

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

Uli'wma fizika kafedrası'

**"Qattı' denelerdi difrakciyali'q izertlew
usi'llari"**

pa'ni boyi'nsha

OQI'W-METODIKALI'Q KOMPLEKS

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

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

No'kis -2013

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

_____ M. Ibragimov
2013-ji'l 29-iyun

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

SABAQLARG'A MO'LSHERLENGEN OQI'W PROGRAMMASI'

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

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

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

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

Qattı' denelerdi difrakciyalı'q izertlew usı'lları'

Annotaciya

Kurs ti'n'lawshi'lardi' kristalli'q materiallardı'n' difrakciyalı'q analizinin' tiykarları' menen tani'sti'ri'w ushi'n arnalıg'an. Ha'zirgi zaman kristallografiysi'ni'n' a'hmiyetli tu'sinikleri kirgizilgen, simmetriyani'n' noqatlı'q ha'm ken'isliklik gruppaları', simmetriyani'n' xarakteristikaları'n anı'qlaw usı'lları' bayanlang'an. Rentgen nurları'ni'n', sonı'n' menen bir qatarda elektronlardı'n', a'ste qozg'alatug'i'n neytronlardı'n' zatlar menen ta'sirlesiwini'n' fizikalı'q tiykarları' qarap shı'g'i'ladi'. Zatlardı'n' atomlı'q-kristalli'q strukturasi'n, haqı'yqı'y strukturasi'n, fazalı'q o'tıwlerdegi strukturalı'q processlerdi izertlegendegi eksperimentallı'q ma'seleler tallanadı'. Son'g'i' onlag'an ji'llar ishinde ası'lg'an strukturalı'q hallar bolg'an - kvazikristallarg'a, modulyaciyalang'an strukturalarg'a, fullerenlerge ayri'qsha itibar berilgen. Ti'n'lawshi'lar fizikani'n' ha'm ulı'wmali'q ximiyani'n' tiykarg'i' bo'limleri menen tani's dep esaplanadı'.

Kurstı'n' programması'

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

1. Tu'yinlik tuwri'. Kristallografiyalı'q tegislik. Elementar quti'. Pa'njere turaqli'lari'. Simmetriyali'q tu'r lendiriliwler tu'rleri. Simmetriyani'n' jabi'q elementleri.
2. Simmetriya elementlerin qosı'w. Simmetriya elementleri generaciyalaw. Kristallografiyalı'q noqatlı'q gruppalar. Kristallografiyalı'q sistemalar - singoniyalar. Simmetriya operaciyalari' menen noqatlı'q gruppaları' matricalar ja'rdeminde ko'rsetiw. Kyuridin' sheklik gruppaları'. Iksoedrlik singoniyani'n' noqatlı'q gruppaları'. Kvazikristall tu'sinigi.
3. Translyaciyalı'q gruppalar. Quti'ni' saylap ali'w qag'i'ydaları' ha'm Bravenin' 14 pa'njeresi. Kristalli'q pa'njere ha'm kristallardı'n' atomlı'q strukturalı' tu'siniklerin salı'sti'ri'w.
4. Translyaciya simmetriya elementi si'patı'nda. Vintlik ko'sherler, ji'lji'p shashi'rati'wshi' tegislikler. Ashı'q simmetriya elementlerin matricalardı'n' ja'rdeminde ko'rsetiw. Xali'q aralı'q sistema boyı'nsha simmetriya gruppaları'ni'n' belgileniwleri.
5. Noqatlardı'n' duri's sistemaları', noqatlardı'n' orbitaları'. Ulı'wmali'q ha'm dara ekvivalent awhallardı'n' sani'. Poziciyalardı'n' sani'na sa'ykes qutı'dag'i' atomlardı'n' sani' ha'm racionalı'q jaylası'wi' tu'sinigi. Kristaldi'n' belgili strukturasi'ni'n' tolı'q ta'riyipleniwi. Ti'g'i'z jaylastı'ri'lg'an sharlar. Jaylastı'ri'wlar defektleri. Strukturadag'i' tera - ha'm okto boslı'qlar.
6. Kristalli'q ko'p mu'yeshlikler. Apiwayı' formalar - tegislikler orbitaları'. Platonni'n' idealli'q figuraları' kublı'q ha'm iksoedrlik singoniyalardı'n' a'piwayı' formaları' si'patı'nda. Pa'njere ha'm pa'njere kompleksi. Kristallografiyalı'q proekciyalardı'n' tu'rleri - si'zi'qli', gnomoniyalı'q, stereografiyalı'q, gnomostereografiyalı'q. Vulf torı'.
7. Keri ken'islik metrikası'. Keri pa'njere ha'm onı'n' atomlı'q-kristalli'q pa'njerenin' xarakteristikaları' menen baylani'si'.

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

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

10. Sinxrotronli'q nurlani'w: sinxrotronli'q nurlardi' ali'wdi'n' fizikali'q principleri ha'm olardi'n' ilim menen texnikadag'i' qollani'li'wi'.

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

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

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

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

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

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

16. Lauenin' interferenciyalı'q funkciyasi'. Kishi kristaldi'n' shashi'rati'wi' haqqı'ndag'i' ma'sele. Difrakciyali'q maksimumlardı'n' payda boli'w sha'rtleri. Keri pa'njere tu'yinlerinin' formalari' ha'm o'lshemleri.

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

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

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

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

20. Belgisiz strukturani'n' analizinin' etapları'. Singoniyani', simmetriyani'n' noqatlı'q ha'm ken'isliklik gruppaları'n, elementar qutı'dag'i' atomlar si'nan ani'qlawda rentgenstrukturalı'q analiz usi'lları'n qollanı'wdı'n' izbe-izligi. Qutı'dag'i' atomlardı'n' koordinataları'n ani'qlawdı'n' eksperimentalli'q ha'm esaplaw usi'lları'. Si'nap ko'riw ha'm qa'teler usi'li'. Patterson sintezi. Fure sintezi.

21. Metal sistemalardi' tallaw ma'slesi. Hal diagrammalari'ndag'i' fazali'q oblastlardi'n' identifikasiyasi'. Qattı' eritpelerdin' ta'rtiplesiwi. quymalardag'i' dispersiyali'q qati'w, dyuralyuminiyidin' qartayı'wi'ndag'i' "eki o'lshemli" zarodi'shlar.

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

V. Elektronografiya menen neytronografiya tiykarkları'.

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

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

VI. Rentgen difrakciyali'q mikroskopiyasi'.

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

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

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

Tiykarg'i' a'debiyat

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

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

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

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

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

Qosi'msha a'debiyat

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

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

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

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

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

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

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

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

Sabaqlarg'a mo'lsherlengen oqi'w programmasi'

Lekciyali'q sabaqlar (30 saat)

Nº	Temalardi'n' atlari'	Saatlar sani'
1	Kristallografiya elementleri. Ken'isliklik pa'njere teoriyası'. Tu'yinlik tuwri' (Uzlovaya prymaya). Kristallografiyalı'q tegislik. Elementar quti'sha. Pa'njere turaqlı'lari'. Simmetriyali'q tu'r lendiriw tu'rleri. Simmetriyani'n' jabi'q elementleri. Simmetriya elementleri qosı'w. Simmetriya elementlerin generaciyalaw. Kristallografiyalı'q noqatlı'q topalar (gruppalar). Kristallografiyalı'q sistemalar -singoniyalar. Simmetriya operaciyalari'n ha'm noqatlı'q toparlardı' matricalar ja'rdeinde ko'rsetiw. Kyuridin' shektegi toparlari'. Ikosaedrdik singoniyali'n' noqatlı'q toparlari'. Kvazikristallar haqqı'nda tu'sinik.	2
2	Translyaciyalı'q topalar. Elementar quti'shani'n' ha'm 14 pa'njereni saylap ali'w qag'i'ydalari'. Kristallardi'n' atomli'q quri'li'si' (strukturasi') ha'm kristalli'q pa'njere tu'siniklerin sali'sti'ri'w. Translyaciya simmetriya elementi si'pati'nda. Vintlik ko'sherler, ji'lji'p shag'i'li'sti'ri'wshi' tegislikler. Simmetriyani'n' ashi'q elementlerin matricalar ja'rdeinde ko'rsetiw. Xali'q arali'q sistema boyi'nsha toparlardı' (gruppalardi') belgilew.	2
3	Noqatlardi'n' duri's sistemasi', noqatlardi'n' orbitasi'. Uli'wmali'q ha'm dara ekvivalentlik awhallardi'n' retliliği. Poziciyalardi'n' eseliligine sa'ykes quti'shadag'i' atomlardı'n' sani' ha'm olardi'n' racional jaylasi'wi'. Kristaldi'n' belgili strukturasi'ni'n' toli'q ta'riyipleniwi. Ti'g'i'z sharli'q	2

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

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

Seminar sabaqlari' (10 saat)

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

2	Rentgen nurlari'ni'n' ali'ni'wi' ha'm olardi'n' zatlar menen ta'sir etisiwi.	2
3	<p>Kristaldag'i' rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'.</p> <p>13. Shashi'rati'wshi' oraylardi'n' u'sh o'lshemli pa'njeresindegi difrakciyani'n' "geometriyali'q" teoriyası'. Vektorli'q ha'm skalyar an'latpalardag'i' Vulfa-Bregg ten'lemesi. Evald quri'li'si'. Brillyuen zonalari' shegaralari'.</p> <p>14. Keri pa'njere ko'rinisindegi tiykarg'i' difrakciyali'q sxemalar: Laue usi'li', poroshok usi'li', aylani'w (terbeliw) usi'li', ken' tarqalatug'i'n da'ste usi'li', polikristalli'q ob'ekt penen monokristaldi'n' difraktometriyası'.</p> <p>15. Rentgen reflekslerinin' intensivligi. Bir elementar quти'sha ta'repinen shashi'rati'w. Strukturali'q amplituda, uli'wma an'latpani' keltirip shi'g'ari'w.</p> <p>16. Lauenin' interferenciyalı'q funkciyasi'. Kishi kristal ta'repinen shashi'rati'w haqqi'ndag'i' ma'sele. Difrakciyali'q maksimumlardi'n' payda boli'w sha'rti. Keri pa'njerenin' tu'yinlerinin' formalari' ha'm o'lshemleri.</p>	2
4	Rentgen difraktometriyası' tiykarları'. Monokristallar ha'm polikristallar rentgenografiyası'ni'n' usi'lları'.	2
5	Elektronli'q mikroskopiya, elektronografiya ha'm neytronografiya tiykarları'.	2
	Ja'mi	10 saat.

Laboratoriyalı'q sabaqlar (20 saat)

Nº	Laboratoriyalı'q jumi'slardi'n' atamalari'	Saat sani'
1	Polikristalli'q u'lgilerdi paydalani'p kristalli'q pa'njerenin' o'lshemleri menen tiplerin ani'qlaw.	4
2	Sapali'q fazali'q tallaw.	2
3	Kubli'q monokristallardi'n' orientaciyalari'n tabi'w.	4
4	Kristallardi' aylani'w ha'm terbeliw usi'llari'ni'n' ja'rdeinde u'yreniw.	4
5	Polikristallardi'n' rentgenogrammaları' boyi'nsha kristallardi'n' simmetriyası'ni'n' ken'isliktegi gruppasi'n ani'qlaw.	4
6	Polikristallardi'n' rentgenogrammaları' boyi'nsha elementar quти'ni'n' parametrlerin da'l ani'qlaw (precizion ani'qlaw).	2
	Ja'mi	20 saat

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

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

- Ken'isliklik pa'njere tu'sinigi. Translyaciyalı'q pa'njereni geometriyali'q ta'riyiplew. Ken' tu'rde qollani'latug'i'n tu'sinikler menen terminler.
- Tu'yinler pa'njeresi. Pa'njere turaqli'lari'. Oni'n' orientaciyalı'q xarakteristikaları' (indekslew).

3. Kristallografiyani'n' ta'jiriybede ashi/lg'an ni'zamlari'. Kristallardi'n' mu'yeshlerinin' turaqli'li'g'i' ni'zami'. Ko'sherlik kesindilerdin' qatnaslari'ni'n' racionalli'q ni'zami'.
4. Kristallardi'n' bir tekligi menen anizotropli'g'i' ni'zami'.
5. Ti'g'i'z jaylasti'ri'lg'an sharlar teoriyası'. Jaylasti'ri'w simmetriyası'. SHarlardi' ti'g'i'z jaylasti'ri'wda payda bolatug'i'n tetraedrdik ha'm oktaedrlik bosliqlar. Olardi'n' geometriyali'q xarakteristikaları'.
6. Ionli'q kristallardi'n' quri'li'si'ni'n' qa'liplesiwindegi qag'i'ydalar.
7. Molekulalardi' ti'g'i'z jaylasti'ri'w teoriyası'.
8. Kristallografiyali'q proekciyalar. Sferali'q proekciya. Stereografiyali'q proekciya. Gnomostereografiyali'q proekciya. Vulf setkasi'.
9. Tu'yinlik tuwri'. Oni'n' indeksleri.
10. Tu'yinlik tegislik. Miller indeksleri.
11. Strukturali'q kristallografiyani'n' tiykarg'i' formulalari'. Elementar quti'ni'n' ko'lemi.
12. Jabi'q simmetriya elementleri. Inversiya orayi'. Simmetriya ko'sherleri. Vintlik simmetriya ko'sherleri.
13. Kristallografiyali'q koordinatalar, sistemalar, singoniyalar.
14. Ashi'q simmetriya elementleri. Vintlik ko'sherler. Ji'lji'p shashi'rati'wshi' simmetriya tegislikleri.
15. Translyaciya simmetriyali'q operaciya si'pati'nda. Translyaciyalı'q gruppalar.
16. Elementar quti'dag'i' simmetriya elementlerin generaciyalaw. Simmetriya elementleri qosı'w haqqı'ndag'i' teoremlar.
17. Simmetriyali'q operaciyalar. Simmetriyali'q operaciyalardi'n' gruppanı' payda etetug'i'nli'g'i'. Gruppali'q aksiomalar. Simmetriyani'n' noqatlı'q gruppasi'.
18. 32 dana noqatlı'q gruppalardı' ta'riyiplew. Kristallografiyali'q klasslar.
19. Pa'njerede mu'mkin bolg'an jabi'q simmetriyali'q tu'rlendiriliwler. Buri'w ko'sherleri ha'm infersiyali'q ko'sherler.
20. Birdey bolg'an simmetriya ko'sherleri arasi'ndag'i' mu'mkin bolg'an mu'yeshler.
21. Elementar quti'ni' saylap ali'wdi'n' usi'llari'. Brave pa'njereleri.
22. Pa'njenenin' simmetriya elementlerinin' ja'rdeminde ori'nlamatug'i'n tu'rlendiriliwler. Noqatti'n' tu'rlendiriliwi.
23. Pa'njenenin' simmetriya elementlerinin' ja'rdeminde ori'nlamatug'i'n tu'rlendiriliwler. Kristallografiyali'q tegisliklerdi tu'rlendiriliw.
24. Kristallardag'i' difrakciyali'q effekt. Keri pa'njere. Keri ha'm tuwri' pa'njenenin' parametrleri arasi'ndag'i' baylanı's.
25. Keri vektordi'n' uzi'nli'g'i' ha'm tegislikler arasi'ndag'i' qashi'qli'q. Zonalar ni'zami'.
26. Tu'yinlik tuwri' menen tu'yinlik tegisliktin' perpendikulyarlı'g'a menen parallelligi sha'rti.
27. Tu'yinlik tuwri'lar menen tu'yinlik tegislikler arasi'ndag'i' mu'yeshlerdin' ma'nislerin esaplaw.
28. Pa'njenenin' tiykarg'i' vektorları'n yamasa koordinatalar ko'sherlerin saylap ali'wdi'n' ha'r qi'yli' usi'llari'.
29. Ken'islikti si'zi'qli' tu'rlendiriliw. Parallel tu'rdegi ji'lji'w yamasa translyaciya.
30. Ken'islikti si'zi'qli' tu'rlendiriliw. Ko'sher do'geregindegi buri'w.
31. Ken'islikti si'zi'qli' tu'rlendiriliw. Inversiya. Inversiya ushi'n si'zi'qli' tu'rlendiriliw koefficientlerinen du'zilgen ani'qlawshi'ni'n' qa'siyetleri.
32. Ken'islikti si'zi'qli' tu'rlendiriliw. Si'zi'qli' tu'rlendiriliw ushi'n uli'wmali'q jag'day. Si'zi'qli' tu'rlendiriliw koefficientlerinen du'zilgen ani'qlawshi'ni'n' qa'siyetleri.
33. Rentgen trubkalari'. Rentgen apparatlari'. Olardi'n' konstrukciyali'q o'zgeshelikleri.
34. Rentgen nurlari'ni'n' spektri. Xarakteristikali'q ha'm tormozli'q rentgen nurlari'wi' (rentgen nurlari'ni'n' u'zliksiz spektri).
35. Xarakteristikali'q spektr. Xarakteristikali'q rentgen nurlari'ni'n' seriyalari'.

36. Rentgen nurlari' menen zatlardi'n' ta'sirlesiwini' uli'wmali'q kartinasi'. Juti'w koefficienti (ha'lzurew koefficienti). Filtrler.
37. Rentgen nurlari'ni'n' fotografiyali'q ta'siri. Rentgen nurlari'ni'n' intensivligin fotoplenkani'n' qarawi'ti'wi' boyi'nsha o'lshew. Rentgenogrammalardi' fotometrlew.
38. Rentgen nurlari'ni'n' ionlasti'ri'w ta'siri ha'm intensivlikti ani'qlawdi'n' ionizaciyalı'q usi'li'. Ionizaciyalı'q kameralar.
39. Kristallarda difrakciyag'a ushi'rag'an rentgen nurlari'ni'n' bag'i'ti'.
40. Rentgen nurlari'ni'n' elektronlardag'i' shashi'rawi'.
41. Atomli'q faktor ha'm elektronlardi'n' tarqali'wi'. Erkin atomlar ushi'n atomli'q faktordi' esaplaw.
42. Lauefunkciyasi'. Oni'n' kristallar rentgenografiyasi'nda tutqan orni'. Laue funkciyasi' menen kristaldi'n' o'lshemleri arasi'ndag'i' baylani's.
43. Laue usi'li'nda kristaldi'n' orientirovkasi'n ani'qlaw.
44. Laue usi'li'. Laue usi'li' kristaldi'n' simmetriyasi'n ani'qlawg'a mu'mkinshilik beretug'i'n tiykarg'i' usi'l si'pati'nda. Usi'ldi'n' ideyasi'. Interferenciyalı'q kartinani'n' geometriyasi'. Zonali'q iymeklikler.
45. Laue usi'li'ni'n' ja'rdeinde monokristallardi'n' mu'yeshlik konstantalari'n ani'qlaw.
46. Laue klasslari'. Lauegrammalardi'n' 10 tipi.
47. Lauegrammalardi'n' gnomonli'q proekciyalari'. Gnomonli'q si'zg'i'sh. Lauegrammalardi' indekslew.
48. Lauegramma boyi'nsha kristaldi'n' bag'i'tlari'n ani'qlaw. Duri's formag'a iye monokristallardi'n' pa'njeresinin' ko'sherlerinin' bag'i'tlari'n ani'qlaw.
49. Rentgenogrammlardi'n' simmetriyasi'. Lauegrammalardi'n' simmetriyasi'.
50. Bregg-Vulf ten'lemesi. Vektorli'q formadag'i' difrakciyani'n' ten'lemesi.
51. Keri pa'njere. Keri pa'njere ko'rinisindegi difrakciyalı'q sxemalar.
52. Kristallardi'n' strukturası'n difrakciyalı'q izertlewde qollani'latug'i'n nurlar ha'm olardi'n' derekleri.
53. Rentgen nurlari'. Rentgen nurlari' derekleri. Strukturalı'q analiz ushi'n qollani'latug'i'n rentgen trubkalari'ni'n' konstrukciyasi'ni'n' o'zgeshelikleri.
54. Rentgen nurlari'n registraciyalaw ushi'n arnalg'an detektorlar. Fotografiyalı'q registraciyalaw.
55. Strukturalı'q analiz ushi'n arnalg'an rentgen apparatlari' ha'm kameralari'.
56. Neytronlar da'stelerinin' derekleri.
57. Elektronli'q difrakciya apparatlari'. Elektronli'q mikroskoplar. Principialı'q du'zilisi.
58. Rentgen nurlari'ni'n' shashi'rawi'. SHashi'rawdi'n' elementar akti.
59. Difrakciyag'a ushi'rag'an rentgen nurlari'ni' ji'lli'li'q terbelislerinin' ta'siri. Temperaturalı'q faktor.
60. Rentgen tolqi'nları' ushi'n ji'lli'li'q diffuziyali'q maksimumlari'. Tiykarg'i' faktler.
61. Diffuziyali'q maksimumlar kartinasi' menen kristaldi'n' strukturası' arasi'ndag'i' baylani's.
62. Rentgen nurlari' ha'm elektronlar ushi'n shashi'rawdi'n' atomli'q faktori'.
63. "Utnalg'an" kristallar (polikristallar) usi'li' ushi'n qaytalani'w faktori'.
64. Idealli'q kristall. Birinshi ekstinkciya.
65. Birinshi ekstinkciyani' esapqa ali'w. Ideal mozaikali'q kristall.
66. Elementar quti'dag'i' shashi'raw. Strukturalı'q faktor. Tiykarg'i' formulalar.
67. Strukturalı'q amplitudalardi' tallaw. Sistemali'q o'shiwler. Strukturalı'q faktor formulalari' ushi'n dara jag'daylar.
68. Keri pa'njerenin' konfiguraciyasi' ha'm simmetriyasi'ni'n' ken'isliklik gruppasi'.
69. Kristaldag'i' rentgen nurlari'ni'n', elektronlardı'n' ha'm neytronlardı'n' shashi'rawi'. Lauenin' interferenciyalı'q funkciyasi'.

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

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

72. Elektronli'q ti'g'i'zli'qtin' qatari' usi'li'. Fure qatari'na jayi'w ha'm strukturali'q analizdin' principleri. Elektronli'q ti'g'i'zli'qtin' u'sh o'lshemli qatari'.

73. Fure tolqi'nları'ni'n' qa'siyeti ha'm kristaldi'n' keri pa'njeresi.

74. Difrakciyani'n' keri ma'selesi haqqı'nda. Fure sintezi. Patterson Sintezi.

75. Keri pa'njere ken'isligindegi interferenciyalı'q (Laue) funkciyasi'. Strukturali'q faktor ha'm keri pa'njere.

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

77. Integralli'q intensivlik. Rentgen difraktometrinin' ja'rdeinde intergalli'q intensivlikti ani'qlaw.

78. Rentgen nurlari'nan, neytronlardan qorg'ani'w ha'm dozimetriya tiykarları'.

79. Monokristallardan ali'ng'an rentgenogrammalardı' esaplawdag'i' sistemali'q izbe-izlik (kristaldi'n' orientirovkası'n, turaqli'lari'n ha'm Brave pa'njeresinin' tipin ani'qlawdag'i' izbe-izlik).

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

81. Belgisiz kristalli'q strukturani' rasshifrovkalawdi'n' fizikalı'q tiykarları' ha'm izbeliqligi.

82. Kristalli'q pa'njerenin' xarakteristikaları' Aylani'w (terbeliw) usi'li'. Usi'ldi'n' ideyası'. Qatlamlı'q si'zi'qlar. Kristalli'q pa'njerenin' parametrlerin ani'qlaw.

83. Aylani'w (terbeliw) usi'li'. Kristalli'q pa'njerenin' parametrlerin ani'qlaw.

84. Aylani'w (terbeliw) usi'li'. Rentgenogrammalardı' indekslew. Aylani'w (terbeliw) usi'li'ni'n' ja'rdeinde aysi'ri'm kristallardi'n' simmetriyası'ni'n' ken'isliktegi gruppasi'n ani'qlaw mu'mkinshilikleri.

85. Intensivlikti esapqa almaytug'i'n strukturalı'q analiz. Usi'llardi'n' geometriyali'q sxemalari'.

86. Ti'g'i'z jaylasti'ri'w teoriyası'. Atomli'q ha'm molekulalı'q arali'q radiuslar. Koordinaciyalı'q san.

87. Rentgenstrukturalı'q analiz ushi'n polikristalli'q u'lgerdi tayarlaw.

88. Polikristaldi'n' rentgenogramması'n teoriyalı'q esaplaw.

89. Kristalli'q pa'njerenin' da'wırlerin ha'm kristallografiyalı'q tegislikler arası'ndag'i' qashi'qli'qlardı' precizionlı'q (da'l) ani'qlaw.

90. Polikristallardı' difrakciyali'q izertlew usi'lları'. Izertlewlerdin' ma'nisi menen maqsetleri. Polikristalli'q u'lginin' (yamasa untalg'an kristaldi'n') rentgenogramması'. Debay (Debay-SHerer) usi'li'.

91. Polikristallardı' difrakciyali'q izertlew din' a'dettegi usi'li'. Rentgenogrammanı'n' tu'ri. Rentgenogrammalardı' indekslew.

92. Kristallografiyalı'q tegislikler arası'ndag'i' qashi'qli'qlar boyi'nsha mag'li'wmatlar tiykari'nda zatti' ani'qlaw.

93. Debay usi'li'nda kristalli'q pa'njerenin' turaqli'lari'ni'n' ma'nisin ani'qlawdi'n' da'lligi ha'm o'lshew da'lligin joqari'lati'w ila'jlari'.

94. Debay usi'li'nda kristalli'q pa'njerenin' tipin ani'qlaw usi'llari'. Rentgen nurlari'ni'n' o'shiw qag'i'ydaları'.

95. Rentgenogrammlar boyi'nsha kristalli'q bo'lekshelerdin' o'lshemlerin ani'qlaw usi'llari'.

96. Sapali'q fazali'q analiz. Kristalli'q strukturani' ani'qlaw menen ali'p bari'latug'i'n sapali'q fazali'q analiz.

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

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

99. Elektronografiya menen elektronli'q mikroskopiyasi. Elektronogrammani'n' qa'liplesiwinin' geometriyali'q o'zgeshelikleri.

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

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

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

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

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

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

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

107. Kristallardag'i' fazali'q o'tiwlerdi ha'm strukturali'q transformaciyalardi' difrakciyali'q izertlewdin' fizikali'q tiykarlari'.

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

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

110. Neytronografiyani'n' ja'rdeinde sheshiletug'i'n' ma'seleler. Ferromagnetikler menen antiferromagnetiklerdi izertlewdin' fizikali'q tiykarlari'.

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

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

113. Elektronli'q mikroskopli'q izertlewed ushi'n replikalardi' ha'm poroshok tu'rindagi ob'yektlerdi tayarlaw.

114. U'lken materiallardan metall folgalardi' tayarlaw ha'm olardi' elektron-mikroskopiyali'q ja'ne elektronografiyali'q izertlewed.

115. Elektron mikroskopi'nda substrukturani' ha'm dislokaciyalı'q strukturani'n' xarakteristikalarini'ndan izertlewed usi'llari'.

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

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

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

119. Ayi'ri'm dislokaciyalardi'n' ha'm dislokaciyalı'q strukturalardi'n' qanday xarakteristikaları' elektronli'q-mikroskopiyali'q izertlewedlerdin' bari'si'nda ani'qlanadi'?

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

121. Rentgen difraktometrine difrakciyali'q si'zi'qlardi'n' integralli'q intensivligin ani'qlaw usi'llari'.

122. Epigramma boyi'nsha monokristaldi'n' kristallografiyali'q bag'i'tlari'n' ani'qlaw.

"Qatti' denelerdi difrakciyali'q izertlewed usi'llari'" pa'ni boyi'nsha juwmaqlaw qadag'alawi' variantlari'

1-variant

1. Ken'isliklik pa'njere tu'sinigi. Translyaciyalı'q pa'njereni geometriyali'q ta'riyiplew. Ken' tu'rde qollani'latug'i'n tu'sinikler menen terminler.
2. Elektron mikroskopı'nda substrukturani' ha'm dislokaciyalı'q strukturani'n' xarakteristikaları'n izertlewed usı'lları'.
3. Tu'yinlik tuwri'lar menen tu'yinlik tegislikler arası'ndag'i' mu'yeshlerdin' ma'nislerin esaplaw.
4. Kristallardag'i' fazalı'q o'tiwlerdi ha'm strukturalı'q transformaciyalardı' difrakciyalı'q izertlewdin' fizikalı'q tiykarları'.
5. Intensivlikti esapqa almaytug'i'n strukturalı'q analiz. Usı'llardı'n' geometriyali'q sxemaları'.

2-variant

1. Tu'yinler pa'njeresi. Pa'njere turaqlı'lari'. Onı'n' orientaciyalı'q xarakteristikaları' (indekslew).
2. Ken'islikti si'zi'qli' tu'r lendiriw. Inversiya. Inversiya ushi'n si'zi'qli' tu'r lendiriw koefficientlerinen du'zilgen ani'qlawshi'ni'n' qa'siyetleri.
3. Elektronlı'q mikroskopıtag'i' elektronlar da'stesinin' payda boli'wi'. Elektronlar tolqi'nları'ni'n' tolqi'n uzi'nli'g'i'.
4. Ti'g'i'z jaylastı'ri'w teoriyası'. Atomlı'q ha'm molekulalı'q aralı'q radiuslar. Koordinaciyalı'q san.
5. Elektron mikroskopı'nda substrukturani' ha'm dislokaciyalı'q strukturani'n' xarakteristikaları'n izertlewed usı'lları'.

3-variant

1. Kristallografiyanı'n' ta'jiriybede ashi'lg'an ni'zamları'. Kristallardı'n' mu'yeshlerinin' turaqlı'li'g'i' ni'zami'. Ko'sherlik kesindilerdin' qatnasları'ni'n' racionallı'q ni'zami'.
2. Pa'njerenin' simmetriya elementlerinin' ja'rdeinde ori'nlanatug'i'n tu'r lendiriwler. Kristallografiyalı'q tegisliklerdi tu'r lendiriw.
3. Rentgen nurları'ni'n' spektri. Xarakteristikali'q ha'm tormozlı'q rentgen nurları'wi' (rentgen nurları'ni'n' u'zliksiz spektri).
4. U'lken materiallardan metall folgalardı' tayarlaw ha'm olardi' elektron-mikroskopiyali'q ja'ne elektronografiyalı'q izertlewed.
5. Polikristallardı' difrakciyalı'q izertlewdin' a'dettegi usı'li'. Rentgenogrammanı'n' tu'ri. Rentgenogrammalardı' indekslew.

4-variant

1. Kristallardı'n' bir tekligi menen anizotropı'g'i' ni'zami'.
2. Rentgen nurları'ni'n' xarakteristikali'q spektri. Xarakteristikali'q rentgen nurları'ni'n' seriyalari'.
3. Keri pa'njere ken'isligindegi interferenciyalı'q (Laue) funkciyası'. Strukturalı'q faktor ha'm keri pa'njere.
4. Elektronlı'q mikroskopı'q izertlewed ushi'n replikalardı' ha'm poroshok tu'r indegi ob'ektlerdi tayarlaw.
5. Integralli'q intensivlik. Rentgen difraktometrinin' ja'rdeinde intergalli'q intensivlikti ani'qlaw.

5-variant

1. Ti'g'i'z jaylasti'ri'lg'an sharlar teoriyası'. Jaylasti'ri'w simmetriyasi'. SHarlardi' ti'g'i'z jaylasti'ri'wda payda bolatug'i'n tetraedrdik ha'm oktaedrlik bosli'qlar. Olardi'n' geometriyali'q xarakteristikaları'.

2. Kristallardag'i' difrakciyali'q effekt. Keri pa'njere. Keri ha'm tuwri' pa'njerenin' parametrleri arası'ndag'i' baylani's.

3. Elektronli'q mikroskopı'n' u'lkeyte ali'wshi'li'q qa'diletligi ha'm oni'n' ob'jektivlik, aralı'qli'q, proekciyali'q linzalardi'n' xarakteristikaları'nan g'a'rezligi.

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

5. Laue klassları'. Lauegrammalardı'n' 10 tipi.

6-variant

1. Ionlı'q kristallardı'n' quri'li'si'ni'n' qa'liplesiwindegi qag'i'ydalar.

2. Pa'njerede mu'mkin bolg'an jabi'q simmetriyali'q tu'r lendiriwler. Buri'w ko'sherleri ha'm infersiyali'q ko'sherler.

3. Laue funkciyasi'. Onı'n' kristallar rentgenografiyasi'nda tutqan orni'. Laue funkciyasi' menen kristaldi'n' o'lshemleri arası'ndag'i' baylani's.

4. Neytronografiyani'n' ja'rdeminde sheshiletug'i'n ma'seleler. Ferromagnetikler menen antiferromagnetiklerdi izertlewdin' fizikalı'q tiykarları'.

5. Elektronli'q mikroskopı'n' linzaları': kondensorlı'q, ob'jektivlik, aralı'qli'q, proekciyali'q.

7-variant

1. Molekulalardı' ti'g'i'z jaylasti'ri'w teoriyası'.

2. Laue usı'li'ni'n' ja'rdeminde monokristallardı'n' mu'yeshlik konstantaları'na ani'qlaw.

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

4. Keri vektordı'n' uzi'nli'g'i' ha'm tegislikler arası'ndag'i' qashi'qli'q. Zonalar ni'zami'.

5. Difrakciyali'q mikroskopiya. Rentgen topografiyasi'. Mu'yeshlik skannerlew usı'li'.

8-variant

1. Kristallografiyali'q proekciyalar. Sferali'q proekciya. Stereografiyali'q proekciya. Gnomostereografiyali'q proekciya. Vulf setkasi'.

2. Rentgen trubkaları'. Rentgen apparatlari'. Olardi'n' konstrukciyali'q o'zgeshelikleri.

3. Fazalı'q analiz. Sapalı'q ha'm sapalı'q fazalı'q analiz. Difrakciyali'q eksperimentlerde ali'ng'an na'tiyjeler tiykari'nda hal diagrammaları'n' du'ziw.

4. Lauegrammalardı'n' gnomonli'q proekciyalari'. Gnomonli'q si'zg'i'sh. Lauegrammalardı' indekslew.

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

9-variant

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

2. Ken'islikti si'zi'qli' tu'r lendiriw. Si'zi'qli' tu'r lendiriw ushi'n uli'wmali'q jag'day. Si'zi'qli' tu'r lendiriw koefficientlerinen du'zilgen ani'qlawshi'ni'n' qa'siyetleri.

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

4. Lauegramma boyı'nsha kristaldi'n' bag'i'tlari'n' ani'qlaw. Duri's formag'a iye monokristallardı'n' pa'njerelerinin' bag'i'tlari'n' ani'qlaw.

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

10-variant

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

11-variant

1. Kristaldag'i' rentgen nurlari'ni'n', elektronlardı'n' ha'm neytronlardı'n' shashi'rawi'. Lauenin' interferenciyalı'q funkciyasi'.
2. Elektronli'q mikroskopıti'n' principialı'q optikalı'q sxemasi'. Elektronli'q pushka, kondensor, elektronli'q linzalar.
3. Kristalli'q pa'njererin' da'wırlerin ha'm kristallografiyali'q tegislikler arası'ndag'i' qashi'qli'qlardı' precizionlı'q (da'l) ani'qlaw.
4. Tu'yinlik tuwri'. Onı'n' indeksleri. Tu'yinlik tegislik. Miller indeksleri.
5. Rentgen nurları'n registraciyalaw ushi'n arnalğ'an detektorlar. Fotografiyali'q registraciyalaw.

12-variant

1. Jabi'q simmetriya elementleri. Inversiya orayı'. Simmetriya ko'sherleri. Vintlik simmetriya ko'sherleri.
2. Difrakciyag'a ushi'rag'an rentgen nurlari'ni' ji'lli'li'q terbelislerinin' ta'siri. Temperaturalı'q faktor.
3. Elektronografiya menen elektronli'q mikroskopiya. Elektronogrammani'n' qa'liplesiwinin' geometriyali'q o'zgeshelikleri.
4. Sanlı'q fazali'q rentgenstrukturalı'q analiz. Difrakciyag'a ushi'rag'an rentgen tolqi'nlari'ni'n' intensivliklerin o'lshew ma'seleleri.
5. Debay usi'li'nda kristalli'q pa'njererin' turaqli'lari'ni'n' ma'nisin ani'qlawdi'n' da'lligi ha'm o'lshew da'lligin joqarılatı'w ila'jlari'.

13-variant

1. Kristallografiyali'q koordinatalar, sistemalar, singoniyalar.
2. Rentgen tolqi'nlari' ushi'n ji'lli'li'q diffuziyali'q maksimumlari'. Tiykarg'i' faktler.
3. Elektronli'q ti'g'i'zli'qtı'n' qatari' usi'li'. Fure qatari'na jayı'w ha'm strukturalı'q analizdin' principleri. Elektronli'q ti'g'i'zli'qtı'n' u'sh o'lshemli qatari'.
4. Rentgenogrammlar boyi'nsha kristalli'q bo'lekshelerdin' o'lshemlerin ani'qlaw usi'llari'.
5. Pa'njerinin' tiykarg'i' vektorlari'n yamasa koordinatalar ko'sherlerin saylap ali'wdi'n' ha'r qi'yli' usi'llari'.

14-variant

1. Ashı'q simmetriya elementleri. Vintlik ko'sherler. Ji'lji'p shashi'rati'wshi' simmetriya tegislikleri.
2. Rentgen nurları' menen zatlardı'n' ta'sirlesiwini'n' ulı'wmali'q kartinası'. Juti'w koefficienti (ha'lşirew koefficienti). Filtrler.
3. Debay usi'li'nda kristalli'q pa'njerinin' tipin ani'qlaw usi'llari'. Rentgen nurları'ni'n' o'shiw qag'i'ydaları'.

4. Kristallografiyali'q tegislikler arasi'ndag'i' qashi'qli'qlar boyi'nsha mag'li'wmatlar tiykari'nda zatti' ani'qlaw.
5. Birinshi ekstinkciyani' esapqa ali'w. Ideal mozaikali'q kristall modeli.

15-variant

1. Translyaciya simmetriyali'q operaciya si'pati'nda. Translyaciyalı'q gruppalar.
2. Kristallarda difrakciyag'a ushi'rag'an rentgen nurlari'ni'n' bag'i'ti'.
3. Elektronli'q difrakciya apparatlari'. Elektronli'q mikroskoplar. Principiiali'q du'zilisi.
4. Elementar quti'dag'i' shashi'raw. Strukturali'q faktor. Tiykarg'i' formulalar.
5. Neytronlar da'stelerinin' derekleri.

16-variant

1. Elementar quti'dag'i' simmetriya elementlerin generaciyalaw. Simmetriya elementleri qosı'w haqqı'ndag'i' teoremalar.
2. Rentgen nurlari'ni'n' ionlasti'ri'w ta'siri ha'm intensivlikti ani'qlawdi'n' ionizaciyalı'q usı'li'. Ionizaciyalı'q kameralar.
3. Bregg-Vulf ten'lemesi. Vektorli'q formadag'i' difrakciyani'n' ten'lemesi.
4. Simmetriyali'q operaciyalar. Simmetriyali'q operaciyalardı'n' gruppası' payda etetug'i'nli'g'i'. Gruppali'q aksiomalar. Simmetriyani'n' noqatlı'q gruppası'.
5. Belgisiz kristalli'q strukturani' rasshifrovkalawdi'n' fizikalı'q tiykarları' ha'm izbeliliği.

17-variant

1. 32 dana noqatlı'q gruppalardı' ta'riyiplew. Kristallografiyali'q klasslar.
2. Keri pa'njere. Keri pa'njere ko'rinisindegi difrakciyalı'q sxemalar.
3. Kristallardi'n' strukturasi'n' difrakciyalı'q izertlewedə qollanı'latug'i'n' nurlar ha'm olardı'n' derekleri.
4. Ken'islikti si'zi'qli' tu'r lendiriw. Parallel tu'rdegi ji'lji'w yamasa translyaciya.
5. Polikristallardi' difrakciyalı'q izertlewedə usı'lları'. Izertlewlerdin' ma'nisi menen maqsetleri. Polikristalli'q u'lginin' (yamasa untalg'an kristaldi'n') rentgenogramması'. Debay (Debay-SHerer) usı'li'.

18-variant

1. Rentgen nurlari'ni'n' elektronlardag'i' shashi'rawi'.
2. Birdey bolg'an simmetriya ko'sherleri arasi'ndag'i' mu'mkin bolg'an mu'yeshler.
3. Laue usı'li'. Laue usı'li' kristaldi'n' simmetriyası'n' ani'qlawg'a mu'mkinshilik beretug'i'n' tiykarg'i' usı'l si'pati'nda. Usı'ldı'n' ideyasi'. Interferenciyalı'q kartinanı'n' geometriyası'. Zonali'q iymeklikler.
4. Fure tolqi'nları'n' qa'siyeti ha'm kristaldi'n' keri pa'njeresi.
5. Polikristaldi'n' rentgenogramması'n teoriyalı'q esaplaw.

19-variant

1. Elementar quti'ni' saylap ali'wdi'n' usı'lları'. Brave pa'njereleri.
2. Diffuziyali'q maksimumlar kartinasi' menen kristaldi'n' strukturasi' arasi'ndag'i' baylani's.
3. Atomli'q faktor ha'm elektronlardı'n' tarqali'wi'. Erkin atomlar ushi'n atomli'q faktordı' esaplaw.
4. Pa'njerenin' simmetriya elementlerinin' ja'rdeinde ori'nlanatug'i'n tu'r lendiriwler. Noqattı'n' tu'r lendiriliwi.

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

20-variant

1. Tu'yinlik tuwri' menen tu'yinlik tegisliktin' perpendikulyarli'g'i' menen parallelligi sha'rti.
2. Rentgen nurlari'. Rentgen nurlari' derekleri. Strukturali'q analiz ushi'n qollani'latug'i'n rentgen trubkalari'ni'n' konstrukciyasi'ni'n' o'zgeshelikleri.
3. Laue usi'li'nda monokristaldi'n' orientirovkasi'n ani'qlaw.
4. Rentgen nurlari'ni'n' "kishi" kristallardag'i' shashi'rawi' (absorbciya menen ekstinkciyani' esapqa almag'an jag'day). Intensivliktin' maksimumi'ni'n' ken'ligi.
5. Rentgenstrukturali'q analiz ushi'n polikristalli'q u'lalerdi tayarlaw.

21-variant

1. Ken'islikti si'zi'qli' tu'r lendiriw. Ko'sher do'geregindegi buri'w.
2. Rentgenogrammlardi'n' simmetriyasi'. Lauegrammalardi'n' simmetriyasi'. Laue klasslari'.
3. "Utnalg'an" kristallar (polikristallar) usi'li' ushi'n qaytalani'w faktori'.
4. Difrakciyani'n' keri ma'selesi haqqi'nda. Fure sintezi. Patterson Sintezi.
5. Elektron mikroskop'i'ndag'i' kontastti'n' payda boli'wi'ni'n' fizikali'q tiykarları'. Ten'dey qali'n'li'qlar jolaqlari'.

22-variant

1. Strukturali'q analiz ushi'n arnalg'an rentgen apparatlari' ha'm kameralari'.
2. Keri pa'njerenin' konfiguraciyasi' ha'm simmetriyasi'ni'n' ken'isliklik gruppasi'.
3. Strukturali'q amplitudalardi' tallaw. Sistemali'q o'shiwler. Strukturali'q faktor formulalari' ushi'n dara jag'daylar.
4. Neytronografiyani'n' o'zine ta'n optikali'q o'zgeshelikleri. Neytronlar da'stesin registraciyalaw usi'llari'.
5. Rentgen nurlari'ni'n' shashi'rawi'. SHashi'rawdi'n' elementar akti.

23-variant

1. Keri pa'njere tu'yinlerinin' formasi' ha'm o'lshemleri. Tuwri' ha'm keri pa'njerenin' konfiguraciyalari' arasi'ndag'i' baylani's.
2. Rentgen nurlari' ha'm elektronlar ushi'n shashi'rawdi'n' atomli'q faktori'.
3. Idealli'q kristall. Birinshi ekstinkciya.
4. Monokristallardan ali'ng'an rentgenogrammalardi' esaplawdag'i' sistemali'q izbe-izlik (kristaldi'n' orientirovkasi'n, turaqli'lari'n ha'm Brave pa'njeresinin' tipin ani'qlawdag'i' izbe-izlik).
5. Aylani'w (terbeliw) usi'li'. Rentgenogrammalardi' indekslew. Aylani'w (terbeliw) usi'li'ni'n' ja'rdeinde ayi'ri'm kristallardi'n' simmetriyasi'ni'n' ken'isliktegi gruppasi'n ani'qlaw mu'mkinshilikleri.

24-variant

1. Rentgen reflekslerdin' intensivligi. Rentgen nurlari'ni'n' kristallardi'g'i' shashi'rawi'ni'n' dinamikali'q teoriyası'ni'n' elementleri.
2. Rentgen nurlari'nan, neytronlardan qorg'ani'w ha'm dozimetriya tiykarları'.
3. Strukturali'q analizdegi eksperimentalı'q bag'darlar. Monokristallar ha'm polikristallardag'i' rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' o'zgeshelikleri.

4. Ayi'ri'm dislokaciyalardi'n' ha'm dislokaciyalı'q strukturalardi'n' qanday xarakteristikaları' elektronlı'q-mikroskopiyali'q izertlewlerdin' bari'si'nda ani'qlanadi'?
5. Elektronlı'q mikroskop penen elektronografi'n' du'zilisinin' principialli'q o'zgeshelikleri. Mikrodifrakciya rejimi.

25-variant

1. Elektronlı'q mikroskopiyali'q izertlewlerde kristalli'q folgalardag'i' dislokaciyalardi'n' ti'g'i'zli'g'i'n ha'm Byurgers vektori'n ani'qlaw usi'llari'.
2. Kristalli'q pa'njerenin' xarakteristikaları' Aylani'w (terbeliw) usi'li'. Usi'ldi'n' ideyasi'. Qatlamli'q si'zi'qlar. Kristalli'q pa'njerenin' parametrlerin ani'qlaw.
3. Elektronogrammalar boyi'nsha ha'r qi'yli' kristalli'q fazalardi'n' pa'njereleri arasi'ndag'i' orientaciyalı'q qatnaslardı' ani'qlaw usi'llari'.
4. Rentgen difraktometrinde difrakciyalı'q si'zi'qlardi'n' integralli'q intensivligin ani'qlaw usi'llari'.
5. Epigamma boyi'nsha monokristaldi'n' kristallografiyalı'q bag'i'tlari'n ani'qlaw.

"Qattı' denelerdi difrakciyalı'q izertlew usi'llari"" pa'ni boyi'nsha lekciyalar tekstleri

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

1-bo'lim. Kristallografiya elementleri.

1.1-bap. Translyaciyalı'q pa'njereni geometriyali'q ta'riyiplew. Tiykarg'i' tu'sinikler ha'm terminler

Tu'yinler pa'njeresi

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

· Noqat tu'rindegi pa'njerenin' tu'yini translyaciyalardi' tek simmetriyali'q operaciya tu'rinde paydalani'li'w mu'mkin bolg'an simvol tu'rinde xi'zmet etedi.

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

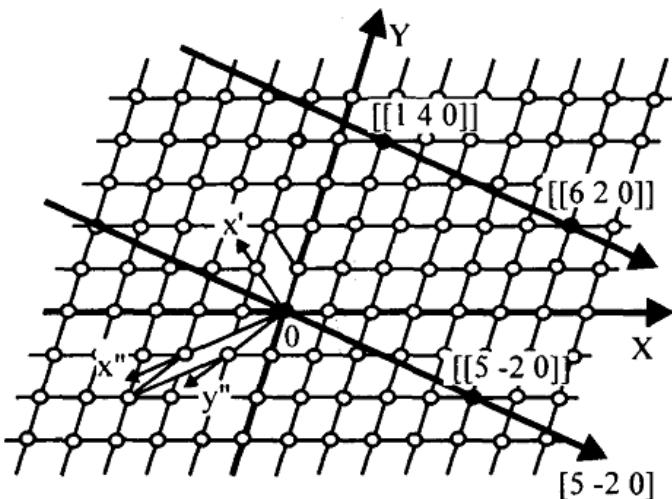
Ju'da' di'qqat penen qaraw kerek bolg'an jag'day "translyaciyalı'q (kristalli'q) pa'njere" tu'sinigi menen "kristalli'q struktura" tu'sinikleri bir birinen ani'q tu'rde ayi'ri'wdi'n' za'ru'rli ekenligi menen baylani'sli'. Pa'njerenin' tu'rleri, olardi'n' berilgen o'lshemlerge iye

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

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

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

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



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

Elementar parallelepipedlerdin' qabi'l etilgen belgileniwleri:

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

r – eki o'lshemli a'piwayi' pa'njere.

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

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

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

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

s – eki o'lshemli oraylasqan pa'njere.

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

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

1.1.2. Orientaciyalı'q xarakteristikalar (indekslew)

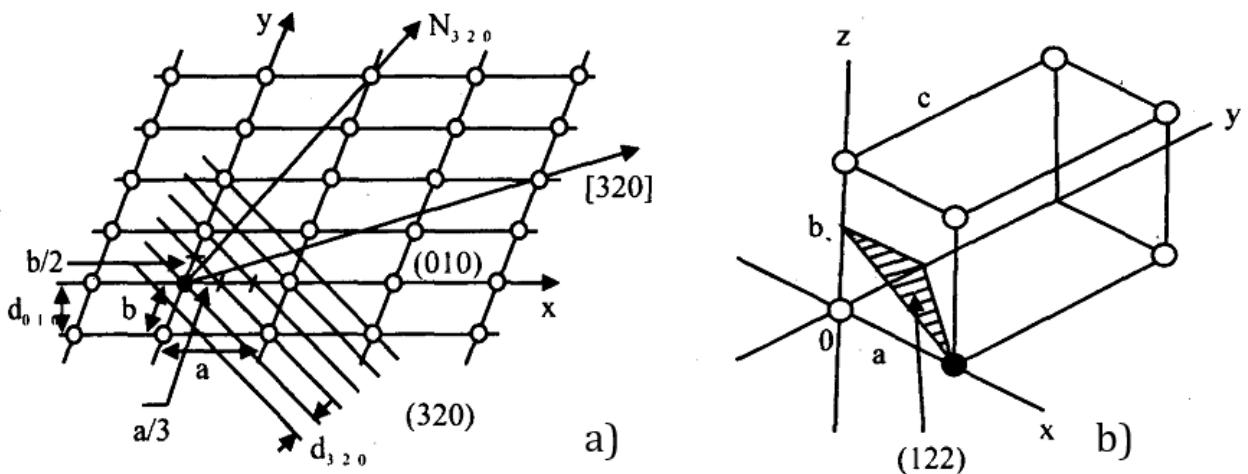
Tu'yinlik tuwri'lardi'n' indeksleri. Cuti'ni'n' to'besindegi tu'yinnin' iyelegen orni'ni'n' koordinatası' koordinata basi'nan baslap "adi'mlar sani'" na ten' (bul sanlar u'sh pu'tin ma'niske iye m, n, p translyaciyalari' boli'p tabi'ladi'). Bul sanlar eki kvadrat qawsı'rmag'a ali'p jazi'ladi' ha'm olar arasi'na u'tir qoyılmayıdı'. Racionalli'q tu'yinlik tuwri'ni' barlı'q waqı'tta da eki tu'yin arqali' o'tkeriw mu'mkin. Mi'sali' [[140]] ha'm [[620]]. Bul tu'yinlik tuwri'ni'n' boyı'nda principinde sheksiz ko'p sanlı' tu'yinlerdin' boli'wi' mu'mkin (1.1.1-su'wret). Bul tuwri'ni'n' indekslerin ani'qlaw ushi'n tuwri'ni' o'z-o'zine parallel qaldı'ri'p koordinata bası'ndag'i' nollık tu'yin de jaylasatug'i'nday etip ko'shiremiz. Endi usı' tuwri' koordinata bası'nan keyin u'stinen o'tetug'i'n birinshi tu'yinnin' koordinataları' [[5 -2 0]] usı' tu'yinlik tuwri'lardi'n' semeystvosi'ni'n' indekslerin ani'qlaydı'. Bul indekslerdi [5 -2 0] tu'rinde jazami'z. Bunday belgilewlerde koordinata bası'nan shı'g'atug'i'n $\mathbf{R} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}$ radius-vektori'ni'n' xarakteristikası' bir kvadrat qawsı'rmalardag'i' [m n p] indeksleri si'patı'nda belgilenedi.

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

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

Tegisliklerdin' indeksleri. Pa'njere tu'yinleri arqali' o'tetug'i'n tegislikler sistemasi'ni'n' sistemasi'n qaraymi'z. Qa'legen racionalli'q tegislikti pa'njeredegei qa'legen u'sh tu'yin arqali' o'tkeriw mu'mkin. Principinde bul tegisliktin' betinde sheksiz ko'p tu'yinler jatadi'. Tu'yinlik tegisliktin' orientaciysi'n (bag'i'ti'n) koordinata bası'nan o'tetug'i'n ha'm usı' tegislikke normal bag'i'tlang'an vektor ani'qlaydı'. Bul vektordi'n' boyı'ndag'i' qon'si'las eki tegislik arasi'ndag'i' qashi'qli'q tegislikler arasi'ndag'i' qashi'qli'q

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



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

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

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

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

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

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

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

yamasa

$$d_{hkl} = \frac{\left[\begin{array}{|ccc|} \hline & \frac{h}{a} \cos \gamma \cos \beta & 1 & \frac{h}{a} \cos \beta \\ \frac{h}{a} & \frac{k}{b} & 1 & \cos \gamma \frac{k}{b} \cos \alpha \\ & \frac{l}{c} \cos \alpha & 1 & \cos \beta \frac{l}{c} \\ \hline & \cos \beta \cos \alpha & \cos \gamma & 1 \\ & & \cos \beta & \frac{k}{b} \\ & & & \frac{l}{c} \\ \hline & & & 1 & \cos \gamma \cos \beta \\ & & & & \cos \gamma & 1 & \cos \alpha \\ & & & & & \cos \beta & \cos \alpha & 1 \\ \hline \end{array} \right]^{-1/2}}{\left[\begin{array}{|ccc|} \hline & \cos \gamma \cos \beta & \cos \gamma & \frac{h}{a} \\ & \cos \gamma & 1 & \cos \alpha \\ & \cos \beta & \cos \alpha & 1 \\ \hline \end{array} \right]}.$$

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

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

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

Q'a'legen eki ($h_1k_1l_1$) ha'm ($h_2k_2l_2$) tegislikler ushi'n olardi'n' "baylani'sti'raturg'i'n" zonani'n' ko'sherleri a'piwayi' u'sh sanni'n' ji'ynag'i' si'pati'nda

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

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

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

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

bolg'an tu'yinlik tuwri'g'a sa'ykes keledi. Uli'wma jag'dayda basqa singoniyalar ushi'n tu'yinlik tegislikke tu'sirilgen normal racionalli'q inlekslerge iye tu'yinlik tuwri' si'pati'nda ta'riyiplene almaydi'. Illyustraciya si'pati'nda 1.1.2-a su'wrette [320] tu'yinlik tuwri'si'n'i'n' bag'i'ti' menen (320) tegisligine tu'sirilgen normaldi'n' bag'i'ti'ni'n' parallel emes ekenligi ko'rsetilgen. Soni'n' menen birge d010 tegislikler arasi'ndag'i' qashi'qli'qtin' "b" parametri menen sa'ykes kelmeytug'i'nli'g'i' da ko'riniq tur.

Kristallografiyanı'n' sistematikası'

Pa'njerenin' geometriyali'q xarakteristikaları' kristallografiyali'q klassifikasiyadag'i' logikalı'q izbe-izligin tu'sindiriwge mu'mkinshilik beredi.

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

keltirilgen elementar quti'lardi' saylap ali'wdi'n' geometriyali'q sha'rtleri bir o'lshemli (1D), eki o'lshemli (2D), u'sh o'lshemli (3D) pa'njereler ushi'n bazislik vektorlardi'n' konfiguraciyalari'n ta'riyipleydi. U'sh o'lshemli strukturalar ushi'n jeti singoniya ori'n aladi': triklinlik, monoklinlik, (orto)rombali'q, tetragonalli'q, trigonalli'q (romboedrlik), geksagonalli'q, kubli'q. "Rangasi"" boyi'nsha en' to'mengi singoniya triklinlik singoniya boli'p tabi'ladi'. Bunday singoniya ushi'n pa'njeredege ayri'qsha qatnaslar ori'n almaydi' ha'm bazislik vektorlar ushi'n sheksiz ko'p sanlag'i' variantlardi'n' saylap ali'ni'wi' mu'mkin. Mi'sali', 1.1.1-su'wrettegi sxemada bir to'besi koordinata basi'nda jaylasqan ko'p sandag'i' parallelegrammlar ko'rsetilgen. Olardi'n' ha'r qaysi'si' triklinlik a'piwayi' quti' ushi'n elementar quti' boli'p xi'zmet ete aladi'. Bul jag'dayda koordinatali'q ko'sherler arasi'ndag'i' mu'yeshtin' ma'nisine qoyi'latug'i'n shek joq ekneligin atap o'temiz. Sonli'qtan gipotezali'q strukturada ha'tte kvadratli'q elementar quti'g'a yie pa'njere de triklinlik singoniyag'a tiyisli bola aladi'.

Noqatli'q gruppalar (sani' 32). Atomli'q struktura ko'z-qaraslari'nda joqari'da keltirilgen mi'sal geometriyali'q strukturani'n' singoniyani' saylap ali'w ushi'n jetkilikli belgi boli'p tabi'lmaytug'i'nli'g'i' ko'rsetedi. Singoniyani' berilgen struktura ushi'n simmetriyani'n' mu'mkin bolg'an tu'r lendiriwleri ani'qlaydi'. Al quti'ni'n' formasi' bolsa bul qa'siyetti tek sa'wlelendiriliwi kerek. Bunday traktovkada ha'r bir singoniya noqatli'q gruppalardi'n' birlespeleri boli'p qaladi'. Al noqatli'q gruppera (simmetriyani'n' noqatli'q gruppasi') bolsa simmetriyali'q operaciyalardi'n' berilgen qosi'ndi'si'nan turatug'i'n shekli ta'rtiptegi ko'plik si'pati'nda xi'zmet etedi. 1.1-kestede bul rubrikaciya berilgen. Translyaciyalı'q pa'njerelerdegi simmetriyali'q tu'r lendiriwlerdin' qa'siyetlerinin' principialli'q tiykarları' 1.2-bapta tallanadi'.

Brave pa'njereleri (yamasa translyaciyalı'q gruppalar, sani' 14). Mu'mkin bolg'an elementar quti'lardi' ta'riyiplegende da'slep ko'rgizbeli geometriyali'q ta'repi ayi'ri'p ko'rsetiledi. U'sh o'lshemli ken'islik ushi'n formal tu'rde ko'rsetiw ushi'n ha'r bir singoniyani'n' a'piwayi' pa'njerelerine monoklinlik, ortonombali'q, tetragonalli'q ha'm kubli'q singoniyadag'i' ja'ne jeti oraylasqan pa'njere qosi'ladi' (1.1-kestege qaran'i'z). Usi'g'an sa'ykes eki o'lshemli torlar ushi'n bes a'piwayi' quti'ni'n' ha'm oraylasqan pa'njerenin' biri (bul tuwri' mu'yeshti pa'njerede) ori'n ali'wi' mu'mkin. To'mende translyaciyalı'q pa'njereler sheksiz ta'rtipli simmetriya gruppaları' si'pati'nda traktovkalanadi'.

Ken'isliklik gruppalar (ken'isliklik gruppalar sani' 230). Bul kristalli'q pa'njerenin' simmetriyasi'ni'n' ha'm atomli'q strukturani'n' barli'q qa'ddileri ushi'n birlestiriwshi sistema boli'p tabi'ladi' SHeksiz ta'rtipli bul gruppalar bazasi'nda kristallardi'n' strukturasi'ni'n' toli'q standart ta'riyipleniwi tiykarlang'an. To'mende (1.3-bapta) transliciyali'q ha'm ken'isliktik gruppalardi'n' o'zgeshelikleri sistemali' tu'rde bayanlanadi'.

1.1-keste. Kristalli'q sistemalar. Simmetriya gruppaları'. Brave pa'njereleri.

	Sim-vol	Singoniya	Kristal-lografiyali'q gruppalar	Ken'-is-lik-tegi grupp. sani'	Koordinatalar sistemasi'		Brave pa'n-jere-si
					El.quti'ni' saylap ali'w sha'rt-leri	Pa'nje-renin' o'lshene-tug'i'n para-metrleri	
1D	-	-	1, m	2	joq	a	-
2D	m	qi'ysi'q mu'yeshti	1, 2	2	joq	a, b, γ	mp
	o	tuwri' mu'yeshti	m, 2mm	7	γ = 90°	a, b	op

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

1.2-bap. Noqatli'q gruppalar

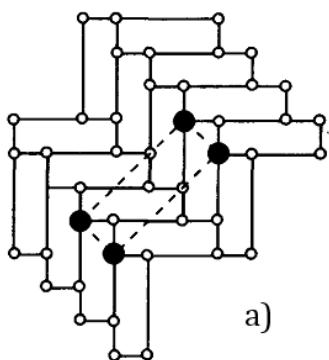
1.2.1. Simmetriyali'q tu'rlerdiriwler

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

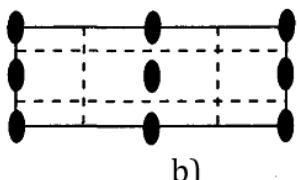
Rawajlani'wi'ni'n' da'slepki ji'llari'nda simmetriya problemalari'ni'n' islep shi'g'i'li'wi' kristallografiyali'q izardew ushi'n u'lken a'hmietli ori'ng'a iye boldi'. Gyuygens penen Gayuidin' jumi'slari'nan baslap XIX a'sirdegi Brave, Fedorov, SHenflis, Gessel, Kyuri, Gadolin, Barlou ha'm basqalardi'n',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

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

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



a)



b)

1.2.1-su'wret.

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

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

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

Da'llilleniwi:

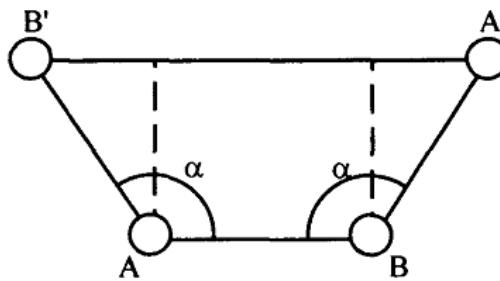
Tu'yinlik pa'njererin'in tegisliktegi fragmentin qaraymi'z (1.2.2-su'wret). AV kesindisinin' ushi' arqali' si'zi'lma tegisligine perpendikulyar bag'i'tta n-ta'rtipli simmetriya ko'sheri o'tedi. Bunday ko'sher shaması' $360^\circ/n$ bolg'an mu'yeshe buradi'. Elementar buri'wdi' eki ret a'melge asi'rsaq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

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

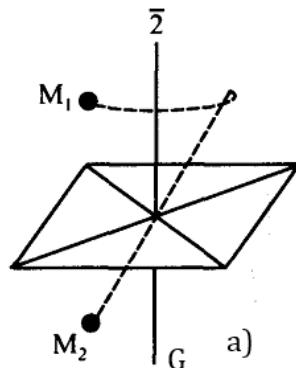
ten'liklerinin' ori'nlanatug'i'nli'g'i'n itibar beremiz. Sonli'qtan $1 + 2\cos\alpha = t$ an'latpasi'na iye bolami'z. Bunnan elementar mu'yeshlerdin' barli'q mu'mkin bolg'an ma'nisleri kelip shi'g'adi':

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

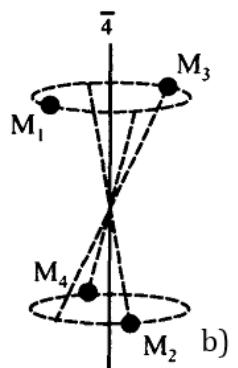
Inversiyali'q ko'sherler. Inversiya dep simmetriyani'n' mi'naday tu'rine aytami'z: bunday jag'dayda ha'r bir (x, u, z) noqati' og'an ekvivalent bolg'an $(-x, -u, -z)$ noqati' menen "simmetriya orayi'ndag'i' shag'i'li'si'w" arqali' baylani'sqan. Usi'g'an baylani'sli' kristalli'q deneler ushi'n buri'w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



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



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



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

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

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

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

$\bar{4}$ 90° qa buri'w + inversiya;

$\bar{6} = 60^0$ qa buri'w + inversiya; bul operaciyalardi'n' toli'q ji'ynag'i' $\bar{6} = 3 + m$ elementlerinin' toli'q qosi'ndi'si'na ten'.

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

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

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

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

Simmetriya gruppasi'ni'n' algebrasi'

Abstrakt gruppaları' ushi'n ani'qlamalardı'n' dizimi. Gruppa dep atalatug'i'n ko'plik {G} ushi'n ori'nlanı'wi' kerek to'rt gruppali'q aksioma belgili:

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

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

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

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

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

Gruppanı'n' elementlerinin' sani' n gruppanı'n' ta'rtibi dep ataladi'; ta'rtibi shekli ha'm ta'rtibi sheksiz gruppaldı'n' bar boli'wi' mu'mkin.

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

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

Gruppanı'n' ko'beytiw kestesi (*Keli kvadrati*) gruppanı'n' qurami'n tallaw ushi'n qollanı'ladi'

$$\begin{pmatrix} & \mathbf{e} & \mathbf{g}_1 & \mathbf{g}_2 & \mathbf{g}_3 & \cdot \\ \mathbf{e} & e & g_1 & g_2 & g_3 & \cdot \\ \mathbf{g}_1 & g_1 & g_1^2 & g_1g_2 & g_1g_3 & \cdot \\ \mathbf{g}_2 & g_2 & g_2g_1 & g_2^2 & g_2g_3 & \cdot \\ \mathbf{g}_3 & g_3 & g_3g_1 & g_3g_2 & g_3^2 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}$$

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

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

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

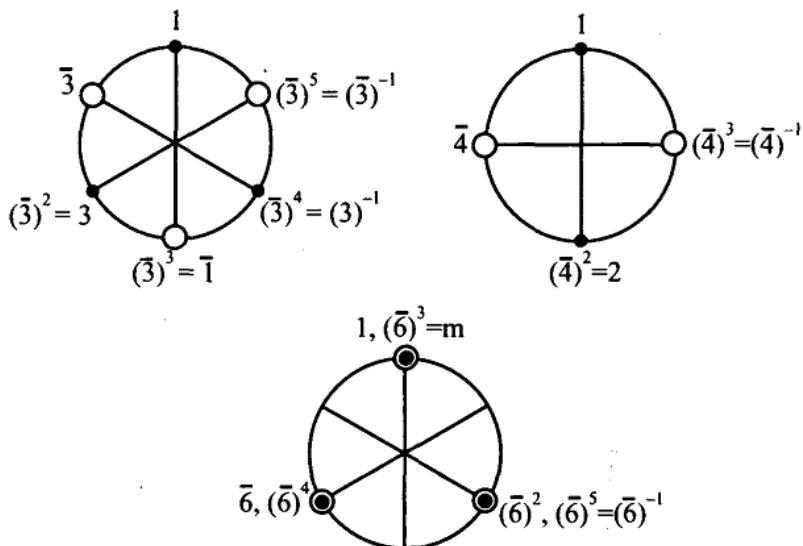
b). Bunnan keyin ekinshi ta'rtipli abstraktli'q gruppera $\{e, A\}$ turadi'. Bul jag'dayda $A^2 = e$ yamasa $A = A^{-1}$ qatnasi' ori'n aladi'. Bunday sha'rtti $\bar{1} = \{1, \bar{1}\}$, $2 = \{1, 2\}$ ha'm $m = \{1, m\}$ gruppaları'qanaatlandı'radi'. Basqa so'z benen aytqanda bir absotaktli'q gruppag'a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

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

d). To'rtinshi ta'rtipli abstraktli'q ciklli'q gruppera $\{e, A, A^2, A^{-1}\}$ tetragonalli'q singoniyani'n' eki gruppasi'nda ju'zege keledi. Bul 4 ha'm $\bar{4}$ gruppaları' boli'p tabi'ladi'. Bul gruppalarда $4^2 = 2$, $4^3 = 4^{-1}$ qatnasları' ori'nlanadı'.

e). Altı'nshi' ta'rtipli ciklli'q gruppag'a mi'nalar izomorflı': geksagonalli'q singoniyada 6 ko'sheri ha'm inversiyali'q $\bar{6}$ ko'sheri; trigonalli'q singoniyada inversiyali'q $\bar{3}$ ko'sheri. Bul ko'sher $\bar{3} = \{1, \bar{3}, 3^{-1}, \bar{1}, 3, \bar{1}^{-1}\}$ qurami'na iye.

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



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

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

- simmetriya elementi buri'wdi'n' ciklli'q gruppasi'ni'n' obrazı' boli'p tabi'ladi';
- simmetriya operaciyası' (simmetriyali'q operaciya) simmetriyani'n' noqatlı'q gruppasi'ni'n' elementi boli'p tabi'ladi';

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

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

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

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

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

a) transponirlengen matrica keri element si'pati'nda

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

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

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

yamasa qi'sqasha tu'rde

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

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

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

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

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

Si'zi'qli' tu'r lendiriw operatori'ni'n' (x, u, z) noqati'na ta'siri kvadratli'q matricani' matrica-bag'anag'a ko'beyiwdin' na'tiyjesi tu'rinde ta'riyiplenedi:

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

Matricag'a mi'sallar:

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

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

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

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

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

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

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

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

a).

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

matricasi' berilgen. Oni' kvadratqa ko'teriw

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

matricasi'n beredi.

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

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

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

b) $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ matricasi' berilgen. Oni' kvadratqa ko'teriw $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$ matricasi'n beredi (yag'ni'y OY ko'sheri bag'i'ti'ndag'i' 2 ko'sheri). U'shinshi da'rejege

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

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

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

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

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

Uli'wmali'q eskertiwler. Jokari'dag'i' paragrafta 10 ciklli'q gruppa ko'rsetildi. Olardi'n' ha'r qaysi'si'na tek bir generator – simmetriya ko'sherlerinin' biri qoyi'ldi'. Kristallografiyalı'q gruppalardı'n' uli'wmali'q ji'ynag'i' o'zi ishine shekli ta'rtiptegi ciklli'q emes gruppalardı' da aladi'. Bunday ciklli'q emes gruppalar belgili generatorlardı'n' qosı'ndı'lari'na tiykarlang'an ha'm olardi' payda etiw ushi'n matricalı'q algebrani'n' qag'i'ydalari' toli'g'i' menen jetkilikli. Biraq endi kombinatorlı'dı'q variantlarda sapali'q jaqtan jan'a shekler payda boladi'. Bul jerde en' baslı' talap mi'nadan ibarat: generatorlardı'n' ha'm olardi'n' tuwi'ndı'lari'ni'n' ta'sir etiwinin' na'tiyjeleri gruppa elementlerinin' shekli ko'pligi boli'wi' sha'rt. Demek algebraali'q tekserip shı'g'i'wda Keli kvadrati' tuyi'q boli'wi' kerek degen so'z. Mi'sali' eger eki simmetriya ko'sheri bir biri menen kesilisetug'i'n bolsa, onda olar arası'ndag'i' i'qtı'yarlı' mu'yesħ jan'a ko'sherlerdin' sheksiz ko'p payda boli'wi' situaciysi'na ali'p keledi. Sonlı'qtan ko'sherlerdin' bir biri menen kesilisiwinin' tek belgili bir mu'yesħler menen boli'wi' qadag'alawshi' faktorg'a aylanadi'. Bunday jag'dayda shekli sandag'i' gruppa elementleri payda boladi'. To'mende kristallografiyalı'q noqatlı'q gruppalardı' simmetriya ko'sherleri arası'nda mu'mkin bolg'an mu'yesħlerdin' ma'nisleri keltirilgen:

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

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

Noqatlı'q gruppalar haqqı'ndag'i' mag'li'wmatlardı'n' ji'ynag'i'. U'sh o'lshemli translyaciyalı'q sistemalarda 32 noqatlı'q gruppaları'n' boli'wi' mu'mkin; olarg'a 18 dana abstrakt gruppa izomorfli'. Olar 1.2-kestede keltirilgen.

Gruppalardı'n' simvolları' haqqı'nda. Ilimi a'debiyatta noqatlı'q gruppalardı'n' ha'r ki'ylı' belgileri qollanı'ldı'. Olardi'n' ishinde gruppadag'i' simmetriya ko'sherlerinin' sani'na tiykarlang'an belgiler (simvolika) bar:

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

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

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

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

Qi'sqasha eskertiwlər:

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

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

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

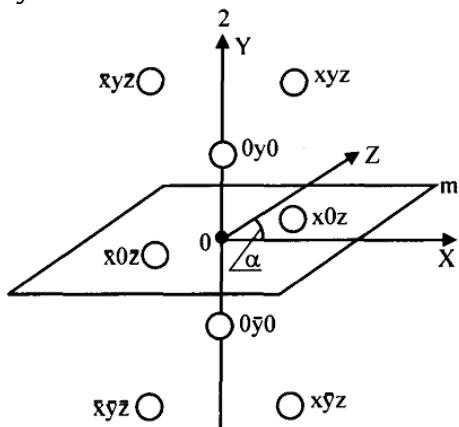
Группаның тәртиби	Группа (сингония)	Абстракт группаның анықлаушы қатнаслары
1	1(трикл)	$A = e$
2	$\bar{1}$ (трикл), 2(мон), m (мон)	$A^2 = e$
3	3(триг)	$A^3 = e$
4	4(тетр), $\bar{4}$ (тетр)	$A^4 = e$
4	$2/m$ (мон), $mm2$ (орт), 222 (орт)	$A^2 = B^2 = (AB)^2 = e$
6	6(гекс), $\bar{6}$ (гекс), $\bar{3}$ (триг)	$A^6 = e$
6	32(триг), $3m$ (триг)	$A^3 = B^2 = (AB)^2 = e$
8	mmm (орт)	$A^2 = B^2 = C^2 = (AB)^2 = (AC)^2 = (BC)^2 = e$
8	4/m(тетр)	$A^4 = B^2 = ABA^3B = e$
8	4mm(тетр), 422(тетр), $\bar{4} 2m$ (тетр)	$A^4 = B^2 = (AB)^2 = e$
12	$6/m$ (гекс)	$A^6 = B^2 = ABA^5B = e$
12	$\bar{3} /m$ (триг), $\bar{6} m$ (гекс), $6mm$ (гекс), 622 (гекс)	$A^6 = B^2 = (AB)^2 = e$
12	23(куб)	$A^3 = B^2 = (AB)^3 = e$
16	$4/mmm$ (тетр)	$A^2 = B^2 = C^2 = (AB)^2 = (AC)^2 = (BC)^4 = e$
24	432 (куб), $\bar{4} 3m$ (куб)	$A^4 = B^2 = (AB)^3 = e$
24	$m3$ (куб)	$A^3 = B^2 = (A^2BAB)^2 = e$
24	$6/mmm$ (гекс)	$A^2 = B^2 = C^2 = (AB)^2 = (AC)^2 = (BC)^6 = e$
48	$m \bar{3} m$ (куб)	$A^4 = B^6 = (AB)^2 = e$

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

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

1.2.5-su'wret.

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



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

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

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

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

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

Gipotezali'q mi'sal keltiremiz: meyli DF₂G₆ ximiyali'q formulasi'na iye i'qt'i'yarli' tu'rdegi birikpe elementar quti'da 2/m gruppasi'ndag'i' tog'i'z atomg'a iye bolsi'n. Kestenin' bazasi'nda mi'naday juwmaqqa kelemiz: D atomlari' bir eselik (a) poziciyalari'nda jaylasadi'; F atomlari' ani'qlaw kerek bolg'an eki eselik poziciyalardi'n' birin iyeleydi. G elementinin' alti' atomi' ushi'n mi'naday variantlardi' boljaymi'z: uli'wmali'q (o) poziciyasi' + eki eselik yamasa u'sh eselik poziciyalardi'n' biri; qanday bolsa da bul elementtin' atomlari' strukturada qa'siyetleri boyi'nsha bo'lingen boli'p shi'g'adi'. Sebebi olar iyelegen poziciyalar simmetriyasi' boyi'nsha ha'r qi'yli' boladi'.

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

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

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

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

23 T
12 c I

	Pentagon-tritetrahedron or tetartoid or tetrahedral pentagon-dodecahedron <i>Snub tetrahedron (= pentagon-tritetrahedron + two terahedra) (j)</i>	(h,k,l) (-h,-k,l) (-h,k,-l) (h,-k,-l) (l,h,k) (l,-h,-k) (-l,-h,k) (-l,h,-k) (k,l,h) (-k,l,-h) (k,-l,-h) (-k,-l,h)
	Trigon-tritetrahedron or tristetrahedron (for h <) <i>Tetrahedron truncated by tetrahedron</i> (for x < z)	(h,h,l) (-h,-h,l) (-h,h,-l) (h,-h,-l) (l,h,h) (l,-h,-h) (-l,-h,h) (-l,h,-h) (h,l,h) (-h,l,-h) (h,-l,-h) (-h,-l,h)
	Tetragon-tritetrahedron or deltohedron or deltoid-dodecahedron (for h >) <i>Cube & two tetrahedra (for x < z)</i>	(0,1,1) (0,-1,1) (0,1,-1) (0,-1,-1) (1,0,1) (1,0,-1) (-1,0,1) (-1,0,-1) (1,1,0) (-1,1,0) (1,-1,0) (-1,-1,0)
8 b .3.	Octahedron <i>Cube (i)</i>	(1,1,1) (-1,-1,1) (-1,1,-1) (1,-1,-1) (-1,-1,-1) (1,1,-1) (1,-1,1) (-1,1,1)
6 a 2m..	Cube or hexahedron <i>Octahedron (e)</i>	(1,0,0) (-1,0,0) (0,1,0) (0,-1,0) (0,0,1) (0,0,-1)

23 T
12 c I

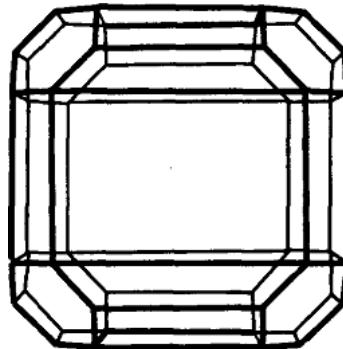
	Pentagon-tritetrahedron or tetartoid or tetrahedral pentagon-dodecahedron <i>Snub tetrahedron (= pentagon-tritetrahedron + two terahedra) (j)</i>	(h,k,l) (-h,-k,l) (-h,k,-l) (h,-k,-l) (l,h,k) (l,-h,-k) (-l,-h,k) (-l,h,-k) (k,l,h) (-k,l,-h) (k,-l,-h) (-k,-l,h)
	Trigon-tritetrahedron or tristetrahedron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

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

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

1.2.6-su'wret.

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



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

1.2.4. Simmetriyalardı'n' ierarxiyası'. Kyuridin' sheklik gruppaları'

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

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

(yamasa) to'mengi gruppansi'n' barlı'q elementlerin joqarı' gruppag'a qosi'w arqali'
 $H \in G$;

(yamasa) eki gruppansi'n' bazi' bir to'mengi gruppada kesilisiwi boyi'nsha
 $H = G \cap T$.

A'piwayi' mi'sal: 4 tetragonalli'q gruppansi' geksagonalli'q 6 gruppasi'ni'na podgruppa si'patı'nda qosi'wg'a bolmaydi'; biraq 2×4 ha'm 2×6 ekenligni ba'rshege tu'sinikli. Demek eki gruppansi'n' kesilisiwi

$$2=4 \cap 6$$

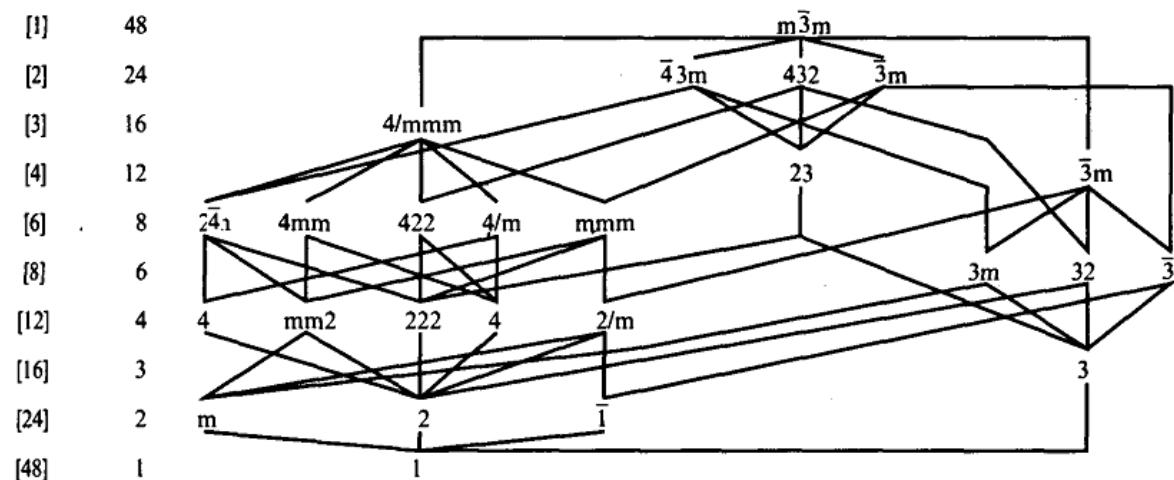
boli'p tabi'ladi'.

Usı' ayti'lg'anlarga sa'ykes, eger bazi' bir birikpeler joqarı'da keltirilgen (t) ha'm (h) singoniyalardı'n' strukturalı'q modifikasiyaları'na iye bolatug'ni' bolsa, onda bir birine aylanı'wda ekinshi tu'rli fazali'q o'tiw variantı'ni'n' ju'zege keliwi biykarlanadi'.

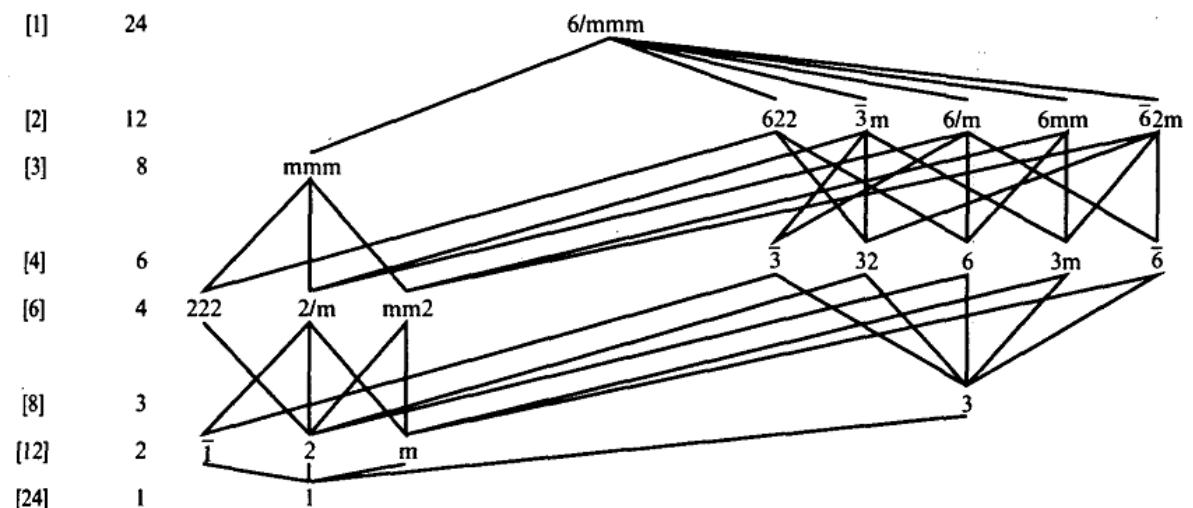
Ma'seleni tap usı'nday qoysi'wda simmetriya ko'z-qarasları' boyi'nsha polattag'i' (KOK \Leftrightarrow QOK), III - V birikpeler kristalları'ndag'i' ha'm II - VI yarı'm o'tkizgishlerindegi qaramalı' mexanizmler menen strukturalı'q o'tiwlerdin' ju'zege keliwi ta'biiy boli'p tabi'ladi' (kubli'q \Leftrightarrow geksagonalli'q).

1.5-keste. Noqatli'q gruppaları'n' ierarxiyası'

индекс порядок



индекс порядок



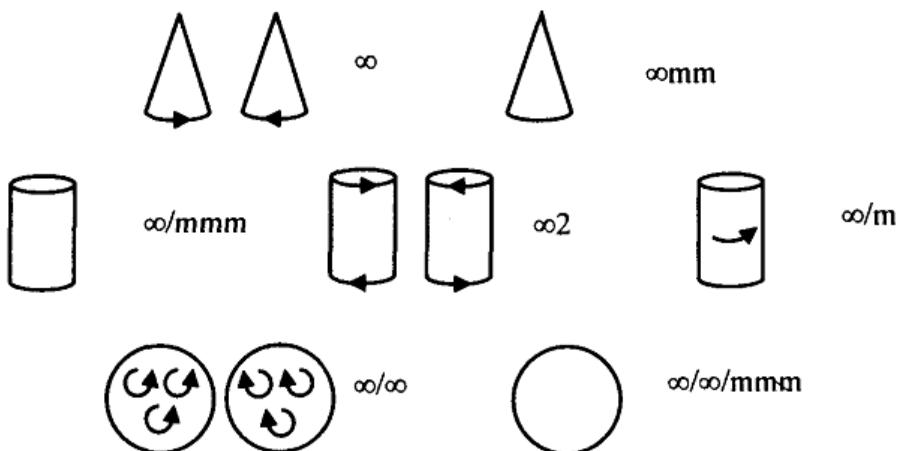
1.6-keste. Kyuridin' sheklik gruppalarini'n' bir birine bag'i'ni'w sistemasi'

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

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

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

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

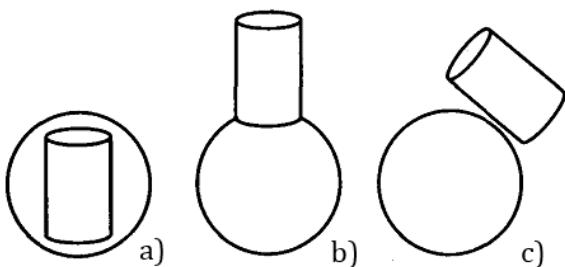


1.2.7-su'wret. Aylani'w figuralari' – Kyuridin' sheklik gruppaları'.

Bunday jag'dayda ma'selege qa'siyettin' simmetriyası'n' sa'wlelendiretug'i'n sheksiz ta'rtipli gruppaları' kirgiziwimiz kerek. Bul gruppalarда generator si'patı'nda sheksiz kishi elementar buri'wg'a iye ∞ ta'rtipke iye simmetriya ko'sheri bar boladi'. Bunday gruppaları' sa'ykes keliwshi ko'rgizbeli figuralar qa'siyettin' simmetriyası'n' sa'wlelendiretug'i'n obraz aylani'w figurasi' boli'p tabi'ladi'. Bunlday figuralardı'n' jeti tipi bar ha'm olar 1.2.7-su'wrette

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

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



1.2.8-su'wret.

Simmetriyalardi'n' superpoziciyasi' principin illyustraciyalaw.

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

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

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

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

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

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

1.3-bap. Ken'isliktegi gruppalar

1.3.1. Brave pa'njereleri

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

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

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

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

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

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

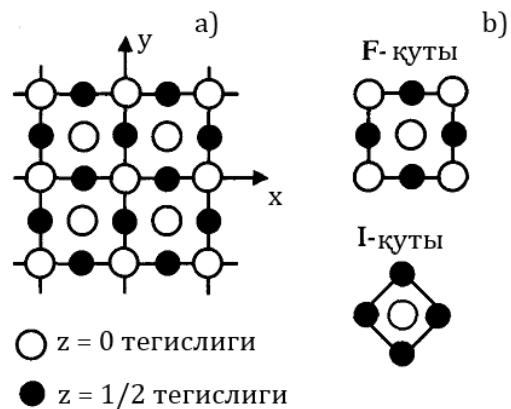
Monoklinlik	1) A = C = I = F		
Ortorombali'q	2) A = B = C	3) I	4) F
Tatragonalli'q	5) I = F		
Kubli'q	6) I	7) F	

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

1.3.1-su'wret.

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

- a) tu'yinlerdin' konfiguraciyası';
- b) saylap ali'wdi'n' variantları'.



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

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

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

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

1.3.2. Translyaciya simmetriyali'q operaciya si'pati'nda

Gruppali'q algebra tiline o'tkende Brave pa'njereleri haqqı'nda aytılg'anlar ga'pler sheksiz ta'rtipke iye translyaciyalı'q gruppaları'n' bar bolatug'i'nli'g'i'na sa'ykes keledi:

- Translyaciya vektori' t ni'n' belgisi kirgiziledi. Bul vektor r noqati'n fizikalı'q jaqtan ayırmasi' joq r' noqati'na o'tiwdi ani'qlaydi.
- $T(t)$ translyaciya operatori' $r' = T(t)r = r + t \text{ sha}'rti boyı'nsha$ kirgiziledi.
- Translyaciyalar gruppasi' ushi'n ko'beytiw operaciyası' $t_1 + t_2 = t_3 \in T$ vektorli'q qosı'w boli'p tabi'ladi'.
- Birlik element – nollık translyaciya $T(0) = E$.
- Keri element - keri belgige iye vektor $((T(t))^{-1} = T(-t))$.

Translyaciyalı'q gruppaları'n' ha'r biri ciklli'q, abellik, sheksiz ta'rtipli boli'p xarakterlenedi. Gruppanı'n' elementi – translyaciya vektori':

$$t = p_1 a + p_2 b + p_3 c + t_c.$$

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

Noqatlı'q (shekli) ha'm translyaciyalı'q (sheksiz) gruppaları'n' qosı'ndı'sı' simmetriyanı'n' ken'isliktegi gruppaları'n payda etedi. Bunday gruppaları'n' o'zgeshelikleri ha'rekettegi simmetriya elementlerinin' dizimi bunnan bi'lay ken'eytiw boli'p tabi'ladi'.

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

Endi translyaciya menen simmetriya ko'sherlerinin' bir biri ta'sirlesiw karaymi'z. A'piwayı'li'q ushi'n biz Zeytc penen Vignerin' maricaları' qatnasatug'i'n racionalli'q texnikani' paydalanami'z. Simmetriya operaicyalari' ushi'n ji'ynaq 4 matrica (to'rt matrica dep oqi'ladi') kirgiziledi:

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

Bul jerde

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

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

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

Bunday jag'dayda noqatqa operaciyanı'n' ta'siri bi'layı'nsha jazi'ladi':

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

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

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

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

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

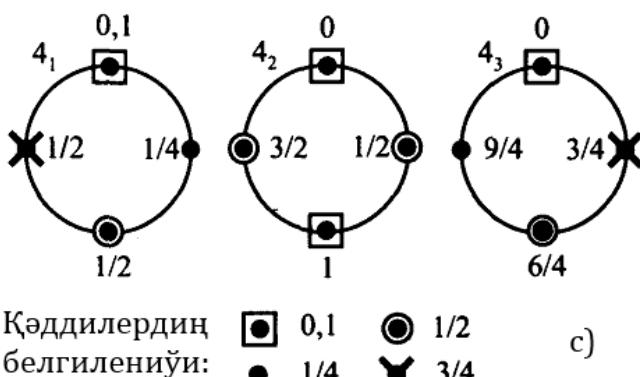
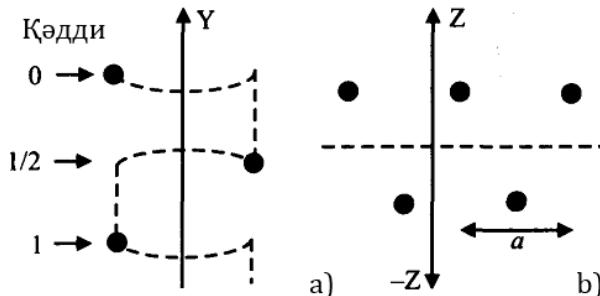
$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ t_1 & -1 & 0 & 0 \\ t_2 & 0 & 1 & 0 \\ t_3 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ t_1 & -1 & 0 & 0 \\ t_2 & 0 & 1 & 0 \\ t_3 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 2t_2 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

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

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

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

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



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

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

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

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

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

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

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

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

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

Endi u'sh variant ruqsat etilgen: $4t_3 = 1$ yamasa 2 yamasa 3. Teppe-ten' noqat 90° qa buri'w menen z ko'sheri bag'i'ti'nda 1/4 yamasa 1/2 yamasa 3/4 shamalari'na ten' translyaciyan'i' saldari'nan ali'nadi' (1.3.2-su'wretti qaran'i'z). 4-ta'rtipli vintlik ko'sherlerdin' u'sh tipine iye bolami'z: 4₁, 4₂ ha'm 4₃. Elementar translyaciya bo'lshek san ja'rdeinde berilgen (to'mengi indeks)/(ko'sherdin' ta'rtibi). Su'wretlerin salsaq 4₁ ha'm 4₃ ko'sherlerinin' enantiomorfli'q ekenligin, yag'ni'y aylani'w bag'i'ti' menen ayri'latug'i'nli'g'i'n ayqi'n ko'remiz. Standart belgilewlerde shep vintke barli'q waqi'tta da kishi to'mengi indeks jazi'ladi'.

1.7-keste. Simmetriyani'n' ken'isligindegi gruppalarini'n' belgilewlerinde qollani'latug'i'n simmetriya elementlerinin' dizimi (reestri)

Бурыў көшерлери	1	2	3	4	6	
Инверсиялық көшерлер			$\frac{3}{3}$	$\frac{4}{4}$	$\frac{6}{6}$	Жабық
Симметрия тегисликлерি m						
Винтлик көшерлер	2 ₁	3 ₁	4 ₁	6 ₁		
		3 ₂	4 ₂	6 ₂		
			4 ₃	6 ₃		Ашық
				6 ₄		
				6 ₅		
Жылжып шашыратыўши симметрия тегисликлери	a	b	c	n	d	



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

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

1.3.4. Quti'dag'i' simmetriya elementlerin generaciyalaw

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

- oni'n' (simmetriyani'n' ken'isliktegi gruppasi'ni'n') tiykari'nda translyaciyalı'q gruppaları'n' biri jatadi' (sheksiz ta'rtipli);
- og'an noqatlı'q gruppaları'n' biri kiredi (shekli ta'rtipli);
- simmetriya elementlerinin' ruqsat etilgen ji'yntag'i'n vintlik ko'sherler menen ji'lji'p shag'i'li'sti'ri'wii' simmetriya tegislikleri tolı'qtı'radi';
- simmetriya elementleri pa'njererin' barlı'q tu'yinleri boyi'nsha translyaciylar menen ko'beytilgen.



- Күткің төбелеріндеги инверсия орайлары.
- ⊗ Базалық трансляциялардың бар болыуна байланысты генерацияланған инверсия орайлары.
- Инверсия менен трансляция жолы менен көбейтилген нокта (1).

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

Bunnan keyin translyaciyyani'n' birlik operaciysi'ni'n' tikkeley ju'zege keltiretug'i'n effektin qarap shi'g'i'w za'ru'r. Bul effekt qutı'dag'i' buri'w, inversiyali'q ha'm vintlik ko'sherlerdin' jan'a pozitsiyasi'n generaciyalawdan ibarat. Gruppali'q algebra terminlerinde bunday generaciyalaw sheksiz ta'rtipli gruppasi'ni'n' elementlerin ko'beytiw operaciysi'ni'n' na'tiyjesi boli'p tabi'ladi'. Bazi' bir xarakterli situaciyanı' qarap o'temiz:

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

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

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

Joqari'dag'i' paragrafti'n' analitikali'q formasi'nda bul jag'daydi' koordinata bası'na qarata "taza" inversiya matricasi'n "taza" translyaciya matricasi'na ko'beytiw joli' menen ko'rsetiwe boladi':

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

Ko'beytiw na'tiyjesi

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

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

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

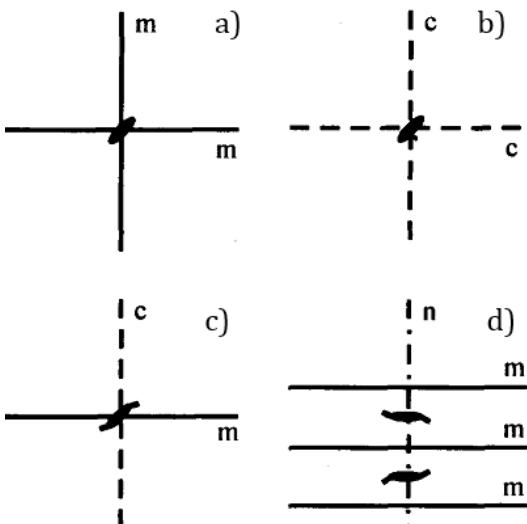
b) **Simmetriya tegisliklerinin' ko'beyowi.** Bul jerde de uqsas logika qollani'ladi': sxemada - Translyaciya $T + ploskost\ m = T/2$ translyaciysi' + m tegisligi(1.3.3-b su'wret).

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

Ortogonalli'q kesilisiwdin' bir neshe ko'rgizbeli variantlari' 1.3.4-su'wrette berilgen:
 - ekinshi ta'rtipli buri'w mu'yeshi
 eki aynali'q mm aynali'q shag'i'li'sti'ri'w tegisliklerinin' kesilisiw si'zi'g'i' si'pati'nda (a);
 eki ji'lji'p tag'i'li'sti'ratug'i'n tegisliklerdin' kesilisiw si'zi'g'i' si'pati'nda (b);
 - ekinshi ta'rtipli vintlik ko'sheri:
 aynali'q shag'i'li'sti'ri'wshi' ha'm ji'lji'p shag'i'li'sti'ri'wshi' tegisliklerdin' kesilisiw (mc)
 si'zi'g'i' si'pati'nda (c cu'wret);
 mn tegisliklerinin' kesilisiw si'zi'g'i'nan awi'sqan poziciyada (d).

1.3.1. Ken'siliklik gruppalardi' belgilew haqqi'nda

Ken'isliktegi grupper noqatli'q gruppasi'n' biri menen translyaciyalı'q gruppasi'n' birinin' qosı'ndı'sı' bolg'an sheksiz ta'rtipli grupper boli'p tabi'ladi'. Ken'isliktegi mu'mkin bolg'an gruppalardi'n' sani'ni'n' 230 ekenligi 1891 g. E.S.Fedorov ha'm A.S.Henflis ta'repinen ani'qlandi'. Ha'r bir singoniya ushi'n ken'isliktegi gruppalardi'n' sani' 1.1-kestede berilgen.



1.3.4-su'wret.

Simmetriya tegislikleri kesiliskende
simmetriya ko'sherlerinin'
generaciyalani'wi' (payda boli'wi')

Ken'isliktegi gruppalardi'n' belgilewlerinde jokari'da keltirilgen kristallografiyali'q simvolika qollani'ladi'. Birinshi ori'nda Brave pa'njeresinin' simvoli', bunnan keyin [noqatli'q gruppadag'i' si'yaqli', 1.2.3-su'wretke qaran'i'z] sha'rtli tu'rdegi bag'i'tlardi'n' izbe-izliginde ashi'q ha'm jabi'q simmetriya elementleri arasi'nan gruppani'n' generatorlari' jazi'ladi'. Xali'q arali'q kestelerdegi ken'isliklik gruppani'n' nomeri de beriledi. A'debiyatta belgili bir gruppani'n' qi'sqa yamasa toli'q belgilewleri de beriledi. Qi'sqasha belgilew gruppani'n' qurami'n ani'qlawg'a mu'mkinshilik beretug'i'n jetkilikli generatordi'n' ji'ynag'i'nan turadi'. Toli'q belgilewde barli'q simmetriya ko'sherleri (bag'i'tlardi'n' tap sonday izbe-izliginde) beriledi. To'mengi singoniyalardi' 1 simvoli' berilgen koordinata bko'sheri bag'i'ti'nda simmetriya ko'sherinin' bolmaytug'i'nli'g'i' an'g'artadi'. Bul jag'day ayri'qsha ko'sherdi ha'm quti'ni' saylap ali'wdi' atap o'tiwe mu'mkinshilik beredi. Mi'sali':

monoklinlik 14-sanli' gruppera, R₂₁/s yamasa R12₁/s1
ortorombali'q 63-sanli' gruppera, Smcm yamasa S 2/m 2/s 2₁/m
kubli'q 206-sanli' gruppera, Ia3 yamasa I2₁/a³
kubli'q 226-sanli' gruppera, FmZs yamasa F4/m³2/s

Cimmetriyani'n' ken'isliktegi gruppalarini' belgilewder menen mer qatarda grafikali'q forma da qollani'ladi': elementar quti'dag'i' barli'q simmetriya elementlerinin' jaylasi'wi'; elementar quti'dag'i' uli'wmali'q awhalda turg'an noqatlardi'n' orbitalari' sa'wlelendiriledi. Ha'r bir gruppera ushi'n kestelerde uli'wmali'q ha'm dara ekvivalentlik poziciyalarda turg'an noqatlardi'n' duri's sistemasi'ni'n' koordinatalari' kirgizilgen. Usi'nday jollar menen noqatlardi'n' orbitasi' arqali' gruppani' sa'wlelendiriw atomli'q-kristalli'q strukturani' ta'riyiplewdin' tiykari' boli'p tabi'ladi'.

1.3.6. mm2 ushi'n a'piwayi' ken'isliklik gruppalar

Ha'r bir ken'isliktegi gruppani'n' genezisi baslang'i'sh noqat si'pati'nda belgili bir noqatli'q gruppag'a iye boladi'. Soni'n' menen birge ha'm bir noqatli'q gruppera sa'ykes ken'isliktegi gruppalardi'n'di'n' seriyasi'n keltirip shi'g'ari'wg'a mu'mkinshilik beredi. Mi'sal retinde ortorombali'q singoniyani'n' gruppalarini'n' biri ushi'n usi'nday keltirip shi'g'ari'wdi'n' logikalı'q izbe-izligin keltiremiz.

1.1-kestege sa'ykes bunday singoniyada 59 ken'isliktegi gruppera bar; olardı'n' jigirma ekisi mm2 gruppasi'na tiyisli. Da'slepki gruppera si'pati'nda mm2 gruppasi'n alami'z. Ma'seleni a'piwayi' pa'njerege iye ken'isliktegi gruppag'a shekem sheklemiz. Bul noqatli'q gruppani'n' jetkilikli generatori' boli'p eki simmetriya tegisligi xi'zmet etedi. Olar sa'ykes OX

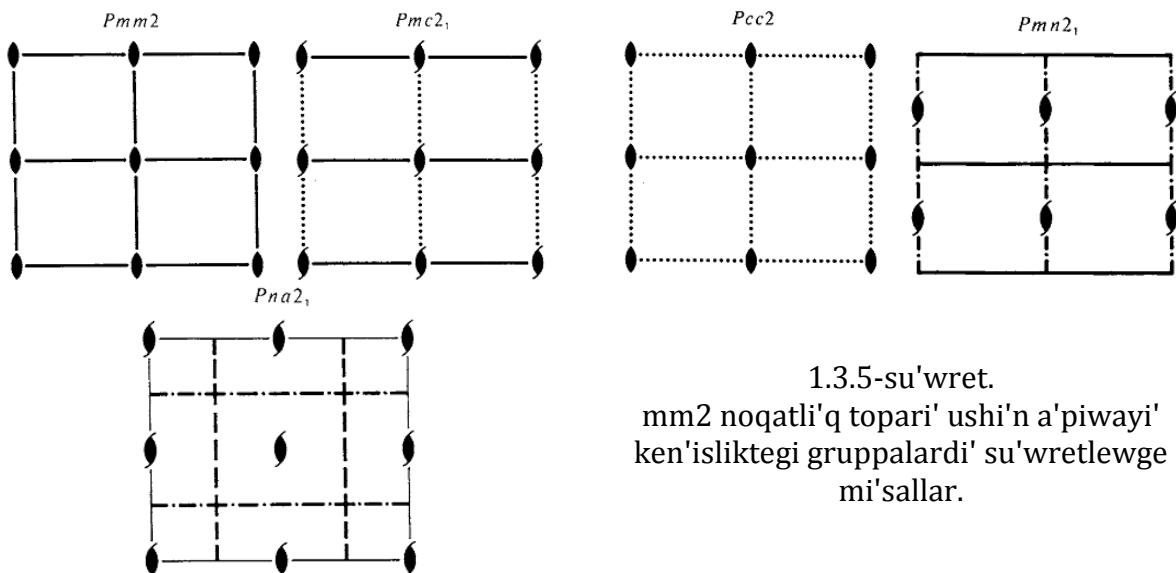
ha'm OY tegisliklerine perpendikulyar jaylasqan. Ken'isliktegi gruppalar'a o'tkende bul aynali'q tegislikler ushi'n tuwi'ndi' si'pati'nda ji'lji'p shashi'rati'wshi' simmetriya tegisligi ali'nadi'. Na'tiyjede mi'naday variantlardi' alami'z:

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

Bunnan keyin ken'isliktegi gruppalar simmetriya tegisliklerinin' jup kombinaciyalari'nan payda etiledi. A'piwayi' kombinatorika 16 sani'n beredi; eger kristallografiyalı'q teppe-ten'liki esapqa alsoq (ma = bm tipindegi teppe-ten'lilik) on dana kenisliktegi gruppala qaladi':

Pmm2, Pmc2₁, Rss2, Pma2, Rsa2₁, Pnc2, Pmn2₁, Rba2, Pna2₁, Rnn2.

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



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

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

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

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

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

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

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

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

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

1.4.4. Strukturani' ta'riyiplewge mi'sallar

Kremniy, Si

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

Singoniya	kubli'q;
Noqatli'q gruppа	m3m;
Pa'njere	qaptalda oraylasqan;
Parametr	a = 5,420 angstrom;
Elementar quti'dag'i' atomlar sani'	A = 8;
Simmetriyani'n' ken'isliktegi gruppasi'	Fd3m;
Gruppani'n' xali'q arali'q kestedegi qatar sani'	No 227;
Atomlar iyeleytug'i'n poziciyalar	8(s);

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

$$(0, 0, 0; 0, 1/2, 1/2; 1/2, 0, 1/2; 1/2, 1/2, 0) + \dots$$

Si 8 (s) 0,0,0; 1/4, 1/4, 1/4

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

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

Galliy fosfidi, GaP

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

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

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

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

$$\begin{array}{lll} R & 4 & (s) \\ Ga & 4 & (a) \end{array} \quad \begin{array}{l} 1/4, 1/4, 1/4 \\ 0,0,0 \end{array}$$

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

Strukturali'q semeystvoni'n' qurami' – 150 den aslami'raq birikpeler.

Manganectin' alfa-modifikaciysi', α -Mn.

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

Singoniya	kubli'q;
Noqatli'q gruppası	$\bar{4}3m$;
Pa'njere	ko'lemde oraylasqan;
Parametr	$a = 8,896$ angstrom;
Elementar quti'dag'i' atomlar sani'	$A = 58$;
Simmetriyani'n' ken'isliktegi gruppasi'	$\bar{1}\bar{4}3m$;
Xali'q arali'q kestelerdegi qatar sani'	No 217;

Atomlar to'mendegidey poziciyalarda jaylasqan:

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

.....

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

Joqari'da keltirilgen struktura o'zine ta'n bir qatar o'zgesheliklerge iye. Bul o'zgeshelikler tiykari'nda ayi'ri'm kristallografiyalı'q jag'daylardı' tu'sindiriw mumkin:

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

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

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

Strukturali'q semeystvosi'ni'n' qurami' - 60 intermetall birikpeler.

Intermetallid, ZrCo₂

Strukturali'q tip – Laves fazasi' MgCu₂(S15 yamasa cF24).

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

Atomlar mi'naday poziciyalarda jaylasqan:

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

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

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

Bunday strukturali'q tip binarli'q ha'm ko'p qurawshi'g'a iye metalli'q sistemalarda ken'nen tarqalg'an. Barli'q jag'daylarda da hal diagrammalari'nda Laves fazasi' AV₂ formulasi'na sa'ykes keletug'i'n belgili quramg'a iye boladi'. Bul fenomendi qurawshi'lardi'n' valentlik qatnaslari' menen tu'sindiriwge bolmaydi'. Laves fazalari'ni'n' payda boli'wi' "razmerlik faktor" menen qadag'alanadi': 8(a) poziciyasi'ndag'i' A qurawshi'si' 16(d) poziciyasi'ndag'i' V qurawshi'si'na sali'sti'rg'anda u'lken atomli'q radius penen xarakterlenedi (22.5 procentke u'lken), shem atomi' komponenta V v pozicii 16(d).

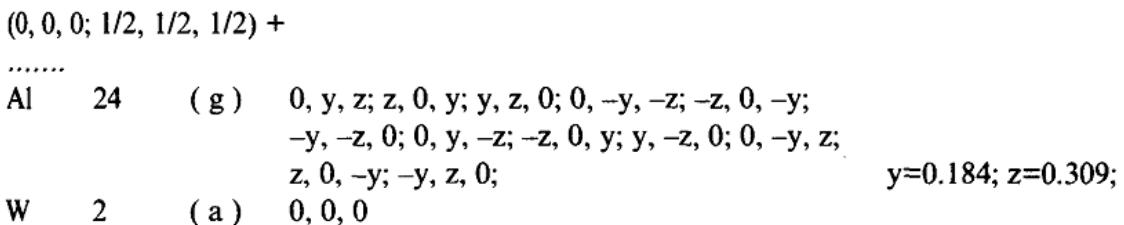
Strukturali'q semeystvoni'n' kurami' – shama menen 500 dey qos ha'm u'shlik birikpeler.

Intermetallid, Al₁₂W

Strukturali'q tip Al₁₂W, (yamasa sI26).

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

Atomlar to'mende ko'rsetilgen poziciyalarda jaylasqan:



Joqarı' temperaturalı' asa o'tkizgishler problemalari' intensivli tu'rde rawajlang'an da'wirlerde bul quramali' oksid bazalı'q materiallardı'n' birine aylandı'. Atomlardı'n' qutı'dag'i' konfiguraciyaları'ni'n' detalları' bunday strukturalardı' ken'nen belgili bolg'an seggentoelektriklik kristallar bolg'an VaTiO_3 kristalları'na jaqi'nlastı'radi'. Usı'ni'n' saldarı'nan a'debiyatta bul birikpeni strukturasi' boyı'nsha perovskitlerdin' strukturalı'q tipi dep atalatug'i'n tipke qosadi'.

1.5-bap. Ti'g'i'z jaylastı'ri'w principleri. Politipiya

1.5.1. Ulı'wmali'q eskertiwler. Kristalloximiya oblastı'nan bazi' bir mag'li'wmatlar

Jokarı'da keltirilgen materiallardı'n' barlı'g'i' da translyaciyalı'q pa'njere koncepciyasi'nan kelip shı'qqan halda kristalli'q strukturani' ta'riyiplewge tiykarlang'an. Bayanlang'an noqatlardi'n' duri's sistemasi' teoriyası' ko'z-qaraslardı'n' jabi'q sistemasi' boli'p tabi'ladi' ha'm ol ha'r qı'yı' atomlı'q strukturalardı' izbe-iz tu'sindiriwge mu'mkinshilik beredi. Bunday ta'riyiplewdin' belgili bir da'rejede abstraktı' ekenligi ta'biyyı ha'm fizikalı'q materialtani'w ma'selelerinde ha'r qı'yı' modellik sxemalar menen tabi'slı' tu'rde tolı'qtı'ri'li'p bari'ladi'. Bul kursti'n' sheklerinde strukturani' atomlardı'n' ti'g'i'z etip jaylastı'ri'lg'an sistemasi' dep qarawg'a tiykarlang'an usı'ldı' rawajlandı'ramı'z. Termodinamikali'q ko'z-qaraslarda qattı' denelerdi atomlı'q qa'ddide ken'islik kompaktlı' tu'rde toltı'ri'lg'an dep esaplani'ladi'. Sonlı'qtan biz qarayı'n dep atı'rg'an ma'seleni fizikalı'q jaqtan tolı'q tiykarlang'an dep esaplaymı'z. Biz to'mende atomlı'q strukturalardı' tap usı'nday jollar menen traktovkalag'anda paydalani'latug'i'n tiykarg'i' tu'sinikler menen tani'sami'z.

Strukturani'n' elementi si'patı'nda endi noqat (atomni'n' orayı') emes, al atomni'n' geometriyalı'q obrazı' si'patı'nda qollanı'latug'i'n sfera ali'nadi'. Usı'g'an sa'ykes atomlı'q radius tu'sinigi payda boladı'. Ionlı'q kristallar menen molekulalı'q birikpelerdi u'yrengende atomlı'q radius tu'sinigi onsha turaqlı' emes tu'sinikke aylanadı'. Sebebi valentlilikler menen baylani'slardı'n' uzi'nli'qları'ni'n' shamaları' ko'p jag'daylarda o'zgermeli shamalar boli'p tabi'ladi'. Biraq ko'p sanlı' matelli'q ha'm fri'm o'tkizgishli fazalarda atomlı'q radiustı'n' shamasi' orni'qli' ma'niske iye boladı'. Olardi'n' ma'nisin eksperimentlerde ani'qlang'an pa'njererin' parametrleri menen qutı'dag'i' atomlar sani'nan esaplaw arqali' tabadı'. En'

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

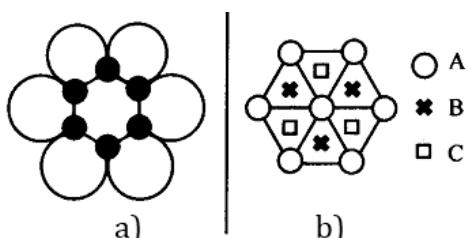
Jaylasti'ri'wdi'n' xarakteristikasi'ni'n' biri koordinaciyalı'q san (KS) boli'p tabi'ladi'. Ko'rgizbeli formada bul sanni'n' ma'nisi strukturani'n' berilgen poziciyasi'ndag'i' atomdi' qorshap turg'an qon'si'lari'ni'n' sani' boli'p tabi'ladi'. Mi'sali' volframni'n' strukturasi'nda atomlar ko'lemde oraylasqan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

Kristallografiyani'n' bul bo'limi haqqi'ndag'i' bilimlerdi metalli'q fazalardi'n' ha'm almaz semeystvosi'ni'n' strukturalari'n tallawdi'n' na'tiyjesinde ali'w mu'mkin.

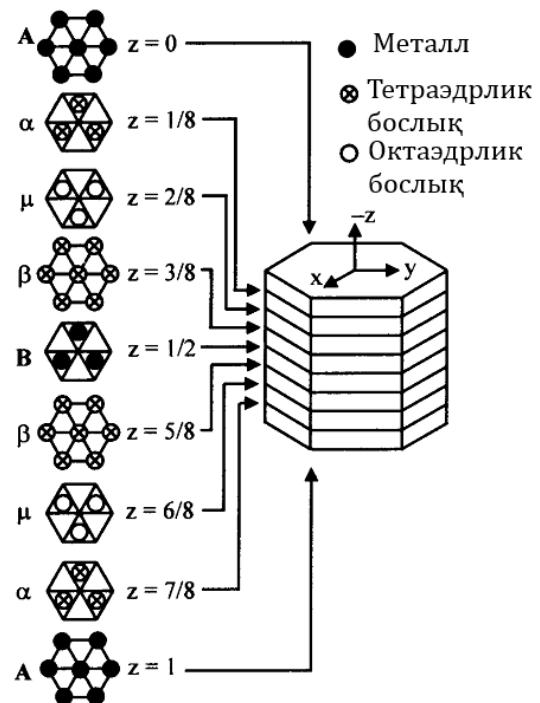
1.5.2. SHarlardi' ti'g'i'z etip jaylasti'ri'w

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

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



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



1.5.2-su'wret.

Eki qatlamlı'q eksagonalli'q jaylasti'ri'wdag'i' poziciyalardı'n' sxemasi'.

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

San	Jaylasti'ri'w tipi	Simvol	Ken'isliktegi gruppası	Strukturalı'q tip
2	AV A...	2N	P6 ₃ /mmc	Mg
3	AVS A...	3S	Fm3m	Cu
4	AVSV A...	4N	P6 ₃ /mmc	La
9	AVSVSASAV A...	9R	R̄3m	Sm

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

Ti'g'i'z geksagonalli'q jaylasti'ri'w (TGJ). Bunnan aldi'n'g'i' bapti'n' terminlerinde bul geksagonalli'q HP2 quti'da eki atomg'a iye magniydin' strukturalı'q tipi boli'p tabi'ladi'. Alternativlik traktovka – (001) tegislikler semeystvosi'ni'n' eki qatlamlı'q jaylasti'ri'li'wi'. Bunday struktura 1.5.2-su'wrette keltirilgen. Su'wrettegi arnawli' belgiler bul strukturadag'i' tetraedrlik ha'm oktaedrlik bosli'qlardi'n' jaylasi'wlari'n' ko'rsetedi. Esaplawlar mi'naday balanstı' beredi: quti'da 2 metalli'q atom, 2 oktaedrlik baslı'q, 4 tetraedrlik bosli'q bar. Demek ha'm bir atomg'a 1 oktaedrlik ha'm 2 tetraedrlik bosli'q sa'ykes keledi.

Ti'g'i'z kubli'q jaylasti'ri'w (TKJ) tek bir variantta ju'zege keledi – bul mi'sti'n' strukturalı'q tipi, ha'm bir qaptalda oraylasqan Cf4 kubli'q quti'g'a 4 atom sa'ykes keledi. Jan'a traktovkada bul (111) semeystvosi'na kiriwshi tegisliklerden' atomları'ni'n' u'sh qatlamlı'q jaylasti'ri'li'wi' boli'p tabi'ladi' (1.5.3-su'wretke karan'i'z). Bul jerde arnawli' bosli'qlardi'n' orayları'ni'n' poziciyaları'n' ko'riwge boladi': oktaedrlik (O) – barlı'q qabi'rg'alardi'n' ortası' ha'm ko'leminin' orayı' – barlı'g'i' boli'p ha'r bir quti'g'a 4 dana; tetraedrlik (T) – kishi kublardi'n' (oktantlardi'n') orayları'nda. Bir quti'gan sa'ykes keliwshi bunday bosli'qlardi'n' sani' 8. Solay etip bosli'qlardi'n' balansi' o'zgerissiz qaladi': metaldı'n' ha'm bir atomı' ushi'n 1-O + 2-T. Basqa ti'g'i'z etip jaylasti'ri'lğan strukturalardan parqı'

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

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

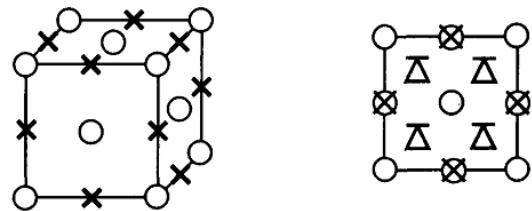
$$a_{\text{Geks}} = \frac{a_{\text{Kub}}}{\sqrt{2}}, \quad c_{\text{Geks}} = \frac{2}{3} a_{\text{Kub}} \sqrt{3}.$$

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

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

1.5.3-su'wret.

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



- | | |
|-------------------------------|--|
| ○ Тафыз жайластырыў атомлары. | ○ z = 0 қәддиндеги тығыз жайластырыў атомлары. |
| ✖ Октаэдрлик бослықтар. | ✖ z = 1/2 қәддиндеги тығыз жайластырыў атомлары. |
| | △ z = 1/4 ҳөм 3/4 қәддилериндеги тетраэдрлик бослықтардың позициялары. |

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

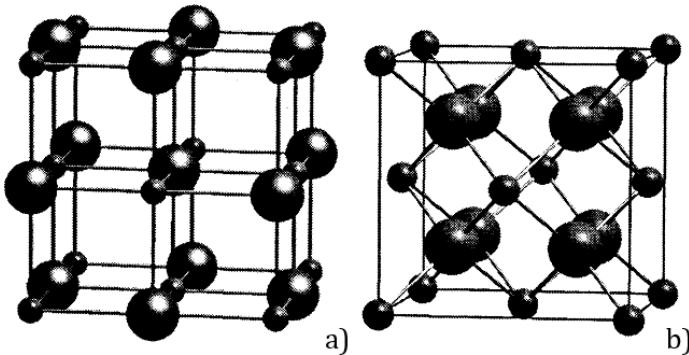
Prototiplik jaylasti'ri'wlar arasi'ndag'i' jokari'da atap o'tilgen baylani'slar haqi'yqi'y strukturali'q processlerde ju'zege keledi. Atap aytqanda metalli'q kobalt penen baylani'sli' bolg'an strukturali'q ma'seleleri sheshiw za'ru'rliji "jaylasti'ri'w defekti" fknomenin islep shi'g'i'w za'ru'rlijin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

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

1.5.2. Binarli'q birikpeler

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

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



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

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

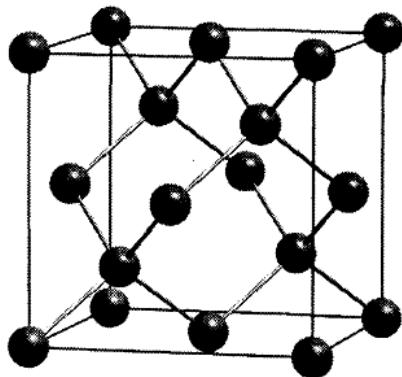
Solay etip ti'g'i'z jaylasti'ri'w modeli o'zinin' qollani'li'w oblasti'na iye eken. Buni'n' ushi'n atomli'q ha'm ionli'q radius ja'ne qattı' denelerdegi baylani'slardi'n' ta'biyati' haqqi'nda juwi'q tu'rdegi mag'li'wmatlarg'a su'yeniwimiz kerek. Soni'n' menen bir qatarda atomli'q dizbeklerdin', qatamlardi'n',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

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

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

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

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



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

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

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

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

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

poziciyalari'nda jaylasqan. Ku'kirttin' tiykarg'i' jaylasi'wlari' geksagonalli'q jaylasti'ri'wlardi' payda etedi. Cink atomlari' sfalerittegi si'yaqli' tetraedrlik poziciyalardi'n' yari'mi'n iyeleydi. Qatlamlardi'n' izbe-izligi AA*VV*A... si'pati'nda jazi'ladi'. (*) belgisi ekinshi qurawshi' atomlari' payda etken tegislikti an'latadi'.

Cink sulfidi ushi'n a'dettegi kristallizaciya processi geksagonalli'q modifikasiyani'n' payda boli'wi' menen ju'redi. Bunnan keyingi salqi'nlati'wda bul geksagonalli'q modifikasiyani'n' orni'qli' sfaleritke aylani'wi' kerek. Haqi'yqati'nda bunday jag'dayda ha'r qi'yli' tu'rdegi eki o'lshemli defektlerdin' ha'm strukturali'q qatlamlardi'n' gezeklesiwinin' (izbe-izliginin') ha'r qi'yli' variantlari'ni'n' ju'zege keliwi kerek.

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

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

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

2.3-bap. Neytronlardı'n' derekleri

1932-ji'li' Dj. SHedvik neytrondi' ashqanda bo'lekshelerdin' (elektronlardı'n') kristalli'q pa'njeredege difrakciyasi'ni'n' principleri ani'qlang'an edi. Neytronlardı'n' difrakciyasi'ni'n' mu'mkin ekenligin birinshi ret V. Elzasser 1936-ji'li' itibar berdi. Tap sol ji'li' birinshi eksperimentlerdi Mitshell, Xalban ha'm Preysverkler a'melge asi'rdi'. Biz da'slep bunday dereklerdin' o'zine ta'n o'zgesheliklerin qarap o'temiz.

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

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

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

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

Arnawli' yadroli'q reaktorlar bolmag'an jag'daylarda neytronlardı'n' da'stelerin to'mendegidey yadroli'q reakciyalardi'n' ja'rdeinde ali'nadi':

- 1) radon-berilliy aralaspasi', reakciya ${}^9\text{Ve}(\alpha, n){}^{12}\text{S}$; barli'q sferag'a ag'i's 10^7-10^8 s^{-1} ;
- 2) (γ , p) reakciyada γ -derektin' ja'rdeinde 10^6 s^{-1} bag'i'tlang'an da'stesinin' ali'ni'wi' mu'mkin;

3) neytron generatorda protonlardı' (dektronlardı') tezletkishtin' ja'rdeinde (p, n) yamasa (d, n) reakciyalari'ni'n' ja'rdeinde 10^{13} s^{-1} ag'i'si'n (da'stesin) aladi'.

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

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

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

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

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

3-bap. Kristaldag'i' shashi'raw. Laueniň interferenciyalı'q funkciyasi'

Ma'seleniň qoyi'li'wi'

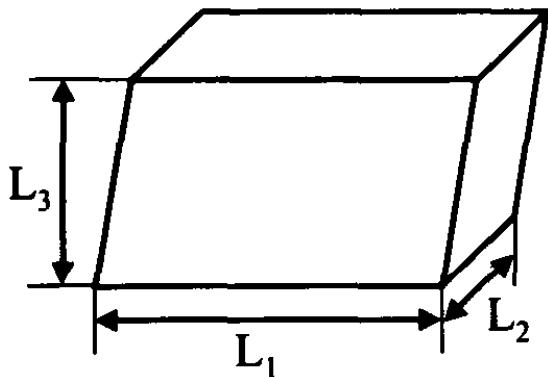
Atomlar gruppasi'ndag'i' shashi'rawdi'ň na'tiyjesinde interferenciyalı'q effekt ha'm struktrali'q uamplituda tu'sinigi kirgizilgennen keyin elementar quti'lardi'ň ji'ynagi' si'pati'nda qaralatug'i'n kristaldag'i' shashi'raw ma'selemine o'tiw maqsetke muwapi'q boladi'. Bunday ma'seleni sheshiwdiň na'tiyjesinde difrakciyalı'q maksimumlardi'ň payda boli'wi'ni'ň sha'rtlerin g'a'rezsiz tu'rde ali'w ha'm keri keñisliktiň qa'siyetleri haqqi'ndag'i' mag'li'wmatlardi'ň toli'q sistemasi'n ali'w mu'mkin.

Eň da'slepki boljaw kishi kristal ta'repinen shashi'rati'w termini menen aňlati'ladi'. Oni'ň ma'nisi to'mendegilerden ibarat:

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

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

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



3.3.1-su'wret.

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

Analitikali'q formani' a'piwayi'lasti'ri'w ushi'n kristaldi' parallelepiped formasi'na iye ha'm oni'ñ qabi'rg'alari' pa'njere ko'sherlerine parallel dep esaplaymi'z (3.3.1-su'wret). Kritaldi'ñ o'lshemleri $L_1 = M_1a$, $L_2 = M_2b$, $L_3 = M_3s$ bolsi'n. Bunday jag'dayda elementar quți'lardi'ñ uli'wmali'q sani' $M = M_1M_2M_3$ ke teñ boladi'. Kristaldag'i' quți'lardi'ñ numeraciyasi'n t, p, r pu'tin sanlari'ni'ñ ja'rdeminde belgileymiz. Elementar quți' N dana atomg'ye bolsi'n. Quți'ni'ñ koordinatalari'ni'ñ basi' r_{mnp} g'a sa'ykes keledi dep espalaymi'z. Quți'ni'ñ ishi j- atom $r = r_{mnp} + r_j$ koordinatasi'na iye. Kristaldag'i' atomlardi'ñ uli'wmali'q sani' $N \times M = M_1 \times M_2 \times M_3$ shaması'na teñ boladi'.

Indekslerdiñ ma'nisleri

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

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

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

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

Ma'seleni sheshiwdiñ sxemasi'

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

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

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

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

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

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

Soñg'i' summai'ñ ("j" boyi'nsha ali'natug'i'n summani'ñ) strukturali'q amplituda ushi'n joqari'da ali'ng'an añlatpag'a sa'ykes keletug'i'nli'g'i' ko'rinipli tur. Biraq g vektori'ni'ñ keri keñisliktegi noqatti'ñ koordinatasi' si'pati'nda ani'qlang'an ekenligin este saqlaw kerek. Al g

ni'ñ keri pa'njereniñ radius-vektori' boli'wi' kerek degen sha'rtti ma'seleni sheshiwdiñ tap usi' etapi'nda qoymaymi'z. Bizge ha'zirshi "difrakciya teñlemesi belgili emes".

Biz endi qi'sqasha tu'rdegi

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

añlatpasi'n jazami'z. Bul añlatpadag'i'

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

funkciyasi'n Laueniñ interferenciyalı'q funkciyasi' dep ataymi'z.

Eksponentialardi'ñ ko'rsetkishleriniñ skalyar ko'beymeleri jazi'ladi'. Vektorlar mi'naday tu'rge iye boladi':

$$\begin{aligned} \mathbf{g} &= \mu \mathbf{a}^* + \eta \mathbf{b}^* + \nu \mathbf{c}^*, \\ \mathbf{r}_{mnp} &= m \mathbf{a} + n \mathbf{b} + p \mathbf{c}. \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} \mathbf{gr}_{mnp} &= m\mu + n\eta + p\nu, \\ \mathbf{gr}_j &= x_j \mu + y_j \eta + z_j \nu. \end{aligned}$$

Na'tiyjede

$$\begin{aligned} F(\mu\eta\nu) &= \sum_{j=1}^N f_j \exp(i2\pi(x_j\mu + y_j\eta + z_j\nu)), \\ \Phi(\mu\eta\nu) &= \sum_{m=0}^{M_1-1} \sum_{n=0}^{M_2-1} \sum_{p=0}^{M_3-1} \exp(i2\pi(m\mu + n\eta + p\nu)). \end{aligned}$$

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

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

yamasa

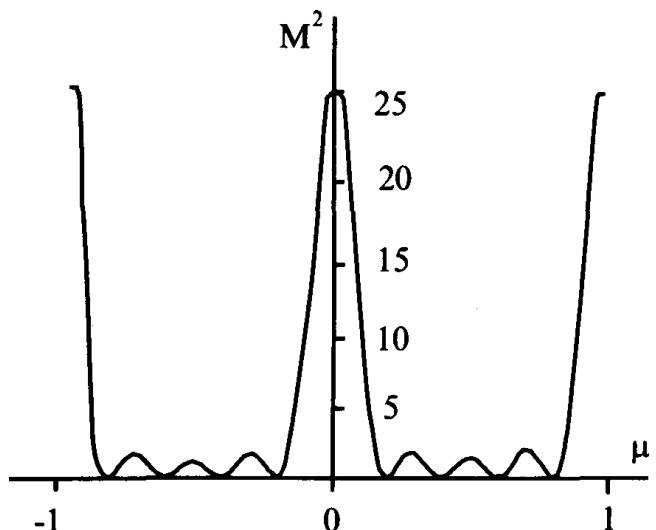
$$J_k = J_e \cdot |F(\mu\eta\nu)|^2 \cdot |\Phi(\mu\eta\nu)|^2$$

añlatpasi'na iye bolami'z. Bul añlatpadag'i'

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

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

3.3.2-su'wret.
Bir o'lshemli tarqali'wdag'i'
interferenciyalı'q funkciyani'ñ
maksimumlari' menen minimumlari'.



Indeksler boyi'nsha u'shlik summani'

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

ko'beytiwshilerine bo'liwdiñ mu'mkin ekenligi ko'rinip tur. YAg'ni'y

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

Bir o'lshemli fragmentti

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

tu'rindegi progressiya si'pati'nda qaraymi'z. Bunday progressiyani'ñ summasi'

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

formulası'ni'ñ ja'rdeinde esaplanadi'. Endi interferenciyalı'q faktordi' sinc-funkciyasi'ni'ñ kvadrati' tu'rinde alami'z:

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

Interferenciyalı'q funkciyani'ñ qa'siyetleri 3.3.2-su'wrette ayqi'nlasadi'. Bul shamani'ñ barli'q

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

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

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

аңлатпаси'n алами'з.

Demek bir o'lshemli tarqali'w su'wrette ko'rsetilgenindey bas maksimumlarg'a, noller sistemasi'na ha'm qosi'msha maksimumlarg'a iye boladi' eken. Maksimumlardi'ñ biyiklikleriniñ qatnaslari': bas maksimum - 100, birinshi qosi'msha - 4.5, ekinshi qosi'msha - 1.6 ha'm tag'i' basqalar. Funkciyani'ñ noller 1/M parametriniñ ja'rdeminde ani'qlanadi'. Basqa so'z benen aytqanda maksimumni'ñ keñligi usi' ko'sher bag'i'ti'ndag'i' elementar quти'lar sani'na g'a'rezli eken. U'sh o'lshemli ta'riyiplegende bas maksimumlardi'ñ ori'nları' $\mu = h$, $\eta = k$, $v = l$ sha'rtleriniñ ori'nlanı'wi'n tabap etedi.

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

Bunday jag'dayda ayqi'n difrakciyali'q maksimumni'ñ intensivligi ushi'n uli'wmali'q аңлатпа

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

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

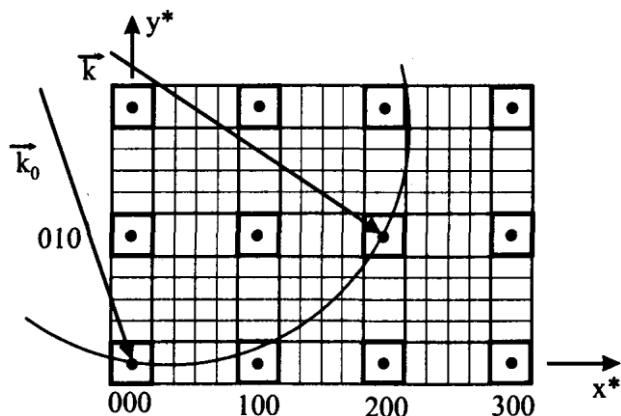
Keri pa'njereniñ tu'yinleriniñ forması' ha'm o'lshemleri

Biz qarap ati'rg'an kristall ushi'n interferenciyalı'q funkciyani'ñ tarqali'wi' sxema tu'rinde 3.3.3-su'wrette keltirilgen. Keri pa'njereniñ ha'r bir koordinata ko'sheri bag'i'ti'ndag'i' tu'yinlerdiñ (bas maksimumlardi'ñ) si'zi'qli' o'lshemleri kristaldi'ñ usi' bag'i'ttag'i' o'lshemli (quти'lar sani') menen ani'qlanadi'. 3.3.2-su'wrette ko'riniп turg'ani'nday, sinc-funkciyani'ñ grafiginde minimumnan minimumg'a shekemgi qashi'qli'q sali'sti'rmali' birliklerde $2/M_1$ ge teñ. Keri keñisliktiñ masshtabi'nda $\delta x^* = a \cdot 2/M_1$. Bunday jag'dayda keri pa'njereniñ tu'yininiñ ko'lemi $V^* = 8a^*b^*c^*/(M_1 M_2 M_3)$ shaması'na teñ ha'm difrakciya processinde qatnasatug'i'n kristalli'q obъekttiñ ko'lemi $V = abc(M_1 M_2 M_3)$ menen keri qatnas arqali' baylani'sqan.

Sanlı'q bahalawdi' keltiremiz (san ma'nisin ani'qlaymi'z). Kub ta'rızlı formag'a iye kristalli'q u'lгige iyemiz dep esaplayı'q. Kubti'ñ qabi'rg'ası'nı'ñ uzi'nli'g'i' $L_1 = 0.1$ mm = 10^{-2} sm bolsı'n. Elementar quти' ushi'n $a = 10$ Å = 10^{-7} sm; quти'lar sani' $M_1 = L_1/a = 10^5$; keri pa'njere tuyininiñ keñligi $\delta x^* = 2 \cdot 10^{-6}$ Å⁻¹; mi's anodti'ñ K_α-nurlanı'wi' paydalani'latug'i'n bolsı'n $\lambda = 1.54$ Å, $|\mathbf{k}| = 0.65$ Å⁻¹. 3.3.3-si'zi'lma boyi'nsha \mathbf{k} vektori' bag'i'ti'ndag'i', difrakciyali'q maksimumni'ñ keñligi

$$\delta\theta = \delta x^*/|\mathbf{k}| = 3,08 \cdot 10^{-6} \text{ radian} \approx 0,2 \text{ mu'yeshlik sekunda}$$

shaması'na teñ boladi'.



3.3.3-su'wret.

Keri pa'njereniň kesimindegi interferenciyalı'q funkciyani'ň tarqali'wi': noqatlar bas maksimumlardı'ň poziciyalari'na, si'zi'qlar "funkciyani'ň nollerine" sa'ykes keledi.

Fraunhofer difrakciyasi'ni'ň uli'wmali'q principlerine saykes interferenciyalı'q funkciyalardı'ň qasıyettelerin izbe-iz tallaw keri pa'njereniň qutı'sı'ni'ň ishindegi intensivliktiň tarqali'wi'ni'ň "substrukturasi'n" tolı'q ta'riyiplewdi ta'miyinleydi. Fizikali'q optikanı'ň terminlerinde F funkciyasi' keri keňislikte ani'qlang'an ha'm ha'r bir tu'yin (maksimum) kristalli'q obъekttiň si'rtqi' formasi'ni'ň fure-obrazı' si'pati'nda ta'riyiplenedi. Usı' jerde tu'siniklerdiň bo'liniwine ja'ne de bir ret itibar beremiz:

- 1) keri keňisliktiň metrikası' birinshi gezekte formal tu'rdegi matematikali'q problema boli'p tabi'ladi';
- 2) keri pa'njere ha'm interferenciyalı'q funkciyani'ň tu'ri – bul ayqi'n fizikali'q eksperimenttiň obrazli'q ko'rinishi boli'p tabi'ladi'; bul jerde konfiguraciyaǵ'a difrakciyag'a qatnasatug'i'n kristaldi'ň o'lshemleri, tolqi'n uzi'nli'g'i', eksperimentalı'q sxemanı'ň geometriyası' ta'sir etedi.

Tap usı'nday ko'z-qarasta keň tarqalg'an "keri pa'njere "F²-dene" si'pati'nda" termininiň ma'nisi tu'sinikli boladı'. Interferenciyalı'q faktordı'ň tarqali'wi' ayqi'n eksperimenttegi difrakciyalı'q maksimumni'ň profili menen piklik intensivligine tiykargı' sha'ttlerdi qoyadı'. Joqarı'da keltirilgen mi'salda reflekstiň jayı'li'wi' di'm kishi edi. Biraq fizikali'q materialtani'wdı'ň o'zine ta'n situaciaları'nda (nanokristallar, kristalli'q bettegi eki o'lshemli qatlamlar, ha'r qi'yli' dispersiyali'q kuymalar, turaqlı' magnitlerdiň strukturaları' ha'm basqalar) difrakciyalı'q eksperimnetlerdiň o'zgeshelikleri keri pa'njereniň ayqi'n anizotroplı'q formasi' ta'repinen qadag'alanadı'.

3.4-bap. Fure qatari'na jayi'w ha'm strukturali'q analizdiq principleri

Elektronli'q ti'g'i'zli'qtin u'sh o'lshemli qatari'

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

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

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

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

Faza ushi'n eksponentani'q ko'rsetkishindegi skalyar ko'beyme tu'rindegi aňlatpag'a o'temiz:

$$\begin{aligned} \mathbf{g} &= h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*, \\ \mathbf{r} &= x\mathbf{a} + y\mathbf{b} + z\mathbf{c}. \end{aligned}$$

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

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

aňlatpasi'nda x_1, y_1, z_1 shamalari' arqali' noqatti'q angstremlerdegi koordinatalari' belgilengen. Usi' aytı'lg'anlardı' esapqa ali'p mi'na aňlatpani' jazi'w mu'mkin:

$$\begin{aligned} F(hkl) &= \iiint_{0 0 0}^{a b c} \rho(x, y, z) \exp(i2\pi(hx + ky + lz)) dx dy dz, \\ &= V_o \iiint_{0 0 0}^{1 1 1} \rho(x, y, z) \exp(i2\pi(hx + ky + lz)) dx dy dz. \end{aligned}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

3. Jazi'wdi'ñ "kosinusli'q" formasi':

$$\begin{aligned} f(x) &= \sum_{-\infty}^{\infty} C_n \cos(2\pi n \frac{x}{a} - \varphi_n), \\ f(x) &= C_o + \sum_{n=1}^{\infty} 2C_n \cos(2\pi n \frac{x}{a} - \varphi_n); \end{aligned}$$

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

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

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

$$\begin{aligned} K_n &= C_n \exp(-i\varphi_n) = A_n + iB_n; \\ A_n &= A_{-n} = \frac{a_n}{2}; \quad B_n = -B_{-n} = \frac{b_n}{2}; \quad K_n = \frac{a_n}{2} + i \frac{b_n}{2}. \end{aligned}$$

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

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

$$F(hkl) = \sum_p \sum_q \sum_r \iiint_{0 0 0}^{1 1 1} V_o K_{pqr} \exp\{-i2\pi(px + qy + rz)\} \cdot \exp\{i2\pi(hx + ky + lz)\} dx dy dz.$$

Bul aňlatpada V_0 arqali' elementar quti'ni'ñ ko'lemi belgilengen.

2. Endi

$$\begin{aligned} \int_0^1 \exp\{i2\pi((h-p)x)\} dx &= \int_0^1 \cos(2\pi(h-p)x) dx + i \int_0^1 \sin(2\pi(h-p)x) dx = \\ &= \frac{\sin(2\pi(h-p))}{2\pi(h-p)} + i \left(\frac{-\cos(2\pi(h-p))}{2\pi(h-p)} + \frac{1}{2\pi(h-p)} \right). \end{aligned}$$

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

Demek qatardi'ñ köoefficienti:

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

Qatardi'ñ nollik ag'zasi' ushi'n

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

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

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

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

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

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

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

añlatpasi'nan paydalanami'z. Bul añlatpada

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

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

Bul añlatpalarda

[I]:

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

[II]:

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

Fure tolqi'nları'ni'ñ semeystvosi' ha'm kristaldi'ñ keri pa'njeresi

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

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

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

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

Demek

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

Bunnan keri pa'njererin' haqi'yqi'y obrazi'ni'n' yamasa F²-denenin' (000) koordinata basi'nda inversiya orayi'na iye bolatug'i'nli'g'i' kelip shi'g'adi'. Basqa so'z benen aytqanda pa'njererin' eki tu'yini (h,k,l) ha'm (-h, -k, -l) birdey salmaqqa iye boladi' degen so'z. Difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'nni'n' intensivliginin' F² shaması'na proporsional ekenligin eske tu'siremiz (yag'ni'y I ~ F²). Demek rentgenogrammadag'i' difrakciyalı'q maksimumlardı'n' jaylasi'wlari'nda ha'm intensivliklerinde inversiya orayi'ni'n' bar ekenligi tabi'lsa da, bul jag'day kristaldi'n' simmetriyasi'ni'n' orayg'a qarata simmetriyali' noqatli'q gruppag'a jataturug'i'nli'g'i'n an'g'artpaydi'. Mi'sali', noqatli'q gruppasi' 2 bolg'an kristall ayri'qsha ko'sher bag'i'ti'nda su'wretke ali'ng'anda rentgenogrammada refleksler 2-ta'rtipli simmetriya ko'sherinin' bar boli'wi'na sa'ykes jaylasadi'. Eger kristaldi' bursaq ha'm 2-ta'rtipli simmetriya ko'sherin kelip tu'siwshi rentgen nuri'na perpendikulyar etip jaylasti'rsaq, onda rentgenogrammadag'i' refdekslerdin' jaylasi'wlari' aynali'q shag'i'li'si'w simmetriya tegisliginin' bar ekenligin ko'rsetedi. Bul "m" simmetriya 2-ta'rtipli simmetriya ko'sherin keri pa'njerede barli'q waqi'tta qatnasatug'i'n simmetriya orayi'na ko'beytiwdin' saldari'nan ali'nadi'. Bul mi'saldan 2 gruppasi'ni'n' kristallari' da, m gruppasi'ni'n' kristallari' da simmetriyasi' boyi'nsha 2/m gruppasi'ni'n' rentgenogrammasi'nday rentgenogrammalardi' beretug'i'nli'g'i' kelip shi'g'adi'. Bul fenomendi a'dette "Fridel ni'zami'" dep te ataydi'.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Patterson sintezi

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

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

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

$$\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m = \mathbf{au}_{nm} + \mathbf{bv}_{nm} + \mathbf{cw}_{nm} = \mathbf{au}_j + \mathbf{bv}_j + \mathbf{cw}_j.$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

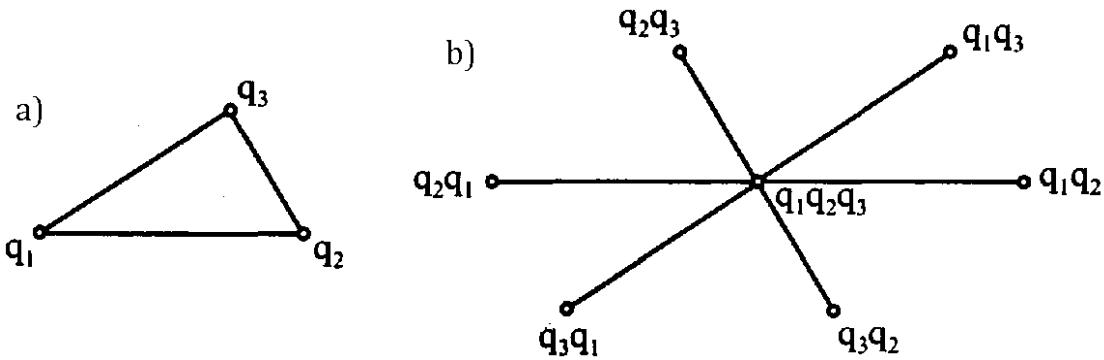
$$|F(hkl)|^2 = \int_{V_0} \left\{ \int_{V_0} \rho(xyz) \cdot \rho(x+u, y+v, z+w) dV \right\} \exp(i2\pi(hu + kv + lw)) dV_{uvw}$$

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

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

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

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



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

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

$$\begin{aligned} F &\xrightarrow{\Phi} \rho(xyz), \\ |F|^2 &\xrightarrow{\Phi} P(uvw). \end{aligned}$$

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

$$P(uvw) = \frac{1}{V_0} \sum_{h}^{\infty} \sum_{k}^{\infty} \sum_{l}^{\infty} |F(hkl)|^2 \exp(-i2\pi(hu + kv + lw)).$$

Bul qatar fazali'q konstantalarsi'z tek kosinuslar boyi'nsha summalaudi' o'z ishine aladi'.

Solay etip kvadratli'q detektorlawg'a baylani'sli' baqlanatug'i'n difrakciyali'q su'wret predmettin' fure-tu'r lendiriwi emes, al predmettin' avtokorrelyaciysi'ni'n' bazi' bir funkciyasi'na sa'ykes keledi eken. Eger golografiya terminologiyasi'nan paydalansaq, onda kristaldi'n' strukturasi'n oni'n' difrakciyali'q su'wretinen payda etiw atomli'q arali'q vektorlar ken'isligindegi predmettin' quramalasqan obraz'i' si'pati'nda avtokorrelyaciya funkciyasi'ni'n' tarqali'wi'n beredi.

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

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

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

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

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

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

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

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

Kirisiw

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

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

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

1-§. SHULC ha'm FUDJIVARA USI'LLARI'

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

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

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

ko'pshilikke belgili sha'rti tiykari'nda difrakciyag'a ushi'raydi'. Bul formulada d arqali' kristallografiyalı'q tegislikler arasi'ndag'i' qashi'qli'q, θ arqali' difrakciyali'q mu'yesh, λ arqali' rentgen nurlari'ni'n' tolqi'n uzi'nli'g'i', al n arqali' 1, 2, ... ma'nislerin qabi'l etiwshi pu'tin san belgilengen.

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

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

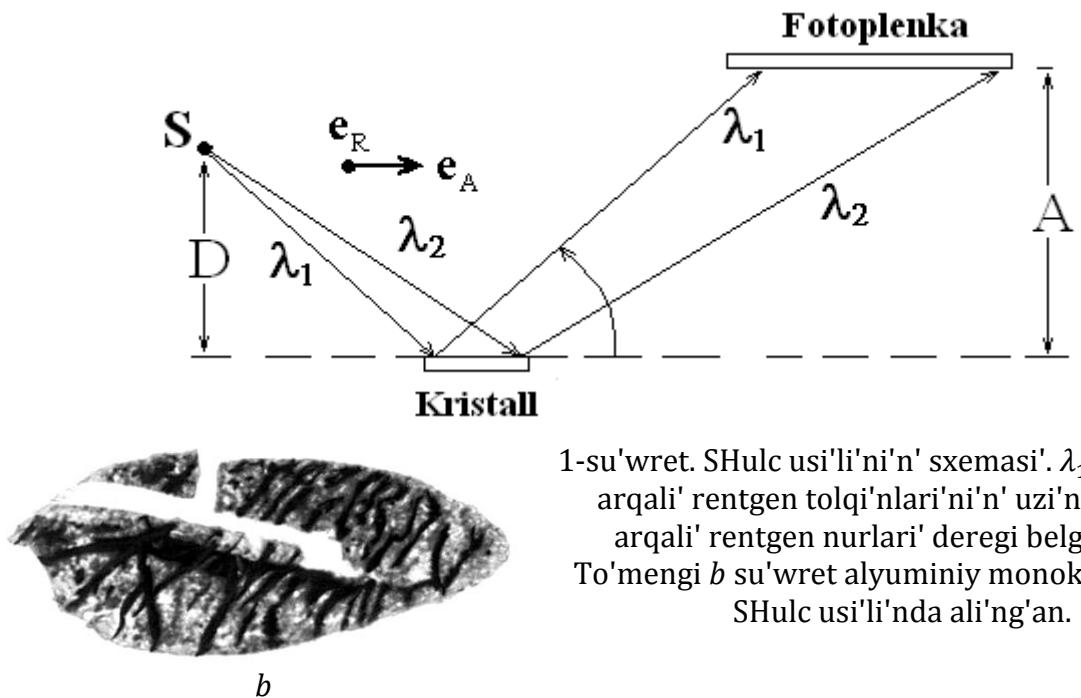
Bul ten'lemede $\theta_1 = \arcsin(\sin \alpha \cos \varphi)$, α arqali' shashi'rati'wshi' tegislikler menen kristaldi'n' beti arasi'ndag'i' mu'yesh, $R(\theta, \varphi)$ ha'm φ arqali' fotoplenka betindegi difrakciyali'q si'zi'qtin' polyar koordinatalari' belgilengen. Koordinata basi' bolg'an O noqati' plenka tegisligi menen shashi'rati'wshi' tegisliklerge tu'sirilgen normaldi'n' kesilisiw noqati'nda jaylasqan. φ mu'yeshinin' ma'nisi bul normaldi'n' plenkag'a tu'sirilgen proekciyasi'nan baslap esaplanadi'.

SHulc usi'li'nda kristaldi' zonası'ni'n' ko'sheri azimutalli'q bag'i'tta jaylasqan tegisliklerden shashi'raw ali'natug'i'nday etip jaylasti'radi'.

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

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

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



a
1-su'wret. SHulc usi'li'ni'n' sxemasi'. λ_1 ha'm λ_2 ler arqali' rentgen tolqi'nлari'ni'n' uzi'nli'qlari', S arqali' rentgen nurlari' deregi belgilengen.
To'mengi *b* su'wret alyuminiy monokristalli'nan SHulc usi'li'nda ali'ng'an.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

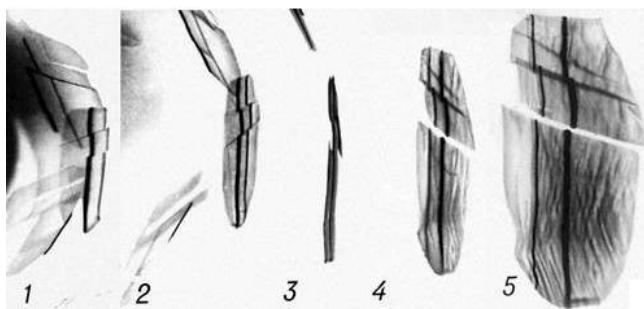
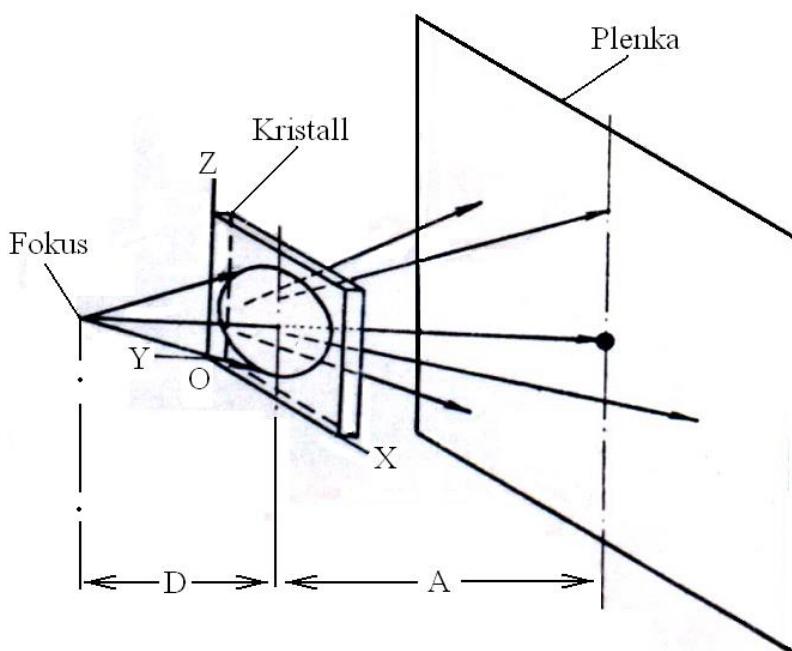
Bul an'latpalarda m_A menen m_R arqali' ha'r qi'yli' subda'neshelerde shashi'rag'an xarakteristikali'q rentgen nurları'ni'n' bir birinen sa'ykes azimutalli'q ha'm radialli'q bag'i'tlardag'i' awi'si'wi' belgilengen (3-su'wretti qaran'i'z). γ_A ha'm γ_R arqali' tu'siwshi

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

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

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

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



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

OY ko'sheri do'geregidegi subda'neshelerdin' bir birinen buri'li'w mu'yeshi xarakteristikali'q si'zi'qli'ni'n' awi'si'wi'na yamasa plenkani'n' vertikalli'q diametrindegi interferenciyalı'q daqtag'i' gorizont bag'i'ti'ndag'i' shegarali'q jolaqlardi'n' payda boli'wi'na ali'p keledi. Bul awi'si'wdi'n' shamasi' boyi'nsha yamasa sa'ykes shegarali'q oblastti'n' ken'ligi boyi'nsha buri'li'w mu'yeshinin' ma'nisi esaplanadi' [(1-8)- ha'm (1-9)-formulalar].

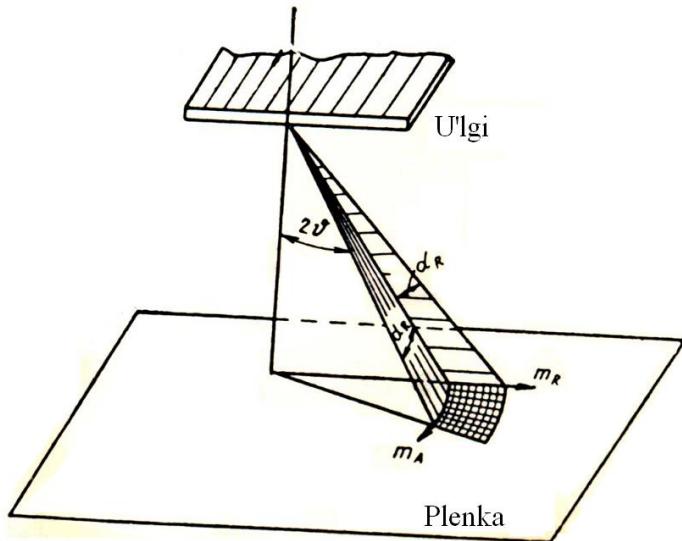
Subda'neshelerdin' OY ko'sheri do'geregidegi buri'li'wlari' fotoplenkada radial bag'i'ttag'i' shegarali'q jolaqtin' payda etedi. Bul jolaqlardi'n' ken'ligi boyi'nsha buri'li'w mu'yeshi ani'qlanadi' [(1-7)-formula]. (1-7)-formula ja'rdeinde ali'ng'an buri'li'w mu'yeshinin' ma'nisinen shashi'rati'wshi'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

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

Vertikalli'q diametrde jaylasqan refleksler ushi'n bunday du'zetiwdin' shaması' $\delta_Z \sin \varphi$, al gorizont bag'i'ti'ndag'i' diametrde jaylasqan daqlar ushi'n $\delta_X \sin \psi$. Bul du'zetiwlerde φ menen ψ arqali' shashi'ratı'wshi' tegisliklerdin' XOY ha'm ZOY tegisliklerine salı'sti'rg'andag'i' buri'l'g'an mu'yeshleri belgilengen. δ_Z penen δ_X bolsa subda'neshelerdin' sa'ykes OZ ha'm OX ko'sherleri do'geregidegi buri'l'i'w mu'yeshleri.

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

Bul aytı'lg'anlardı'n' barlı'g'i' da subda'neshelerdin' o'lshemleri rentgen trubkasi'ni'n' fokusi'ni'n' o'lshemi bolg'an f shaması'nan u'lken bolg'an jag'daylarda g'ana ori'nlanadi'.

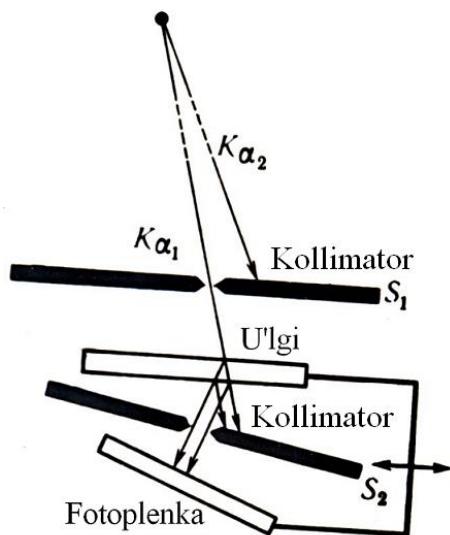


3-su'wret.

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

2-§. Lang usi'li'

Kristallar rentgenografiyasi'nda ken' tarqalg'an ha'm monoxromat rentgen nurları' paydalani'latug'i'n Lang usi'li' salı'sti'rmali' juqa kristallardag'i' kristalli'q quri'li'slardı'n' defektlerin u'yreniw ushi'n qollani'ladi'. Bunday juqa kristallar ushi'n $\mu t < 1$ sha'rtinin' ori'nlanı'wi' lazi'm. Bul ten'sizlikte μ arqali' kristaldi'n' si'zi'qli' jutı'w koefficienti, al t arqali' onı'n' qali'n'li'g'i' belgilengen. Bul usi'lda rentgentopografiyali'q su'wretke tu'siriw sxemasi' 4-su'wrette berilgen. Si'zi'qli' rentgen nurları' dereginen (4-su'wrette bul si'zi'q sxema tegisligine perpendikulyar) shi'qqan rentgen nurları' shashi'ratı'w awhali'na qoyı'lg'an kristalga kelip tu'sedi. Bregg (Breg) bag'i'ti'nda u'lken ayı'ra ali'wshi'li'qqa jetiw ushi'n nurları'wdı'n' tek $K\alpha_1$ qurawshi'si' g'ana paydalani'ladi'. Bul $K\alpha_1$ qurawshi'si'n spektrdin' basqa bo'limlerinen ayı'ri'p ali'w ushi'n rentgen trubkasi'nan keliwshi nurlar aldi'na S_1 san'lag'i'n qoyadi'. Bul san'laqtı'n' ken'ligin saylap alg'anda rentgen nurları'ni'n' da'stesinin' jayı'l'i'w mu'yeshi $K\alpha_1$ menen $K\alpha_2$ dubletleri arasi'ndag'i' qashi'qli'qtan kishi boli'wi' kerek. Fotoplenka aldi'ndag'i' S_2 san'lag'i' bolsa tek difrakciyag'a ushi'rag'an nurdi' g'an'an o'tkeredi ha'm plenkani' trubkadan tuwri' kelip tu'siwshi rentgen nuri'nan qorg'aydi'. Kristaldi'n' u'lken oblastı'nan topografiyali'q su'wret ali'w ushi'n u'lgi menen plenkag'a usi' plenkani'n' betine parallel bag'i'tta qaytalanbali'-ilgerilemeli qozg'ali's (skannerlew) beriledi. Usi'ni'n' saldarı'nan kristaldi'n' betinin' u'lken bo'liminin' yamasa bettin' barlı'q bo'liminin' u'zliksiz su'wreti ali'nadi'.



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

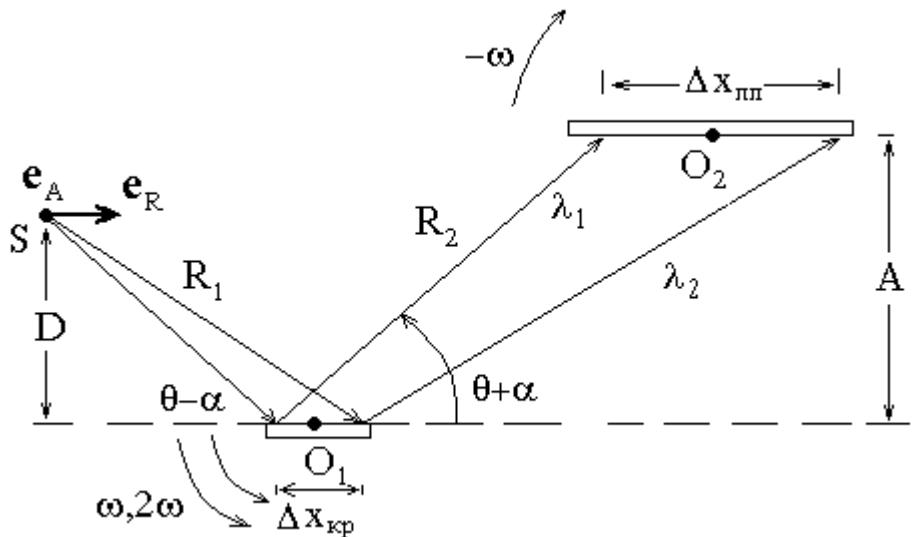
Ali'ng'an topogrammalarda u/lgidegi strukturalı'q defektlerdi (mi'sali' dislokaciyalardı') qorshap turg'an ortali'qtı'n' su'wreti joqarıraq intensivlikke iye ushastkalar tu'rinde qa'liplesedi. Dislokaciyalardag'i' kontrassti'n' payda boli'wi'ni'n' teoriyası' ko'p sanlı' ilimiyl jumi'slarda rawajlandı'ri'lg'an. Bul jumi'slarda dislokaciya si'zi'qları' a'tirapi'ndagi' kristaldi' mozaykali'q kristall si'patı'nda qaraydı'. Al mozaykali'q kristallarda bolsa rentgen nurları'ni'n' shashi'rawı'ni'n' kinematikali'q teoriyası' ori'nli' boladı' ha'm bunday u'lgilerde birinshi ekstinkciya baqlanbaydı'. Sonlı'qtan bunday ushastkalarda shashi'rag'an rentgen nurları' dislokaciyalar joq ori'nlardag'i' shashi'rag'an nurlarg'a salı'sti'rg'anda u'lkenirek intensivlikke iye boladı'. Sonlı'qtan difrakciyalı'q su'wrettegi bunday kontrasti' a'dette ekstinkciyalı'q kontrast dep atayıdı'.

Lang usi'li'nda ayı'ri'm dislokaciyalardı' baqlaw mu'mkin. Biraq bunday baqlawlar ju'rgiziletug'i'n kristalli'q denelerde dislokaciyalardı'n' $ti'g'i'zli'g'i' 10^6 \text{ sm}^{-2}$ shaması'nan u'lken bolmawi' kerek.

3-§. Mu'yeshlik skannerlew usi'li'

Noqatlı'q derekten shi'qqan polixromatik rentgen nurları' qollani'latug'i'n SHulc, Fudjivara ha'm monoxromat rentgen nurları' qolani'latug'i'n Lang usi'lları'ni'n' en' ko'zge tu'setug'i'n kemshiliklerinin' biri u'lken ekspoziciya waqi'ti' boli'p tabi'ladi'. Bul usi'llar menen bir topografiyalı'q su'wret onlag'an saat waqi't kerek boladı'.

Rentgentopografiyalı'q usi'llardi'n' ekspressligin (kishi waqi'tlar ishinde topografiyalı'q su'wretler ali'w) arttı'ri'w maqsetinde kristallardi'n' topografiyalı'q su'wretin ali'wdi' nurları'wdi'n' xarakteristikali'q spektrin qosı'msha tu'rde paydalani'w usi'ni'ldi'. Bunday usi'ldi'n' optikalı'q sxemasi' 5-su'wrette berilgen.



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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Rentgen trubkai'ni'n' anodi'ndag'i' kernewdin' maksimalli'q ma'nisi 45 kv shaması'na ten', al anaod tog'i'ni'n' maksimalli'q ma'nisi 450 mikroamper (μa). Paydalani'w quwatli'gi' 140 vt shaması'nan ko'p emes.

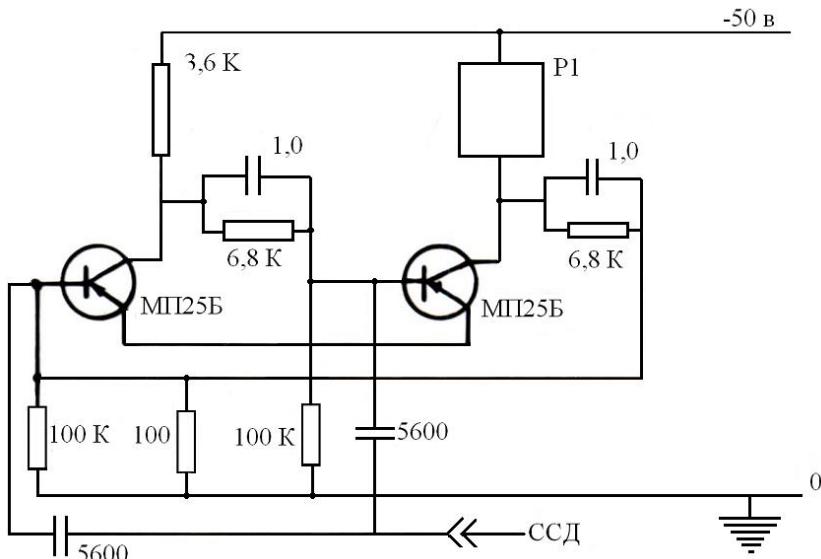
MARS-2 apparati' (oni' URS-0,1 dep te ataydi') rentgenostrukturalı'q analiz ushi'n arnalı'g'an boli'p, quwatli'g'i' 0,1 kvat, mikrofokuslu' rentgen trubkasi'na (BSV-7 tipindegi) iye. Oni'n' anodi'ni'n' o'lshemleri 0,1x0,1 mm. Maksimalli'q anod kernewi 50 kv, anod tog'i'ni'n' shaması' 4,5 ma g'a shekem.

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

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

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

si'yaqli' signal berildi. usi'ni'n' saldari'nan R₁ relesi iske tu'sirildi ha'm GUR-4 goniometrinin' aylandi'ri'wshi' magnit maydani'n'i'n' bag'i'ti' o'zgertildi. Usi'ni'n' na'tiyjesinde izertleniwshi kristalli'q u'lginin' ha'm fotoplenkani'n' aylani'w bag'i'ti' o'zgertildi.

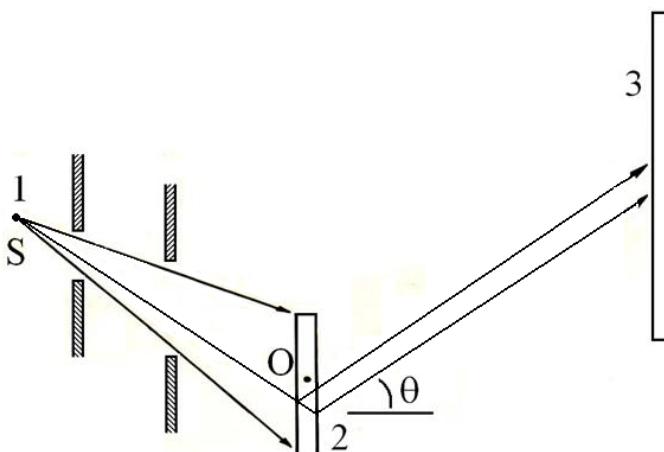


6-su'wret. GUR-4 rentgen goniometrine paydalani'lg'an ciklli'q mu'yeshlik skannerlewdi a'melge asi'ri'w ushi'n paydalani'lg'an elektrlik sxema. Blok 50 voltlik tuwri'lag'i'shtan elektr energiyasi' menen ta'miyinlendi.

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

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

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



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

1 – rentgen nurlari'ni'n' noqatli'q deregi, 2 – izertlenetug'i'n u'lgi, 3 – fotoplenka, 0 – u'lgi menen fotoplenkani'n' aylani'w ko'sheri, θ arqali' difrakciyali'q mu'yeshtin' ma'nisi belgilengen.

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

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

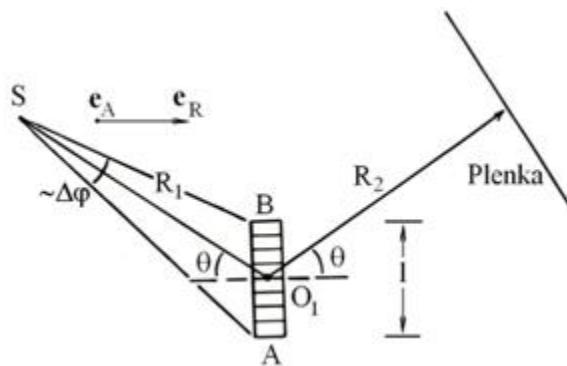
$\Delta\varphi$ mu'yeshinin' shamasi' u'lginin' o'lshemlerine ha'm rentgen nurlari' deregi menen izertlenetug'i'n u'lgi shekemgi arali'qqa baylani'sli'. – su'wrette ko'riniq turg'ani'nday, eger kristaldi'n' beti kelip tu'siwhi rentgen nurlari'ni'n' tarqali'w bag'i'ti'na perpendikulyar bolsa, onda $\Delta\varphi$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

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

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

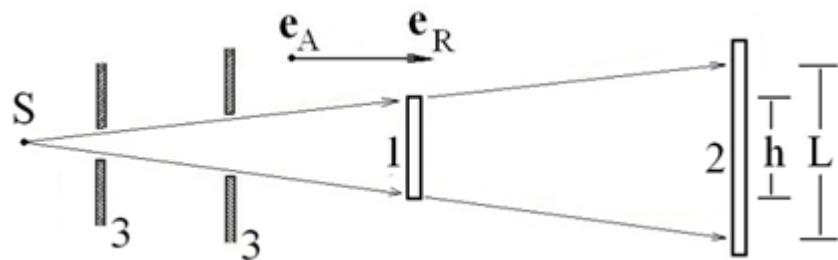
$$\Delta\varphi = \text{arc} \tg \frac{l \cos \theta}{2R_1}. \quad (2-2)$$

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



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

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



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

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

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

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

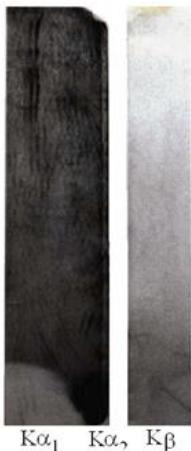
$$P_R = \left(\frac{R_2}{R_1} - 1 \right) \cos \theta \quad (2-4)$$

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

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

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

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



10-su'wret.

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

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

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

4.2. X-RAYS

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

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

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

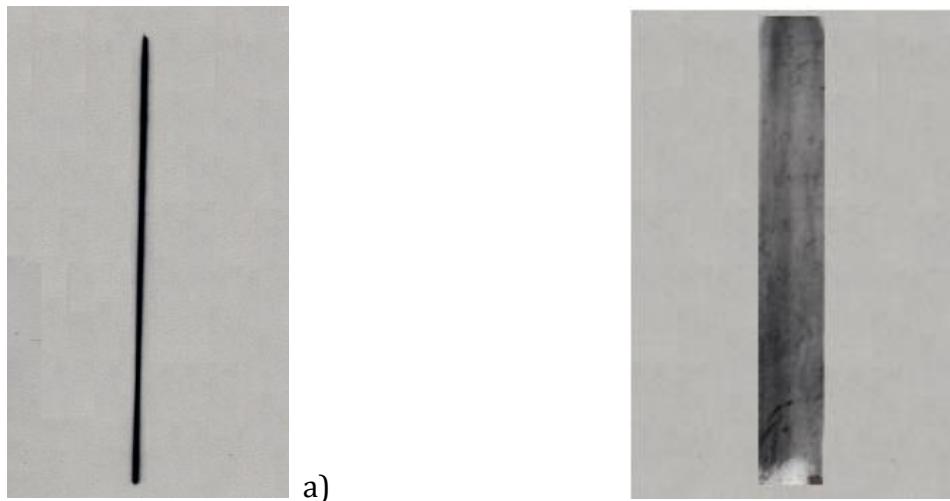
A'lvette $\lambda_{K\beta_1}$ din' qasi'nda $\lambda_{K\beta_2}$ spektralli'q si'zi'qli'n' bar ekenligi biz usi'ni'p ati'rg'an usi'ldi'n' a'hmiyetin to'menletedi.

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

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

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

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



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

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

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

Solay etip $\theta < 45^0$ bolg'an jag'daylarda azimutal bag'i'tta sozi'lg'an si'zi'qtı'n' boyi'nsha polixromat rentgen nurlari'ni'n' fokuslanı'wi' ori'n aladi' eken. Bul fokuslanı'wdi'n' sebebi paydalani'lg'an rentgen spektrinin' u'zliksizligi boli'p tabi'ladi'.

Monoxromat nurlani'wdi' paydalang'anda ha'm kristaldi' $\Delta\varphi$ mu'yeslik intervali'nda skannerlegenimizde kristaldi'n' ha'r qi'yli' noqatlari'nan shi'qqan barli'q difrakciyag'a ushi'rag'an nurlar polixromatik nurlani'w ushi'n fokusta jatatug'i'n bir si'zi'q arqali' o'tedi. Sonli'qtan $R_2 > R_1$ sha'rti ori'nlang'anda topogrammada kristaldi'n' 180⁰ qa aylandi'ri'lg'an su'wreti payda boladi' (yag'ni'y radial bag'i'ttag'i' on'i' menen shep ta'repi almasqan, basqa

so'z benen aytqanda 8- ha'm 9-su'wretlerdegi O noqati'ni'n' a'tirapi'nda 180 gradusqa buri'lg'an).

Bul jumi'sta Fudjivara usi'li'n menen o'tiwge tiykarlang'an mu'yeshlik skannerlew usi'li' menen sali'sti'ri'w boli'p tabi'ladi'. Usi' usi'llardi'n' o'zgesheliklerin ha'm arti'qmashli'g'i'n ani'qlaw ushi'n difrakciyalı'q eksperimentler seriyasi' o'tkerilip, olar to'mendegidey na'tiyjelerdi berdi:

1). Radial bag'i'tta kristalldi'n' o'lshemi menen oni'n' su'wretinin' o'lsheminin' birdey boli'wi' ushi'n kristall menen fotoplenkani'n' birdey mu'yeshlik tezlik penen skannerleniwi kerek. Bunday jag'dayda kristalli'q u'lgi ω mu'yeshlik tezligi menen, al fotoplenka bolsa sol bag'i'tta 2ω mu'yeshlik tezligi menen qozg'ali'wi' sha'rt. Fudjivara ha'm mu'yeshlik skannerlew usi'li' menen ali'ng'an topografiyalı'q su'wretlerdi bir biri menen sali'sti'ri'w kristall menen fotoplenka birgelikte qozg'alg'anda u'lgi menen topografiyalı'q su'wrettin' u'lkenlikleri radialli'q bag'i'tta bazi' bir shamag'a ayri'ladi' ($mi'sali' R_2 = 25$ sm bolg'anda mu'yeshlik skannerlew usi'li'nda P_R din' shaması' Fudjivara usi'li'ndag'i'g'a qarag'anda a'dewir u'lken). Geometriyali'q tallaw bunday ayi'rmani'n' paydjalani'lg'an rentgen nurlari'ni'n' qurami'na baylani'sli' ekenligin ko'rsetedi. Fudjivara usi'li'nda u'lginin' bir birine qarama-qarsi' shetlerinde (8-su'wrettegi A ha'm V noqatlari') difrakciyalı'q shag'i'li'si'w ha'r qi'yli' difrakciyalı'q mu'yeshler (Bregg mu'yeshleri menen) menen boladi'. Bul rentgen nurlari'ni'n' bir si'zi'qqa fokuslani'wi'n boldi'radi' ha'm si'zi'lmag'a parallel bolg'an bag'i'tta u'lgiden ali'natug'i'n su'wrettin' o'lshemlerin kishireytedi. Al mu'yeshlik skannerlew usi'li'nda bolsa kristalli'q u'lginin' barli'q noqatlari'nda difrakciyalı'q mu'yetin' ma'nisleri birdey boladi' ha'm usi'g'an sa'ykes u'lkeytiw koefficienti bul jag'dayda sali'sti'rmali' u'lken ma'niske iye boladi'.

2). 12-su'wrette Fudjivara usi'li' menen mu'yeshlik skannerlew usi'llari'ndag'i' kontrastli'qtı'n' ha'r qi'yli' bolatug'i'nli'g'i' ko'rsetilgen. 12-a ha'm 12- su'wretlerdi sali'sti'ri'w mu'yeshlik skannerlew usi'li'nda kristaldi'g'i' strukturalı'q defektlerdin' su'wretlerinin' u'lken kontrastqa iye bolatug'i'nli'g'i'n ani'q ko'rsetedi. Fudjivara usi'li' menen ali'ng'an topogrammada kontastli'q to'menlew (tap usi'nday jag'day SHulc usi'li' menen shashi'rawg'a tiykarlang'an mu'yeshlik skannerlew usi'li'n sali'sti'rg'anda da baqlang'an edi). Bul jag'day mu'yeshlik skannerlew usi'li'ni'n' (yag'ni'y monoxromat rentgen nurlari'n' qollani'wdi'n') Fudjivara usi'li'ni'n' aldi'ndag'i' arti'qmashli'gi'n' da'lilleydi. Turpayi'raq bahalawlar mu'yeshlik skannerlew usi'li'nda kontarstli'qtı'n' Fudjivara usi'li'ndagi'g'a qarag'anda 1,5 ese u'lken bolatug'i'nli'g'i'n ko'rsetedi.



a)



b)



c)



d)

12-su'wret. Bir kvarc kristalli'ni'n' o'tiwge tiykarlang'an mu'yeshlik skannerlew (a), Fudjivara (b), Lang (d) ha'm shashi'rawg'a tiykarlang'an mu'yeshlik skannerlew (c) usi'llari'ni'n' ja'rdeinde ali'ng'an su'wretleri (a, b, c topogrammalari' mi's anodi'ni'n' nurlani'wi'nda, d su'wrettegi topogramma molibden anodi'ni'n' nurlani'wi'nda ali'ndi').

3). 12-s su'wrette ko'rsetilgen topogramma shashi'rawg'a tiykarlang'an mu'yeshlik skannerlew usi'lli' boyi'nsha ali'ndi'. Su'wretlerdi sali'sti'ri'p ko'riw bizin' usi'ni'p ati'rg'an sxemami'z boyi'nsha topogrammalar tu'sirilgende sali'sti'rmali' bay informaciya ali'natug'i'nli'g'i'n ko'rsetedi.

4). 12-d su'wrette ali'ng'an rentgentopografiyalı'q su'wret Lang usi'lli' menen KRS kamerası'nda molibden anodi'ni'n' nurlani'wi'nda tu'sirildi. Topografiyalı'q su'wrette strukturalı'q defektlerdin' izleri (bir tekliktin' joqlı'g'i', si'zi'qlar ha'm basqalar) baqlanadi') ani'q ko'riniq tur. Bul jag'day Lang usi'lli'ni'n' aji'rata ali'wshi'li'q qa'biletliginin' mu'yeshlik skannerlew usi'lli'ni'n' aji'rata ali'w qa'biletliginen a'dewir joqarı' ekenligin ko'rsetedi.

5). Eksperimentler mu'yeshlik skannerlew usi'lli'nda ekspoziciya waqi'ti'ni'n' ~ 2-4 saatti' quraytug'i'nli'g'i'n ko'rsetti. Bul Fudjivara usi'lli'ndag'i'g'a sali'sti'rg' anda ekspoziciya waqi'ti'ni'n' shama menen 4 ese kem ekenligin ko'rsetedi (birdey rentgen nurları' deregın paydalang'anda). Rentgen nurları' deregının' (rentgen trubkasi'ni'n') birdey quwati'nda ha'm birdey bolg'an R_1 menen R_2 lerde kvarc kristalları'n su'wretke alg'anda ekspoziciya waqi'ti' ushi'n to'mendegidey na'tiyjeler ali'ndi':

	Usi'lli	Ekspoziciya waqi'ti'
1	Mu'yeshlik skannerlew usi'lli' (o'tiwhi tolqi'nlardag'i')	2,5 saat.
2	Fudjivara usi'lli'	10 saat.
3	Mu'yeshlik skannerlew usi'lli' (shashi'raw tolqi'nlari')	0,2 saat
4	Lang usi'lli'	15 saat.

Ali'ng'an su'wretlerde baqlang'an kontrastlı' si'zi'qlar, jolaqlar ha'm basqalar kristalli'q u'lgidigi joqarı' kernewli ushastkalarg'a sa'ykes keledi. Bul ushastkalar ekstinkciya effektinin' ha'lşirewin ta'miyinleydi ha'm bul kristaldi'n' shashi'rati'wshi'li'q qa'biletligin u'lkeytedi.

Ppolyarizaciyanbag'an rentgen nurları' ushi'n mozaykali' (ideal jetilispegen monokristall yamasa polikristall) kristallardag'i' integralli'q shag'i'li'sti'ri'w to'mendegidey formula boyi'nsha esaplanadi':

$$\rho_m = \frac{N^2 \lambda^3}{2\mu} |F|^2 \left(\frac{e^2}{m c^2} \right)^2 \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2 \sin 2\theta}. \quad (2-6)$$

Ideal jetilisken kristallar ushi'n (2-6) ni'n' orni'na

$$\rho_i = \frac{8}{3\pi} N|F| \lambda^2 \frac{e^2}{m c^2} \frac{1 + \cos 2\theta}{2 \sin 2\theta} \quad (2-7)$$

formulası'na iye bolami'z. Bul an'latpalarda N arqali' kristaldi'n' ko'leminin' birligindegi elementar qutı'shalar sani', F arqali' sol elementar qutı'shalardi'n' shashi'rati'w faktori' (strukturalı'q faktor). θ arqali' difrakciyalı'q mu'yesh, μ arqali' si'zi'qli' ha'lşirew koefficienti, $\frac{e^2}{m c^2} = 2,818 \cdot 10^{-13}$ arqali' elektronni'n' klasskali'q radiusi' belgilengen. (2-6) menen (2-7) ni salı'sti'ri'p mi'naday sanlı'q mag'li'wmatlardı' alami'z:

$$\frac{\rho_m}{\rho_i} = \frac{\frac{N^2 \lambda^3}{2\mu} |F|^2 \left(\frac{e^2}{m c^2}\right)^2 \frac{1+\cos^2 2\theta}{2 \sin 2\theta}}{\frac{8}{3\pi} N|F| \lambda^2 \frac{e^2}{m c^2} \frac{1+\cos 2\theta}{2 \sin 2\theta}}.$$

Bul qatnasqa kvarc (SiO_2) ushi'n sa'ykes ma'nislerdi qoysaq (yag'ni'y $F \approx 50$, $N \approx 10^{21} \text{ sm}^{-3}$, $\lambda = 1,5418 \cdot 10^{-8} \text{ sm}$, $\mu = 200 \text{ sm}^{-1}$), onda

$$\frac{\rho_m}{\rho_i} = \frac{\frac{N^2 \lambda^3}{2\mu} |F|^2 \left(\frac{e^2}{m c^2}\right)^2 \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2 \sin 2\theta}}{\frac{8}{3\pi} N|F| \lambda^2 \frac{e^2}{m c^2} \frac{1 + \cos 2\theta}{2 \sin 2\theta}} = 10 \quad (2-9)$$

shamasi'n alami'z. Demek mozaykali' kvarc kristallari' quri'li'si' ideal jetilsken kvarcqa salı'sti'rganda rentgen nurları'n shama menen 10 ese ku'shlirek shashi'ratadi' eken. Bizin' jag'dayı'mi'zda izertlenligen kristallardi'n' ha'r qi'yli' ushastkalari'nda difrakciyalang'an rentgen nurları'ni'n' intensivligi bir birinen 2-3 ese pari'q qi'ladi'. Bul jag'day ali'ng'na eksperimentalli'q mag'li'wmatlardı'n' esaplawlardı'n' na'tiyjelerine qayshi' kelmeytug'i'nli'g'i'n ko'rsetedi.

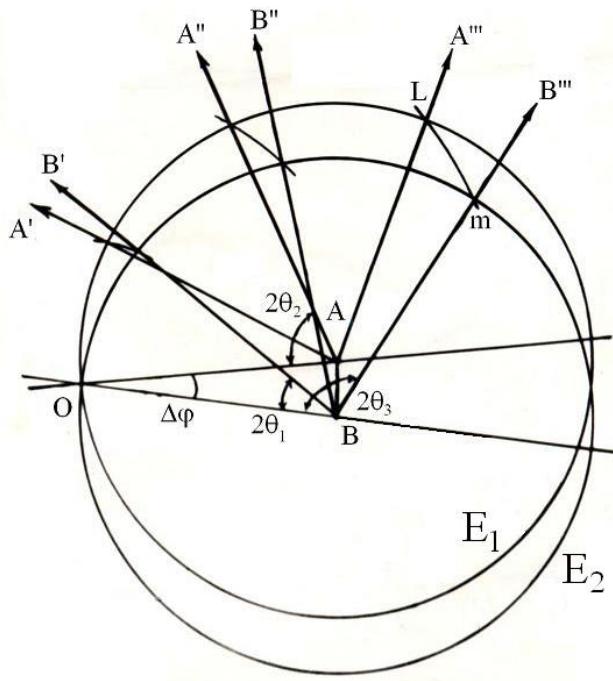
Biz rentgenografiyalı'q su'wrettin' sapasi'ni'n' paydalani/lg'an rentgen nuri'ni'n' uzi'nli'gi'na baylani'sli' ekenligin atap o'temiz. Basqa so'z benen aytqanda si'zi'qli' juti'li'w koefficienti μ tolqi'n uzi'nli'g'i' λ nin' funkciyasi' boli'p tabi'ladi'. Sonli'qtan bul ma'seleni ayqi'n tu'rde sheshiw maqsetinde ha'r ki'yli' tolqi'n uzi'nli'qlari'nda eksperimentler o'tkeriw za'ru'rliyi' payda boladi'. Biraq texnikali'q qi'yı'nshi'li'qlarg'a baylani'sli' bunday eksperimentler islenbedi.

7-§. Difrakciyalı'q sxemani'n' keri ken'islikte interpretaciysi'

Qa'legen dirfakciyalı'q eksperimentti (optikali'q rentgenografiyalı'q, elektronli'q mikroskopiyali'q, neytronografiyalı'w, atomli'q yamasa ionli'q ha'm basqlar) keri ken'islikte interpretaciyalaw bul eksperimenttin' korgizbeliligin joqari'latadi' ha'm oni'n' tiykarg'i' fizikalı'q ma'nisin teren' tu'siniwge mu'mkinshilik beredi.

13-su'wrette mu'yeshlik skannerlew topogrammalari'ni'n' keri ken'islikte payda etiliwinin' sxemasi' ko'rsetilgen. E₁ menen E₂ ler Evald sferasi'ni'n' eki awhali'na sa'ykes keledi.

Tallawlari'mi'zdi'n' a'piwayi' boli'wi' ushi'n Evald sferasi'n O ko'sheri do'gereginde bazi' bir $\Delta\varphi$ mu'yeshlik intervali'nda qozg'alatug'i'n, skannerlenetug'i'n dep esaplaymi'z. Evald sferasi'ni'n' radiusi' $\frac{1}{\lambda}$ ge ten' boli'p, λ arqali' xarakteristikali'q nurlani'wdi'n' birinin' tolqi'n uzi'nli'g'i' belgilengen.



A ha'm V noqatlari'na kristalli'q u'lginin' shetki noqatlari' sa'ykes keledi. OA menen OV si'zi'qlari' arqali' A ha'm V noqatlari'na kelip tu'setug'i'n rentgen nurlari' belgilengen. AA', BB', AA'', BB'' ha'm basqalar difrakciyag'a ushi'rag'an nurlarg'a sa'ykes keledi.

$\theta > 45^\circ$ mu'yeslerde rentgen su'wretinin' fokuslani'wi'ni'n' ori'n almaytug'i'nli'g'i' ko'rinipli tur. Fokuslani'w $\theta < \theta_\phi$ mu'yeslerinde ori'n ali'p, bunday jag'dayda BB' nuri' A noqati' arqali' o'tedi. Sonli'qtan $\theta_\phi = 45^\circ - \Delta\varphi$. Joqari'da aytili'p o'tilgenindey $\Delta\varphi$ mu'yesinin' shamasi' kristalli'q u'lginin' radial bag'i'ttag'i' o'lshemlerinen g'a'rezli [(2-2)-formula].

Usi'ldi'n' radial bag'i'ttag'i' aji'rata ali'w koefficienti P_R din' AA' ha'm BB' nurlari' arasi'ndagi' mu'yes $\Delta\varphi$ ha'm difrakciyali'q mu'yes θ arqali' ari'qlanatug'i'nli'g'i'n joqari'da aytili'p o'tken edik. usi'g'an baylani'sli' P_R koefficientinin' $\Delta\varphi$ ha'm θ shamalari'nan g'a'rezligin ani'qlaymi'z. R_2 arkali' buri'ng'i'day u'lgi menen fotoplenka arasi'ndagi' qashi'qli'qtı' belgileymiz (5-su'wretke qaran'i'z).

14-su'wrette $\theta = 0$ bolg'anda fokusli'q kashi'qli'qtı'n' Evald sferasi'ni'n' radiusi'na ten' bolatug'i'nli'gi' ko'rinipli tur. $\theta = 90^\circ - \Delta\varphi$ sha'rti ori'nlang'anda fokus kristaldi'n' beti tegisliginde jaylasadi'. Sonli'qtan $\theta = 0$ ha'm $R_2 = 2R_1$ sha'rtleri ori'nlang'anda $P_R = 0$. Al $\theta = 90^\circ$ ha'm $R_2 = R_1$ sha'rti ori'nlang'anda $P_R = 2$. Uli'wma jag'dayda, $\theta = 0$ ha'm $R_2 > R_1$ ori'nlang'an jag'dayda mi'naday ten'liklerden paydalanami'z:

$$L = 2(R_2 - R_1) \tan \Delta\varphi, \quad (2-9)$$

$$l = \frac{2R_1 \tan \Delta\varphi}{\cos \theta}. \quad (2-10)$$

Sonli'qtan

$$P_R = \frac{L}{l} = \left(\frac{L = 2(R_2 - R_1) \tan \Delta\varphi}{\frac{2R_1 \tan \Delta\varphi}{\cos \theta}} \right) = \left(\frac{R_2}{R_1} - 1 \right) \cos \theta = \frac{R_2}{R_1} - 1. \quad (2-11)$$

Bunnan $R_2 = 2R_1$ sha'rti ori'nlang'anda haqi'yqati'nda da $P_R = 1$ ten'liginin' ori'nlanatug'i'nli'g'i'na isenemiz.

$\theta = 90^\circ$ bolg'an jag'dayda

13-su'wret.

Mu'yeslik skannerlew usi'li'n keri ken'islikte interpretaciyalaw. O arqali' koordinata basi', A ha'm V arqali' E1 ha'm E2 Evald sferalari'ni'n' oraylari', $\theta_1, \theta_2, \theta_3$ arqali' difrakciyali'q mu'yesler belgilengen. Keri pa'njererin' tu'yinleri mL tipindegi si'zi'qlar boylap sozi'lg'an.

$$\frac{l}{R_1} = \frac{L}{R_1 + R_2}. \quad (2-12)$$

Demek

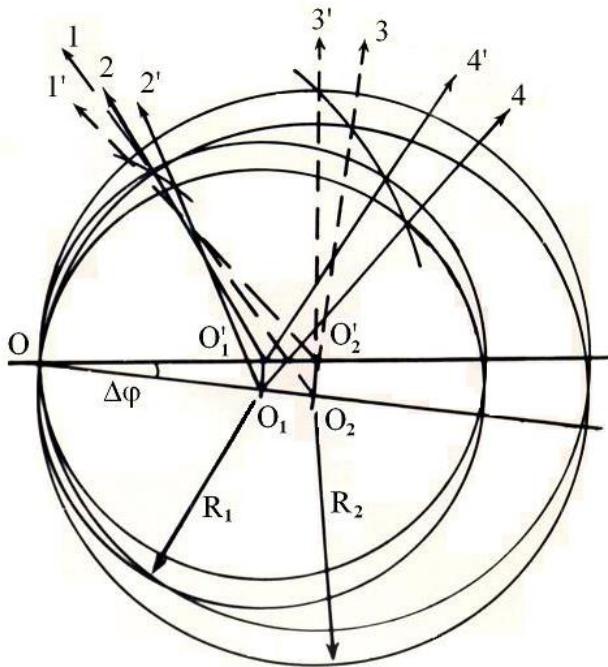
$$P_R = \frac{L}{l} = \left(\frac{R_1}{R_2} + 1 \right) \cos \theta = 0. \quad (2-13)$$

Bul jag'day mi'nani' an'g'artadi': $\theta = 90^\circ$ bolg'anda u'lgi tegisligi rentgen trubkasi'ni'n' fokusi'na karap turadi' ha'm su'wrettin' o'lshemleri usi'ldi'n' geometriyali'q o'zgesheliklerinen emes, al kristaldi'n' qali'n'li'g'i'nan g'ana g'a'rezli boladi' (bunday jag'dayda difrakciyalı'q su'wret ali'nbaydi' degen so'z).

Solay etip P_R shaması' difrakciyalı'q mu'yeshtin' 0° tan 90° qa shekemgi intervalı'nda $\frac{R_2}{R_1} - 1$ den 0 ge shekem o'zgeredi eken. Sonli'qtan uli'wma jag'day ushi'n

$$P_R == \left(\frac{R_2}{R_1} - 1 \right) \cos \theta \quad (2-14)$$

formulasi'nan paydalanimi'z. Bul formulani'n' o'tken paragrafta keltirilip shi'g'ari'lg'anli'g'i'n eske tu'siremiz. Endi xarakteristikali'q rentgen nurlari'ni'n' dubletlerinin' ta'sirin qarap shi'g'ami'z. Buni'n' ushi'n $K\alpha_1$ ha'm $K\alpha_2$ spektrallı'q si'zi'qları' ushi'n Evald sferalari'n qarap o'temiz.



14-su'wret.

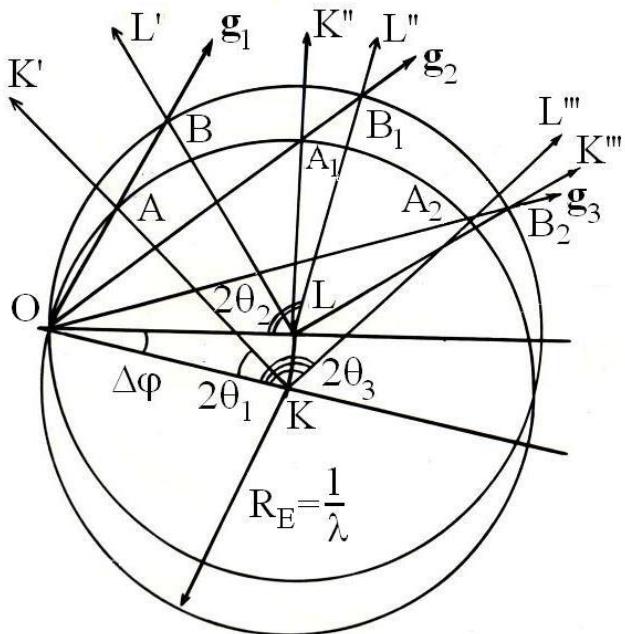
Mu'yeshlik skannerlew usi'li'nda rentgen nurlari'ni'n' xarakteristikali'q nurlani'wi'ni'n' su'wrettin' payda boli'wi'na ta'sirin tu'sindiriw ushi'n arnalg'an su'wret.
 $R_1 = \frac{1}{\lambda_1}$, $R_2 = \frac{1}{\lambda_2}$. O₁ menen O₂ noqatlari' Evald sferalari'ni'n' orayi'na sa'ykes keledi.

14-su'wrette R_1 menen R_2 arqali' rentgen nurlari'ni'n' spektrinin' $K\alpha_1$ ha'm $K\alpha_2$ spektrallı'q si'zi'qları'na sa'ykes keliwshi Evald sferalari'ni'n' radiuslari' belgilengen. Ha'r bir xarakteristikali'q nurlani'w ushi'n o'z aldi'na su'wrettin' sa'ykes keletug'i'nli'g'i' ko'rinp tur. Bul su'wretler O₁₁ ha'm O_{11'}, O₁₂ ha'm O_{12'} tipindegi si'zi'qlar menen sheklengen.

Joqari'da keltirilgen sxemalar tiykari'nda Fudjivara usi'li'n keri ken'islikte interpretaciyalaw (tu'sindiriw) mu'mkinshiligine iyemiz. Ilimiy a'debiyatlardi' u'yreniw bunday intepretaciyalawdi'n' izertlewshilerdin' di'qqati'nan shette qalg'anli'g'i'n ko'rsetedi.

Bul jag'dayda polixromat nurlardi'n' paydalni'wi'ni'n' sebebinen radiusi' u'zliksiz tu'rde o'zgeretug'i'n Evald sferalari'n qolani'wi'mi'z kerek dep boljawi'mi'z mu'mkin. Biraq

usi'ndayc jollar menen geometriyali'q tallaw u'lken ki'yi'nshi'li'qlardi' payda etedi. Usi'g'an baylani'sli' bir Evald sferasi' menen u'zliksiz spektrge sa'ykes keliwshi keri pa'njerenin' sozi'lg'an radius-vektorlari'n paydalanami'z.



15-su'wret.
Keri ken'islikte Fudjivara usi'li'n
sa'wlelendiriliw.
 $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2$ ha'm \mathbf{g}_3 belgileri arqali'
keri pa'njerenin' radius-vektorlari'
belgilengen.

Usi'ni'li'p ati'rg'an sxema 15-su'wrette berilgen. Bul su'wrette $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2$ ha'm \mathbf{g}_3 ler keri pa'njerenin' u'sh radius-vektori'na sa'ykes keledi. AV_1, A_1V_1 ha'm A_2V_2 belgileri menen sheklengen vektordi'n' kesindileri ushi'n difrakciya sha'rti ori'nlanadi'. Noqatti'n' su'wreti KK' , KK'' ha'm KK''' nurlari' tu'repinen payda etiledi, al L noqati'nan bolsa LL' , LL'' , LL''' nurlari' difrakciyag'a ushi'raydi'. Sonli'qtan biz mi'naday juwmaq shi'g'arami'z: biz qarap ati'rg'an jag'dayda da, u'lginin' betindegi rentgen nurlari'ni'n' shashi'rawi'n paydalanatug'i'n mu'yeshlik skannerlew usi'li'nda da fotolenkani'n' (topogrammani'n') betindegi difrakciyali'q su'wret boyi'nsha tolqi'n uzi'nli'g'i' turaqli' qalatug'i'n si'zi'qlardi'n' kesindilerinen payda boladi'. Bunday si'zi'qlardi'n' ten'lemesi ken'nen tarqali'wshi' da'ste usi'li' ushi'n keltirilip shi'g'ari'lg'an edi. Usi'nnan biz ta'repinen usi'ni'li'p ati'rg'an mu'yeshlik skannerlew usi'li'n da, Fudjivara usi'li'n da ko'p sanli' jumi'slarda keltirilgen tallaw tiykari'nda toli'q tu'sindiriw mu'mkin dep juwmaq shi'g'arami'z. Biz bunday tallawdi' o'tkermeymiz, sebebi bunday fizikali'q tallaw pitkeriw qa'nigelik jumi'si'ni'n' sheklerinen shi'g'i'p ketedi.

8-§. Mu'yeshlik skannelew usi'li'n kristallografiyali'q difrakciyali'q eksperimentte qollani'w

Joqari'da keltirilgen paragraflarda bir neshe ret usi'ni'li'p ati'rg'an mu'yeshlik skannerlew usi'li'ni'n' o'zgeshelikleri atap o'tildi. Biraq oni'n' mu'mkinshiliklerine duri's tu'rde baha beriw ushi'n oni'n' na'tiyjelerin basqa da usi'llar menen ali'ng'an na'tiyjeler menen sali'sti'ri'p ko'riw za'ru'r boladi'. Bunday sali'sti'rwdi' biz to'mendegidey tu'rde keltiremiz:

Lang usi'li'.

Kristalli'q u'lginin' qozg'ali'wi': ilgerilemeli, qozg'ali'w joli'ni'n' uzi'nli'g'i' sol bag'i'ttag'i' kristalli'q u'lginin' uzi'nli'g'i'nday.

Fotoplenkani'n' qozg'ali'wi': kristalli'q u'lgi menen birlikte ilgerilemeli.

Rentntgen nurlari'ni'n' tutas spektrin qollani'w effektleri: qollani'lmaydi', tutas spektr unamsi'z na'tiyjelerdi beredi.

Kristalli'q u'lginin' qali'n'li'g'i': $\mu t \leq 1$.

R_1 menen R_2 nin' shamalari'na qoyi'latug'i'n talap: $R_2 < R_1$.

Kristalli'q u'lginin' goniometrde ornatil'i'wi'na qoyi'latug'i'n talap: og'ada qatan'.

Fudjivarap usi'li'.

Kristalli'q u'lginin' qozg'ali'wi': qozg'almaydi'.

Fotoplenkani'n' qozg'ali'wi': qozg'almaydi'.

Rentntgen nurlari'ni'n' tutas spektrin qollani'w effektleri: rentgen nuri'ni'n' tutas spektri qollani'ladi'.

Kristalli'q u'lginin' qali'n'li'g'i': $\mu t \leq 1$.

R_1 menen R_2 nin' shamalari'na qoyi'latug'i'n talap: $R_2 > R_1$

Kristalli'q u'lginin' goniometrde ornatil'i'wi'na qoyi'latug'i'n talap: talap qoyi'lmaydi'.

SHashi'rawg'a tiykarlang'an mu'yeshlik skannerlew usi'li'.

Kristalli'q u'lginin' qozg'ali'wi': rentgen goniometrinin' ko'sherine ornatil'lg'an kristalli'q u'gli ω mu'yeshlik tezligi menen qozg'aladi' (mu'yeshlik skannerlenedi).

Fotoplenkani'n' qozg'ali'wi': rentgen goniometrindegi difrakciyag'a ushi'rag'an rentgen tolqi'nları'n registraciyalawshi' esaplag'i'shti'n' orni'na ortani'ti'ladi' ha'm goniometr ko'sherinin' do'gereginde 2ω mu'yeshlik tezliginde fotoplenka menen bir bag'i'tta qozg'aladi'.

Rentntgen nurlari'ni'n' tutas spektrin qollani'w effektleri: tutas spektr de su'wrettin' payda boli'wi'na qatnasadi'.

Kristalli'q u'lginin' qali'n'li'g'i': qa'legen qali'n'li'qtag'i' u'lgiler paydalani'ladi', sebebi bul usi'lda topografiyalı'q su'wretti payda etiwge kristaldi'n' betinde shashi'rag'an rentgen nurlari' qatnasadi'.

R_1 menen R_2 nin' shamalari'na qoyi'latug'i'n talap: talap qoyi'lmaydi'.

Kristalli'q u'lginin' goniometrde ornatil'i'wi'na qoyi'latug'i'n talap: qatan' emes.

O'tiwge tiykarlang'an mu'yeshlik skannerlew usi'li'.

Kristalli'q u'lginin' qozg'ali'wi': aylanbali' qozg'ali's jasaydi'.

Fotoplenkani'n' qozg'ali'wi': talap qoyi'lmaydi'.

Rentntgen nurlari'ni'n' tutas spektrin qollani'w effektleri: tutas spektr unamsi'z ta'sirin jasaydi'.

Kristalli'q u'lginin' qali'n'li'g'i': $\mu t \leq 1$.

R_1 menen R_2 nin' shamalari'na qoyi'latug'i'n talap: $R_2 > R_1$.

Kristalli'q u'lginin' goniometrde ornatil'i'wi'na qoyi'latug'i'n talap: qatan' emes.

16-su'wrette mu'yeshlik skannerlew usi'li'n ayqi'n izertlewlerde, atap aytqanda mezastrukturag'a iye kvarc kristallari'ni'n' haqi'yqi'y strukturasi'n izertlew bari'si'nda ha'm bul usi'lda ali'ng'an na'tiyjelerdi basqa usi'llarda ali'ng'an eksperimentalli'q su'wretler menen sali'sti'ri'w maqsetinde o'tkerilgen eksperimentlerdin' bergen na'tiyjeleri keltirilgen.



a)



b)



c)

16-su'wret.

- Mezastrukturag'a iye kvarc kristallari'ni'n' topogrammalari'ni'n' su'wretleri.
- o'tiwge tiykarlang'an mu'yeshlik skannerlew usi'li'nda ali'ng'an,
 - shag'i'li'si'wg'a tiykarlang'an mu'yeshlik skannerlew usi'li'nda ali'ng'an,
 - Lang usi'li'nda tu'sirilgen.

II bo'lim. Studentlerdin' o'z betinshe u'yreniwi ushi'n arnalg'an oqi'w materiallari'

I bap. Rentgen nurlari'ni'n' kristalli'q zatlardag'i' shashi'rawi'

1-§. Elektronlardag'i' rentgen nurlari'ni'n' shashi'rawi'

Kogerent shashi'raw. Rentgen nuri'ni'n' tarqalatug'i'n bag'i'tta jaylasqan zatti'n' atomlari' menen ta'sirlesiw processinin' ju'da' quramali' ekenligin an'sat ko'riwge boladi'. Ta'sirlesiwdin' barli'q ni'zamli'qlari'n ha'rtarepleme u'yreniw ushi'n mikrodu'nyani'n' quri'li'si' menen processlerinin' ha'zirgi zaman kvant mexanikasi'n paydalani'w kerek boladi'. Biraq difrakciyalı'q effekttin' tiykari'nda jati'wshi' rentgen nurlari'ni'n' kogerent shashi'rawi' processin (bunday processte rentgen nurlari'ni'n' tolqi'n uzi'nli'qlari' o'zgermeydi) klassikali'q elektrodinamikali'q teoriya tiykari'nda da tu'sindiriw mu'mkin.

Klassikali'q elektrodinamika ko'z-karaslari'nda elektromagnit tolqi'nлари'ni'n' kogerentli shashi'rawi'n qos process tu'rinde sa'wlelendiriw mu'mkin: o'zgermeli elektromagnit maydani'ni'n' ta'sirinde zaryadlang'an bo'leksheler terbelmeli qozg'ali's jasay baslaydi'; al terbelmeli qozg'ali'stag'i' zaryadlang'an bo'leksheler bolsazari'dti'n' do'gereginde barli'q bag'i'tlarda tarqalatug'i'n elektromagnit tolqi'nлари'n nurlandi'radi'. Solay etip birinshi akt kelip tu'siwhi elektromagnit maydani'ni'n' energiyasi'ni'n' zaryadlang'an bo'lekshenin' kinetikali'q energiyasi'na aylani'wdan, al ekinshi akt maxinkali'q energiyani'n' elektromagnit maydani'ni'n' aylani'wi'nan turadi'

Kelip tu'siwhi tolqi'nni'n' ta'sirindegi zaryadlang'an bo'lekshenin' qozg'ali'si' mexanikani'n' to'mendegidey ten'lemesine bag'i'nadi':

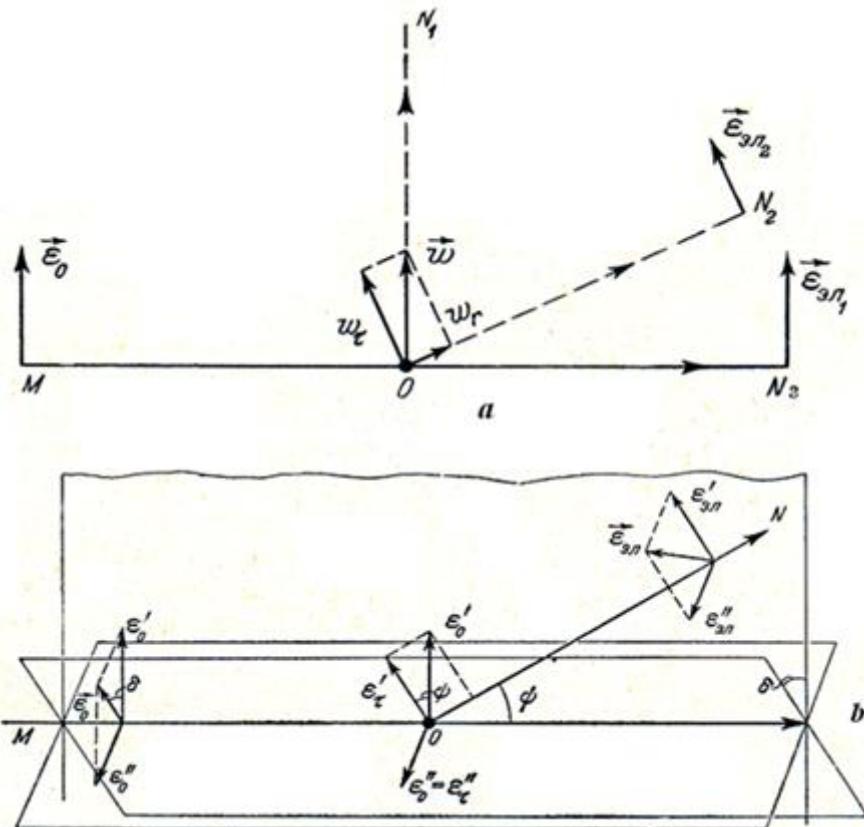
$$ma = e\varepsilon. \quad (1)$$

Bul ten'lemede m arqali' zaryadlang'an bo'lekshenin' massasi', \mathbf{a} arqali' oni'n' alatug'i'n tezleniwi, e arqali' oni'n' zaryadi', al ε arqali' elektr maydani'ni'n' kernewligi belgilengen.

Terbele baslag'an zaryadlang'an bo'lekshe o'zinen elektromagnit tolqi'nлари'n nurlandi'ra baslaydi'. Usi' zaryadtan R qashi'qli'g'i'nda turg'an noqattag'i' elektr maydani'ni'n' kernewligi to'mendegidey elektrodinamika ten'lemesi ja'rdeminde ani'qlanadi':

$$|\varepsilon_{el}| = \frac{e}{c^2} \frac{\omega_\tau}{R}. \quad (2)$$

Bul ten'lemede c arqali' jaqtı'li'qtı'n' vakuumdegi tezligi, ω_τ arqali' tezleniwdin' tangensiali'q qurawshi'si' belgilengen.



2-su'wret. Kelip tu'siwshi tolqi'nni'n' polyarizaciysi'nan shashi'rag'an tolqi'nni'n' g'a'rezligi.

(2)-an'latpani'n' ma'nisi 2-a su'wrette tu'sindiriledi. O noqati'nda zaryadlang'an bo'lekshe ornalasqan.warqali' oni'n' tezleniw vektori' belgilengen. N_1, N_2 ha'm N_3 ler bolsa ha'r qi'yli' baqlaw noqatlari'. Bo'lekshe ta'repinen shashi'rag'an elektromagnit tolqi'nni'n' maydan kernewligi baqlaw noqati' bag'i'ti'ndag'i' bo'lekshenin' awi'si'wi'nan g'a'rezli emes. Kernewlik bo'lekshenin' ko'ldenen' bag'i'ttag'i' awi'si'wi'ni'n' shaması' menen ani'qlanadi'. Sonli'qtan N_1 baqlaw noqati'na karay shashi'rag'an tolqi'n tarqalmaydi'. Al N_3 noqati'nda bolsa shashi'rag'an tolqi'nni'n' maydani'ni'n' kernewligi maksimal ma'niske jetedi ha'm $\frac{e}{c^2} \frac{\omega_\tau}{R}$ shaması'na ten' boladi'.

ON_2 bag'i'ti'nda tarqalatug'i'n tolqi'nni'n' maydani'ni'n' kernewligin tabi'w ushi'n aterzleniw radialli'q a_r ha'm tangensiali'q a_τ qurawshi'larg'a jiklew kerek. Olardi'n' birinshisi ON_2 bag'i'ti'nda tarqalatug'i'n shashi'rag'an tolqi'ndi' payda etpeydi. Ekinshisi bolsa zaryadtı'n' ko'ldenen' bag'i'ttag'i' awi'si'wi'n ta'miyinleydi ha'm sonli'qtan maydanni'n' kernewligin ani'qlaydi'. Solay etip elektron ta'repinen shashi'rati'lg'an tolqi'nni'n' kernewligi uli'wma jag'dayda (2)-an'latpani'n' ja'rdeminde ani'qlanadi'. Tek g'ana kelip tu'siwshi tolqi'nni'n' kernewligi ε_0 menen shashi'rag'an tolqi'nni'n' kernewligi ε_{el} arasi'ndag'i' baylani'sti' tabi'w ushi'n (1)- ha'm (2)-ten'lemelerdi sali'sti'ri'w kerek. Na'tiyjede

$$|\varepsilon_{el}| = \frac{e^2}{mc^2} \frac{\omega_\tau}{R} \quad (3)$$

an'latpasi'na iye bolami'z.

Endi polyarizaciyalang'an ha'm polyarizaciyalanbag'an (ta'biyyiy) nurlar ushi'n sa'ykes formulalardi' ali'wi'mi'z kerek.

1-b su'wrettegi ε^0 ha'm ε_0'' vektorlari'na sa'ykes keliwshi eki dara jag'daydi' qaraymi'z. Da'slep tu'siwshi tolqi'nni'n' elektr maydani'ni'n' kernewligi vektori' bolg'an ε_0' vektori' *ON* si'zi'g'i' (elektronnan baqlaw noqati'na qaray) jatqan tegislikte jatadi' dep esaplaymi'z. $\varepsilon_\tau' = \varepsilon_0' \cos \psi$ ekenlige an'sat iseniwge boladi'. Bul an'latpada ψ arqali' kelip tu'siwshi tolqi'nni'n' ha'm shashi'rag'an tolqi'nni'n' bag'i'tlari' arasi'ndag'i' mu'yesh belgilengen. Sonli'qtan

$$\varepsilon_{el}' = \frac{e^2}{mc^2} \frac{\varepsilon_0'}{R} \cos \psi.$$

Ekinshi jag'dayda kelip tu'siwshi tolqi'nni'n' kernewlik vektori' ε_0'' «tu'siw-shashi'raw» tegisligine perpendikulyar. Endi $\varepsilon_\tau = \varepsilon_0''$ ha'm usi'g'an sa'ykes

$$\varepsilon_{el}'' = \frac{e^2}{mc^2} \frac{\varepsilon_0''}{R}.$$

Uli'wma jag'dayda ε_0 vektori' menen *MON* tegisligi arasi'nda bazi' bir δ su'yir mu'yeshi boladi'. 2-b su'wrette «tu'siw-shashi'raw» tegisligi si'zi'lma tegisligi boli'p tabi'ladi' (*MO* ha'm *ON* tuwri'lari') Al ε_0 vektori' ha'm *MO* tuwri'lari' arqali' o'tiwshi tegislik penen birinshi tegislik arasi'ndag'i' mu'yesh δ shamasi'na ten' boladi'.

Vektorlardi' qurawshi'lardan jiklewdin' a'piwayi' procedurasi', sol qurawshi'lardi'n' ha'r biri menen basqalari'nan g'a'rezsiz bolg'an matematikali'q operaciyalardi' islew ha'm qurawshi'lardi' bir biri menen biriktiriw bizge

$$\begin{aligned} \varepsilon' &= \varepsilon_0 \cos \delta, \quad \varepsilon'' = \varepsilon_0 \sin \delta, \\ \varepsilon_{el}' &= \frac{e^2}{mc^2} \frac{\varepsilon_0}{R} \cos \delta \cos \psi, \quad \varepsilon_{el}'' = \frac{e^2}{mc^2} \frac{\varepsilon_0}{R} \sin \delta \end{aligned}$$

an'latpalari'n beredi. En' aqi'ri'nda

$$\varepsilon_{el} = \sqrt{(\varepsilon_{el}')^2 + (\varepsilon_{el}'')^2} = \frac{e^2}{mc^2} \frac{\varepsilon_0}{R} \sqrt{\cos^2 \delta \cos^2 \psi + \cos^2 \delta}$$

formulasina iye bolami'z.

Sa'ykes an'latpani'n' shashi'rag'i'n ha'm kelip tu'sken tolqi'nlardi'n' kernewliklerinin' amplitudali'q ma'nisleri bolg'an E_{el} ha'm E_0 shamalari'nda bir biri menen baylani'sti'ra aladi'. Waqi't boyi'nsha ortashalasti'ri'lg'an intensivliktin' ma'nisi

$$I = \frac{c}{8\pi} E_o^2$$

formulasina menen beriledi. Demek

$$I_{el} = \frac{c}{8\pi} \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{E_0^2}{R^2} (\cos^2 \delta \cos^2 \psi + \cos^2 \delta)$$

yamasa

$$I_{el} = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{I_0}{R^2} (\cos^2 \delta \cos^2 \psi + \cos^2 \delta)$$

formulalari'na iye bolami'z. Bul jerde I_0 arqali' kelip tu'siwshi tolqi'nni'n' intensivligi, al I_{el} arqali' berilgen bag'i'tta shashi'rag'an tolki'nardi'n' intensivlikleri. Biraq bul formulani'n' si'zi'qli' polyarizaciyalang'an tolqi'nlar ushi'n duri's ekenligin an'g'ari'wi'mi'z sha'rt (yag'ni'y ε_0 vektori' o'zinin' bag'i'ti'n saqlaydi'). Al rentgen trubkasi'nan shi'qqan rentgen tolqi'nları' polyarizaciyalanbag'an ha'm sonli'qtan δ mu'yeshi qa'legen ma'nisti qabi'l ete aladi'. Sonli'qtan waqi't boyi'nsha ortasha bolg'an intensivlikti esaplawi'mi'z kerek boladi'. Intensivliktin' bunday ma'nisi ushi'n

$$I_{el} = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{I_0}{R^2} \frac{1 + \cos^2\psi}{2} \quad (4)$$

formulası'n an'sat tu'rde alami'z.

Demek berilgen bag'i'tta shashi'rag'an tolqi'nni'n' intensivligi kelip tu'siwshi tolki'nni'n' intensivligine tuwri' proporsional, al shashi'rati'wshi' noqattan baqlaw noqati'na shekemgi qashi'qli'qti'n' kvadrati'na keri proporsional eken.

(4)-an'latpadan shashi'rag'an tolqi'nni'n' intensivliginin' shashi'rati'wshi' bo'lekshenin' massasi'ni'n' kvadrati'na keri proporsional ekenligi de ko'riniq tur. Usi' jag'dayg'a tiykarlani'p biz rentgen nurlari'n atomlardag'i' elektronlar g'ana shashi'ratadi' dep esaplay alami'z. Atom yadrolari' rentgen nurlari'n shashi'rati'wg'a derlik qatnaspaydi'. Haqi'yqati'nda da protonni'n' massasi' elektronni'n' massasi'nan 1835 ese u'lken. Sonli'qtan elektron protong'a qarag'anda rentgen nurlari'n $3,37 \cdot 10^6$ ese ku'shlirek shashi'ratadi' degen so'z.

(4)-an'latpadag'i' $\frac{1+\cos^2\psi}{2}$ ko'beytiwshisin polyarizaciyalı'q faktor dep ataymi'z. Biz tuwri' kelip tu'siwshi ha'm difrakciyag'a ushi'rag'an nur arasi'ndagi'i' ψ mu'yeshtin' shamasi'ni'n' Vulf-Bregg sha'rtindegi 2θ mu'yeshtine ten' ekenligin bilemiz. Sonli'qtan polyarizaciyalı'q faktordi'

$$P(\theta) = \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2}$$

tu'rinde jazami'z.

2-§. Atom ta'repinen rentgen nurlari'ni'n' shashi'rati'li'wi'. «Atomli'q amplituda»

Elektronli'q ti'g'i'zli'q. Elektronnan atomga o'tkende shashi'rag'an tolqi'nardi'n' intensivliginin' shashi'raw mu'yeshten g'a'rezligi a'dewir quramalasadi'. Polyarizaciyalı'q faktorg'a atomni'n' ha'r qi'lyi' bo'limlerinde shashi'rag'an tolqi'nardi'n' interferenciysi'ni'n' ta'siri de qosiladi'. Bunday jan'a baylani'sti'n' xarakterin ani'qlaw ushi'n quramali' bolg'an sanli'q esaplawlardi' ju'rgiziwdin'qa'jeti joq. Uli'wmali'q jag'daylar sapali'q tallaw o'tkergende de jetkilikli da'rejede ayqi'nlasadi'.

Atomni'n' ha'r qi'lyi' noqatlari'nda jaylasqan eki elektronda bazi' bir bag'i'tta shashi'rag'an tolqi'nlar baqlaw noqati'na jetkende fazalar ayi'rmasi'na iye boladi'. Sebebi sol elektronlardan baqlaw noqati'na shekemgi arali'qlar bir birine ten' emes. Sonli'qtan eki elektronda shashi'rag'an tolqi'nardi'n' qosiladi' intensivligi atomdag'i' sol eki elektronni'n' bir birine sali'sti'rg'andag'i' jaylasi'wlari'nan ha'm shashi'raw mu'yeshten g'a'rezli boladi'. Bizdi intensivliktin' bir zamatli'q ma'nisi emes, al ortasha ma'nisi qi'zi'qti'radi'. Sonli'qtan bizdi elektronlardı'n' qanday da bir waqi't momentindegi iyelegen ori'nları' bizin' ushi'n a'hmiyetli emes. Al elektronlardı'n' sheksiz ko'p traektoriyalari'n qosqanda ali'natug'i'n

«elektronli'q bult» bizin' ushi'n kerek boladi'. Solay etip biz atomni'n' Z dana diskret atomlari'na emes, al shaması' eZ bolg'an u'zliksiz tarqalg'an zaryadqa iye bolami'z.

Kvant mexanikasi' ko'z-qaraslari' boyi'nsha ha'r bir elektron o'zinin' $\psi_j(xyz)$ tolqi'n funkciyasi'na iye boladi'. Bul tolqi'n funkciyasi' ken'isliktegi zaryadti'n' statistikali'q tarqali'wi'n beredi. Tolqi'n funkciyasi'n sa'ykes tu'rde normirovkalag' anda oni'n' modulinin' kvadrati' $[\psi_j(xyz)]^2$ elektrondi' atomni'n' ana yamasa mi'na noqati'nda tabi'wdi'n'itimalli'g'i'n beredi. Atom boyi'nsha barli'q elektronlardı'n' tarqali'wi'n'i' qosı'ndı' funkciyasi'

$$\rho(xyz) = \sum_{j=1}^Z [\psi_j(xyz)]^2$$

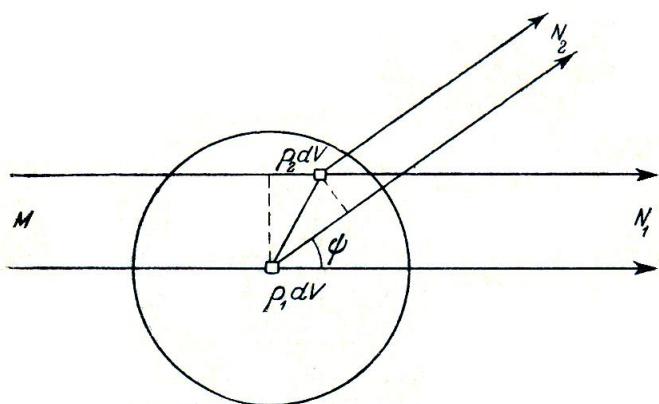
ko'leminin' bir birligindegi ha'r qi'yli' noqatlardag'i' elektronlardı'n' waqi't boyi'nsha ortasha sani'n ani'qlaydi'. Bul funkciyani' «elektronli'q ti'g'i'zli'q» dep ataydi'.

Ayi'ri'm elektronlardı'n' tarqali'w funkciyasi' bolg'an $[\psi_j(xyz)]^2$ funkciyasi'n juwi'q tu'rdegi kvantmexanikali'q esaplawlar joli' menen ani'qlawg'a boladi'. Atomni'n' ha'rqi'yli'qabi'qları'ndag'i' elektronlarg'a sa'ykes keliwshi tarqali'w funkciyalari'n qossaq, onda berilgen noqattan atomni'n' orayı'na shekemgi ko'lemdegi qosı'ndı' elektronli'q ti'g'i'zli'qti' ani'qlaymi'z.

Atom ta'repinen rentgen nurlari'ni'n' shashi'rati'li'wi'. Atomda eki sheksiz kishi dV ko'lemdi ayi'ri'p alami'z: birinshisi atomni'n' orayı'nda (elektronli'q ti'g'i'zli'q ρ_1), ekinshisi qa'legen noqatta (elektronli'q ti'g'i'zli'q ρ_2). Birinshi ko'lem $\rho_1 dV$, al ekinshisi $\rho_2 dV$ elektrong'a iye boladi'.

Rentgen nurlari' shashi'rag'anda birinshi ko'lem kernewliginin' amplitudasi' $E_{el}\rho_1 dV$, al ekinshi ko'lem kernewliginin' amplitudasi' $E_{el}\rho_2 dV$ bolg'an shashi'rag'an tolqi'nlardi' payda etedi.

Ayi'ri'p ali'ng'an eki ko'lemler ta'repinen ha'rqi'yli'bag'i'tlardashashi'rati'lg'an rentgen nurlari'ni'n' qosı'ndı'si'n tabami'z. Bul jag'day 3-su'wrette ko'rsetilgen.

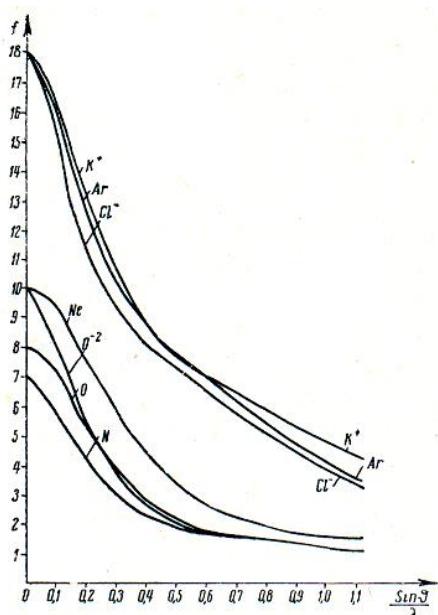


3-su'wret.

Atomni'n' ha'r qi'yli' noqatlari'nda shashi'rawdi'n' na'tiyjesinde fazalar ayi'rmasi'ni'n' payda boli'wi'.

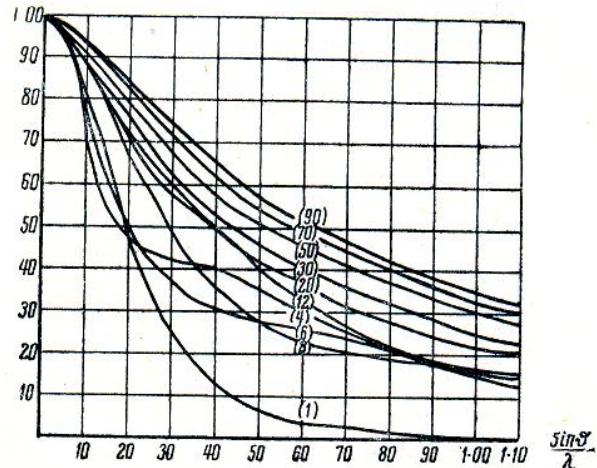
Kelip tu'siwshi nurlardi'n' bag'i'ti' menen sa'ykes keliwshi N_1 bag'i'ti'nan baslaymi'z. Bul bag'i'tta eki ko'lem arqaldi' o'tiwshitolki'nlardi'n' ju'risler ayi'rmasi' birdey, nurlari'di'n' fazalari' birdey, al qosı'ndı' amplituda $E_{el}\rho_1 dV + E_{el}\rho_2 dV$ qosı'ndı'si'n ten'. Basqa bag'i'tlarda nurlar arasi'nda fazalar ayi'rmasi' payda boladi' ha'm sog'an sa'ykes qosı'ndı' nurdi'n' amplitudasi' kemeyedi. ψ mu'yeshinin' shamasi' qansha u'lken bolg'an sayi'n fazalar ayi'rmasi'ni'n' da shamasi' u'lkeyedi ha'm sheksiz kishi eki ko'lem ta'repinen shashi'rag'an qosı'ndı' tolqi'nni'n' intensivligi de kishi boladi'.

Atomni'n' si'zi'qli' o'lshemleri rentgen tolqi'nları'n' uzi'nli'g'i'na barabar. Eger dV₁ ha'm dV₂ ko'lemeleri bir birinen u'lkenirek qashi'qli'qta ali'ng'an bolsa shashi'rawdi'n' bazi' bir mu'yeshlerinde π den de u'lken boli'wi', al ayi'ri'm jag'daylarda ha'tte 2π ge de jaqi'nslasi'wi' mu'mkin. Bunday jag'dayda qosi'ndi' amplitudani'n' ma'nisi u'lkeye baslaydi'. Biraq elektronli'q ti'g'i'zli'qtin' tarqali'wi'ni'n' uli'wmali'q xarakterinen rentgen nurlari'n shashi'rati'wg'a tiykari'nan atomni'n' orayli'q bo'liminde jaylasqan bo'limlerdin' qatnasatug'i'nli'g'i'n ko'riwge boladi'. Al atomni'n' orayli'q bo'liminde bolsa elektronli'q ti'g'i'zli'q en' u'lken ma'niske iye boladi'. Rentgen nurlari'n effektivli tu'rde shashi'ratug'i'n bunday bo'limler bir birinen λ ge sali'sti'rg'anda a'dewir kishi qashi'qli'qlarda jaylasadi'. Bul jag'day shashi'raw mu'yeshinin' u'lkeyiwi menen shashi'rag'an tolqi'nlardı'n' intensivliginin' monotonli' tu'rde kishireywin ta'miyinleydi (4-su'wret).



4-su'wret.

$$f = f \left(\sin \frac{\vartheta}{\lambda} \right) \text{ atomli'q amplitudalar iymeklikleri.}$$



5-su'wret.

$$\hat{f} = \hat{f} \left(\sin \frac{\vartheta}{\lambda} \right) \text{ birlik atomli'q amplitudalar iymeklikleri.}$$

Tap sol si'yaqli' tallawlar tiykari'nda basqa da ni'zamlı'qtı' – shashi'rag'an tolqi'nlardı'n' intensivliginin' tolqi'n uzi'nli'g'i'nan g'a'rezligin ani'qlawg'a mu'mkinshilik beredi.

3-su'wretke qayti'p kelemiz. SHashi'raw mu'yeshinin' ma'nisi berilgen, al rentgen nurlari'nı'n tolqi'n uzi'nli'qları'n o'zgermeli dep esaplaymi'z. Tolqi'n uzi'nli'g'i'ni'n kemeyiwinin' nurlar arası'ndagi' fazalar ayi'rmasi'ni'n' u'lkeyiwine ali'p keletug'i'nli'g'i'n tu'siniw qi'yi'n emes. Sonli'qtan 1- ha'm 2-ko'lemlerde shashi'rag'an tolqi'nlardı'n' qosi'ndi'si'ni'n' amplitudasi'ni'n' shashi'raw mu'yeshinin' ma'nisinin' u'lkeyiwi ha'm tolqi'n uzi'nli'g'i'ni'n' kishireywi menen kishireyetug'i'nli'g'i'n ko'remiz

Atom boyi'nsha elektronlardı'n' ti'g'i'zli'g'i'ni'n' statistikali'q tarqali'wi'n esapqa alatug'i'n sanli'q esaplawlar joqari'da keltirilgen tallawlardı'n' duri's ekenligin tasti'yi'qlaydi'. Atom ta'repinen shashi'rati'lg'an tolqi'nni'n' qosi'ndi' amplitudasi' E_a shashi'raw mu'yeshi ψ ha'm $1/\lambda$ shamalari'ni'n' monotonli' tu'rde kishireywshi funkciyası' boli'p tabi'ladi'. Bul esaplawlar ψ ha'm $1/\lambda$ shamalari'n bir waqi'tta esapqa ali'wshi' funkcionalli'q g'a'rezlilikti $\frac{\sin(\frac{\psi}{2})}{\lambda}$ funkciyası'ni'n' beretug'i'nli'g'i'n da'lilleydi.

Atomli'q amplituda. Kelip tu'siwshi tolqi'nlar bag'i'ti'nda atomni'n' barli'q ushastkalari' ta'repinen shashi'rag'an nurlari' fazalari' boyi'nsha birdey boladi' $E_a = ZE_{el}$ shamasi'na ten'.

Basqa bag'i'tlarda E_a shamasi'ni'n' ma'nisi kishi ha'm $\frac{\sin \vartheta}{\lambda}$ shamasi'nan g'a'rezli boladi'. E_a ni'n' ma'nisin berilgen ϑ ha'm λ shamalari' ushi'n $E_a = f\left(\frac{\sin \vartheta}{\lambda}\right) E_{el}$ tu'rinde jazami'z. $\vartheta = 0$ bolg'an jag'dayda $f\left(\frac{\sin \vartheta}{\lambda}\right)$ funkciyasi'ni'n' ma'nisi Z ke ten'. Al mu'yeshtin' basqa ma'nislerinde Z ten kishi. Bul shaman'i'n' ma'nisi berilgen bag'i'tta atom ta'repinen shashi'rati'lg'an tolki'nni'n' amplitudasi'ni'n' elektron ta'repinen shashi'rati'lg'an tolqi'nni'n' amplitudasi'nan neshe ese u'lken ekenligine ten' ha'm oni' atomli'q shashi'raw funkciyasi' yamasa atomli'q amplituda dep ataymi'z.

Usi'nday sali'sti'rmali' shamalar atomlar, molekulalar ha'm kristallar ta'repinen rentgen nurlari'ni'nshashi'rati'w processlerin u'yrengende jiyi ushi'rasadi'. Usi'g'an baylani'sli' biz elektronli'q birliklerde jazi'lg'an shamalardi' kirgizemiz. Bunday jag'dayda elektron ta'repinen berilgen bag'i'tta shashi'rati'lg'antolki'nni'n' amplitudasi'n birge ten' dep qabi'l etemiz (bunday jag'dayda sa'ykes intensivlikte birge ten' boladi'). Sa'ykes iymeklikler 4-ha'm 5-su'wretlerde keltirilgen.

3-§. Kishi kristallardag'i' rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'. Intensivliktin' strukturali'q faktori'

Kristalli'q pa'njerenin' elementar quti'si'ndag'i' atomlardi'n' ji'ynag'i'n bazi' bir molekula dep karawg'a boladi'. Kristaldan qi'yali'mi'zda ayi'ri'p ali'ng'an elementar quti' rentgen nurlari'n barli'q bag'i'tta shashi'ratadi'. Elementar quti'da shashi'rag'an nurlardi'n' amplitudasi', baslang'i'sh fazasi' ha'm intensivlikleri molekulalar ushi'n ali'ng'an

$$E_m = E_{el}|F_m| = E_{el}\sqrt{F_A^2 + F_B^2}, \quad (5)$$

$$\operatorname{tg} \alpha_m = \frac{F_B}{F_A}, \quad (6)$$

$$I_m = I_{el}|F_m|^2 = \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 \frac{I_0}{R^2} P(\psi) f^2 \quad (7)$$

formulalar boyi'nsha ani'qlanadi'. Bul formulalarda:

F_m molekula ushi'n shashi'rawdi'n' strukturali'q faktori'. f arqali' (f_j arqali' -atom ushi'n) atomli'q faktor, al $P(\psi)$ arqali' polyarizaciyalı'q faktor belgilengen.

$$I_m = \frac{c}{8\pi} E_{el}^2 \left\{ \left[\sum_{j=1}^N f_j \cos \delta_j \right]^2 + \left[\sum_{j=1}^N f_j \sin \delta_j \right]^2 \right\},$$

$$F_A = \sum_{j=1}^N f_j \cos \delta_j,$$

$$F_B = \sum_{j=1}^N f_j \sin \delta_j.$$

$$|F_m|^2 = F_A^2 + F_B^2 = \left[\sum_{j=1}^N f_j \cos \delta_j \right]^2 + \left[\sum_{j=1}^N f_j \sin \delta_j \right]^2.$$

Biz qarap ati'rg'an jag'dayda koordinata basi' orni'n pa'njererin' sa'ykes tu'yini iyeleydi. Al koordinata basi' bolsa atomlardi'n' koordinatalari'n, shashi'rag'an tolqi'nlardi'n' baslang'i'sh fazalari'n esaplaw ushi'n tiykar boli'p tabi'ladi'.

Ekinshi ta'repten tutasi' menen ali'ng'an kristaldan ali'natug'i'n qosi'ndi' shashi'rawdi'n' effekti de jaqsi' belgili. Ayi'ri'm elementar quti'llar ta'repinen shashi'rag'an tolqi'nlardi'n' interferenciyasi'ni'n' na'tiyjesinde nurlar tek bazi' bir bag'i tlarda g'ana tarqaladi'. Bunday bag'i tlarda nurlardi'n' fazalari'n'i'n' birdey boli'wi' kerek. Qosi'ndi' nurdi'n' amplitudasi'ni'n' E_m amplitudalari'ni'n' a'piwayi' arifmetikali'q qosi'ndi'si' ME_m ko'beymesine ten' bolatug'i'nli'g'i' tu'sinikli (M arqali' kristaldag'i' elementar quti'lardi'n' sani' belgilengen). Solay etip

$$E_k = ME_m, \quad (8)$$

$$I_k = M^2 I_m. \quad (9)$$

Bul formulalarda E_k arqali' kristalda shashi'rag'an tolqi'nni'n' amplitudasi', al I_k arqali' intensivligi belgilengen.

Strukturali'q faktor. SHashi'rag'an tolqi'nlardi'n' intensivliklerinin' formulalari'na qayta keliw arqali' difrakciyag'a ushi'rag'an nurlardi'n' intensivligin elementar quti'dag'i' atomlardi'n' koordinatalari' arqali' an'lati'w mu'mkinshilagine iye bolami'z:

$$I_k = I_{el} M^2 |F(hkl)|^2 = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{I_0}{R^2} P(\vartheta) M^2 |F(hkl)|^2. \quad (10)$$

Bul an'latpada

$$\begin{aligned} |F(hkl)|^2 &= \left[\sum_{j=1}^N f_j \cos 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j) \right]^2 + \\ &+ \left[\sum_{j=1}^N f_j \sin 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j) \right]^2. \end{aligned} \quad (11)$$

(11)-an'latpadag'i' $F(hkl)$ shamasi'n strukturali'q faktor dep ataydi'. Bul faktordi'n' san ma'nisi difrakciyali'q bag'i'ttag'i' bir elementar quti'dan shashi'rag'an tolqi'nlardi'n' elektronli'q birliklerdegi intensivligine ten'.

Strukturali'q faktor atomli'q-kristalli'q quri'li'sti'n' o'zgesheliklerine baylani'sli' difrakciyag'a ushi'ri'g'an tolqi'nlardi'n' intensivliklerinin' ha'r qi'yli' bolatug'i'nli'g'i'n ta'miyinleydi. Strukturali'q faktor ushi'n jazi'lg'an an'latpadag'i' argument $hx_j + ky_j + lz_j$ tikkeley fizikali'q ma'niske iye: oni'n' shamasi' elementar quti'dag'i' j-atom arqali' o'tkerilgen atomli'q tordi'n' usi' tordi'n' betine perpendikulyar bag'i'ttag'i' awi'si'wi'na ten', al $2\pi (hx_j + ky_j + lz_j)$ bolsa joqari'dag'i' awi'si'wdi'n' saldari'nan payda bolg'an usi' atomli'q torda shashi'rag'an nurdi'n' baslang'i'sh fazasi'.

Solay etip elementar quti'dag'i' atomlardi'n' jaylasi'wlari'n bile oti'ri'p qa'legen hkl shashi'rawi'ni'n' intensivligin ani'qlawg'a boladi' eken (hkl indeksleri kristallografiyali'q tegislikler seriyasi'ni'n' indeksleri yamasa Miller indeksleri dep ataladi').

Izertlewshiler aldi'nda pu'tkilley qarama-qarsi' mazmundag'i' ma'sele qoyi'ladi': difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'nlardi'n' intensivlikleri boyi'nsha elementar quti'dag'i' atomlardi'n' koordinatalari'n ani'qlaw kerek boladi'. Bul ma'sele rentgenstrukturali'q analizdin' tiykarg'i' ma'selelerinin' biri boli'p esaplanadi'.

4-§. Strukturali'q amplitudalar. Uli'wmali'q formulalar

Strukturali'q amplituda rentgen nurlari'ni'n' shashi'rawi'ni'n' atomlardi'n' bir birine sali'sti'rg'andag'i' jaylasi'wlari'nan, olardi'n' shashi'rati'wshi'li'q qa'siyetlerinen ha'm nurlardi'n' bag'i'ti'nan g'a'rezlilikti an'latadi'.

Strukturali'q amplituda tu'sinigi tutasi' menen ali'ng'an kristalg'a o'tpesten buri'n atomlardi'n' shekli toparlari'ni'n' (molekula yamasa elementar quti' atomlari') shashi'rati'wi'n tallawdi'n' bari'si'nda kirgizildi. Ayi'ri'm ali'ng'an elementar quti'g'a qatnasi' boyi'nsha strukturali'q amplituda kompleksli shama tu'rinde ani'qlanadi'. Oni'n' moduli elektronli'q birliklerdegi nurdi'n'amplitudasi'na, alargumenti bul nurdi'n' baslang'i'sh fazasi'na ten'.

Fizikali'q jaqtan bul jag'day mi'nalardi' bildiredi: strukturali'q amplituda nurdi'n' amplitudasi' menen baslang'i'sh fazasi'ni'n' atomlardi' xarakterleytug'i'n parametrlerden ha'm nurdi'n' bag'i'ti'nan g'a'rezlilikti an'latadi'. Strukturali'q amplitudani'n' kompleksli formasi' eki funkcionali'q g'a'rezlilikti bo'lip ko'rsetiwge mu'mkinshilik beredi: moduli amplitudani', alargumenti baslang'i'sh fazani' ani'qlaydi'.

Kristalg'a qatnasi' boyi'nsha strukturali'q amplituda difrakciyag'a ushi'rag'an nurlardi'n' intensivligin ani'qlawshi' faktorlardı'n' biri g'ana boli'p tabi'ladi'. Sonli'qtan shi'g'i'li'si'wdi'n' strukturali'q amplitudasi'ni'n' ani'qlaw baskasharaq formada a'melge asi'ri'li'wi' kerek. Qosi'msha faktorlardan quti'li'w ushi'n (integralli'q, juti'li'w, ekstinkiya faktorları') kristaldi' sheksiz u'lken, jutpaytug'i'n ha'm ideal mozaykali'q dep esaplaymi'z. Bunday jag'dayda difrakciyali'q sha'rtlerdi qanaatlandi'ri'wshi' (Vulf-Bregg sha'rtin qanaatlandi'ri'wshi') bag'i'tta tarqali'wshi' nurdi'n' kompleksli amplitudasi' to'mendegidey tu'rge iye boladi':

$$\tilde{E}(hkl) = E_{el} M F(hkl).$$

Demek

$$F(hkl) = \frac{\tilde{E}(hkl)}{E_{el} M} = \frac{E(hkl)}{E_{el} M} e^{i\alpha(hkl)}. \quad (12)$$

SHag'i'li'si'wdi'n' strukturali'q amplitudasi'ni'n' moduli sheksiz u'lken, jutpaytug'i'n, ideal mozaykali'q kristalda difrakciyag'a ushi'rag'an nurdi'n' amplitudasi'na ten' (bir elementar quti'g'a tiyisli elektronli'q birliklerdegi).

Strukturali'q amplituda ushi'n uli'wmali'q an'latpa (11)-an'latpa boli'p tabi'ladi'. Oni' bi'layi'nsha ko'shirip jazami'z:

$$F(hkl) = \sum_{j=1}^N f_j e^{i2\pi(hx_j + ky_j + lz_j)} = \sum_{j=1}^N f_j e^{i\theta_j}. \quad (13)$$

Bul algebralı'q formulani'n' ja'rdeinde strukturali'q amplituda atomli'q amplitudalarha'm shashi'rati'wshi' atomlardi'n' oraylari'ni'n' koordinatalari' x_j, y_j ha'm k_j shamalari' menen baylani'sti'ri'ladi'. Bul koordinatalar a, b ha'm c da'wirlerinin' (turaqli'lari'ni'n') u'leslerinde berilgen. Sonli'qtan

$$F(hkl) = \int_{v_0} f_j e^{i2\pi(hx_j + ky_j + lz_j)} dv = \int_{v_0} \rho(xyz) f_j e^{i\theta_j} dv \quad (14)$$

tu'rine enedi. Bul formulada strukturali'q faktor elektronli'q f ti'g'i'zli'qtin' tarqali'wi' menen baylani'sqan. Bul jerde $2\pi(hx_j + ky_j + lz_j)$ argumentin a'dette Θ arqali' an'latatug'i'ni'mi'z ko'rinipli tur.

Joqari'da keltirilgen algebralı'q formula atomlardı'n' kristaldi'n' qutisi'ndagi'i koordinataları berilgen jag'daylar ushi'n strukturalı'q faktordı'n' ma'nislerin ani'qlaw ushi'n paydalani'latug'i'n formulalar ekenligin atap o'temiz. Biz tiykari'nan (13)- yamasa (14)-tu'rdegi formulalardan paydalanimi'z:

Joqari'da keltirilgen formulalarda eksponencialli'q ag'zalar trigonometriyali'q formada ko'rsetiliwi mu'mkin. Bunday jag'dayda kompleksli strukturalı'q amplitudani'n' haqi'yqi'y ha'm jormal bo'leklerin ayi'ri'p jazami'z:

$$F(hkl) = \sum_{j=1}^N f_j A_j + i \sum_{j=1}^N f_j B_j. \quad (15)$$

Bul an'latpada

$$\begin{aligned} A_j &= \cos 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j), \\ B_j &= \sin 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j). \end{aligned}$$

Eger kristalda inversiya orayı' bolsa (yamasa koordinatalar bası' inversiya orayları'ni'n' birewinde jaylastı'ri'lg'an bolsa), onda strukturalı'q amplituda haqi'yqi'y ma'niske iye boladi' ha'm

$$F(hkl) = \sum_{j=1}^{N/2} f_j A_j = 2 \sum_{j=1}^{N/2} f_j \cos 2\pi(hx_j + ky_j + zk_j)$$

tu'rine enedi. Bul jag'day u'lken a'hmiyetke iye. Bul a'hmiyet esaplawlardi'n' ko'leminin' eki ese kemeyiwinde emes, al haqi'yqi'y $F(hkl)$ shag'i'li'si'wladag'i' da'slepki fazani' ani'qlaw mashqalasi'n an'satlasti'radi'. Orayg'a qarata simmetriyali' kristaldag'i' (egersimmetriya orayı' koordinatalar bası' si'pati'nda saylap ali'ng'an bolsa) qa'legen difrakciyag'a ushi'rag'an nur tek 0 ge yamasa π ge ten' baslang'i'sh fazag'a iye boladi'. Eger $F(hkl) > 0$ bolsa, onda baslang'i'sh faza nolge ten', al $F(hkl) < 0$ bolg'an jag'dayda baslang'i'sh faza π ge ten'.

Berilgen struktura ushi'n strukturalı'q amplitudani' esaplaw tiykarg'i' soni'n' menen birge en' miynetti ko'p talap etetug'i'n ma'selelerdin' biri boli'p tabi'ladi'. A'sirese elementar qutidag'i' atomlardı'n' sani' ko'p bolsa (mi'sali' organikali'q birikpelerde) strukturalı'q faktordı' esaplaw og'ada u'lken ko'lemdegi esaplawlardi'n' o'tkeriliwin talap etedi.

Mi'sal retinde $Ni(NC_5H_5)_4Cl_2$ kristalli'n' ali'p qaraymi'z. Bul kristaldi'n' elementar qutisi'nda 8 molekula, yag'ni'y 376 atom jaylasqan boladi'. Demek tek bir shag'i'li'si'w (difrakciyag'a ushi'rag'an nur) ushi'n eksponencialli'q funkciyani'n' 376 ma'nisin tabi'lw kerek. Bunnan keyin bul shamalardi' atomli'q faktorlardı'n' ma'nislerine ko'beytiw ha'm ali'ng'an ko'beymelerdi bir birine qosı'w kerek. Bunday operaciyalar difrakciyag'a ushi'rag'an nurlardi'n' sani'na baylani'sli' ju'zlegen yamasa mi'n'lag'an ret qaytalawg'a tuwri' keledi.

6-§. Simmetriyasi'ni'n' ken'isliktegi topari' ha'r qi'yli' bolg'an kristallar ushi'n strukturali'q amplitudani'n' formulalari'n keltirip shi'g'ari'w

Cimmetriya elementerinin' bar boli'wi' ha'm pa'njererin' a'piwayi' emesligi elementar quti'dagi' ha'r qi'yli' atomlardi'n' koordinatalari' arasi'ndag'i' o'z-ara baylani'sti' ta'miyinleydi. Usi'nday o'z-ara baylani'sli'qti'n' en' a'piwayi' formasi'n oraylasqan pa'njereler beredi. Mi'sali' ko'lemde oraylasqan pa'njerede barli'q atomlar jup-juptan baylani'sqan: eger bir atom x_j, y_j, z_j koordinatalari'na iye bolsa, onda koordinatalari' $x_j' = x_j + 1/2, y_j' = y_j + 1/2, z_j' = z_j + 1/2$ bolg'an tap sonday sorttag'i' atom so'zsiz tabi'ladi'. (13-15) formulalardag'i' sa'ykes jup ag'zalardi' bir birine qosi'w arqali' mi'nag'an iye bolami'z:

$$\begin{aligned} f_j \text{Exp}[2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)] + f_j \text{Exp}\left\{2\pi i\left[h(x_j + 1/2) + k(y_j + \frac{1}{2}) + l(z_j + 1/2)\right]\right\} &= \\ &= f_j \text{Exp}[2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)][1 + \text{Exp}i\pi(h + k + l)] = \\ &= 2f_j \text{Exp}[2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)] \cos^2 \frac{\pi}{2}(h + k + l). \end{aligned}$$

Barli'q formula tutasi' menen

$$F(hkl) = 2\cos^2 \frac{\pi}{2}(h + k + l) \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \text{Exp}[2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)]$$

formulasina ali'p kelinedi.

Summa belgisinin' aldi'nda turg'an koefficient tek eki ma'niske iye bola aladi': eger $h + k + l = 2n$ bolsa (n arqali' pu'tin san belgilengen, $2n$ shaması' bolsa $h + k + l$ qosi'ndi'si'ni'n' teñ), onda $F(hkl) = 1$. Eger $h + k + l = 2n + 1$ bolsa, onda $F(hkl) = 0$. Demek rentgenogrammada payda bolg'an reflekslerdin' indeksleri ushi'n $h + k + l$ qosi'ndi'si' jup sang'a ten' boli'wi' kerek. Biz ko'lemde oraylasqan kristallar ushi'n belgili bolg'an so'niw qag'i'ydalari'n aldi'q degen so'z.

Tap sonday jollar menen ken'isliktegi simmetriyasi'ni'n' toparlari' basqa bolg'an kristallar ushi'n da strukturali'q faktorlardı'n' ma'nislerin ha'm so'niw qag'i'ydalari'n keltirip shi'g'ari'wi'mi'z mu'mkin. Joqari'da keltirilgen mi'saldan elementar quti'dag'i' barli'q atomlar boyi'nsha qosi'ndi'lardi' ali'p oti'ri'wdi'n' da kerek emes ekenligin ko'rsetedi. Biraq biz bul jumi'sta esaplawlardı'n' ko'lemiñ kishireytiwdi aldi'mi'zg'a maqset etip qoymaymi'z.

Simmetriya elementlerinin' boli'wi'na baylani'sli' formulalardi' tu'r lendiriw. Simmetriya elementlerinin' qatnasi'wi' qosi'ndi'ni'n' ag'zalari'ni'n' sani'n azayti'p g'ana qoymay, a'piwayi'lasti'ri'lg'an formulalardi'n' tu'rlerin de o'zgertedi.

Birinshi mi'sal retinde orayg'a qarata simmetriyasi' bar strukturani' qaraymi'z: eger koordinatalar basi' simmetriya orayi'nda jaylasti'ri'lg'an bolsa, onda strukturali'q amplitudani'n' tek haqi'yqi'y bo'legi g'ana (summadag'i' kosinus funkciyası' bar ag'zalar g'ana) qaladi'. Basqa simmetriya elementleri de formulalardi'n' bir qansha tu'r lendiriliwin ta'miyinleydi.

Eger kristalda Z ko'sherine parallel bolg'an ekinshi ta'rtipli simmetriya ko'sheri bolsa (yag'ni'y 2 bolsa), onda koordinatalari' x_j, y_j, z_j ha'm $-x_j, -y_j, z_j$ bolg'an atomlar jup-juptan birigedi. Bul jag'daydan mi'nag'an iye bolami'z:

$$\begin{aligned} \text{Exp}[2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)] + \text{Exp}[2\pi i(-hx_j - ky_j + lz_j)] &= \\ &= \text{Exp}(i2\pi lz_j) 2 \cos 2\pi(hx_j + ky_j). \end{aligned}$$

Demek bul jag'dayda strukturali'q amplitudani'n' formulası'

$$F(hkl) = 2 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \cos 2\pi i (hx_j + ky_j) \text{Exp}(i2\pi lz_j) \quad (16)$$

tu'rine enedi.

Bul formulani' trigonometriyali'q formag'a aylandı'rsaq, onda

$$\begin{aligned} F(hkl) &= 2 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \cos 2\pi i (hx_j + ky_j) \cos(2\pi lz_j) + \\ &\quad + 2i \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \cos 2\pi i (hx_j + ky_j) \sin(2\pi lz_j) \end{aligned} \quad (17)$$

formulası'na iye bolami'z.

Joqarı'da aytalg'an si'yaqlı' Z ko'sherine perpendikulyar bolg'an simmetriya tegisligi m strukturali'q amplituda formulası'n

$$F(hkl) = 2 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \cos(2\pi lz_j) \text{Exp}[2\pi i (hx_j + ky_j)]$$

tu'rine endiredi. Bul formulani' basqasha etip jazsaq, onda

$$\begin{aligned} F(hkl) &= 2 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \cos(2\pi lz_j) \cos[2\pi(hx_j + ky_j)] + \\ &\quad + 2i \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \cos(2\pi lz_j) \sin[2\pi(hx_j + ky_j)] \end{aligned}$$

formulası'na iye bolami'z. Sebebi bul jag'dayda x_j, y_j, z_j ha'm $x_j, y_j, -z_j$ noqatlari'nda jaylasqan atomlar jup-juptan birlesedi.

Joqarı' ta'rtiptegi simmetriya ko'sherleri, vintlikko'sherler, ji'lji'p shashi'rati'wshi' simmetriya tegislikleri bolg'an jag'dayda esaplawlar a'dewir quramalasadi'. Mi'sali' XY tegisligi arqali' o'tiwshi a ji'lji'p shashi'rati'wshi' simmetriya tegisligi koordinatalari' x, y, z bolg'an atomlar menen koordinatalari' $x + \frac{1}{2}, y, -z$ bolg'an atomlardı' jup-juptan birlestiredi. Usi'nday o'zgerislerge sa'ykes ag'zalardi' bir biri menen baylani'sti'ri'w joli' menen biz to'mendegidey formulalarg'a iye bolami'z:

$$\begin{aligned} &\text{Exp}[2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j)] + \text{Exp}[2\pi i (hx_j + h/2 + ky_j - lz_j)] = \\ &= \text{Exp}[2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j)] \{ \text{Exp}[2\pi i (lz_j - h/4)] \} + \text{Exp}[2\pi i (h/4 - lz_j)] = \\ &\quad = 2 \cos 2\pi (lz_j - h/4) \text{Exp}[2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j)] \end{aligned}$$

ha'm

$$F(hkl) = 2 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \cos 2\pi (lz_j - h/4) \text{Exp}[2\pi i (hx_j + ky_j + h/4)] =$$

$$\begin{aligned}
&= 2 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \cos 2\pi(lz_j - h/4) \cos 2\pi(hx_j + ky_j + h/4) + \\
&\quad + 2i \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \cos 2\pi(lz_j - h/4) \sin 2\pi(hx_j + ky_j + h/4)
\end{aligned}$$

formulası'n alami'z.

Vintlik ko'sherlerge ha'm ji'lji'p shashi'rati'wshi' simmetriya tegisliklerine juwap beretug'i'n formulalar sa'ykes simmetriya elementin ta'riyipleytug'i'n so'niw qag'i'ydalari'na da iye boladi'. Mi'sali' a ji'lji'p shashi'rati'wshi' simmetriya tegisligi bar jag'dayg'a sa'ykes keliwshi en' aqi'rg'i' formula boyi'nsha $h = 2n - 1$ bolg'an jag'dayda (yag'ni'y h ti'n' ma'nisi taq san bolsa) $F(hk0) = 0$. Bunnan

$$F(hk0) = 2 \cos \frac{\pi}{2} h \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \text{Exp} [i2\pi \cos 2\pi(hx_j + ky_j + h/4)]$$

Bul shama h ti'n' ma'nisi taq bolg'anda nolge aylanadi'.

Simmetriya elementlerinin' kombinaciyalari' ja'ne de formulalardi'n' tu'rlerinin' o'zgerislerine ali'p keledi. Mi'sali' $P2/m$ topari'nda 2 ko'sheri Z ke parallel, al m tegisligi bolsa XY tegisliginde jatadi' dep esaplasaq, onda srukturali'q amplitudani'n' ma'nisi

$$F(hkl) = \sum_{j=1}^{\frac{N}{4}} f_j \cos 2\pi(hx_j + ky_j) \cos 2\pi lz_j$$

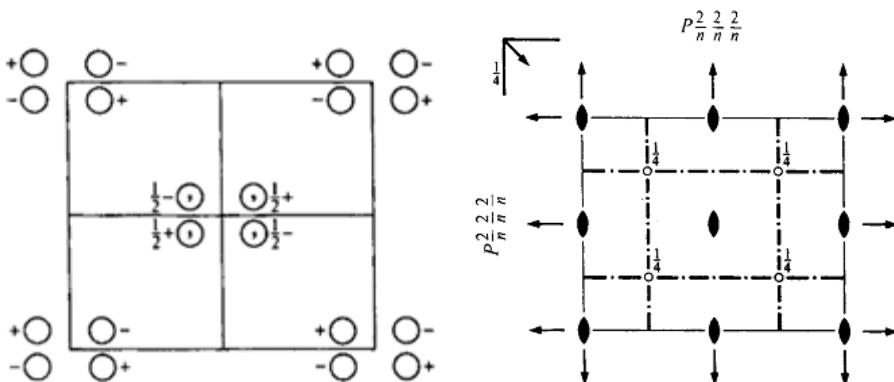
an'latpasi'n alami'z.

$Pmmm$ topari' formulalardi' bunnan da beter a'piwayi'lasti'radi'. Bul jag'dayda

$$F(hkl) = 8 \sum_{j=1}^{\frac{N}{8}} f_j \cos 2\pi hx_j \cos 2\pi ky_j \cos 2\pi lz_j .$$

Strukturali'q amplituda simmetriyani'n' $P2/m$ topari'nda da, $Pmmm$ topari'nda da haqi'yqi'y ma'niske iye boladi'. Sebebi bunday kristallarda koordinatalar basi' simmetriya orayi' menen bir noqatta jaylasqan.

$Pnnn$ topari'nda koordinata basi' ekinshi ta'rtipli u'sh simmetriya ko'sheri kesilisken noqatta saylap ali'nadi'. Bul jag'day 6-su'wrette ko'rsetilgen. Esaplawlar na'tiyjesinde biz bul jag'dayda strukturali'q amplitudani'n' to'mendegidey kompleksli ma'niske iye bolatug'i'nli'g'i'n ko'remiz:

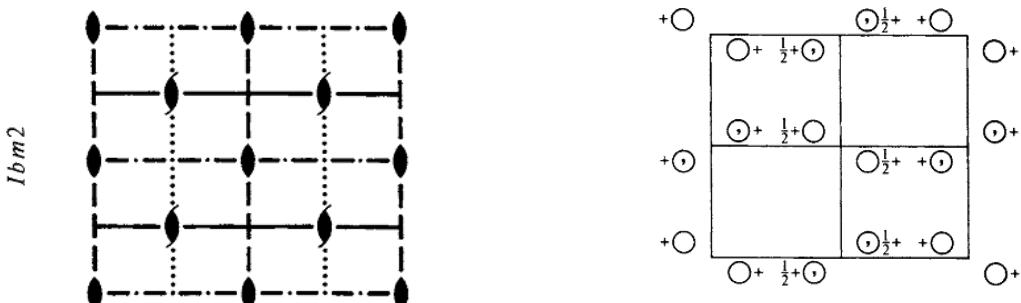


6-su'wret. Simmetriyani'n' ken'isliktegi topari' $Pnnn(D_{2h}^2)$ (qatar sani' 48-bolg'an topar) jag'daydag'i' elementar quti' ha'm simmetriya elementlerinin' o'z-ara jaylasi'wlari'.

$$F(hkl) = 8 \cos^2 2\pi \frac{h+k+l}{4} \sum_{j=1}^{N/8} f_j \cos 2\pi h x_j \cos 2\pi k y_j \cos 2\pi l z_j + \\ + i \sin^2 2\pi \frac{h+k+l}{4} \sum_{j=1}^{N/8} f_j \sin 2\pi \left(h x_j - \frac{h}{4} \right) \sin 2\pi \left(k y_j + \frac{h}{4} \right) \sin 2\pi l z_j .$$

Tap usi'nday jag'day inversiya orayi'na iye emes toparlarda da ori'n aladi'. Mi'sali' *Ima2* (International Tables for Crystallography (2006).Vol.A, Space group 46, pp. 260–261.) topari' ushi'n (7-su'wret)

$$F(hkl) = 8 \cos^2 2\pi \frac{h+k+l}{4} \left\{ \sum_{j=1}^{N/8} f_j \cos 2\pi \left(h x_j - \frac{h}{4} \right) \cos 2\pi \left(k y_j + \frac{h}{4} \right) \cos 2\pi l z_j + \right. \\ \left. + i \sum_{j=1}^{N/8} f_j \cos 2\pi \left(h x_j - \frac{h}{4} \right) \cos 2\pi \left(k y_j + \frac{h}{4} \right) \sin 2\pi l z_j \right\} .$$



7-su'wret. Simmetriyani'n' ken'isliktegi topari' $Ima2 (C_{2v}^{22})$ (qatar sani' 46-bolg'an topar) jag'daydag'i' elementar quti' ha'm simmetriya elementlerinin' o'z-ara jaylasi'wlari'.

Simmetriyani'n' ha'r bir ken'isliktegi topari' o'zinin' tu'r lendirilgen formulasi' menen ta'riyiplenedi. Bul formula strukturali'q amplitudalardi' esaplag'anda a'dette tiykarg'i' formula si'pati'nda xi'zmet etedi. Sa'ykes mag'li'wmatlar rentgenstrukturali'q analiz boyi'nsha spravoshnikerde, rentgen kristallografiyası' boyi'nsha xali'q arali'q kestelerde keltirilgen. A'dette bizdi qi'zi'qtı'ratug'i'n formula

$$F(hkl) = \sum_{j=1}^{N/p} f_j A_j + i \sum_{j=1}^{N/p} f_j B_j$$

tu'rine ali'p kelingen dep esaplanadi' ha'm joqari'da atap o'tilgen a'debiyatlarda A menen B shamalari'ni'n' ma'nisleri beriledi. Mi'sali' *Pnnn* topari' ushi'n xali'q arali'q kestelerde

$$A = 8 \cos^2 2\pi \frac{h+k+l}{4} \cos 2\pi h x \cos 2\pi k y \cos 2\pi l z,$$

$$B = 8 \cos^2 2\pi \frac{h+k+l}{4} \sin 2\pi h x \sin 2\pi k y \sin 2\pi l z,$$

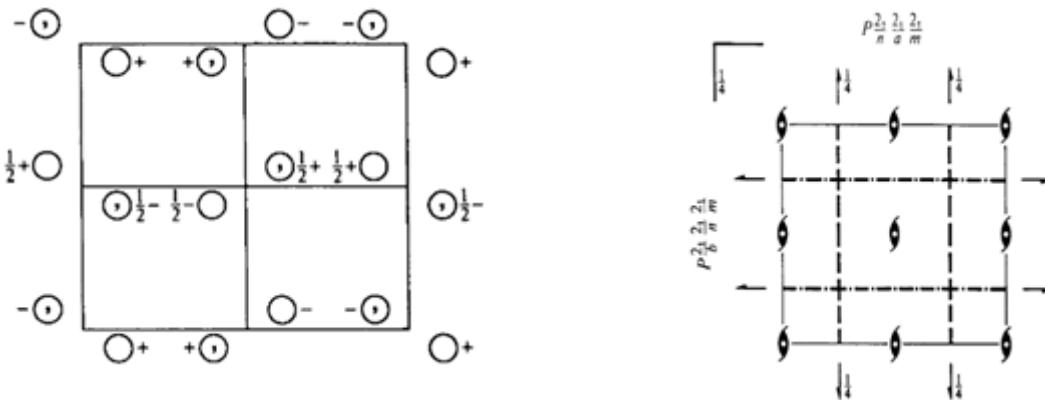
al, *Ima2* topari' ushi'n

$$A = 8 \cos^2 2\pi \frac{h+k+l}{4} \cos 2\pi(hx - \frac{h}{4}) \cos 2\pi(ky + \frac{h}{4}) \cos 2\pi h z,$$

$$B = 8 \cos^2 2\pi \frac{h+k+l}{4} \cos 2\pi(hx - \frac{h}{4}) \cos 2\pi(ky + \frac{h}{4}) \sin 2\pi h z$$

formulalari' berilgen.

Strukturali'q amplitudalardi' esaplaw ushi'n qolaylasti'ri'lg'an formulalardi' ayi'ri'p alg'an jaqsi'. Haqi'yqati'nda da $\cos^2 2\pi \frac{h+k+l}{4}$ tipindegi ko'beytiwshi rentgen nurlari'n shashi'rati'wg'a $h+k+l = 2n - 1$ sha'rtin qanaatlandi'raturug'i'n kristallografiyalı'q tegislikler semeystvolari'ni'n' qatnaspaytug'i'nli'g'i'n bildiredi. Al $\cos 2\pi(hx - \frac{h}{4}) \cos 2\pi(ky + \frac{h}{4})$ ko'beytiwshisi bolsa h jup bolg'anda $\cos 2\pi h x \cos 2\pi k y$ ko'beymesin beredi. Al h indeksinin' ma'nisi taq bolsa $\sin 2\pi h x \sin 2\pi k y$ ko'beymesin alami'z.



8-su'wret. Simmetriyani'n' ken'isliktegi topari' *Pnma* (D_{2h}^{16}) (qatar sani' 46-bolg'an topar) jag'daydag'i' elementar quti' ha'm simmetriya elementlerinin' o'z-ara jaylasi'wlari'.

En' aqi'ri'nda *Pnnn* topari' ushi'n to'mendegidey qatmaslarg'a iye bolami'z:

$h+k+l = 2n$ bolg'anda	$A = 8 \cos 2\pi h x \cos 2\pi k y \cos 2\pi l z,$ $B = 0.$
$h+k+l = 2n - 1$ bolg'anda	$A = 0,$ $\sin 2\pi h x \sin 2\pi k y \sin 2\pi l z,$

$(h + k + l = 2n)$ bolg'anda degen so'z h, k, l shamalari'ni'n' bir waqi'tta jup yamasa bir waqi'tta tek ekewinin' jup, al u'shinshisinin' taq bolatug'i'n an'g'artadi'.

Simmetriyani'n' ken'isliktegi *Ima2* topari' ushi'n to'mendegidey mag'li'wmatlarga iye bolami'z:

$h + k + l = 2nha'mh = 2n$ bolg'anda	$A = 8 \cos 2\pi hx \cos 2\pi ky \cos 2\pi lz,$ $B = 8 \cos 2\pi hx \cos 2\pi ky \sin 2\pi lz,$
$h + k + l = 2nha'mh = 2n - 1$ bolg'anda	$A = -8 \sin 2\pi hx \sin 2\pi ky \cos 2\pi lz,$ $B = -8 \sin 2\pi hx \sin 2\pi ky \sin 2\pi lz,$
$h + k + l = 2n - 1$ bolg'anda	$A = 0ha'mB = 0.$

Kristallar (metallar yamasa qatti' deneler) rentgenografiyani'n' tiykarg'i' ma'selesi rentgen nurlari'ni'n' kristalli'q denelerdegi difrakciyasi'ni'n' ja'rdeinde strukturali'q analizdin' (tallawdi'n') tiykarg'i' ma'selesin sheshiw boli'p tabi'ladi'. Rentgenografiyali'q usi'llar menen kristallardi'n' atomli'q-kristalli'q, substrukturasi'n ani'qlaw ma'selesi menen rentgenstrukturali'q analiz (rentgendifrakciyali'q analiz) shug'i'llanadi'. Al strukturali'q analizdin' fizikali'q tiykari' bolsa kristaldi'n', amorf denenin', suyiqli'qtin', ha'm zatti'n' basqa da kondensaciyalang'an hallari'ndag'i' zatli'q ob'yeekttin' (atomlar menen molekulalardi'n') mikrobo'listiriliwinin' belgisiz bolg'an funkciyasi'n, olardi'n' jayiasi'wi'ndag'i' simmetriyani', kristalli'q pa'njererin' parametrlerin, fazali'q quramdi' ha'm sog'an usag'an jag'daylardı' eksperimentalli'q jollar menen ani'qlaw boli'p tabi'ladi'. Kristallardag'i' rentgen nurlari'ni'n' shashi'rawi' mikrotarqali'wdi'n' Fure-analizinin' du'ziliwine ali'p keledi. Keri matematikali'q operaciya bolg'an Fure-sintezdin' ja'rdeinde izlenip ati'rg'an mikrotarqali'w funkciyasi'n tabi'w mu'mkin.

Rentgenstrukturali'q analizdin' ja'rdeinde to'mendegilerdi ani'qlaw mu'mkin:

a) kristaldi'n' atomli'q-molekulalı'q quri'li'si'ni'n' da'wirlı sistemasi'n, oni'n' noqatlı'q ha'm translyaciyalı'q simmetriyasi'n, elementar quți'dag'i' atomlar menen molekulalardi'n' koordinataları'n;

b) kristallardag'i' defektlerdi - nol o'lshemli - noqatlı'q defektler ha'm olardi'n' koncentraciyasi', bir o'lshemli dislokaciyalar (su'wreti ha'm koncentraciyasi'), dislokaciyalar a'tirapi'ndag'i' kernewler maydani' defekti (dinamikalı'q ha'm statikali'q), eki o'lshemli defektler - jayiasi'wlar defektleri menen kristalli'q bloklar, egizler arası'ndag'i' shegaralar, jaylastı'ri'w defektlerinin' koncentraciyaları'), u'sh o'lshemli defektlerdi (polikristalli'q denelerdegi da'nesheler arası'ndag'i' shegaralar, bul shegaralardi'n' si'rtqi' mexanikali'q ta'sirlerdegi ji'li'si'wlari' ha'm basqlar);

v) amorf deneler menen suyiqli'qlardag'i' jaqi'n arali'qlarda ori'n alatug'i'n ta'rtipler;

g) gaz molekulalari'ni'n' quri'li'si';

d) zatlardi'n' fazali'q qurami'.

Internet tarmag'i'ndag'i' Vikipediya universalli'q enciklopediyasi'nda rentgenstrukturali'q analiz haqqi'nda to'mendegidey mag'li'wmatlar keltirilgen:

Rentgenstrukturali'q analiz (rentgendifrakciyali'q analiz) - zatlardi'n' quri'li'si'n izertlewdin' difrakciyali'q usi'llari'ni'n' biri. Bul usi'ldi'n' tiykari'nda rentgen nurlari'ni'n' u'sh o'lshemli kristalli'q pa'njeredege difrakciya qubi'li'si' jatadi'.

Kristallardag'i' rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi' qubi'li'si' Laue ta'repinen ashi'ldi', bul qubi'li'sqa teoriyali'q tiykardi' Vulf-Breggler berdi (Vulf-Bregg sha'rti). Zatlardi'n' quri'li'si'n izertlew usi'li' si'pati'nda rentgenstrukturali'q analiz Debay (PeterDebye) ha'm SHerer (PaulScherrer) ta'repinen islep shi'g'i'ldi'.

Usi'l zatlardi'n' atomli'q quri'li'si'n ani'qlawg'a mu'mkinshilik beredi ha'm ol o'z ishine elementar quți'ni'n' simmetriyasi'ni'n' ken'isliktegi topari'n, oni'n' o'lshemleri menen formasi'n, soni'n' menen birge kristaldi'n' simmetriyasi'ni'n' topari'n ani'qlaydi'.

Rentgenstrukturali'q analiz a'piwayi'li'g'i' ha'm sali'sti'rmali' arzang'a tu'setug'i'nli'g'i'na baylani'sli' usi'ku'nlergeshekem zatlardi'n' quri'li'si'n ani'qlaytug'i'n en' ko'p tarqalg'an usi'l boli'p tabi'ladi'.

Usi'ldi'n' (rentgenstrukturali'q analizdin') tu'rleri:

- **Laue usi'li'** monokristallar ushi'n qollani'ladi'. Izertlenetug'i'n kristalli'q u'lgi rentgen nurlari'ni'n' u'zliksiz spektrinin' jin'ishke da'stesi menen nurlandi'ri'ladi', da'ste menen kristall arasi'ndag'i' bag'i't o'zgermeydi. Difrakciyag'a ushi'rag'an nurlani'wdi'n' mu'yeshlik tarqali'wi' ayi'ri'm difrakciyali'q daqlar tu'rine iye (lauegramma).

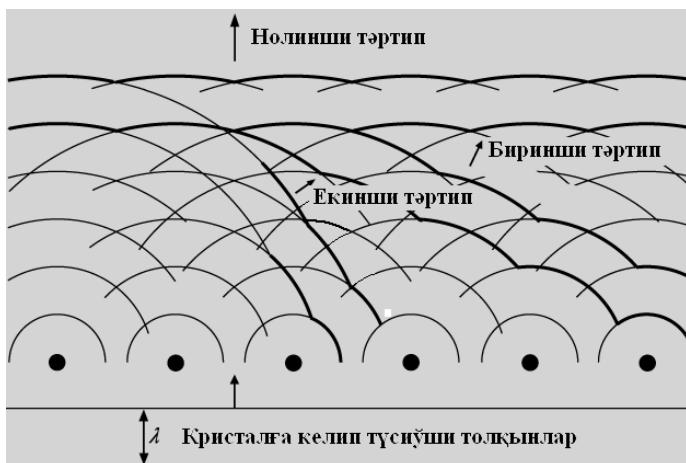
- **Rentgengoniometriya** (rentgen nurlari'ni'n' ja'rdeinde kristallardi'n' quri'li'si'na baylani'sli' bolg'an mu'yeshlerdin' ma'nislerin o'lshew).

- **Debay-SHerrer** usi'li' polikristallardi' ha'm olardi'n' aralaspalari'n izertlew ushi'n qollani'ladi'. Kristalg'a kelip tu'siwshi monoxromat rentgen nurlari'ni'n' bag'i'ti'na sali'sti'rg'anda u'lgidigi kristallardi'n' ta'rtipsiz (xaotikali'q) jaylasi'wlari' difrakciyag'a ushi'rag'an nurlardi' ko'sheri u'lgiye kelip tu'siwshi rentgen nurlari' da'stesi bolg'an kaossiali'q konuslardı'n' semeystvosi'na aylandi'radi'. Olardi'n' rentgenogramalardag'i' (fotoplenkadag'i' yamasa debaigrammadag'i') su'wreti koncentrlik saqi'ynalar tu'rinde payda boli'p, olardi'n' intensivlikleri izertlenip ati'rg'an zatlti'n' qurami' haqqi'nda mag'li'wmatlardi' beredi.

Kristallar rentgenografiyası'ni'n' analizdin' fizikali'q tiykarları'

Rentgenostrukturali'q analiz zatlardi'n' atomli'q-molekulali'q quri'li'si'n izertlew usi'li' boli'p tabi'ladi'. Bul usi'lda kristalli'q denelerdin' atomli'q-kristalli'q quri'li'si'n izertlew tiykarı'nan rentgen nurlari'ni'n' usi'nday kristallarda difrakciyag'a ushi'rawi' paydalani'ladi'. Solay etip rentgenstrukturali'q analiz kristalli'q, amorf, suyi'q ha'm gaz ta'rezli denelerdegi rentgen tolqi'nları'ni'n' difrakciyasi'n paydalanyadi' eken.

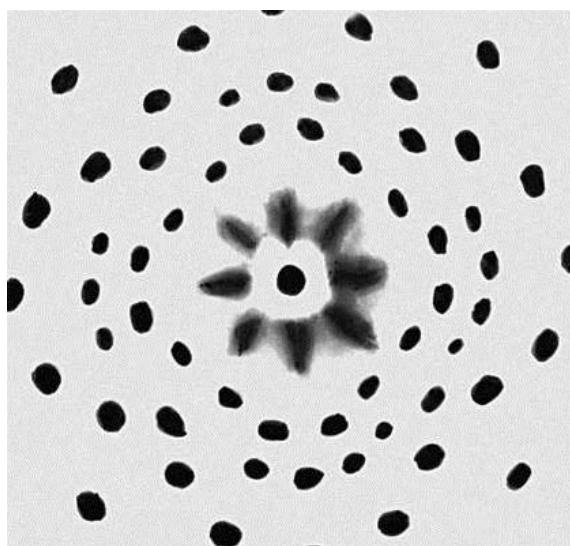
Rentgen nurları' 1995-ji'li' nemis fizigi Rentgen (nemissehe Wilhelm Conrad Röntgen) ta'repinen ashi'ldi'. Bul nurlardi'n' ta'biyati' belgisiz bolg'anlı'qtan olardi' da'slep X nurları' dep atadi' (rawajlang'an shet el ilimiyy a'debiyati'nda bul termin ha'zirge shekem paydalani'ladi'). Rentgen nurlari'ni'n' elektromagnit tolqi'nları'ni'n' bir tu'ri ekenligin tekserip ko'riw ushi'n M.Laue (von Laue M.) 1912-ji'li' o'zinin' qarawi'nda islewshi ilimiyy xi'zmetkerler Fridrix (Friedrich W.) ha'm Knippingke (Knipping P.) sol nurlardi' kristallar arqali' o'tkerip, ali'ng'an na'tiyjelerdin' qanday bolatug'i'nli'g'i'n tekserip ko'riwdi usi'ndi' [1]. Ta'jiriyebe ku'tilgendet na'tiyjelerdi berdi. Bul ta'jiriyebe'nden' tiykarı'nda a'dettegi optika kursı'nan belgili bolg'an difrakciya qubi'li'si' menen analogiya jatqan edi. Eger jaqtı'li'q da'stesi bir birinen jaqtı'li'q tolqi'nları'ni'n' uzi'nli'g'i'nday qashi'qli'qlarda jaylasqan san'laqlar arqali' o'tse ekranda jaqtı'li' ha'm qaran'g'i' oblastlardi'n' izbe-izliginen ibarat bolg'an interferenciyalı'q (biz «interferenciyalı'q» ha'm «difrakciyalı'q» so'zlerin bir ma'niste qollanamı'z) su'wret ali'nadi'. Rentgen nurları' jag'dayı'nda olardi'n' tolqi'n uzi'nli'qları' kristaldag'i' atomlar arası'ndag'i' qashi'qli'qlar menen birdey. Sonlı'qtan kristalli'q denelerge rentgen tolqi'nları' kelip tu'skende fotoplastinkada difrakciyalı'q su'wret payda boladı'.



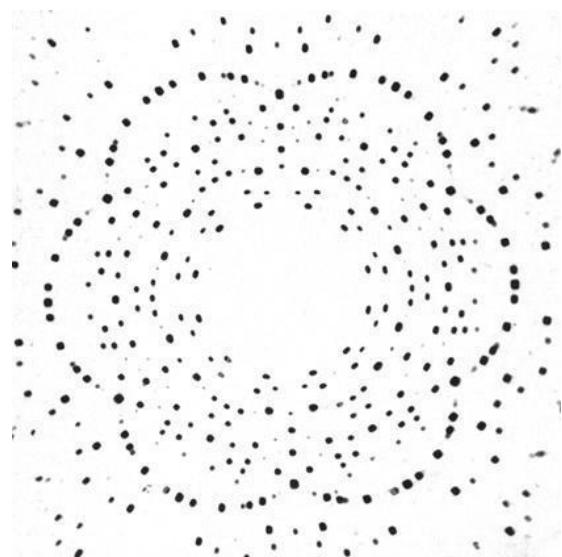
1-su'wret.

Rentgen nurlari'ni'n' kristalli'q denelerdegi difrakciyası' qubi'li'si'ni'n' ma'nisin tu'sindiriwge arnalg'an sxema.

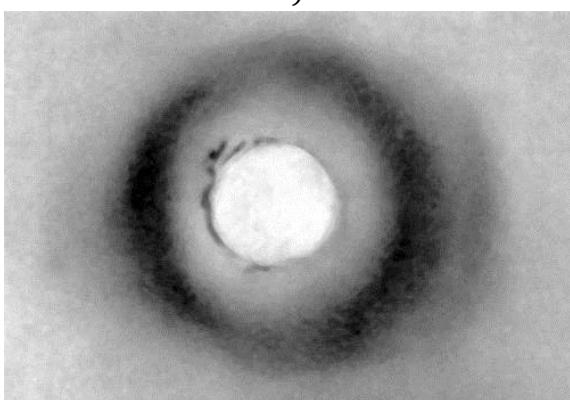
Difrakciya qubi'li'si'ni'n' fizikali'q ma'nisi 1-su'wrette berilgen. Bul jerde shashi'rati'wshi' oraylar qatari'na kelip tu'siwshi tegis tolqi'nlar sa'wlelengen. Kelip tu'siwshi tolqi'nlardi'n' ta'sirinde usi'nday ha'r bir oray o'zinen sferali'q tolqi'nlardi' nurlandi'radi', bul nurlar bir biri menen interferenciyanadi', na'tiyjede tek kelip tu'siwshi tolqi'nni'n' bag'i'ti'nda emes, al basqa bag'i'tlarda da tarqalatug'i'n tolqi'n frontlari' payda boladi'. Laue difrakciyası' (lauegramma) dep atalatug'i'n difrakciyali'q su'wret juqa kristalli'q plastinka arqali' rentgen nurlari' o'tkende payda boladi'. Lauegrammalarg'a mi'sallar 2-su'wrette berilgen.



a)



b)



c)

2-cu'wret.

NaCl ha'm beril kristallari'ni'n' a) ha'm b), suwdi'n' lauegrammalari'.

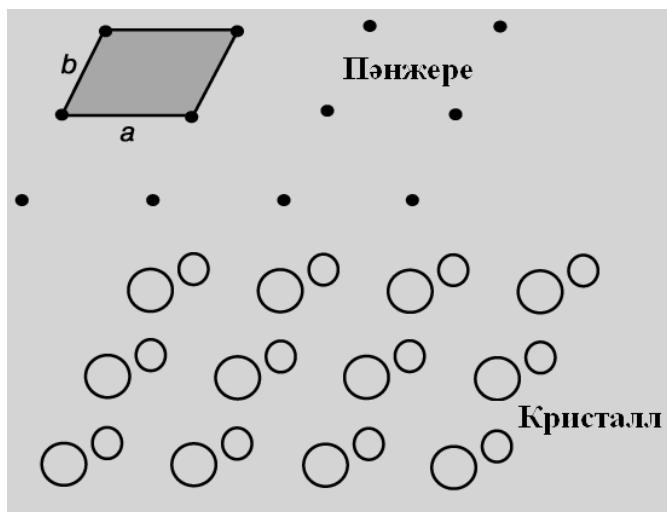
Berill kristalli'nan ali'ng'an [berill kristalli'ni'n' ximiyali'q formulasi' $Al_2Be_3(Si_{16}O_{18})$ geksagonalli'q kristallar qatari'na kiredi, simmetriyasi'ni'n' noqatli'q topari' 6/mmm (6/m 2/m 2/m), simmetriyasi'ni'n' ken'isliktegi topari' P6/mcc (P6/m 2/c 2/c), kristalli'q pa'njererin' turaqli'lari' $a = 9.21\text{\AA}$ ha'm $c = 9.19\text{\AA}$] lauegrammada alti'nshi' ta'rtipli simmetriya ko'sheri ani'q ko'rinedi. Usi' tiykarda rentgendifrakciyalı'q su'wret kristaldi'n' quri'li'si' haqqi'nda a'hmiyetli mag'li'wmatlarga iye boladi' dep ayta alami'z. Bul qubi'li's 1912-1913 ji'llari' a'keli-balali' U. Bregg ha'm U. Breggler (balasi' William Lawrence Bragg, a'kesi William Henry Bragg) ta'repinen muqi'yatlı' tu'rde izertlendi [2]. Usi'ni'n' na'tiyjesinde olar kristallardi'n' rentgenstrukturalı'q analizinin' bahali' eksperimentalli'q metodi'n islep shi'qtı'. Olardi'n' jumi'slari' ha'zirgi zaman rentgenstrukturalı'q analizinin' rawajlani'wi'ni'n' baslamasi' boli'p tabi'ladi'. Kompyuterler menen birgelikte isleytug'i'n jan'a rentgen a'sbap-u'skeneleri ushi'n quramali' kristallardag'i' atomlardı'n' koordinataları'ni' ani'qlaw jumi'slari' a'dettegi jumi'slarg'a aylandı'.

Rentgenstrukturalı'q analizdin' ja'rdeminde kristallardi'n' quri'li'si' haqqi'nda qanday informaciyalardi' ali'w mu'mkin degen soraw beriledi. Rentgen nurlari' elekromagnit nurlari' boli'p, bul nurlardi'n' elektr maydanları' denelerdegi atomlar ha'm elektronlar menen ta'sirlesiwdi. Elektronlardi'n' massalari' atomlardı'n' massalari'nan a'dewir kishi bolg'anli'qtan rentgen nurlari' elektronlarda effektivli tu'rde shashi'raydi'. Solay etip rentgenogramma elektronlardi'n' tarqali'wi' haqqi'nda mag'li'wmatlardi' beredi. Nurlani'w difrakciyag'a ushi'rag'an bag'i'tlari' bilip kristaldi'n' simmetriyasi'ni'n' tipin yamasa kristalli'q klassı', soni'n' menen birge kristalli'q pa'njere turaqli'lari'ni'n' ma'nislerin o'lshew mu'mkin. Difrakciyalı'q maksimumlardı'n' sali'sti'rmali' intensivlikleri boyi'nsha elementar kuti'shalardag'i' atomlardı'n' koordinataları'ni' (iyelegen ori'nlari'n) ani'qlaw mu'mkin.

O'zinin' fizikali'q mag'anasi' boyi'nsha difrakciyalı'q su'wret kristaldag'i' elektronlardi'n' tarqali'wi'ni'n' matematikali'q jaqtan qaytadan tu'r lendirilgen su'wreti, yag'ni'y fure-obrazi' boli'p tabi'ladi'. Demek difrakciyalı'q su'wret atomlar arasi'ndag'i' ximiyali'q baylani'slardi'n' quri'li'si' haqqi'nda da mag'li'wmatlarga iye degen so'z. Soni'n' menen birge bir difrakciyalı'q maksimumdag'i'intensivliktin' tarqali'wi' kristallitlerdlin' o'lshemleri, pa'njererin' defektleri, mexanikali'q kernewler ha'm kristalli'q quri'li'sti'n' basqa da o'zgeshelikleri haqqi'nda mag'li'wmatlarga iye boladi'.

2-§. Kristalli'q quri'li's ha'm difrakciya

Kristal bo'lekshelerdin' u'sh o'lshemli diskret da'wirli ko'lemlik sistemasi' boli'p tabi'ladi'. Makroskopiyali'q jaqtan bul jag'day kristaldi'n' bir tekliginde, olardi'n' qaptal ta'repleri arasi'ndag'i' mu'yeshlerdin' usi' kristal ushi'n ta'n ekenliginde, soni'n' menen birge ko'pshilik jag'daylarda kristalli'q denelerdin' belgili bir tegislik boyi'nsha si'natug'i'nli'g'i'nda ko'rinedi. Mikroskopiyali'q jaqtan kristaldi' kristalli'q pa'njere si'pati'nda ta'riyipley alami'z. Kristalli'q pa'njerede noqatlar (kristaldi' payda etiwshi bo'lekshelerdin' salmaq oraylari') sistemasi' da'wirli tu'rde qaytalanadi'. Bul da'wirlilik komplanar emes u'sh ko'sherli translyaciya ha'm olar arasi'ndag'i' u'sh mu'yesh penen xarakterlenedi. Kristal menen kristalli'q pa'njere sxema tu'rinde 3-su'wrette keltirilgen.

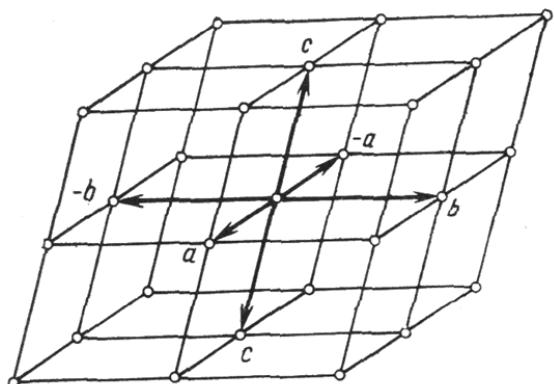


3-su'wret.

Kristal (to'mende) ha'm kristalli'q pa'njere (joqari'da).

Kristal ayqi'n atomlardan yamasa molekulalardan, al pa'njere bolsa noqatlardan (pa'njere tu'yinlerinen) turadi'.

Kristalli'q pa'njerede ali'ng'an translyaciyalı'q quti' ha'm translyaciylar da'stesi 4-su'wrette keltirilgen.



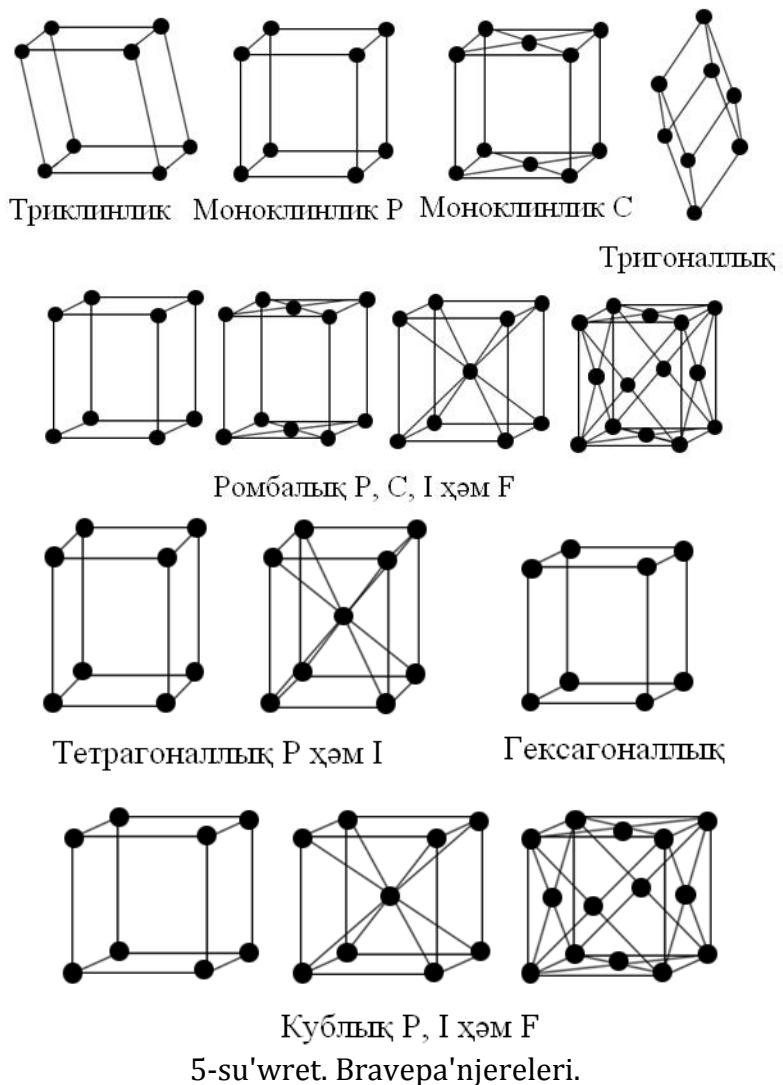
4-su'wret.

Translyaciyalı'q quti' ha'm translyaciylar da'stesi.

SHamasi' boyi'nsha bir birine ten' ha'm bir birine ten' emes translyaciyalardi', bir birine ten' ha'm ten' emes olar arasi'ndag'i' mu'yeshlerdi ayi'ri'p barli'q kristalli'q pa'njerelerdi jeti singoniyag'a to'mendegishe bo'liw mu'mkin:

Triklinlik	$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma, \alpha \neq \gamma$
Monoklinlik	$a \neq b \neq c, a \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$
Rombali'q	$a \neq b \neq c, a \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Trigonalli'q	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
Tatragonalli'q	$a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Geksagonalli'q	$a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
Kubli'q	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

Eger translyaciyalı'q simmetriyani' esapqa alatug'i'n bolsaq, onda 14 translyaciyalı'q topar payda boladi' ha'm olardi'n' ha'r biri Brave pa'njeresin payda etedi (5-su'wret)[4].



Brave pa'njereleri bir noqatti' translyaciyalı'q qaytalaw joli' menen ali'natug'i'n noqatlardi'n' sheksiz sistemasi' boli'p tabi'ladi'. Kristaldi'n' qa'legen quri'li'si' Bravenin' 14 pa'njeresinin' birinin' ja'rdeinde ko'rsetiliwi mu'mkin. Kristalli'q deneler kishi tezlikler menen payda bolg'anda ha'm o'skende iri monokristallar payda boladi'. Bunday monokristallar si'pati'nda minerallardı' keltiriwge boladi'. Kristallar u'lkenirek tezlikler menen o'skende polikristalli'q konglomerat payda boladi'. Bunday polikristalli'q konglomeratlarg'a metallar menen quymalar kiredi. Kristallarg'a ta'n bolg'an uzaqtan ta'sirlesiw (uzaqtan ta'rtiplesiw) amorf deneler menen suyi'qli'qlarg'a o'tkende jog'aladi'. Bunday denelerde (materiallarda) atomlar menen molekulalardi'n' jaylasi'wi'nda tez jaqi'nnan ta'rtiplesiw ori'n aladi'.

Brave pa'njeresindegi elementar quti'lardi'n' radiusi' vektori'n bi'layi'nsha jazi'wi'mi'z mu'mkin:

$$R = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3.$$

Bul formulada a_1, a_2 ha'm a_3 arqali' kristalli'q pa'njeredege translyaciyalı'r, ал n_1, n_2 ha'm n_3 arqali' pu'tin sanlar belgilengen. Bul pu'tin sanlardı'n' ma'nisi ushi'n shek qoyi'lmag'i'n. Sonli'qtan biz elementar quti'lardi'n' sani'ni'n' sheksiz ko'p bolatug'i'nli'g'i'n atap o'temiz.

Rentgenstrukturalı'q analizdin' artı'qmashli'g'i' oni'n' joqari' saylap ali'wshi'li'g'i'nda. Eger monoxromat rentgen nurları'ni'n' da'stesi monokristalg'a qa'legen bag'i'tta tu'setug'i'n bolsa, onda tap sol bag'i'ttag'i' kristaldan shi'g'i'wshi'da steni de baqlawg'a boladi'. Bul da'stedifrakciyag'a ushi'rag'an da'ste emes. Difrakciyag'a ushi'rag'an da'steler

kristallografiyali'q ko'sherlerge ha'm kelip tu'siwshi rentgen nurlari' da'stesinin' bag'i'ti'na sali'sti'rg'anda diskret ma'nistegi belgili bir mu'yeshlerge buri'lg'an boladi'. Bul sha'rt kristallar rentgenografiyasi'ndag'i' aylani'w usi'li'ni'n' tiykari'nda jatadi'. Bul usi'lida kristal belgili bir ko'sherdin' do'gereginde aylani'sta boladi' ha'm difrakciya qubi'li'si' baqlanatug'i'n bag'i'tlar da'l ani'qlanadi'.

Basqa rentgenografiyali'q eksperimentlerde untalg'an kristallar yamasa polikristallar paydalani'ladi'. Bul usi'l Debay-SHerer usi'li' dep ataladi' (bir qatar jag'daylarda Debay usi'li' dep te ataladi'). Bunday eksperimentlerde ayi'ri'm kristallitlerdin' orientaciyalari'ni'n' u'zliksiz spektrine iye bolami'z. Biraq baqlani'wi' mu'mkin bolg'an intensivli difrakciyali'q da'stelerdii belgili bag'i'tlarg'a iye kristallitler beredi. Untalg'an kristallar (polikristallar) usi'li' iri monokristallardi'o'siriwdi talap etpeydi ha'm sonli'qtan Laue ha'm aylani'w usi'llari'ni'n' aldi'nda geypara arti'qmashli'qlarg'a iye boladi'. Laue usi'li'nda monokristal ha'm rentgen nurlari'ni'n' u'zliksiz spektri qollani'ladi'. Usi'ni'n' saldari'nan kristaldi'n' o'zi difrakciyali'q su'wrettin' payda boli'wi' ushi'n za'ru'rli bolg'an tolqi'n uzi'nli'qlari'n saylap aladi'.

Solay etip rentgenstrukturali'q analizdin' tiykarg'i' formulasi' Vulf-Bregg ten'lemesi boli'p tabi'ladi' [5]:

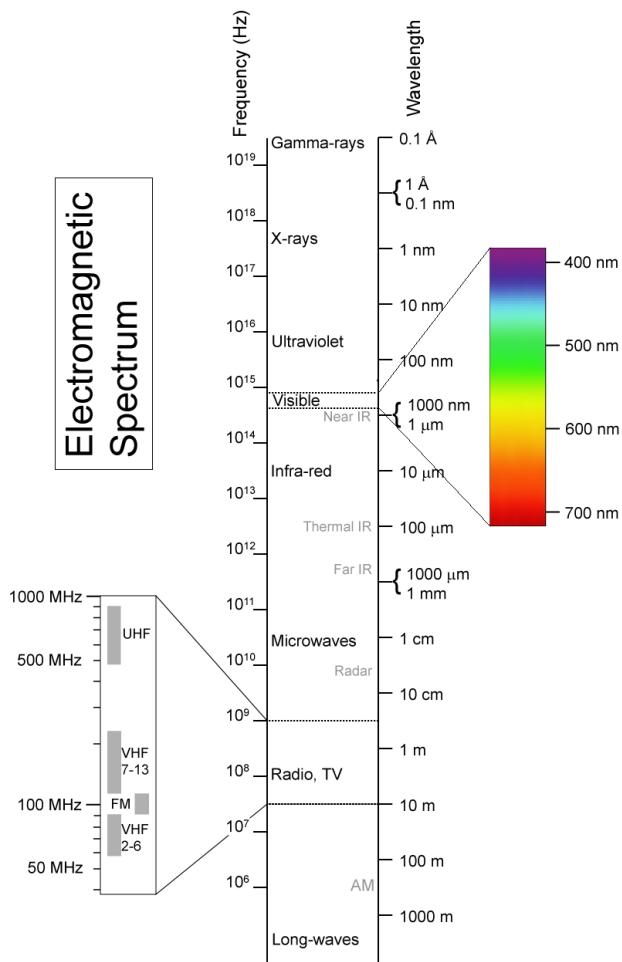
$$2d \sin \theta = n\lambda. \quad (1)$$

Bul formulada d arqali' kristallografiyali'q tegislikler arasi'ndag'i' qashi'qli'q, θ arqali' difrakciyali'q mu'yesh, al λ arqali' rentgen tolqi'nлari' ushi'n tolqi'n uzi'nli'g'i' belgilengen. Rentgenografiyali'q usi'llarda sol u'sh fizikali'q shamalardi'n' birewi turaqli' etip ali'nadi'. 1-keste.

Turaqli' shama	O'zgermeli shamalar	Rentgenografiyali'q usi'l
θ	$d \text{ ha}'m \theta$ (d shamasini'n' har bir ma'nisine ani'q λ sa'ykes keledi)	Laue usi'li'
d	$\theta \text{ ha}'m \lambda$	Debay-SHerer usi'li'.
λ	$\theta \text{ ha}'m d$	Aylani'w (terbeliw) usi'li'.

Polixromat rentgen nurlani'wi' Laue usi'li'nda difrakciyali'q su'wretti beredi (λ shamasini o'zgermeli). Debay-SHerer usi'li'nda u'zliksiz polixromat nurlani'w rentgenogrammada fon payda etedi, al aylani'w (terbeliw) usi'li'nda bolsa θ difrakciyali'q mu'yeshinin' o'zgeriwi bag'i'ti'nda reflekslerdi sozadi'. Sonli'qtan Debay-SHerer ha'm aylani'w (terbeliw) usi'llari'nda monoxromat rentgen nurlari'n paydalani'w maqsetke sa'ykes keledi.

Rentgenstrukturali'q analiz qatt'i' denelerdi atomlarqa'ddindeu'yreniwdin' eski usi'llari'ni'n' biri bolsa da (rentgenstrukturali'q analizdin' payda bolg'ani'na derlik 100 ji'l bolg'anli'g'i'n eske ali'p o'temiz) oni'n' usi'llari' rawajlanip ha'm jetilisip ati'r. Mi'sali' ha'zirgi waqi'tlari' rentgenstrukturali'q analiz rentgen nurlari'ni'n' quwatli' dereklerinin' biri bolg'an sinxrotronli'q nurlani'wdi' paydalanbaqta. Sinxrotron bolsa elektronlardı' ju'da' u'lken tezliklerge shekem tezletiwshi tezletkish boli'p tabi'ladi'. Bunday u'skene a'dette yadroli'q fizikada qollani'ladi'. Elektronlar ultrafioletten rentgen nurlari'na shekemgi diapazonda elektromagnit nurlani'w payda etedi. Bul quwatli' (u'lken intensivlikke iye) nurlani'wdi'n' ja'rdeminde qatt'i' denelerdin' quri'li'si' boyi'nsha ko'p sanli' mag'li'wmatlardi' ali'w mu'mkin [6].



6-su'wret.

Rentgen nurlari'ni'n' elektromagnit tolqi'nlar spektrinde iyelegen orni' (Internettarmag'i'ndag'i' Vikipediya universalli'q enciklopediyasi'nan ali'ng'an su'wret).

Rentgen nurlari'ni'n' elektromagnit tolqi'nlar spektrindegi iyelegen orni' 6-su'wrette keltirilgen.

3-§. Rentgen nurlari'ni'n' zatlar menen ta'sirlesivi

Zatlar arqali' o'tkende rentgen nurlari'ni'n' bir bo'limi qanday da bir da'rejede zatlarda juti'ladi'. Ekinshi bo'limi zatlar arqali' o'tedi. Juti/lg'an rentgen nurlari'ni'n' mug'dari' zatlardi'n' qali'n'li'g'i'na, rentgen nurlari'ni'n' tolqi'n uzi'nli'g'i'na ha'm zatlardi'n' juti'wshi'li'q qa'siyetlerine baylani'sli'. Rentgen nurlari' zatlar arqali' o'tkende to'mendegidey eki processke baylani'sli' o'zinin' energiyasi'n jog'altadi' (ha'lsireydi yamasa intensivligi kemeyedi):

1. Haqi'yqi'y juti'li'w. Bunday jag'dayda rentgen nurlari' fotonlari'ni'n' energiyalari' energiyani'n' basqa tu'rlerine aylanadi';
2. Rentgen nurlari'ni'n' zatlardag'i' shashi'rawi'. Bunday jag'dayda zatqa kelip tu'siwshi rentgen nurlari'ni'n' tarqali'w bag'i'ti' o'zgeredi.

Nurlardi' juti'wshi' zatlardag'i' bir tekli nurlardi'n' ha'lsirewin sanli' tu'rde ani'klaytug'ni' ni'zamdi' bi'layi'nsha keltirip shi'g'ari'w mu'mkin: bir tekli zatti'n' birdey qali'n'li'qlari'nda nurlani'wdi'n' birdey mug'dardag'i' energiyalari' juti'ladi'. Eger zatqa kelip tu'siwshi nurlardi'n' intensivligin I_0 arqali' belgilesek, al qali'n'li'g'i' t bolg'an plastinka (qali'n'ldi'q) arqali' o'tken nурdi'n' intensivligin I_t arqali' belgilesek, onda biz izlep ati'rg'an ni'zamdi' bi'layi'nsha jaza alami'z:

$$dI \sim -I_0 dx,$$

$$dI = -\mu I_0 dx,$$

$$\frac{dI}{I_0} = -\mu dx,$$

$$-\int_{I_0}^{I_t} \frac{dI}{I} = \mu \int_0^t dx, I_t = I_0 e^{-\mu t}$$

Bul an'latpalarda μ arqali' juti'wshi' denenin' fizikali'q qa'siyetlerinen g'a'rezli bolg'an proporcionalli'q koefficient belgilengen. Oni'n' sanli'q ma'nisi $\mu = \ln\left(\frac{I_0}{I_{t=1}}\right)$ shaması'na (nurlar bir birlilik qali'n'li'q arqali' o'tkende intensivliginin' sali'sti'rmali' o'zgerisinin' logarifmine) ten'. Rentgenografiyada μ koefficientin ha'lşirewdin' nurlardi' juti'wdi'n' toli'q si'zi'qli'q koefficienti yamasa zatti'n' massali'q juti'w koefficienti dep ataydi'. Si'zi'qli' juti'li'w koefficienti μ_0 shaması'na ten' (ρ arqali' zatti'n' ti'g'i'zli'g'i' belgilengen).

Ayi'ri'm zatlardi'n' massali'q juti'li'w koefficientlerinin' ma'nisleri to'mendegi kestede berilgen.

Keste. Ayi'ri'm massali'q juti'li'w koefficientlerinin' ma'nisleri $\left(\frac{\mu}{\rho}\right)$

Element	Tolqi'n uzi'nli'g'i', Å						
	0,200	0,498	0,632 <i>Mo 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	

5-§. Rentgenstrukturali'q analiz usi'llari'

Rentgenstrukturali'q analizde tiykari'nan to'mendegi usi'llar qollani'ladi':

1. Laue usi'li'. Bul usi'lda polixromat rentgen nurlari' da'stesi qozg'almaytug'i'n monokristal u'lgiye kelip tu'sedi. U'lginin' o'lshemleri a'dette 1-2 mm den u'lken bolmawi' kerek. Difrakciyalı'q su'wret qozg'almaytug'i'n fotoplenkadatu'siriledi. Laue kamerası' 7-a su'wrette keltirilgen.

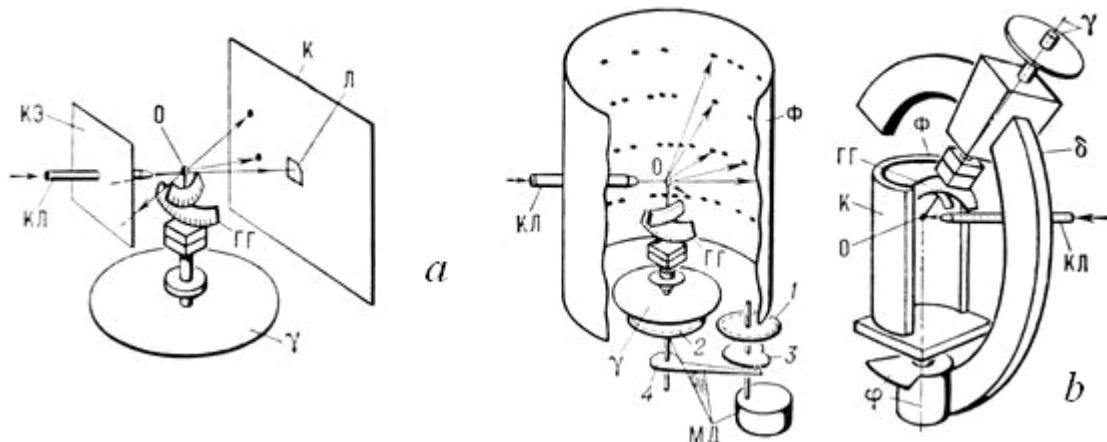
2. Aylani'w (terbeliw) usi'li'. Monoxromat rentgen nurlari' da'stesi bazi' bir kristallografiyalı'q ko'sher do'gereginde aylani'wshi' (yamasa terbeliwshi) kristalg'a kelip tu'sedi. Sol kristallografiyalı'q bag'i't kamerani'n' aylani'w (terbeliw) bag'i'ti'na da'l parallel etip ali'nadi'. Difrakciyalı'q su'wret cilindr ta'rizli qozg'almaytug'i'n fotoplenkada ali'nadi'. Ayi'ri'm jag'daylarda fotoplenka u'lgi menen sinxronli' ra'wishte aylani's jasaydi'; aylani'w usi'li'ni'n' bunday tu'rinqatlamli'q si'zi'qlardi' tu'sirip ali'w usi'li' dep ataydi' (7-b su'wret).

Aylani'w usi'li'nda monoxromat rentgen nurlari' emes, al a'dette polixromat rentgen nurlari' paydalani'ladi' (sebebi intensivli monoxromat rentgen nurlari'n ali'w an'sat emes). Fotoplenkadag'i' difrakciyalı'q su'wret bolsa tiykari'nan xarakteristikali'q nurlani'wdi'n' esabi'nan qa'liplesedi. Al u'zliksiz spektr bolsa rentgen reflekslerinin' a'tirapi'nda belgili bir bag'i'tlardag'i' fondi' payda etedi.

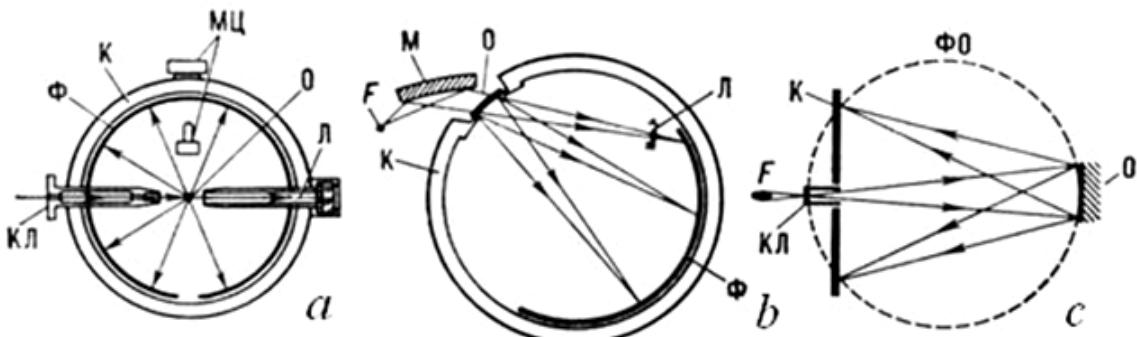
3. Untalg'an kristallar (yamasa polikristallar) usi'li' (Debay-SHerer usi'li'). Bul usi'lda da monoxromat rentgen nurlari'n paydalani'w kerek. Izertlenetug'i'n u'lgi polikristal yamasa untalg'an kristal boli'p tabi'ladi'. Untalg'an kristaldi' shiyshe iynäge rentgen nurlari'n kem shashi'ratatug'i'n jeliminin' ja'rdeminde jabi'sti'radi'.

Laue usi'li'.Bul usi'l kristallardi'n' atomli'q-kristalli'q quri'li'si'n izertlewdin' en' baslang'i'sh etapi'nda qollani'ladi'. Laue usi'li'n'i'n' ja'rdeminde kristallardi'n' singoniyasi' ha'm Laue klassi' ani'qlanadi'. Fridel ni'zami' (FriedelBijvoetmates, qaran'i'z [http://en.wikipedia.org /wiki/Laue_diffraction#Friedel_and_Bijvoet_mates](http://en.wikipedia.org/wiki/Laue_diffraction#Friedel_and_Bijvoet_mates)) boyi'nsha lauegramma (barli'q rentgenogramma) ja'rdeminde kristallardag'i' simmetriya orayi'ni'n' joq ekenligin ani'qlawg'a bolmaydi' (barli'q rentgenogrammalarda simmetriya orayi' ori'n aladi'). Sonli'qtan 32 noqatli'q toparg'a simmetriya orayi'n qosи'w olardi'n' sani'n 11 ge shekem kemeytedi. Sonli'qtan 11 Laue klassi' bar dep esaplaydi'.

Laue usi'li' monokristallardi', polidomenli kristallardi' ha'm iri kristallitlik u'lgilerdi izertlew ushi'n qollani'ladi'. Joqari'da ayti'li'p o'tilgenindey bul usi'lda qozg'almaytug'i'n kristalli'q u'lgige diametri 1-2 mm bolg'an u'zliksiz spektrge iye polixromat rentgen nuri' kelip tu'sedi.



7-su'wret. Monokristallardi' izertlew ushi'n arnalg'an rentgen kameraları'ni'n' tiykarg'i' sxemalari': *a*—Laue usi'li' menen qozg'almaytug'i'n kristallardi' izertlew kamerası'; *b* — aylani'w (terbeliw) kamerası'. Fotoplenkada qatlamlı'q si'zi'qlardi'n' boyi'nda jaylasqan difrakciyalı'q maksimumlar ko'rinishi tur; eger toli'q aylani'wdi' belgili bir mu'yeshlik intervaldag'i' terbeliw menen almasti'rsaq (aylanı'w usi'li'nda izertlenetug'i'n kristal kamera ko'sheri do'geregide aylani'sta boladi' ha'm ekspozisiya bari'si'nda bir neshe ret aylani'p shi'g'adi', al terbeliw usi'li'nda kristal ekspozisiya bari'si'nda kamera ko'sheri do'geregide belgili bir mu'yeshlik intervalda g'ana aldi'g'a ha'm keyinge bir neshe ret buri'ladi'), onda terbeliw intervali'ni'n' ma'nisine baylani'sli' qatlamlı'q si'zi'qlardag'i' refleksler sani' kemeyedi. U'lginin' aylani'wi' 1- ha'm 2-tislerdin' ja'rdeminde a'melge asi'ri'ladi', terbelis bolsa 3 penen 4-ri'shang ja'rdeminde ju'zege keledi. *c* — elementar quiti'ni'n' formalari'n ha'm o'lshemlerin ani'qlaw kamerası'. O — u'lgi; GG — u'lgi ornalasti'ri'latug'i'n goniometrlik du'zilis; γ — limb ha'm u'lgi ornalasti'ri'latug'i'n goniometrlik du'zilistin' buri'li'w ko'sheri; KL — kollimator; K bolsa F fotoplenkasi' bar kasseta; KE arqali' epigramma tu'siriw ushi'n arnalg'an fotokasseta ko'rsetilgen (keri bag'i'tta su'wretke ali'w); MD arqali' u'lginin' aylandi'ratug'i'n yamasa terbeletug'i'n mexanizm ko'rsetilgen.; φ — limb ha'm u'lginin' terbelis ko'sheri; δ — goniometrlik du'zilistin' ko'sherin dog'a tu'rindagi bag'i'tlag'i'sh.

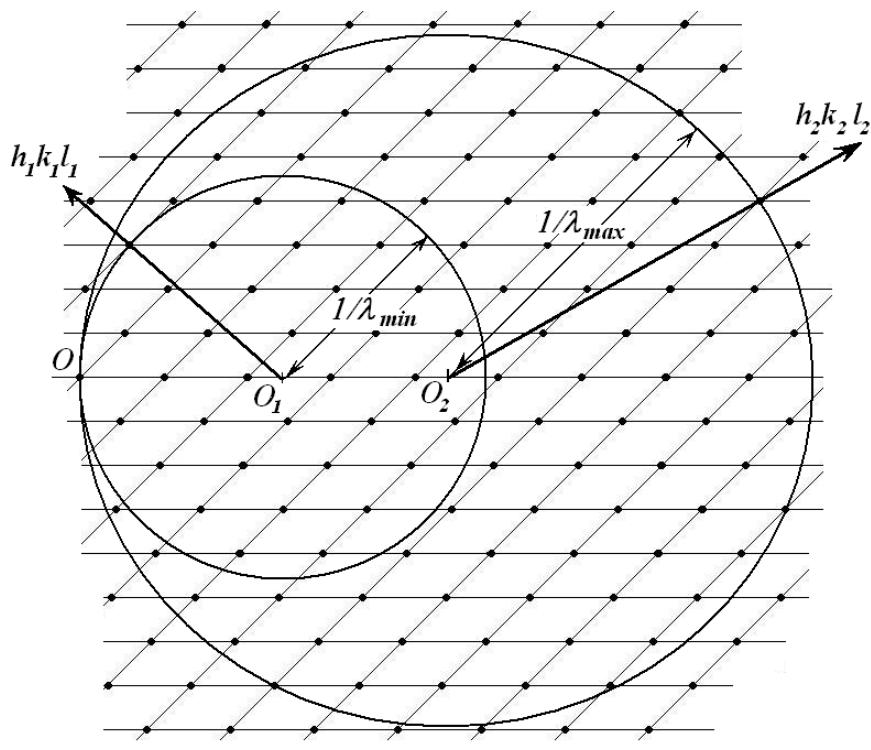


8-su'wret. Polikristallardi' (yamasa untalg'an kristallardi') izertlew ushi'n arnalg'an rentgen kameralari ni'n tiykarg'i' sxemalari': a — Debay kamerasi'; b — iymeytilgen kristall-monoxromator'a iye fokuslawshi' kamera, bul kamera izertlenetug'i'n u'lgi arqali' o'tiwhi nurlarda, yag'ni'y kishi difrakciyalı'q mu'yeshlerde isleydi; c — keri bag'i'tta (u'lken difrakciyalı'q mu'yeshler) tegis kassetada su'wret alatug'i'n fokuslawshi' kamera.

Strelkalar ja'rdeinde u'lgi tuwri' kelip tu'setug'i'n ha'm difrakciyag'a ushi'rag'an nurlardi'n' bag'i'tlari' ko'rsetilgen. O — u'lgi; F — rentgen trubkasi ni'n' fokusi'; M — kristall-monoxromator; K — fotoplenkasi' bar kasseta; L — paydalani'lmag'an rentgen nuri'n uslap qali'wshi'; FO — fokuslanı'w shen'beri (difrakciyalı'q maksimumlar jaylasatug'i'n shen'ber); KL — kollimator; MC — u'lginı orayg'a ali'p keliwge ja'rde beretug'i'n mexanizm.

Rentgen trubkasi'nan shi'qqan en' kishi tolqi'n uzi'nli'g'i' trubkadag'i' anod penen katod arasi'na tu'sken kernewdin' ma'nisin g'a'rezli. Haqi'yqati'nda da $eU = h\nu = \hbar\omega = 2\pi\hbar\frac{c}{\lambda}$. Bul formulada e arqali' elektronni'n' zaryadi', U arqali' anodli'q kernewdin' ma'nisi, h arqali' Plank turaqli'si' ($h = 2\pi\hbar$), ν arqali' rentgen tolqi'n'i'n'i' jiyiliği, ω arkali' tolqi'nni'n' ciklikli jiyiliği, carqali' jaqtılı'qti'n' vakuumdegi tezligi, al λ arqali' rentgen tolqi'n'i'n'i' tolqi'n' uzi'nli'g'i' belgilengen. Bunnan λ menen U arasi'ndag'i' baylani'sti' an'sat tabami'z: $\lambda = \frac{2\pi\hbar c}{eU}$. Eger biz anodli'q kernewdi kilovoltlerde beretug'i'n, al tolqi'n uzi'nli'g'i' angstromlerde esaplaytug'i'n bolsaq, onda ken'nen ma'lim bolg'an $\lambda_{min} = \frac{12,3}{U}$ formulasi'na iye bolami'z. Bunday jag'dayda anod kernewinin' ma'nisi 36 kilovolt bolg'anda (mi's anodi' bar rentgen trubkasi'nda usi'nday kernewde islew usi'ni'ladi') $\lambda_{min} = 0,344 \text{ \AA}$ shamasi'na iye bolami'z. Difrakciyalı'q su'wretti payda etiwge qatnasatug'i'n rentgen tolqi'n'i'n'i' maksimalli'q uzi'nli'g'i' tabi'w ushi'n qa'ddi fonni'n' qa'dinen keminde 5-10 % joqari' bolg'an tolqi'nni'n' uzi'nli'g'i' n alami'z. Mi's anodi' (antikatodi') ushi'n bul tolqi'nni'n' uzi'nli'g'i' shama menen 3 angstromnen u'lken emes. Usi'g'an baylani'sli' mi's anodi'nda payda bolg'an (qozg'an) u'zliksiz rentgen spektrinde lauegrammalardi' payda etiw ushi'n uzi'nli'g'i' shama menen 0,3 angstromnen 3 angstromge shekemgi uzi'nli'qtag'i' rentgen tolqi'n'lari' qatnasadi' dep esaplaymi'z. $\lambda_{max} - \lambda_{min}$ spektrine radiuslari' $\frac{1}{\lambda_{min}}$ shamasi'nan $\frac{1}{\lambda_{max}}$ shamasi'na shekemgi Evald sferalari' (Ewald's sphere, qaran'i'z http://en.wikipedia.org/wiki/Ewald%27s_sphere) arasi'nda jaylasqan keri pa'njere tu'yinleri qatnasadi'. Bul jag'day 8-su'wrette keltirilgen.

Qi'zi'g'i' sonnan ibarat, lauegrammada payda bolg'an reflekslerdin' sani' $\lambda_{max} - \lambda_{min}$ ayi'rmasi'nan g'a'rezli. Usi' g'a'rezliliktiayki'nlasti'ri'w ushi'n kompyuterdin' ja'rdeinde Delphi programmali'q tilinde teoriyalı'q lauegrammalar seriyasi' du'zildi. 10-asu'wrette $\lambda_{min} = 0,36 \text{ \AA}$ ha'm $\lambda_{max} = 3 \text{ \AA}$. 10- b su'wrette bolsa $\lambda_{min} = 0,036 \text{ \AA}$ ha'm $\lambda_{max} = 30 \text{ \AA}$. Bul su'wretlerde $\lambda_{max} - \lambda_{min}$ ayi'rmasi'ni'n' lauegrammalardi'n' reflekslerinin' payda boli'wi'na qanday ta'sirin tiygizetug'i'nli'g'i' ani'q ko'rinipli tur.



9-su'wret.

Lauegrammani'n' payda boli'wi'n sa'wlelendiretug'i'n sxema. Fotoplenkadag'i' difrakciyali'q daqlardi' radiuslari' $1/\lambda_{\min}$ ha'm $1/\lambda_{\max}$ bolg'an Evald sferalari' arasi'nda jaylasqan keri pa'njererin' tu'yinleri beredi. Vulf-Bregg sha'rtinin' ori'nlanı'wi' ushi'n keri pa'njererin' tu'yininin' Evald sferasi'ni'n' beti menen kesilisiwi kerek. Sonli'qtan ha'r bir tu'yin ushi'n belgili bir radiusqa iye (yag'ni'y belgili bir toqi'n uzi'nli'g'i'na sa'ykes keliwshi) Evald sferasi' sa'ykes keledi. Demek ha'm bir d (kristallografiyali'q tegislikler arasi'ndag'i' kashi'qli'q) o'zine sa'ykes tolqi'n uzi'nli'g'i'n saylap aladi' degen so'z (1-kesteni qaran'i'z). Soni'n' menen birge indeksleri hkl , $2h2k2l$, $3h3k3l$, ...bolg'an bir tu'yinler tuwri'si'ni'n' boyi'nsha jaylasqan tu'yinler ushi'n difrakciyali'q mu'yesh θ ni'n' ma'nisleri birdey boladi' ha'm olardi'n' barli'g'i' da fotoplenkani'n' bir noqati'nda difrakciyali'q daq payda etedi. Sonli'qtan lauegrammalardag'i' rentgen refleksleri «ren'li» boli'wi' kerek (yag'ni'y bir refleksti payda etiw ushi'n ha'r qi'yli' uzi'nli'qtag'i' tolqi'nlar qatnasadi').

Lauegrammalar tu'siriw ushi'n Laue kamerasi' (RKS0 kamerasi') paydalani'ladi'. RKS0 kamerasi'ni'n' fotosu'wreti 7-su'wrette keltirilgen.

Aylani'w (terbeliw) usi'li'. Bul usi'll kristallardi'n' atomli'q-kristalli'q quri'li'si'n ani'qlawdag'i' tiykarg'i' usi'llardi'n' biri boli'p tabi'ladi'. Aylani'w (terbeliw) usi'li'ni'n' ja'rdeinde elementar quти'ni'n' o'lshemlerin, bir quти'g'a sa'ykes keliwshi atomlardı'n' yamasa molekulalardi'n' sani'n, rentgen nurları'ni'n' o'shiw ni'zamları'n ani'qlap, kristallardi'n' simmetriyasi'ni'n' ken'isliktegi topari'n anı'qlawg'a shekemgi ma'seleler sheshiledi. Soni'n' menen bir qatarda bul usi'ldi'n' ja'rdeinde kristallardag'i' strukturalı'q domenlerdin' quri'li'si', strukturalı'q domenler arasi'ndag'i' orientaciyalı'q qatnastalar, qattı' denelerdegi fazali'q o'tiwlerdi izertlew mu'mkin [9-12].

*a**b*

10-su'wret. Lauegrammadag'i' refleksler sani'ni'n' ha'm olardi'n' intensivliliginin' λ_{max} – λ_{min} ayi'rmasi'nan g'a'rezli ekenligin illyustraciyalawshi' esaplaw joli' menen ali'ng'an su'wretler. *a* su'wrette $\lambda_{min} = 0,36 \text{ \AA}$ ha'm $\lambda_{max} = 3 \text{ \AA}$. *b* su'wrette $\lambda_{min} = 0,036 \text{ \AA}$ ha'm $\lambda_{max} = 30 \text{ \AA}$.

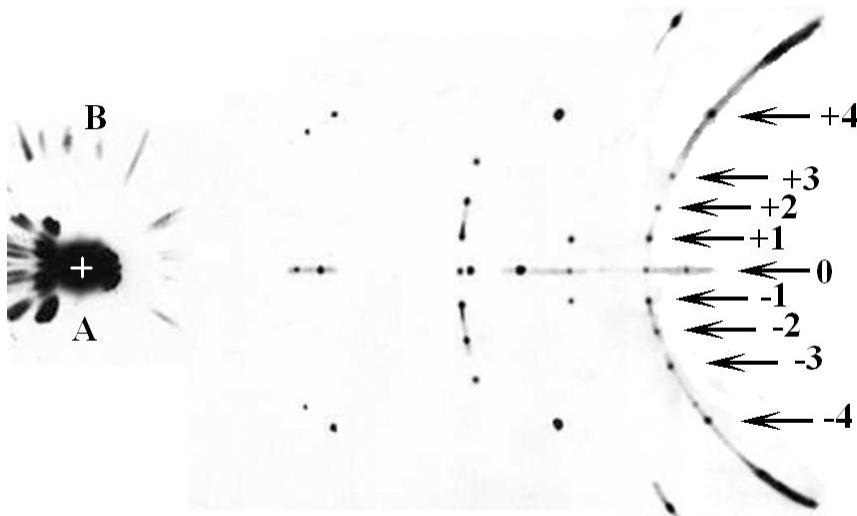
Rentgenogrammalardi' aylani'w (terbelis) usi'li' menen tu'sirgende kristal belgili bir kristallografiyali'q bag'i't a'tirapi'nda aylandi'ri'ladi' yamasa belgili bir mu'yesh intervali'nda mu'yeshlik skannerlenedi (mi'sali' rentgen kamerasi'nda 210 gradustan 225 gradus arali'g'i'nda arman-berman buri'ladi'). Kristalg'a monoxromat rentgen nurlari' yamasa polixromat rentgen nurlari' tu'siriledi. Rentgenogrammalardag'i' dirfakciyali'q refleksler (daqlar) xaraktristikali'q rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' saldari'nan ali'nadi'.

Rentgen trubkasi'nan shi'qqan (trubkani'n' fokusi'ni'n' noqatli'q bolg'ani' maqsetke muwapi'q keledi) rentgen nurlari' uzi'n kollimator arqali' izertlenetug'i'n kristalg'a kelip tu'sedi. Kollimatordi'n' eki ushi'nda diametri 0,5-22 millimetrluk do'n'gelek tesikler boli'p, bul tesikler kristalli'q u'glige do'n'gelek formadag'i' rentgen nuri'ni'n' tu'siwin ta'miynileydi. Aylani'w (terbeliw) rentgenogrammalari'n almastan buri'n goniometrlik du'ziliske ornalasti'ri'lg'an u'lgi Laue usi'li'ni'n' ja'rdeinde qatan' tu'rde bag'i'tlanadi'. Usi'nday aldi'n-ala o'tkerilgen operacyilar kristaldi'n' [100], [010], [001] yamasa basqa da bizin' ushi'n maqsetke muwapi'q bolg'an bag'i'tlari'n rentgen kamerasi'ni'n' aylani'w (terbeliw) ko'sherine da'l parallel etip qoyi'wg'a mu'mkinshilik beredi. Aylani'w rentgenogrammalari' a'dette diametri 86,6 mm bolg'an cilindr forması'na iye fotokasseta ishindegi fotoplenkada payda boladi'.

Joqari'da aytılli'p o'tilgenindey, aylani'w rentgenogrammasi'nda refleksler qatlamlı'q si'zi'qlar dep atalatug'i'n si'zi'qlar boylap jaylasadi' (11-su'wret).

Nolinshi qatlamlı'qsi'zi'qtan birinshi (yamasa minus birinshi) katlamli'qsi'zi'qqa shekemgi arali'qtı' l arqali' belgileyik. Bunday jag'dayda l arali'g'i'na keri pa'njerede d^* sa'ykes keledi (12-su'wret). Ani'qlama boyi'nsha tuwri' pa'njeredegi tegislikler semeystvosı' arasi'ndag'i' qashi'qli'q bolg'an d shamasi' $1/d^*$ shamasi'na ten'. Olay bolsa $\frac{l}{R} = \tan \varphi$. Bul an'latpada R arqali' cilindr ta'rezli rentgen plenkasi'ni'n' radiusi' belgilengen. Ekinshi ta'repten $\frac{d^*}{R_E} = \tan \varphi = \frac{l}{R}$. Bul an'latpada $R_E = \frac{1}{\lambda}$ arqali' Evald sferasi'ni'n' radiusi' belgilengen. Bul an'latpalardan $d = \frac{R}{l} \lambda$ formulası'na iye bolami'z. Solay etip aylani'w

(terbelis) rentgenogrammalari' ja'rdeinde biz aylani'w ko'sheri bag'i'ti'ndag'i' kristalli'q pa'njerenin' translyaciya vektori'ni'n' uzi'nli'g'i'n - kristalli'q pa'njerenin' turaqli'si'n ani'qlay alami'z.

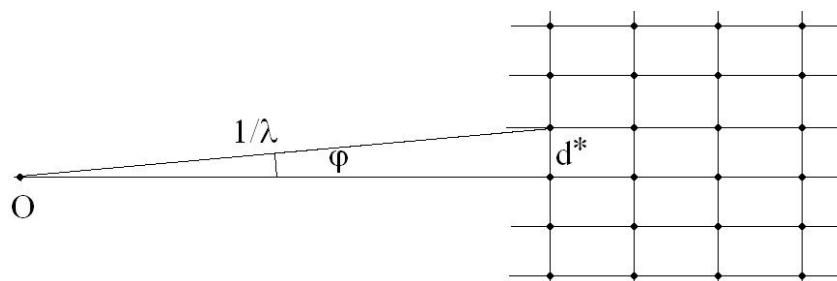


11-su'wret. ZnS kristallari'ni'n' 6H politipinen ali'ng'an terbelis rentgenogrammasi'ni'n' fotosu'wreti. Strelkalar menen qatlamlı'q si'zi'qlar, al sanlar menen olardi'n' qatar sani' belgilengen. A arqali' u'lgige tuwri' kelip tu'sken rentgen nuri'ni'n' izi, al V arqali' rentgen spektrinin' polixromat bo'leginin' rentgen plenkasi'nda payda etken daqlari' ko'rsetilgen.

Aylani'w (terbeliw) ko'sheri [0001]bag'i'ti'ha sa'ykes keledi ha'm ol vertikal bag'i'tta.

Sonli'qtan su'wrettegi rentgenogramma kristaldi'n' [0001] bag'i'ttag'i' turaqli'si'n ani'qlawg'a mu'mkinshilik beredi.

Terbelis rentgenogrammalari'n indekslew (yag'ni'y ha'r bir reflekske sa'ykes keliwshi kristallografiyalı'q tegislikler semeystvosı'ni'n' kristallografiyalı'q indekslerin ani'klaw) arqali' izertlenip ati'rg'an kristalli'q u'lginin' simmetriyası'ni'n' ken'isliktegi topari'n ani'qlaw mu'mkin. Biz usi' jerde rentgenogrammalarda ba'rqulla simmetriya orayı'ni'n' qatnasatug'i'nli'g'i'n esletip o'temiz (Fridel ni'zami'). Sonli'qtan rentgenografiyada biz kristalda simmetriya orayı'ni'n' bar yamasa joq ekenligin ani'qlay almaymi'z. Bunday jag'dayda ma'selenin' bir ma'nisi sheshiliwi ushi'n kristaldi'n' basqa da fizikali'q qa'siyetleri haqqı'ndag'i' mag'li'wmatlardı'n' za'ru'rligi payda boladi'. Mi'sali' kristal piroelektriklik qa'siyetke iye bolsa simmetriya orayı'ni'n' bunday kristallarda bolmaytug'i'nli'g'i'n ani'q ayta alami'z.



12-su'wret. Aylani'w (terbeliw) rentgenogrammalari' ja'rdeinde aylani'w (terbeliw) ko'sheri bag'i'ti'nda kristalli'q pa'njerenin' translyaciya vektori'ni'n' uzi'nli'g'i'n ani'qlaw ushi'n si'zi'lg'an sxema.

Kristallardi'n' simmetriyası'ni'n' ken'isliktegi topari'n ani'qlaw kristallardag'i' rentgen nurları'ni'n' o'shiw ni'zami'n tekserip ko'riw menen a'melge asi'ri'ladi'. Ken'isliktegi ha'r bir

topar belgili bir o'shiw ni'zami' menen ta'riyiplenedi. O'shiw ni'zami' kristallografiyalı'q indekslerdin' belgili bir topari' ushi'n strukturalı'q faktordi'n' nolge ten' ekenligi menen baylani'sli'. O'shiw ni'zami' 230 topardi'n' ha'r bir ushi'n ta'n ha'm bul jag'day «Rentgen kristallografiyası'ni'n xali'q arali'q kestelerinde» toli'q tu'rde berilgen.

Aylanı'w yamasa terbeliw usılli' tiykari'nda ali'ng'an rentgenogrammalardı' indekslew processinde Bernal setkasi' ken'nen paydalani'ladi'. Bernal setkasi'n islep shı'g'i'w boyı'nsha rentgenstrukturalı'q analizde ma' sele de bar. Biraq ha'zirgi waqi'tlari' personalli'q kompyuterler jaqsi' rawajlang'an da'wirlerde Bernal setkasi'n jan'asha quri'w ma'selesi pu'tkilley jan'a ma'selelerdin' biri boladı'. Bul ma'seleni sheshiw menen shug'i'llanami'z.

Birinshi gezekte keri pa'njere koordinataları'nan cilindr ta'rizli fotoplenkadag'i' (Bernal setkasi'ndag'i') reflekslerdin' koordinataları' arası'ndag'i' baylani'sti' qarap shı'g'ami'z. Keri pa'njerinin' tu'yinlerinin' koordinataları'n ζ ha'm ξ arqali' belgileymiz. Al fotoplenkadag'i' (Bernal setkasi'ndag'i') sa'ykes koordinatalardı' x ha'm yarqali' belgileyik. Bunday jag'dayda to'mendegidey formulalarg'a iye bolamı'z:

$$y = R \frac{\zeta}{\sqrt{1 - \zeta^2}},$$

$$x = R \cdot \text{ArcCos} \left(\frac{2 - \zeta^2 - \xi^2}{2\sqrt{1 - \zeta^2}} \right).$$

Bul an'latpalarda R arqali' rentgen kamerası'ni'n' radiusı' belgilengen.

Tegis rentgen plenkasi' ushi'n joqari'dag'i' formulalar

$$y = D \frac{2\zeta}{2 - \zeta^2 - \xi^2},$$

$$x = D \tan \left[\text{ArcCos} \left(\frac{2 - \zeta^2 - \xi^2}{2\sqrt{1 - \zeta^2}} \right) \right]$$

tu'rine iye boladı'.

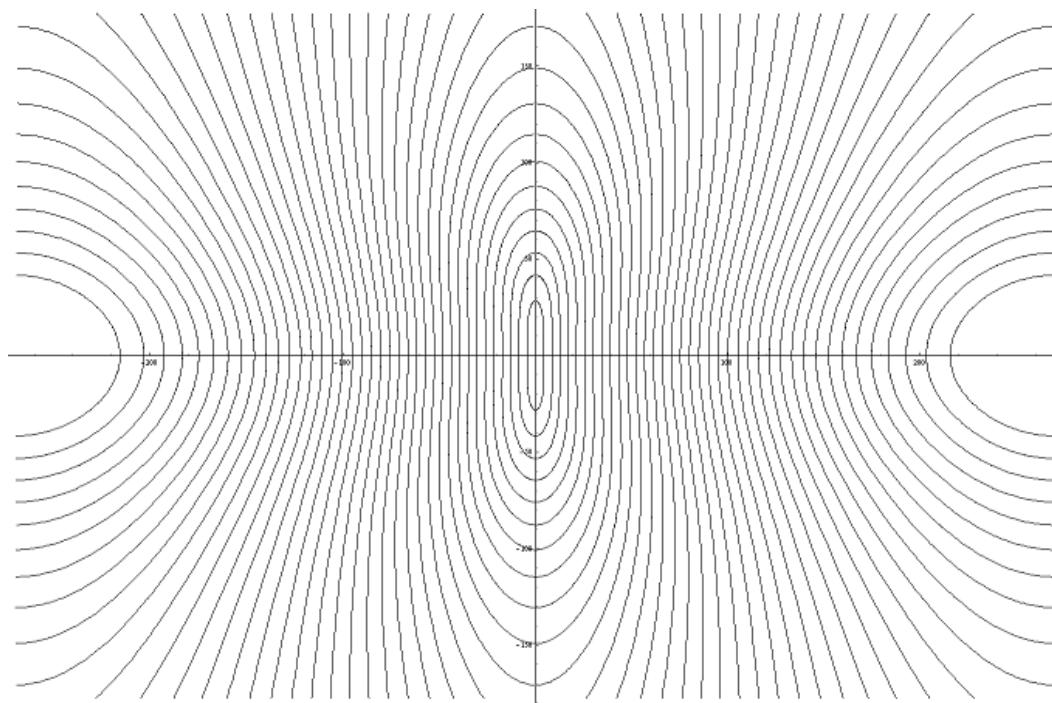
Joqari'da keltirilgen formulalar boyı'nsha esaplawlar ha'm sa'ykes grafikti si'zi'w Mathematica programmalaw tili ja'rdeinde ori'nlandı'. Cilindr tu'rindəgi fotoplenka ushi'n ali'ng'an Bernal setkasi' 13-su'wrette, al tegis fotoplenkada ushi'n quri'lg'an Bernal setkasi' 14-su'wrette keltirilgen ($R = 86,6$ mm dep esaplandı'). Setkani'n' bir si'zi'g'i'nsi'zi'w ushi'n arnalıg'an sa'ykes matematikali'q programma

```
R=86; x=0.05; ParametricPlot[{{R*ArcCos[(2-y^2-x^2)/(2\sqrt{1-y^2})]}, Ry/(2\sqrt{1-y^2})}, {y,-0.7,0.7}, PlotStyle→Directive[Opacity[3],Black],ImageSize→1400]
```

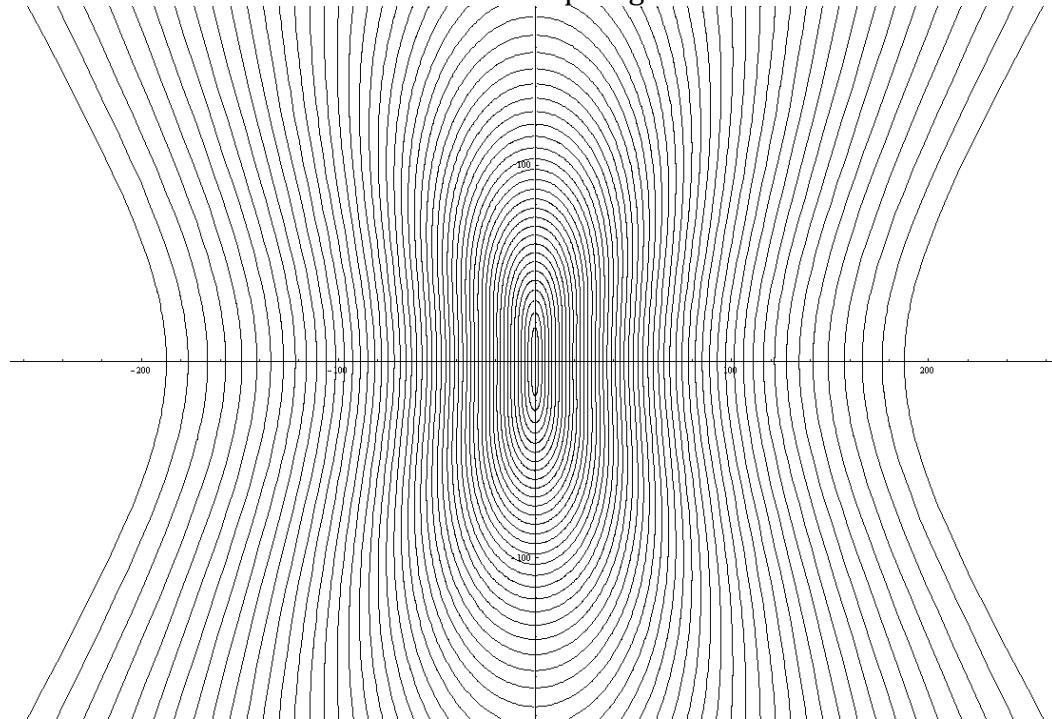
(cilindrilik fotoplenka ushi'n) ha'm

```
R=86; x=0.05; ParametricPlot[{{R*Tan[ArcCos[(2-y^2-(x)^2)/(2 (2\sqrt{1-y^2}))]]}, R (2 y)/(2-y^2-(x1)^2)}, {y,-0.9,0.9}, PlotStyle → Directive [Opacity[3], Black], ImageSize→1600]
```

(tegis fotoplenka ushi'n) tu'rine iye boladı'. x boyı'nsha adı'm 0,05ke ten' etip ali'ndı'.



13-su'wret. Personalli'q kompyuterde Mathematica 6 programmalaw tili ja'rdeminde cilindrlik fotokasseta ushi'n quri/lg'an Bernal setkasi'.



14-su'wret. Personalli'q kompyuterde Mathematica programmalaw tili ja'rdeminde tegis fotokasseta ushi'n quri/lg'an Bernal setkasi'.

Untalg'an kristallar usi'li' (poroshok usi'li'). Polikristalli'q materiallardı' yamasa untalg'an kristalli'q zatlardi' izertleytug'i'n a'dettegi a'piwayi' usi'lda u'lgi rentgen nurları'ni'n' jin'ishke da'stesi menen nurlandi'ri'ladi'. Monoxromat rentgen nurları'n ali'w u'lken mashqalalardi' payda etetug'i'n bolg'anli'qtan bası'm ko'pshilik jag'daylarda rentgen trubkasi'nan shi'qqan polixromat rentgen nurları' qollani'ladi'. Rentgenogrammalardag'i' refleksler spektrdin' xarakteristikali'q nurları'ni'n' difrakciyasi'ni'n' esabi'nan qa'liplesedi, al u'zliksiz spektr rentgen plenkasi'nda tutas fon payda etedi.

Polikristalli'q materiallardı' yamasa untalg'an kristalli'q zatlardı' izertleytug'i'n rentgenografiyali'q usi'ldı' Debay-SHerer usi'li' dep ataydı' (rentgenografiyani'n' en' birinshiler qatari'nda payda bolg'an usi'llari'ni'n' biri).

Difrakciyali'q su'wret a'dette cilindrlık betke ornati/lg'an eni kishi bolg'an rentgen plenkasi'na tu'siriledi ha'm oni' debaegamma dep ataydı'. Cilindrın' orayı'nda izertleniwshi u'lgi jaylasti'ri'ladi' (8-su'wret). Geypara jag'daylarda debaegamma tegis fotoplenkag'a da tu'siriledi.

Polikristallardag'i' kristallitlerdin' bag'i'tlari', soni'n' menen birge untalg'an kristallardag'i' mayda kristallardi'n' bag'i'tlari' ken'islikte ten'dey itimalli'q penen tarqalg'an. Sonlıqtan bunday u'lgi rentgen nuri' kelip tu'skende Vulf-Bregg sha'rtin (difrakciya sha'rtin) kanaatlandi'ratug'i'n jag'dayda ko'plegen kristallitlerdin' yamasa mayda kristallardi'n' turi'wi' mu'mkin. Bunday kristallitler o'zine kelip tu'sken nurlardi' konusli'q bette jaylasqan bag'i'tlar boyi'nsha difrakciyag'a ushi'ratadi' ha'm tegis fotoplenkada bir daq emes, al do'n'gelek difrakciyali'q refleks payda boladi'. Bul do'n'gelek reflekst'in radiusi'n r arqali' belgileyik. U'lgi menen fotoplenka arasi'ndag'i' kashi'qli'q R shaması'na ten' bolsi'n. Bunday jag'dayda $\frac{r}{R} = \tan 2\theta$ shaması'na ten' boladi' (θ arqali' difrakciyali'q mu'yeshtin' ma'nisi belgilengen). Al difrakciyali'q mu'yesh θ bolsi'n Vulf-Bregg ten'lemesi boyi'nsha kristallografiyali'q semeystvodag'i' tegislikler arasi'ndag'i' qashi'qli'q d_{hkl} shamalari'n ani'qlawg'a mu'mkinshilik beredi.

Solay etip Debay-SHerer usi'li'nda kristallografiyali'q tegislikler arasi'ndag'i' qashi'qli'qlar tikkeley ani'qlanadi' eken. Eger bir sol tegislikler arasi'ndag'i' qashi'qli'qlardi'n' dizimin du'zetug'i'n bolsaq ha'm bul tegislikler ushi'n kristallografiyali'q indekslerdi ani'qlasaq, onda biz kristaldi'n' simmetriyasi'ni'n' ken'isliktegi topari' haqqi'nda tikkeley ga'p ete alami'z.

Debay-SHerer usi'li'ni'n' ja'rdeinde kristalli'q pa'njere turaqli'lari'ni'n' ma'nisin da'l ani'qlaw mu'mkinshiligine iye bolami'z. Haqi'yqati'nda da Vulf-Bregg ten'lemesinen sali'sti'rmali' qa'telik ushi'n

$$\frac{\Delta d}{d} = -ctg \theta \cdot \Delta \theta + \frac{\Delta \lambda}{\lambda}$$

an'latpasi'n alami'z. A'dette $\Delta \lambda = 0$ dep qabi'l etiledi. Difrakciyali'q mu'yesh θ ni'n' ma'nisi 90° qa umti'lg'anda bul sali'sti'rmali' qa'teliktin' ma'nisi nolge umti'ladi'. Biraq bunday u'lken difrakciyali'q mu'yeshlerde difrakciyali'q maksimumlardi' ali'w u'lken qi'yi'nshi'li'qlardi' payda etedi. Soni'n' menen birge bunday u'lken mu'yeshlerde Debay saqi'ynalari'ni'n' (reflekslerinin') eni a'dewir u'lkeyedi. Sonlıqtan Debay-SHerer usi'li'nda kristalli'q pa'njerenin' turaqli'lari'ni'n' ma'nislerin da'l esaplaw ushi'n $\theta \rightarrow 90^\circ$ qa karay ekstropolyaciyalaydi'.

A'melde ko'pshilik jag'daylarda Nelson-Rayl ekstrapolyaciyalı'q funkciyasi' qollani'ladi':

$$F(\theta) = \frac{1}{2} \left(\frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} + \frac{\cos^2 \theta}{\theta} \right)$$

Bul funkciya ekstropolyaciyyadag'i' en' jaqsi' si'zi'qli'li'qtı' ta'miyinleydi.

II bap. Rentgen ha'm elektronlardi'n' katti' denelerde shashi'rawi'ni'n' kinematikali'q ha'm dinamikali'q teoriyalari' haqqi'nda

1-§. Rentgen ha'm elektronlar tolqi'nlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' kinematikali'q ha'm dinamikali'q teoriyalari'

Qattı' deneler fizikasi' menen fizikalı'q materialtani'wdi'n' rawajlani'wi'nda rentgenstrukturalı'q analiz benen elektronlı'q mikroskopiyani'n' tutqan orni' og'ada ullı'. 1912-ji'li' ashi'lg'an rentgen nurları'ni'n' kristallardag'i' difrakciyasi' [M. fon Laue (M. von Laue), V.Fridrix (W.Friedrich) ha'm P.Knipping (P.Knippung)] bunday ob'jetlerdegi atomlar menen molekulalardi'n' belgili ni'zamlar boyi'nsha ta'rtipli jaylasqanlı'g'i' haqqı'ndag'i' birinshi eksperimentalli'q mag'li'wmatlardı' berdi (yag'ni'y kristalli'q deneler rentgen nurları' ushi'n kristalli'q pa'njererin' (reshetkani'n') orni'n iyeleydi degen so'z). Rentgen nurları' difrakciyasi'ni'n' birinshi en' a'piwayi' teoriyası' (bul teoriyanı' kinematikali'q teoriya dep ataydı') 1913-ji'li' Laue ta'repinen berildi. Usı' ji'li' U.L.Bregg (W.L.Bragg) ha'm G.V.Vulf rentgen nurları'ni'n' difrakciyasi'n kristaldag'a bir birine parallel bolg'an atomli'q tegislikler sistemasi'ndag'i' shashi'rawi' dep interpretaciyaladi' ha'm Vulf-Bregg sha'rtı dep atalatug'i'n rentgenografiyadag'i' en' ko'p qollani'latug'i'n

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

formulası'n keltirip shı'g'ardi'. Bul an'latpada d arqalı' atomli'q tegislikler arası'ndag'i' qashi'qli'q, ϑ arqalı' difrakciyalı'q mu'yesh ha'm λ arqalı' rentgen nurları'ni'n' tolqı'n uzi'nli'g'i' belgilengen. $n = 1, 2 \dots$ (pu'tin sanlar). (1)-ten'lemeni Vulf-Bregg sha'rtı dep ataydı' (ko'pshilik jag'daylarda Vulf-Bregg ten'lemesinde difrakciyalı'q mu'yeshti θ ha'ripi arqalı' belgileydi. Biz bul jumi'si'mi'zda difrakciyalı'q mu'yeshti ϑ arqalı' belgileymiz).

1914-ji'li' SH.Darvin (Ch.Darvin) rentgen nurları'ni'n' difrakciyasi'ni'n' dinamikali'q teoriyası'ni'n' tiykari'n do'retti. Bunnan keyin 1917-ji'li' P.Ewald (P.Ewald) ortali'qtı'n' noqatlı'q dipollerı menen nurları'w maydani' arası'ndag'i' bir biri menen kelisilgen teoriyası'n islep shı'qtı' (teoriya samosoglasovannogo vzaimodeystviya tosheshni'x dipoleyl sredi' i polya izlusheniya). 1931-ji'li' M.Laue rentgen nurları'ni'n' difrakciyasi'n nurları'wdi'n' polyarizaciyalanı'wshı'li'g'i' u'sh o'lshemli da'wırı $\chi(r, \omega)$ bolg'an ortalı'qta tarqalı'wi'ni'n' elektrordinamikali'q ma'selesi si'patı'nda sheshiw menen shug'i'llandi'.

Na'tiyjede XIX a'sirdin' ekinshi yarı'mi'nda rawajlang'an fizikalı'q kristallografiya eksperimentalı'q tastı'yi'qlanı'wg'a iye boldı'. Da'rha'l rentgen difraktometriyası', keyinirek rentgen topografiyası' qa'liplesti ha'm tez pa'tler menen rawajlana basladı'. Ilimpazlar kristalli'q denelerdegi difrakciyag'a ushi'rag'an nurlardi'n' intensivligin u'yreniw menen sol denelerdin' atomlardi'n' qanday ni'zamlı'qlar menen jaylaskanlı'g'i'n ani'qlaw usı'lları'n islep shı'qtı'. Da'slepki da'wırlerde kristarlı'q pa'njererin' oraylası'wları' (ko'lemde, qatpalda, bazada oraylasqan kristalli'q quri'li'slar, krisladdı'q pa'njereler), keyinirek quramalı' organikalı'q ximiyalı'q birikpelerdegi atomlardi'n' elementar qutılardı'g'i' koordinataları' ani'qlana basıldı'. Son'g'i' 10 ji'l ishindegi DNK molekulaları'ni'n' quri'li'si'n ani'qlaw boyı'nsha ori'nlang'an jumi'slar bul bag'dardag'i' islengen jumi'slardi'n' en' jokargı'i' shı'n'i' boli'p tabı'ladi' dep esaplanadi'.

Rentgen nurları'ni'n' difrakciyasi' tiykari'nda do'retilgen barlı'q usı'llardi'n' ji'ynag'i'n (rentgen plenkasi'nda difrakciyalı'q su'wretlerdin' ali'ni'wi', rentgen topografiyası'ni'n' ko'p sanlı' sxemalari', rentgen difraktometriyası', parallel da'stelerdegi ha'm tarqalı'wshı' da'stelerdegi rentgen nurları'ni'n' difrakciyasi', kristallardı'g'i' elektronlı'q ti'g'i'zli'qtardı'n' izertleniwi, rentgen nurları'ni'n' difrakciyasi'ni'n' kinematikali'q ha'm dinamikali'q teoriyaları' ha'm usı'g'an sa'ykes usı'llar) biz bir so'z benen kristallar rentgenografiyası' dep ataymı'z.

Kvant mekanikası'ni'n' rawajlani'wi', a'sirese korpuskulalı'q dualizm menen De Broyl gipotezasi' elektronlardi'n' kristalli'q denelerdegi difrakciyasi'n a'melge asi'ri'wg'a ali'p keldi. Na'tiyjede 1930-ji'llarlan keyin elektron mikroskopları', keyinirek olardı'n' jan'a modifikasiyaları' bolg'an elektronlı'q ha'm ionlı'q proektorlar, rastrlı'q elektronlı'q mikroskoplar do'retildi. Na'tiyjede adamzat ayı'ri'm atomlardi'n' su'wretlerin ko'riw mu'mkinshiligine iye boldı'.

Rentgenografiya ha'm elektronli'q mikroskopiyani'n' ja'ne bir a'hmiyeti ha'r qi'yli' si'rtqi' ta'sirlerdin' ta'sirinde (mexanikali'q deformaciya, qi'zdi'ri'w ha'm salqi'nlati'w, elektr ha'm magnit maydanlari'ni'n', jaqtı'li'qtı'n', radioaktivli nurlardi'n') kristallarda boli'p o'tetug'i'n strukturali'q aylani'slardı' izertlew menen baylani'sli'. Usi'ni'n' na'tiyjesinde kristalli'q denelerdin' fizika-ximiyali'q ha'm texnologiyali'q qa'siyetlerinin' olardi'n' ayqi'n atomli'q-kristalli'q ja'ne substrukturali'q qa'ddidegi quri'li'si'nan g'arezli ekenligin ko'rsetti. Na'tiyjede berilgen atomli'q-kristalli'q quri'li'sqa ha'm substrukturag'a, usi'g'an sa'ykes fizikali'q ha'm texnologiyali'q qa'siyetlerge iye kristalli'q deneler ali'w problemasi' qa'liplesi. Bul bag'darda Jer ju'zindegı en' rawajlang'an ellerinin' (AQSH, Angliya, Fransiya, Germaniya, Rossiya, Yaponiya ha'm basqa da eller) ilimpazlari'ni'n' birlesip bir bag'dardag'i' ti'ri'si'wlari'ni'n' na'tiyjesinde (fizikali'q materialtani'w, qattı' deneler fizikasi', yari'ım o'tkizgishler fizikasi' ha'm tag'i' basqalar) u'lken jetiskenliklerge erisildi. Usi'ni'n' na'tiyjesinde ha'zirgi waqi'tlarda kosmos texnikasi'nda, kompyuterler ha'm basqa da elektronli'q abap-u'skenelr sog'i'wdi' ken'nen paydalani'p ati'rg'an jan'a materiallar do'retildi.

2-§. Dirfrakciyag'a ushi'rag'an rentgen nurlari'ni'n' intensivligi (kinematikali'q ha'm dinamikali'k ma'seleler)

Kristalli'q denelerge tolqi'n uzi'nli'g'i' 0,1-10 angstrom bolg'an elektromagnit tolqi'nlar (rentgen tolqi'nları') yamasa elektronlar tolqi'nları' kelip tu'skende joqarı'da keltirilip o'tilgen (1)-Vulf-Bregg sha'rtı boyı'nsha difrakciyag'a ushi'raydi'. Difrakciyag'a ushi'rag'an nurlardi' (basqa so'z benen aytqanda difrakciyali'q maksimumlar) kristaldag'i' atomlarda shashi'rag'an nurlar birdey fazada tarqalatug'i'n bag'i'tlarda payda boladi'. Kristallarda fazirovkani'n' bunday sha'rtı bir o'lshemli difrakciyali'q pa'njeredegi u'sh sha'rttin' bir waqi'tta ori'nlanı'wi'n talap etedi:

$$\begin{aligned} a(\cos \alpha - \cos \alpha_0) &= H\lambda; & b(\cos \beta - \cos \beta_0) &= K\lambda; \\ c(\cos \gamma - \cos \gamma_0) &= L\lambda. \end{aligned} \quad (2)$$

Bul an'latpadag'i' a , b ha'm c lar kristaldi'n' pa'njeresinin' u'sh ko'sher boyı'nsha da'wirleri, α_0 , β_0 ha'm γ_0 arqali' kristalg'a kelip tu'sken nundi'n', al α , β ha'm γ ler arqali' difrakciyag'a ushi'rag'an nundi'n' kristaldi'n' pa'njeresinin' ko'sherleri arasi'ndag'i' mu'yesh belgilengen. H , K ha'm L arqali' atomli'q tegisliklerdin' kristallografiyali'q sistemalari'ni'n' indekslerine proporsional bolg'an pu'tin sanlar belgilengen. (2)-ten'lemelerdi Vulf-Bregg sha'rtı tu'rinde de jazi'w mu'mkin. α_0 , β_0 ha'm γ_0 mu'yeshleri ani'q ma'nislierge iye bolg'anlı'qtan, al α , β ha'm γ shamalari' bir birinen g'a'rezsiz bolg'anlı'qtan (2)-sistema ju'da' az pu'tin sanlı'q sheshimlerge iye boladi'. Basqa so'z benen aytqanda qozg'almaytug'i'n kristallarg'a monoxromatik nurlar tu'skende difrakciyali'q maksimumlardi'n' sani' ju'da' az boladi'.

Kristaldi'n' shashi'ratı'w qa'biletligi onı'n' o'lshemlerinen ha'm quri'li'si'nan g'a'rezli boladi'. Fragmentlerinin' o'lshemleri $l \leq 10^{-5}$ sm bolg'an ideal mozaykali'q kristallar ha'm polikristallarda shashi'rag'an nurlanı'wlar rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' kinematikali'q jaqi'nlaşı'w (kinematischeskoe priblijenie) ja'rdeminde ta'riyiplenedi. Bunday shashi'rawdi' u'yreniya isleri tiykari'nan 1950-ji'llarg'a shekem pitken ha'm olar ha'zirgi waqi'tlari' og'ada siyrek ushi'rasatug'i'n kitaplarda toli'q bayan etilgen [1-3]. Rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' kinematikali'q teoriyası'nda kristalda shashi'rag'an tolqi'nni'n' intensivligi kristalg'a kelip tu'siwshi nundi'n' intensivliginen kishi dep esaplanadi'. Bunday jaqi'nlaşı'wdi'n' ko'pshilik kristallar ushi'n duri's ekenligi ba'rshege ani'q. Klassikali'q elektrodinamikag'a sa'ykes nundi'n' elektr maydani' E_0 , jiyiliği ω ha'm tolqi'n vektori' k_0 bolg'an kristalg'a kelip tu'siwshi tolqi'n atomlardi'n' o'zgermeli dipollik momentin payda

etedi. Usi'ni'n' na'tiyjesinde ha'r bir atom ekinshi (shashi'rag'an) sferali'q tolqi'nni'n' deregine aylanadi'. Bunday shashi'rag'an sferali'q tolqi'nni'n' amplitudasi' atomni'n' shashi'rati'wshi'li'q qa'siyeti arqali', al fazasi' sol atomni'n' kristaldag'i' iyelegen orni' menen ani'qlanadi'. bir atom ta'repinen shashi'rati'lg'an maydanni'n' elektr maydani'n' kernewilik vektori'

$$\mathbf{E}_j(s) = \frac{1}{R} [\mathbf{k}_s[\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_0]] \left(\frac{e^2}{m\omega^2} \right) f(s) \exp[i(\mathbf{s} \cdot \mathbf{r}_j)] \quad (3)$$

an'latpasi'ni'n' ja'rdeinde ani'qlanadi'. Bul an'latpada $f(s)$ arqali' atomli'q faktor (bul faktor o'z ishine kristaldi'n' temperaturasi'na baylani'sli' bolg'an Debay-Uoller faktori'n da aladi' dep esaplang'an), $\mathbf{r}_j = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}$ arqali' j –atomni'n' radius-vektori', m, n ha'm p arqali' pu'tin sanlar, $\mathbf{s} = \mathbf{k}_s - \mathbf{k}_0$ arqali' shashi'raw vektori' belgilengen. $s = \frac{4\pi \cos \vartheta}{\lambda}$, 2ϑ arqali' \mathbf{k}_0 ha'm \mathbf{k}_s vektorlar arasi'ndag'i' mu'yesh, R arkali' shashi'raw noqati'nan baqlaw noqati'na shekemgi arali'q belgilengen. ϑ mu'yeshin shashi'raw mu'yeshi yamasa Bragg mu'yeshi dep ataydi'. Qos vektorli'q ko'beyme polyarizaciyalı'q g'a'rezlilik $\mathbf{E}_j(s)$ ti ani'qlaydi'. SHashi'rag'i'n tolqi'nni'n' toli'q amplitudasi' $\mathbf{E}(s)$ kristaldag'i' barli'q N dana atomdag'i' shashi'rag'an tolqi'nlardi'n' amplitudalari'ni'n' qosi'ndi'si'na ten': $\mathbf{E}(s) = \sum_{j=1}^N \mathbf{E}_j(s)$.

Bir birlik denelik mu'yesh ishindegi shashi'rag'an tolqi'nlardi'n' sali'sti'rmali' intensivligi

$$\frac{I_s}{I_0} = \int |\mathbf{E}(s)|^2 R^2 d\Omega = \sigma_e P(\vartheta) |f(s)|^2 \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \exp[i(\mathbf{s}, \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k)] \quad (4)$$

an'latpasi' ja'rdeinde esaplanı'ladi'. Bul an'latpada I_0 arqali' kristalg'a kelip tu'sken rentgen nuri'ni'n' intensivligi, $\sigma_e = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2$ arqali' elektron ta'repinen shashi'raw kese-kesimi (m arqali' elektronni'n' massasi', e arqali' zaryadi', c arqali' jaqtı'li'qtı'n' tezligi belgilengen), al $P(\vartheta)$ arqali' polyarizaciyalı'q eo'beytiwshi an'lati'lg'an. Polyarizaciyalang'an nurları'w ushi'n $P(\vartheta) = (1 + \cos^2 2\vartheta)/2$. $\sigma_e P(\vartheta) |f(s)|^2$ ko'beytiwshisi atom ta'repinen shashi'raw kese-kesimine ten'. (4)-an'latpadag'i' eksponentalar j - ha'm k -atomlarda shashi'rag'an tolqi'nlar arasi'ndag'i' fazalardi'n' ji'lji'wi'n esapqa aladi'. Elementar qutı'si'nda bir neshe atomlar bar kristallar ushi'n (4)-an'latpadag'i' $f(s)$ ti straturalı'q faktor $F(s)$ penen almasti'ri'w kerek. Bunday jag'dayda \mathbf{r}_j shamasi' j – elementar qutı'ni'n' radius-vektori' boli'p tabi'ladi'.

Ideal kristallar ushi'n (4)-an'latpadag'i' summalar geometriyali'q progressiyalar boli'p tabi'ladi'. Eger kristall paralelepiped formasi'na iye bolsa, onda $N = N_a N_b N_c$ elementar qutı'g'a iye boladi' (demek a ko'sheri bag'i'ti'nda N_a elementar qutı' boladi' degen so'z). Bunday jag'dayda (4)-an'latpadag'i' summalaw Laue interferenciyalı'q funkciyalari'na ali'p keledi:

$$\frac{\sin^2 \left[N_a \left(\frac{\mathbf{s}\mathbf{a}}{2} \right) \right]}{\sin^2 \left(\frac{\mathbf{s}\mathbf{a}}{2} \right)} \cdot \frac{\sin^2 \left[N_b \left(\frac{\mathbf{s}\mathbf{b}}{2} \right) \right]}{\sin^2 \left(\frac{\mathbf{s}\mathbf{b}}{2} \right)} \cdot \frac{\sin^2 \left[N_c \left(\frac{\mathbf{s}\mathbf{c}}{2} \right) \right]}{\sin^2 \left(\frac{\mathbf{s}\mathbf{c}}{2} \right)} \quad (5)$$

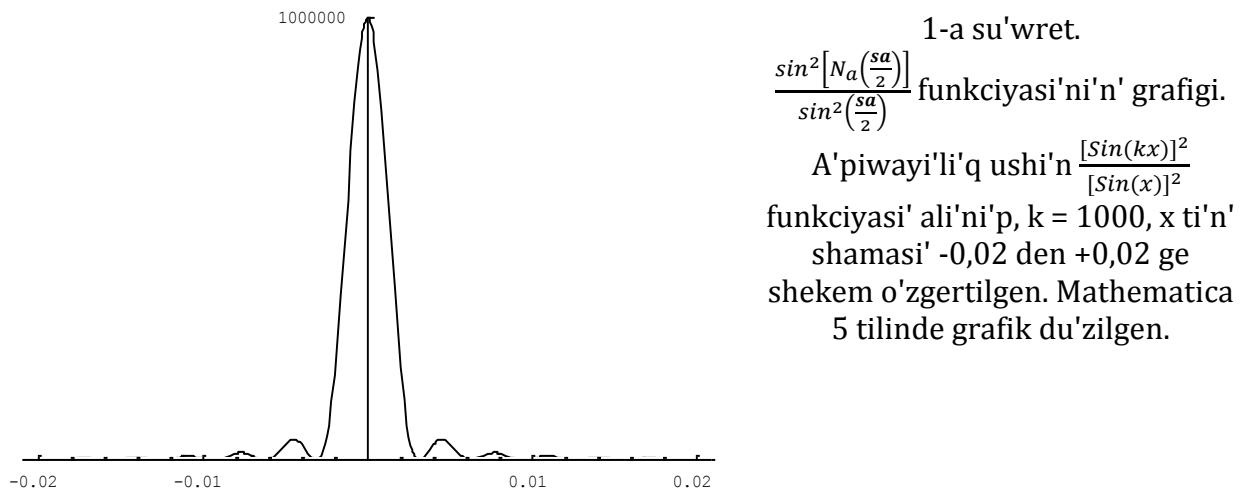
Bul funkciyanı'n' maksimalı'q ma'nisi (difrakciyalı'q maksimumi') s, a, b, c lardi'n' (2)-Laue sha'rtlerine ekvivalent bolg'an ma'nislerinde: $(\mathbf{s}\mathbf{a}) = 2\pi H$, $(\mathbf{s}\mathbf{b}) = 2\pi K$ ha'm $(\mathbf{s}\mathbf{c}) = 2\pi L$ bolg'anda $(N_a N_b N_c)^2$ shamasi'na, yag'ni'y kristaldi'n' ko'lemi V^2 qa ten'. Bcl sha'rtler s

shashi'raw vektori'ni'n' ma'nisinin' keri pa'njere vektori' \mathbf{g} g'a ten' ekenligin bildiredi, yag'ni'y $\mathbf{k}_g = \mathbf{k}_0 + \mathbf{g}$. Tu'siw tegisligindegi difrakciyali'q maksimumli'n' mu'yeshlik ken'ligi $\frac{2\pi}{N_g}$ g'a ten'. Bul jerde N_g arqali' \mathbf{g} vektori'ni'n' bag'i'ti'ndag'i' kristaldi'n' da'wirlerinin' sani'. Mi'sali' $N_g \sim 10^4$ bolsa, onda maksimumli'n' mu'yeshlik ken'ligi $\sim 10^{-4}$ radiang'a ten' boladi'. Kristaldi'n' ko'lemi u'lkeygende bas difrakciyali'q maksimumni'n' intensivligi $\sim V^2$ shamsasi'na tuwri' proporsional o'sedi, al olardi'n' ken'ligi $\sim V^{-\frac{2}{3}}$ shamsasi'na proporsional o'zgeredi (1-su'wret).

Kristaldi'n' mu'yeshler boyi'nsha integralli'q shashi'rati'wshi'li'q qa'biletligi onnan o'tiwshi nurlari' ushi'n kristaldi'n' ko'lemi V g'a proporsional, yag'ni'y sali'sti'rmali' integralli'q intensivligi

$$I_i^g = Q(g)V \quad (6)$$

shamsasi'na ten'. Bul an'latpadag'i' $Q(g) = K\sigma_e P(\vartheta)L(\vartheta)|F(g)|^2\lambda^3/V_{el}^2$ shamsasi' kristaldi'n' sali'sti'rmali' shashi'rati'wshi'li'q qa'libetligi dep ataladi', λ arqali' nurlan'iwdi'n' tolqi'n uzi'nli'g'i', V_{el} arqali' elementar kuti'shani'n' ko'lemi belgilengen. K konstantasi'ni'n' ma'nisi integralli'q faktor $L(\vartheta)$ difrakciyani'n' sxemasi' tiykari'nda ani'qlanadi'. Mozayikali'q kristallardag'i' rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'nda ekilemenshi (vtorishnaya) ekstinkciya qubi'li'si' ori'n aladi'.



Da'wirlik quri'li'si'nda buzi'qli'qlarg'a iye, sonday-aq amorf denelerde, shiyshelerde ha'm suyi'qli'qlarda rentgen nurlari'ni'n' kinematikali'q difrakciyasi'nda intensivlikti atomlardı'n' ken'isliktegi mu'mkin bolg'an barli'q konfiguraciyalari' boyi'nsha (4)-an'latpa boyi'nsha ortashalap tabadi'. Al atomlardı'n' ken'isliktegi mu'mkin bolg'an barli'q konfiguraciyalari' $\omega(r_{jk})$ korrelyaciya funkciyasi' arqali'

$$\begin{aligned} & \left\langle \frac{I_s}{I_0 \sigma_e P(\vartheta) |f(s)|^2} \right\rangle = \\ & = N + N(N-1) \int_0^V \int_0^V \exp[i(\mathbf{s}, \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k)] \frac{d\nu_j}{V} \frac{d\nu_k}{V} - \\ & - N(N-1) \int_0^V \int_0^V \omega(r_{jk}) \exp[i(\mathbf{s}, \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k)] \frac{d\nu_j}{V} \frac{d\nu_k}{V} \end{aligned} \quad (7)$$

an'latpasi' tu'rinden esaplanadi'. N ge proporsional ag'za N atomnan turatug'i'n ta'rpitke sali'nbag'an ji'ymaqtan nurlani'wdi'n' shashi'rawi'n ta'riyipleydi. Ekinshi ag'za – kristaldi'n' formasi'ni'n' fure-obrazi'ni'n' modulinin' kvadrati' Fraungofer difrakciyasi'na sa'ykes keledi (Fraungofer difrakciyasi' – parallel nurlardi'n' difrakciyasi').

Polikristalli'q ob'ektler ushi'n $\omega(r_{jk})$ funkciyasi' a'dette izotrop boli'p, sonli'qtan difrakciyag'a ushi'rag'an nurdi'n' intensivligi ob'ektke kelip tu'siwshi nurg'a sali'sti'rg'anda aksiali'q simmetriyag'a iye. Difrakciyali'q maksimumlar saqi'ynalar tu'rine iye boladi', olardi'n' intensivligi ϑ mu'yeshinin' u'lkeyiwi menen $|f[\sin(\frac{\vartheta}{\lambda})]|^2$ shamasi'na proporsional tez kemeyedi.

Rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' kinematikali'q jaqi'niasi'wi' to'mende keltirilgen (9)-ten'lemenin' sheshiminin' Bornli'q jaqi'niasi'wi' boli'p tabi'ladi'. Kristaldi'n' nurlani'w menen ta'sirlesiwinin' diskret (atomli'q faktor $f(g)$ tiykari'ndagi') ha'm kontinualli'q (polyarlani'w $\chi(\mathbf{r}, \omega)$ tiykari'ndagi') ta'rpileniwi $\chi_g = -4\pi \left(\frac{e^2}{m\omega^2}\right) \frac{1}{V_{el}} F(\mathbf{g})$ an'latpasi' menen ko'rsetiledi. Bul an'latpadag'i' χ_g shamasi' $\chi(\mathbf{r}, \omega)$ funkciyasi'n keri pa'njere vektori' \mathbf{g} boyi'nsha qatarg'a jayg'andag'i' fure-qurawshi' (fure-komponenta). Bul qatnasti' qollani'p (6)-integralli'q shashi'rati'wshi'li'q qa'biletlikti mi'na tu'rde ko'rsetiwge boladi':

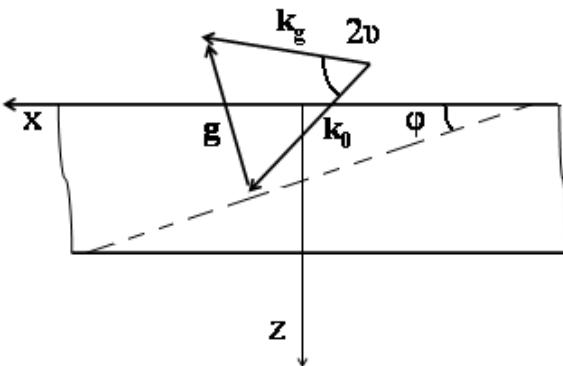
$$\frac{I_g}{I_0} = \pi^2 \frac{1+\cos^2 2\vartheta}{2 \sin 2\vartheta} |\chi_g|^2 \frac{V}{\lambda}. \quad (8)$$

Eger ideal kristaldi'n' si'zi'qli' o'lshemleri $l > 10^{-5}$ sm bolsa, onda kinematikali'q jaqi'niasi'wdi' qollani'wg'a bolmaydi'. Rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi' bunday jag'daylarda dinamikali'q teoriya ja'rdeminde ta'riyiplenedi. Bul teoriya boyi'nsha ideal kristaldi'n' sali'sti'rmali' ha'm integral shashi'rati'wshi'li'q qa'biletligi ha'm oni'n' ko'lemindegi maydanni'n' quri'li'si' rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' kinematikali'q teoriyası'nan pu'tkilley basqasha tu'rge iye boladi'.

Rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' dinamikali'q teoriyası' difrakciyag'a ushi'rag'an nurdi'n' kristalg'a kelip tu'siwshi nurg'a keri ta'sirin esapqa alg'an halda tolqi'n ten'lemesin elektr awi'si'wi' $\mathbf{D}(\mathbf{r}, \omega)$ vektori' ushi'n toli'g'i'raq sheshiwge tiykarlang'an [4-5].

$$\Delta \mathbf{D} + k^2 \mathbf{D} \approx -\text{rot rot } (\chi \mathbf{D}). \quad (9)$$

Bul anlatpani'n' on' ta'repi kristalda si'rtqi' ta'sirde (rentgen nurlari'ni'n' kelip tu'siwinin' ta'sirinde) qozdi'ri'lg'an ekinshi maydan boli'p tabi'ladi' (Biz ori's terminologiyasi'nda qa'liplesken «vtorishnoe pole» so'zin «ekinshi maydan» dep awdarami'z). (9) di' sheshiwdin' tiykarg'i' usi'li' Fure usi'li' boli'p tabi'ladi'. Bul usi'l «dispersiyali'q bet» tu'sinigine ali'p keledi [1, 3]. (9) di' sheshiw ushi'n a'stelik penen o'zgeriwshi amplitudalar usi'li' da qollani'ladi' («Metod medlenno menyayushixsyu amplitud» na'zerde tuti'lmaqta).



1-b su'wret.

Kristalli'q plastinkadag'i eki nurli' difrakciya. 2v arqali' kristaldan o'tiwshi \mathbf{k}_g ha'm kristalg'a tuwri' kelip tu'siwshi vektor \mathbf{k}_0 arasi'ndag'i' mu'yesh, φ arqali' x ha'm shashi'rati'wshi' atomli'q tegislik (punktir menen ko'rsetilgen) arasi'ndag'i' mu'yesh belgilengen. \mathbf{g} bolsa difrakciya vektori' (keri pa'njere vektori').

Rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' dinamikali'q teoriyası'ni'n' o'zine ta'n o'zgeshelikleri eki tolqi'n esapqa ali'natug'i'n a'piwayi' jag'dayda ayqi'n ko'rinedi. Bul eki tolqi'nni'n' birinshisi tuwri' o'tken tolqi'n (0), al ekinshisi difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'n (\mathbf{g}) boli'p tabi'ladi'. En' a'hmiyetli jag'daylardi'n' biri kristalli'q plastinkadag'i' tegis tolqi'nni'n' difrakciyasi' boli'p tabi'ladi' (1-b su'wret).

(9)-ten'lemenin' sheshimi kristallarda shashi'rag'an tolqi'nlar (Breg shashi'rawi', Bul jag'dayda difrakciyali'q su'wret rentgen nurlari'ni'n' degeri menen kristaldi'n' arali'g'i'na qoyi'lg'an fotoplenkada ali'nadi') ushi'n bir tu'rli, al kristall arqali' o'tken difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'nlar (Laue o'tivi) ushi'n pu'tkilley basqa tu'rge iye boladi' (Bul jag'dayda kristall difrakciyali'q su'wret ali'natug'i'n fotoplenka menen rentgen nurlari'ni'n' deregi arasi'na qoyi'ladi'). Biz bul jag'daylardi' qarap qarap shi'g'i'w menen shug'i'llanbaymi'z.

Breg shashi'rawi' menen Laue o'tkeriwi monoxromatik ha'm tegis parallel rentgen nurlari'n ali'w ushi'n ken'nen qollani'ladi'.

Gamma nurlari'ni'n' neytronlardı'n' ha'm elektronlardı'n' difrakciyasi' o'zlerine ta'n o'zgesheliklerge iye boladi'. Bul o'zgeshelikler ta'sirlesiw shaması' ha'm tolqi'n uzi'nli'qları' menen baylani'sli'. Dinamikali'q difrakciya optikali'q diapazonda da xoleristikali'q ha'm kolloidli'q suyi'q kristallardi' izertlew processinde baqlanadi'. Endigi paragrafta biz elektronlardı'n' difrakciyasi'n qarap o'temiz.

3-§. Difrakciyag'a ushi'rag'an elektronlardı'n' intensivligi

Elektronlardı'n' difrakciyasi' dep a'dette olardı'n' kristallardag'i' yamasa suyi'qli'qlar menen gazlerdin' molekulaları'ndag'i' serpimli shashi'rawi'ni'n' kelip tu'sken da'steden bazi' bir mu'yeshke buri'lg'an basqa da'stenin' payda boli'wi'na aytadi'. Bul da'stenin' kelip tu'sken da'stege sali'sti'rg'andag'i' bag'i'ti', intensivligi shashi'rati'wshi' ob'jeektin' quri'li'si'nan g'a'rezli. 1927-ji'di' K.Devisson (C.Davisson) ha'm L.Djermer (L.Garmer) ta'repinen ashi'lg'an elektronlardı'n' difrakciyasi' L. de Broyldı' (L. de Broglie) bo'lekshelerdin' tolqi'nli'q qa'siyetleri haqqı'ndag'i' gipotezasi'n toli'q da'lilledi.

Biz da'slep elektronlar tolqi'nları'ni'n' uzi'nli'g'i'n esaplaw menen shug'i'llanami'z ha'm usi' jerde belgili bolg'an ilimiyy a'debiyatta usi'nday esaplawlar ju'rgizgende metodikali'q jaqtan u'lken qa'teliklerge jol qoyi'li'p ati'rg'anlı'g'i'n atap o'temiz. Derlik barlı'q a'debiyatlarda (mi'sali' elektroli'q mikroskopiya boyı'nsha ko'pshilikke belgili P.Xirshti'n', A.Xovidin' ha'm basqalardı'n' «Elektronnaya mikroskopiya tonkix kristallov» kitabı', Fizikalı'q enciklopediyani'n' 1-tomı'ndag'i' «Difrakciya elektronov» atlı' maqala) massanı'n' tezlikke baylani'sli' dep esaplap atı' shi'qqan (shawqi'mi' jer jarg'an) $m = m_0 / \sqrt{1 - v^2/c^2}$ formulasi'nan paydalanyadi'. Bul formulani' tek esaplawlardı' jen'illestiriw ushi'n g'ana paydalani'w mu'mkin. Al haqi'yqatı'nda massa relyativistlik invariant boli'p, onı'n' ma'nisi tezlikten g'a'rezli emes.

De Broglid'in' formulasi'

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (10)$$

Bul an'latpada $h = 6,6260755 \cdot 10^{-34}$ erg·s, al impuls $p = \frac{mv}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$ formulasi' ja'rdeinde esaplani'ladi'. Demek tezliktin' qa'legen ma'nisi ushi'n (10)-an'latpani' bi'layi'nsha jazi'wi'mi'z kerek:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \sqrt{1 - v^2/c^2} \quad (11)$$

tu'rinde jazi'wi'mi'z kerek.

Katod penen anod arasi'nda elektron elektr maydani'ni'n' ta'sirinde $E = eU$ energiyasi'na iye boladi'. Bul an'latpada U arqali' anod penen katod arasi'ndagi' kernew (anodli'q kernew), al e arqali' elektronni'n' zaryadi' belgilengen. E energiyasi' ushi'n $E = \frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$ formulasi' ori'n aladi' [8]. Bul massasi' m ha'm tezligi v bolg'an elektronni'n' toli'q energiyasi' boli'p tabi'ladi'. Bizge kinetikali'q energiya E_{kin} kerek, al $E_{kin} = \frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}} - mc^2 = eU$ shaması'na ten' (kinetikali'q energiya = toli'q energiya - ti'ni'shli'qtag'i' energiya). Bunnan

$$v = c \sqrt{1 - \frac{m^2c^2}{(eU + mc^2)^2}} \quad (11)$$

an'latpasi'n alami'z. (11)-an'latpadag'i' tezliktin' ma'nisin (11)-an'latpag'a qoyi'wi'mi'z kerek. Bunday jag'dayda bir qansha a'piwayi'lasti'ri'wlardan keyin mi'naday an'latpalarg'a iye bolami'z:

$$\lambda = \frac{h}{mc \sqrt{1 - \frac{m^2c^4}{(eU + mc^2)^2}}} \frac{mc^2}{eU + mc^2} = \frac{hmc^2}{mc\sqrt{e^2U^2 + 2eUmc^2}}. \quad (12)$$

Eger elektronni'n' massasi'ni'n', zaryadi'ni'n', Plank turaqli'si'ni'n', jaqtı'li'qtı'n' vakuumdegi tezliginin' SGS sistemasi'ndagi' ma'nislerin, sonday-aq 1 sm = 10^{-8} angstrom ekenligin (12)-formulag'a qoyatug'i'n bolsaq, onda

$$\frac{1.98645 \cdot 10^{-8}}{\sqrt{2.62344 \cdot 10^{-18}U + 2.56697 \cdot 10^{-24}U^2}} \text{ angstrom} \quad (13)$$

formulasi'na iye bolami'z. Bul formula boyi'nsha U di'n' ma'nisleri voltlerde beriliwi kerek, al na'tiyje (ko'rinipli turg'ani'nday) angstromlerde ali'nadi'.

Eger biz (12)- ha'm (13)-formulalarg'a $U = 100000$ volt ma'nisin qoysaq, onda $\lambda = 0.0370444 \text{ \AA}$ tolqi'n uzi'nli'g'i'n alami'z. Bul arnawli' kestelerde berilgen tolqi'n uzi'nli'g'i'n ma'nisine da'l sa'ykes keledi.

Eger biz internacionalli'q birlikler sistemasi'nan (SI) paydalananug'i'n bolsaq, onda $m_e = 9,10938188 \cdot 10^{-31}$ g; $c = 2,99792458 \cdot 10^8$ sm/c; $e = 1,602176462 \cdot 10^{-19}$ Kl; $h = 6.62606876 \cdot 10^{-34}$ Dj·s [9] ha'm (13) tin' orni'na

$$\frac{1.98645 \cdot 10^{-15}}{\sqrt{2.62344 \cdot 10^{-32} U + 2.56697 \cdot 10^{-38} U^2}} \text{ angstrem} \quad (14)$$

an'latpasi'n alami'z. Bul an'latpalardi'n' barli'g'i' da da'l an'latpalar boli'p tabi'ladi' ha'm u'tirden keyingi 7-belgige shekem duri's na'tiyje beredi. Biz elektron mikroskoplari'nda ko'p qollani'latug'i'n kernewler ushi'n angstromlerdegi elektronlar tolqi'nлari'ni'n' uzi'nli'qlari'n beremiz:

Anodli'q kernew, voltlerde	Elektronlardi'n' tolqi'n uzi'nli'g'i', Å
50 000	0,0535531
75 000	0,0432248
100 000	0,0370144
125 000	0,0327439
150 000	0,0295704

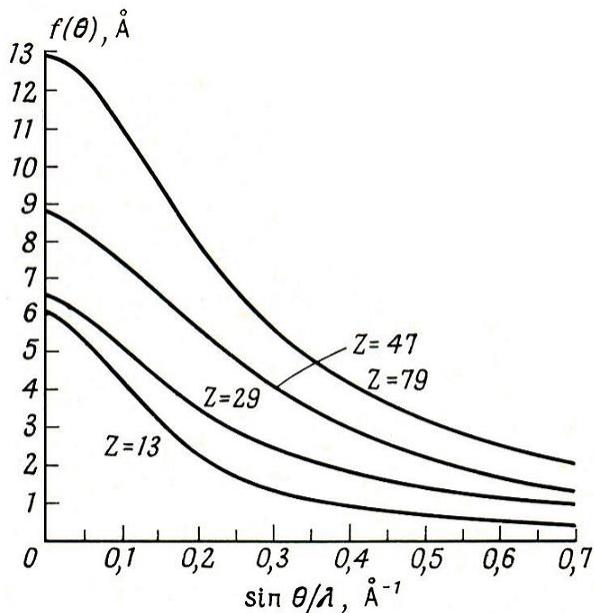
Solay etip biz duri's fizikali'q talqi'lawlar tiykari'nda elektron mikroskopi'ndag'i' elektronlar tolqi'nлari'ni'n' uzi'nli'g'i'n da'l ma'nisin esaplaytug'i'n formulalardi' keltirip shi'g'ardi'q.

Endi elektronlar difrakciyasi'ni'n' teoriyası' menen shug'i'llanami'z.

Elektronlardi'n' kristalli'q denelerdegi difrakciyasi'ni'n' teoriyası' rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi' teoriyası'na sa'ykes do'retildi. Biraq bul eki qubi'li'sti'n' ta'biyatları' pu'tkilley basqasha. Rentgen nurlari' atomlardi'n' elektronli'q ti'g'i'zli'qlari'nda shashi'raydi'. Al zaryadlari' bar bolg'anli'qtan elektronlar on' zaryadlarg'a iye atom yadrolari' ha'm atomlardag'i' elektronlar payda etken elektrostatikali'q maydan menen ta'sirlesedi. Solay etip atomni'n' shashi'rati'wshi'li'q qa'siyetileri atomlardi'n' quri'li'si'na baylani'sli' ha'm sonli'qtan ha'r qi'yli' ximiyali'q elementlerdin' elektronlardı' shashi'rati'wshi'li'q qa'siyetleri ha'r qi'yli'. Sanli'q jaqtan atomni'n' elektronlardı' shashi'rati'wshi'li'q qa'siyeti $f_e(\theta)$ atomlardi'n' nomeri Z ten g'a'rezli boli'p mi'na an'latpani'n' ja'rdeminde beriledi:

$$f_e(\theta) = \frac{me^2}{2h^2} \left(\frac{\lambda}{\sin \theta} \right)^2 (Z - f_p) \quad (14)$$

Bul an'latpadag'i' $\frac{me^2}{2h^2} = 2,38 \cdot 10^6$ sm⁻¹, f_p arqali' rentgen nurlari' ushi'n atomli'q amplituda belgilengen. θ ni'n' ma'nisinin' o'siwi menen f_e nin' ma'nisi tez kemeyedi. $f_e \sim (\sin \theta)^{-2}$ (bul jag'day 2-su'wrette keltirilgen). SHashi'rawdi'n' atomli'q amplitudası' shashi'rag'an nirdi'n' intensivligin xarakterleydi, al bul intensivliktin' ma'nisi f_e^2 qa tuwri' proporsional.



2-su'wret.

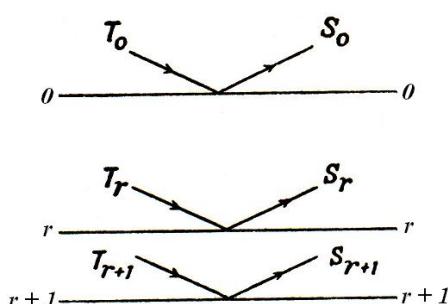
Elektronlardı'n' shashi'rawi'ni'n' $f_e(\theta)$ atomlı'q amplitudaları' [6]:

Al ($Z = 13$), Cu ($Z = 29$), Ag ($Z = 47$) ha'm Au ($Z = 79$) ushi'n berilgen.

Elektronlar atomlar menen rentgen nurları'na salı'sti'rg'annda millionlag'an ese ku'shlirek ta'sirlesedi. Usı'g'an baylani'sli' elektronlardı'n' shashi'raw amplitudası' rentgen nurları'ni'n' shashi'raw amplitudası'nan mi'n'lag'an ese, al elektronlardı'n' shashi'rag'an dastesinin' intensivligi rentgen nurları'ni'n' intensivliginen 1000 000 - 10 000 000 (million - on million) ese u'lken. Elektronlar atomlar menen ku'shli ta'sirlesetug'i'n bolg'anlı'qtan eksperimentlerdi joqarı' vakuumde o'tkeredi, al izertlenetug'i'n ob'jeektlerden o'tiwhi elektronlar da'stesi paydalani'latug'i'n jag'dayda (prosveshivayushaya elektronnaya mikroskopiya jag'daydari'nda) izertlenetug'i'n ob'jeektler si'pati'nda qali'n'li'g'i' shama menen 10 - 50 nm (100 - 500 Å) folgalar (plastinkalar) qollanı'ladi'. Juqa kristalli'q ob'jeektler ali'w problemesi'nan qutı'li'w ushi'n izertlewshiler geypara jag'dayda ob'jeektlerdin' betinen shashi'rag'an elektron nurları'n da paydalanadi'. Biraq bunday jag'daydarda ali'ng'an difrakciyali'q su'wret izertlenilip atı'rg'an denenin' qali'n'li'g'i' 1 - 10 nm bolg'an betinen g'ana informaciyalardı' ala aladi' (sebebi 1 - 10 nm den artı'g'i'raq teren'likte jaylasqan oblastlardan difrakciyag'a ushi'rag'an elektronlar tolqi'nları' sezilerlikte intensivlikte baqlanbaydi').

4-§. Rentgen nurları'ni'n' shashi'rawi'ni'n' Darwin boyı'nsha teoriyası'

1914-jı'li' SH.Darwin (Ch.Darwin) shashi'rati'wshi' kristallografiyali'q tegislikleri kristalli'q u'lginin' (obrazectin') betine parallel bolg'an ideal kristallardag'i' rentgen nurları'ni'n' shashi'rawi'n' izertledi [10]. Usı'nday sxemada baqlanatug'i'n rentgen nurları'ni'n' difrakciyasi'n Bregg difrakciyasi' (Bregg boyı'nsha difrakciya) dep ataymi'z (1-paragraftı' qaran'i'z).



3-su'wret.

xy tegisligi menen sheklengen, ken'isliktin' yari'mi'n toltı'ri'p turatug'i'n ideal kristaldi'n' rentgen nurları'n shashi'rati'wi'.

xy tegisligi menen sheklengen, ken'isliktin' yari'mi'n tolqi'ri'p turatug'i'n ideal kristaldi'n' rentgen nurlari'n shashi'rati'wi'n qaraymi'z (3-su'wret). Su'wrettegi tuwri' si'zi'qlar shashi'rati'wshi' tegisliklerdin' izlerine sa'ykes keledi. Bul tegislikler 0, 1, 2, ..., r sanlari' ja'rdeinde nomerlengen. Meyli kristalg'a almlitudas'i' T_0 bolg'an tegis tolqi'n ϑ mu'yesi menen kelip tu'setug'i'n bolsi'n. Bazi' bir r tegisligine tu'siwshi tolqi'nni'n' amplitudasi'ni'n' usi' tegisliktin' tikkeley u'stindegi ma'nisin T_r arkali' belgileymiz. Usi'g'an sa'ykes shashi'rag'an tolqi'nlardi'n' amplitudalari'n S_0, S_r arqali' belgileymiz

Bir atomli'q tegislik ta'repinen shashi'raw bag'i'ti'ndag'i' shashi'rati'lg'an tolqi'nni'n' amplitudasi'ni'n' tu'siwshi tolqi'nni'n' amplitudasi'na qatnasi' $\frac{A_p}{A_0} = -iq$ shamasi'na ten' ekenligi belgili. Bul jerde

$$q = -\frac{Nd\lambda}{\sin \vartheta} F(2\vartheta) \frac{e^2}{mc^2}. \quad (15)$$

Sol tegislik ta'repinen o'tken nur bag'i'ti'ndag'i' tolqi'n ushi'n $\frac{A_p}{A_0}$ qatnasi'ni'n' ma'nisinin' $-iq_0$ ekenligi ani'q. Bul jerde

$$q_0 = -\frac{Nd\lambda}{\sin \vartheta} F(0) \frac{e^2}{mc^2}. \quad (15)$$

Bunday jag'dayda r-nomerli tegislik arqali' o'tken tolqi'nni'n' amplitudasi'n $T_r(1 - iq_0 - \delta)$ tu'rinde jaza alami'z. Bul an'latpada δ arqali' juti'li'wdi'n' saldarı'nan tegislikten o'tip ati'rg'an nurdi'n' amplitudasi'ni'n' jog'ali'wi'ni'n' u'lesi.

r tegisliginde shashi'rag'an tolqi'nni'n' amplitudasi'n $-iqT_r$ tu'rinde jazi'w mu'mkin. Bunday jag'dayda tolqi'n atomli'q tegislikler arqali' o'tkendegi fazani'n' o'zgerisin φ arqali' belgilep T_{r-1}, T_{r+1}, S_r ha'm S_{r+1} lerdi baylani'sti'ratug'i'n ten'lemelerdi jazi'wg'a boladi'. Haqi'yqati'nda da T_{r+1} shamasi' r tegisligi arqali' o'tiwshi T_r tolqi'ni'nan, r menen $r + 1$ tegislikleri arasi'ndag'i' joldan, r tegisligi arqali' keri bag'i'tta shashi'rag'an S_{r+1} tolqi'ni'nan qosiladi'. Bul tolqi'n fazalar ayi'rmasi' 2φ shamasi'na o'zgeretug'i'n qos joldi' o'tedi. Bunday jag'dayda

$$T_{r+1} = T_r(1 - iq_0 - \delta)e^{-i\varphi} - iqS_{r+1}e^{-2i\varphi}. \quad (16)$$

T_r menen S_r ler ushi'n mi'nani' jazi'wg'a boladi':

$$T_r = T_{r-1}(1 - iq_0 - \delta)e^{-i\varphi} - iqS_r e^{-2i\varphi}, \quad (17)$$

$$S_r = -iqT_r + S_{r+1}(1 - iq_0 - \delta)e^{-i\varphi}. \quad (18)$$

Endi

$$e^{-i\varphi} = b, \quad 1 - iq_0 - \delta = a \quad (19)$$

belgilewlerin kirgizemiz. Bunday jag'dayda (16)-(18) ten'lemeler sistemasi'n mi'na tu'rde ko'shirip jazami'z:

$$T_{r+1} = T_r ab - iqS_{r+1}b^2, \quad (20)$$

$$T_r = T_{r-1}ab - iqS_rb^2, \quad (21)$$

$$S_r = -iqT_r + S_{r+1}ab. \quad (22)$$

(20)-(22) tenlemeler sistemasi'nan S_r menen S_{r+1} shamalari'n joq etemiz. Buni'n' ushi'n u'shinshi ten'lemenin $b^2(-iq)$ g'a, al ekinshisin $-ab$ g'a ko'beytemiz ha'm bunnan keyin olardi' bir birine qosami'z. Na'tiyjede T_r ushi'n mi'na tu'rdegi rekurrent ten'lemenin alami'z:

$$(T_{r+1} - T_{r-1})ab = T_r(1 + a^2b^2 + b^2q^2). \quad (23)$$

T_r shaması' r din' o'siwi menen a'ste-aqi'ri'n kemeyedi. Sonli'qtan sheshimdi $T_{r+1} = xT_r$ tu'rinde izleymiz. Bul an'latpadag'i' $x < 1$. x arqali' an'lati'lg'an T_{r+1} menen T_{r-1} shamalari'n (23)-an'latpag'a qoyi'p

$$x^2 - \frac{1 + a^2b^2 + b^2q^2}{ab}x + 1 = 0 \quad (24)$$

ten'lemesin alami'z. Bunday tenlemenin' tu'birlerinin' (korenlerinin') $x_1x_2 = 1$ qanaatlandi'ratug'i'nli'g'i'n bilemiz. demek ten'lemenin' tu'birlerinin' biri 1 den u'lken, al ekinshisi 1 den kishi. Tu'birlerdin' 1 den kishi bolg'ani' g'ana fizikali'q ma'niske iye boladi'.

(20)- ha'm (21)-an'latpalarg'a $T_{r-1} = \frac{T_r}{x}$ ha'm $T_{r+1} = xT_r$ shamalari'n qoyi'p $S_{r+1} = xS_r$ ekenligin da'rha'l biliwge boladi'. Bunday jag'dayda (22)-ten'lemeden mi'nani' alami'z:

$$\frac{S_r}{T_r} = \frac{-iq}{1 - abx} = \frac{S_0}{T_0}. \quad (25)$$

x ti'n' ma'nisin (24)-an'latpadan, al a menen b ni'n' ma'nislerin (19)-an'latpadan ali'p $\frac{S_0}{T_0}$ din' shaması'n esaplaymi'z. Usi'ni'n' menen ma'sele sheshildi dep esaplawg'a boladi'. Biraq bunnan keyingi esaplawlardi'n' qolayli' boli'wi' ushi'n biz bazi' bir a'piwayi'lasti'ri'wlar menen shug'i'llanami'z.

Bir tegislikten ekinshi tegislikke o'tkende ori'n alatug'i'n fazalar ayi'rmasi' $\frac{2d}{\lambda} d \sin \vartheta = m\pi + v$ shaması'na ten'. Bul an'latpadag'i' v kishi shama, sebebi ϑ mu'yeshinin' ma'nisi Breggtin' shashi'raw mu'yeshinen az shamag'a ayraladi'. Rentgen nurlari' juti'lmaydi' dep esaplaymi'z, yag'ni'y $\delta = 0$. x ti'n' orni'na $x = (1 - \xi)e^{im\pi}$ ten'ligi ori'nlanatug'i'nday etip jan'a ξ o'zgeriwshisin kirgizemiz (bul o'zgeriwshinin' kompleks shama boli'wi' mu'mkin). ξ, q, q_0 ha'm v si'yaqli' kvadratlari' kishi bolg'an shamalardi' saqlap qalami'z. Bunday jag'dayda (24)-an'latpa mi'na tu'ske enedi:

$$\xi^2 = q^2 - (q_0 + v)^2 \quad (26)$$

Bo'limindegi kishi ag'zalardi'n' kvadratlari'n esapqa almay (25)-ten'lemeden

$$\frac{S_0}{T_0} = \frac{-q}{q_0 + v \pm \sqrt{(q_0 + v)^2 - q^2}}$$

an'latpasi'n alami'z. $q_0 + v = \varepsilon$ dep belgilesek, onda

$$\frac{S_0}{T_0} = \frac{-q}{\varepsilon \pm \sqrt{\varepsilon^2 - q^2}} \quad (27)$$

ten'lemesine iye bolami'z.

(27)-ten'leme ε nin' kishi bolg'an $-q < \varepsilon < +q$ ma'nislerinde $\frac{S_0^2}{T_0^2}$ qatnasi'ni'n' birge ten' ekenligin, yag'ni'y toli'q shag'i'li'si'wdi'n' ori'n alatug'i'nli'g'i'n ko'rsetedi. Haqi'yqati'nda da (27)-formulani'n' bo'limi kompleksli shama ha'm o'zinin' tu'yinlesine ko'beytilse q g'a

aylanadi'. ε nin' bul intervaldi'n' eki ta'repinen de u'lkeyiwi menen shashi'raw amplitudasi' ha'm og'an sa'ykes shashi'raw intensivligi tez kemeyedi. Eger $\varepsilon > +q$ bolsa, onda (27)-formulada plus belgisin, al $\varepsilon < -q$ da minus belgisin paydalani'w kerek.

Biz belgilewlerde bir qansha ani'qli'qlar kirgizemiz. q arqali' biz sheksiz u'lken atomli'q tegislik ta'repinen usi' tegislikke kelip tu'setug'i'n tolqi'nni'n' amplitudasi' birge ten', bul tolqi'ndag'i' E vektori' tolqi'nni'n' tu'siw tegisligine perpendikulyar bolg'an jag'daydag'i' shashi'rag'an tolqi'nni'n' amplitudasi'. Eger (1)-ten'lemedegi (Vulf-Bregg ten'lemesi) difrakciyalı'q mu'yeshti ϑ_0 arqali' belgilesek, onda $\vartheta = \vartheta_0 + \varepsilon$ boli'p, qosimsha jazi'lg'an kishi mu'yesh ε qosimsha fazalar ayi'rmasi'ni'n' payda boli'wi'na ali'p keledi. Basqa so'z benen aytqanda

$$\frac{4\pi}{\lambda} d[\sin(\vartheta_0 + \varepsilon) - \sin \vartheta_0] = \frac{4\pi d\varepsilon}{\lambda} \cos \vartheta_0 = \delta.$$

Kristalg'a kelip tu'siwshi tolqi'nni'n' amplitudasi'n 1 (bir) ge ten' dep esaplaşa, onda bir birine parallel, al ara qashi'qli'g'i' d bolg'an N dana tegislik ta'repinen shashi'rati'lg'an tolqi'nni'n' amplitudasi'

$$A = q[1 + e^{-i\delta} + e^{-2i\delta} + \dots + e^{-(N-1)i\delta}] = q \frac{1 - e^{-Ni\delta}}{1 - e^{-i\delta}}$$

formulasi' menen ani'qlanatug'i'nli'g'i'n ko'remiz. Al amplitudani'n' kvadrati' bolsa

$$A^2 = |q|^2 \frac{\sin^2 \left(N \frac{2\pi d\varepsilon}{\lambda} \cos \vartheta_0 \right)}{\sin^2 \left(\frac{2\pi d\varepsilon}{\lambda} \cos \vartheta_0 \right)} \quad (28)$$

formulasi'ni'n' ja'rdeinde esaplanadi' (bul funkciyag'a uqsas funkciyani'n' grafigi 1-su'wrette keltirilgen).

Eger usi'nday plastinka ushi'n integralli'q shashi'raw koefficienti bolg'an ρ shaması'n esaplaytug'i'n bolsaq, onda

$$\rho = \frac{E\omega}{I_0} = \frac{n^2 \lambda^2}{\sin 2\vartheta} F^2 \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{1 + \cos^2 2\vartheta}{2} U \quad (29)$$

an'latpasi'n alami'z. Bul an'latpada n arqali' kristaldi'n' ko'lem birligindegi elementar qutı'lar sani', F arqali' strukturalı'q faktor, al U arqali' kristaldi'n' toli'q ko'lemi belgilengen.

(29)-an'latpa ideal-mozaykali'q kristallar ushi'n krinematikali'q teoriya tiykari'nda keltirilip shi'g'ari'lg'an an'latpa boli'p tabi'ladi'. Bun an'latpa to'mende dinamikali'q teoriya tiykari'nda ali'ng'an an'latpa menen sali'sti'ri'w ushi'n kerek boladi' [(30)-formula].

Biz endi esaplawlari'mi'zdi' dawam ete alami'z.

Rentgen nurlari'ni'n' kristaldi'n' shegarasi'ndag'i' si'ni'wi'n esapqa almasaq ha'm ϑ din' ma'nisi ϑ_0 ge ten' bolatug'i'n bolsa, onda onda ani'qlama boyi'nsha ϑ nolge ten' $\frac{2\pi}{\lambda} d \sin \vartheta = m\pi + \vartheta$ sha'rtinen

$$\vartheta = \frac{2\pi}{\lambda} d \cos \vartheta (\vartheta - \vartheta_0)$$

ekenligi ko'rinipli tur. Eger biz ϑ ni'n' kishi ekenligin esapqa alsaq, onda $\cos \vartheta$ di shama menen $\cos \vartheta_0$ shaması'na ten' dep ali'wg'a boladi'. Bunnan

$$\vartheta - \vartheta_0 = \frac{\lambda}{2\pi d \cos \vartheta} \vartheta = \frac{\lambda}{2\pi d \cos \vartheta_0} \vartheta$$

an'latpasi'n alami'z.

Integralli'n' shag'i'li'si'w ρ shag'i'li'si'w iymekligi asti'ndag'i' maydang'a ten':

$$\rho = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{R}(\vartheta) d\vartheta = \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{S_0}{T_0} \right|^2 d\vartheta = \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{S_0}{T_0} \right|^2 d\varepsilon \frac{d\vartheta}{d\varepsilon}.$$

$\vartheta - \vartheta_1 = \Delta\vartheta = \frac{\lambda\varepsilon}{2\pi d \cos \vartheta_0}$ formulasi'nan $\frac{d\vartheta}{d\varepsilon} = \frac{\lambda}{2\pi d \cos \vartheta_0}$ ekenlige iye bolami'z. Integral u'sh oblastqa bo'linedi:
birinshisi $\varepsilon < -q$;
ekinshisi $-q < \varepsilon < +q$;
u'shinshisi $\varepsilon > +q$.
Bunday jag'dayda

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{S_0}{T_0} \right|^2 d\varepsilon &= 2q + 2 \int_q^{\infty} \frac{q^2}{(\varepsilon + \sqrt{\varepsilon^2 - q^2})^2} d\varepsilon \text{ ha'm} \\ \int_q^{\infty} \frac{q^2}{(\varepsilon + \sqrt{\varepsilon^2 - q^2})^2} d\varepsilon &= \frac{1}{q^2} \int_q^{\infty} (2\varepsilon^2 - 2\varepsilon\sqrt{\varepsilon^2 - q^2} - q^2) d\varepsilon = \\ &= \frac{1}{q^2} \left[\frac{2}{3}\varepsilon^2 - \frac{2}{3}(\varepsilon^2 - q^2)^{3/2} - \varepsilon q^2 \right]_q^{\infty} = \frac{1}{3}q. \end{aligned}$$

Bunnan tu'siw tegisligine perpendikulyar bag'i'tta polyarlang'an nurlani'w ushi'n mi'na an'latpani' alami'z:

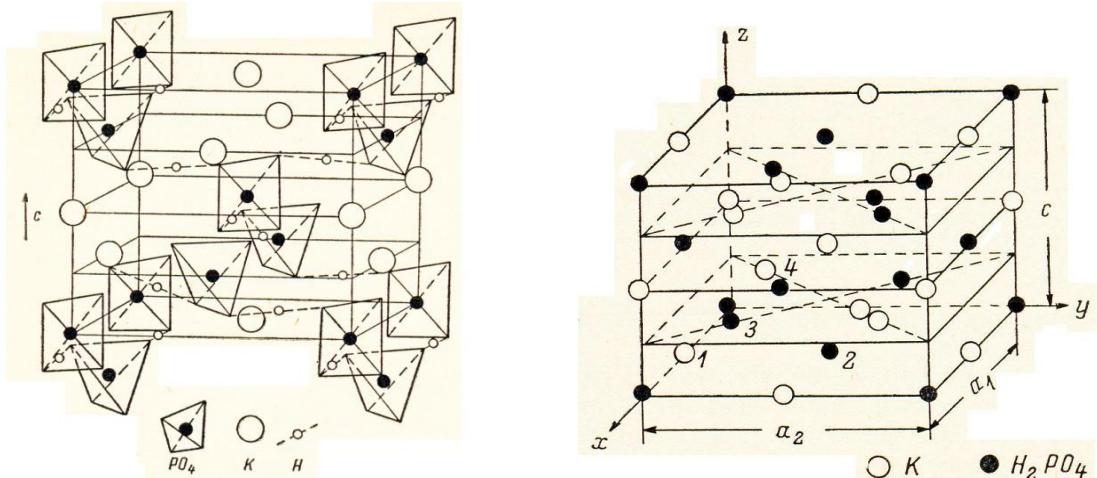
$$\rho = \frac{8}{3}q \frac{\lambda}{2\pi d \cos \vartheta} = \frac{8}{3\pi} \cdot \frac{N\lambda^2}{\sin 2\vartheta} \frac{e^2}{mc^2} F(2\vartheta) \quad (30)$$

Eger kristallarg'a kelip tu'siwshi nurdi'n' polyarizaciylanbag'anli'g'i'n esapqa alatug'i'n bolsaq ha'm oni' polyarizaciyan'i' eki qurawshi'lari'na jaysaq, onda shashi'rawdi'n' integralli'q intensivligi ushi'n mi'na formulani' alami'z:

$$\rho = \frac{8}{3\pi} \cdot \frac{e^2}{mc^2} \cdot \frac{1 + |\cos 2\vartheta|}{2\sin 2\vartheta} N\lambda^2 F(2\vartheta). \quad (31)$$

Bul formula Laueni'n' kinematikali'q teoriyası'nda ideal-mozaykali'q kristall ushi'n ali'ng'an (29)-formuladan u'lken ayi'rmag'a iye. Ideal kristall jag'dayi'nda ρ strukturali'q faktor $F(2\vartheta)$ tin' birinshi da'rejesine tuwri' proporsional, al kinematikali'q teoriyada bolsa strukturali'q faktordi'n' kvadrati'na proporsional. Mu'yeshlik ko'beytiwshiler de, tolqi'n uzi'nli'g'i'na g'a'rezlilik te ha'm $\frac{e^2}{mc^2}$ ko'beytiwshisinin' da'rejesi de birdey emes.

Endi $\frac{e^2}{mc^2} = 2,8132 \cdot 10^{-13}$ sm ko'beytiwshisi haqqi'nda mag'li'wmat beri o'temiz. Bul shamani' elektronni'n' klassikali'q radiusi' dep ataymi'z. Bul shama $\frac{e^2}{R}$ shamasi'n (potencial energiya) elektronni'n' ti'ni'shli'qtag'i' mc^2 energiyasi'na ten'lestiriw joli' menen ali'nadi'.



4-su'wret. KH_2PO_4 kalyi digidrofosfati' kristallari'ni'n' elementar quti'lari'.

- (a) Kyuri noqati'nan joqari' temperaturalarda (tetragonalli'q parafazada, quramali' model) ha'm (b) Kyuri noqati'nan to'mengi temperaturalarda (ferroelektriklik ortonombali'q fazada, a'piwayi'lasti'ri'lga'an model). 1 – 4 cifralari' menen bir birine ekvivalent emes strukturali'q birlikler belgilengen.

Endi ayqi'n esaplawlarg'a o'temiz. Ko'pshilikke belgili ferroelektriklik kalyi digidrofosfati' KH_2PO_4 kristallari' ushi'n ali'ng'an na'tiyjelerdi ko'remiz. Bul kristall o'jire temperaturalari'nda paraelektrik (a'dettegidey si'zi'qli' dielektrik) boli'p tetragonalli'q quri'li'ska iye: $a = 7,45236 \text{ \AA}$, $c = 6,97298 \text{ \AA}$ (simmetriyani'n' ken'isliktegi topari' $I\bar{4}2d$). 121,3 – 122 K temperataralarda KH_2PO_4 kristallari'nda ferroelektriklik fazali'q o'tiw ori'n ali'p, usi'ni'n' saldarı'nan kristall ortonombali'q kristalg'a aylanadi'. 105 K temperaturadagi' kristalli'q pa'njererin' turaqlı'lari': $a = 10,54581 \text{ \AA}$, $b = 10,46634 \text{ \AA}$ ha'm $c = 6,92241 \text{ \AA}$ (simmetriyani'n' ken'isliktegi topari' $Fdd2$). Ferroelektriklik fazali'q o'tiwdin' saldarı'nan kristaldi'n' elementar quti'si'ni'n' ko'lemi sezilerliktey o'zgermeydi $[(6 - 10) \cdot 10^{-3}$ procent g'ana].

Ferroelektriklik fazali'q o'tiwdi kristalda polidomenlik quri'li's payda boladi'. Na'tiyjede atomli'q-kristalli'q quri'li'si' jetilisken u'lgiler polidomenlik kristallarg'a aylanadi'. Usi'g'an baylani'sli' paraelektriklik xaldag'i' KH_2PO_4 kristallari'n jetilisken atomli'q-kristalli'q kuri'li'sqa iye, sonli'qtan olardı' ideal-mozaykali'q kristall dep qarawi'mi'zg'a boladi' ha'm sonli'qtan rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' kinematikali'q teoriyasi'n paydalani'wg'ap boladi' dep boljaymi'z. Usi' boljawdi'n' duri's yamasa duri's emes ekenligin sanli' bahalaw ushi'n KH_2PO_4 kristallari'ni'n' eki modifikasiyasi' ushi'n strukturali'q faktordi'n' ma'nislerin esaplaymi'z.

Strukturali'q faktordi'n'

$$F_{hkl} = \sum_{k=1}^N f_k e^{i2\pi(hx_k + ky_k + lz_k)} \quad (32)$$

formulası' ja'rdeinde esaplanatug'i'nli'g'i' ken'nen ma'lim. Eger kristall simmetriya orayı'na iye bolatug'i'n bolsa (32)-an'latpa a'piwayi'lasadi' ha'm

$$F_{hkl} = 2 \sum_{k=1}^{N/2} f_k \cos 2\pi(hx_k + ky_k + lz_k) \quad (33)$$

tu'rine enedi. Solay etip kalyi digidrofosfati' kristaldi'n' tetragonalli'q paraelektrlik fazasi' ushi'n strukturali'q faktor (33)-formula menen, al ferroelektrlik ortonombali' fazasi' ushi'n (32)-formula tiykari'nda esaplan'i'wi' kerek.

Bul formulani' bi'layi'nsha da jaza alami'z:

$$|F(h, k, l)|^2 = \left[\sum_{j=1}^N f_j \cos 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j) \right]^2 + \left[\sum_{j=1}^N f_j \sin 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j) \right]^2 \quad (34)$$

Bul haqi'yqi'y funkciya boli'p tabi'ladi' (kvadratqa ko'teriw menen kompleksli strukturali'q faktordan qutu'ldi'q).

Strukturali'q faktordi' esapqa ali'w menen (yag'ni'y elementar qutu'dag'i' atomlardi'n' koordinatalari'n esapqa ali'w menen) biz qa'legen hkl shashi'rawi'ni'n' (shag'i'li'si'wi'ni'n', hkl indeksli difrakciyag'a ushi'rag'an nurdin') sali'sti'rmali' intensivligin ani'q ayta aladi' ekenbiz. Bul juwmaq elektronlar tolqi'nlarini'n' kristalli'q denelerdegi difrakciyasi' ushi'n da duri's.

Kalyi digidrofosfati' ushi'n strukturali'q amplituda bi'layi'nsha esaplanadi' (to'rt tu'rli atomlardi'n' strukturali'q amplitudalari'ni'n' qosi'ndi'si'):

$$F = \sum_K + \sum_P + \sum_O + \sum_H . \quad (35)$$

Bul an'latpalarda \sum_K kalyi boyi'nsha, \sum_P fosfor boyi'nsha, \sum_O kislород boyi'nsha ha'm \sum_H vodorod boyi'nsha strukturali'q amplituda.

Fosfor boyi'nsha strukturali'q amplituda bi'layi'nsha esaplanadi':

$\sum_P = \frac{1}{4} f_P \sum_{j \in I} \exp(hx_j + ky_j + lz_j)$ ha'm tag'i' basqalar. Bul an'latpada f_P arqali' fosfor ushi'n atomli'q faktor belgilengen.

Fosfor atomlari'ni'n' elementar qutu'lardagi'i' koordinatalari'n esapqa alami'z. Olar mi'nalar: (000), (0,1/2,1/4), (1/2,1/2,1/2). Usi' shamalardi' esapqa ali'p biz mi'nag'an iye bolami'z:

$$\sum_{j \in I} \exp(hx_j + ky_j + lz_j) = [1 + e^{i\pi(h+k+l)}][1 + e^{i\pi(k+l/2)}].$$

Usi' an'latpalardi' esapqa alg'an halda so'niwlerdi tabami'z:

(h,0,0) difrakciyali'q maksimumlari' arasi'nda $h = 2n$ ha'm $\sum_P = f_P$.

(h,h,0) difrakciyali'q maksimumlari' arasi'nda $h = 2n$ ha'm $\sum_P = f_P$.

(0,0,l) difrakciyali'q maksimumlari' arasi'nda $l = 4n$ ha'm $\sum_P = f_P$.

Kalyi atomlari' ushi'n sa'ykes mi'na baylani'slardi' alami'z:

(h,0,0) difrakciyali'q maksimumlari' arasi'nda $h = 2n$ ha'm $\sum_K = f_K$.

(h,h,0) difrakciyali'q maksimumlari' arasi'nda $h = 2n$ ha'm $\sum_K = f_K$.

(0,0,l) difrakciyali'q maksimumlari' arasi'nda $l = 4n$ ha'm $\sum_K = f_K$.

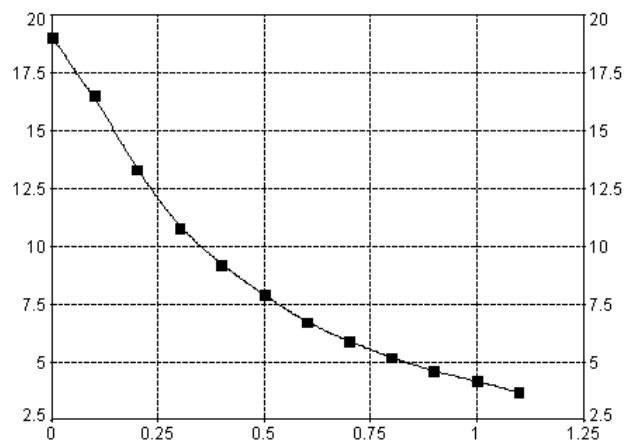
Kalyi, fosfor, vodorod ha'm kislород atomlari' ushi'n rentgen tolqi'nlarini'n' atomli'q shashi'rawi'ni'n' $\sin\theta/\lambda$ den g'a'rezligin tabi'w qi'yi'nli'q payda etpeydi. Haqi'yqati'nda da qolda bar a'debiyatlarda bul atomlar ushi'n mi'naday atomli'q faktorlardi'n' ma'nislerin beredi:

$\frac{\sin\theta}{\lambda}$	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0	1.1
$\frac{\lambda}{2\sin\theta}$		5	2.5	1.667	1.25	1	0.833	0.714	0.625	0.556	0.5	0.455
H	1.0	0.81	0.48	0.25	0.13	0.07	0.04	0.03	0.02	0.01	0.00	0.00
O	8.0	7.1	5.3	3.9	2.9	2.2	1.8	1.6	1.5	1.4	1.35	1.26
P	15.0	12.4	10.0	8.45	7.45	6.5	5.65	4.8	4.05	3.4	3.0	2.6
K	19.0	16.5	13.3	10.8	9.2	7.9	6.7	5.9	5.2	4.6	4.2	3.7

Eskertiw: $\frac{\lambda}{2\sin\theta}$ shaması' kristallografiyalı'q tegislikler arası'ndag'i' qashi'qli'qqa ten', yag'ni'y $d = \frac{\lambda}{2\sin\theta}$.

Endigi ma'sele bul kestelik mag'li'wmatlardi' analitikali'q an'latpag'a aylandı'ri'w boli'p tabi'ladi' (matematikali'q til menen aytqanda approksimaciya menen shug'ilani'wi'mi'z kerek).

Ma'seleni sheshiw ushi'n biz SYSTAT TableCurve 2D 5.01 programması'nan paydalanimi'z. Bul matematika iliminin' ha'r qi'yli' tarawlari'nan ali'ng'an 3665 funkciyani'n' ja'rdeinde eksperimentte ali'ng'an na'tiyjelerdi avtomatlastı'ri'wg'a mu'mkinshilik beredi. Kelesi su'wrette usi' programma ja'rdeinde kaly ushi'n joqari'dag'i' kestede berilgen mag'li'wmatlar ha'm qayta islewdin' na'tiyjesinde ali'ng'an approksimaciyalı'q iymeklik berilgen.



SHashi'rawdi'n' atomli'q faktori'ni'n' kaly ushi'n ali'ng'an approksimaciyalı'q iymekligi. Abscissada $\frac{\sin\theta}{\lambda}$ ni'n', al ordinatada shashi'rawdi'n' atomli'q faktori'ni'n' ma'nisi berilgen. To'rt mu'yeshlikler joqari'da keltirilgen kestedegi mag'li'wmatlarga sa'ykes keledi.

Biz strukturalı'q faktordi' «Mathematica» programmalaw tilinde esaplawdi' a'melge asi'rdi'q ha'm usi'g'an baylani'sli' esaplawlar algoritmin bere alami'z. Esaplaw sxemasi' to'mendegilerden ibarat:

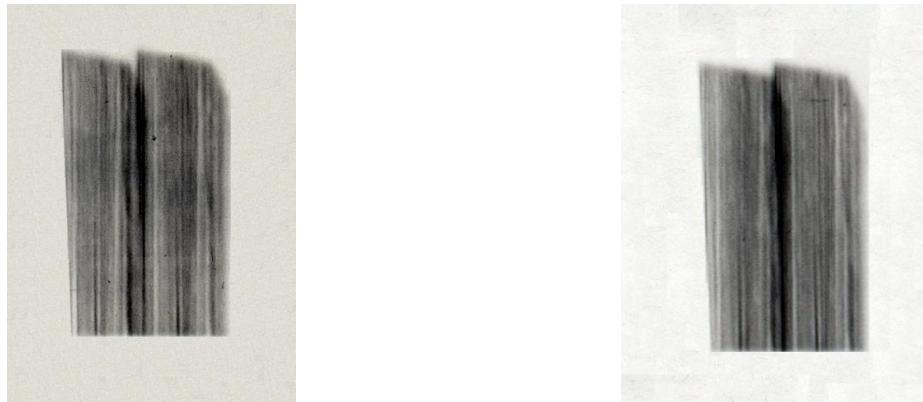
1. Izertlenip ati'rg'an kristalli'q ob'jeektke kiriwshi ximiyali'q elementlerdin' atomli'q faktori'ni'n' difrakciyalı'q mu'yeshke g'a'rezliginin' juwi'q tu'rdegi analitikali'q an'latpasi'n' ali'w (bizin' jag'dayi'mi'zda kaly, fosfor, vodorod ha'm kislorod ushi'n). Bul keyinirek elektronlar tolqi'nları' ushi'n ko'rsetiledi.
2. Elementar quti'lardag'i' atomlar iyetep turg'an noqatlardi'n' da'l koordinatalari'n biliw.
3. Strukturalı'q faktor ushi'n (35)-formulag'a sa'ykes keliwshi toli'q an'latpa jazi'w.
4. Rentgen nurlari'ni'n' o'shiw ni'zamli'qlari'n (usloviya ili zakoni' pogasaniya) biliw ha'm bull ni'zamli'qlar ori'nlanatug'i'n keri pa'njere tu'ynlerin esaplawlardan ali'p taslaw.
5. Paydalani'latug'i'n rentgen tolqi'nları'ni'n' tolqi'n uzi'nli'qlari'na saykes polyarizaciyanbag'an nurlar ushi'n strukturalı'q faktordi'n' o'zinin' da'l ma'nislerin esaplaw ha'm ali'ng'an na'tiyjelerdi eksperimente o'lshegen na'tiyjeler menen sali'sti'ri'w.

Vodorod ha'm kislorod boyi'nsha bir qansha quramali'raq bolg'an na'tiyjeler ali'nadi'.
Esaplawlar

$$\frac{(F_{hkl})_{kin}}{(F_{hkl})_{din}} \approx 4 \quad (34)$$

ekenligin ko'rsetti. Bul eksperimentlerde ali'ng'an na'tiyjelerge toli'q sa'ykes keldi.

KH_2PO_4 kristallari'ni'n' ferroelektriklik fazalari'n rentgentopografiyali'q izertlewler bari'si'nda rentgen tolqi'nlarini'n' difrakciyasi'ni'n' dinamikali'q ha'm kinematikali'q teoriyalari'n bir biri menen sali'sti'ri'p ko'riw mu'mkinshiligi tuwi'ladi'.



5-su'wret. Ferroelektriklik KH_2PO_4 kristalli'nan ali'ng'an rentgentopografiyali'q su'wretler [kristalli'q u'lginin' beti tetragonalli'q fazalag'i' (110) kristallografiyali'q betke parallel, c ko'sheri vertikal bag'i'tta bag'i'tlang'an, rentgentopografiyali'q mu'yeshlik skannerlew metodi' (usi'li')].

KH_2PO_4 kristallari'nda ferroelektriklik fazali'q o'tiwlerde polidomenlik quri'li's payda boli'p, bul quri'li's eki domenler sistemasi'nan turadi'. Strukturali'q domenlerdin' payda boli'wi' kristaldi'n' sezilerliktey mayi'si'wi'na ali'p kelmeydi. Biraq polidomenlik kompleksler arasi'nda kristall ku'shli mayi'sadi' ha'm idel-mozaikali'q kristallardi'n' modelin beredi. Solay etip polidomenlik kompleksler arasi'ndag'i' o'tiw oblasti'nda rentgen nurlari'ni'n' shashi'raw rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' kinematikali'q teoriyası', al ayi'ri'm domenlerde yamasa polidomenlik komplekslerde shashi'raw dinamikali'q teoriya ja'rdeinde ta'riyiplenedi dep boljawg'a boladi'.

5-su'wrette ferroelektriklik KH_2PO_4 kristalli'nan ali'ng'an rentgentopografiyali'q su'wret keltirilgen [kristalli'q u'lginin' beti tetragonalli'q fazalag'i' (110) kristallografiyali'q betke parallel, c ko'sheri vertikal bag'i'tta bag'i'tlang'an, rentgentopografiyali'q mu'yeshlik skannerlew usi'li']. Su'wrettegi [001] ko'sherine parallel bolg'an jolaqlar polidomenlik komplekslerdin' izleri boli'p tabi'ladi'. Bizin' ma'selemiz [001] ko'sherine perpendikulyar bag'i'tta (yag'ni'y [110] ko'sheri bag'i'ti'nda) fotoplenkani' fotometrlew (yag'ni'y difrakciyag'a ushi'rag'an rentgen nurlari'ni'n' intensivliklerin o'lshew) boli'p tabi'ladi'. Bul jag'dayda da shama menen $\frac{(F_{hkl})_{kin}}{(F_{hkl})_{din}} \approx 4$ ma'nisi ali'ndi'.

Solay etip biz rentgen tolqi'nlarini'n' difrakciyasi'ni'n' kinematikali'q ha'm kinematikali'q teoriyalari'n bir ob'jeektke qollani'w ma'selesin bir ob'jeektti izertlew bari'si'nda sheshe aladi' ekenbiz. Biz alg'an na'tiyjeler KH_2PO_4 kristallari'ni'n' ideal-mozaikali'q ta emes, ideal da emes ekenligin ko'rsetedi.

Endi ρ ni'n' joqari'dag'i' (29)- ja'ne (31)- eki formula menen esaplang'an ha'm eksperimentte ali'ng'an ma'nislerin sali'sti'ri'p ko'riw ushi'n beremiz.

Kristalli'q zat	hkl	ρ_{Din}	ρ_{Kin}	ρ_{eksper}
Al	111	19,6	818,3	580
	222	6,3	157,9	144,1
	333	0,37	1,39	1,43
CaCO_3	$\sin \vartheta$	ρ_{Din}	ρ_{Kin}	ρ_{eksper}
	0,1	30,9	1220	240
	0,5	1,7	12,5	2,4

Joqari'da keltirilgen kestelerdegi mag'li'wmatlar Al menen CaCO_3 kristallari'ni'n' da idealli'q-mozaikali'q yamasa ideal emes ekenligin ko'rsetedi.

5-§. Rentgen nurlari'ni'n' shashi'rawi'ni'n' Evald boyi'nsha teoriyası'ni'n' elementleri

Rentgen nurlari'ni'n' difrakciyasi'ni'n' Evald boyi'nsha (dinamikali'q) teoriyası'nda kristalli'q ken'isliktegi elektromagnitlik tolqi'nni'n' tarqali'wi' qarap shi'g'i'ladi' ha'm elektromagnit tolqi'nlardi'n' ortalı'q penen dinamikali'q ta'sirlesowi esapqa ali'nadi'. Pa'njerede on' zaryad ken'isliktin' ha'r bir noqati'ndag'i' elektronli'q ti'g'i'zli'g'i'na ten'dey ti'g'i'zli'q penen tarqalg'an ha'm olar qozg'almaydi' dep esaplanadi'. Bunday jag'dayda ortalı'q erkin zaryadqa iye emes sistema dep qabi'l etiledi. Biraq bul zaryad pa'njerede da'wirlik tu'rde o'zgeredi (o'zgeriw da'wiri kristalli'q pa'njerenin' da'wirine ten').

Bunday ortalı'qlardag'i' elektromagnitlik tolqi'nlardi'n' tarqali'wi' haqqi'ndag'i' ma'seleni sheshkende induksiya vektori' $\mathbf{D}||\mathbf{E}$ dep esaplanadi' (yag'ni'y kristallardag'i' anizotropiya esapqa ali'nbaydi'). Bunday boljaw rentgen nurlari' ushi'n si'ni'w ko'rsetkishi $n = \sqrt{\varepsilon}$ shamasi'ni'n' shama menen birge ten'liginde (birden 10^{-6} - 10^{-7} shaması'na ayri'ladi').

Usi'nday boljawlar tiykari'nda

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}(\mathbf{r})e^{2\pi i(vt - \mathbf{K}_0 \cdot \mathbf{r})} \quad (35)$$

an'latpasi' menen ta'riyiplenetug'i'n tegis tolqi'nlar tu'rindegi stabilli (waqi'tqa g'a'rezli emes) sheshimler izlenedi. Tolqi'nni'n' amplitudasi' \mathbf{A} waqi'ttan g'a'rezli emes, al koordinatadan g'a'rezli boli'wi' mu'mkin. Sebebi elektronlar tarqali'wshi' tolqi'nlardi'n' ta'sirinde terbeledi ha'm sonli'qtan olar (elektronlar) ta'repinen tarqalatug'i'n tolqi'nlar bir biri ha'm kelip tu'siwhi tolqi'n menen interferenciya' ushi'raydi'. Na'tiyede amplitudasi' ken'islikte da'wirli tu'rde o'zgeretug'i'n bazi' bir turaqli' elektromagnit tolqi'n payda boladi'. Bul da'wirlik pa'njerenin' da'wirindey boli'wi' kerek, yag'ni'y $A(\mathbf{r})$ u'sh bag'i't boyi'nsha da'wirlikke iye funkciya boli'p tabi'ladi'. Bul funkciyanı' pa'njerelik summa (qosi'ndi') tu'rinde ko'rsetiw mu'mkin:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \sum_m \mathbf{D}_m e^{-2\pi i(r, H_m)} \quad (36)$$

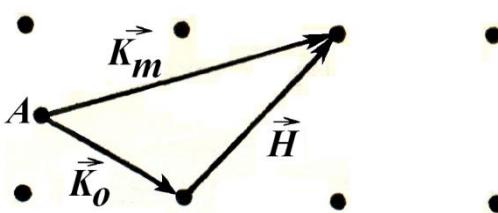
Bul an'latpada \mathbf{H}_m arqali' keri pa'njerenin' vektori' belgilengen. Bunday jag'dayda sheshim bir qatar tegis tolqi'nlardi'n' summasi' si'pati'ndag'i' sheshimge iye boladi':

$$\mathbf{D} = \sum_m \mathbf{D}_m e^{-2\pi i[vt - (\mathbf{K}_0 + \mathbf{H}_m \cdot \mathbf{r})]} = \sum_m \mathbf{D}_m e^{-2\pi i[vt - (\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r})]}. \quad (37)$$

(37)-an'latpada $\mathbf{K}_m = \mathbf{K}_0 + \mathbf{H}_m$.

Eger ma'seleni a'piwayi'lasti'rsaq ha'm zaryadlardı' pa'njerenin' tu'yinlerinde jaylasqan dep esaplasaq, onda sheshimnin' tu'rinin' qanday bolatug'i'nli'gi'n ani'q boladi'.

Haqi'yqati'nda da, eger zaryadlar koordinatalari' $\mathbf{r} = \mathbf{ma} + \mathbf{nb} + \mathbf{pc}$ bolg'an pa'njerenin' tu'yinlerinde jaylasqan bolsa, onda $(\mathbf{r}, \mathbf{H}) = hm + kn + lp$ shaması'na ten' boli'p, barli'q waqi'tta da pu'tin ma'niske iye boladi'. Bunday jag'dayda (35)-ten'lemedegi \mathbf{K}_0 di $\mathbf{K}_0 + \mathbf{H}$ ka almasti'ri'w mu'mkin ha'm \mathbf{H} qa pari'q ki'latug'i'n barli'q tolqi'n vektorlari'n bir birine ekvivalent dep esaplawg'a boladi'. 6-su'wrette keri pa'njere ko'rsetilgen. \mathbf{K}_0 vektori' (000) tu'yinine qaray bag'i'tlang'an. A noqati'nan keri pa'njerenin' qa'legen tu'yinine karay bag'i'tlang'an qa'legen vektordi' Maksvell ten'lemelerinin' sheshimine kiriwshi qa'legen vektor dep qarawg'a boladi'.



6-su'wret.

Keri pa'njerenin' bir tegisliginin' fragmenti. \mathbf{K}_0 vektori' (000) tu'yinine qaray bag'i'tlang'an.

Ortali'qta tarqali'wshi' elektromagnit maydani' ushi'n Maksvell ten'lemelerin jazami':

$$\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = c \operatorname{rot} \mathbf{H}; \quad \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = c \operatorname{rot} \mathbf{E} = c \operatorname{rot} \frac{\mathbf{D}}{\epsilon}. \quad (38)$$

Bunnan

$$\frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} = -c^2 \operatorname{rot} \operatorname{rot} \frac{\mathbf{D}}{\epsilon}. \quad (39)$$

ten'lemesine iye bolami'z.

Dielektriklik sin'irgishligi ϵ bolg'an ortali'qta \mathbf{D} , \mathbf{E} ha'm \mathbf{P} vektorlari' bi'layi'nsha baylani'sqan:

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P} = \epsilon\mathbf{E}. \quad (40)$$

Bunnan

$$4\pi\mathbf{P} = \mathbf{D} - \mathbf{E} = (\epsilon - 1)\mathbf{E} = \chi\mathbf{E}$$

ten'lemesine iye bolami'z. Bul ten'lemede χ arqali' ortali'qtin' polyarizaciyalani'wshi'li'g'i' belgilengen.

Dielektriklik sin'irgishlik ϵ u'sh bag'i't boyi'nsha da'wirli tu'rde o'zgeretug'i'n bolg'anli'qtan (da'wirleri a, b ha'm c , elementar quti'lardi'n' da'wirleri) χ da u'sh bag'i't boyi'nsha da'wirli o'zgeredi. Oni' qatarg'a jayi'p mi'na tu'rde ko'rsetiwge boladi':

$$\chi = \sum \chi_h e^{2\pi i(\mathbf{H}_h \cdot \mathbf{r})}$$

Qatarg'a jayi'wdi'n' χ_h koefficientleri boyi'nsha an'latpani' jen'il tu'rde tabi'wg'a boladi'. Haqi'yqati'nda da, eger elektron bazi' bir noqatta jaylasqan bolsa, onda elektromagnit tolqi'ni'ni'n' ta'sirindegi qozg'ali's ten'lemesi mi'na tu'rde jazi'ladi':

$$\ddot{x} + kx + \omega_0^2 x = \frac{e}{m} E_0 e^{i\omega t}.$$

Bul an'latpa elektr zaryadi'ni'n' awi'si'wi'n tabi'wg'a mu'mkinshilik beredi:

$$x = \frac{e}{m} \frac{E_0 e^{i\omega t}}{\omega_0^2 - \omega^2 + i\omega t}.$$

Ken'isliktin' berilgen noqati'ndag'i' ko'lem birligindegi polyarizaciya P ni'n' ma'nisi $P = \frac{\sum_{\Delta\nu}^{ex}}{\Delta\nu}$ sha'rtinen ani'qlanadi'. Summalaw bazi' bir $\Delta\nu$ ko'lemindegi barli'q zaryadlar boyi'nsha ju'rgiziledi.

Rentgen nurlari' ushi'n a'dette $\omega^2 \gg \omega_0^2$. Sonli'qtan P ni' bi'layi'nsha jazami'z:

$$4\pi P = -\frac{4\pi e^2}{m\omega^2} \frac{\Delta N}{\Delta\nu} E_0 e^{i\omega t} = -\frac{e^2}{m\pi\nu^2} \rho E_0 e^{i\omega t}.$$

Demek

$$\chi = -\frac{e^2}{m\pi\nu^2} \rho = -\frac{e^2\lambda^2}{m\pi c^2} \rho = -\frac{e^2\lambda^2}{m\pi c^2} \frac{1}{v} \sum_{hkl} F_{hkl} e^{2\pi i(\mathbf{H}_{hkl}, \mathbf{r})}. \quad (41)$$

Usi'g'an baylansli'

$$\chi = -\frac{e^2\lambda^2}{m\pi c^2} \frac{F_h}{v}. \quad (42)$$

Bul an'latpada v arqali' elementar quti'ni'n' ko'lemi belgilengen.

Strukturali'q amplitudadag'i' dispersiyali'q du'zetiwlerdi ($i\kappa$ ni') esapqa alg'anda atomli'q faktordi'n' jormal ag'zasi' $i\Delta f''$ payda boladi'. Bunday jag'dayda χ_h penen $\chi_{\bar{h}}$ shamalari' kompleksli tu'yinles shamalar boli'wdan qaladi' ha'm χ shaması' kompleks shamag'a aylanadi'. Soni'n' menen birge ϵ nin' shaması' 1 (bir) den az shamag'a ayri'latug'i'n bolg'anli'qtan, ondi' mi'na an'latpani' jazi'w mu'mkinshiline iye bolami'z:

$$\chi = \epsilon - 1 \approx \frac{\epsilon - 1}{\epsilon} = 1 - \frac{1}{\epsilon}.$$

Usi' jag'daylarga baylani'sli' (39)-ten'lemeni bi'layi'nsha ko'shirip jazami'z:

$$\frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} = -c^2 \text{rot rot } \mathbf{D} + c^2 \text{rot rot } \chi \mathbf{D}.$$

Bunnan ha'm $\text{rot rot } \mathbf{D} = \text{grad div } \mathbf{D} - \nabla^2 \mathbf{D}$ bolg'anli'qtan ha'm erkin zaryadlardı'n' joq ekenligi sha'rtinen $\text{div } \mathbf{D} = 0$ (39)-ten'lemenin' en' aqi'rg'i' tu'rin alami'z

$$\nabla^2 \mathbf{D} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} = -c^2 \text{rot rot } (\chi \mathbf{D}). \quad (43)$$

(37)- ha'm (41)-formadag'i' D menen χ ni'n' ma'nislerin esapqa ali'p $\chi \mathbf{D}$ ko'beymesin mi'na tu'rde esaplap shi'g'ari'wg'a boladi':

$$\begin{aligned} \chi \mathbf{D} &= \sum_n \sum_q \psi_h D_n \exp[2\pi i(vt - (K_n + H_k, r))] = \\ &= \sum_n \sum_q (\chi \mathbf{D})_m \exp[2\pi i(vt - (K_n + H_k, r))]. \end{aligned} \quad (44)$$

Bul jerde

$$(\chi \mathbf{D})_m = \sum_n \chi_{m-n} \mathbf{D}_n.$$

(43)-ten'lemege (40)-an'latpadan \mathbf{D} ni', al (44)-an'latpadan $\chi \mathbf{D}$ ni' qoysaq ha'm ali'ng'an ten'lemen sheshemiz. Buni'n' ushi'n eger vektor $\mathbf{u} = \mathbf{u}(r, t) = \mathbf{A} e^{2\pi i(vt - \mathbf{K}r)}$ berilgen bolsa, onda

$$\text{div } \mathbf{u} = -2\pi i(\mathbf{K}, \mathbf{u}),$$

$$\begin{aligned}\nabla^2 \mathbf{u} &= -4\pi^2 K^2 \mathbf{u}, \\ \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} &= -4\pi^2 \nu^2 \mathbf{u}, \\ \text{rot } \mathbf{u} &= -2\pi i [\mathbf{K} \times \mathbf{u}], \\ \text{rot rot } \mathbf{u} &= 4\pi^2 \{K^2 \mathbf{u} - \mathbf{K}(\mathbf{K}, \mathbf{u})\} = 4\pi^2 K^2 (\mathbf{u})_K\end{aligned}$$

ekenligin eske alami'z. Bul ten'lemedegi $(\mathbf{u})_K$ arqali' \mathbf{K} vektori'na perpendikulyar bolg'an \mathbf{u} di'n' qurawshi'si' belgilengen (ten'lemeni toli'q sheshiwdi biz bul tekstke kirgizbeymiz) Bunday jag'dayda (43)-ten'lemenin' sheshimin

$$\frac{K_m^2 - K^2}{K_m^2} \mathbf{D}_m = \sum_n \chi_{m-n} (\mathbf{D}_n)_m \quad (45)$$

ten'lemeler sistemasi' tu'rinde alami'z. Bul an'latpada $(\mathbf{D}_n)_m$ arqali' \mathbf{D}_n vektori'ni'n' \mathbf{K}_m vektori'ni'n' bag'i'ti'ndagi' proekciyasi' boli'p tabi'ladi'. \mathbf{K} bolsa tolqi'n vektori'ni'n' bosli'qtag'i' ma'nisi.

(45)-ten'lemeler si'zi'qli' ten'lemeler sistemasi' boli'p tabi'ladi'. Bul ten'lemelerdin' sani' indukciyasi' \mathbf{D}_m bolg'an tolqi'nlar sani'na ten'. Polyarizaciyalanbag'an tolqi'n ushi'n polyarizaciyanı'n' eki hali' bir birinen g'a'rezsiz bolg'anlı'qtan \mathbf{D}_m nin' n ma'nisi ushi'n 2 n ten'lemege iye bolami'z.

(45)-ten'lemeler sistemasi' principinde sheksiz ko'p ten'lemeler sistemasi'nan turi'wi' mu'mkin. Biraq bull ten'lemeler sistemasi'n di'qqat penen u'yreniw $K_m^2 - K^2$ ayi'rmasi'ni'n' o'siwi menen \mathbf{D}_m shamalari'ni'n' sani'ni'n' ju'da' kemeyip ketetug'i'nli'g'i'n ko'rsetedi. Haqi'yqati'nda da (45)-sistemanı'n' on' ta'repi bull sistemadag'i' bir ten'lemeden ekinshi ten'lemege o'tkende u'lken shamag'a o'zgere almaydi', yag'ni'y $K_m^2 - K^2$ ayi'rmasi'ni'n' ma'nisi kishi bolsa \mathbf{D}_m nin' ma'nisi u'lken boladi'. Bunday jag'dayda ten'lemeler sistemasi'ndag'i' ten'lemeler sani' kemeyedi.

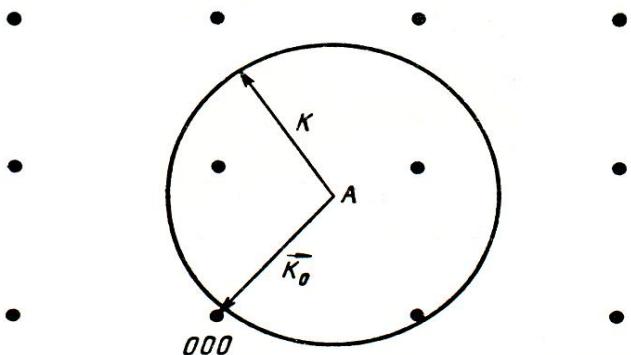
$K_m^2 - K^2$ ayi'rmasi' kishi bolg'anlı'qtan (45)-ten'lemeni bi'layi'nsha ko'shirip jaza alami'z:

$$2\varepsilon_m \mathbf{D}_m = \sum_n \chi_{m-n} (\mathbf{D}_n)_m \quad (46)$$

Bul an'latpada $\varepsilon_m = \frac{|\mathbf{K}_m| - |\mathbf{K}|}{|\mathbf{K}|}$ ju'da' kishi shama boladi' (tolqi'n vektori' $K = \frac{1}{\lambda}$ bolg'anlı'qtan biz $|\mathbf{K}_m| - |\mathbf{K}|$ ayi'rmasi'n nolge ten' dep oylawi'mi'z mu'mkin). Biraq (45)-ten'leme joqari'da aytı'lg'anlarg'a qosi'msha $|\mathbf{K}_m|$ nin' $|\mathbf{K}|$ g'a ten' bola almaytug'i'nli'g'i'n da ko'rsetedi. Demek kristall ishindegi tolqi'nni'n' tarqali'w tezligi bosli'qtag'i' tolqi'nni'n' tarqali'w tezligine ten' bolmaydi' dep juwmaq shi'g'arami'z. Haqi'yqati'nda da ε shaması'ni'n' nolge ten' boli'wi' \mathbf{D}_m shaması' ushi'n sheksizlikti beredi. Al bunday jag'day fizikali'q ma'niske iye bola almaydi'. Bul ε shaması' rezonanslı'q qa'telik atamasi'na iye boldi'.

Joqari'da aytı'li'p o'tilgenindey \mathbf{K}_m nin' bir neshe ma'nisi ushi'n ε_m lerdin' ma'nisleri kishi bolsa (ε_m nin' ma'nisleri haki'yqati'nda da kishi shama ha'm 10^{-5} ten aspaydi'), onda sa'ykes \mathbf{D}_m ler u'lken ma'niske iye boladi'. Bunday jag'dayda (46)-sistemanı' sheshkende basqa barlı'q ag'zalardi' esapqa almawg'a boladi'. Bul a'piwayi' usi'l Evald sferasi'n paydalani'p ku'shli \mathbf{D}_m lerdi saylap ali'w mu'mkinshiligin beredi. Tap usi'nday a'piwayi' jollar menen kinematikali'q teoriyada difrakciyag'a ushi'rag'an nurlardi'n' bag'i'ti'n ani'qlaydi'.

Meyli keri pa'njerede tolqi'n vektori' \mathbf{K}_0 bolg'an tolqi'n tarqalatug'i'n bolsi'n (demek bul vektordi'n' uzi'nli'g'i' da, bag'i'ti' da belgili degen so'z, 6-su'wret). Difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'n lardi'n' shashi'raw orayi'n A arqali' belgileymiz ha'm usi' noqattan (000) tu'yinine \mathbf{K}_0 vektori'n ju'rgizemiz [A noqati' menen (000) tu'yinine shekemgi qashi'qli'q \mathbf{K}_0 vektori'n'i'n' uzi'nli'g'i'na ten' degen so'z]. A noqati' orayi' ha'm radiusi' \mathbf{K} bolg'an sfera ju'rgizemiz (Rentgenografiyada bul sferani' Evald sferasi' dep ataydi'). Bul sfera (000) tu'yini arqali' o'tpeydi. Sebebi $|\mathbf{K}_m| \neq |\mathbf{K}|$. Biraq (000) noqati' sferag'a ju'da' jaqi'n jaylasqan boladi'. Sebebi $\Delta K = K\varepsilon_0 = K(n - 1) \approx K \cdot 10^{-5}$. Eger keri pa'njerenin' qanday da bir baska tu'yini Evald sferasi'na jaqi'n jaylasqan bolsa, onda oni'n' ushi'n ε_m shaması' kishi, biraq \mathbf{D}_m nin' shaması' u'lken boladi'.



7-su'wret.
Dinamikali'q teoriya boyi'nsha Evald sferasi' menen keri pa'njere vektori'n'i'n' o'z-ara jaylasi'wlari'.

7-su'wrette keltirilgen jag'day rentgen nurlari'n'i'n' difrakciyasi'ni'n' dinamikali'q teoriyasi'nda ori'n alg'an jag'daydi'n' rentgen nurlari'n'i'n' difrakciyasi'ni'n' kinematikali'q teoriyasi'nda da ori'n alatug'i'nli'g'i'n ayqi'n ko'rsetedi. Ayi'rma sonnan ibarat, kinematikali'q teoriyada (000) noqati'nan \mathbf{K}_0 vektori' emes, al \mathbf{K} vektori' ju'rgiziledi.

6-§. Elektronlar tolqi'nлари' ushi'n dinamikali'q teoriyani'n' qollani'li'wi'

Elektronlardi'n' difrakciyasi'ni'n' kinematikali'q teoriyası' elektronli'q-mikroskopiyali'q su'wretlerdi interpretaciyalaw ushi'n sapali'q jaqtan paydali' teoriya boli'p tabi'lsa da, bul teoriyani' difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'nni'n' amplitudasi' q_g kristalg'a kelip tusiwsı tolqi'nni'n' amplitudasi' q_0 dan kishi bolg'an jag'dayda g'ana tabi'sli' tu'rde paydalani'w mu'mkin. Qali'n'li'g'i' t bolg'an jetilispegen kristaldag'i' z teren'ligindegi atomlardi'n' awi'si'wlari' $R(z)$ bolsi'n. Bunday jag'dayda izertleniwshi kristalli'q folgani'n' to'mengi betindegi difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'nni'n' amplitudasi' q_g mi'na shamag'a ten':

$$q_g = \frac{\pi i}{\xi_g} q_0 \int_0^t e^{[-2\pi i s z - 2\pi i \mathbf{g} \cdot \mathbf{R}(z)] dz}. \quad (47)$$

Bul an'latpada ξ_g arqali' ekstinkciyali'q uzi'nli'q, al s arqali' da'l Bregg awhali'nan awi'si'w belgilengen. \mathbf{g} bolsa keri pa'njerenin' vektori'. Bul ten'leme ayi'ri'm atomlar ta'repinen shashi'rati'lg'an tolqi'nлardi'n' amplitudalari'n fazani' esapqa alg'an halda qosi'wdi'n' ja'rdeinde ali'ng'an. Biraq, eger difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'nni'n' amplitudasi' ξ_g u'lken ma'niske iye bolsa, onda difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'nлardi'n' o'zlerinin' atomlardag'i' shashi'rawi'n esapqa ali'wi'mi'z kerek boladi'. Kinematikali'q teoriyani'n' bul sheklengenligi a'sirese s tin' ma'nisi ju'da' kishi bolg'anda (Bregg sha'rti da'l ori'nlang'anda) ayqi'n ko'rinedi. Bul jag'day (47)-an'latpada kelip tu'siwsı tolqi'nni'n' amplitudasi' $q_0 = 1$ bolg'anda ani'q ko'rinedi:

$$|q_g|^2 = \frac{\pi^2}{\xi_g^2} \frac{\sin^2 \pi ts}{(\pi s)^2}. \quad (48)$$

Bul an'latpa $s = 0$ sha'rti ori'nlang'anda

$$|q_g|^2 = \left(\frac{\pi t}{\xi_g}\right)^2.$$

Bul an'latpadan difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'nni'n' intensivliginin' kristalg'a kelip tu'siwshi tolqi'nni'n' intensivliginen u'lken boli'p shi'g'i'w mu'mkinshiliqi payda boladi'. Haqi'yqati'nda da t ni'n' ma'nisi $\frac{\xi_g}{\pi}$ den u'lken bolsa $q_g > q_0$ boli'p shi'g'adi'. Elektron mikroskoplari'nda izertlenetug'i'n kristalli'q denelerdin' qali'n'li'g'i' a'dette $10\xi_g$ den u'lken bolmaydi'. Demek bunday jag'daydarda kinematikali'q teoriya duri's na'tiyjelerdi bermeydi. Sonli'qtan kristaldag'i' atomlarda shashi'rag'an barli'q tolqi'nlardi'n' (izertlenetug'i'n kristalli'q deneye kondensorli'q linzadan kelip tu'siwshi, difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'nlardi'n') fazalari'n esapqa ali'w menen qosi'w za'ru'rliqi payda boladi'. Usi'nday jag'daydardi' esapqa ali'p kristallarda difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'nlardi'n' intensivligin esaplaytug'i'n teoriyanı' dinamikali'q teoriya dep ataydi'.

Dinamikali'q teoriya elektronlar tolqi'nlarini'n' kristalli'q denelerdegi difrakciyasi'n izertleb bari'si'nda pu'tkilley ku'tilmegen jan'a kubi'li'slardi'n' ori'n alatug'i'nli'g'i' da ko'rsetedi. Bunday qubi'li'slar qatari'na adsorbciali'q dep atalatug'i'n fizikali'q effektler kiredi. Sonli'qtan biz kinematikali'q teoriyanı'n' a'piwayi'li'g'i' oni'n' en' u'lken arti'qmashli'g'i' boli'p esaplansa da, oni'n' kemshilikleri rentgen nurlari'ni'n' kristalli'q denelerdegi kinematikali'q difrakciyasi'nan a'dewir u'lken orni' iyeleydi ha'm elektronlardi'n' difrakciyasi'nda dinamikali'q teoriya tiykarg'i' ori'ndi' iyeleydi.

Biz joqari'da elektronlar tolqi'nlarini'n' tolqi'n uzi'nli'g'i'ni'n' rentgen tolqi'nlarini'n' tolqi'n uzi'nli'g'i'nan a'dewir kishi bolatug'i'nli'g'i' ko'rgen edik. Olardi'n' tolqi'n uzi'nli'qlari'n ha'm ZnS kristallari'ndagi' (220) tegislikler semeystvosi'nda ($d_{220} = \frac{a}{\sqrt{8}} = \frac{5,4145}{\sqrt{8}} = 1,91431$) qanday difrakciyali'q mu'yeshe buri'latug'i'nli'g'i' mi'na keste ja'rdeinde beremiz:

Tolqi'n	$d, \text{\AA}$	$2\theta = \text{arc sin} \left(\frac{\lambda}{2d} \right)$, mu'yeslik gradus
Rentgen tolqi'ni' (Cu anodi'ni'n' α -spektri).	1.5418	49,5
Elektronlar tolqi'ni', anodli'q kernew 100 kV bolg'anda.	0,0370144	1,10787

Solay etip a'dettegi rentgenografiyadag'i' 50 gradusli'q difrakciyali'q mu'yeshtin' orni'na elektron mikroskopiyasi'nda shama menen 1 gradusli'q mu'yeshe ca'ykes keledi. Sonli'qtan elektronlar kristaldi'n' betine derlik perpendikulyar jaylasqan atomli'q tegisliklerde difrakciyag'a ushi'raydi' ha'm difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'nlardi' kristaldi'n' ishinde oni'n' betine perpendikulyar etip ali'ng'an jin'ishke kolonka arqali' tarqaladi' dep esaplawg'a boladi' (8-su'wret).

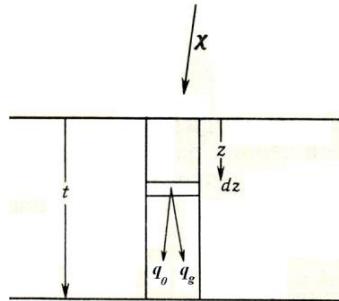
Biz kristalda tarqalatug'i'n eki tolqi'ndi' esapqa alami'z. Olardi'n' birinshisi kristalg'a kelip tu'setug'i'n tolqi'n [amplitudasi' $q_g(z)$], ekinshisi kristalda difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'n [amplitudasi' $q_0(z)$], z arqali' kristaldi'n' betine perpendikulyar bag'i'ttag'i' koordinata belgilengen. Bunday jag'dayda elektronlar

$$\psi(z) = q_0(z) \exp(2\pi i \chi \cdot \mathbf{r}) + q_g(z) \exp(2\pi i \chi' \cdot \mathbf{r}) \quad (49)$$

Bul an'latpada χ arqali' energiyasi' eU bolg'an elektronlardi'n' tolqi'n vektori' belgilengen ($yag'ni'y \frac{h^2\chi^2}{2} = eU$) . χ' bolsa uzi'nli'g'i' χ ni'n' uzi'nli'g'i'nday bolg'an shashi'rag'an (difrakciyag'a ushi'rag'an) tolqi'nni'n' tolqi'n vektori'. Kinematikali'q teoriyadag'i'day mi'na an'latpani' jazami'z:

$$\chi' = \chi + g + s. \quad (50)$$

Bul an'latpada s arqali' Bregg awhali'nan awi'si'wdi' ani'qlaytug'i'n kishi vektor.



8-su'wret.
Kristaldag'i' kolonka ishinde tarqali'wshi'
tuwri' tu'siwshi q_0 ha'm difrakciyag'a
ushi'rag'an q_g tolqi'nlari'

Elektronlardi'n' difrakciyasi'ni'n' kinematikali'q teoriyasi'nda tu'siwshi nurdi'n' amplitudasi' q_0 turaqli' shama dep esaplanadi'. Biraq kristaldi'n' ishinde bul tolqi'nni'n' atomlarda (atomli'q tegisliklerde) ko'p qaytara shashi'rag'an sebepli bul shamani' da, dirakciyag'a ushi'rag'an tolqi'nni'n' amplitudasi' bolg'an q_g shamasi'n da turaqli' dep esaplay almaymi'z. Olar kristaldi'n' teren'ligi z ke baylani'sli' o'zgeredi (kemeyedi, 8-su'wretti qaran'i'z).

A'lvette folgadag'i' (izertlenetug'i'n juqa kristalli'q denedegi) atomlar tu'siwshi tolki'nda da, difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'ndi' da barli'q bag'i'tlarda shashi'ratadi'. Biraq biz ko'pshilik bag'i'tlarda shashi'rag'an tolqi'nlardi'n' interferenciyanı'n' saldari'nan bir birin so'ndiretug'i'nli'g'i'n esapqa alami'z (Freneldin' yari'm da'wirlik zonalari'n eske tu'siremiz). Biz eki bag'i'tti'n' bar ekenligin ha'm usi' bag'i'tlarda tolqi'nlardi'n' bir birin ku'sheytetug'i'nli'g'i'n bilemiz. Olardi'n' birinshisi tuwri' bag'i'tta tarqalatug'i'n nurlar, bul nurlar $\chi \rightarrow \chi$, $\chi' \rightarrow \chi'$ bag'i'tlarda fazalas (birdey fazada) tarqaladi'. Ekinshisi Bregg mu'yeshinde tarqalatug'i'n nurlar, yag'ni'y $\chi \rightarrow \chi'$, $\chi' \rightarrow \chi$ nurlari' bir biri menen s shamasi'ni'n' ma'nisi baylani'sli' fazada boladi'. Sonli'qtan difrakciyag'a ushi'rag'an tolqi'nni'n' qali'n'li'g'i' dz bolg'an kristall arqali' o'tkendegi o'simi dq_g mi'nag'an ten' boladi':

$$dq_g = \left\{ \frac{\pi i}{\xi_0} q_g(z) + \frac{\pi i}{\xi_g} q_0(z) \exp[2\pi i(\chi - \chi') \cdot r] \right\} dz. \quad (51)$$

Bul an'latpadag'i' $q_g(z)$ ke proporsional bolg'an birinshi ag'za tuwri' bag'i'ttag'i' shashi'rawg'a u'les, al ekinshi $q_0(z)$ ke proporsional ha'm a'dettegidey fazali'q ko'beytiwshige iye ha'm kinematikali'q teoriyada qollani'latug'i'n ag'za Bregg shashi'rawi'ni'n' qosqan u'lesi boli'p tabi'ladi'. Eki ag'za da plastinkani'n' qali'n'li'g'i' dz ke proporsional ha'm eki ag'za da i ko'beytiwshisine iye. Bul jag'day shashi'rag'an tolqi'nlardi'n' amplitudasi'ni'n' plastinkani'n' to'mengi betindegii ma'nisin alg'ani'mi'zdi', bul jerde olardi'n' fazasi'ni'n' tuwri' tu'sken tolqi'nni'n' fazasi'nan 90° qa aji'raltetug'i'nli'g'i'n bildiredi. (51)-ten'lemedegi ξ_0 ha'm ξ_g shamalari' f(0) ha'm f(2θ) shamalari'na keri proporsional (bul shamalar atomli'q shashi'raw amplitudalari' boli'p tabi'ladi'). Haqi'yki'ti'nda ξ_g shamasi' ekstinkciyali'q uzi'nli'q boli'p tabi'ladi'. Biraq biz ha'zir ol shamalardi' fundamentalli'q fizikali'q turaqli'lar arqali' an'latpaymi'z.

Endi tuwri' tu'siwshi tolqi'n ushi'n (51)-an'latpag'a sa'ykes an'latpani' jazami'z:

$$dq_0 = \left\{ \frac{\pi i}{\xi_0} q_0(z) + \frac{\pi i}{\xi_g} q_g(z) \exp[2\pi i(\chi' - \chi) \cdot \mathbf{r}] \right\} dz. \quad (52)$$

(50)-an'latpani' paydalani'p ha'm \mathbf{s} vektori'ni'n' z ko'sheri bag'i'ti'ndag'i' vektor ekenligin esapqa ali'p biz (51)- ha'm (52)- ten'lemelerdi

$$\begin{aligned} \frac{dq_0}{dz} &= \frac{\pi i}{\xi_0} q_0 + \frac{\pi i}{\xi_g} q_g \exp(2\pi i s z), \\ \frac{dq_g}{dz} &= \frac{\pi i}{\xi_0} q_g + \frac{\pi i}{\xi_g} q_0 \exp(-2\pi i s z) \end{aligned} \quad (53)$$

tu'rine ali'p kelemiz.

q_0 ha'm q_g amplitudalari'n bir biri menen baylani'sti'ratug'i'n bul birinshi ta'rtipli differencial ten'lemeler jubi' dinamikali'q teoriyadag'i' tiykarg'i' ten'lemeler sistemasi' dep esaplanadi'.

(53)-ten'lemelerdi quri'li'si'nda bi'zi'qli'qlar (defektler) bolg'an (quri'li'si' jetilspegen) kristallar ushi'n jen'il tu'rde uli'wmalasti'ri'w mu'mkin. Biz bul jerde kristallardi'n' quri'li'si'ndag'i' buzi'qli'qlardi'n' atomlardı'n' duri's ori'nları'nan \mathbf{R} awi'si'wi'na ali'p keletug'i'nli'g'i'n eske tu'siremiz (basqa so'z benen aytqanda kristaldag'i' buzi'qli'qlar (strukturali'q defektler) kristaldi'n' ayi'ri'm oblastlari'ni'n' mayi'si'wi'na, yag'ni'y atomlardı'n' awi'si'wi'na ali'p keledi). Usi' jag'daydi' esapqa alsoq biz defektleri bar kristallar ushi'n tolqi'nlar amplitudasi' ushi'n mi'na ten'lemeler sistemasi'n alami'z:

$$\begin{aligned} \frac{dq_0}{dz} &= \frac{\pi i}{\xi_0} q_0 + \frac{\pi i}{\xi_g} q_g \exp(2\pi i s z + 2\pi i \mathbf{g} \cdot \mathbf{R}), \\ \frac{dq_g}{dz} &= \frac{\pi i}{\xi_0} q_g + \frac{\pi i}{\xi_g} q_0 \exp(-2\pi i s z - 2\pi i \mathbf{g} \cdot \mathbf{R}) \end{aligned} \quad (54)$$

Biz joqari'da keltirgen jag'daylar kristal arqali' tuwri' o'tiwshi ha'm kristalda shashi'rag'an (difrakciyag'a ushi'rag'an) tolqi'nlardı'n' amplitudalari'ni'ni'n' qanday jollar menen esaplanatug'i'nli'g'i'n ko'rsetedi. Soni'n' menen birge kristaldag'i' defektlerdin' elektronlar tolqi'nları'ni'n' difrakciyasi' ushi'n tek atomlardı'n' o'z orni'nan awi'si'wi' \mathbf{R} menen g'ana ko'rinetug'i'nli'g'i'n an'g'ardi'q.

Ayqi'n kristallar ushi'n (53)- ha'm (54)-ten'lemeler sistemasi'n da'l sheshiw ha'zirgi waqi'tlari' hesh kanday qi'yi'nshi'li'qtı' payda etpeydi. Sebebi bizin' ku'ndelikli turmi'si'mi'zda ken'nen qollani'li'p ju'rge «Mathematica 5» si'yaqli' programmalaw tilleri differenciallar ten'lemelerin sanli' tu'rde sheshiwde bizge og'ada jaqsi' imkaniyatlırdı' jarati'p beredi.

III bap. Elektronli'q mikroskopiya tiykarlari'

Ha'zirgi zaman elektron mikroskopiyasi' eksperimentatorlar ta'repinen fizikalı'q material tani'wda, qattı' deneler fizikasi'nda, biologiyada, medicinada ha'm ilimnin' basqa da tarawlarda jiyi paydalani'latug'i'n izertlewdin' en' joqari' informaciyalı'q usi'llari'ni'n' biri boli'p tabi'ladi'. A'dettegi optikali'q mikroskopqa sali'sti'rg'anda o'tiw elektronli'q mikroskopi' bir qansha arti'qmashli'qqa iye. Bul arti'qmashli'qlardi' biz to'mende ko'rip o'temiz. Zatlardi'n' quri'li'si'n mikroskopiyali'q izertlewdin' tiykarg'i' xarakteristikasi' ayi'ra ali'wshi'li'q qa'biletilik - su'wreti bir biri menen qosi'li'p ketpeytug'i'n ob'jeektin' eki noqati' arasi'ndag'i' qashi'qli'q boli'p tabi'ladi' (Qatan' tu'rde aytqanda ayi'ra ali'w yamasa ayi'ra

ali'wshi'li'q qa'biletlilik dep uzi'nli'qtin' o'lshemine iye объекттин' eki noqati' arasi'ndag'i' qashi'qli'qtin' emes al usi' qashi'qli'qqa keri shaman'i aytadi' (mi'sali' fotoplastinkani'n' ayi'ra ali'w qa'biletligi 400 si'zi'q/mm, yag'ni'y bo'lek su'wretlenetug'i'n noqatlar arasi'ndag'i' qashi'qli'q qanshama kishi bolsa, ayi'ri' ali'w qa'biletligi sonshama joqari' boladi'). Biraq a'dette ayi'ra ali'w si'pati'nda a'dette usi' qashi'qli'qtin' o'zin ko'rsetedi (keltirilgen mi'sal ushi'n 2,5 mkm).

Optikada baqlawdi'n' qa'legen usi'li'ni'n' ayi'ra ali'wshi'li'g'i' principinde paydalani'li'p ati'rg'an nurlani'wdi'n' tolqi'n uzi'nli'g'i'nan joqari' bola almaydi'. Bul shama jaqtii'li'q nuri' ushi'n 0.5-0.7 mkm di' quraydi'. Elektronni'n' tolqi'n uzi'nli'g'i' oni'n' impulsi menen, yag'ni'y potenciali' V bolg'an tezletiwshi elektr maydani'na baylani'sli':

$$\lambda = \frac{1}{k} = \frac{h}{p}. \quad (1.1)$$

Bul an'latpada $h = 6,62606876(52) \cdot 10^{-34}$ Dj·s arqali' Plank turaqli'si', p arqali' elektronni'n' impulsi' belgilengen. Relyativistik emes jaqi'niasi'wda (Nyuton mexanikasi' tilinde) impuls mi'na formula ja'rdeinde esaplanadi':

$$\frac{p^2}{2m} = eV. \quad (1.2)$$

Bul an'latpadag'i' m elektronni'n' massasi' al e oni'n' zaryadi'ni'n' absolyut ma'nisi. (1.1)-aňlatpani' (1.2)-aňlapag'a qoyi'p tolqi'n uzi'nli'g'i' ushi'n formula alami'z:

$$\lambda = \frac{12,225}{\sqrt{V}}. \quad (1.3)$$

Relyativistik jaqi'niasi'wda massa, energiya ha'm impuls arasi'ndag'i' baylani'slar basqasha formulalar menen beriledi. Bul jag'dayda (1.3)-aňlatpani'ň tin' orni'na mi'na formulani' alami'z:

$$\lambda = \frac{12,27}{(1 + 0,978 \cdot 10^{-6} V) \sqrt{V}} \quad (1.4)$$

Bul formulalardi' paydalani'p elektron mikroskop'i'ndag'i' elektronni'n' tolqi'n uzi'nli'g'i'n an'sat esaplawg'a boladi'. Ju'da' jiyi paydalani'latug'i'n tezletiwshi potencial $V = 100$ kv bolg'anda $\lambda = 0,037$ Å. Bul shama jaqtii'li'q tolqi'ni'ni'n' tolqi'n uzi'nli'g'i'na sali'sti'rg'anda ju'da' kishi. Sonli'qtan elektron mikroskop'i'ni'n' ayi'ri'a ali'wshi'li'q qa'biletligi optikali'q mikroskop'i'ni'n' ayi'ra ali'wshi'li'q qa'biletliligine sali'sti'rg'anda a'dewir jaqsi'. A'lvette elektron mikroskop'i' объекттеги elektronlardı'n' difrakciyasi'n (difraktogrammani') baqlawg'a da mu'mkinshilik beretug'i'nli'g'i' tu'sinikli. Basqa so'z benen aytqanda elektron mikroskop'i' u'lginin' keri pa'njeresinin' kesimin baqlawg'a mu'mkinshilik beredi. Bul jag'day elektron mikroskop'i' kristalli'q pa'njerenin' simmetriyasi', quri'li's defektleri, izertlenip ati'rg'an kristalli'q quri'li'si' haqqi'nda bahali' mag'li'wmtalardi' beretug'i'n ten'i joq a'sbapqa aylandi'radi'. Mikrofotosu'wretlerdi elektron difrakciyasi' su'wretleri menen sali'sti'ri'p eksperimentator kristalli'q saylap ali'ng'an ushastkasi'ni'n' difraktogrammasi'n u'yreniw, haqi'yqi'y waqi't rejiminde izertlenip ati'rg'an объекттин' quri'li'si'na ta'sir eteug'i'n processlerdi tikkeley baqlawg'a mu'mkinshilik aladi'. Soni'n' menen birge elektron da'stesi izertlenetug'i'n zat penen

ta'sirleskende payda bolatug'i'n nurlani'wdi' registraciyalaytug'i'n ha'r qi'yli' qosi'msha du'zilislerdi («Qosi'msha du'zilis» termini «pristavka» terminine sa'ykes keledi) paydalang'anda u'lginin' saylap ali'ng'an ushastkasi'ni'n' elementlik qurami'n ani'qlawg'a mu'mkinshilik alami'z.

Elektronli'q mikroskopti'n' payda ob'yeekttin' su'wretin qansha shamag'a u'lkeyte alatug'i'nl'i'g'i' ayri'qsha a'hmiyetke iye. Oni'n' ushi'n biz mikroskopti'n' ha'r bir linzasi'ni'n' u'lkeytiwi haqqi'nda mi'na mag'li'wmatlardi' keltiremiz:

Ob'yeekativlik linza	x 50
Arali'qli'q linza	x 10
Proekciyali'q linza	x 100

Demek biz keltirgen mag'li'wmatlar boyi'nsha elektron mikroskopi'nda $50 \times 20 \times 100 = 100000$ ese u'lkeytiwge iye bolami'z (yag'ni'y vodorod atomi'ni'n' diametri 10^{-2} sm ge shekem u'lkeyedi).

Elektronli'q mikroskop Berdaq ati'ndag'i' Qaraqalpaq ma'mlekетlik universitetinin' fizika fakultetinin' uli'wma fizika kafedrası'ni'n' laboratoriyaları'nda bir qatar strukturalı'q ma'selelerdi sheshiw ushi'n 1980-ji'llardan baslap paydalani'ldi' (UEMV-100k ha'm EMV-100 lm mikroskopları') ha'm ZnS, ZnSe, Pb₃(VO₄) kristalları'n, tiykari' uglerod bolg'an ko'p qatlamlı' kristalli'q zatlardı'n' quri'li'si'n izertlew processinde bir qansha ilimiyy na'tiyjeler ali'ndi'.

§ 1. Tariyxi'y sholi'w

Tiykarg'i' materialdi' bayanlamastan buri'n a'dette qarap shi'g'i'layi'n dep ati'rg'an ma'selenin' tariyxi'n bayanlaydi'. Elektron mikroskopiyasi'nda buni' islew an'sat. Sebebi oni'n' payda boli'w tariyxi' a'debiyatta jaqsı' sa'wlelengen, al oni'n' tiykari'n salı'wshi'lar ishinde du'nyali'q ataqqa iye ilimpazlar ko'p. Soni'n' menen birge tariyxi'y kirisiw pitkeriw qa'nigelik jumi'si' ushi'n za'ru'rli bolg'an bazi' bir ma'selelerdi toli'g'i'raq sa'wlelendiriw ushi'n da kerek. Mi'sali' elektronni'n' fizikali'q qa'siyetleri elektron mikroskopiyasi' ushi'n ju'da' a'hmiyetli ori'n iyeleydi. Soni'n' ushi'n bul ma'sele tariyxi'y sholi'wda aytılı'p o'tiledi.

En' da'slep korpuskulalı'q-nurli'q optikali'q a'sbaplardi'n' fizikali'q tiykari'ni'n' elektronli'q mikroskoplar payda bol mastan derlik ju'z ji'lday buri'n 1834-ji'li' U.R.Gamilton ta'repinen qalang'anlı'g'i'n atap o'temiz. Ol optikali'q bir tekli emes ortalıqlardan jaqtılı'q nurları'ni'n' o'tiwi menen ku'sh maydanları'ndag'i' bo'lekshelerdin' traektoriyaları' arası'nda uqsaslı'qtı'n' bar ekenliginaptı'.

Magnit linzalarg'a iye ha'zirgi zaman elektron mikroskopi'n do'retiw ha'r tu'rli bolg'an eksperimentalli'q ha'm teoriyalı'q izertlewlerdin' zor juwmag'i' boli'p tabi'ladi'. Ol jumi'slardı'n' en' tiykari' Dj.Tomsonni'n' gaz razryadları'nda payda bolatug'i'n katod nurları' menen islegen jumi'sları' boli'p tabi'ladi'. Ol katod nurları'ni'n' elektr maydani'ni'n' ta'sirinde buri'latug'i'nli'g'i'n, bul nurlardı'n' massasi' vodorod atomi'ni'n' massasi'nan mi'n' esedey kishi bolg'an teoriya zaryadlang'an bo'lekshelerdin' ag'i'mi' ekenligin ko'rsetti. Magnit ha'm elektr maydanları'ni'n' tasirinde Dj.Tomsong'a elektronni'n' zaryadi'ni'n' oni'n' massasi'na qatnasi'n ani'qlawdi'n' sa'ti tu'sti ha'm oni'n' ha'zirgi waqi'tlarda qabi'l etilgen ma'nisi $e/m = 1,758820174 \cdot 10^{-7}$ Kl/kg shamasi'na teñ («Uspexi fizisheskix nauk» jurnalı'. Tom 173. № 3. 2003-ji'l. 339-344 betler. Fizikali'q shamalar menen fizikali'q turaqli'lardı'n' ma'nislerinin' barlı'g'i' usı' maqaladan ali'ndi'). Bul qatnas ju'da' u'lken a'hmiyetke iye, sebebi oni'n' ja'rdeminde elektronni'n' impulsı ani'qlanadi':

$$Hr = \frac{m}{e} v. \quad (1.5)$$

Bul formulada r arqali' v tezligi menen qozg'ali'wshi', kernewliligi H bolg'an si'rtqi' magnit maydani'na perpendikulyar bag'i'tta qozgalatug'i'n elektronni'n' traektoriyasi'ni'n' iymeklilik radiusi' belgilengen. Elektron da'stesinin' magnit maydani'nda si'ni'wi' qubi'li'si' ashi'lgan bolg'anli'qtan e/m qatnasi' linzalardi' esaplaw ushi'n tikkeley ma'niske iye boladi'. Biraq usi'g'an karmastan Bush 1926-ji'li' birinshi magnit linzasi' haqqi'nda maqalasi'n baspadan shi'g'arg'ansha bir neshe ji'llar o'tti. Bunnan buri'ni'raq basqa bir a'hmiyetli eksperimentte, atap aytqanda Milliken ta'repinen elektronni'n' zaryadi' ani'qlangan edi, al bul oni'n' massasi'n' da'rha'l' ani'qlawg'a imkaniyat berdi. Ha'zirgi waqi'tlardag'i' elektronni'n' zaryadi'

$$e = 1,602176462(63) \cdot 10^{-19} \text{ Kl.}$$

Bunnan ha'zirgi waqi'tlari' qabi'l etilgen elektronni'n' massasi'

$$m = 9,10938188(72) \cdot 10^{-31} \text{ kg.}$$

Bul e ha'm m nin' ma'nisleri, magnit maydani'nda qozg'ali'wshi' elektrong'a ta'sir etiwshi ku'shtin' shamasi' elektrostatikali'q tezleniwdin' shamasi' menen birge ja'ne si'ni'w elektron pushkalari'n, magnit yamasa elektrostatikali'q linzalardi' konstrukciyalaw ushi'n en' za'ru'rli bolg'an shamalar boli'p tabi'ladi'.

D.J.Tomsonni'n' birinshi eksperimentlerinen keyin elektron mashqalalari'n sheshiwe a'sirese Lorenc ha'm Eynshteyn si'yaqli' teoretikler teperish tu'rde qatnasti'. Lorenc elektron teoriyasi'n rawajlandi'ri'w menen shug'i'llandi'. Lorenc boyi'nsha elektrondi' Maksvell teoriyasi'na sa'ykes zaryad penen maydan tarqalg'an bo'lekshe si'pati'nda ko'z aldi'g'a elesletiw kerek. O'zinin' qozg'ali'wshi' koordinatalar sistemasi'n tu'r lendiriw teoriyasi'na sa'ykes Lorenc massani'n' tezlikten mi'na ta'rdegi g'a'rezliligin boljadi':

$$m = m_0 / (1 - \gamma^2)^{1/2}. \quad (1.6)$$

Bul formuladagi' $\gamma = v/c$ - bo'lekshenin' tezliginin' jaqtli'li'q tezligine qatnasi'. m_0 arqali' bo'lekshe qozg'almay turg'an koordinatalar sistemasi'ndag'i' massasi'. (2)-formulani' ilime kirgiziw menen Lorenc ta'limati' massani'n' fizikali'q ta'biyati' haqqi'nda duri's emes ta'limatti'n' payda boli'wi'na ali'p keldi. Ha'zirgi waqi'tlari' massani'n' relyativistlik invariant ekenligi, oni'n' tezlikten g'a'rezsizligi ko'pshilikke belgili. Soni'n' menen birge ilimiw ha'm oqi'w a'debiyatlari'nda massani'n' tezlikten g'a'rezliliginin' birinshi avtorlari'ni'n' biri Eynshteynnin' o'zi, bul juwmaq Kaufman ta'repinen eksperimentte tasti'yi'qlandi' degen de mag'li'wmatlar ko'p ushi'rasadi'. Biraq bul pikirge biz qosi'lmaymi'z. Sebebi o'ziniq ilimiw miynetleriniq birinde Eynshteyn mi'naday juwmaqlar shi'g'aradi' (Qaran'i'z: A.Eynshteyn. Zavisit li inerciya tela ot soderjasheysa v nem energii. Ann. Phys., 1905, 18, 639-641. Internet te www.physics1189.front.ru/EinshteinEmc2.pdf):

«Denenin' massasi' onda toplang'an energiyani'n' o'lshemi; eger energiya L shamasi'na o'zgeretug'i'n bolsa, onda oni'n' massasi' sa'ykes L/(9·10²⁰) shamasi'na o'zgeredi, qala berse bul jerde energiya erglerde, al massa grammlarda o'lshengen... Eger teoriya faktlerge sa'ykes keletug'i'n bolsa, onda nur nurlani'wshi' deneden juti'wshi' deneye inerciya ali'p keledi».

Bul ga'plerden hesh waqi'tta da massani'n' tezlikten g'a'rezliligi haqqi'ndag'i' pikir kelip shi'qpaydi', al massa menen energiyani'n' ekvivalentligin ani'q an'g'ari'w mu'mkin [Biz qa'legen massag'a $E = mc^2 / (1 - v^2/c^2)^{1/2}$ formulası'na sa'ykes energiyani'n' ani'q ma'nisinin'

sa'ykes keletug'i'nli'g'i'n ha'm energiyag'a massani'n' sa'ykes kelmewinin' mu'mkin ekenligin bilemiz (mi'sali' A'lemdi toliti'ri'p turg'an «qaran'g'i' energiya» g'a massa sa'ykes kelmeydi).

Sali'sti'rmali'q teoriyası'nın elektronni'n' ti'ni'shli'qtag'i' energiyası' E = mc² shaması'nı ten'. Al v tezligi menen qozg'ali'wshi' elektronni'n' teli'q energiyası' mi'na formula ja'rdeinde ani'qlanadi':

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1-\gamma^2}}. \quad (1.7)$$

Al bo'lekshenin' (elektronni'n') kinetikali'q energiyası' mi'nag'an ten' boladi':

$$E_{\text{kin}} = \frac{mc^2}{\sqrt{1-\gamma^2}} - mc^2 = mc^2 \left[\frac{1}{\sqrt{1-\gamma^2}} - 1 \right]. \quad (1.8)$$

Nurlani'wdi'n' korpuskulalı'q qa'siyetke iye bolatug'i'nli'g'i'ni'n' biz fotoeffekt penen Kompton effektinen bilemiz. Ekinshi ta'repten interferenciya qubi'li'si'nda biz nurlani'wdi'n' tolqi'nli'q qa'siyetin ko'remiz. Plank E energiyası'na v jiyiliginin' sa'ykes keletug'i'nli'g'i'n taptı' ha'm qo'pshilikke belgili mi'na formulani' usi'ndi':

$$E = hv. \quad (1.9)$$

Bul an'latpadag'i' h = 6,62606876(52)·10⁻³⁴ Dj·s Plank turaqli'si' boli'p tabi'ladi'. Bul quramali' jag'daydan shi'g'i'wdi' 1924-ji'li' de Broyl ta'repinen tabi'ldi'. Ol o'zinin' doktorli'q dissertaciysi'nda materiyani'n' tolqi'nli'q teoriyası'n usi'ndi'. Bazi' bir talqi'lawlardan keyin dissertaciya qabi'l etilgen ha'm baspada basi'li'p shi'qtı'. Bul jumi'sta mi'na ju'da' belgili bolg'an qatnas ori'n alg'an:

$$\lambda = \frac{h}{p}. \quad (1.1)$$

Bul an'latpada λ arqali' tolqi'nni'n' de Broyl uzi'nli'g'i', p arqali' bo'lekshenin' impulsı' belgelinegen $\left(\mathbf{p} = \frac{mv}{\sqrt{1-v^2/c^2}} \right)$. Fizikali'q optikani'n' tolqi'n ten'lemesine kirgizilgen bul jag'day SHredingerdin' belgili ten'lemesinin' du'ziliwine ha'm tolqi'n mexanikasi'ni'n' payda boli'wi'na ali'p keldi. (1.1)-qatnas 1927-ji'li' Devisson ha'm Djermerler ta'repinen tasti'yi'qlandı'. Olar elektronlardı'n' difrakciyası' qubi'li'si'n ashti' ha'm (1.1)-formulani'n' duri'sli'g'i'n da'lilledi. Bul eksperimentte energiyası' 100 ev bolg'an elektronlar nikel kristalli'ni'n' betinen shashi'radi' (bul jag'daydi' ha'rız difrakciyani'n' Bregg jag'dayı' dep ataydi'). Usi' ji'li' ju'da' qi'zi'qli' sa'ykes keliwshilik ori'n aldi'. Devisson ha'm Djermerdin' maqalası' bası'lg'an Nature jurnalı'ni'n' tap sol sani'nda G.Tomson menen Reydtin' maqalası' bası'li'p, onda juqa plastmassa plenkasi'nan o'tiwshi elektronlar da'stesinin' difrakciyası'n izertlew boyı'nsha jumi'slari'ni'n' na'tiyjeleri bayanlang'an. Tomson-Reydtin' ta'jiriyyesinde 16800 ev energiyag'a iye elektron da'stesi qollani'ldi' ha'm olardi'n' u'skenesi elektronli'q difrakciyani' izertlew ushi'n arnalı'g'an ha'zirgi zaman u'skenelerinin' prototipi boli'p tabi'ladi'.

Elektronlardi'n' difrakciyasi' kubi'li'si'n ashqanli'g'i'na baylani'sli' Devisson ha'm G.Tomson Nobel si'yli'g'i'n ali'wg'a miyasar boldi'. Solay etip a'kesi ha'm balasi' Dj.Tomson ha'm G.Tomson elektron mikroskopiyasi' tariyxi'nda tiykarg'i' ori'nlardi'n' birin iyeledi.

De Broyldin' teoriyasi' eksperimentte tasti'yi'qlang'annan keyin ko'p waqi't o'tpey Bete elektronlardi'n' difrakciyasi'ni'n' dinamikali'q teoriyasi'n - kristaldag'i' elektronni'n qozg'ali'si'ni'n' kvant mexanikasi'n islep shi'qtı'. Bul teoriya Evald ta'repinen on ji'lday buri'n islep shi'g'i'lg'an rentgen nurlari' difrakciyasi'ni'n' dinamikali'q teoriyasi'n ju'da' uqsas. Bete difrakciyani'n Laue jag'dayi'n toli'q talqi'ladi', al Morz, Devission-Djermer eksperimentinin' detallari'n tu'sindiriw ushi'n keyinirek Bregg jag'dayi' ushi'n teoriyani' rawajlandi'rdi'. Elektron difrakciyasi'n paydalani'w teperish tu'rde rawajlansa da dinamikali'q teoriya bazi' bir waqi'tlar dawami'nda itibarg'a ali'nbadi', al rentgen nurlari' difrakciyasi' ushi'n rawajlandi'ri'lg'an a'dewir a'piwayi' bolg'an kinematikali'q teoriya paydalani'ldi'.

Elektronni'n' zaryadlangan bo'lekshe ekenligin paydalani'p Knol ha'm Ruska magnit linzag'a iye birinshi elektron mikroskopi'n soqti'. Bul jerde elektronlardi'n' rraektoriyasi'n ta'riyiplew ushi'n geometriyali'q optika jaramli' boli'p shi'qtı' ha'm sog'an sa'ykes usi' waqi'tlardan baslap elektronli'q optika rawajlana basladi'. Bryuxe ha'm Ioganson elektronli'k linzalardi' do'retiwdin' mu'mkinshiliklerin izertledi ha'm bunnan bi'lay linzalardi'n' eki tipi (elektrostatikali'q ha'm magnitlik) parallel tu'rde rawajlana basladi'. Biraq bir qansha texnikali'q sebeplerge baylani'sli' elektrostatikali'q linzalar ko'p tarqalmadi'.



Ruska ha'm Knol o'zleri islep shi'qqan mikroskopti'n' qasi'nda.

(Ruska E. (1980) *The Early History of the Electron Microscope*. Verlag GmbH & Co.)

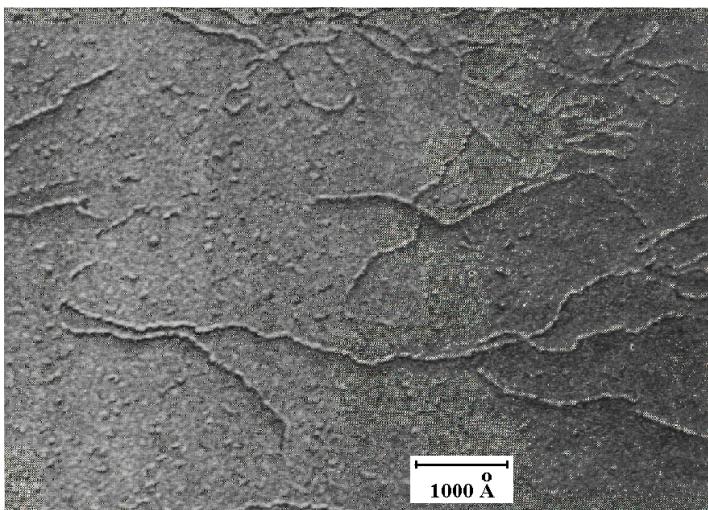
1934-ji'li' Marton magnit linzalarg'a iye elektron mikroskopi' haqqi'nda xabarladı' ha'm biologiyali'q ob'jeektlerdin' birinshi elektronli'q mikrofotosu'wretlerin aldi'. Arqa Amerikada birinshi mikroskop 1939-ji'li' Barton ni'n' basshi'li'g'i'nda Prebas ha'm Xile ta'repinen Toronto universitetinde islep shi'g'i'ldi'. Al AQSH tag'i' birinshi o'ndiriske engen mikroskop Xile ta'repinen Marton menen birgelikte islep shi'g'i'lgan edi. Bul mikroskop «Reydio korporeyshn of Amerika» firmasi' ta'repinen shi'g'ari'li'p, Borrisom ha'm Ruska ta'repinen do'retilgen ha'm Germaniyadag'i' Simens-Xalske firmasi' ta'repinen shi'g'ari'lg'an a'sbapqa di'm uqsas edi. Keyinirek sog'an usag'an magnit linzalarg'a iye elektronli'q mikroskoplar ko'p firmalar ta'repinen shi'g'ari'la basladi' (Xitashi, «Djapan elektron optike», Filips, RCA, Bendiks, AEI, UEMV-100lm ha'm basqalar).

1940-ji'llarg'a shekem elektronli'q difrakciya teoriyasi' elektronlardi'n' tolqi'nli'q qa'siyetine tiykarlanı'p rawajlandı' ha'm elektron mikroskopiyasi'nda o'zinin' qollanı'li'wi'n taba almadi'. Al sol waqi'tlardag'i' elektron-mikroskopiyali'q su'wret teoriyasi' tiykari'nan ob'jeektin' «effektiv qali'n'li'g'i» (mass-thickness) ko'z-qarasi'na tiykarlang'an edi. 1940-ji'li' Borris ha'm Ruska xrom okisinin' su'wretlerindegi intensivliktin' o'zgerisleri haqqi'nda maqala jazdi' ha'm ol «effektiv qali'n'li'g'i» interpretaciyasi'n sa'ykes kelmedi. Xile ha'm Bekerden' jumi'si'nda $\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ ni'n' mikrofotografiyalari' jari'q ko'rди. Bul su'wretlerde Bregg shashi'rawlari'ni'n' bar ekenligi ko'rindi. R.Xeydenrayx MgO kristalli'n izertlew

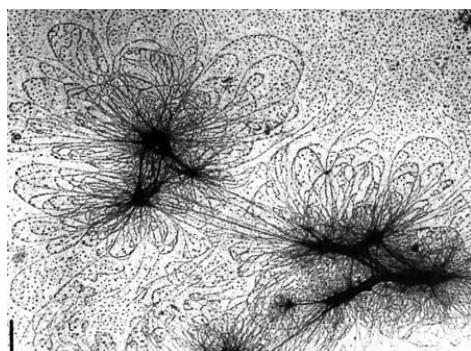
bari'si'nda su'wrette bir tekli intensivlikler jolaqlari'ni'n' ali'natug'i'nli'g'i'n tapti' ha'm oni' ko'p qaytalanatug'i'n breg shashi'rawi' tiykari'nda tu'sindirdi. Bersh kristallardi'n' su'wretlerindegi interferenciyalı'q effektlerdin' mi'sallari'n keltirdi. Kossel Kinder ta'repinen MgO kristallari' izertlegende ali'ng'an jolaqlardi'n' payda boli'w sebeplerin tu'sindire aldi'. Xeydenrayx ha'm Sterki kubli'q MgO ha'm CdO kristallari'ni'n' su'wretlerindegi intensivlik jolaqlari'n o'lshedi ha'm Bete teoriyası' tiykari'nda Fure potencialdi'n' koefficientlerin esapladi'. Bunnan buri'ni'raq Blekman ta'repinen difrakciyani'n' kinematikali'q teoriyası'ni'n' kemshilikleri qarap shi'g'i'ldi', soni'n' saldarı'nan joqarı'da bayanlang'an elektronli'q-mikroskopiyali'q baqlawlar ko'p waqi'tlərg'a shekem sheshilmegen bul ma'seleni qaytadan qoydi'. Usi' jag'daylarg'a qaramastan elektronli'q su'wretlerdegi interferenciyalı'q effektlerdin' tutqan orni'ni'n' a'hmiyeti jetkilikli tu'rde ani'qlang'an edi.

Usi' jag'daylar menen bir qatarda bakteriologiyada elektron mikroskopiyasi'n ken'nen qollani'w baslandi' ha'm ali'ng'an su'wretler «effektiv qali'nli'q» ko'z-karasları'nda tu'sindirildi. Biologiyali'q ob'yeuktlerdi sekcionlasti'ri'w ushi'n (juqa ob'yeuktler ali'w ushi'n) mikrotomlar jetilistirildi (Mikrotomlar - juqa ob'yeuktler ali'w ushi'n kollani'latug'i'n u'skeneler). Soni'n' ushi'n usi'nday strukturalardi' izertlegende mikrotom bahasi' joq quralg'a aylandi'. Biologiyali'q ob'yeuktlerdi mikrotomda bekitkende, ob'yeuktlerdi keptirgende u'lken qi'ynshi'li'qlar payda boldi' (sebebi elektron mikroskopı'nda tek keptilirilgen ob'yeuktler izertleniledi). Sonli'qtan ob'yeektten izertlew ushi'n juqa folgalardı' tayarlawda suwdi'n' kritikali'q noqati' ha'm salqi'nlati'lg'an halda keptiriw usi'llari' islenip shi'g'i'ldi'.

Org'anikali'q emes ob'yeuktlerdi elektron mikroskopı'ni'n' ja'rdeminde izertlew islerin eki usi'l og'ada ken'eytti. Olardi'n' birinshisi Mal ta'repinen usi'ni'lg'an ob'yeuktlerdin' betinin' ko'shirmelerin ali'w, ekinshisi Myuller ha'm onnan g'a'rezsiz Vilyams penen Vikov ta'repinen usi'ni'lg'an metallar ja'rdeminde ko'len'keler payda etiw (ko'len'ke tusiriw) usi'lli' boli'p tabi'ladi'. 1954-ji'li' Bredli ko'mir tamg'alardi' paydalani'wdi' elektron mikroskopiyasi'na kirgizdi (Ori'ssha «Otpeshatok» so'zi «tamg'a» so'zi menen qaraqalpaqshag'a awdari'lg'an, tekstte bunnan keyin paydalani'latug'i'n «replika» so'zi usi' ma'nisti an'g'artadi'). Usi'nnan baslap ko'mir replikalar usi'li' betlik ko'len'ke tu'siriw («Ottenenie» so'zin «ko'len'ke tu'siriw» dep awdarami'z) usi'li' menen birgelikte kontrast penen ayi'ra ali'wshi'li'qtı' a'dewir joqarı'latti' (50 Å ge shekem). SiO ni' puwlandi'ri'w menen ali'natug'i'n replikalardi' qollani'w 1980-ji'llarg'a shekem dawam etti. Xoll podlojka si'pati'nda awi'r metallar menen ko'len'ke tu'sirlilgen slyudani', al plenka materialı' si'pati'nda kremlı okisin paydalani'wdi' usi'ndi'. Usi' usi'ldan' ja'rdeminde ayı'ri'm molekulalardi'n' su'wreti ali'ndi'. 2-su'wrette diametri shama menen 20 Å bolg'an iyne ta'rizli DNK molekulasi'ni'n' mikrofotosu'wreti keltirilgen.

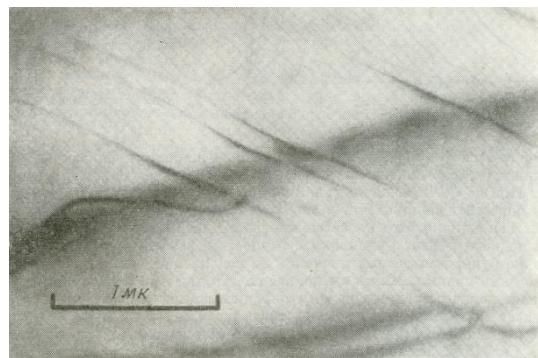


1-su'wret. Slyudani'n'
si'ni'w tegisligindegi DNK
molekulalari'ni'n'
elektronli'q
mikrofotosu'wreti.
Molekulalardi'n' diametri
shama menen 20
angstromge (Å) ten'.

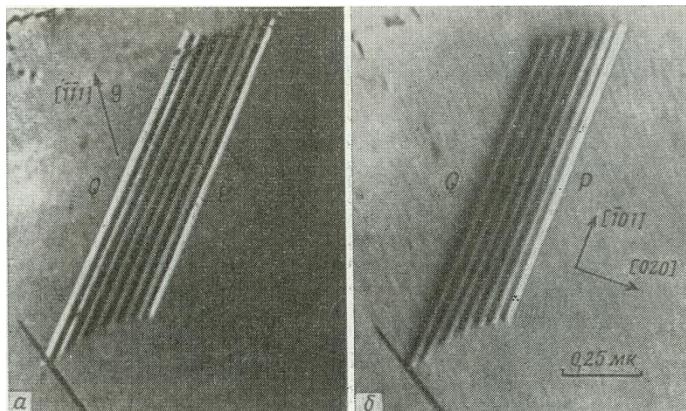


2-su'wret. DNK molekulasi'ni'n' ha'zirgi
zaman elektron mikroskop'inda ali'ng'an
su'wreti.

Metall kristallarda replikalar usi'li' qanaatlandi'rарли" na'tiyjeler bermegenlikten ji'lji'w jolaqlari'n o'tiwshi elektronlar da'stesinde baqlawg'a ha'reketler islendi. Bunday jag'dayda na'tiyjelerdi tu'sindiriw ushi'n dinamikali'q teoriyadan paydalani'w za'ru'rligi kelip shi'qt'i ha'm bul usi'ldi'n' u'lken perspektivag'a iye ekenligin ko'rsetetug'i'n mag'li'wmatlar ali'ndi'. Biraq tezletiwshi kernewdin' to'menligi ha'm izertleniwshi u'lginin' saylap ali'ng'an bo'liminen difrakciya ali'wdi'n' qi'yi'n ekenligi o'tiw arqali' izertlew usi'li'n ju'zege keltiriwge mu'mkinshilik bermedi. Bul awhal Simens firmasi'ni'n' tezletiwshi kernewi 100 kv bolg'an ha'm jup kondensori' bar Elmiskop-I mikroskop'i payda bolg'annan keyin jo'nledi. 1956-ji'l'i' Bolman ha'm Xirsh ta'repinen metallardag'i' dislokaciyalardi'n' en' birinshi su'wretleri ali'ndi'. 3-su'wrette o'tkeriwshi mikroskopta ali'ng'an dislokaciyan'i'n' ken'nen tarqalg'an su'wreti keltirilgen («Prosveshivayushiy mikroskop» so'zi «o'tkeriwshi mikroskop» dep awdari'lg'an). Dislokaciylar menen qatar kristallardag'i' jaylasti'ri'w defektleri de tabi'ldi' («Jaylasti'ri'w defektrleri» so'zleri «Defekti' upakovki» russha so'zlerinin' ma'nisin beredi). 4-su'wrette alyuminiydegi jaylasti'ri'w defektlerinin' ko'rini keltirilgen. Usi'nday su'wretlerdi tu'sindiriw ushi'n («tu'sindiriw ushi'n» so'zi menen bir qatarda «interpretaciyalaw» so'zinde bir ma'niste qollanami'z) elektronlar difrakciyası teoriyası'ni'n' bar barli'q na'tiyjelerin paydalani'w za'ru'r. Sebebi haqi'yqatta ali'ng'an su'wretlerdin' detallari' a'dette mayi'sqan boli'p, su'wrettegi qashi'qli'qlar obъekttegi qashi'qli'qlarg'a sa'ykes kelmeydi, al difrakciyalı'q sha'rtler menen ani'qlanadi'. Eger difrakciyag'a ushi'rag'an da'ste obъektivlik linza arqali' o'tip su'wret tegisliginde o'tiwshi daste menen betlesse, onda su'wretlerdegi qashi'qli'qlar obъekttegi haqi'yq'i'y qashi'qli'qlarg'a sa'ykes keledi. 1956-ji'l'i' Menter platina ftalocianinine saykes keliwshi birinshi jumi'sti' baspadan shi'g'ardi' (tegislikler arasi'ndag'i' qashi'qli'q 12 Å shaması'nda). Baset penen Menter din' jumi'slari'nda MoO₃ kristalli'ndag'i' d₍₀₂₀₎ tegislikleri arasi'ndag'i' qashi'qli'qqa sa'ykes keliwshi su'wret ali'ndi' (6,93 Å). 5-su'wrette sonday jollar menen ali'ng'an pa'njererin' su'wreti keltirilgen.



3-su'wret. Alyuminiydegi dislokaciylar.



4-su'wret.

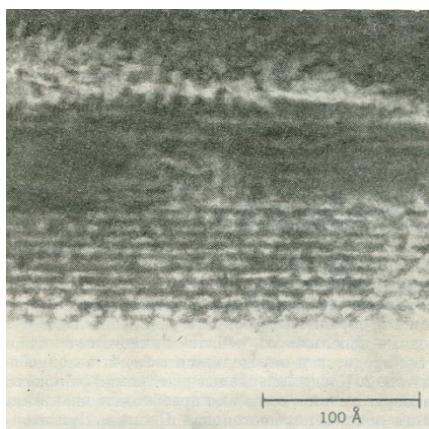
Cu+ 7% salmaq boyi'nsha Al quymasi'ndag'i' jaylasti'ri'w defektlerinin' su'wretleri.

Orientaciya -[101], shag'i'li'si'w K=[111].

a - jaqtı' maydandag'i' su'wret,
b - qaran'g'i' maydandag'i' su'wret
(Russa a'debiyattag'i' «svetropolnoe izobrazenie» ha'm «temnopolnoe izobrazenie» so'zleri sa'ykes «jaqtı' maydandag'i' su'wret» ha'm «qaran'g'i' maydandag'i' su'wret» dep awdari'lg'an).

A'lvette ha'zirgi waqi'tlari' elektron mikroskoplari'ni'n' ayi'ra ali'wshi'li'q qa'biletlikleri joqari' ha'm olar ayi'ri'm atomlardı' ko're aladi'. Mi'sali' Yaponiyada shi'qqan SMH-5 elektron mikroksopi' ja'rdeinde tegislikleri arasi'ndag'i' qashi'qli'q 1 Å bolg'an pa'njerenin' su'wretin sali'sti'mali' an'sat ali'wg'a boladi'.

Soni' aytı'p o'tiw a'hmiyetli boladi', Yaponiya elektron mikroskoplari'n shi'g'ari'w, elektron mikroskopiyası' usı'lları'n rawajlandı'ri'w boyi'nsha en' aldi'n'g'i' ma'mleketler qatarı'na birinshi boli'p kirdi. Bug'an tiykar retinde «Uspexi fizisheskix nauk» журнали'ni'n' 1957-ji'l, LXIII томи'ni'n' 4-sani'nda (827-845 betler) bası'li'p shi'qqan Aziya ha'm Okeaniya ma'mleketlerinin' Tokio qalası'nda 1956-ji'li' oktyabr ayi'nda boli'p o'tken elektronli'q mikroskopiya boyi'nsha birinshi regionalli'q konferenciya na'tiyjeleri haqqı'ndag'i' «Elektronnaya mikroskopiya v Yaponii» maqalası'n ko'rsetiwge boladi'. Bul maqaladan ali'ng'an Yaponiya elektronli'q mikroskoplari'ni'n' sali'sti'rması' kestesi to'mende keltirilgen ha'm bul kesteden 1956-ji'ldi'n' o'zinde Yaponiya elektronli'q mikroskoplari'ni'n' qanday da'rejede joqari' rawajlang'anlı'g'i'n ani'q ko'riwge boladi'.



5-su'wret.
MoO₃ kristalli'ndag'i' (020) tegisliklerinin'
Fure-su'wreti
(d = 6,93 Å).

Сравнительная таблица японских электронных микроскопов.

	№ п/п.	Тип	Разрешение в Å	Ускоряющее напряжение в кВ	Увеличение электронное	Конденсоры	Колич. линз	Стигматор
Высокое разрешение	1	JEM-5	15	50,80 100	600—100000	2	4	Магнитн. регулир.
	2	HU-10	15	50,75, 100	400—100000	2	3	Магнитн. регулир.
Среднее разрешение	3	JEM-T4	25	50	2000—20000	4	3	Магнитн. регулир.
	4	HS-5	25	50	2000—20000	1	3 пост.магн.	Нет
Низкое разрешение	5	SMV-80	20	80	500—50000	—	—	—
	6	TRS-50D	30	50	500—10000	Нет	3	Магнитн. нерегулир.
	7	JEM-T1	50	50	2500; 5000	Нет	2	Нет
	8	SM-C3	40	50	500—10000	Нет	3	Нет
	9	HM-2	100	40	1500; 2000; 3000; 4000	Нет	2 пост.магн.	Нет

Atomlar arasi'ndag'i' qashi'qli'qlardi' tikkeley o'lshewdegi qi'yi'nshi'li'qlar materiyani'n' tolqi'nli'q qa'siyetlerinin' tuwri'dan-tuwri' na'tiyjesi boli'p tabi'ladi'. Tolqi'nli'q qa'siyetke ani'qsi'zli'q ta'n, al bul ani'qsi'zli'q shashi'rati'wshi' объектti tek itimalli'q ko'z-qarasi'nan ta'riyiplewge mu'mkinshilik beredi. Atomlardi'n' elektronli'q mikroskopiyali'q su'wretinin' qa'liplesiwi ushi'n process yamasa aylani's a'sbapti'n' defekti menen sheklenip qalmawi' kerek. Bul process u'lgiye tu'siwshi elektronlar menen baylani'sli' boli'p, olardi'n' u'lgi betindegi orni' (predmetlik bettegi orni') shama menen 300 Å lik ani'qsi'zli'q penen ta'riyiplenedi. Eger su'wret tegisligine kelip tu'siwshi elektronnan atomni'n' turg'an ori'ni'ni'n' u'lkeytilgen su'wreti talap etiletug'i'n bolsa, onda oni'n' berilgen fokal tegisliktegi tolqi'n paketi og'ada ushli' (ostri'y) boli'wi' kerek. Solay etip da'slep diffuziyali'q tu'siwshi elektron объектten atomli'q qashi'qli'qlar xaqqi'nda qanday da bir informaciyalardi' ali'p ketedi. Biraq informaciyanı'n' shaması' usi' shashi'rawdi'n' qanshama ani'q an'lati'lg'anli'g'i'na baylani'sli'. Bul qashi'qli'q qanshama tez-tezden qaytalanatug'i'n bolsa su'wret tegisligine ol haqqi'nda ali'p kelinetug'i'n informaciya sonshama ko'p boladi'. Demek объект joqari' jetilisen kristall boli'wi' kerek ha'm oni'n' formasi'ni'n' transformantasi' delta-funkciya bolg'anday o'lshemge iye boli'wi' sha'rt. Pa'njererin' da'wirliliginin' qa'legen mayi'si'wi' ta'rtipsizlikke yamasa artqi' fokal tegisliktegi elektronni'n' tolqi'n paketinin' ken'eyiwine ali'p keledi. Basqa ta'repten jetilisen u'lken o'lshemlerge iye kristallar ushi'n

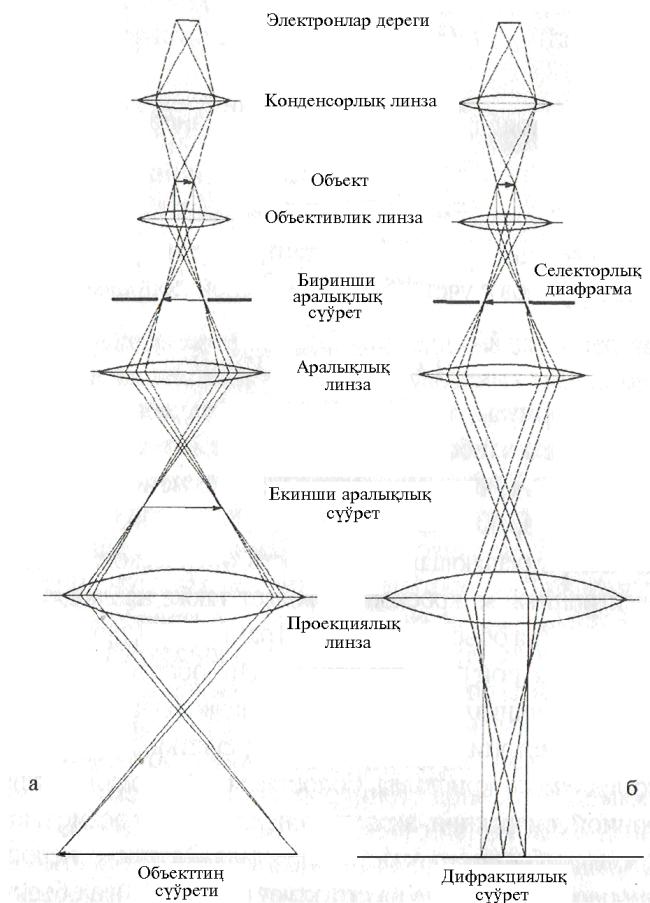
da tolqi'n paketinin' ken'eyiwine ali'p keletug'i'n eki faktor bar: birinshisi ji'lli'li'q qozg'ali'slari' ha'm serpimli emes soqli'g'i'si'wlar. Bul faktorlar obъektte shashi'rag'an elektrong'a qashi'qli'qlardi'n' qanday da bir pu'tin intervali'n beredi. Olar haqqi'nda da elektron su'wret tegisligine informaciya ali'p keledi. Al bul o'z gezeginde su'wret tegisliginde itimalli'raq yamasa xarakterlirek qashi'qli'qtin' obъektte bar basqa da qashi'qli'qlar menen jabi'li'p, ko'rinpoy qalatug'i'nli'g'i'n an'g'artadi' (a'lvette bul qubi'li'sti'ñ kontrastti'n' joqli'g'i'ni'n' aqi'betinde ju'zege keletug'i'nli'g'i'n ahsat tu'siniwge boladi').

§ 2. Elektron mikroskopini'n elektronli'q-optikali'q sxemasi'

Elektronli'q mikroskopi'n' tiykarg'i' bo'leklerine elektronlar deregi bolg'an elektron pushkasi'nan ha'm su'wretti payda etetug'i'n linzalar sistemasi'nan turadi'. Derekten shi'qqan elektronlar dastesi kondensorli'q linzalar ta'repinen tu'rlendiriledi ha'm bunnank eyin obъektivlik linza ni'n' polyuslik nakoneshnigi jani'nda ornati'lg'an izertlenetug'i'n u'lgige kelip tu'sedi.

O'tkeriwhsi elektron mikroskopi'ndag'i' elektronlardi'n' eki mi'na jag'daydag'i' bunnan bi'layg'i' ju'rislerin qaraymi'z: birinshisinde mikroskop u'lkeytilgen su'wret ali'w, ekinshisinde mikroskop elektronograf (mikrodifrakciya ali'w) rejiminde isleydi. U'lkeytiw rejiminde (6-a su'wretti qaran'i'z) obъektiv ta'repinen u'lkeytilgen su'wret I_1 arali'qli'q linza ushi'n obъekt boli'p, bul linza I_2 su'wretin beredi. Bul su'wret bolsa o'z gezeginde proekciyali'q linza ta'repinen u'lkeytiledi. Ali'ng'an su'wret fluorescent ekranda vizualizaciyalanadi' (ko'zge ko'rinetug'i'n halg'a ali'p kelinedi), al ekranni'n' tikkeley asti'nda su'wretti tu'sirip ali'w ushi'n fotoplastinka ornati'lg'an boladi'.

Magnit linzalari'ni'n' katushkalari'ndag'i' toqt'i' o'zgerte oti'ri'p u'lgidan shi'qqan elektronlar da'stesinin' ha'r biri ekranda fokuslengenday etip saylap ali'wg'a boladi'. (1.b su'wret). Qala berse bul noqatti'n' orni' bul da'stenin' bag'i'ti'na bir ma'nisli sa'ykes keledi. Bunday jag'dayda difrakciyali'q kartina baqlanadi' (bunday difrakciyali'q kartinani' elektronogramma dep ataymi'z).



6-su'wret.

O'tkeriwshi elektron mikroskopi'ni'n' elektronli'q-optikali'q sxemasi'.

- a) U'lkeytiw rejimindegi nurlar joli', b) mikrodifrakciya rejimindegi nurlar joli'.

§ 3. Su'wrettin' payda boli'wi' ha'm difrakciyali'q kontarst

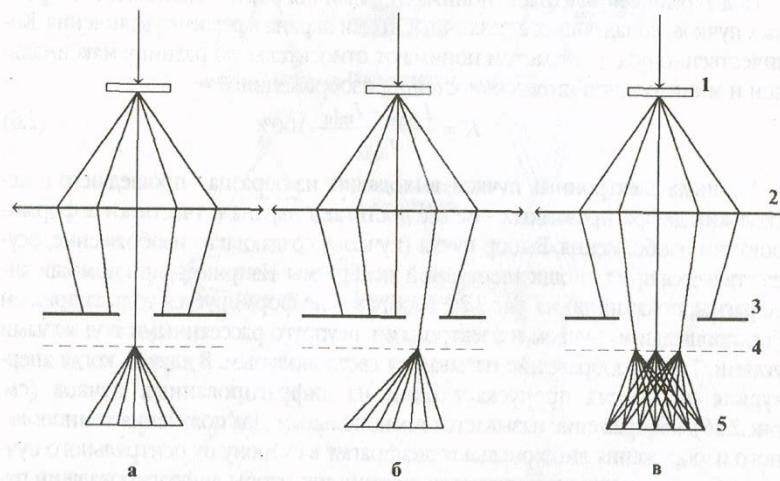
«Kontrast» termini u'lkeytiw rejiminde ekranni'n' ha'r qi'yli' noqatlari'na tu'sken elektron da'telerinin' intensivliklerinin' ayi'rmasi'na sa'ykes keledi. Sanli'q jaqtan kontarst degenimizde su'wrettegi maksimalli'q ha'm minimalli'q intensivliklerdin' sali'sti'rmali' ayi'rmasi'n tu'sinedi:

$$K = \frac{I_{\max} - I_{\min}}{I_{\max}} \cdot 100 \% \quad (1.10)$$

U'lgi arqali' o'tiwshi elektron da'stelerinin' bir neshe da'stenin' barli'g'i' da ekrang'a jetip kelmeydi ha'm su'wretti payda etiwge qatnaspaydi'. Su'wretti payda etiwshi da'steni saylap ali'w (yamasa da'stelerdi saylap ali'w) aperturali'q diafragma ja'rdeminde a'melge asi'ri'ladi'. Mi'sali' 7-a su'wrette ko'rsetilgen diafragmani'n' ja'rdeminde su'wret tek tuwri' o'tken (yag'ni'y u'lgi arqali' tuwri' o'tken) da'ste ta'repinen ha'm kishi mu'yeshlerge serpimli emes shashi'rag'an elektronlar ta'repinen payda etiledi. Bunday su'wretti jaqtı' maydandag'i' su'wret (svetlopolnoe izobrajenie) dep ataydi'. Eger aperturali'q diafragma difrakciyag'a ushi'rag'an da'stelerdin' birewin o'tkeretug'i'n bolsa (7-b su'wret) su'wret qaran'g'i' maydandag'i' su'wret (temnopolnoe izobrajenie) dep ataladi'. Qaran'g'i' maydandag'i' su'wretti ali'w ushi'n eki joldi' paydalanyadi': diafragmani' orayli'q da'stege qaray i'si'radi' yamasa difrakciyag'a ushi'rag'an da'ste ob'jeaktivlik linzani'n' ko'sheri arqali'

o'tetug'i'nday etip jaqtı'landı'ri'wshi' sistemani' en'keytedi. Joqarı' ayı'ra ali'wshi' elektron mikroskopiyası'nda (High Resolution Electron Microscopy - HREM) su'wret tuwrı' o'tiwshi nur menen difrakciyag'a ushi'rag'an bir neshe da'stelərdi qosi'w menen ali'nadi'. Bul jag'day 7-v su'wrette keltirilgen. U'lğiden shı'g'i'wshi' dastelerdin' intensivlikleri u'lğıdegi difrakciya processi ha'm juti'w arqalı' ani'qlanadı' ha'm sonı'n' menen birge u'lginin' quri'li'si' menen quramı'nan, onı'n' qalı'n'li'g'i'nan, orientaciysi'nan, tolqı'n uzi'nli'g'i' λ den (yag'ni'y elektronni'n' energiyasi'nan) g'a'rezli boladı'. Sonı'n' menen birge u'lğiden shı'g'i'wshi' dastelerdin' intensivlikleri elektronlardı'n' shashi'rawı'ni'n' dinamikali'q teoriyası' menen ta'riyiplenedi. Al bul teoriyanı'n' matematikali'q apparati' SHredinger ten'lemesi boli'p tabı'ladi'.

Joqarı'da o'tkeriwshi elektron mikroskopiyası'nda u'lginin' bir ushastkasi'ni'n' su'wretinde, difrakciyalı'q su'wretinde ali'wg'a boladı' dep aytı'lg'an edi. Sonı' da aytı'p o'tiw kerek, elektron da'steleri magnit linzalar arqalı' o'tiwdin' bari'si'nda magnit maydani'ni'n' linzani'n' ko'sheri bag'i'ti'ndag'i' boylı'q qurawshi'si'ni'n' bar'boli'w saldarı'nan spiral ta'rızlı mayı'sadi'. Usı'ni'n' na'tiyjesinde linza arqalı' o'tkende elektronlar da'stesinin' barlı'q ji'ynag'i' linzani'n' optikalı'q ku'shine g'a'rezli mu'yeske buri'ladi'. U'lkeytiw rejiminen mikrodifrakciya rejimine o'tkende aralı'qli'q linzani'n' optikalı'q ku'shinin' o'zgertiliwi talap etiledi. Sonlı'qtan mikrodifrakciyalı'q su'wrettin' u'lginin' quri'li'si'ni'n' su'wrette salı'sti'rg'anda buri'li'wi' ori'n aladı'. Sol buri'li'w mu'yeshin eksperimentte yamasa linzalardı'n' parametrlerin biliw arqalı' esaplawg'a boladı'.



7-su'wret. Elektron mikroskopı'ndag'i' su'wrettin' payda boli'wi': a) – jaqtı' maydandag'i' su'wret (su'wretke u'lesti tek tuwrı' o'tiwshi da'ste beredi); b) – qaran'g'i' maydandag'i' su'wret (su'wrettin' payda boli'wi'na u'lesti tek bir difrakciyag'a ushi'rag'an da'ste beredi); v) - ko'p sandag'i' difrakciyag'a ushi'rag'an da'stelər ta'repinen payda etiletug'i'npa'njererin' tuwrı' su'wreti; 1 – u'lgi; 2 ha'm 4 - linzalar; 3 - aperturalı'q diafragma; 5 – ekran

§ 4. O'tkeriwshi elektro mikroskopları' ushi'n u'lğıler tayarlaw

O'tkeriwshi elektron mikroskopları'nda izertleniwi kerek bolg'an u'lğıler bir qatar talaplardı' qanaatlandı'ri'wi' kerek. Birinshiden olardi'n' juqa ($500 - 5000 \text{ \AA}$) ha'm olardi'n' betleri derlik parallel boli'w sha'rt. Elektronlardı'n' ko'p juti'li'wi' u'lğılerdin' kali'n'li'g'i'na shek qoyadı', al parallellikke talap usı'nday qalı'n'li'qtı'n u'lginin' u'lken maydani'nda ornı' ali'wi'ni'n' kerekliginen kelip shı'g'adi'. Sebebi qalı'n' ushastkalar elektron da'stesi ushi'n derlik mo'ldır emes. Ekinshiden u'lğıler taza betke iye boli'wi' lazi'm, sebebi amorf plenkani'n' og'ada juqa qatlami'ni'n' o'zi kontarst payda etpey-aq u'lginin' mo'ldirligini keskin tu'rde u'lkeytip jibere aladı'. A'dette u'lken materialdi' da'slep qalı'n'li'g'i' kishi

bolg'an juqa plastinkalarg'a kesedi. Usi'ni'n' na'tiyjesinde kesilgen denenin' beti tegis emes ha'm pataslang'an boli'p shi'g'adi'. Sonli'qtan kesiwden keyin shlifovkani' qollanadi'. SHlifovka processi shlifovkalawshi' qag'az u'stinde a'melge asi'ri'ladi'. Bunnan keyin A1₂O₃, MgO yamasa arnawli' almaz pastalardan tayarlang'an emulsiyani' paydalani'p jumsaq gezleme u'stinde polirovkalanadi'. Kesiw, shlifovkalaw ha'm mexanikli'q polirovkalanadi'n' bari'si'nda payda bolg'an deformaciyalang'an betlik qatlam ximiyali'q yamasa elektroximiyali'q polirovka ja'rdeinde ali'p taslanadi'. Ximiyali'q polirovka processinin' ma'nisi saykes ximiyali'q reagentler bolg'an siltiler, kislotalar, olardi'n' aralaspasi' ha'm duzları' menen ta'sirleskendegi u'lginin' betinin' eriwi boli'p tabi'ladi'. Ximiyali'q polirovkani'n' tiykarg'i' arti'qmashli'g'i' oni'n' a'piwayi'li'g'i'nda. Bul usi'l ha'r qi'yli' jollar menen a'mege asi'ri'ladi' (eritpege batı'ri'w, ag'i'sta polirovkalaw). U'lgi ximiyali'q eritpege sali'ng'an baslang'i'sh momentte reakciya u'lken tezlik penen o'tedi, al keyinirek reakciya ten' o'lshewli ju'redi. Bul jag'day bar ekenligi ayqi'n ko'rinetug'i'n relefke iye betlik mexanikali'q buzi'lg'an qatlamni'n' bar ekenligi menen tu'sindiriledi. Bul qatlam ta'sirlesiwdin' effektivlik maydani'n' u'lkeytedi. Ximiyali'q birikpe betlerdegi mikrojari'qlarg'a kiredi, olardi' ken'eytedi ha'm su'yir mu'yeshli relefti tegisleydi. Deformaciyalang'an qatlam jog'alti'lg'annan keyin kristaldi'n' buzi'lmag'an qatlami'n'i'n' eriwi ten' o'lshewli o'tedi. Polirovka tezligi reakciya o'nimlerin (ximiyali'q reakciya na'tiyjesinde payda bolatug'i'n birikpeler) ali'p ketiw (polirovkalani'wshi'f betten qashi'qlati'w) ha'm eritkishtin' (traviteldin') jan'a porciyasi'n'i'n' ali'p keliniw tezligine baylani'sli'. Aralasti'ri'w eritkishtin' (eritkish so'zi rus tilindegi «travitel» so'zinin' ma'nisin beredi) qurami'n'i'n' tezden ten'lesiwine ali'p keledi, usi'ni'n' saldari'nan u'lginin' juqari'w tezligi a'dette u'lkeyedi. Eger u'lgi ha'm elektrlitke batı'ri'lg'an metall elektrod arqali' elektr tog'i' o'tkerilse a'dettegi elektroliz processi baslanadi'. Usi'ni'n' aq'i'betinde u'lginin' betinin' eriwi ori'n aladi'. Eritkishlerdin' qurami' menen elektropolirovka sha'rtleri spravoshnikerde berilgen.

Son'g'i' waqi'tlari' ionlar menen juqarti'w usi'li' ken'nen qollani'lmaqta. Bul usi'lda u'lginin' betinen atomlar energiyasi' 1:1 kev bolg'an ionlardi'n' uri'li'wi' menen uri'p shi'g'ari'ladi'. Bunday etip juqarti'w processi og'ada kishi tezlikler menen ju'redi (shama menen 0.1 mkm/min). Sonli'qtan ol tek juqarti'w processinin' en' keyingi etapi'nda paydalani'ladi'. A'lbette ionli'q bombalaw ju'da' taza bettin' payda boli'wi'n ta'miyinleydi. Soni'n' menen birge juqa plenkalardi' vakuumde puwlandi'ri'w yamasa elektrlik otı'rg'i'zi'w (elektroosajdenie) joli' menen de aladi'. Biraq bul jag'dayda otı'ri'zi'lg'an qatlamlardi'n' o'zlerine ta'n quri'li'sqa iye bolatug'i'nli'g'i'n esapka ali'w kerek. Jen'il si'natug'i'n betke iye qatlamlı' kristallardi' u'lGINI ko'p ret sol betler boyi'hsha si'ni'qlarg'a si'ndi'ri'w arqali' jukarti'wg'a boladi'. Buni'n' ushi'n u'lgi jabi'sqaq lentani'n' eki bo'legi menen bo'leklerge ayi'radi'. Za'ru'rli kali'n'li'qtag'i' u'lgi ali'ng'anda lenteni' eritkishke sali'p u'lGINI jazdi'ri'p ali'w mu'mkin. Soni'n' menen birge joqari'da elektron mikroskopiyasi' ushi'n jetkilikli da'rejede taza betke iye u'lgilerdin' kerek ekenligi aytı'li'p o'tilgen edi. Sonli'qtan juqarti'w processinen keyin u'lgiler abaylap juwi'ladi'. Eger juwi'lg'annan keyin de u'lgi jetkilikli da'rejede taza bolmasa, onda oni' ultrases ja'rdeinde tazalawg'a tuwri' keledi. Al tayarlang'an u'lgilerdi tezden mikroskopta izertlew yamasa inert gazdin' atmosferasi'nda saqlaw kerek. Sebebi ximiyali'q aktiv zatlardi'n' betleri hawada saqlag'anda tezden buzi'li'p ketedi (tiykari'nan okislenedi).

§ 5. Elektronogrammalardi' interpretaciyalaw

Izertleniwshi kristaldi'n' quri'li'si' haqqi'nda informaciya ali'w ushi'n ali'ng'an elektronogrammalardi' oqi'y biliw kerek. Elektronogramma bazi' bir jaqi'niasi'wda keri pa'njererin' tegislik penen kesilisiwde payda bolg'an kese-kesimi bolg'anlı'qtan en' da'slep keri pa'njererin' su'wretin sali'w kerek. Keri pa'njere tu'sinigi to'mende qaralatug'i'n

mi'saldan ta'biyyiy tu'rde kelip shi'g'adi'. Kristall arqali' elektron tolqi'ni'ni'n' tarqali'wi' SHredinger ten'lemesi menen ta'riyiplenedi:

$$\Delta\psi(r) + \frac{8\pi^2 me}{h^2} [E + V(r)]\psi(r) = 0. \quad (1.11)$$

Bul an'latpadag'i' eE elektronni'n' toli'q energiyasi', eV(r) elektronni'n' potencial energiyasi' (u'lgi pa'njeresinin' atomlari'ni'n' elektronlari' ha'm yadrolari' menen ta'sir etisiwdin' na'tiyjesinde payda boladi'), $\psi(r)$ arqali' elektronlardi'n' tolqi'n' funkciyasi' belgilengen. SHeksiz u'lken jetilisken kristall ushi'n potencialdi'n' Fure qatari' tu'rinde jazi'li'wi' mu'mkin:

$$V(r) = \sum_H V_H \cdot \exp[i(H, r)] \quad (1.12)$$

Bul an'latpada H arqali' ha'r qi'yli' atomli'q tegisliklerge sa'ykes keliwshi «keri pa'njererin' vektor» lari', V_H arqali' Fure qatari'ni'n' koefficientleri belgilengen. Bul koefficientler elementar quti'ni'n' atomlari' boyi'nsha summa ali'w arqali' ani'qlanadi':

$$V_H = \frac{1}{V} \sum_j V_j(r) \cdot \exp[-i(H, r_j)] \quad (1.13)$$

Bul an'latpada $V_j(r)$ arqali' j-atomni'n' potenciali' belgilengen. Bazi' bir H lar ushi'n ha'r qi'yli' atomlardi'n' u'lesleri bir birin kompensaciyalaydi' ha'm $V_j(r) = 0$ boladi'. Usi'g'an baylani'sli' elektronogrammada sa'ykes tu'yin bolmaydi' (so'nedi dep aytami'z, strukturali'q analizde ken' tu'rde qollani'latug'i'n rus tilindegi «Pravila pogasaniya» so'zleri «so'niw qag'i'ydalari'» dep awdari'lg'an) ha'm $H(h,k,l)$ vektorlari'ni'n' qurawshi'lari' (h, k, l indeksleri Miller indeksleri boli'p tabi'ladi') ha'm elementar quti'ni'n' tipleri boyi'nsha usi'nday tu'yinlerdi ani'qlawg'a mu'mkinshilik beretug'i'n qag'i'ydalardi' so'niw kag'i'ydalari' dep ataymi'z. Mi'sali' qaptaldan oraylasqan pa'njereler ushi'n h, k ha'm l indekslerinin' ma'nislerinin' barli'g'i' bir waqi'tta taq yamasa jup boli'wi' sha'rt. Bul sha'rtti matematikali'q tu'rde bi'layi'nsha jazami'z: $h + k = 2n$, $k + l = 2n$, $h + l = 2n$, n pu'tin san (demek $2n$ degenimiz bul sanni'n' jup ekenligin an'g'artadi'). Ko'lemde oraylasqan pa'njere ushi'n $h + k + l = 2n$. Al almaz strukturasi'na iye kristallar ushi'n (kremniy, germaniy ha'm basqalar) - $h, k, l = 2n + 1$ yamasa $h, k, l = 2n$ ha'm $h + k + l = 4n$.

Keri pa'njere noqatlardi'n' ji'ynag'i' boli'p, bul noqatlarda koordinata basi'nan baslap qo'y'ilg'an, so'niw qag'i'ydalari' ta'repinen «ruqsat etilgen» H vektorlari' tamam boladi'.

SHekli kristall ushi'n keri pa'njere tu'sinigi Fure integrali' ja'rdeinde keltirilip shi'g'ari'ladi' (al Fure qatari' tu'sinigi ja'rdeinde emes):

$$F(H) = \frac{1}{V} \int_V V(r) \cdot \exp[-i(H, r)] dr. \quad (1.14)$$

Bul an'latpadag'i' integrallaw kristaldi'n' barli'q ko'lemi v boyi'nsha ali'nadi'. Bul jag'dayda $|F(H)|^2$ funkciyasi'ni'n' maksimumlari' keri pa'njererin' tu'yinleri dep ataladi'. Olar endi shekli ko'lemleruge ha'm kristaldi'n' formalari'na g'a'rezli bolgan formalarg'a iye boladi'. Mi'sali' juqa folga ushi'n bul maksimumlar folga tegisligine perpendikulyar sterjenlerdin' tu'rine iye boladi', qala berse sol sterjenlerdin' uzi'nli'qlari' folgani'n' qali'n'li'g'i'na keri proporcional.

Keri pa'njere to'mendegidey etip ani'qlang'anda da so'niw qag'i'ydalari'n sapali'q jaqtan qollani'w mu'mkin. Ko'pshilik jag'daylarda elektronlardi'n' serpimli shashi'rawi' dep

atalatug'i'n shashi'raw izertlenedi. Bunday jag'dayda shashi'rag'an elektronlardı'n' energiyalari' kelip tu'sken elektronlardı'n' energiyalari'na ten'. Elektronni'n' energiyasi' oni'n' tolqi'n vektori' menen bir ma'nisi baylani'sqan bolg'anli'qtan barli'g'i' da bir noqattan baslanatug'i'n barli'q elektron da'stelerinin' tolqi'n vektorlari' (kelip tu'siwshi ha'm difrakciyag'a ushi'rag'an elektronlardı'n' tolqi'n vektorlari') bir sferani'n' betinde tamam boli'wi' kerek. Bul sfera tarqali'w sferasi' yamasa Evald sferasi' dep ataladi'. Eger shashi'rati'w sferasi' keri pa'njererin' tu'yinin kesip o'tetug'i'n bolsa g'ana ku'shli shag'i'li'sti'ri'w ori'n aladi'. Eger \mathbf{K}_0 arqali' tu'siwshi da'stenin' tolqi'n vektori'n, \mathbf{K}_H arqali' shashi'rag'an tolqi'nni'n' tolqi'n vektori'n, \mathbf{H} arqali' keri pa'njererin' vektori'n belgilesek onda joqari'da ayti'lg'an sha'rt bi'layi'nsha jazi'ladi':

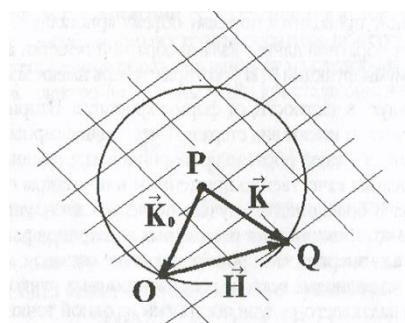
$$\mathbf{K}_H = \mathbf{K}_0 + \mathbf{H}. \quad (1.15)$$

Bunnan shashi'rawdi' ani'qlawdi'n' a'piwayi' geometriyali'q usi'li' kelip shi'g'adi'. Keri pa'njereni du'zemiz. O orayi'nan \mathbf{K}_0 vektori'n ju'rgizemiz ha'm oni'n' ushi'nan radiusi' $1/\lambda$ bolg'an sfera ju'rgizemiz. Bul sfera shashi'rati'w sferasi' (Evald sferasi') boli'p tabi'ladi'. Sol sferani'n' keri pa'njererin' tu'yinleri menen ha'r bir kesilisiw noqati' shashi'rag'an tolqi'nni'n' \mathbf{K}_H vektori'n'i'n' ushi' boli'p tabi'ladi'.

Eger tezletiwshi kernewdin' shamasi' 100 kv bolsa sferani'n' radiusi' 27 Å ge ten' boladi'. Bul shama keri pa'njererin' parametrlerine sali'sti'rg'anda a'dewir u'lken. Sonli'qtan sferani tegislik dep approksimaciyalaw mu'mkin.

Solay etip biz difrakciyag'a ushi'rag'an da'stenin' bag'i'ti'n an'sat ani'qlay alami'z (8-su'wrette keltirilgen) ha'm fotoplastinkada keri pa'njererin' kese-kesiminin' proekciyasi'n alami'z. Keri ken'isliktegi o'lshemler menen fotoplastinkadag'i' o'lshemler arasi'ndag'i' proporcionalli'q koefficientti bi'layi'nsha ani'qlaw mu'mkin: Tegislikleri arasi'ndag'i' qashil qli'q $d_{hkl} = 1/|\mathbf{H}_{hkl}|$ shamasi'ha ten' bolg'an tegisliklerden ali'ng'an fotoplastinkadag'i' daqtin' qaysi' ori'nda turg'anli'g'i' mi'na an'latpa ja'rdeinde ani'qlanadi':

$$R = \lambda L / d_{hkl} = \lambda L |\mathbf{H}|. \quad (1.16)$$



8-su'wret. Keri ken'isliktegi difrakciyasi' ushi'n Evald sxemasi'. O arqali' keri ken'isliktegi koordinatalar basi', OP arqali' keri pa'njererin' koordinata basi' belgilengen.

Bul an'latpada R arqali' orayli'q daqqa shekemgi qashi'qli'q, λ arqali' tolqi'n uzi'nli'g'i', L arqali' kamerani'n' uzi'nli'g'i' (u'lgidien fotoplastinkag'a shekemgi qashi'qli'q belgilengen. λL shamasi' mikroskopti'n' difrakciyali'q turaqli'si' dep ataladi'. Oni'n' ma'nisi fotoplastinkadag'i' qashi'qli'qlardi'n' kristaldi'n' keri pa'njeresindegi tegisliktegi qashi'qli'qlardan qansha shamag'a ayri'latug'i'nli'g'i'n bildiredi.

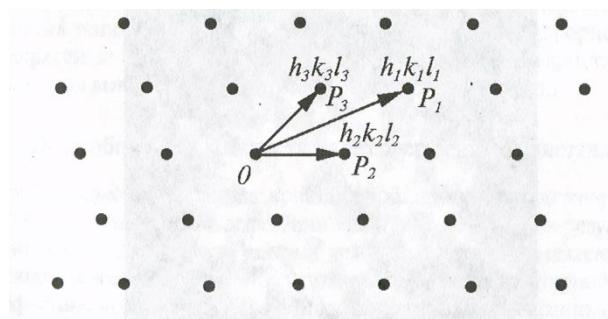
§ 6. Elektronogrammalardi' indekslew

Endi elektronogrammasi' ali'natug'i'n kristaldi'n' elementar quti'si' belgili, biraq oni'n' orientaciyasi' belgisiz bolsi'n. 9-su'wrette baqlanatug'i'n difrakciyali'q su'wret ko'rsetilgen. U'sh P_1 , P_2 ha'm P_3 tu'yinlerin saylap alami'z. Olar kooridanata basi' O menen

parallelogramm payda etedi. Usi' shag'i'li'si'wlarg'a sa'ykes keliwshi PH shamalari'n o'lshaymiz ha'm (1.16) formulasi'na sa'ykes tegislikler arasi'ndag'i' qashi'qli'qlardi' ani'qlaymi'z. Bul qashi'qli'qlar tiykari'nda Miller indekslerinin' mu'mkin bolg'an ji'ynaqlarini'n tabami'z. Izertewdin' usi' basqi'shi'nda tegisliklerdin' ha'r bir qatari' ushi'n qaytalani'w faktori'na sa'ykes keliwshi indekslewdin' ja'ne de bir qansha usi'llari' bar. Mi'na sha'rtlerdin' ori'nlan'i'wi' ushi'n si'nap ko'riw ha'm qa'telik jiberiw usi'li' (sabaqtih bari'si'nda «Metod prob i oshibok» so'zlerin «si'nap ko'riw ha'm qa'telik jiberiw usi'li» so'zleri menen almasti'rami'z) tiykari'nda bir birine sa'ykes keliwshi bir qatar indekslerdi saylap alami'z:

$$\begin{aligned} h_3 &= h_1 + h_2, \\ k_3 &= k_1 + k_2, \\ l_3 &= l_1 + l_2. \end{aligned} \quad (1.17)$$

Elektronogrammani'n' qalg'an barli'q tu'yinleri bunnan keyin a'piwayi' vektorli'q qosi'w usi'li' menen ani'qlanadi'.



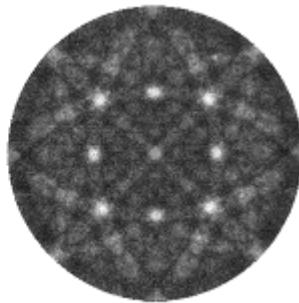
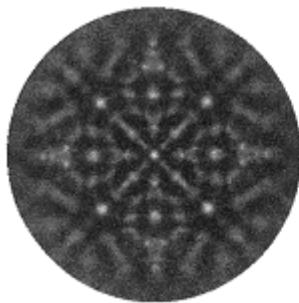
9-su'wret. Belgisiz elektronogrammani' indekslewge mi'sal.

Jiyi tu'rde paydalani'latug'i'n basqa bir usi'lda da'slep OP₂ ha'm OP₁ ler arasi'ndag'i' mu'yeshe o'lshenedi ha'm bunnan keyin kestelik mag'li'wmatlar menen sali'sti'ri'w yamasa P₂ ha'm P₃ ler ushi'n sa'ykes keliwshi indekslerdi esaplaw arqali' ma'sele sheshiledi.

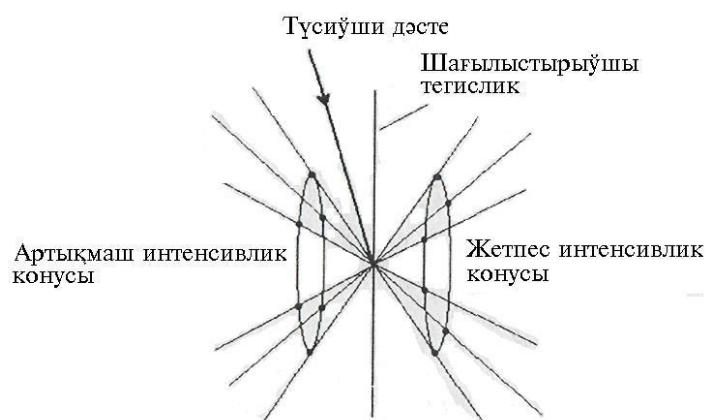
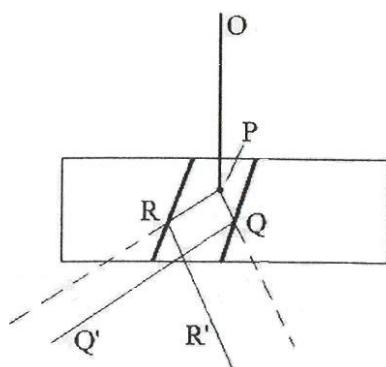
§ 7. Kikushi si'zi'qlari' ja'rdeinde kristaldi'n' orientaciyalari'n ani'qlaw

Kristaldi'n' qali'n'li'g'i' u'lkeytilgende elektronogrammadag'i' daqlar menen birge Kikushi si'zi'qlari' dep atalatug'i'n si'zi'qlardi'n' quramali' su'wreti payda boladi' (10-su'wretti qaran'i'z, Kikushi Yaponiyali' fizik boli'p, usi'nday si'zi'qlardi'n' ali'ni'wi' haqqi'ndag'i' maqalasi' 1928-ji'li' baspadan shi'qt'i': Kiruchi S., Japan Journ. Phys., 5, 83, (1928).]). Elektronogrammani'n' diffuziyali'q foni'nda bul si'zi'qlar detallari' jetkilikli da'rejede quramali' bolg'an bazi' bir strukturani' payda etedi. Bul si'zi'qlardi'n' payda boli'wi' serpimli emes shashi'rag'an elektronlardi'n' Bregg shag'i'li'si'wi' menen baylani'sqan boli'p, ma'selege toli'q juwap beriw ushi'n dinamikali'q teoriyanı' paydalani'wg'a tuwri' keledi. Biraq Kikushi si'zi'qlari'ni'n' geometriyasi' u'lginin' orientaciysi'n joqari' da'llikte ani'qlaw ushi'n ju'da' qolayli' qural boli'p tabi'ladi'. A'piwayi' tu'rde Kikushi si'zi'qlari'ni'n' payda boli'w mexanizmin bi'layi'nsha ko'z aldi'g'a keltiriw mu'mkin: Orayg'a jaqi'n bazi' bir noqatta (11-su'wretti qaran'i'z) tu'siwshi da'stenin' elektronlari'ni'n' serpimli emes shashi'rawi' ori'n aladi'. Bul shashi'rawda tolqi'n vektori'ni'n' bag'i'ti' o'zgeredi ja'ne elektronni'n' energiyasi' kemeyedi. Soni'n' menen birge serpimli emes shashi'raw intensivligi shashi'raw mu'yeshinin' u'lkeyiwi menen monoton tu'rde kemeyedi. Eger serpimli emes shashi'rag'an da'ste menen kristaldag'i' bazi' bir tegislikler arasi'ndag'i' mu'yeshe Bregg mu'eshi θ g'a ten' bolsa, onda bul tegisliklerden serpimli shashi'raw ori'n aladi'. Usi' tegislik penen θ mu'yeshin jasawshi' barli'q nurlardi'n'

ji'ynag'i' mu'yeshini'n' shamasi' (ugol rastvora) $\pi/2 + \theta$ bolg'an 11-su'wrette ko'rsetilgendey eki konusti' payda etedi. Solay etip shashi'rati'wshi' tegislikler sistemasi'ni'n' ha'r qaysi'si' ushi'n nurlardi'n' eki konusi' payda boli'p, olar ekran menen kesiliskende eki giperbolani' payda etedi. θ mu'yeshi kishi bolg'anali'qtan bul giperbolalar tuwri' si'zi'qqa jaqi'n.



10-su'wret. Kikushi
si'zi'qlari'ni'n' jiyi ushi'rasatug'i'n
ko'rinisi



11-su'wret. Kikushi si'zi'qlari'ni'n' payda boli'w sxemasi'

Joqari'da atap o'tilgenindey, serpimli emes shashi'raw intensivligi shashi'raw mu'yeshinin' u'lkeyiwi menen kemeyedi. Usi'nday g'a'rezliliktin' ori'n ali'wi' mi'nag'an ali'p keledi: kristallografiyalı'q tegisliklerdin' bir sistemasi'ndag'a difrakciyada payda bolg'an Kikushi si'zi'qlari'ni'n' tu'siwhi da'stenin' bag'i'ti'na jaqi'n turatug'i'n ha'r bir jubi' ushi'n elektronogrammani'n' orayi'na sali'sti'rg'anda qashi'qlaw jaylasqan si'zi'qtin' intensivliliği sol jupti'n' ekinshi si'zi'g'i'ni'n' intensivliliginen kishi boladi'. Si'zi'qlar arasi'ndag'i' mu'yeshlik qashi'qli'q 2θ g'a ten'. Bul si'zi'qlar shashi'rati'wshi' tegislik penen ekranni'n' kesilisiw si'zi'g'i'na sali'sti'rg'anda simmetriyalı' jaylasadi'. Sonli'qtan u'lginin en'keytsek yamasa bursaq, onda Kikushi si'zi'qlari' u'lgi menen bekkem baylani'sqan si'yaqli' boli'p o'zgeredi. Bul jag'day Kikushi si'zi'qlari'ni'n' orni'n almasti'ri'w bag'i'tlari' ha'm shamasi' boyi'nsha kristaldi'n' orientaciysi'n da'l ani'qlawg'a mu'mkinshilik beredi. A'dette eksperimentator Kikushi su'wretinin' orayi' ekranni'n' orayi'nda jaylasatug'i'nday etip kristaldi' buradi'. Bul kristaldi'n' orientaciysi'n Kikushi si'zi'qlari' boyi'nsha ani'qlawdag'i' en' tiykarg'i' operaciya boli'p tabi'ladi'.

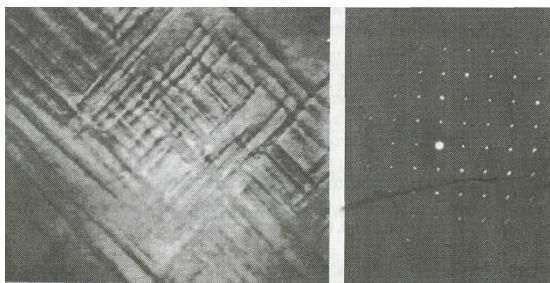
§ 8. Kontrastti'n' jetilispegen (strukturali'q defektli) kristallardag'i' o'zgeshelikleri

A'melde paydalani'li'p ju'rgen kristallar quramali' mikrostrukturag'a iye boladi'. Kristaldi'n' quri'li'si'ndag'i' defektler menen baylani'sli' kontrast difrakciyalı'q sha'rtlerdin'

lokalli'q o'zgerislerinin' saldari'nan payda boladi'. Bunday o'zgerislerge tegislikler arasi'ndag'i' qashi'qli'qlardi'n' o'zgerisleri, pa'njerenin' lokalli'q buri'li'wlari', strukturali'q amplitudani'n' o'zgerisleri, u'lginin' qali'n'li'g'i'ni'n' effektivlik qalan'li'g'i'ni'n' o'zgerisi, bo'liw shegaralari'ndag'i' fazali'q o'zgerisler (mi'sali' jaylasti'ri'w defektleri ha'm tag'i' basqalar) kireti. Kristaldag'i' sonday defektler shashi'rag'an tolqi'nni'n' amplitudasi'nda qosimsha $\alpha = 2\pi(\mathbf{H}, \mathbf{R})$ fazali'q ko'beytiwshisinin' payda boli'wi'na ali'p keledi. Bul an'latpada \mathbf{H} keri pa'njerenin' vektori', \mathbf{R} arqali' elementar qutu'dag'i' atomni'n' defekt joq bolg'andag'i' haldan awi'si'wi' belgilengen. Eger (\mathbf{H}, \mathbf{R}) ko'beymesi nolge ten' bolsa, onda quri'li's defektinin' su'wretindegi kontrast nolge ten' boladi'. Bul defettin' keri pa'njere vektori'na perpendikulyar bag'i'tta awi'si'w payda etetug'i'nli'g'i'n bildiredi (shashi'rati'wshi' tegislikke parallel). «Su'wrettin' so'niwi» dep atali'wshi' bul uli'wmali'q sha'rt kristallardi'n' quri'li'si'ni'n' defektlerin tallaw ushi'n qollani'ladi'.

4- ha'm 12-su'wretlerde kristallardag'i' jaylasti'ri'w defektleri menen dvoyniklerdin' su'wretleri berilgen.

12-su'wrette $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ kristalli'ndag'i' si'n'arlas (dvoynik) qatlamni'n' su'wreti berilgen. Qon'i'si'las si'n'arlas (rus tilinlegi «dvoynikovi'e orientaci» so'zleri «si'n'arlas orientaciylar» dep awdari'lg'an) orientaciylar tu'sken dasteni ha'r qi'yli' etip shashi'ratatug'i'n bolg'anli'qtan, olar ushi'n o'tken da'stenin' intensivlikleri ha'r qi'yli'. Sonli'qtan su'wrette ha'r qi'yli' intensivlikke iye jolaqlar payda boladi'. Kristalda si'n'arlas kristallardi'n' bar boli'wi' (dvoyniklerdin' bar boli'wi') elektronogrammada bazi' bir reflekslerdin' bir neshe reflekslerge bo'liniwin ta'miyinleydi (12-b su'wret). Elektronli'q-mikroskopiyali'q su'wret penen difrakciyali'q kartinani' birgelikte tallaw tiykari'nda kristalda si'n'arlas bo'limlerdin' bar ekenligi haqqi'nda juwmaq shi'g'ari'wg'a ha'm oni'n' parametrlerin ani'qawg'a mu'mkinshilik beredi (si'n'arlas'i'w tegisligi ha'm mu'yeshi haqqi'nda). Mi'sali' 12-b su'wrette mikrofotosu'wreti ha'm elektronogrammasi' keltirilgen kristalda si'n'arlas'i'w tegisligi o'z-ara perpendikulyar bolg'an si'n'arlardi'n' eki sistemasi' ori'n aladi': [110] ha'm [1̄10]. Si'n'arlas'i'w mu'yeshi $\varphi = 0.87^0$. Kristaldag'i' usi' ori'nnan ali'ng'an elektronogrammada refleksler to'rt daqqa ayri'ladi' (ekewi si'n'arlardi'n' bir sistemasi', qalg'an ekewi ekinshi sistemasi' ushi'n).



12-su'wret. $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ kristallari'ndag'i' dvoyniklerdin' su'wretleri:

a)-elektronli'q-mikroskopiyali'q su'wret; b) xarakterli elektronogramma. Ali'stag'i' reflekslerde daqlardi'n' bir neshe daqlarg'a bo'liniwi ayqi'n ko'rinish tur. Bul jag'day dvoyniklerdin' bar ekenliginen derek beredi.

§ 9. Dislokaciyalardi'n' Byurgers vektori'ni'n' bag'i'ti'n ani'qlaw

Dislokaciylar elektron mikroskopi'nda qaran'g'i' si'zi'q tu'rinde su'wret payda etedi. Bul karan'g'i' si'zi'q dislokaciyalı'n' haqi'ygatta iyelegen ori'nni'n' bir ta'reipnde jatadi'. Kontrasti'na karap dislokaciyalı'n' Byurgers vektori'ni'n' bag'i'ti'n ani'qlaw mu'mkin. Sebebi kontart dislokaciyanı'n' sebebinen deformaciyaq'a ushi'rag'i'n kristalli'q pa'njerenin' tegisliklerinen g'ana ali'nadi'. Birinshi jaqi'nlasi'wda dislokaciyanı'n' Byurgers vektori'na parallel bolg'an tegislikter tegis boli'p kaladi'. Sebebi barli'q awi'si'wlar usi'nday tegisliklerge parallel. Elektronli'q-mikroskopiyali'q su'wrette \mathbf{K} difrakciyali'q vektor (\mathbf{K}, \mathbf{b}) =

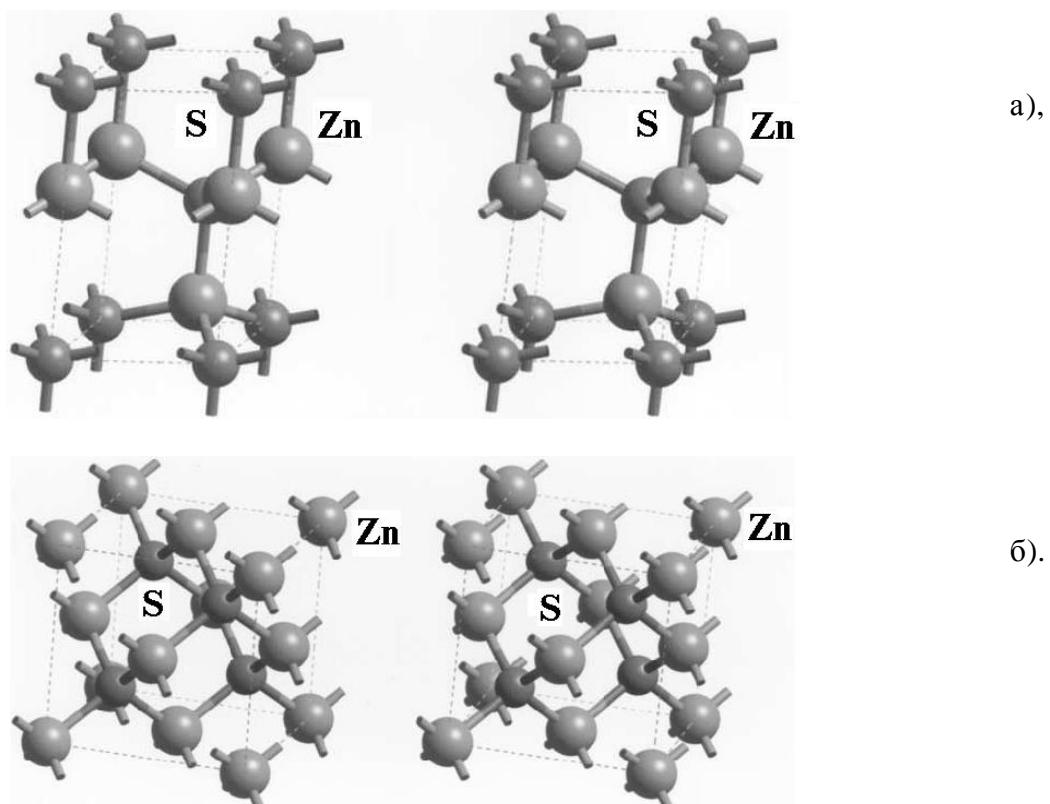
0 sha'rtin ori'nlag'anda kontarst baqlanbayli'. Solay etip Byurgers vektori'ni'n' bag'i'ti'n ani'qlaw ushi'n joqari'dag'i' sha'rtti qanaatlandi'ratug'i'n difrakciyali'q vektorlari' \mathbf{K}_1 , \mathbf{K}_2 bolg'an tegisliklerdin' eki a'wladi'n tabi'wdan ibarat boladi' eken. Bunday jag'dayda Byurgers vektori' \mathbf{b} bag'i'ti' boyi'nsha [\mathbf{K}_1 , \mathbf{K}_2] vektori'na parallel boladi'. Dislokaciylar haqqi'nda qosimsha mag'li'wmatlar bolg'an jag'dayda (mi'sali' oni'n' ji'lji'w tegisligi belgili bolsa) Byurgers vektori'ni'n' bag'i'ti'n difrakciyani'n' so'niwinin' tek bir sha'rti boyi'nsha ani'qlawg'a mu'mkin bolgan bolar edi.

Solay etip dislokaciyanı'n' Byurgers vektori'ni'n' bag'i'ti'n ani'qlaw ushi'n usi' dislokaciyanı'n' ha'r qi'yli' reflekslerdegi mikrodifrakciyali'q kartinası'n tu'siriw ha'm usi' su'wretlerdin' ishinen dislokaciyanadan ali'natug'i'n kontrast jog'alatug'i'n bir yamasa eki shag'i'li'si'wdi' tabi'w kerek eken. Buni'n' ushi'n mikroskopqa bir birine perpendikulyar eki bag'i'tlarda buri'wg'a mu'mkinshilik beretug'i'n goniometr ornati'lg'an boli'wi' lazi'm.

Elektron mikroskopi'n ayi'ri'm kristalli'q denelerdin' haqi'yqi'y quri'li'si'n izertlew ushi'n qollani'w

§ 11. ZnS ha'm ZnSe kristallari'

Ilimiy a'debiyatlarda ZnS (ku'kirtli cink, cink sulfidi) ha'm ZnSe (selenlik cink yamasa cink selenidi) kristallari'ni'n' atomli'q-kristalli'q quri'li'si', oni'n' substrukturasi' haqqi'nda mag'li'wmatlar og'ada ko'p. Olardi'n' quri'sli'si' «cink aldawshi'si» («cinkovaya obmanka») dep atali'p almaz quri'li'si'na sa'ykes keledi. ZnS tin' joqari' temperaturadag'i' geksagonalli'q modifikaciysi' vyurcittegi atomlardi'n' jaylasi'wlari' 12-a swu'rette, al o'jirie temperaturalari'ndag'i' kubli'q sfalerit modifikaciysi'ndag'i' atomlardi'n' jaylasi'wi' 12-b su'wrette berilgen.



12-su'wret. ZnS ha'm ZnSe kristallari'ni'n' quri'li'si' sxemasi'. a) joqari' teperaturali'q vyurcit, b) o'jire temperaturalasi'ndag'i' sfalerit modifikaciyalari'.

ZnS kristallari' ushi'n en' xarakterli na'rse ko'p sanli' politiplik modifikaciyalardi'n' bar ekenliginde (A'debiy sholi'wlar politiplik modifikaciyalari'ni'n' ko'pligi boyi'nsha kremniy karbidi (SiC) kristallari'ni'n' en' birinshi ori'ndi' iyeleytug'i'nli'g'i'n ko'rsetedi (Mi'sali' qaran'i'z T. L. DAULTON, T. J. BERNATOWICZ, R. S. LEWIS, S. MESSENGER, F. J. STADERMANN, S. AMARI. Geochimica et Cosmochimica Acta, Vol. 67, No. 24, pp. 4743–4767, 2003. Fayl 2003_GCA67_7). Bul boyi'nsha to'mendegilerdi bayanlaymi'z.

Eki qatlamlili' vyurcittin' quri'li'si'ndag'i' atomlar qatlamlari'ni'n' birden-bir [0001] bag'i'ti'ndag'i' izbe-izligi ushi'n bi'lay jaza alami'z: A α B β A α B β A α B β ... Bul izbe-izlikte A qatlami' Zn atomlari'na sa'ykes kelse, α qatlami' S atomlari' qatlami'na sa'ykes keledi. Biz bunnan bi'lay A α B β A α B β A α B β ... izbe-izliklerin a'piwayi'li'q ushi'n AVAVAV.. tu'rinde jazami'z ha'm bul jag'dayda almaz quri'li'si' ushi'n jazi'lg'an ha'r bir ha'ripke eki qatlamnan sa'ykes keletug'i'nli'g'i'n an'g'arami'z (usi' ayti'lg'an so'zler ZnSe kristallari' ushi'n da duri's). Al kubli'q sfalerit modifikaciysi' ushi'n ABCABCABC... izbe izligi ori'n aladi'. Ko'p sanli' politiplik modifikaciylar geksagonalli'q vyurcit modifikaciysi' menen kubli'q sfaleritlik modifikaciyan'i' arasi'ndag'i' arali'qli'q fazalar boli'p esaplanadi'. Olardi'n' en' ko'p tarqalg'anlari' to'mendegiler:

Modifikaciya	Atomlar qatlamlari'ni'n' izbe-izligi
2H (geksagonalli'q)	AB AB AB AB ...
4H (geksagonalli'q)	ABAC ABAC ABAC ...
6H (geksagonalli'q)	ABCACB ABCACB ABCACB ...
3R (kubli'q)	ABC ABC ABC ...

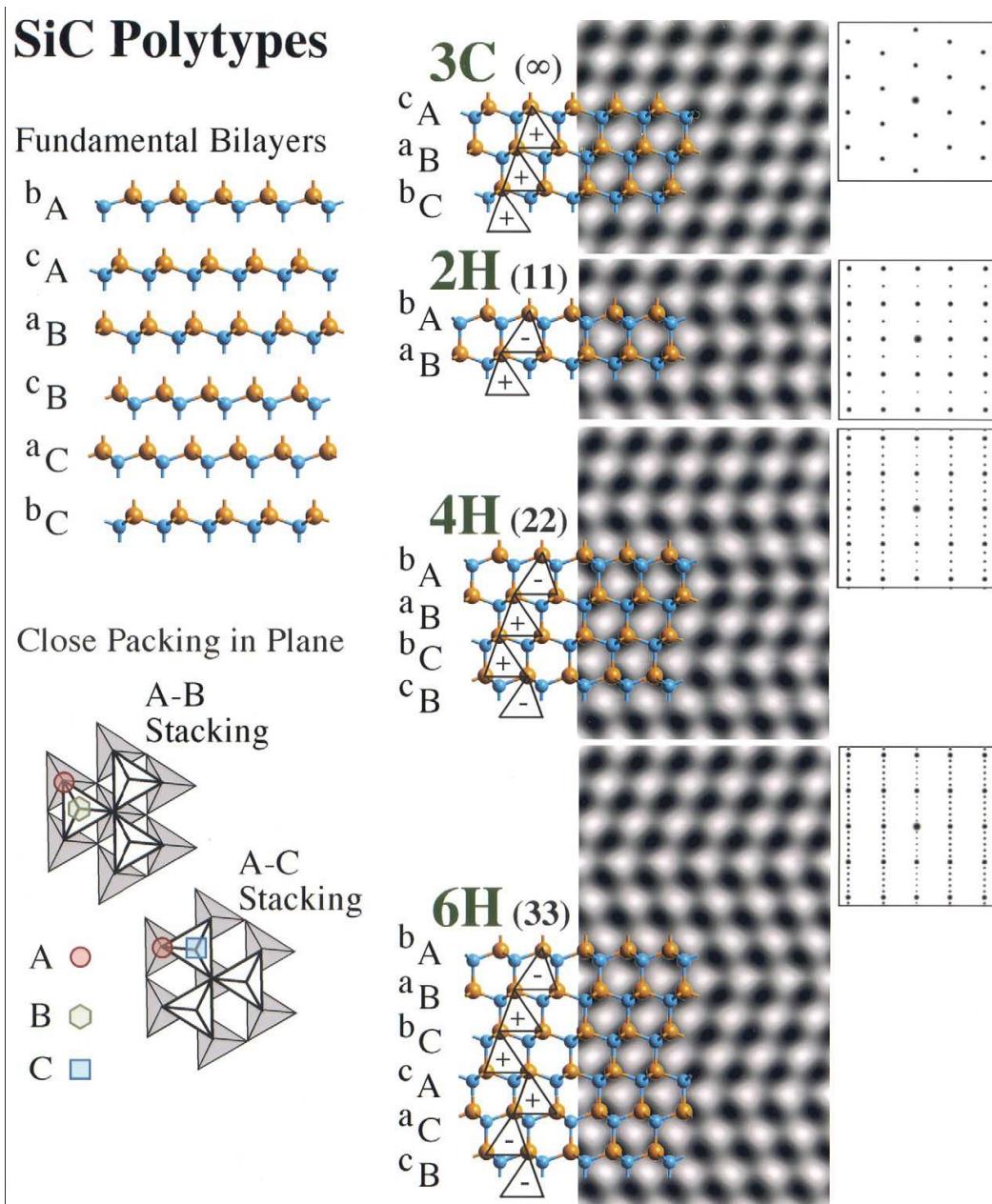
A'lvette ha'r bir politiplik modifikaciya ushi'n o'zine ta'n elektronli'q mikroskopiyali'q su'wret ali'nadi'. Bul boyi'nsha SiC (kremniy karbidi) kristallari' ju'da' jaqsi' izertlengen ha'm 13-su'wrette usi'nday politiplerden ali'ng'an elektronli'q mikroskopiyali'q su'wretler ha'm elektronogrammalar keltirilgen.

Biz ZnS ha'm ZnSe kristallari'ni'n' joqari' ha'm to'mengi temperaturalardag'i' geksagonalli'q ha'm kubli'q modifikaciyalari' arasi'ndag'i' tiykarg'i' baylani'sti' atap o'tiwigiz kerek. Bul baylani's kubli'q ZnS penen ZnSe kristallari'ni'n' substrukturasi'ni'n' qa'liplesiwinde tiykarg'i' ori'ndi' iyeleydi.

Geksagonalli'q fazani'n' kubli'q fazag'a aylani'si' temperaturani'n' tomenlewi menen boladi' (ZnS ushi'n vyurcit modifikaciysi' 1100 $^{\circ}$ S dan joqari' temperaturalarda turaqli' tu'rde jasaydi') [ZnS kristallari'ni'n' eriw temperaturasi' 1900 $^{\circ}$ S, qaynaw temperaturasi' 2185 $^{\circ}$ S]. YAg'ni'y fazali'q o'tiw skalyar ta'sirdin' (salqi'nlati'wdi'n') na'tiyjesinde ju'zege keledi. Skalyar tasirdin' simmetriyasi' ti'ni'shli'qta turg'an sferani'n' simmetriyasi'n sa'ykes keledi. Sonli'qtan kristallofizikali'q Kyuri principi boyi'nsha geksagonalli'q simmetriyani'n' o'zgermewi kerek.

Al termodinamikali'q ko'z-qaraslar boyi'nsha o'jire temperaturalari'nda ZnS ha'm ZnSe kristallari'ni'n' kubli'q modifikaciysi' turaqli'. Olay bolsa biz o'jire temperaturalari'nda qalayi'nsha kubli'q simmetriyani'n' saqlani'wi'ni'n' mu'mkinshiligin tabi'wi'mi'z kerek. Haqi'yqati'nda da geksagonalli'q AB AB AB ... izbe-izliginin' kooperativ tu'rde ABC ABC ABC... yamasa ASV ASV ASV ... izbe-izliklerine aylani'wi'n a'piwayi' etip ko'rsetiw qi'yi'n emes. Bunday jag'dayda AB AB AB ... izbe-izliginin' atomli'q qatlamlardi'n' bir birine sali'sti'rg'andag'i' ji'li'si'wlari'ni'n' bari'si'nda ABC ABC ABC... yamasa ASV ASV ASV ... izbe-izliklerinin' payda bolatug'i'nli'g'i' a'debiyatta ko'rgizbeli tu'rde ken'nen sa'wlelendirilgen [Mi'sali' Hindistan fizikleri Verma ha'm Krishnani'n' jumi'slari'nda, Verma A. R. and Krishna P. (1966) Silicon carbide and other polytypic substances. In Polymorphism and Polytypism in Crystals, pp. 92–135. John Wiley & Sons, New York]. Solay etip biz vyurcitten ABC ABC ABC... yamasa ASV ASV ASV ... izbe-izliklerindegi sfalerittin' payda bolatug'i'nli'g'i'n ha'm

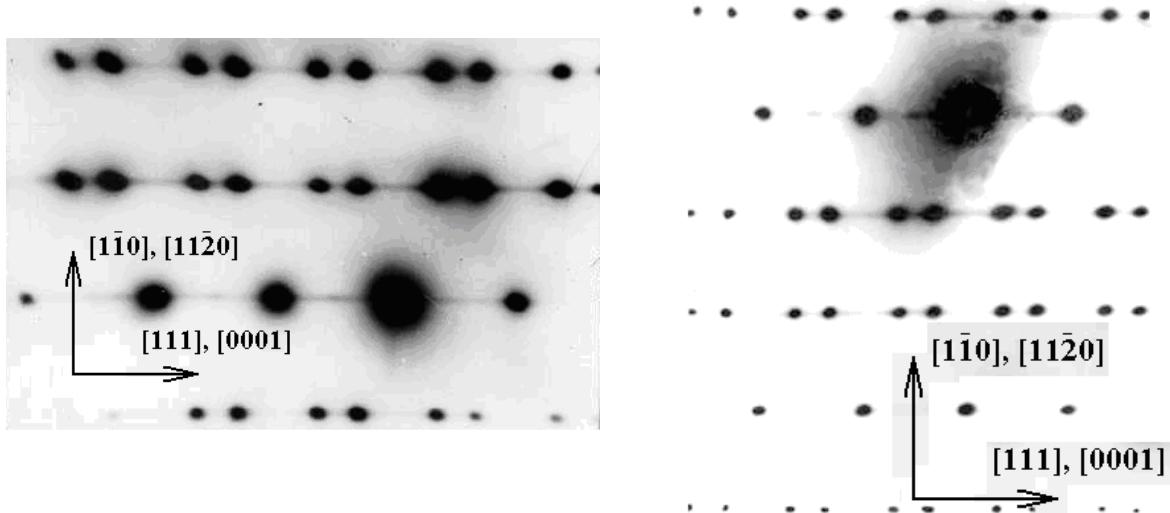
fazali'q aylani'sti'n' aqi'betinde ABC ABC ABC... ASV ASV ASV ... izbe izligindegi polisintetikali'q dvoyniktin' payda bolatug'i'nli'g'i'n (polidomenlik strukturag'a iye kristall) an'sat tabami'z. Al bul quri'li'stag'i' kristallar o'z gezeginde geksagonalli'q simmetriyani' saqlaydi'. Soni'n' menen birge eki-izbe-izlik arasi'ndag'i' shegara ... ABC ACB... jaylasti'ri'w defekti boli'p tabi'ladi'. A'dettegi polisintetikali'q ZnS tegi jaylasti'ri'w defektleri arasi'ndag'i' ortasha qashi'qli'qtin' 30 Å ekenligi ani'qlandi'.



13-su'wret SiC kristallari'ni'n' jiyi ushi'rasatug'i'n politipleri ha'm olardan ali'natug'i'n elektronli'q-mikroskopiyali'q su'wretler.

Solay etip ZnS ha'm ZnSe kristallari'nan ali'natug'i'n difrakciyali'q su'wretler geksagonalli'q simmetriyag'a iye boladi' dep boljaw kerek. Bul jag'day elektronli'q-mikroskopiyali'q su'wretler tusirilgende haqi'yqattan da da'lillendi. Ali'ng'an elektronogrammalardi'n' su'wretleri 14-su'wrette keltirilgen. Bul elektronogrammalardag'i' en' birinshi ko'zge taslanatug'i'n jag'day reflekslerdin' bir bag'i'tta sozi'li'wi' boli'p tabi'ladi'. Bul sfalerittin' ABCABCABC... yamasa ACBACBACB... qatlamlari'ni'n' qali'nli'g'i'ni'n' turaqlı' emes, al bazi' bir shamalar arasi'ndag'i' variaciysi'ni'n' ori'n alatug'i'nli'g'i'ni'nn' da'lili

boli'p tabi'ladi'. A'lvette qatlamni'n' en' kishi ma'nisi AB qatlami'ni'n' qali'n'li'g'i' – vyurcit elementar quti'si'ni'n' biyikligine (*s* turaqli'si'na) ten' ekenligin boljaw mu'mkin. Al en' qali'n' qatlamni'n' qali'n'li'g'i' (ortasha qali'n'li'q 30 Å bolg'anda) 50-70 Å di qurawi' sha'rt.



14-su'wret. ZnS kristalli'nan ali'ng'an elektronogrammalar. UEMV-100k elektron mikroskopi'. Tezletiwshi kernew 50 kv. U'sh sannan turatug'i'n indeksler kubli'q modifikasiyag'a, al to'rt sannan turatug'i'n indeksler geksagonalli'q modifikasiyag'a tiyisli.

Solay etip biz elektronogrammada polisintetikali'q (polidomenlik) ZnS kristalli'na tiyisli mi'naday o'zgesheliklerge iye bolami'z:

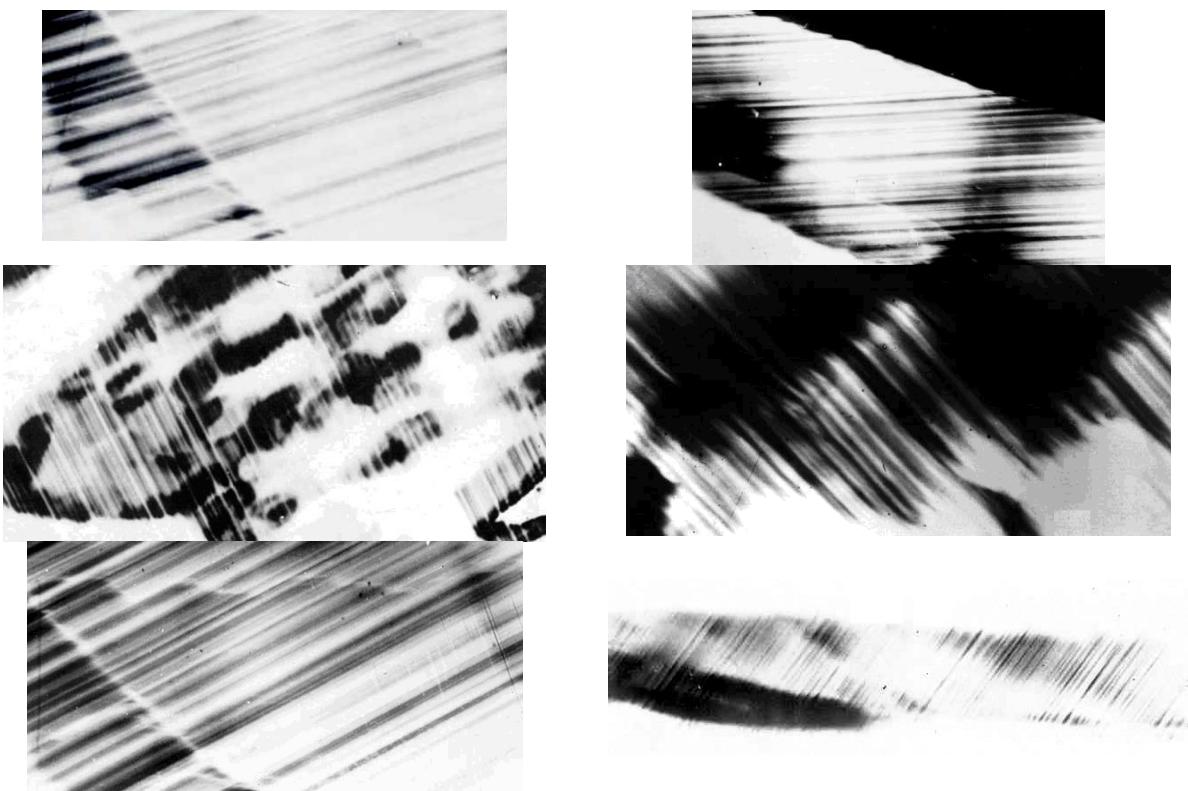
Birinshiden, reflekslerdin' jaylasi'wi'nda geksagonalli'q modifikasiyani'n' (0001) tegislidine, al kubli'q modifikasiyani'n' (111) tegislidine sali'sti'rg'anda aynali'q simmetriya ori'n aladi'. Biz kristallografiyadan kubli'q kristalda (111) tegisliginin' simmetriya tegisligi emes ekenligin bilemiz. Demek usi'nday simmetriyani'n' bar ekenligi kristaldi'n' polidomenlik quri'li'sqa iye ekenliginen derek beredi. Soni'n' ushi'n (111) tegislidine qarata simmetriya jormal simmetriya boli'p tabi'ladi'. Soni'n' menen birge indeksleri $h + k + l = 3N + 1$ bolg'an tu'yinler kubli'q pa'njererin' [111] bag'i'ti'nda (geksagonalli'q pa'njererin' [0001] bag'i'ti', soni'n' menen birge keri pa'njererin' $\mathbf{H}_{(111)}$ vektori' bag'i'ti'nda (biz keri pa'njererin' vektori' ushi'n joqari'da keltirilgendey $\mathbf{H}_{(hkl)}$ jazi'li'wi'nan paydalani'p, rentgenstrukturali'q tallawda ko'p qollani'latug'i'n $\mathbf{g}_{(hkl)}$ belgileniwin qollanbaymi'z) sozi'lg'an. Bul sfalerit qatlamlari'ni'n' qali'n'li'g'i'ni'n' haqi'ykat'inda da statistikali'q tarqalg'ani'nan derek beredi. Usi'ni'n' menen bir qatarda $h + k + l = 3N$ sha'rtin qanaatlandi'ratug'i'n tu'yinlerdin' formasi'ni'n' derlik do'n'gelek ekenligi ayqi'n ko'rinedi. Bunday tu'yinler jaylasti'ri'w defektleri arqali' hesh bir mayi'si'ws'i'z o'tetug'i'n kristallografiyali'q tegisliliklerge tiyisli boladi'.

Ekinshiden elektronogrammani' o'lshewlerden kubli'q modifikasiyani'n' turaqli'si'ni'n' ZnS tin' kubli'q modifikasiyasi'ni'n' kristalli'q pa'njeresinin' turaqli'si'na ten' ekenligi kelip shi'g'adi' ($a = 5,4107 \text{ \AA}$). Bul jag'day kristaldi'n' polidomenlik ekenligin, geksagonalli'q simmetriyasi'ni'n' jormal simmetriya ekenligin ja'ne bir ret da'lleydi.

Endi elektronogrammalardi' o'lshew joli' menen ali'ng'an ZnS kristallari'ni'n' pa'njerelerinin' turaqli'lari'n beremiz:

	Modifikaciyalardi'n' belgileniwi		Simmetriyasi ni'n' ken'isliklik topari'	Elementar quti' turaqli'lari'	
	klassikali'q			a	S
1	AV AV AV ...	2N	P6 ₃ mc	3.819	6.246
2	AVS AVS ...	3S	F4mc	3.827	9.369

Joqari'da ayt'i lg'ani'nday ZnS tin' domenlerinin' ortasha qali'n'li'g'i' shama menen 30 Å. Sonli'qtan oni' ko'riw (vizuaciyalaw) ma'selesi qoyi'li'p, o'tkerilgen elektronli'q difrakciyali'q eksperimenlerde ali'ng'an su'wretler 15-su'wrette keltirilgen.



15-su'wret. ZnS kristallari'nan ali'ng'an jaqtı' maydandag'i' elektronli'q-mikroskopiyali'q su'wretler.

ZnSe kristallari'ndag'i' betleri [111] ([0001] bag'i'ti') bag'i'ti'na perpendikulyar sfalerit domenlerinin' qali'n'li'g'i'ni'n' ZnS tin' domenlerinin' qali'n'li'g'i'na sali'sti'rg'anda a'dewir u'lken, makroskopiyali'q o'lshemlerde ekenligi belgili (Qaran'i'z Abdikamalov B.A., Ametov K.K., Ismailova K.X. Elektronografisheskoe izushenie strukturni'x prevrasheniy pri plastisheskoy deformacii v ZnS. Statya. Vestnik Karakalpakskogo filiala AN UzSSR. № 3. S. 15-19). Sonli'qtan ZnSe kristallari'nan ali'ng'an sa'ykes elektronogrammalarda reflekslerdin' [111] ([0001] bag'i'ti') bag'i'ti'ndag'i' sozi'li'wi' baqlanbaydi', al sol domenlerdin' o'zlerinin' su'wretleri ani'q ko'rinedi. Sonli'qtan bunday kristallardi' (ZnSe si'yaqli') izertlewde elektronli'q mikroskopiya emes, al rentgenografiya ko'birek na'tiyjelerdi beredi.

Solay etip o'tkerilgen elektronli'q-mikrokopiyali'q izertlewler ZnS ha'm ZnSe kristallari'ni'n' atomli'q-kristalli'q strukturasi'n ha'm sub strukturasi'n ani'qlawg'a mu'mkinshilik berdi ha'm sol ali'ng'an difrakciyali'q mag'lawmatlar boyi'nsha to'mendegidey qi'sqasha juwmaqlardi' shi'g'ari'wg'a boladi':

O'jire temperaturalari'nda ZnS ha'm ZnSe kubli'q strukturag'a iye boli'p kristallar toli'g'i' menen polisintetikali'q substrukturag'a iye boladi'. Sfaleritlik faza juqa, betleri o'z-ara

parallel bolg'an domenlerge iye boli'p, bul juqa domenler joqari' temperaturali' geksagonalli'q fazadag'i' kristaldi'n' (0001) tegisligine parallel. ZnS kristallardag'i' domenlerdin' qali'n'li'g'i' ju'da' kishi bolg'anli'qtan (ortasha qali'n'li'q 30 Å) olardi' vizualizaciyalaw tek elektronli'q mikroskopiyali'q usi'llar menen g'ana a'melge asi'ri'ladi'.

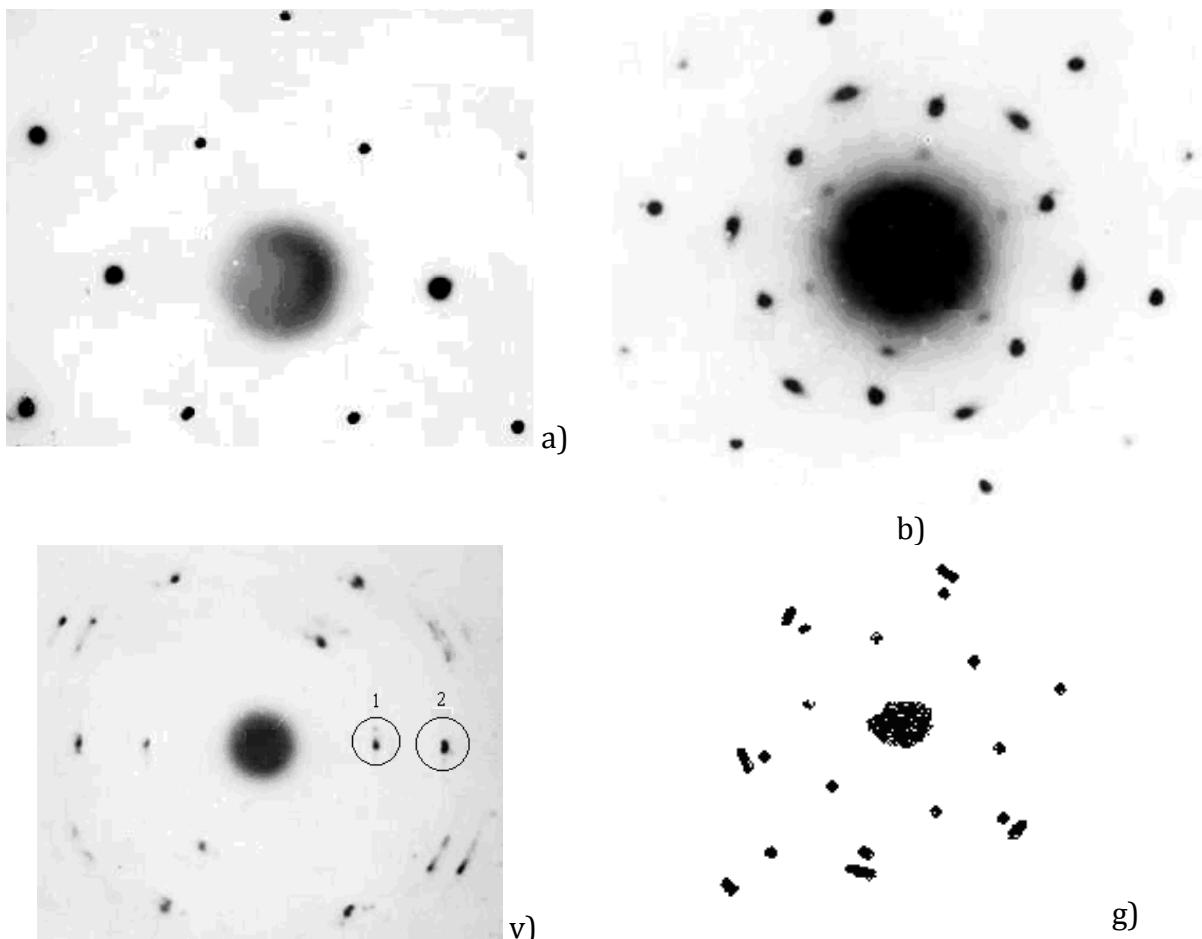
§ 12. Tiykari' grafit bolg'an qatlamlı'q kristalli'q materiallardı' izertlew

Grafittin' ha'm tiykari' grafit bolg'an materiallardı'n' atomli'q-kristalli'q strukturasi' jaqsi' izertlengen boli'p, og'an ko'p sanli' ilimiyl a'debiyat bag'i'shlang'an. Biraq usi' jag'dayg'i' qaramastan, a'sirese son'g'i' waqi'tlari' bekkemligi jag'i'nan joqari', al salmag'i' boyi'nsha kishi grafit penen oni'n' ha'r qi'yli' ximiyali'q zatlar menen bolg'an birikpelerinin' turmi'sta ken'nen qollana baslag'anli'g'i'na baylani'sli' tiykari' grafit bolgan kristalli'q materiallardı'n' atomli'q ha'm substrukturali'q quri'li'slari'n izertlew a'hmiyetli ori'nlardı' iyeleydi.

Grafittin' metallardı'n' xloridleri menen bolg'an qatlamlı'q birikpeleri a'dette kishi ha'm juqa japi'raqshaldan ibarat boli'p [diametri 1 mm den kishi, japi'raqsha beti geksegonalli'q pa'njererin' (0001) tegisligine parallel], usi'ni'n' saldarı'nan olardi'n' ko'pshiliği elektronli'q-mikroskopiyali'q izertlew ushi'n aldi'n-ala juqa u'lgiler tayarlaw procedurasi'n ju'rgiziwdi talap etpeydi.

Biz grafittin' metallardı'n' xloridleri menen bolg'an qatlamlı'q birikpelerinin' elektronli'q-mikroskosiyalı'q izertlew na'tiyjelerin ko'remiz. 16-su'wretlerde ali'ng'an elektronogrammalar keltirilgen. Bul difrakciyalı'q su'wretlerde grafittin' keri pa'njeresinin' tu'yinlerine ha'm ayri'li'p shi'g'i'w fazalari'na sa'ykes keliwshi refleksler payda boladi' («Ayri'li'p shi'g'i'w fazasi» so'zleri «faza vi'deleniya» so'zine sa'ykes keledi). Ol reflekslerdin' belgili bir kristallografiyalı'q bag'i'tlar boyi'nsha jaylasatug'i'nli'g'i' ha'm sog'an sa'ykes grafittin' pa'njeresi menen ayri'li'p shi'g'i'w fazalari'ni'n' arasi'nda kristallografiyalı'q qatnasti'n' bar ekenligi ayki'n ko'rinedi. Biraq bul jag'day grafittin' CuCl₂ menen bolg'an birikpesinde ju'zege kelmeydi. Ali'ng'an elektronogrammalarla noqatli'q refdeksler Debay saqlynalari'ni'n' boyi'nsha jaylasqan. Demek bul kristalli'q materialarda ayi'ri'li'p shi'g'i'w fazasi' blokli'q (kristallar blokları') quri'li'sqa iye boladi'.

Ayri'li'w fazasi' kristallari'ni'n' elementar quти'lari'ni'n' turaqli'lari'n tabi'w ushi'n etalan si'pati'nda grafit qollani'ldi'. Esaplawlar MeSl₂ formulasi' menen ani'qlanatug'i'n (Me = Cu, Co, Mn ha'm Ni) fazalardi'n' noqatli'q maksimumlari'ni'n' kristall tu'rindegi MeSl₂ ge teyisli ekenligi belgili boldi'. Soni'n' menen birge grafittin' FeCl₃ menen bolg'an qatlamlı'q birikpesinde pu'tkilley basqa na'tiyjeler ali'ndi'. Bul jag'dayda ali'ng'an $a = 5,6 \text{ \AA}$ shaması' FeCl₂ birikpesinin' kristalli'q pa'njere turaqli'si'na jaqi'n. Grafittin' FeCl₃ menen birikpesinde grafit ha'm FeCl₃ birikpelerinin' kristalli'q pa'njereleri o'z-ara parallel, al grafit ha'm MeSl₂ (Me=Co, Mn ha'm Ni) jag'dayi'nda sol pa'njereler [0001] ko'sheri do'gereginde 30° qa buri'lg'an .



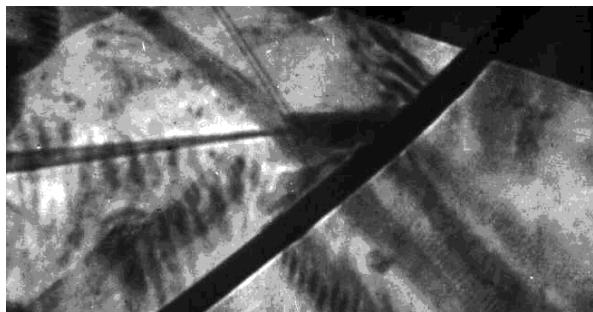
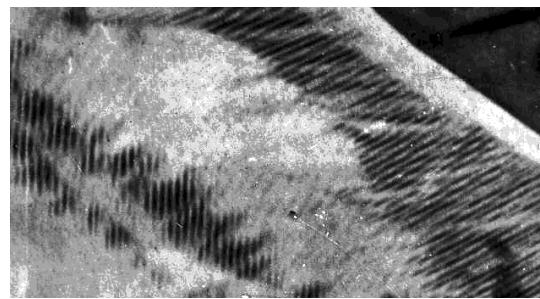
16-su'wret. Tiykari' grafit bolg'an materiallardan ali'ng'an elektronogrammalar.

a) taza grafit, b) grafit + FeCl_3 , v) grafit + CuCl_2 , g) grafit + MnCl_2 .

v) dag'i' a'zzi Debay saqi'ynasi'n su'wrette di'qqat penen qarag'anda an'g'ari'w mu'mkin.

Joqari'da keltirilgen xloridlerdin' ku'shli gigroskopiyali'q qa'siyetlerge iye boli'wi'na qaramastan ayri'li'w fazalari' olardi' atmosferada bir neshe ay dawami'nda saqlag'anda da o'zlerinin' kristalli'q hali'n saqladi'. Bunnan ayri'li'w fazalari'ni'n' xawa menen kontaktqa iye emes ekenligin, al grafit matrica ishindegi ishki san'laqlar yamasa bosli'qlarda jaylasatug'i'nli'g'i'n ko'rsetedi.

Ha'r qanday kristalli'q fazalardi'n' pa'njereleri arasi'nda duri's kristallografiyali'q katnaslar tomendige eki jag'dayda ori'n aladi': eger eki faza birgelikte o'setug'i'n bolsa ha'm qatti' eritpelerdin' qurawshi'lari' qatlamlarg'a ayri'latug'i'n bolsa. Biraq biz alg'an eksperimentalli'q na'tiyjelerde qatlamlı'q birikpelerdegi qurawshi'lardi'n' qatlamlarg'a ayri'li'wi' ori'n almaytug'i'nli'g'i' ko'rinedi. Sonli'qtan jan'a fazani'n' kristallitlerinin' osiwi xaqqi'nda ga'p ete alami'z. Biraq usi'nday jag'daydi'n' ori'n ali'yai' ushi'n eki zatti'n' kristallitlerinin' kristalli'q pa'njeresi turaqli'lari' u'lken shamag'a ayri'li'wi' mu'mkin emes (15 procentten arti'q emes shamag'a). Bul jag'daydi'n' biz qarap ati'rg'an birikpeler ushi'n ori'nlanbaytug'i'nli'g'i' ta'biyyiy ha'm biz eksperimentte alg'an na'tiyjelerdi tu'sindiriw ushi'n ilimiyl a'debiyatta keltirilgen mag'li'wmatlar tiykari'nda ayi'ri'li'p shi'g'i'w fazalari'ni'n' si'rtqi' qatlamlari' menen ulgerodti'n' qatlamlı'q birikpeleri arasi'nda taza uglerod qatlami' arqali' baylani'sadi' dep boljaymi'z.



17-su'wret. Tiykari' grafit bolg'an materiallardan ali'ng'an elektronli'q-mikroskopiyali'q su'wretler.

Solay etip grafittin' qatlamli'q birikpeleri u'lgilerinde tabi'lg'an jetilisken quri'li'sqa ha'm eki bag'i't boyi'nsha a'dewir u'lken o'lshemlerge iye ayri'li'w fazalari' sintez processinde payda bolg'an dep boljaymi'z. Soni'n' menen birge onday fazalar qi'zdi'rg'anda yamasa ko'p waqi't u'lgilerdi xawada saqlag'anda (eki-u'sh ay) payda boladi' eken. Bul fazalardi'n' kristalli'q pa'njereleri grafit tegisligine sali'sti'rg'anda [0001] bag'i'ti' a'tirapi'nda 0 ha'm 30° qa buri'lg'an.

§ 13. Qorg'asi'n ortovanadati' kristallari'n izertlew

Menshikli emes segnetoelastik qorg'asi'n ortovanadati' $Pb_3(VO_4)_2$ shama menen $100^{\circ}S$ ni'n' a'tirapi'nda I a'wlad fazali'q o'tiwine ushi'raydi' ha'm oni'n' simmetriyasi' romboedrlik R3m nen monoklinlik P2₁/c ge shekem to'menleydi. Usi'ni'n' na'tiyjesinde quramali' polidomenlik struktura payda boli'p, bul struktura polyarizaciyalı'q mikroskopta an'sat baqlanadi'. $Pb_3(VO_4)_2$ kristallari'ndag'i' domenlerdin' quri'li'si' rentgenografiyalı'q usi'llar menen izertlendi ha'm bul kristallarda strukturali'q este saqlaw effekti baqlandi' (Qaran'i'z: B.A.Abdikamalov. Memory Effect in Lead Orthovanadate Crystals (Effekt pamyati v kristallax ortovanadata svinca). Uzbekskiy fizisheskiy jurnal. 2000. Vol. 2 (№ 5-6), S. 469-470). Biraq qorg'asi'n ortovanadati'ndag'i' domenler quri'li'si'ni'n' quramali'li'g'i' qosi'msha elektronografiyalı'q ha'm elektronli'q-mikroskopiyali'q izertlewlerdi ju'rgiziwdi talap etti.

$Pb_3(VO_4)_2$ kristallari'ni'n' kristallografiyalı'q mag'li'wmatlari' mi'na kestede berilgen:

Fazani'n' belgisi ha'm temperatura, K.	Simmetri-yani'n' ken'islik-tegi topari'	Kristalli'q pa'njere turaqli'lari', Å.
g- faza. $T > 373$	R3m	$a_g = 5.76$, $s_g = 20.368$.
b- faza. $273 < T < 373$	P2 ₁ /n	$a = 7.515$, $b = 6.1062$, $c = 9/2831$, $b = 111.86^{\circ}$ pri 300° .

a - faza. T<273	P2 ₁	a = 15.042, b = 6.106, c = 18.596 b = 111.88° pri 230 K.
--------------------	-----------------	---

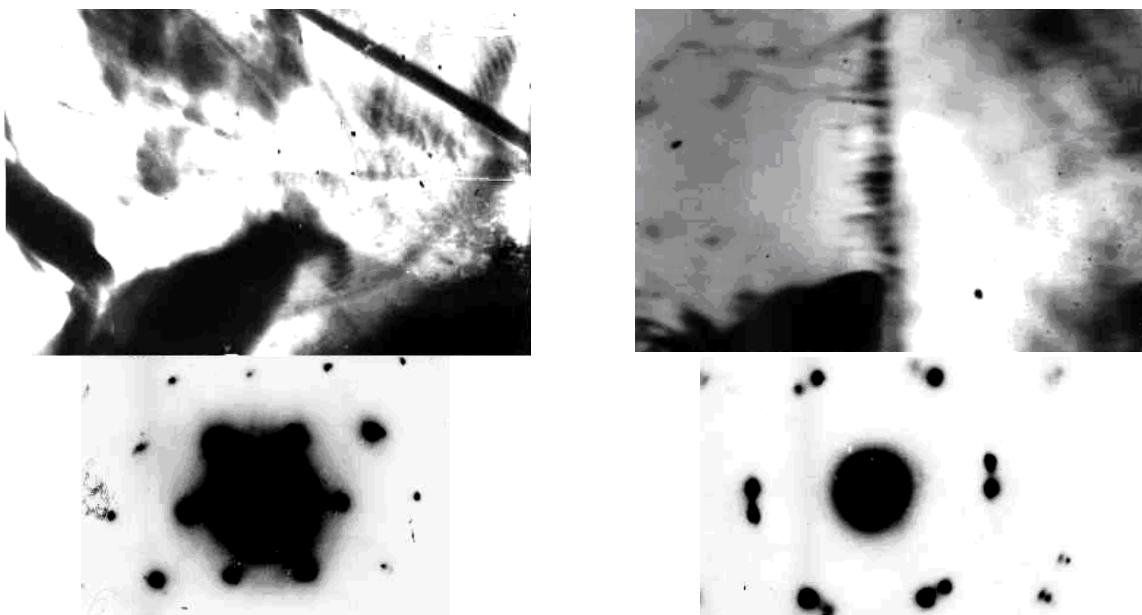
Korg'asi'n ortovanadati' kristallari'ni'n' monoklinlik β -fazasi'ni'n' elektronogrammalari' 18-su'wrette keltirilgen. Bul su'wretlerde romboedrlik pa'njerenin' monoklinlik pa'njerege o'tiwinin' birden eki mexanizm menen ju'zege keletugi'nli'g'i' ko'rincip tur. Fazali'q o'tiwler eki tegislikte si'n'arasi'w joli' menen tomendegidey sxemalarda ju'redi:

1. {11 $\bar{2}$ 0} tipindegi tegisliklerde si'n'arasi'w, ji'lji'w tegisligi (00.1), ji'lji'w bag'i'ti' <11 $\bar{2}$ 0>;

2. {11 $\bar{2}$ 0} tegisligindegi si'n'arasi'w, ji'lji'w tegisligi (00.1), ji'lji'w bag'i'ti' <11 $\bar{2}$ 0> (indekslerdin' barli'g'i' da joqari' temperaturali' fazani'n' geksagonalli'q quri'li'si'na tiyisli).

Monoklinlik pa'njerenin' [0k0] ha'm [h 0 2h] bag'i'tlari'ndag'i' difrakciyalı'q maksimumlari' o'zlerine ta'n ayri'qshali'qqa iye. Ha'r bir ekinshi maksimumnan keyin daqtı'n' intensivligi ku'shli tu'rde kemeyedi. Bul qubi'li'sti' qos difrakciya qubi'li'si' menen baylani'sti'rami'z. Usi'n'i'n' saldarı'nan qadag'an etilgen refleksler payda boladi' (Rentenografiyalı'q terbeliw rentgenogrammalari'nda bul refleksler elektronogrammalardag'i' si'yaqli' intensivlikleri ku'shli ayri'lmaytug'i'nli'g'i' atap o'temiz).

Su'wretlerdi ko'rincip turg'ani'nday si'n'arasi'wdi'n' eki mexanizminin' bir waqi'tta islewinin' na'tiyesinde formalari' ha'r qi'yli' bolg'an reflekslerdin' ali'natug'i'nli'g'i' ko'rinedi. Mi'sali' {11 $\bar{2}$ 0} tegisliklerindegi si'n'arasi'wlarda payda bolg'an quri'li'sqa juwap beriwshi refleksler [11 $\bar{2}$ 0] bag'i'ti'na parallel bag'i'tlarda sozi'lg'an ha'm olardi'n' qurawshi'lari' bir biri menen a'zzi jolaqlar menen tutasqan. Bunday jolaqlar yamasa sozi'li'wlar {11 $\bar{2}$ 0} tegisligindegi si'n'arasi'wlarda payda bolmaydi'.



18-su'wret. Qorg'asi'n ortovanadati' kristallari'nan ali'ng'an elektron-mikroskopiyali'q su'wretler ha'm elektronogrammalar.

Solay etip qorg'asi'n ortovanadati' kristallari'nda 80-140°S temperaturalar intervali'nda atomli'q-kristalli'q quri'li'sti'n' a'dewir u'lken o'zgerisleri ori'n aladi'. Bul ozgerisler bir waqi'tta birden eki tegislikte si'n'arasi'w arqali' ju'zege keledi. Bir waqi'tta eki tegislikte si'n'arasi'w og'ada kuramali' polidomenlik quri'li'sti'n' payda boli'wi'na ali'p kelip, bul

ayri'qsha jag'daydi' ele de toli'g'i'raq izertlew u'lken ilimiyl ha'm texnikali'q a'hmiyetke iye boladi'.

A'debiyatlar dizimi

1. R.Djeyms. Optisheskie principi' difrakcii rentgenovskix lushey. Perevod s anglayskogo G.A.Goldera i M.P.SHaskolskoy. Pod redakciei V.I.Iveronovoy. Izdatelestvo Inostrannoy literaturi'. Moskva. 1950. 572 s.
2. A.I.Kitaygorodskiy. Rentgenostrukturni'y analiz. Gosudarstvennoe izdatelestvo texniko-teoretisheskoy literaturi'. Moskva, Leningrad. 1950. 650 s.
3. V.I.Iveronova, G.P.Revkevish. Teoriya rasseyaniya rentgenovskix lushey. Izdatelestvo Moskovskogo universiteta. Moskva. 1972. 246 s.
4. Z.G.Pinsker. Rentgenovskaya kristallooptika. Izdatelestvo «Nauka». Moskva. 1982. 392 s.
5. Rentgendifrakcionni'e i elektronno-mikroskopisheskie metodi' analiza atomno-kristallisheskoy strukturi' materialov. Metodisheskoe posobie. Pod redakciei SHeftmana V.SH. i Suvorova E.V.. Institut fiziki tverdogo tela RAN. SHernogolovka 2000. 138 s.
6. P.Xirsh, A.Xovi, R.Nikelson, D.Peshli, M.Uelan. Elektronnaya mikroskopiya tonkix kristallov. Izdatelestvo «Mir». Moskva. 1968. 574 s.
7. Fizisheskaya enciklopediya. Tom 1. Moskva. «Sovetskaya enciklopediya». 1988. 704 s.
8. L.D.Landau, E.M.Lifshic. Teoretisheskaya fiziki. Tom II. Teoriya polya. 8-izdanie. Izdatelestvo «Nauka». Moskva. 2001. 534 s.
9. Fundamentalni'e fizisheskie postoyanni'e (1998). Uspexi fizisheskix nauk. Tom 173. № 3. 2003.339-344.
10. M.A.Krivoglaz. Difrakciya rentgenovskix lushey i neytronov v neidealni'x kristallax. Izdatelestvo «Naukova dumka». Kiev. 1983. 408 s.
11. A.Gine. Rentgenografiya kristallov. Gosudarstvennoe izdatelestvo fiziko-matematisheskoy literaturi'. Moskva. 1961. 604 s.