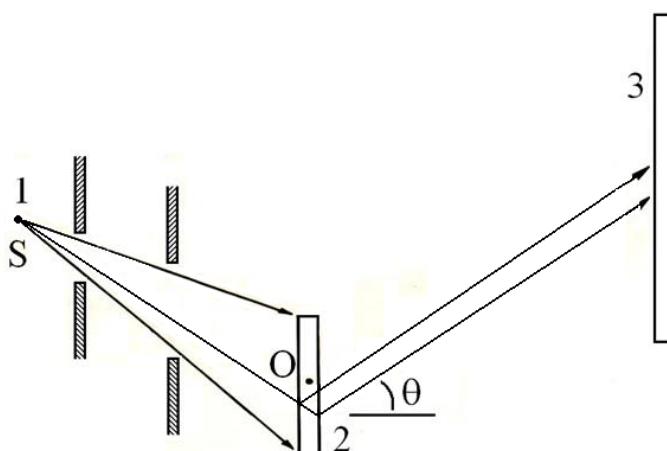
6-сүйрет. ГУР-4 рентген гониометринде пайдаланылған цикллық мүйешлиқ сканнерлеуди әмелге асырыў ушын пайдаланылған электрлік схема.

Блок 50 вольтлик туруылағыштан электр энергиясы менен тәмийинленди.

6-§. Мүйешлиқ сканнелеў усылында кристалдан өтиўши рентген нурлары тәрепинен топографиялық сүйреттиң алыныўы

4-параграфта айтылып өтилгениндей мүйешлиқ сканнерлеў усылы бойынша рентгенографиялық топографиялық сүйретлер алыў ушын изертленетуғын үлгининц ортасы арkalы өтиўши көшер дөгерегинде кристалдың ω мүйешлиқ тезлиги, ал фотопленканың сол көшердин дөгерегинде 2ω мүйешлиқ тезлиги менен айланыўын тәмийинлеўимиз керек. Усыған байланыслы экспериментлерди өткериў ушын улыўма мақсетлер ушын арналған УРС-50ИМ рентген дифрактометриниң қурамына кириўши ГУР-4 рентген гониометринен пайдаланылды.

7-сүйретте топограммаларды алыўдыңсхемасы көрсетилген. Рентген гониометриниң көшерине жайластырылған кристалл 2 ге 1 арқалы белгиленген рентген нурларының нокатлық дерегинен тарқалыўшы толқын келип түседи. Дирфакцияға ушыраған нурлар нурлардың тарқалыў бағытына перпендикуляр қойылған 3 фотоластинкада кристалдың сүйретин қәлипластрииўши дифракциялық дақ пайда етеди. Экспозиция ўақытында кристалл О көшериниң дөгерегинде $\omega \pm \Delta\theta/2$ интервалында ω мүйешлиқ тезлиги менен сканнерленийи керек. Кристалдың айланыў барысында фотопленканы қозгалыссыз калдырыўға да, гониометр көшери дөгерегинде белгили бир мүйешлиқ тезлик пенен сканнерлеў де мүмкин. Бул қолланылған усылдың радиал бағыттағы үлкейтиў қәбилетлигинин өзгерисине алып келеди. Соның менен бирге пленканың бетин үлгининц бетине параллель етип те қойыў мүмкин. Бирақ бундай өзгерислердин ақыбетинде алынған нәтийжелерде принципиаллық өзгерислер жүз бермейди. Бул жағдайда усылдың радиал бағыттағы үлкейтиў коэффициентиниң мәниси өзгереди.



7-сүйрет. Мұйешлик сканнерлеў усылында рентгентопографиялық сүйретке түсириўдің оптикалық схемасы.

1 – рентген нурларының ноқатлық дереги, 2 – изертленетуғын үлги, 3 – фотопленка, О – үлги менен фотопленканың айланыў көшери, θ арқалы дифракциялық мүйештиң мәниси белгиленген.

Биз усынып атырған усылда кристаллық үлгинин ҳәр бир участкасының сүйрети ҳәр қайлы толқын узынлықтары тәрепинен пайда болады. Таллаўлар сүйретке түсириўдің усындай геометриясында бир бириниң үстине түспейтуғынлығын көрсетеди. Соныктан 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 узынлықтары интервалына характеристикалық рентген нурлары киретуғын болса (мысалы Кβ – спектраллық сызығы), онда полихроматлық нурлардың фонында кристалдың топографиялық сүйрети пайда болады. Усының менен бирге топограмманы алыў ушын зәрүрли болған ўақыттың шамасы айтартылтай кемейеди.

8-сүйретте өтиўге тийкарланған мүйешлик сканнерлеў усылың оптикалық схемасы келтирилген. Шашыратыўшы атомлық тегисликлер үлгинин бетине перпендикуляр жайласқан. Сүйреттеги аўхал $2d \sin \theta = n\lambda$ Вульф-Брэгг шәрти кристалдың дәл ортасында орынланатуғын жағдайға сәйкес келеди. Усы моментте фотопленкада гониометрдин көшерине параллель болған дифракциялық дақ пайда болады. 8-сүйреттен усы сызықтың кеңлигинин үлгинин қалыңлығына байланыслы болатуғынлығы көринип тур. Үлгинин толық сүйретин алыў ушын кристалды O_1 көшеринин дәгерегинде $\pm \Delta\phi/2$ мүйешине сканнерлеў керек (яғнай үлгинин толық бурылыш мүйеши $\Delta\phi$ шамасына тең).

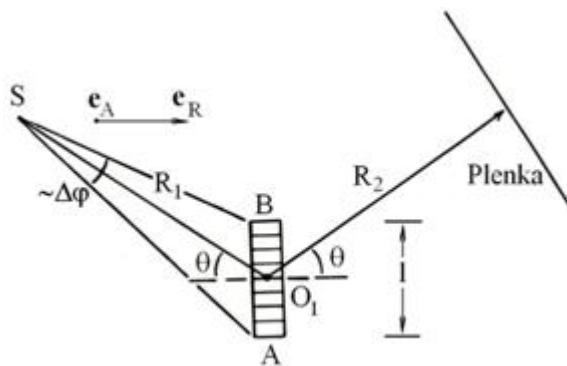
$\Delta\phi$ мүйешинин шамасы үлгинин өлшемлерине ҳәм рентген нурлары дереги менен изертленетуғын үлгиге шекемги аралықта байланыслы. – сүйретте көринип турғанындей, егер кристалдың бети келип түсиўши рентген нурларының тарқалыў бағытына перпендикуляр болса, онда $\Delta\phi$ ушын мынадай аңлатпаны аламыз:

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

Бул аңлатпада l арқалы сызылма тегислиги бағдарындағы үлгинин узынлығы, R_1 арқалы рентген трубкасының фокусынан O_1 ноқатына шекемги қашықтық белгиленген. Улыўма жағдайда $\alpha \neq 90^\circ$ мәнисине ийе боламыз ҳәм мынаған ийе боламыз:

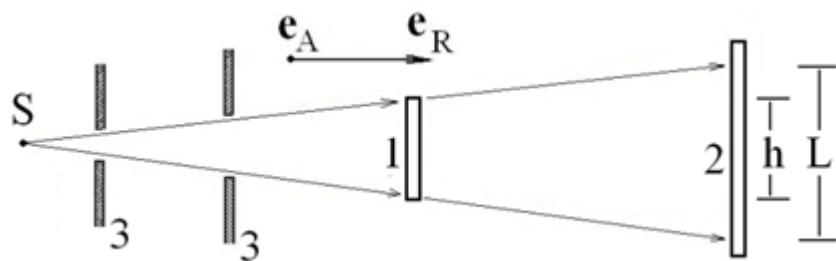
$$\Delta\phi = \arctg \frac{l \cos \theta}{2R_1}. \quad (2-2)$$

Биз бул жерде ҳәм буннан кейин де изертленетуғын үлги менен рентген нурларын шағылыштыратуғын тегисликлер арасындағы мүйеш 90° қа тең болған жағдайларды қараймыз, яғнай енди $\alpha = 90^\circ$ деп есаплаймыз.



8- сүйрет. Мүйешлик сканнерлеў усылының оптикалық схемасы.

S арқалы рентген нурларының дереги, e_R арқалы радиал бағыт, e_A арқалы азимутал бағыт (сызылма тегислигине перпендикуляр), R_1 ҳәм R_2 арқалы дерек-үлги ҳәм үлги-фотопленка қашықлықтары, АВ арқалы изертленетуғын кристалл (үлги). Фотопленка Plenka деп белгиленген.



9- сүйрет. Азимутал бағытта үлкейтиў коэффициентин анықлау ушын зәрүрли болған сүйрет. S арқалы рентген нурларының дереги, 1 арқалы кристаллық үлги, 2 арқалы фотопленка, e_R арқалы радиал бағыт, e_A арқалы азимутал бағыт (сызылма тегислигине перпендикуляр), 3 арқалы саңлақлар (коллиматорлар) белгиленген.

Мүйешлик сканнерлеў усылының азимутал бағыттағы үлкейтиў коэффициенти 9-сүйрет жәрдемінде анықланады. Бул сүйретте $\frac{L}{R_1+R_2} = \frac{h}{R_1}$ теңлигинин орынланатуғынлығы көринип тур. Бул аңлатпада L арқалы сүйреттиң бийиклигі, ал h арқалы изертленип атырған үлгинин бийиклиги белгиленген. R_1 ҳәм R_2 шамалары сәйкес анод-үлги ҳәм үлги-фотопленка қашықлықтары. Демек

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

аңлатпасына иие боламыз. Радиал бағыт ҳәм фотопленка қозғалмай туратуғын болған жағдай ушын (бул ҳақында келеси параграфта толығырақ гәп етиледи)

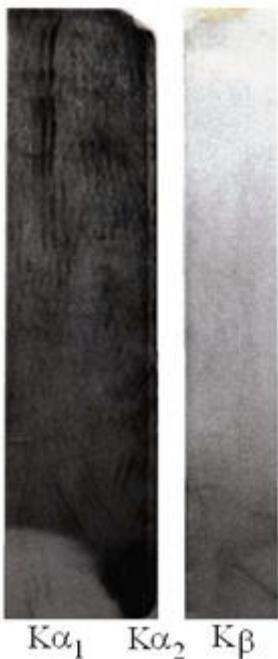
$$P_R = \frac{R_2}{R_1} - 1 \cos \theta \quad (2-4)$$

аңлатпасына иие боламыз. Сонықтан

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

хәм улыўма жағдайда кристалдың фотопленкадағы сүйрети конформлық бола алмайды хәм кристалдың фрагментеринин сүйреттеги формалары майысқан болып шығады.

Биз бул жерде биз қарап атырған рентгентопографиялық усылда да, кристаллық үлгининң бетининң сүйретин түсириўши мүйешлик сканнерлеў усылында да $P_R = P_R(\theta)$ байланысының орын алатуғынлығына итибар беремиз. Бул жағдай мыналарга байланыслы: кристалдың сүйрети ҳәр қандай толқын узынлығына ийе рентген толқынлары тәрепинен ҳәр қыйлы P_R коэффициентлери менен пайда етиледи. Бул унамсыз жағдай усылдың сызықлы айыра алыўшылық уқыбын да, мүйешлик айыра алыўшылық уқыбын да басқа рентгентопографиялық усылларға (мысалы Шульц ҳәм Ланг усыллары) салыстырғанда төменлетеди.



10-сүйрет.

Мүйешлик сканнерлеў усылы бойынша алынған кварц кристаллының АТ-кесиминин топографиялық сүйрети. $K\alpha_1$ менен $K\alpha_2$ спектраллық нурланыўы тәрепинен пайда етилген топографиялық сүйретлер бир бири менен қабатласады (биринши сүйреттиң оң тәрепинде еки сүйреттиң қабатласқанлығы көринип түр). Ал $K\beta$ нурланыўы болса өз алдына сүйрет береди.

10-сүйретте кварц кристаллының топограммасы көрсетилген. Бул топограмма үш сүйреттиң қосындысынан турады. Бир биринин үстине түскен еки сүйрет рентген трубкасының мыс анодының $K\alpha_1$ ҳәм $K\alpha_2$ спектраллық нурланыўы тәрепинен пайда етилген. Ал он тәрептеги әззирек сүйретти $K\beta$ нурланыўы пайда еткен (мыс аноды тәрепинен қоздырылған рентген нурлары ушын $\lambda_{K\alpha_1} = 1,5442740$, $\lambda_{K\alpha_2} = 1,5409290$ ҳәм $\lambda_{K\beta} = 1,3922320$ ангстрөм).

Тилекке қарсы мыс анодына нурланатуғын $K\beta$ рентген нұры 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.

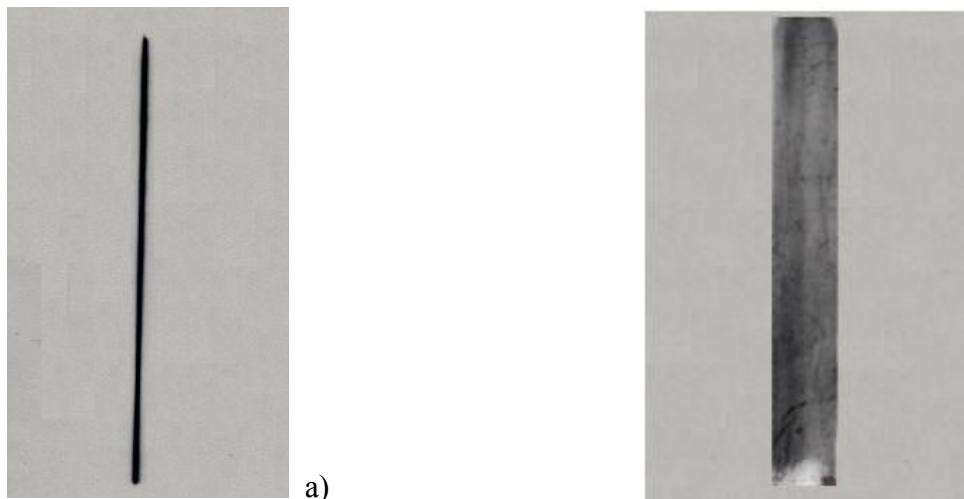
Z	Symbol	A	$K\alpha_2$	$K\alpha_1$	$K\beta_3$	$K\beta_1$	References
12	Mg		9.89153 (10)	9.889554 (88)			(a)
13	Al		8.341831 (58)	8.339514 (58)			(a)
14	Si		7.12801 (14)	7.125588 (78)			(b)
16	S		5.374960 (89)	5.372200 (78)			(b)
17	Cl		4.730693 (71)	4.727818 (71)			(b)
18	Ar		4.194939 (23)	4.191938 (23)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

Әлбетте $\lambda_{K\beta_1}$ дин қасында $\lambda_{K\beta_2}$ спектраллық сызықтың бар екенлиги биз усынып аттырған усылдың әхмийетин төменлетеди.

Изертленетуғын кристаллық үлгилердин сызықты өлшемлери киши (1 cm^2 шамасынан үлкен емес) ҳәм киши дифракциялық мүйешлерде (дифракциялық мүйештиң мәниси $\theta < 15^\circ$) Ка ҳәм Кβ нурлары тәрепинен пайда етілген сүүретлердин бир бириниң үстине түсіүи орын алады. Бул унамсыз жағдайдан қашыў мақсетинде бизиң қолланыўымыз ушын керекли болған дифракциялық мүйештиң мәнислериниң интервалын табамыз. Әпиўайы геометриялық таллау θ дифракциялық мүйешиниң төменги шәртті қанаатландырыўының керек екенлигин көрсетеди:

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

Откерилген экспериментлер (2-3), (2-4) ҳәм (2-5) формулалардың дұрыс екенлигин тастыйылады.



11-сүүрет. Улги-фотопленка арасындағы қашықтың R_2 ниң ҳәр қыйлы мәнислеринде алынған топографиялық сүүретлер.

a) $R_2 = 14 \text{ см}$, b) $R_2 = 25 \text{ см}$.

Рентген нурлары оптикасында кристалл арқалы тутас спектрге иие рентген нуры өтетуғын болса, бул нурдың радиал бағытта фокусланатуғынлығы белгили [22-23]. Бул кубылысты бақлау ушын ҳәм фокуслық қашықтықты экспериментте өлшеў ушын топографиялық сүүретке түсіриўлердин бир сериясы өткерилди. Бул жағдай 12-сүүретте

демонстрацияланған. 12-а сүйретте алынған топограмма $R_2 = 14$ см болғанда, ал екинши топограмма $R_2 = 25$ см болғанда түсирилди. Есаплаўлар еки жағдайда да фокус пенен ұлғи арасындағы қашықтықтың 13 см болғанлығын ҳәм бул қашықтықтың R_1 дин шамасына тең екенligин көрсетти (бизиң экспериментлеримизде R_1 дин шамасы ҳақыйқатында да 13 см ге тең еди). Демек (2-4) формуладағы $R_1 = R_2$ болған жағдайда усылдың радиал бағыттағы үлкейтиү коэффициенти болған P_R шамасының нолге тең болатуғынлығының (яғни $R_1 = 0$) себеби полихромат рентген нурларының гониометрдиң көшерине параллель болған сзыққа фокусланыўы болып табылады екен.

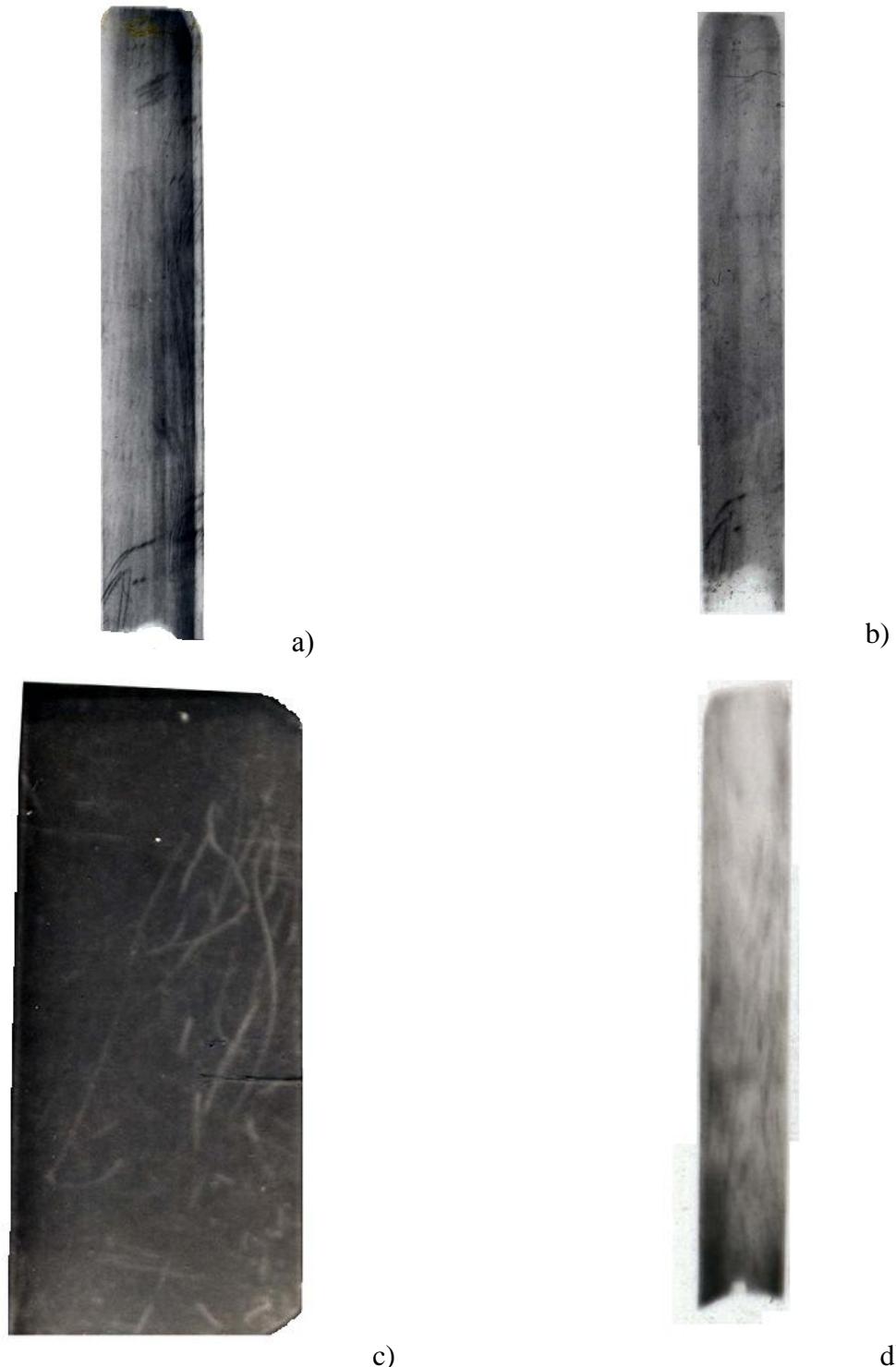
Солай етип $\theta < 45^\circ$ болған жағдайларда азимутал бағытта созылған сзықтың бойынша полихромат рентген нурларының фокусланыўы орын алады екен. Бул фокусланыўдың себеби пайдаланылған рентген спектриниң үзлиksизлиги болып табылады.

Монохромат нурланыўды пайдаланғанда ҳәм кристалды $\Delta\phi$ мүйешлик интервалында сканнерлегенимизде кристалдың ҳәр қыйлы нокатларынан шыққан барлық дифракцияға ушыраған нурлар полихроматик нурланыў ушын фокуста жататуғын бир сзық арқалы өтеди. Соныңтан $R_2 > R_1$ шәрти орынланғанда топограммада кристалдың 180° қа айландырылған сүйрети пайда болады (яғни радиал бағыттағы оны менен шеп тәреpi алмасқан, басқа сөз бенен айтқанда 8- ҳәм 9-сүйретлердеги О нокатының әтирапында 180° градусқа бурылған).

Бул жумыста Фудживара усылын менен өтиүге тийкарланған мүйешлик сканнерлеў усылы менен салыстырыў болып табылады. Усы усыллардың өзгешеликтерин ҳәм артықмашлығын анықлаў ушын дифракциялық экспериментлер сериясы өткерилип, олар төмендегидей нәтийжелерди берди:

1). Радиал бағытта кристаллдың өлшеми менен оның сүйретиниң өлшеминиң бирдей болыўы ушын кристалл менен фотопленканың бирдей мүйешлик тезлик пенен сканнерленийи керек. Бундай жағдайда кристаллық ұлғи ω мүйешлик тезлиги менен, ал фотопленка болса сол бағытта 2ω мүйешлик тезлиги менен қозғалыўы шәрт. Фудживара ҳәм мүйешлик сканнерлеў усылы менен алынған топографиялық сүйретлерди бир бири менен салыстырыў кристалл менен фотопленка биргеликтे қозғалғанда ұлғи менен топографиялық сүйреттин үлкнеликтери радиаллық бағытта базы бир шамаға айрылады (мысалы $R_2 = 25$ см болғанда мүйешлик сканнерлеў усылында P_R дин шамасы Фудживара усыныңдағыға қарағанда әдеўир үлкен). Геометриялық таллаў бундай айырманың пайджаланылған рентген нурларының қурамына байланыслы екенлигин көрсетеди. Фудживара усылында үлгинин бир бирине қарама-қарсы шетлеринде (8-сүйреттеги А ҳәм В нокатлары) дифракциялық шағылышыў ҳәр қыйлы дифракциялық мүйешлер (Брэгг мүйешлері менен) менен болады. Бул рентген нурларының бир сзыққа фокусланыўын болдырады ҳәм сзыылмаға параллель болған бағытта үлгиден алынатуғын сүйреттиң өлшемлерин киширейтеди. Ал мүйешлик сканнерлеў усылында болса кристаллық үлгинин барлық нокатларында дифракциялық мүйетиң мәнислери бирдей болады ҳәм усыған сәйкес үлкейтиү коэффициенти бул жағдайда салыстырмалы үлкен мәниске ийе болады.

2). 12-сүйретте Фудживара усылы менен мүйешлик сканнерлеў усылларындағы контрастлықтың ҳәр қыйлы болатуғынлығы көрсетилген. 12-а ҳәм 12- сүйретлерди салыстырыў мүйешлик сканнерлеў усылында кристалдығы структуралық дефектлердин сүйретлериниң үлкен контрастқа ийе болатуғынлығын анық көрсетеди. Фудживара усылы менен алынған топограммада контактлық төменлеў (тап усындай жағдай Шульц усылы менен шашыраўға тийкарланған мүйешлик сканнерлеў усылын салыстырғанда да бақланған еди). Бул жағдай мүйешлик сканнерлеў усылының (яғни монохромат рентген нурларын қолланыўдың) Фудживара усылының алдындағы артықмашлығын дәлиллейді. Турпайырақ баҳалаўлар мүйешлик сканнерлеў усылында контарастлықтың Фудживара усылындағыға қарағанда 1,5 есе үлкен болатуғынлығын көрсетеди.



12-сүйрет. Бир кварц кристаллының өтиўге тийкарланған мүйешлик сканнерлеў (а), Фудживара (б), Ланг (д) ҳәм шашыраўға тийкарланған мүйешлик сканнерлеў (с) усылларының жәрдеминде алынған сүйретлери (а, б, с топограммалары мыс анодының нурланыўында, д сүйреттеги топограмма молибден анодының нурланыўында алынды).

3). 12-сүйретте көрсетилген топограмма шашыраўға тийкарланған мүйешлик сканнерлеў усылы менен [21] де келтирилген схема бойынша алынды. Сүйретлерди салыстырып көриў бизиң усынып атырған схемамыз бойынша топограммалар тусирилгенде салыстырмалы бай информация алынатуғының көрсетеди.

4). 12-d сүйретте алынған рентгентопографиялық сүйрет КРС камерасында молибден анодының нурланыўында тусирилди. Топографиялық сүйретте

структуралық дефетлердин излери (бир теклиликтин жоқлығы, сзыықтар ҳәм басқалар) бақланады) анық көринип тур. Бул жағдай Ланг усылының ажырата алыўшылық қәбилетлигинин мүйешлик сканнерлеў усылының ажырата алыў қәбилетлигинен әдеўир жоқары екенлигин көрсетеди.

5). Экспериментлер мүйешлик сканнерлеў усылында экспозиция ўақытының $\sim 2\text{-}4$ саатты қурайтуғынлығын көрсетти. Бул Фудживара усылындағы салыстырғанда экспозиция ўақытының шама менен 4 есе кем екенлигин көрсетеди (бидей рентген нурлары дерегин пайдаланғанда). Рентген нурлары дерегинин (рентген трубкасының) бидей қуўатында ҳәм бидей болған R_1 менен R_2 лерде кварц кристалларын сүүретке алғанда экспозиция ўақыты ушын төмендегидей нәтийжелер алынды:

	Усылы	Экспозиция ўақыты
1	Мүйешлик сканнерлеў усылы (єтиўши 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 сзыықтар, жолаклар ҳәм басқалар кристаллық ұлгидеги жоқары кернеўли участкаларға сәйкес келеди. Бул участкалар экстинкция эффектинин ҳәлсиреўин тәмийинлейди ҳәм 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:

$$\rho_m = \frac{N^2 \lambda^3}{2\mu} F^2 \frac{e^2}{m c^2}^2 \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2 \sin 2\theta}. \quad (2-6)$$

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 иие боламыз. Бул аңлатпаларда N арқалы кристалдың көлеминин бирлигиндеги элементар қутышалар саны, F арқалы сол элементар қутышалардың шашыратыў факторы (структуралық фактор). θ арқалы дифракциялық мүйеш, μ арқалы сзыықлы ҳәлсиреў коэффициенти, $\frac{e^2}{m c^2} = 2,818 \cdot 10^{-13}$ арқалы электронның класскалық радиусы белгиленген. (2-6) менен (2-7) ни салыстырып мынадай санлық мағлыўматларды аламыз:

$$\frac{\rho_m}{\rho_i} = \frac{\frac{N^2 \lambda^3}{2\mu} F^2 \frac{e^2}{m c^2}^2 \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2 \sin 2\theta}}{\frac{8}{3\pi} N F \lambda^2 \frac{e^2}{m c^2} \frac{1 + \cos 2\theta}{2 \sin 2\theta}}.$$

Бул қатнасқа кварц (SiO_2) ушын сәйкес мәнислерди қойсақ (яғни $F \approx 50$, $N \approx 10^{21}$ см⁻³, $\lambda = 1,5418 \cdot 10^{-8}$ см, $\mu = 200$ см⁻¹), онда

$$\frac{\rho_m}{\rho_i} = \frac{\frac{N^2 \lambda^3}{2\mu} F^2 \frac{e^2}{m c^2}^2 \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2 \sin 2\theta}}{\frac{8}{3\pi} N F \lambda^2 \frac{e^2}{m c^2} \frac{1 + \cos 2\theta}{2 \sin 2\theta}} = 10 \quad (2-9)$$

шамасын аламыз. Демек мозайкалы кварц кристаллары құрылышы идеал жетилсken квартқа салыстырганда рентген нурларын шама менен 10 есе күшлирек шашыратады екен. Бизин әдебайымызда изертленлиген кристаллардың ҳәр қыйлы участкаларында дифракцияланған рентген нурларының интенсивлігі бир бириңен 2-3 есе парық қылады. Бул жағдай алынған эксперименталлық мағлыуматлардың есаплаўлардың нәтижелерине қайшы келмейтуғынлығын көрсетеди.

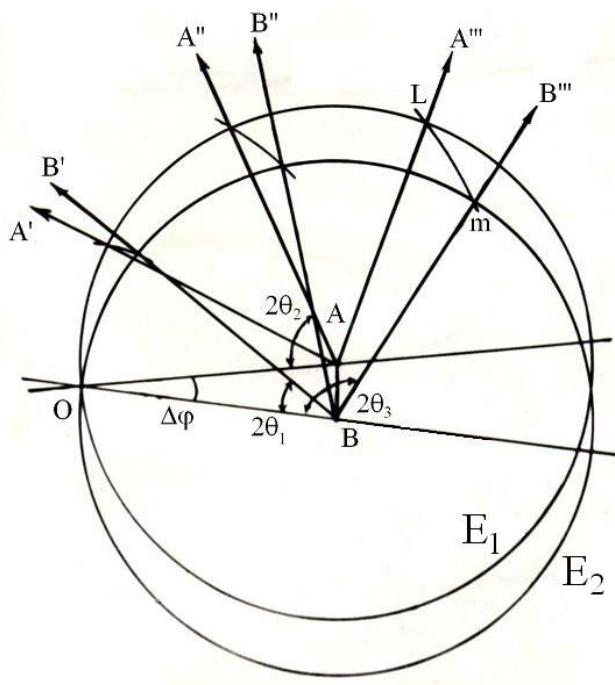
Биз рентгенографиялық сүйреттің сапасының пайдаланылған рентген нурының узынлығына байланыслы екенligин атап өтепиз. Басқа сөз бенен айтқанда сызыклы жутылыш коэффициенти μ толқын узынлығы λ нин функциясы болып табылады. Соныңтан бул мәселени айқын түрде шешиү мақсетинде ҳәр қыйлы толқын узынлықтарында экспериментлер өткериү зәрүрлиги пайда болады. Бирақ техникалық қыйыншылықтарға байланыслы бундай экспериментлер исленбеди.

7-§. Дифракциялық схеманың кери кеңисликте интерпретациясы

Қәлеген дифракциялық экспериментти (оптикалық рентгенографиялық, электронлық микроскопиялық, нейтронографиялық, атомлық ямаса ионлық ҳәм басқалар) кери кеңисликте интерпретациялаү бул эксперименттиң коргизбелилігін жоқарылатады ҳәм оның тийкарғы физикалық мәнисин терең түснүүге мүмкиншилик береди.

13-сүйретте мүйешлик сканнерлеү топограммаларының кери кеңисликте пайда етилийиниң схемасы көрсетилген. E_1 менен E_2 лер Эвалъд сферасының еки аүхалына сәйкес келеди.

Таллаўларымыздың эпиўайы болыўы ушын Эвалъд сферасын O көшери дөгерегинде базы бир $\Delta\varphi$ мүйешлик интервалында қозғалатуғын, сканнерленетуғын деп есаптаймыз. Эвалъд сферасының радиусы $\frac{1}{\lambda}$ ге тең болып, λ арқалы характеристикалық нурланыўдың бириңиң толқын узынлығы белгиленген.



13-сүйрет.

Мүйешлик сканнерлеү усылын кери кеңисликте интерпретациялаү. О арқалы координата басы, А һәм В арқалы E_1 һәм E_2 Эвалъд сфераларының орайлары, θ_1 , θ_2 , θ_3 арқалы дифракциялық мүйешлер белгиленген.

Кери пәнжерениң түйинлери mL типиндеги сызықтар бойлап созылған.

А хәм В ноқатларына кристаллық үлгиниң шетки ноқатлары сәйкес келеди. ОА менен ОВ сыйықлары арқалы А хәм В ноқатларына келип түсетеуғын рентген нурлары белгиленген. AA', BB', AA'', BB'' хәм басқалар дифракцияға ушыраған нурларға сәйкес келеди.

$\theta > 45^0$ мүйешлерде рентген сүүретиниң фокусланыуының орын алмайтуғынлығы көринип тур. Фокусланыу $\theta < \theta_\phi$ мүйешлеринде орын алыш, бундай жағдайда BB' нұры А ноқаты арқалы өтеди. Соныңтан $\theta_\phi = 45^0 - \Delta\varphi$. Жоқарыда айтылып өтилгениндей $\Delta\varphi$ мүйешиниң шамасы кристаллық үлгиниң радиал бағыттағы өлшемлеринен ғәрэзли [(2-2)-формула].

Усылдың радиал бағыттағы ажыраты алыў коэффициенти P_R дин AA' хәм BB' нурлары арасындағы мүйеш $\Delta\varphi$ хәм дифракциялық мүйеш θ арқалы арықланатуғынлығын жокарыда айтып өткен едик. Усыған байланыслы P_R коэффициентиниң $\Delta\varphi$ хәм θ шамаларынан ғәрэзлигин анықтаймыз. R_2 арқалы бурынғыдай үлги менен фотопленка арасындағы қашықтықты белгилеймиз (5-сүүретке қараңыз).

14-сүүретте $\theta = 0$ болғанда фокуслық қашықтықтың Эвалъд сферасының радиусына тең болатуғынлығы көринип тур. $\theta = 90^0 - \Delta\varphi$ шәрти орынланғанда фокус кристалдың бети тегислигінде жайласады. Соныңтан $\theta = 0$ хәм $R_2 = 2R_1$ шәртлери орынланғанда $P_R = 0$. Ал $\theta = 90^0$ хәм $R_2 = R_1$ шәрти орынланғанда $P_R = 2$. Улыўма жағдайда, $\theta = 0$ хәм $R_2 > R_1$ орынланған жағдайда мынадай теңликлерден пайдаланамыз:

$$L = 2 R_2 - R_1 \tan \Delta\varphi, \quad (2-9)$$

$$l = \frac{2R_1 \tan \Delta\varphi}{\cos \theta}. \quad (2-10)$$

Соныңтан

$$P_R = \frac{L}{l} = \frac{L = 2 R_2 - R_1 \tan \Delta\varphi}{\frac{2R_1 \tan \Delta\varphi}{\cos \theta}} = \frac{R_2}{R_1} - 1 \cos \theta = \frac{R_2}{R_1} - 1. \quad (2-11)$$

Буннан $R_2 = 2R_1$ шәрти орынланғанда ҳақыйқатында да $P_R = 1$ теңлигинин орынланатуғынлығына исенемиз.

$\theta = 90^0$ болған жағдайда

$$\frac{l}{R_1} = \frac{L}{R_1 + R_2}. \quad (2-12)$$

Демек

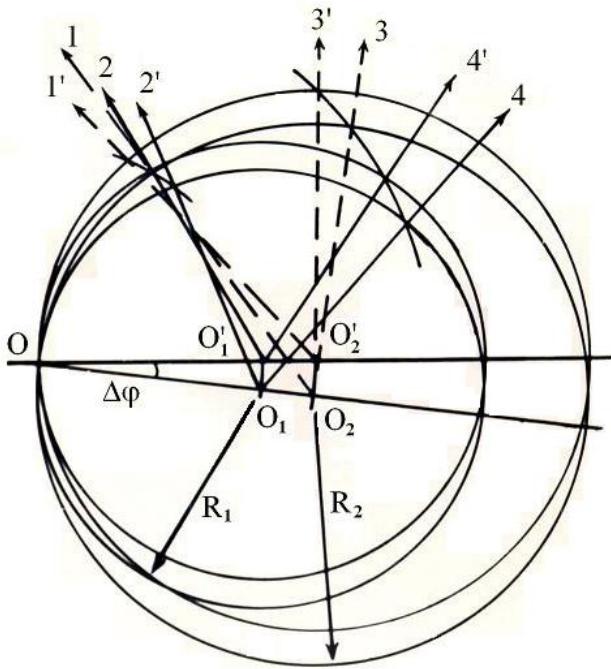
$$P_R = \frac{L}{l} = \frac{R_1}{R_2} + 1 \cos \theta = 0. \quad (2-13)$$

Бул жағдай мынаны аңғартады: $\theta = 90^0$ болғанда үлги тегислиги рентген трубкасының фокусына карап турады хәм сүүреттің өлшемлери усылдың геометриялық өзгешеликтеринен емес, ал кристалдың қалыңтығынан ғана ғәрэзли болады (бундай жағдайда дифракциялық сүүрет алынбайды деген сөз).

Солай етип P_R шамасы дифракциялық мүйештиң 0^0 тан 90^0 қа шекемги интервалында $\frac{R_2}{R_1} - 1$ дең 0 ге шекем өзгереди екен. Соныңтан улыўма жағдай ушын

$$P_R == \frac{R_2}{R_1} - 1 \cos \theta \quad (2-14)$$

формуласынан пайдаланамыз. Бул формулалың өткен параграфта келтирилип шығарылғанлығын еске түсиремиз. Енди характеристикалық рентген нурларының дублетлериниң тәсирин қарап шығамыз. Буның ушын Ka_1 ҳәм Ka_2 спектраллық сзықлары ушын Эвалъд сфераларын қарап өтемиз.



14-сүйрет.

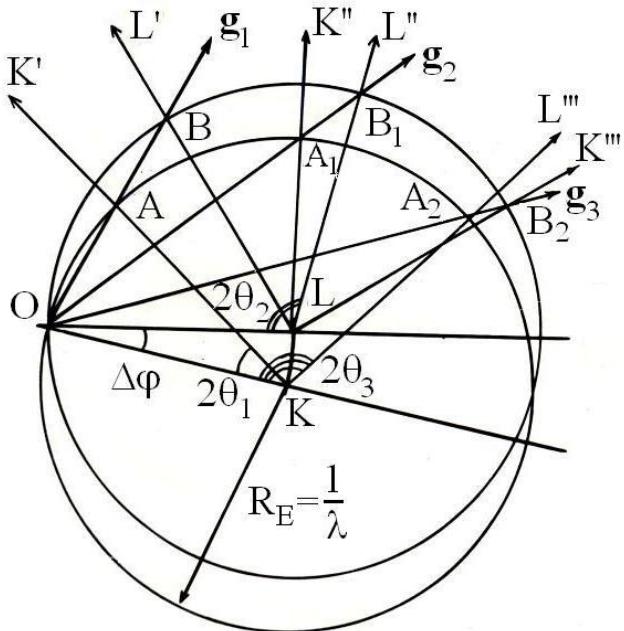
Мүйешлик сканнерлеў усылында рентген нурларының характеристикалық нурланыўының сүйреттің пайда болыўына тәсирин түсіндіриў ушын арналған сүйрет.

$R_1 = \frac{1}{\lambda_1}$, $R_2 = \frac{1}{\lambda_2}$. O_1 менен O_2 нокатлары Эвалъд сфераларының орайна сәйкес келеди.

14-сүйретте R_1 менен R_2 арқалы рентген нурларының спектриниң Ka_1 ҳәм Ka_2 спектраллық сзықларына сәйкес келиўши Эвалъд сфераларының радиуслары белгиленген. Ҳәр бир характеристикалық нурланыў ушын өз алдына сүйреттің сәйкес келетуғынлығы көринип түр. Бул сүйретлер O_1 ҳәм O_1' , O_2 ҳәм O_2' типиндеғи сзықлар менен шекленген.

Жоқарыда келтирилген схемалар тийкарында Фудживара усылын кери кеңисликте интерпретациялаў (түсіндіриў) мүмкіншилигине ийемиз. Илимий әдебиятларды үйрениў бундай интерпретациялаудың изертлеўшилердин дыққатынан шетте қалғанлығын көрсетеди.

Бул жағдайда полихромат нурлардың пайдалыўының себебинен радиусы үзлиksiz түрде өзгеретуғын Эвалъд сфераларын қоланыўымыз керек деп болжаўымыз мүмкін. Бирақ усындағы жоллар менен геометриялық таллаў үлкен кыйыншылықтарды пайда етеди. Усыған байланыслы бир Эвалъд сферасы менен үзлиksiz спектрге сәйкес келиўши кери пәнжерениң созылған радиус-векторларын пайдаланамыз.



15-сүйрет.

Кери кеңисликте Фудживара усылын сәүлелендириў.

$\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2$ һәм \mathbf{g}_3 белгилери арқалы кери пәнжерениң радиус-векторлары белгиленген.

Усынылып атырған схема 15-сүйретте берилген. Бул сүйретте $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2$ һәм \mathbf{g}_3 лер кери пәнжерениң үш радиус-векторына сәйкес келеди. AB_1, A_1B_1 һәм A_2B_2 белгилери менен шекленген вектордың кесиндилири ушын дифракция шәрти орынланады. Ноқаттың сүйрети KK' , KK'' һәм KK''' нурлары түрепинен пайда етиледи, ал L ноқатынан болса LL' , LL'' , LL''' нурлары дифракцияға ушырайды. Сонлықтан биз мынадай жуўмақ шығарамыз: биз қарап атырған жағдайда да, ұлгинин бетиндеги рентген нурларының шашырауын пайдаланатуғын мүйешлик сканнерлеў усылында да фотоленканың (топограмманың) бетиндеги дифракциялық сүйрет бойынша толқын узынлығы тұрақты қалатуғын сзықтардың кесиндилиринен пайда болады. Бундай сзықтардың теңлемеси кеңнен тарқалыўшы дәсте усылы ушын көлтирилип шығарылған еди [3]. Усыннан биз тәрепинен усынылып атырған мүйешлик сканнерлеў усылын да, Фудживара усылын да [2,9] жумысларда көлтирилген таллау тийкарында толық түсіндіриў мүмкін деп жуўмақ шығарамыз. Биз бундай таллауды өткермеймиз, себеби бундай физикалық таллау питкериү қәнигелик жумысының шеклеринен шығып кетеди.

8-§. Мүйешлик сканнелеў усылын кристаллографиялық дифракциялық экспериментте қолланыў

Жоқарыда көлтирилген параграфларда бир неше рет усынылып атырған мүйешлик сканнерлеў усылының өзгешеликтери атап етилди. Бирақ оның мүмкіншиликлерине дұрыс түрде баҳа бериў ушын оның нәтийжелерин басқа да усыллар менен алынған нәтийжелер менен салыстырып көриў зәрүр болады. Бундай салыстыруды биз төмендегидеги түрде көлтиремиз:

Лант усылы.

Кристаллық ұлгинин қозғалыўы: илгерилемели, қозғалыў жолының узынлығы сол бағыттағы кристаллық ұлгинин узынлығында.

Фотопленканың қозғалыўы: кристаллық ұлғи менен бирліктеги илгерилемели.

Ренттнген нурларының тутас спектрин қолланыў эффекттери: қолланылмайды, тутас спектр унамсыз нәтийжелерди береди.

Кристаллық ұлгинин қалыңлығы: $\mu t \leq 1$.

R_1 менен R_2 нин шамаларына қойылатуғын талап: $R_2 < R_1$.

Кристаллық ұлгинин гониометрде орнатылыўына қойылатуғын талап: оғада қатаң.

Фудживаралық усылы.

Кристаллық үлгинин қозғалыұы: қозғалмайды.

Фотопленканың қозғалыұы: қозғалмайды.

Ренттген нурларының тутас спектрин қолланыў эфектлери: рентген нурының тутас спектри қолланылады.

Кристаллық үлгинин қалыңлығы: $\mu t \leq 1$.

R_1 менен R_2 ниң шамаларына қойылатуғын талап: $R_2 > R_1$

Кристаллық үлгинин ғониометрде орнатылыұына қойылатуғын талап: талап қойылмайды.

Шашыраўға тийкарланған мүйешлик сканнерлеў усылы.

Кристаллық үлгинин қозғалыұы: рентген ғониометриниң көшерине орнатылған кристаллық угли ω мүйешлик тезлиги менен қозғалады (мүйешлик сканнерленеди).

Фотопленканың қозғалыұы: рентген ғониометріндеги дифракцияға ушыраған рентген толқынларын регистрациялаушы есаплағыштың орнына ортанытылады ҳәм ғониометр көшериниң дөгерегінде 2ω мүйешлик тезлигінде фотопленка менен бир бағытта қозғалады.

Ренттген нурларының тутас спектрин қолланыў эфектлери: тутас спектр де сүүреттің пайда болыўына қатнасады.

Кристаллық үлгинин қалыңлығы: қәлеген қалыңлықтағы үлгилер пайдаланылады, себеби бул усылда топографиялық сүүретті пайда етиўге кристалдың бетинде шашыраған рентген нурлары қатнасады.

R_1 менен R_2 ниң шамаларына қойылатуғын талап: талап қойылмайды.

Кристаллық үлгинин ғониометрде орнатылыұына қойылатуғын талап: қатаң емес.

Өтиўге тийкарланған мүйешлик сканнерлеў усылы.

Кристаллық үлгинин қозғалыұы: айланбалы қозғалыс жасайды.

Фотопленканың қозғалыұы: талап қойылмайды.

Ренттген нурларының тутас спектрин қолланыў эфектлери: тутас спектр унамсыз тәсіриң жасайды.

Кристаллық үлгинин қалыңлығы: $\mu t \leq 1$.

R_1 менен R_2 ниң шамаларына қойылатуғын талап: $R_2 > R_1$.

Кристаллық үлгинин ғониометрде орнатылыұына қойылатуғын талап: қатаң емес.

16-сүүретте мүйешлик сканнерлеў усылын айқын изертлеўлерде, атап айтқанда мезаструктуралық айырмашылықтарда орнатылығынан изертлеў барысында ҳәм бул усылда алынған нәтийжелерди басқа усылларда алынған эксперименталлық сүүретлер менен салыстырыў мақсетинде өткерилине экспериментлердин берген нәтийжелери көлтирилген.



a)



b)

16-сүйрет.

Мезаструктураға ииे кварц кристалларының топограммаларының сүйретлери.

- a) өтиўге тийкарланған мүйешлик сканнерлеў усылында алынған,
- b) шағылсызыўға тийкарланған мүйешлик сканнерлеў усылында алынған,
- c) Ланг усылында түсирилген.



c)

Пайдаланылған әдебияттар 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 silicon, 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 silicon, 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 Gryst. **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. Черноголовка. 1977.
23. В.Л.Индебом, 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. Черноголовка. 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. Черноголовка. 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 өзгерислерди рентгенографиялық изертлеў

Кирисиў

Қатты денелерде орын алатуғын фазалық өтиўлер (фазалық айланыслар) әхмийетли болған физикалық құбылыслар қатарына киреди. Бир фазадан екинши фазаға өткенде қәлелеген кристаллық ямаса аморфлық заттың барлық физикалық-технологиялық қәсийетлері кескин түрде өзгереди. Усы жағдайларға байланыслы фазалық өтиўлер мәселелерин эксперименталлық ҳәм теориялық изертлеў ҳәзирги ўақытлардағы қатты денелер физикасының ең әхмийетли машқалаларының бири болып табылады.

Қатты денелердеги фазалық өтиўлерди изертлеўлер тиикарынан XX әсирдин басында басланды. Кристаллық денелердеги рентген нурларының дифракциясы, усы құбылыс тиикарында дөретилген рентгенструктуралық анализ, буннан кейин пайда болған электронография менен электрон микроскопиясы қатты денелердеги фазалық өтиўлердин ҳақыйкый механизмлерин ашып көрсетиўде анықлаушы орынды ийеледи. Фазалық айланыслардың нызамлықлары ҳәм олардың айқын механизмлери ашып көрсетилди. Усындей илимий ашылыўлар тиикарында берилген технологиялық қәсийетлерге ийе затларды алыў бойынша үлкен жумыслар исленди. Бул XX әсирдин ақырларында фуллеренлер менен нанокристаллардың ашылыўына, ал XXI әсирдин басында графенниң алыныўына алып келди [1-6]. Солай етип фазалық айланыслардың ҳақыйкый физикалық механизмлерин терен үйрениўлер адамзат турмысына пүткіллей жаңа затлардың кирип келиўин тәмийинледи.

Жоқарыда атап өтилген жетисkenликлер менен бир қатарда айырым кристаллық затлардагы фазалық өтиўлердин ҳақыйкый механизмлери еле толық изертленбegen. Сондай кристаллар қатарына пьезоэлектриклик қәсийетлерге ийе болған литий иодаты ($LiIO_3$) кристаллары киреди [7-10]. Бул кристалларда белгили болған α , β ҳәм γ фазалары менен бир қатарда $70^{\circ}\text{C} - 120^{\circ}\text{C}$ температуралары аралығында физикалық қәсийетлердин аномаллық ҳәм қайтымсыз өзгерислери бақланды. Усы тиикарда литий иодаты

кристалларында жоқарыда келтирилген үш фазадан басқа және бир фаза орын алады дег болжауға болады

Литий иодаты ($LiIO_3$) кристалларының атомлық-кристаллық құрылышы ҳәм базы бир физикалық қәсийетлери

1-§. Литий иодаты кристалларының атомлық-кристаллық құрылышы ҳәм 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 құрылышының параметрлері 1-кестеде берилген.

Ең дәл деген мағлұйматтар бойынша [12-15] $\alpha - LiIO_3$ кристалларының сингониясы гексагоналлық, симметрияның гексагоналлық-пирамидалық класы болған $C_6(L_6)$ ноқатлық топарға киреди. $\alpha - LiIO_3$ кристалларының құрылышында симметрия орайы жоқ болғанлықтан бундай кристаллар айқын керинетуғын пьезоэлектриклик, сыйықты оптикалық ҳәм техника ушын басқа да бағалы болған қәсийетлерге иие.

Литий иодаты кристалларының гексагоналлық α фазасының атомлық-кристаллық құрылышы 1-сүйретте келтирилген [13]. Кислород атомлары гексагоналлық тәқлетте тығыз етип жайластырылған, иодат молекулалары октаэдрлік бослықтарды ийелейди. Кислородлық октаэдрлер азмаз майысқан. Атомлық-кристаллық құрылышта C_3 симметрияға иие айырым IO_3 топарлары бар. Бул дұрыс тригоналлық пирамиданың (пирамида IO_3 топарларынан турады) бас көшери элементар құтышаның 3-тәртипли симметрия көшери менен бағытлас. IO_3 топарларындағы кислород атомлары қонысылас IO_3 топарындағы кислород атомлары менен 2,892 Å қашықтықта координацияланады. Бул қашықтық Ван-дер-Ваальс радиусларынан (бундай радиустың шамасы ~ 0,7 Å ге тең) әдеүір киши. Бир бири менен қонысылас болған IO_3 топарлары арасындағы күшли тәсир етисиүдің нәтижесинде үш өлшемли беккем тор пайда болады. Бул тордың ишинде атомлар үлкен емес амплитуда менен жылдылық тербелислерине қатнасады.

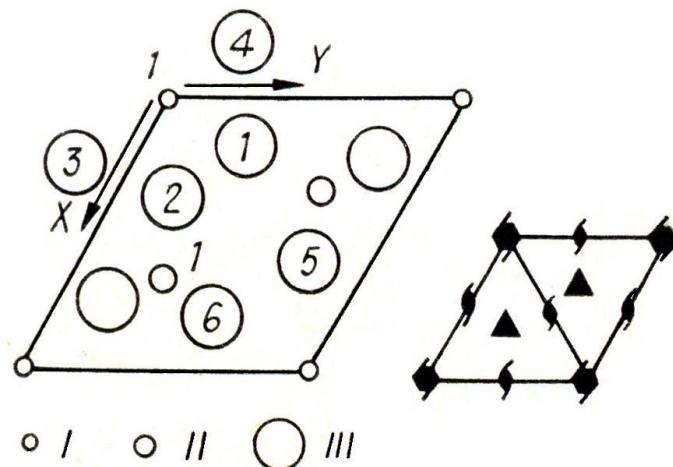
1-кесте.

Литий иодаты кристалларының құрылышының параметрлері

	Модификация						
	α		β		γ		
	a_0	c_0	a_0	c_0	a_0	b_0	c_0
Кұтыша параметри, Å	$5,4815 \pm \pm 0,003;$	$5,1709 \pm \pm 0,004;$ [12]	$9,7329$ (7);	$6,1566$ (7); [19]	$T = 253^{\circ}\text{C}$		
	$5,478 \pm \pm 0,003;$	$5,170 \pm \pm 0,002;$ [13]	$9,712 \pm \pm 0,005;$	$6,146 \pm \pm 0,005;$ [16]	$5,324(2)$ $9,428(4)$ $5,888(2)$		
	$5,484 \pm \pm 0,003;$	$5,177 \pm \pm 0,002$ [22]	$9,66 \pm \pm 0,002$	$6,21 \pm \pm 0,001$ [18]	$T = 265^{\circ}\text{C}$		
					$19,1$	$11,14$	$10,44$
Кұтышадағы формулалық бирліктер саны	2 [12]		8 [19]		32 [20]		
Симметрияның кеңисликтеги топары	$P6_3$ [12]		$P4_2/n$ [16]		Белгисиз		

Литий атомлары да кислородлық октаэдрлердин орайында жайласқан болып, алтыншы тәртипли симметрия көшери Z ке параллель шынжыр (дизбек) пайда етеди. $\alpha - LiIO_3$ кристалларының атомлық кристаллық құрылышын дәл анықлау мақсетинде

нейтронографиялық изертлеўлер де өткерилген. Бул изертлеўлер литий атомларының кислородлық октаэдрдин орайына салыстырғанда Z көшери бағытында 0,0343 ангстремге (\AA) жылысқан екенligин көрсетти [13]. Жиберилген қәтеликлер шеклеринде литий октаэдрдин орайында жайласқан. [12]-жұмыстың авторлары болса литий атомлары Z көшеринин кери бағытында 0,291 ангстремге жылысқан деп тастыыйқлады. 2-кестеде $\alpha\text{-LiIO}_3$ кристалларының атомлардың координаталары менен жыллыштық параметрлері, 3-кестеде болса атомлар арасындағы қашықтықтар менен ионларды байланыстырыушы туўрылар арасындағы мүйешлер, ал 4-кестеде кристаллографиялық тегисликлер арасындағы қашықтықтар берилген.



1-сүйрет. Элементар қутышаның (0001) тегислигіне түсирилген 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

$\alpha\text{-LiIO}_3$ кристаллары ушын атомлардың координаталары ҳәм жыллыштық параметрлері

Атом-лар	Координаталары ҳәм жыллыштық 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 (\AA) 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

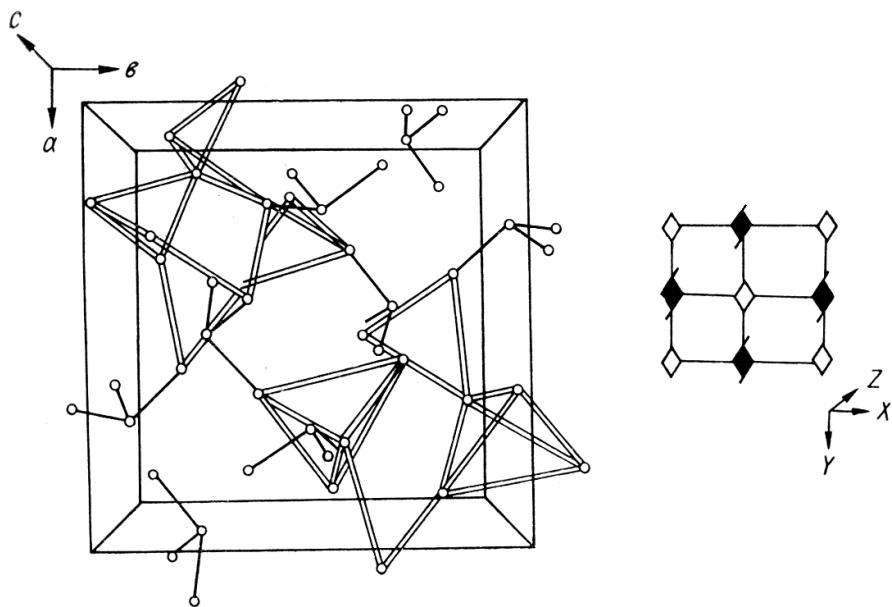
4-кесте

α- $LiIO_3$ кристаллары ушын hkl кристаллографиялық индекслер менен сол тегисликлер арасындағы қашықтықтар (I/I_0 арқалы дебаеграммадағы рентген рефлекслеринин салыстырмалы интенсивлігі белгилендірілген) [23]

hkl	I/I ₀	d, \AA	hkl	I/I ₀	d, \AA
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 класына, $C_4 L_4 PC$ ноқатлық топарына (группасына) киреди [16-19] (2-сүйретте көлтирилген). $\beta - LiIO_3$ кристалларының құрылышы да майысқан тригоналлық пирамидалар формаға ийе дискрет IO_3 топарларына ийе. Бул пирамидалардағы қашықтықтар $I - O_1 = 1,79 \text{ \AA}$, $I - O_2 = 1,63 \text{ \AA}$, $I - O_3 = 1,71 \text{ \AA}$ [18]. $\alpha - LiIO_3$ кристалларында кислородтың барлық атомлары $O - I - O$ байланысларын пайда етиүге қатнасады ҳәм гексагоналлық кислородлық жайластырыўлардың тығызлығы 52 % ке тең. Ал $\beta - LiIO_3$ кристалларында болса кислород атомларының жайластырыўларының тығызлығы 47 процент ғана ҳәм атомлардың $2/3$ бөлеги ғана Z көшерине параллель болған $I - O - I - O$ спираллық байланысын пайда етиүге қатнасады. Бул дизбеклер бир бири менен $O - I - O$ байланысы менен байланысқан. Структуралардың екеүінде де байланыслар қашықтықтарының 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 $99,5^0$ қа тең [19]. Ал $\alpha - LiIO_3$ ушын сәйкес мағлыўматлар 3-кестеде берилген.



2-сүйрет. $\beta - LiIO_3$ кристалларындағы IO_3 ҳәм LiO_4 тетраэдрлериниң орайлық проекциясы [19]. IO_3 топарлары тутас сызықтар менен, ал LiO_4 тетраэдрлеридеги $O - O$ байланыслары қос сызықтар менен сәўлелендірілген. Координаталар басы 1 көшериниң бойынша жайласқан.

$\alpha - LiIO_3$ менен $\beta - LiIO_3$ фазаларының кристаллық құрылышындағы тийкарғы айырма литий атомларының жайласыўында болып табылады. $\alpha - LiIO_3$ кристалларында көшерлер октаэдрлик кислородлық координацияда, ал $\beta - LiIO_3$ кристалларында болса тетраэдрлик кислородляқ координацияда жайласқан. $\beta - LiIO_3$ фазасында төрт LiO_4 тетраэдри (0001) тегислигине параллель болған изоляцияланған сақыйналарды пайда етеди. Ҳәр бир сақыйна төрт тетраэдрге 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 құтыша усындай еки сақыйнаға ийе болады. $Li - O$

арасындағы қашықтық $1,87 - 2,13 \text{ \AA}$, ал олар арасындағы мүйешлер $92 - 123^0$ қа тең [21]. $Li - O$ байланысы ушын орташа қашықтық $1,98$ ангстремге тең ҳәм бал шама кислородтың төрт қайтара координациясындағы орташа қашықтыққа сәйкес келеди. 5-кестеде β - $LiIO_3$ кристаллары ушын hkl кристаллографиялық индекслер менен сол тегисликтер арасындағы қашықтықтар берилген.

5-кесте

β - $LiIO_3$ кристаллары ушын hkl кристаллографиялық индекслер менен сол тегисликтер арасындағы қашықтықтар (I/I_0 арқалы дебаеграммадағы рентген рефлекслеринин 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 γ - $LiIO_3$ кристаллары орторомбалы элементар қутышаға ииे болады [21] ҳәм менен β фазалары арасындағы аралықтық фаза болып есапланады [20-21]. γ - $LiIO_3$ кристалларының дифракциялық картинасы (дебаеграммасы ямаса дифрактограммасы) α - $LiIO_3$ кристалларының дифракциялық сүүретине (картинасына) жақын келеди (3-сүүрет). Бундай жағдайда IO_3 топарлары системасы α - $LiIO_3$ ге салыстырғанда метрлик жақтан бузылған деп есапланады, ал литий атомлары болса β - $LiIO_3$ кристалларындағыдей тетраэдрлик координацияларда жайласады.

6-кесте.

γ - $LiIO_3$ кристаллары ушын 253^0C температурадағы hkl кристаллографиялық индекслер менен сол тегисликтер арасындағы қашықтықтар [21]

hkl	$d_{\text{экспер.}}$	$d_{\text{есаплау}}$	hkl	$d_{\text{экспер.}}$	$d_{\text{есаплау}}$
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			

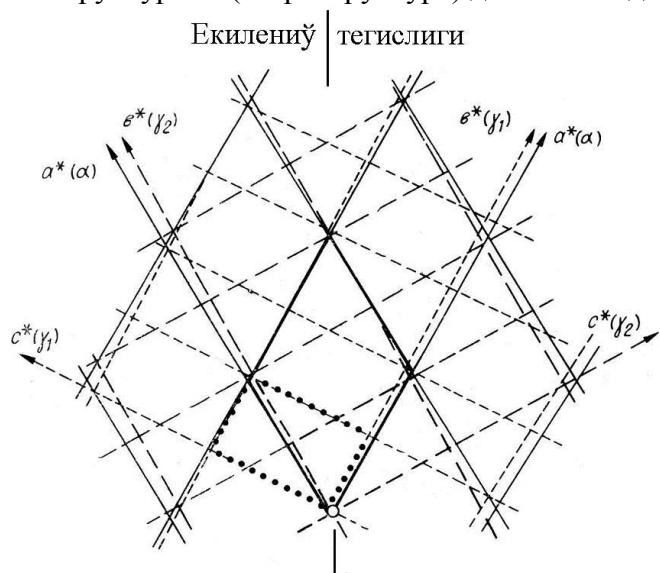
7-кесте

Литий иодаты кристалларының физикалық-химиялық қәсиетлері.

Қәсиетлер	Литий иодаты кристалларының фазалары бойынша эксперименталлық мағлыўматлар		
	α	β	γ
Тығызлығы, $\text{г}, \text{см}^3$			

Пикнометрик 20°C	4,48	4,16	
23°C	4,45	4,14	
Рентгенографиялық мағлыўматлар бойынша есапланған (265°C)	4,39	4,10	4,35
Ериў температурасы, $^{\circ}\text{C}$			
$\beta - \text{LiIO}_3$	435		
$\gamma - \text{LiIO}_3$	419-420		
Энтропия, ккал/моль			
$\alpha - \gamma - \text{LiIO}_3$	0,43		
$\gamma - \beta - \text{LiIO}_3$	0,17		
Жылдыў жыллылығы ΔH , ккал/моль			
$\alpha - \gamma - \text{LiIO}_3$	5,7		
$\gamma - \beta - \text{LiIO}_3$	6,31		
Жыллылық сыйымлығы C_p , кал·град $^{-1}$ ·моль $^{-1}$		$(15,87 \pm 2,826) \cdot 10^{-2} \text{ T}$	24,7
Жыллылық кеңейиў коэффициенти, $10^{-6}/^{\circ}\text{C}$			
$\alpha - \text{LiIO}_3$			
C көшерине параллель		45	
C көшерине перпендикуляр		25	
$\beta - \text{LiIO}_3$ ($2-350^{\circ}\text{C}$ интервалда)			
C көшерине параллель		5,4	
C көшерине перпендикуляр		31	
Кюри температурасы T_c , $^{\circ}\text{C}$		255 ± 1	

Бирақ $\beta - \text{LiIO}_3$ кристалларының дәл атомлық-кристаллық қурылсызы усы ўақытларға шекем балгисиз болып келмекте. 6-кестеде бундай кристаллардың орторомбалы күтышта тийкарында есапланған ҳәм экспериментлерде алынған кристаллографиялық тегисликлер арасындағы қашықтықтардың мәнислери берилген. LiIO_3 кристалларының α ҳәм β фазаларының кристаллық пәнжерелеринин турақтылары арасындағы айырмаларды таллау арқалы [20] ның авторлары LiIO_3 кристалларының γ -фазасын гексагоналлық α -фазаның асаструктурасы (сверхструктура) деп болжайды.



3-сүйрет.

Литий иодаты кристалларындағы α -фазаның $hk0$ қатламлары (тутас сызықтар) менен екиленген γ_1 ҳәм γ_2 фазалардың $0kl$ тегисликлери арасындағы ориентациялық қатнас схемасы.

Литий иодаты кристалларының усы ўакытларға шекем белгили болған тийкарғы хәм термодинамикалық қәсийеттери ҳақындағы мағлыўматлар 7-кестеде берилди.

2-§. Литий иодаты кристалларындағы $\alpha - \beta - \gamma$ фазалық өтиўлер

Литий иодаты монокристалларын әдette еритпелерден кристаллизацияланыў усылы менен алады. Либертциң (Libertz J.) мағлыўматлары бойынша [16] усындай кристаллизацияланыўдың салдарынан гексагоналлық, ал Мацамураның мағлыўматлары бойынша [20] «орторомбальық» γ -фаза қәлиплеседи. Бир қатар авторлардың жумыслары бойынша γ -фаза 250-285⁰C салыстырмалы орнықлы. Бундай фаза гексагоналлық $LiIO_3$ кристалларын 247 – 249⁰C температурасына шекем қыздырганда алынады. 185⁰ дан жоқары температураларда ямаса 300⁰C температурада экзотремалық рәүиште ямаса 250 - 300⁰C интервалында β -фазаның излери болған жағдайдарда $\gamma \rightarrow \beta$ фазалық өтиўи орын алады [11].

Бир қанша мағлыўматлар бойынша литий иодаты еритпесин киши температураларға аса қыздырган жағдайларда ийне тәризли ямаса призма тәризли монокристаллар түринде еседи. Жоқары температраларға қыздырыў γ -фазаға тийисли болған пластинка тәризли кристаллардың өсиүине алып келеди. β -фаза 435⁰C, ал γ -фаза 420⁰C температурада ерийди. Бул жағдай литий иодаты кристалларының еки ериў температрасының бар екенлигин билдиреди. 420 – 325⁰C температуралар аралығында γ -фаза бирден (бир неше секундлар даўамында) экзотермалық рәүиште β -фазаға өте алады. Бул жағдайда үлгинин температурасы секирмели түрде 6 – 8⁰ қа жоқарылады. Егер жоқарыда көрсетилген температуралар интервалында сондай фазалық өтиў орын алмаса құйманы 210 – 200⁰C температурасына шекем салқынлатқанда γ -фаза экзотермалық рәүиште α -фазаға айланады. Кери $\alpha \rightarrow \beta$ өтиўи 234 – 244⁰C температураларына шекем жоқарылатқанда орын алады. 250- 325⁰C температуралар интервалындағы $\alpha \rightarrow \beta$ өтиўлері (ямаса 170 – 250⁰C температураларындағы $\alpha \rightarrow \beta$ өтиўлері) бир неше рет қайталанылған қыздырыў – салқынлатыў циклларының нәтийжесинде избе-излик пенен қайталанады. Бул жағдайдардың барлығы да 8-кестеде берилген.

8-кесте.

Литий иодаты кристалларындағы үлгилердин таярланыўы менен кристалланыў шәртине байланыслы орын алатуғын фазалық өтиўлердин схемалары

№	$LiIO_3$ кристалларының пайда болыў шәртлері	$LiIO_3$ кристалларындағы фазалық өтиўлер, ⁰ C
Кристаллизацияланыў:		
I	Нейтрал орталықтағы кристаллизация	$\begin{array}{ccccccc} \sim 247 & & \sim 285; 300 & & \sim 435 & & \\ \alpha & \leftrightarrow & \gamma & \leftrightarrow & \beta & \rightarrow & \text{еритпе} \\ \sim 200 & & & & & & \sim 390 \end{array}$
II	HIO_3 ямаса β -фаза қатнасқанда; бир неше салқынлатыў – қыздырыў циклинен кейин [11]	$\begin{array}{ccc} 240 \div 285 & & \\ \gamma & \rightarrow & \beta \end{array}$
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 $< 5^0$	$\begin{array}{ccc} & \sim 435 & \\ & \beta \rightarrow \text{еритпе} & \\ & \sim 435 & \end{array}$

	$> 5^0$	$\alpha \xrightleftharpoons[200-210]{\gamma} 230 \div 244 \quad 420 \div 325 \rightarrow \beta$ $\sim 420 \uparrow \downarrow \sim 420$ еритпе
V	Бир неше салқынлатыў – қыздырыў циклин басынан кеширген γ -фазадан туратуғын күйма ушын.	$\gamma \rightarrow \beta \xrightleftharpoons{\text{еритпе}} 250 \div 325 \quad \sim 435$ $\sim 435 \quad \text{естелик пенен}$
	75^0C температурадан төменги температуралардағы бир неше ай даўамындағы өстелик пенен жүргизилген рекристаллизация.	$\beta \rightarrow \alpha$ < 75

Жоқарыда келтирилген кестедеги мағлыұматлар, басқа да әдебияттарда орын алған мағлыұматлар тийкарында литий иодаты кристалларындағы фазалық өтиўлер бойынша мынадай жуўмақлар шығарыўға болады:

Нормал басымларда 75^0C температурасына шекем LiIO_3 кристалларының гексагоналлық модификациясы, ал 75^0C да жоқары температураларда тетрагоналлық β -фаза орнықлы, әдеттегидей шарайтларда γ -фаза метастабилли фаза болып табылады, ал $210 - 420^0\text{C}$ температуралар интервалында γ -фаза салыстырмалы орнықлы. α -фаза кристаллары $75 - 250^0\text{C}$ температураларында салыстырмалы орнықлы. Себеби бул фазаның β -фазаға өтиўи ушын атомлық-кристаллық қурылыштың үлкен өзгерислерге ушырауы керек.

[22]-жумыстың авторлары литий иодаты кристалларының гексагоналлық фазасының (α -фазасының) жыллылық көнейиү коэффициентлеринин мәнислеринин төмендегидей еkenлигин көрсетти (7-кестени қараңыз, бул шамалар бизин эксперименталлық нәтийжелеримиз бенен салыстырыў ушын зәрүрли):

$$k_a = 2,81 \cdot 13 \cdot 10^{-5} \frac{1}{K},$$

$$k_c = 5,44 \cdot 5 \cdot 10^{-5} \frac{1}{K}.$$

3-§. Базы бир жуўмақлар

[11-22] жумысларды үйренип ҳәм таллап симметрия орайы жоқ литий иодаты кристалларында үш кристаллық фазаның болыуының мүмкін еkenлигин көрдік. Сол үш фазаның биреуи болған гексагоналлық α -фаза көбірек қолланылады. Усыған байланыслы $\alpha - \text{LiIO}_3$ кристалларының физикалық-технологиялық қәсийетлерин изертлеүге көбірек әхмийетлер берилмекте. Бундай кристаллардан жоқары технологиялық қәсийетлерге ийе пьезоэлектрик түрлендиргишлер соғылады.

Бир қанша эксперименталлық илимий изертлеў жумысларының барысында 70^0C дан 120^0C температуралары орталығында LiIO_3 кристалларының айырым электрфизикалық қәсийетлеринин қайтымсыз өзгеретуғынлығын көрсетti. Бундай өзгерислердин себеплери, физикалық механизмлери ҳақында ҳеш қандай мағлыұматлар жоқ. Кристаллық объекттиң физикалық қәсийетлеринин қәлеген өзгерислерин оның атомлық-кристаллық қурылышының өзгериси менен байланыстырган мақсетке муўапық келеди. Усы жағдайға байланыслы литий иодаты кристалларын $70^0\text{C} \div 120^0\text{C}$ температуралар интервалында рентгенографиялық жоллар менен изертлеўдің зәрүрлиги пайда болды.

Солай етип бул лабораториялық жумыс литий иодаты кристалларының физикалық қәсийетлеринин $70^0\text{C} \div 120^0\text{C}$ температуралар интервалындағы қайтымсыз өзгерислерин рентгенографиялық жол менен изертлеў мақсетинде орынланады.

II бап. Эксперименттиң техникасы менен усыллары

4-§. Сапалық фазалық таллау

Фазалық таллау дәп берилген системадағы фазалардың санын анықлау менен олардың идентификациясына (атомлық-кристаллық құрылышын анықлауға) айтамыз.

Рентгенографияда ҳәр бир фаза өзине тән дифракциялық сүйретти береди. Бул сүйретлер бир биринен дифракциялық сзықтардың саны, интенсивлиги, орны (мүйешлик координаталарда 2θ мүйеши, θ мүйешинің мәниси Вульф-Брегг теңлемеси $2d \cdot \sin \theta = n\lambda$ жәрдемінде анықланады) менен айрылады. Ал дифракциялық сзықтардың саны, интенсивлиги, орны болса берилген заттың элементар күтшаларындағы атомлардың қалай жайласқанлығына тикелей байланыслы. Ҳәзирги заман рентгенструктуралық анализи бирдей кристаллық структураға иие болған еки заттың табылмайтуғынлығын айқын түрде көрсетти. Сонықтан рентгенограммалар (рентген нурларының дифракциясы түсирилген фотопленка) берилген затты бир мәнисли етип анықтай алады. Бир неше кристаллық затлардың араласпасынан туратуғын үлгиден алынған рентгенограммаларда ҳәр бир затқа тийисли рентгendifракциялық сүйрет қөлиплеседи. Сонықтан бундай рентгенограмма ҳәр бир затты айырып алып түсирилген рентгенограммалардың қосындысынан турады.

Дифракциялық анализ бир кристаллық заттағы фазаларды идентификациялаудың туурыдан-тууры усылы болып табылады. Дифракциялық анализ болса рентгendifракциялық, электронографиялық ҳәм нейтронографиялық анализлерден турады. Биз питкеріү қәнигелик жумысында рентгendifракциялық анализди (рентген анализинен) пайдаланамыз.

Рентгendifракциялық анализде рентгенограмманы ямаса дифрактограмманы өлшеү арқалы биринши гезекте дифракциялық мүйештиң мәниси, дифракциялық сзықтың (рентген рефлексинің) интенсивлиги анықланады. Рентгенограммаларда алынған дифракциялық сзықтың интенсивлиги қуалланбаған көз бенен баҳаланады (4-6 кестелердеги I/I_0 шамаларының мәнислері көз бенен баҳаланған).

Рентгенографиялық анализдин электронография менен нейтронографиядан артықмашлықтары усылдың жоқары исенимлигі менен экспресслигинде. Усыл бойынша фазалардың бар ямаса жоқ екенлиги туурыдан тууры анықланады. Буның ушын алынған дебаеграмма ямаса дифрактограмма берилген фаза ушын алдын-ала түсириллип алынған эталон рентгенограмма менен салыстырылады ямаса ҳәзирги заман компьютерлік технологиялары рентгенограмманы өлшеү жолы менен алынған тегисликлер арасындағы қашықтықтар бойынша (4-6 кестелерди қараңыз) жүргизилген есаплаўлар тийкарында кристаллық фазаның элементар күтшаларының турақтылары анықланады. Бул еки усыл да исенимли усыллардың қатарына киреди.

Бирақ экспериментлер өткериү барысында бир қатар қыйыншылықтар да ушырасады. Мысалы араласпсыдың фазаның муғдары 1 проценттен кем болса рентгенограммалар менен дифрактограммаларда оларды бақлау мүмкіншилиги болмайды. Бир фазаның табыла алышылық қәсийеттери бир қатар жағдайларға байланыслы: араласпадағы атомлардың атомлық номеринен (себеби дифракциялық сзықтардың интенсивлиги атомлық номердин үлкейиүи менен бирге үлкейеди), кристалдың элементар күтшасының өлшемлери менен симметриясынан, және де басқа факторлардан ғәрэзли. Кристалдың симметриясы қаншама жоқары болса рентгенограммалардағы сзықтардың саны киши, бирақ олардың интенсивликтери жоқары болады. Буның себеби мыналардан ибарат: кублық кристалларда hkl кристаллографиялық тегислиги 48 рет қайталанады (қайталаныў факторының саны), ал триклинилдік кристалда бир сзыққа тек hkl менен hkl еки тегислиги ғана сәйкес келеди (бул жағдайда қайталаныў факторы 2 ге тең).

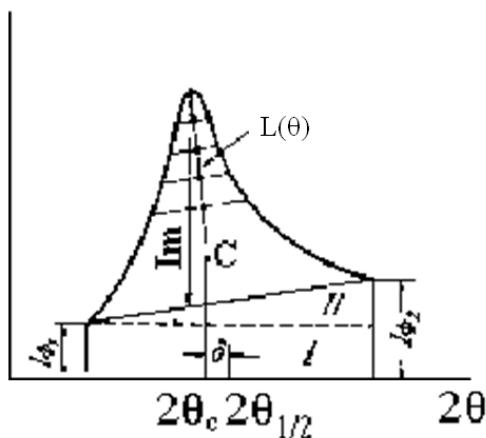
Усылдың сезирлигін анықтайтуғын әхмийетли факторлардың бири изертленилип атырған заттың кристаллиттеринің өлшемлери болып табылады. Кристаллиттердің геометриялық өлшемлери қаншама киши болса дифракциялық максимумлардың мүйешлик өлшемлери үлкен болады хәм нәтийжеде дифракциялық сзықтар жайылған болады. Нәтийжеде оларды рентгенограммалардағы фоннан айырып алыў мүмкіншилиги жоғалады. Егер изертленип атырған үлгидеги кристаллиттердің сзықты өтшемлери 10^{-5} см дең киши болғанда анық рентген рефлекслерин (дебай сзықтарын) алыўдың мүмкіншилиги пүткіллей жоғалады [24].

Сапалық фазалық анализде үлгидеги белгилі бир кристаллық қурылымка ийе фазаның бар ямаса жок екенligи ғана анықланады (фазалардың мұғдарларының қатнаслары ҳақындағы мағлыұматлар алынбайды). Биз экспериментлерди УРС-2,0 рентген аппаратына орнатылған мыс аноды бар рентген трубкасының нурланыўында РКУ-114 камерасында түсірдік. Цилиндрик фотопленкасының диаметри 114 мм болған камераада дебаеграммалардың түсирилетуғының атап өтемиз. Жоқары температуралардағы сүретлер ДРОН-2,0 рентген дифрактометринің жәрдемінде түсірілді. Берилген температураны услап турыў ушын стандарт болған жоқары температуралы рентгendifрактометрлик УВД-2000 камерасы пайдаланылды. Бул камера температураны $\pm 2^{\circ}$ дәллікте услап турыўға мүмкіншиликті береди.

5-8. Кристаллық пәнжерениң турақтыларының температурадан тәрзелигин анықлау

Кристаллардың температурасын өзгертиў арқалы структуралық фазалық өтиўлерди (біринши хәм екінши тәртипли), айырықша кристаллографиялық бағыттардағы жыллылық кеңейиўи нызамлықтарын рентгендифракциялық анықлау усылы басқа дилатометриялық усыллардан артықмашлықтарға ийе. Көп фазалы кристаллық бирикпелерде таңлап алынған бир неше фазаның жыллылық кеңейиўлерин бир тәжирийбеде өлшеў хәм сол фазалар дүзилисіндеги температуралық өзгерислерди бақлап барыў, нәтийжелердин қалдық қосымталарда жүретуғын процесслерге байланыссызлығы хәм т.б. [25-27].

Жоқары температураларда кристаллар дүзилисін үйрениў ДРОН типіндеги стандарт дифрактометрлерде УВД-2000 температураны орнатыўшы қосымша жәрдемінде әмелге асырылады. Бул қосымша дүзилис кристаллдың температурасын басқарылған түрде өзгертиў, кристалл температурасын өлшеў даўамында турақты услап турыў мүмкіншилигин береди. Кристалдың температурасы термопаралар жәрдемінде өлшенеди. Қосымша дүзилис кристаллға түсіўши хәм шашыраған толқынлар интенсивликтеринің минимал жутылыўын тәмийинлеўши жуқа фольгалы айналарға ийе.



4-сүрет.
Дифракциялық максимумлардың дәл мәнисин анықлау усылын түсіндіриў ушын арналған сзылма

Рентгendifрактометрия усылында тәжирийбеде өлшенетуғын шама - еки еселенген дифракция мүйеши. Кристалдан шашыраған рентген нурлары арнаұлы детекторларда (счетчиклердин жәрдеминде) қабылланып, күштеги тип, диаграммалық потенциометрлерге бериледи. Диаграммалық потенциометрде қағаздың хәм дифрактометрдин θ - 2θ фокусланыўында айланыўшы кристалл-детектордың тезликтерин ҳәр қыйлы қатнасларда өзгерте отырып алынған дифрактограммалар арқалы кристалл турақтыларының берилген температуралардағы мәнислерин үлкен дәллікте өлшеүге болады. Дифрактограммалардан максимум орайларын анықлау рентгенография әмелиятында бир неше усыллар жәрдеминде жүргизиледи. Биз максимум орнын анықлауда тәменги усылды қолландық: фонлық шашырау интенсивлиги ажыратылғаннан кейин максимум бийиклигиниң ярымын анықтаймыз, сол бийиклитети максимум кеңлигиниң ярымынан ултанға түсирилген нормаль 2θ мәнисин береди (4-сүйрет). Өлшенген дифракция мүйеши арқалы Вульф-Брэгг теңлемеси жәрдеминде атомлық тегисликтер арасындағы қашықтықтар d (d_{hkl}) анықланады. Атомлық тегисликтер арасындағы қашықтықтар арқалы квадраттық теңлемелер деп аталауышы кристаллографиялық аңлатпалар жәрдеминде кристаллық пәнжере турақтыларын анықлауға болады.

Кристаллық пәнжере турақтыларының жыллылық кеңейиүи коэффициентин анықлау ушын ҳәр қыйлы температураларда дифракция мүйеши өлшенеди. Вульф-Брэгг теңлемеси арқалы сол температуралардағы кристалл турақтылары анықланады. Мейли, T_1 хәм T_2 температураларда кристаллық пәнжере турақтылары сәйкес d_1 хәм d_2 болсын. Онда жыллылық кеңейиүи коэффициентин тәмендеги аңлатпа тийкарында анықлауға болады:

$$\alpha = \frac{1}{I_c} \frac{d_2 - d_1}{T_2 - T_1}.$$

Бунда I_c арқалы әдеттеги температурадағы кристаллық пәнжере турақтысы.

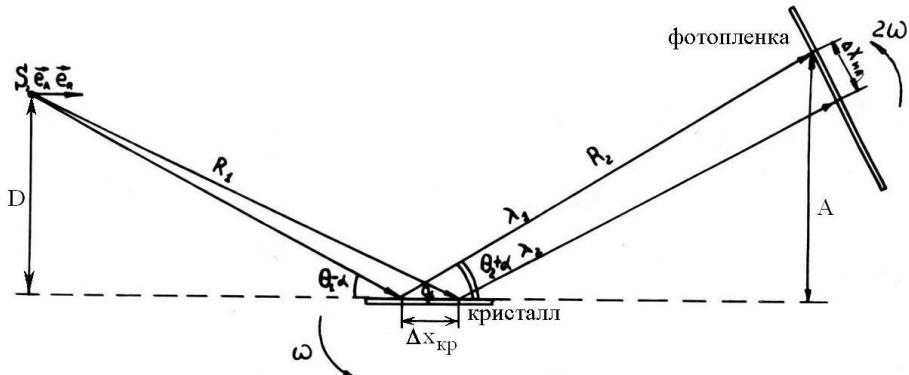
Өлшеўлерди ҳәр қыйлы температураларда жүргизе отырып $f = f(T)$ графигин дүзсек таңлап алынған фазаның пәнжере турақтысының температурасы байланыслы өзгерисин хәм жыллылық кеңейиүи коэффициентиниң мәнисин анықтаймыз.

6-§. Рентгентопографиялық мүйешлиқ сканнерлеу усылы

[28]-жумыстың авторлары кристаллардағы фазалық өтиўлерди изертлегенде рентгентопографиялық усылды сайлап алыуда тәмендегидей талапларды басшылықта алыудың зәрүр екенлигі көрсетилген:

- схема жеткилики дәрежеден үлкен болған рентген нурлары дереги – изертленетуғын үлгі және изертленетуғын үлгі – фотопленка қашықтықтарына иие болыуы керек. Бул изертленетуғын үлгиге ҳәр қыйлы физикалық тәсирлер (жыллылық, механикалық, электрик, оптикалық хәм басқалар) түсириү ушын керек.
- кристаллардың субструктурасының фрагментлеринен (бөлимелерин) алынатуғын контрастлар олардың бағытларының ҳәр қыйлы болатуғынлығынан ғәрзели болмауы керек.
- ҳәр қыйлы температураларда рентгendifракциялық изертлеу жумысларын жүргизиү ушын усыл жеткилики дәрежеде экспресс болыуы керек.

Рентгентопографиялық усыллардың экспресслигин (киши ўақытлар ишинде топографиялық сүйретлер алыу) арттырыу, соның менен бирге жоқарыда көлтирилген а) және б) пунктлерде көлтирилген шәртлерди қанаатландырыу мақсетинде кристаллардың топографиялық сүйретин алыуды нурланыудың характеристикалық спектрин қосымша түрде пайдаланыу усынылды [29]. Бундай усылдың оптикалық схемасы 5-сүйретте берилген.



5-сүйрет. Мүйешлик сканнерлеў усылының оптикалық схемасы [29].

S арқалы рентген нурлары дереги, e_R ҳәм e_A арқалы сәйкес радиаллық ҳәм азимуталлық бағатылар (кейингиси сүйрет тегислигine перпендикуляр), R_1 ҳәм R_2 арқалы сәйкес дерек-ұлғи ҳәм ұлғи-фотопленка қашықлықтары белгиленген.

S арқалы белгиленген ноқатлық рентген нурлары дерегинен рентген гониометрии көшерине орнатылған ұлғиге келип түседи. Кристаллық ұлғиден A қашықлығына жайластырылған фотопленка Шульц усылындағы жағдайдағы ҳәр бир үақыт моментинде кристалдың бетиниң топографиялық сүйрети қәлиплеседи. Экспозиция барысында кристалл O_1 көшеринин дөгерегинде $\Delta\phi$ мүйешлик интервалында ω мүйешлик тезлиги менен сканнерленеди (бұны мүйешлик сканнерлеў деп атайды). Ал пленка болса қурамалы түрде қозғалыўы керек. Ол O_1 көшери дөгерегинде 2ω мүйешлик тезлиги, ал O_2 көшери дөгерегинде $-\omega$ тезлиги менен қозғалады. Бундай қозғалыста фотопленканың бети кристалдың бетине параллель болып қалады, ал O_1 ноқатында дифракцияға ушыраған нур O_2 ноқатына келип түседи. Кристалдың ҳәр бир участасының топографиялық сүйрети ҳәр қыйлы үақыт моментинде ҳәр қыйлы узынлықтағы толқынлар тәрепинен пайда етиледи. Бундай геометрияда сүйретке түсиргенде сүйретлердин сәйкес ноқатлары бир бириңиң үстине түседи. Соныңтан сүйретті пайда етиші толқын узынлықтары интервалына характеристикалық спектр сызығы киретуғын болса топограмма алғы ушын кететуғын үақыт Шульц усылында топограмма алғы ушын керек болған үақытқа салыстырғанда әдеўир кемейеди.

Егер дерек-ұлғи ҳәм ұлғи фотопленка қашықлықтары R_1 ҳәм R_2 (яmasa A ҳәм D) изертленетуғын кристаллық ұлғиниң сызықлы өлшемлерине салыстырғанда әдеўир ұлкен болса, онда кристалдың ҳәр қыйлы ноқатлары арасындағы қашықлықтар R'_1 ҳәм R'_2 шамаларының өзгерисин аз деп есаплаўға, соның менен бирге бул қашықлықтарды R_1 ҳәм R_2 қашықлықтарына тең деп қабыл етиў мүмкін. Бул усылда R_1 ҳәм R_2 шамалары өзгерисиз қалады, ал кристалдың сүйретин пайда етиўге қатнасадуғын толқын узынлықтары ушын θ мүйеши ҳәр қыйлы мәнислерге ийе болады. $\alpha \neq 0$ ҳәм $\alpha \neq \frac{\pi}{2}$ болған жағдайларда $P_R = P_R(\theta)$ ҳәм усыған сәйкес кристалдың сүйрети ҳәр бир толқын узынлығында өзине сәйкес P_R ұлкейтиў коэффициенти менен бериледи. Усындай аўхалдың ақыбетинен мүйешлик сканнерлеў усылының сызықты ҳәм мүйешлик ажыратада алғышылық қәбилетлікleri Шульц усылының айыра алғы қәбилетліклеринен төмен болады.

Солай етип мүйешлик сканнерлеў усылы Шульц усылының дәл аналогы болып табылмайды. Бул усылдың ажырата алғы қәбилетлиги үлгини сканнерлеў интервалы $\Delta\varphi$, θ , α мүйешлериниң функциялары болып табылады.

[29]-жұмыста $\Delta\varphi \leq 2 - 3^0$ болған жағдайларда экспозиция ўақтының (топограмманы алғы ушын кететуғын ўақыт) Шульц усылындағы экспозиция ўақтының салыстырғанда 5-10 есе кем болатуғынлығы көрсетилди. Соның менен бирге сканнерлеўдин үлкен емес интерваллары пайдаланылғанда ($< 5^0$) усыл жеткилик дәрежедеги анық топографиялық сұйреттін алынатуғынлығы, соның менен бирге O_2 көшери дөгерегиндеги фотопленканың айланыушы қозғалысының зәрүргилигинин жоқтығы көрсетилди. Бул жағдай қолланылған усылды әдеүир әпиүайластырыды.

Мүйешлик сканнерлеў камерасын изертленетуғын кристаллық үлги менен есаплағыштың тезликтери сәйкес о ҳәм 2ω болған қәлеген рентген гониометри тийкарында соғыў мүмкін. Бул питкеріў қәнигелик жұмысын орынлаў ушын ГУР-4 (УРС-50 аппараты), ГУР-5 (ДРОН-2 аппараты) ҳәм ГУР-8 (ДРОН-2 аппараты) рентген гониометрлери қолланылды.

7-§. Литий иодаты кристалларының кристаллық пәнжереси турақтыларының температурадан ғәрзлигі

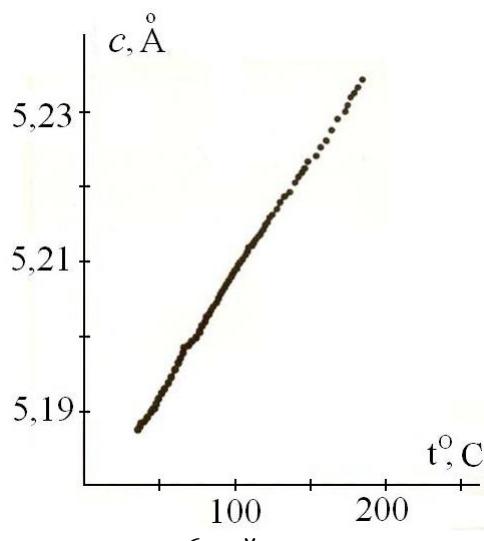
Литий иодаты кристалларының $70 - 120^0C$ температуралар интервалындағы физикалық қәсийетлериниң аномал өзгерислериниң орын алғыуы усы районда фазалық өтиўдин орын алатуғынлығы ҳәм жыллылық кеңейиў коэффициентлериниң өзгериске ушырайтуғынлығы ҳақындағы ойларға алғып келеди. Бул мәселени айқынластырыў ушын литий иодаты кристалларының кристаллық пәнжере турақтыларының температурадан ғәрзлигі изертленди.

Кристаллық пәнжере турақтыларының температурадан ғәрзлигі ДРОН-2 дифрактометринде мыс анодының нурланыўында өткерилди. Берилген температуралы алғы ушын жоқары температуралы рентген аппараты УВД-2000 қолланылды. Бул установка $20 - 300^0C$ интервалында температуралары $\pm 0,5^0$ дәллигінде услап тұра алады. Усындай температуралар интервалында кристаллық пәнжерениң сзыбықлы параметрлериниң салыстырмалы өзгерислерин $\pm 0,0005 \text{ \AA}$ дәллигінде анықланды.

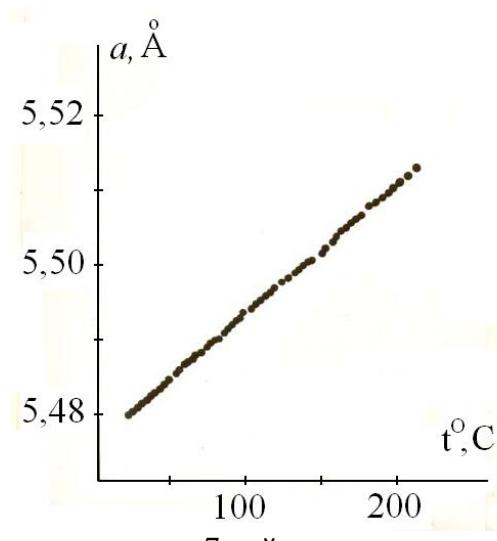
Экспериментлерде бетиниң майданы $\sim 1 \text{ cm}^2$ болған монокристаллық үлгилер пайдаланылды. Олардың бетлері (0001) ҳәм (1010) кристаллографиялық тегисликлер семействоларына параллель етип кесип алынды. $(0006)_\beta$ ($2\theta = 107,7^0$) ҳәм (6060) ($2\theta = 140,1^0$) дифракциялық шағылышылары сайлап алынды.

Алынған эксперименталлық нәтийжелер 6- ҳәм 7-сұйреттерде көрсетилген.

6-сұйретте «с» параметриниң температурадан ғәрзлилигин көремиз. Бул сұйретті дыққат пенен үйрений 80^0C әтирапында ғәрзлиликтің қыялышының өзгерислерге ушырайтуғынлығын айқын түрде көрсетеди. 20^0C дан 80^0C га шекемги температуралар интервалында жыллылық кеңейиў коэффициентиниң мәниси $\alpha_c = 6,3 \cdot 10^{-5} \text{ 1/град}$ шамасына тең. Ал 90^0C дан жоқары температураларда жыллылық кеңейиў коэффициентиниң мәниси кемейеди ҳәм $5,7 \cdot 10^{-5} \text{ 1/град}$ шамасына тең болады.



6-сүүрет.
«*c*» параметриниң температурадан
ғәрзелиги.



7-сүүрет.
«*a*» параметриниң температурадан
ғәрзелиги.

Биз жоқарыда қарап өткен температуралар интервалында «*a*» параметриниң мәнислери температурадан ғәрзели сызықты түрде өзгереди ҳәм сәйкес жылдылық кеңейиўи коэффициентиниң мәниси $5,7 \cdot 10^{-5}$ 1/град шамасына тең.

Жылдылық кеңейиўи коэффициентиниң «*c*» көшери бағытындағы 60°C температурасы әтирапындағы өзгериси бурын бақланған жоқ. Соның менен бирге биз алған мағлыўматлар [30]-жумыстың авторы тәрепинен алынған мағлыўматлардан бир қанша айырмаға ие. Биз алған мағлыўматлар менен [30] дың авторының мағлыўматлары төмендеги 9-кестеде берилген.

9-кесте

Литий иодаты кристаллары ушын жылдылық кеңейиўи коэффициентлериниң мәнислери, 10^{-5} 1/град.

<i>a</i>	[30] бойынша	Бизиң мағлыўматларымыз	
		80°C дан төменде	80°C дан жоқарыда
« <i>c</i> » көшери бойынша	5,44	6,3	5,7
« <i>a</i> » көшери бойынша	2,81	3,3	3,3

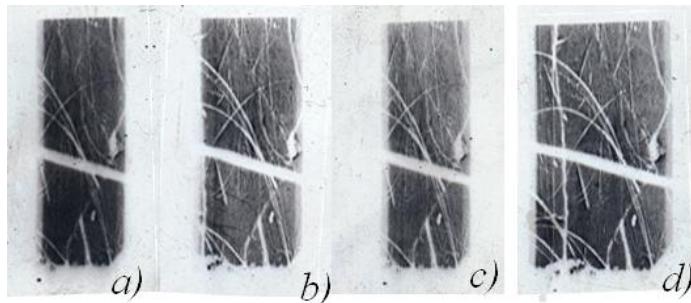
Кристаллық пәнжере турақтыларының ұлгилерди қыздырғанда алынған температурадан ғәрзелиги менен ұлгилерди салқынлатқанда алынған ғәрзелиги бирдей. Бул мағлыўматлардың барлығы да литий иодаты LiIO_3 кристалларында 80°C температурасы әтирапында структуралық фазалық өтиў орын алады деп болжаўға мүмкиншилиқ береди. Бул фазалық өтиўдин өзгешелікleri кейинги параграфларда талланады. Соның менен бирге 80°C температурасы әтирапындағы фазалық өтиўде кристалдың құрылышы сезилерліктей үлкен дәрежеде өзгерислерге ушырамаўы керек. Бул «*c*» көшери бойынша жылдылық кеңейиўи коэффициентиниң киши шамаға өзгериўинен көринип тур. Соның менен бирге бундай киши структуралық өзгерислердин орын алатуғының ренттентопографиялық изертлеўлерде де бақланды.

8-§. Ренттентопографиялық изертлеў

70 – 120°C температуралар интервалында LiIO_3 кристалларында орын алатуғын структуралық өзгерислерди тарацирек изертлеў мақсетинде ренттентопографиялық сүүретке түсириўлер әмелге асырылды. (1120) ҳәм (0001) тегисликлер семействоларына

параллель етип кесип алынған пластинка тәризли үлгилер пайдаланылды. Киши тәртипли рентген шағылысыўлары пайдаланылды ($\theta < 25^\circ$).

8-сүйретте литий иодаты кристалларының (1120)-кесиминен ҳәр қыйлы температураларда алынған мүйешлик сканнерлеў топограммалары келтирилген. Бул топограммаларда $LiIO_3$ кристалларында 120°C этирапында сезилерліктей структуралық өзгерислердин орын алмайтуғынлығы айқын түрде көринеди. Соның менен бирге 120°C температурасында үлгини узақ ўақыттар услап турыўдың да сезилерліктей структуралық өзгерислерге алып келмейтуғынлығын көрсетти (8-д сүйрет).

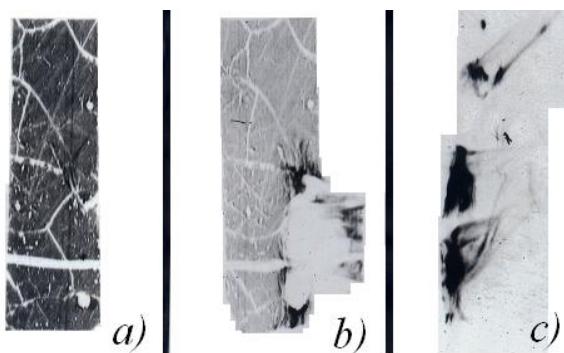


8-сүйрет.

$LiIO_3$ кристалларын (1120)-кесиминен түсирилген топограммалар. a) – өжире температурасында, b) - 120°C , c) - 120°C (еки saatтан кейин алынған), d) - 120°C (6 saatтан кейин алынған)

Жоқарырақ температураларда түсирилген рентген топограммаларында кескин түрде жүретуғын структуралық өзгерислер айқын түрде көринди. 9-сүйретте келтирилген топограммалар 20°C ҳәм 200°C температураларында түсирилген. Рентгентопографиялық экспериментлер 160°C температурасына шекемги температураларда $LiIO_3$ кристалларында сезилерліктей структуралық өзгерислердин болмайтуғынлығын көрсетти. 200°C температурасында үлгинин әстелик пенен қырайауының орын алатуғынлығы мәлім болды (9-б сүйрет). Үлгинин қырайауының турақты температурада ўақыттың өтийи менен жүретуғынлығы айқын болды (9-с сүйрет). Усындағы өзгерислердин салдарынан дәслепки мөлдир кристалл өзиниң мөлдирлигін толық жоғалтты, ал оннан өжире температураларда алынған дебаеграммалардағы дифракциялық сыйықтардың 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 сезилерліктей структуралық өзгерислердин орын алмайтуғынлығы көрсетти. 200°C температурада болса фазалық өтиў жүрип, бул үлгилердин ыдырауына (қырайауына) алып келеди. Бул құбылыстың төмендегидей жағдайлар менен байланыслы болыўы итимал:



9-сүйрет.

Литий иодаты кристалларының (1120)-кесиминен алынған мүйешлик сканнерлеў топограммалары.
a) – өжире температураларында, b) - 200°C ҳәм c) - 200°C температурасында 4 saat услап турылғаннан кейин.

[11]-жумыстың авторлары a- ҳәм β -фазалардың тығызлықтарының сәйкес 4,48 ҳәм 4,16 г/см³ екенлигін көрсеткен. Сонықтан $\alpha \rightarrow \beta$ фазалық өтийіндегі кристалдың көлеми 7,2 проценке өзгериўи шәрт. Көлемниң усындағы үлкен шамаларға өзгерислері әдетте

монокристаллардың бузылыуына алып келеди. Тап усындаған фазалық өтиўдин $Sm_{1-x}Gd_xS$ кристалларында да орны алатуғынлығын атап өтемиз [26-27].

Буннан кейин өткерилиген дифракциялық экспериментлер α -фазаның β -фазаға өтийиниң аралықтың γ -фаза арқалы жүзеге келетуғынлығын көрсетти. Бул ҳақында келеси параграфларда гәп етиледи.

9-§. Фазалық өтиўлерди рентгendifрактометрик изертлеў

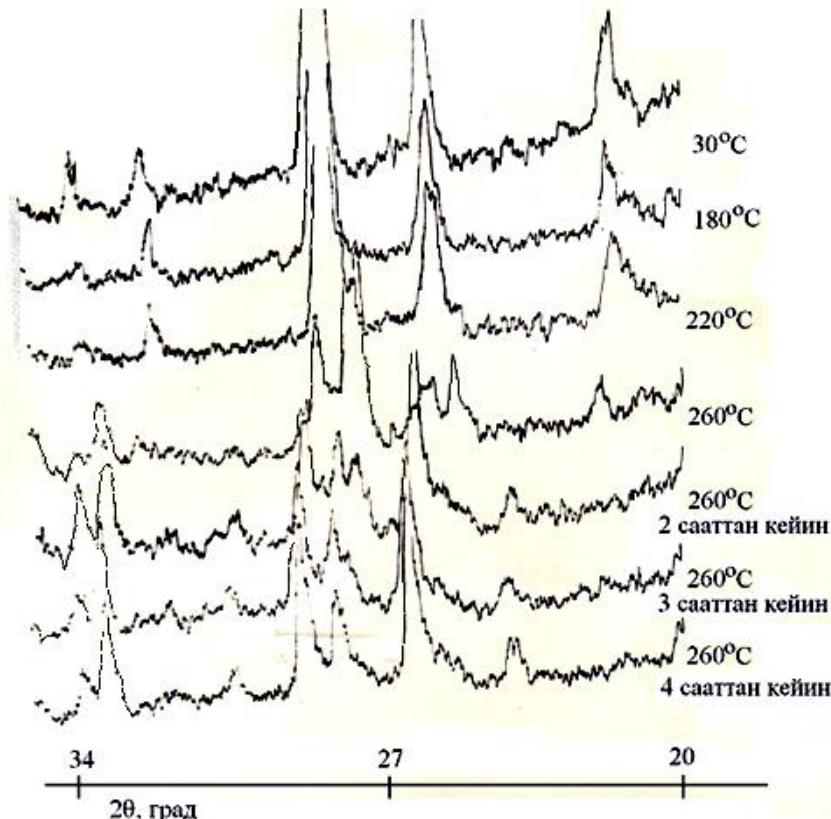
$LiIO_3$ кристалларындағы $\alpha \rightarrow \beta$ фазалық өтийиниң кинетикалық өзгешеликлерин изертлеў мақсединде унталған кристаллар менен ҳәр қылыш температураларда рентгendifрактометрик эксперименттер өткерилди. Бул экспериментлер ДРОН-2 рентген дифрактометринде мыс аноды нурланыуында әмелге асырылды. Рентген гониометриниң дифракцияға ушыраған рентген нурларын регистрирділаушы есаплағышының мүйешлик айланыў тезлиги 2 град/мин шамасын қурады. Алынған дифрактограммалрадың фрагментлери 10-сүйретте көлтирилген.

Сүйретте көлтирилген дифракциялық сызықларды дыққат пенен үйрениў 180^0C температурасына шекем тек α -фазаға тийисли дифракциялық сызықлардың болатуғынлығын көрсетти. 230^0C температурасында алынған дифрактограмма үлкен өзгешеклилерге ийе. Бундай дифрактограммаларда γ -фазаға сәйкес келиўши дифракциялық сызықлар орын алады. Температураны 260^0C га шекем көтергенде бул сызықлардың интенсивилері әдеўир үлкейди. Бирақ сол температурада еки сааттан кейин бундай сызықлар толық жоғалды, ал қалған дифракциялық сызықлардың барлығы да тек β -фазаға сәйкес келди. Усындаған экспериментлердин берген мағлыұматлары бойынша метастабилли деп аталатуғын γ -фазаның α - ҳәм β -фазалар арасында женил бақланатуғынлығына көз жеткеремиз. Соның менен бирге $\alpha \rightarrow \gamma \rightarrow \beta$ фазалық өтиўлері ушын тек температура емес, ал базы бир ўакыттың өтийиниң де зәрүр екенлигине көз жеткеремиз.

Буннан кейин өткерилиген айырым экспериментлерде дифракциялық сүйреттиң өзгерисиниң 70^0C өтирапында жүзеге келетуғынлығы мәлим болды. Ал айырым унталған кристалларда болса фазалық өтиў $230-260^0\text{C}$ интервалында бақланды. Бирақ фазалық өтиўдин тийкарынан 200^0C өтирапында жүретуғынлығына биз жоқарыда көз жеткерген едик.

Буннан кейни өткерилиген экспериментлер фазалық өтиўдин ҳәр қылыш үлгиде ҳәр қылыш температурада жүретуғынлығын толық тастыйықлады. Солай етип фазалық өтиў ноқатына үлгинин тарийхы менен басқа да өзгешеликлери (хақыйқый структурасы) тәсир етеди деген сөз.

Солай етип $LiIO_3$ кристалларын рентгendifрактометрик изертлеў жоқары температараларда қайтымсыз $\alpha \rightarrow \gamma \rightarrow \beta$ фазалық өтиўлериниң орын алатуғынлығын көрсетти. Фазалық өтиў ноқаты үлгинин тарийхы менен ҳақыйқый структурасына байланыслы.

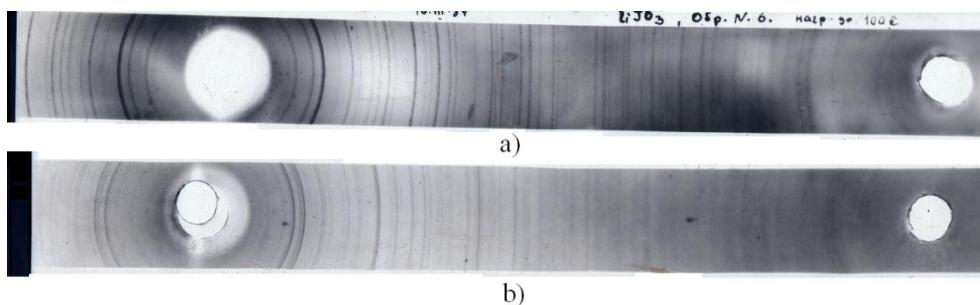


10-сүйрет.
Литий иодаты
кристалларынан ҳәр
қыйлы температураларда
алынған рентген
дифрактограммалары.

10-§. Дебаеграммаларды таллау

11-сүйретте унталған литий иодаты кристалларының α - ҳәм β -фазаларының дебаеграммалары көрсетилген. α -фазаның дебаеграммаларындағы дифракциялық сзықтар еки сзықтан турады. Сол қос сзықтардың ҳәлсизлерине киши дифракциялық мүйешлер сәйкес келеди. Бул кристаллар β -фазаға өткенде еки кристалға сәйкес келиўши дифракциялық сзықтар системасы пайда болады. Бул еки кристал ноқаттық симметриясы бойынша бирдей, ал кристаллық пәнжересиниң параметрлері бойынша 1-2 процентке айрылады.

Дебаеграммаларда киши параметрлерге ийе кристаллардың муғдары бойынша да аз еkenлиги айқын көринеди (5 проценттен киши).



11-сүйрет. Литий иодаты кристалларының дебаеграммалары. а) α -фазаға ҳәм б) β -фазаға тийисли. Дебаеграммаларда $Li_{1-x}H_xIO_3$ қатты еритпесине тийисли болған дифракциялық сзықтарды табыўға болады.

Ҳәр қыйлы турақтыларға ийе еки кристалдың бир ўақытта жасай алыў себеби айырым үлгилерде водородтың ионының ямаса атомының бар еkenлигинде деп болжаймыз.

Бундай ионлар ямаса атомлар қатты еритпени пайда етеди. Бундай еритпениң химиялық формуласын $Li_{1-x}H_xIO_3$ түріндө жазыў керек.

Киргизилген атомлар (қатты еритпени пайда етиўши атомлар) кристалды кеңейтеди. Усының нәтийжесинде қатты еритпеге киши дифракциялық мүйешке сәйкес келиўши дифракциялық сызықлар сәйкес келеди. Усы тийкарда литий иодаты кристалларының дебаеграммаларындағы дифракциялық сызықларды екиге ажыратыў зәрүрлиги пайда болады: бириншиси таза $LiIO_3$ кристалларына, ал екіншиси $Li_{1-x}H_xIO_3$ қатты еритпесине тийисли.

$\alpha - LiIO_3$ кристалларының дебаеграммасын индекслеудің нәтийжелери 10-кестеде берилген.

10-кесте

 $\alpha - LiIO_3$ кристалларының дебаеграммасын есаплаў

№	2θ, град	θ, град	sin(θ)	d, Å	hkl	d, Å, есапланған
I	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	

Есаплаўлар $\alpha - LiIO_3$ кристалларының кристаллық пәнжересинин тұрақтыларының төмендегидей екенлегин көрсетти:

$$a = 5,46 \pm 0,01 \text{ Å};$$

$$c = 5,16 \pm 0,01 \text{ Å}.$$

Бизиң мағлыўматларымыздың әдебиятта бар мағлыўматлардан парқының бар екенлегин аңғарамыз.

Солай етип дебаеграммаларды таллаў барысында биз изертленген кристаллардың таза литий иодаты ҳәм аз муғдардағы $Li_{1-x}H_xIO_3$ қатты еритпесинен туратынылығын көрсетти.

11-§. Гейпара жуўмақлар

Жоқарыда келтирилген эксперименталлық мағлыўматлар тийкарында $LiIO_3$ кристалларында 70-120⁰C интервалында орын алатуғын физикалық қәсийетлердин қайтымсыз өзгерислериниң физикалық себеплери хаққында төмендегидей жуўмақлар шығара аламыз:

Бизиң пикеримизше $LiIO_3$ кристалларында 70⁰C әтирапында $\alpha \rightarrow \gamma \rightarrow \beta$ фазалық өтиўлери жүрийи, ал бундай фазалық өтиўлерде кристалдың көлеми 7,2 % шамасына өзгериүи шәрт. Фазалық өтиўлердин кристалдағы структуралық дефектлер бар орынларда басланатуғынлығы бәршеге мәлім (дислокациялар, ноқатлық дефектлер комплекслері ҳәм т.б. дефектлер әтирапында). Бул кристалдың ишинде басымның үлкейійне алып келеди (кристалды толығы менен басым астына қойған менен барабар). Ал басым болса фазалық өтиў ноқатын өзгерти. Биз қарап атырған жағдайларда кристалл ишинде пайда болған қосымша басым фазалық өтиў ноқатын 200-250⁰C ға шекем жылыстырады. Биз изертлеген кристаллардағы $\alpha \rightarrow \gamma \rightarrow \beta$ фазалық өтиўлери қайтымсыз жүретуғын болғанлықтан литий иодаты кристалларының 70-120⁰C районындағы физикалық қәсийетлериниң өзгерислері де қайтымсыз рәүиште бақланады. Тап усындай құбылыстың басқа да кристалларда да орын алатуғынлығын биз билемиз.

Енди қайтымсыз $\alpha \rightarrow \gamma \rightarrow \beta$ фазалық өтиўлериниң механизмлери хаққында толық айта аламыз. Буның ушын биз бақлаған фазалық өтиўлердин төмендегидей өзгешеликтериниң бар екенлигин еслетип етемиз:

1. Фазалық өтиўдин дәрежеси ўақыттан ғәрэзли.

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 рәүиште 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 дұрыслығын [31-32] жумыслардың нәтийжелери де тастайықлады.

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 хаққында мақалалар: <http://fulleren.com/articlesf1.php>.

7. D. Campbell, A. McL Mathieson and M. F. Mackay. The absolute structure of LiIO₃ crystals. *Acta Cryst.* (1969). B25, 1214-1215.
8. A. E. Aliev, A. Sh. Akramov, L. N. Fershtat, P. K. Khabibullaev. Mechanism of a superion phase transition in α -LiIO₃. *Physica status solidi (a)*. Volume 108, Issue 1, pages 189–196, 16 July 1988.
9. Viera Trnovcová, František Hanic, Tatjana Šrámková, Andrej Škubla. Martensitic $\alpha \leftrightarrow \gamma$ Phase Transition and Ionic Conductivity in "Pure" and Doped LiIO₃ 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 LiIO₃ (γ -Al₂O₃). *Chinese Phys. Lett.* 4. 169. 1987.
11. Arend H., Remoissenet M., Staehlin W. Thermoanalytical study of the polymorphism in LiI0₃.—*Mat. Res. Bull.*, 1972, v. 7, N 9, p. 869—872.
12. Rosenzweig A., Morosin R. A reinvestigation of the crystal strukture of LiI0₃.—*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., Ямzin И. И., Любимцев В. А. Нейтронодифракционное уточнение структуры α -LiI0₃.— *Кристаллография*, 1973, т. 18, № 6, с. 1177—1181.
15. Эмирамиев А., Кочаров А. Г., Ямzin И. И., Любимцев В. А. Тепловые параметры атомов в α -LiI0₃.— *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 LiI0₃ и Ce(IO₃)₄.— *Доклады АН СССР*, 1972, т. 206, № 3, с. 613-616.
19. Schulz H. The structure of β -LiI0₃.— *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 II. G. The thermal behaviour of LiI0₃ — *Z. Kristallographie*, 1976, Bd 143, N 1; S. 99—111.
22. А. В. Яценко. Электростатическая модель пироэлектрика α – LiI0₃. *Кристаллография*. 2005. Т. 50. Вып. 6. 1054-1059. Кутолин С. А., Белова Л. Ф., Самойлова Р. П. и др. Оптические и физико-химические свойства монокристаллов α -LiI0₃.—Изв. АН СССР. Неорганические материалы, 1975, т. И, № 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 Sm_{0.8}Gd_{0.2}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 Sm_{0.85}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.