

O'ZBEKISTON RESPUBLIKASI OLIY VA O'RTA MAXSUS TA'LIM
VAZIRLIGI

ALISHER NAVOIY NOMIDAGI SAMARQAND DAVLAT UNIVERSITETI
FIZIKA FAKULTETI

QATTIQ JISMLAR FIZIKASI KAFEDRASI

5440100-“FIZIKA” YO'NALISHI BO'YICHA BAKALAVR
AKADEMIK DARAJASINI OLIH UCHUN

BITIRUV MALAKAVIY ISHI

MAVZU: Kristallar simmrtriyasini uslubiyati”o’rganish

Himoyaga tavsiya etildi
bo’lim talabasi Xudoyberdiyeva
Gulshoda
Kafedramudiri

Bajardi: 4 - kurs kunduzgi

_____dots. Axrorov S.Q.
“ ____ ” _____2012 y.

Ilmiy rahbar:
_____dots. S.N. Sirajev

S A M A R Q A N D - 2012

MUNDARIJA

Kirish.....	3
I-BOB. KRISTALLAR SIMMETRIYASI ELEMENTLARI.....	4
1.1 Oddiy simmetriya elementlari.....	4
1.2 Murakkab simmetriya elementlari.....	8
1.3 Simmetriya sinflarini belgilash.....	15
II-BOB. KRISTALLOGRAFIYA ASOSLARIGA OID MASALALAR..	22.
2.1. Kristallografiyaga asoslariga oid masalalar va ularning yechimlari...	22
Xulosa.....	56
Adabiyotlar ro'yxati.....	57

KIRISH

Biz xilma-xil, lekin go'zal tabiat qo'ynida yashaymiz. Tabiatning go'zalligi uning simmetrikligi bilan aniqlanadi. Tabiatdagi moddalarning aksariyati bir-birini takrorlovchi va bir-biriga nisbatan ma'lum qonuniyat asosida joylashgan qismlardan iborat bo'ladi. Buni o'simliklar dunyosida ham (daraxt shoxi va bargi, turli xil gullar va boshqalar), hayvonot dunyosida ham (kapalaklar, hayvonlar va boshqalar), minerallar dunyosida ham ko'rish mumkin. Bularning hammasi ikki yoki undan ko'p bir-birini takrorlovchi teng qismlardan iborat bo'ladi. Masalan, kapalaklar, ikkita qanotlaridagi dog'largacha bir xil bo'lgan ikki teng qismdan iborat. Bu qismlar ko'zguli tekislikning ikki tomonida joylashgandek bo'ladi. Agar kapalakni uning o'rtasidan o'tgan ko'zguli tekislikda qaytarsak, uning qismlari bir-biri bilan o'zaro ustma-ust tushadi va kapalakning holatida o'zgarish sezilmaydi. Ana shunday teng va ma'lum qonuniyat asosida joylashuvchi qismlardan iborat bo'lgan moddalarga simmetrik moddalar deyiladi. Barcha simmetrik moddalar go'zal va nosimmetrik bo'lgan moddalar esa xunuk ko'rinishda bo'ladi.

Simmetriya grekcha so'z bo'lib, teng o'lchamli demakdir. Ikkita modda (jism yoki biror modda bo'laklarining) o'zaro simmetrik bo'lishi uchun u moddalarning har ikkalasida bir xil qism bo'lishi, har bir moddaning ikki nuqtasi orasidagi masofalar bir-biriga teng bo'lishi kerak. Bunday ikkita moddalar biron geometrik amallar bajarilganda to'la ustma-ust tushishi kerak. Geometrik amallar bajarilganda to'la ustma-ust tushuvchi moddalar *o'zaro simmetrik moddalar deyiladi*. Moddalar yoki biror modda qismlarining o'zaro ustma-ust tushishiga olib keluvchi geometrik amallar *simmetriya amallari deyiladi*. Simmetriya amallariga tekislikda qaytarish, biror yo'nalish atrofida burash, nuqtada qaytarish (inversiya) va parallel siljitish amallari kiradi. Simmetriya amallarini bajarishga imkoniyat beruvchi geometrik tasvirlar *simmetriya elementlari deyiladi*.

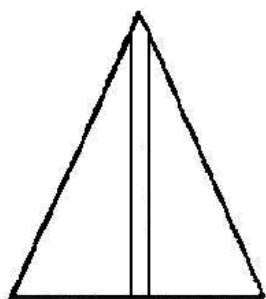
Simmetriya elementlari bo'lib, moddada tekisliklar, yo'nalishlar va nuqtalar xizmat qiladi. Bunday elementlarga mos ravishda simmetriya tekisligi, simmetriya o'qi, simmetriya markazi deyiladi. Simmetriya elementlari oddiy va murakkab bo'ladi. *Oddiy simmetriya elementlari deb*, bitta simmetriya amalini bajarishni talab qiluvchi simmetriya elementlariga aytiladi. Bunday simmetriya elementlariga simmetriya tekisligi, simmetriya markazi va burama simmetriya o'qlari kiradi. *Murakkab simmetriya elementlari deb*, birdaniga ikkita burash va siljitish amalini bajarishni talab qiluvchi simmetriya elementlariga aytiladi. Murakkab simmetriya elementlariga ko'zguli, burama va inversion simmetriya o'qlari kiradi. Simmetriya elementlari uchun ikki xil belgi: xalqaro va Shenflis belgilari ishlatiladi. Xalqaro belgilashda simmetriya o'qlari 1,2,3..., simmetriya tekisligi m , simmetriya markazi C orqali, Shenflis belgisi bo'yicha simmetriya o'qlari C_n , simmetriya tekisligi P va simmetriya markazi C harfi bilan belgilanadi. Simmetriya o'qlari uchun L_n belgi ham ishlatiladi. Bu belgi simmetriya formulalarini belgilashda qo'llaniladi.

I-BOB. KRISTALLAR SIMMETRIYASI ELEMENTLARI

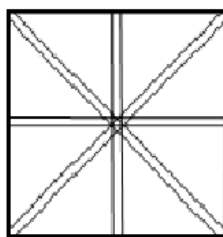
1.1 ODDIY SIMMETRIYA ELEMENTLARI

Yuqorida ta'kidlanganidek, oddiy simmetriya elementlariga: simmetriya tekisligi, simmetriya o'qi va inversiya (simmetriya) markazi kiradi. *Simmetriya tekisligi deb*, modda yoki jismlardagi shunday tekislikka aytiladiki, bu tekislik moddani ikkita bir-biriga nisbatan ko'zguli teng bo'lakka bo'ladi. Yoki aksincha, agar jismda bir-biriga nisbatan ko'zguli teng bo'laklar bo'lsa, bu bo'laklar o'rtasidan simmetriya tekisligi o'tkazish mumkin. Demak, agar biror jism yoki geometrik shakl simmetriya tekisligiga ega deyilsa, u jism yoki geometrik shakl shu tekislikning ikki tomonida yotuvchi ikkita ko'zguli teng bo'laklardan iborat bo'ladi. Masalan, daraxt bargi, kapalak, teng yonli uchburchaklar (balandligiga nisbatan) ikkita teng qismlardan iborat bo'lib, ularning har birining o'rtasidan simmetriya tekisligi o'tkazish mumkin. Simmetriya tekisligi P yoki m harfi bilan belgilanadi.

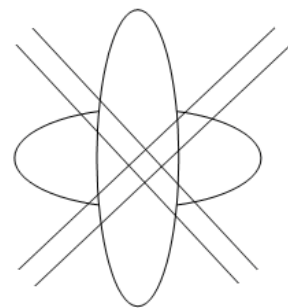
Agar jism bir necha teng bo'laklardan iborat bo'lsa, unga mos holda jism bir necha simmetriya tekisliklariga ega bo'lishi mumkin. Masalan, teng yonli uchburchak-1 ta, kvadrat-4 ta, gul (gulning turiga qarab) - 2 ta, 6 ta, 24 ta va undan ko'p simmetriya tekisliklariga ega bo'lishi mumkin. 1-rasmda ba'zi bir geometrik shakllarning simmetriya tekisligi parallel chiziq bilan ko'rsatilgan.



Teng yonli uchburchak



Kvadrat



4 bargli gul

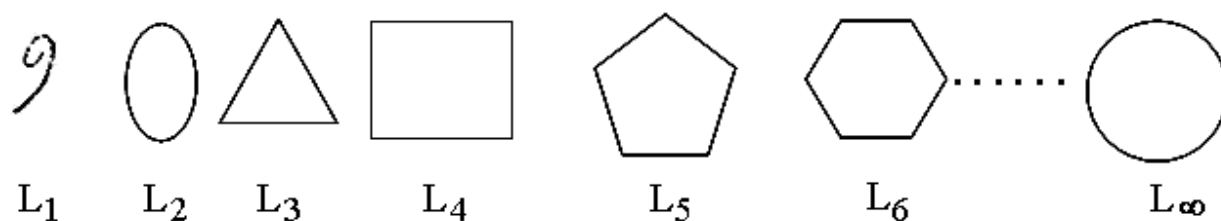
1-rasm. Ikki o'lchamli ba'zi geometrik shakllarda simmetriya tekisliklarining soni va joylashishi.

Simmetriya o'qi deb, modda orqali o'tuvchi shunday yo'nalishga aytiladiki, modda bu yo'nalish atrofida ixtiyoriy α burchakka buralganda, u burashdan avvalgi boshlang'ich holatini to'la egallaydi. Demak, moddada simmetriya o'qining bo'lishi uchun uning teng qismlari bu o'q atrofida ma'lum qonuniyat asosida joylashishi kerak. α burchakning qiymati $0-360^0$ oralig'ida bo'lishi kerak. Modda qismlarining fazoda joylashishiga qarab, modda simmetriya o'qi atrofida to'la aylantirilganda bir yoki bir necha marta boshlang'ich holatini egallashi (ustma-ust tushishi) mumkin. Moddani biror yo'nalish atrofida α burchakka burganda moddaning boshlang'ich holatini to'la egallashlari (ustma-ust tushishlari) soni $-n$ ga *simmetriya o'qining tartibi deyiladi* va u quyidagicha aniqlanadi:

$$n = \frac{360^0}{\alpha}$$

Kuzatishlarning ko'rsatishicha, moddalarning tashqi shakliga qarab, ustma-ust tushishlari soni, yani simmetriya o'qining tartibi har xil bo'ladi. Ularning tartibi 1 dan ∞ gacha bo'ladi (2-rasm).

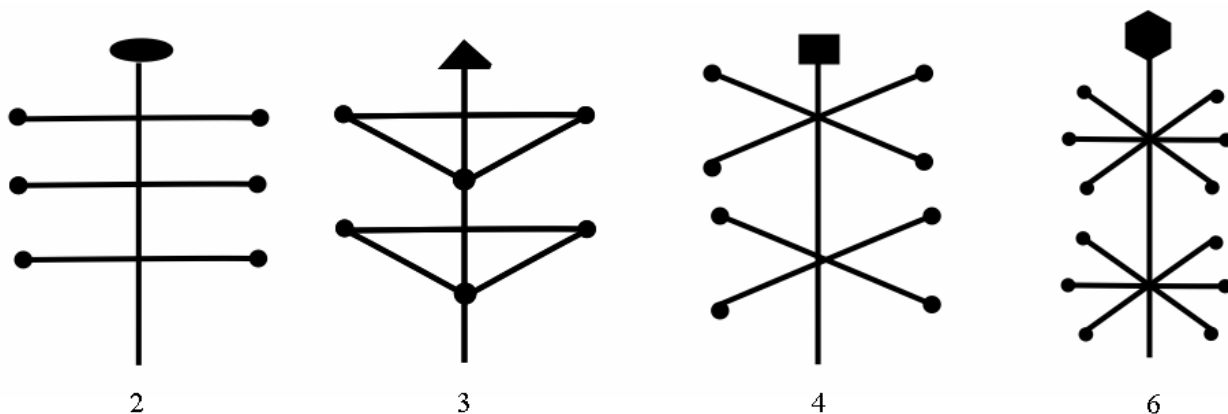
1-chi tartibli simmetriya o'qiga ega bo'lgan jismga ixtiyoriy simmetrik yoki asimmetrik bo'lgan jismlarni misol qilib keltirish mumkin. Tabiatdagi har qanday jism cheksizta 1-tartibli simmetriya o'qiga ega bo'ladi.



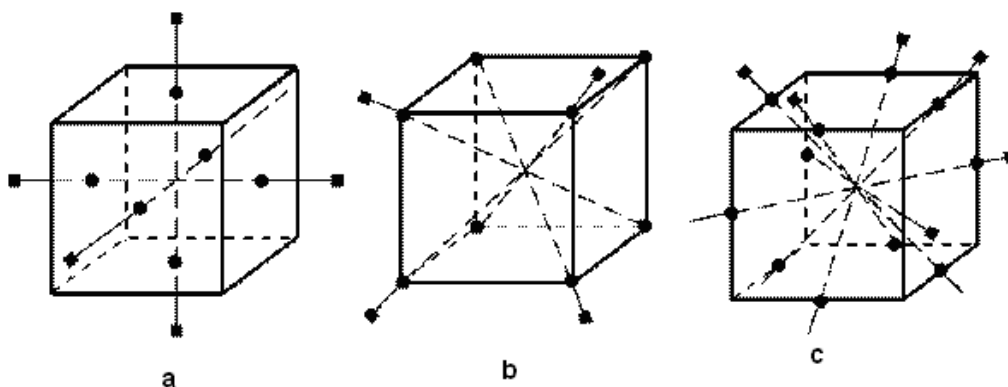
2-rasm. 1 dan ∞ gacha tartibdagi simmetriya o'qlariga ega bo'lgan geometrik shakllar qatori.

2-rasmlarda simmetriya o'qlari kitob tekisligiga tik yo'nalgan. Aniq tashqi ko'rinishga ega bo'lgan geometrik shakllar va kristall ko'pyoqlilarning simmetriya o'qlarini keyingi paragrafda ko'ramiz. Hozircha kubda 3 ta 4-tartibli, 4 ta 3- tartibli va 6 ta 2- tartibli simmetriya o'qlari, sharda esa cheksizta cheksizinchi tartibli simmetriya o'qlari mavjud bo'lishini ta'kidlaymiz. Simmetriya o'qlari ularning tartibini ko'rsatuvchi sonlar 1,2,3..... ∞ yoki, har xil harflar C, L, Λ bilan belgilanadi. Agar simmetriya o'qlari harflar bilan belgilansa, unda o'qning tartibi harfning o'ng tomonida indeks yoki daraja ko'rinishida yoziladi. Masalan, to'rtinchi tartibli simmetriya o'qi C_4 , L_4 yoki g^4 kabi belgilanadi. Rasmda ko'rsatiladigan simmetriya o'qlari to'g'ri chiziqlar bilan ifodalanadi. Ularning tartibi esa, to'g'ri chiziq uchida joylashgan tegishli ko'p burchaklar bilan ko'rsatiladi.

3-rasmda 2, 3, 4, 6...tartibli o'qlarga ega bo'lgan jismlarda zarrachalar (jism qismlari) ning joylashish qonuniyati ko'rsatilgan.



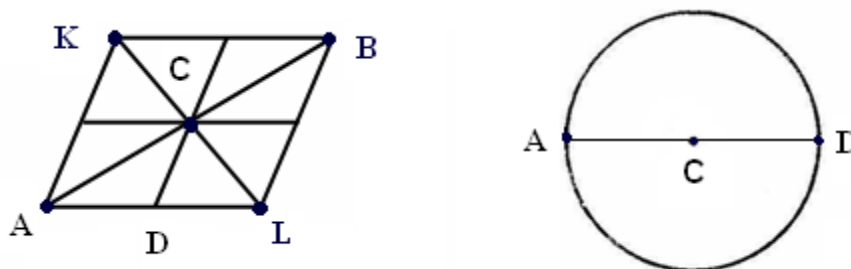
3-rasm. 2, 3, 4, 6...tartibli simmetriya o'qiga ega bo'lgan jismlarda jism qismlarining joylashish qonuniyati.



4-rasm. Kubda 4-chi (a), 3-chi (b), va 2-chi (c) tartibli o'qlarning joylashishi.

Simmetriya (inversiya) markazi deb, modda ichidagi shunday nuqtaga aytiladiki, modda ichida bu nuqtadan hamma yo'nalishlar bo'yicha bir xil uzoqlikda bir xil nuqtalar yoki moddaning bir xil qismlari joylashgan bo'ladi. Sharning markazi, aylananing markazi, kubning hajmiy markazi, romashka

gulining markazi bu jismlar uchun simmetriya markazi bo'ladi. Bu jismlarning ixtiyoriy nuqtasini (qismini) simmetriya markaziga nisbatan aks ettirsak, jismning ikkinchi tomonidagi xuddi shunday nuqta (qism) bilan ustma-ust tushadi. Shuning uchun ba'zi hollarda simmetriya markazi *aks ettirish markazi yoki inversiya markazi deb ham ataladi*. Simmetriya markazi C yoki i harfi bilan belgilanadi va 5-rasmdagidek nuqta shaklida belgilanadi. Quyida aylana va parallelogramning simmetriya markazlari ko'rsatilgan (5-rasm).



5-rasm. Parallelogram va aylanada simmetriya markazining joylashishi.

Aylana diametrining qarama-qarshi uchlarida joylashgan A va D nuqtalar, parallelogramning diagonallari uchlarida joylashgan A va B nuqtalar, hamda K va L nuqtalar C nuqtadan bir xil uzoqlikda joylashgan va bir xil nuqtalar hisoblanadi. D va E nuqtalar ham shunday kuchga ega. Demak, aylana va parallelogram uchun C nuqta simmetriya markazi bo'ladi.

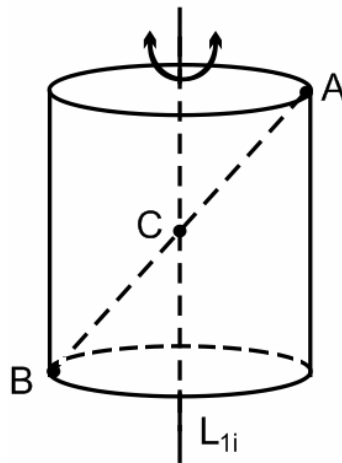
1.2 MURAKKAB SIMMETRIYA ELEMENTLARI

Murakkab simmetriya elementlariga inversion va ko'zguli burama simmetriya o'qlari kiradi va ular ham oddiy simmetriya o'qlari kabi 1,2,3... ∞ tartibli bo'ladi.

a) Inversion simmetriya o'qlari. *n*-chi tartibli inversion o'q deb, modda orqali o'tuvchi shunday chiziqqa aytiladiki, moddani bu chiziq atrofida $\alpha = 360^\circ/n$ burchakka burab, moddadagi simmetriya markaziga qaytarsak, modda o'zining boshlang'ich holiga *n* marta qaytadi. Inversion o'q $\bar{n}$ yoki L_{n_i} bilan belgilanadi.

Masalan, 1-tartibli inversion o'q- L_{1i} , 2- tartibli - L_{2i} cheksiz tartibli esa - $L_{\infty i}$ ko'rinishida belgilanadi. Shuni alohida ta'kidlash kerakki, inversion o'qlardan ba'zilar oddiy simmetriya elementlari bilan teng kuchli bo'ladi. Masalan, $L_{1i} = C$, $L_{2i} = P$ bo'ladi. Inversion o'qlardan birinchi beshtasining (L_{1i} , L_{2i} , L_{3i} , L_{5i} , L_{6i}) geometrik mohiyati bilan quyida tanishamiz.

Birinchi tartibli inversion o'q deb, modda yoki shakl orqali o'tuvchi shunday chiziqqa aytiladiki, moddani bu chiziq atrofida 360^0 ga burab, simmetriya markazida qaytarsak, modda boshlang'ich holatiga qaytadi. Buni 6-rasmda yaqqol ko'rish mumkin. A va B nuqtalarda jismning bir xil elementlari nuqtalari mavjud bo'lsin. Bu nuqtalar jismni 360^0 ga burab, C nuqtada qaytarganda avvalgi holatiga to'la qaytadi. Bu shaklning markazidan o'tgan o'q L_{1i} ekanligidan dalolat beradi.



6-rasm. Birinchi tartibli inversion o'qni ko'rsatuvchi shakl.

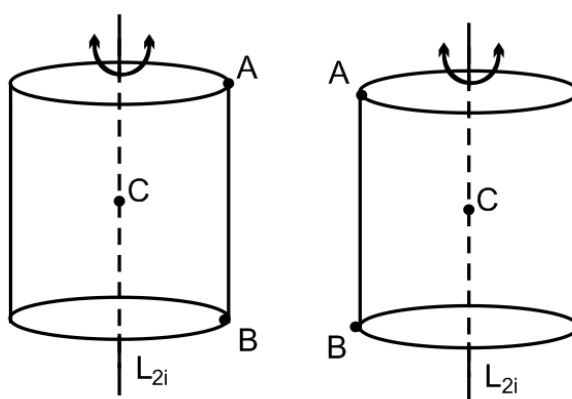
Ikkinchi tomondan A va B nuqtalar simmetriya markazida qaytarilganda ham avvalgi holatiga qaytadi. Demak, 1-tartibli inversion o'qning ta'siri oddiy simmetriya elementlaridan biri bo'lgan simmetriya markazi ta'siri kabi bo'lar ekan.

Demak,

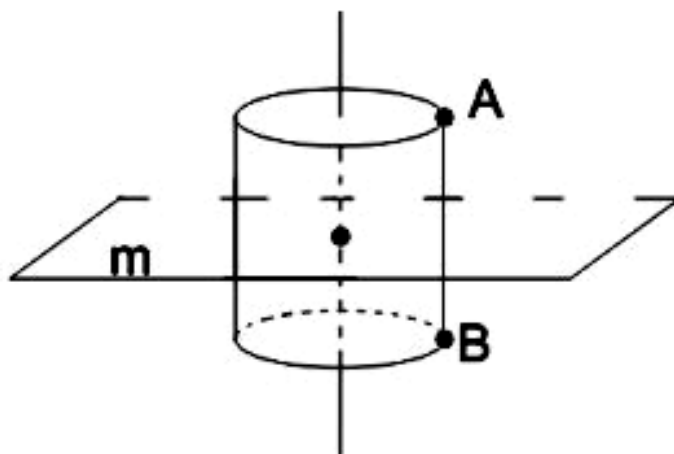
$$L_{1i} = C$$

Bundan, L_{2i} -ni alohida simmetriya elementi sifatida qaramasa ham bo'lar ekan, degan xulosa kelib chiqadi.

Moddada **ikkinchi tartibli inversiya o'qining** bo'lishi uchun modda qismlari, nuqtalari 7-rasmda ko'rsatilgandek joylashishi kerak. Moddani 180° ga buraganda A nuqta A' nuqtaga, B nuqta esa B' nuqtaga va shakl yangi holatga o'tadi. Lekin simmetriya markazida qaytarsak, A va B nuqtalar burashidan avvalgi o'rinlarini egallaydi va jism boshlang'ich holatiga qaytadi.



7-rasm. Ikkinchi tartibli inversion o'qni (L_{2i}) ko'rsatuvchi shakl.



8-rasm. Ikkinchi tartibli inversion o'qning (L_{2i}) simmetriya tekisligiga (m) teng ekanligini

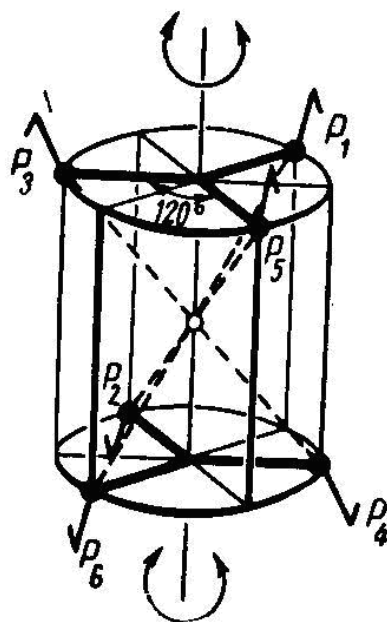
($L_{2i} = m$) ko'rsatuvchi shakl.

A va B nuqtalarni ham simmetriya tekisligida qaytarsak, jism boshlang'ich holatiga qaytadi. Bundan ikkinchi tartibli inversion o'q o'z ta'siri bilan oddiy simmetriya tekisligiga teng kuchli ekan, degan xulosa kelib chiqadi (8-rasm).

Endi ***uchinchi tartibli inversion o'qni*** qaraymiz. Bunda jism qismlari 120^0 burchak hosil qilib joylashishi kerak. 9-rasmda ko'rsatilgan struktura L_{3i} ga ega chunki, sistemani 120^0 ga burab, C ga nisbatan qaytarsak, struktura avvalgi holatini egallaydi. Haqiqatdan ham strukturani 120^0 ga burasak A nuqta C nuqta o'rnini, C nuqta B nuqta o'rnini va B nuqta A nuqta o'rnini oladi. Lekin bu nuqtalarni o'q ustida yotgan simmetriya markazi C ga nisbatan qaytarsak, ko'chgan nuqtalar tegishlicha D, L va E nuqtalarga o'tadi. Bu esa strukturaning burashdan oldingi boshlang'ich holatidir. Xuddi shunday o'tishlar D, L va E nuqtalar uchun ham o'rinli bo'ladi. Demak, strukturani 120^0 ga burab o'q ustida yotgan simmetriya markaziga nisbatan qaytarsak, struktura avvalgi holatini egallaydi. Lekin bunday struktura mustaqil 2 ta oddiy simmetriya elementlari L_3 va C ga ega. Chunki sistemani 120^0 ga burasak, struktura boshlang'ich holatini egallaydi. Xuddi shu kabi burash amalini bajarmasdan struktura qismlarini (nuqtalarini) simmetriya markazi C da qaytarsak ham struktura boshlang'ich holatiga keladi. Demak,

$$L_{3i} = L_3 + i$$

Amaliyotda ikkita simmetriya amalini bajarish o'rniga bitta L_{3i} ni bajarish qulay. Shuning uchun bunday struktura bitta L_{3i} ega deb aytiladi.



9-rasm. Uchinci tartibli inversion o'q.

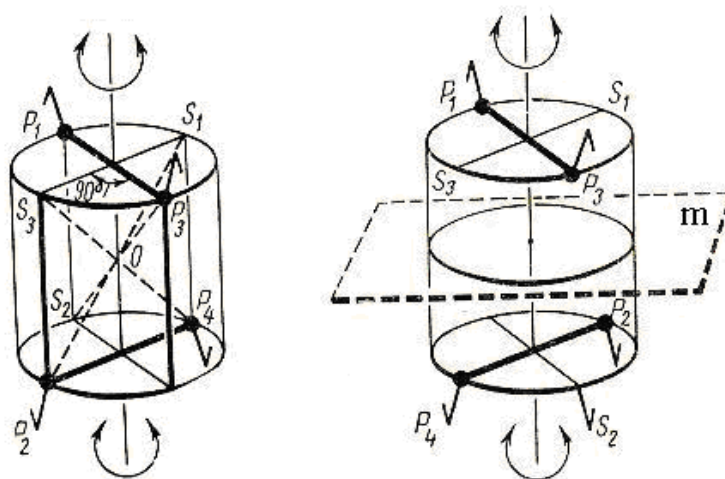
To'rtinchi tartibli tartibli inversion o'qning geometrik mohiyatini 10-rasmdan yaqqol tushuntirib berish mumkin. Sistemani 90^0 ga burasak nuqtalar

$A' B'$ va $D' E'$ holatga o'tadi (10 (a)-rasm). Bu holat sistemaning boshlang'ich holati bilan ustma-ust tushmaydi. Lekin uni simmetriya markazi C ga nisbatan qaytarsak, $D' E'$ nuqtalar AB holatga, $A' B'$ chiziq DE holatga o'tadi va sistema boshlang'ich holatiga qaytadi. Bu simmetriya amalini oldin qaralgan bironta simmetriya elementi yordamida bajarib bo'lmaydi. Demak, 4-tartibli inversion o'q, xuddi 3-tartibli inversion o'q kabi mustaqil simmetriya elementi bo'lar ekan. Shuni alohida ta'kidlash lozimki, 4-tartibli inversion o'q hamma vaqt ikkinchi tartibli oddiy o'qdan iborat bo'ladi. Ammo, ikkinchi tartibli oddiy o'q (L_2) 4-tartibli inversion o'qdan (L_{4i}) iborat bo'lolmaydi.

6-tartibli inversion simmetriya o'qi va uning geometrik mohiyati.

Strukturaning zarrachalari boshlang'ich holatda ABD va mnk nuqtalarda joylashgan bo'ladi. Strukturani 60^0 ga burasak (L_6 ga tegishli amal) u yangi holatga $A'B'D'$ va $m'n'k'$ ga o'tadi. Bu holat buralmasdan avvalgi holat bilan ustma-ust tushmaydi. Demak struktura L_6 ga ega emas. Endi yangi holatga ko'chgan zarrachalarning L_6 ustida joylashgan simmetriya markazi C ga

nisbatan qaytaradi. Unda A' nuqtadagi zarracha buralgan avvalgi k nuqtadagi zarracha o'rnini, B' - zarracha m zarracha, D' - zarracha n zarracha o'rnini oladi va struktura boshlang'ich holatiga qaytadi.



10-rasm. To'rtinchi tartibli inversion o'qni tushuntirishga doir.

Shunday qilib, bu struktura uchun birdaniga L_6 va C amallarini bajarib, uni avvalgi holatiga qaytarish mumkin ekan. Demak, biz qarayotgan struktura 6-tartibli inversion o'qqa ega bo'lar ekan.

Bunday struktura oddiy L_3 ga ega bo'ladi. Demak, L_{6i} ni hamma vaqt L_3 deb qarash mumkin. Lekin L_3 hech qachon L_{6i} bo'la olmaydi. Chunki, strukturaning L_3 ega bo'lishi uchun unda simmetriya markazi bo'lishi shart emas. Lekin strukturaning L_{6i} ga ega bo'lishi uchun L_3 ga tegishli strukturadan tashqari, inversiya markazi ham bo'lishi kerak.

b) Ko'zguli burama simmetriya o'qlari. Ko'zguli burama simmetriya o'qlari deb, modda (shakl) orqali o'tgan shunday chiziqqa aytiladiki, moddani bu chiziq atrofida ixtiyoriy α burchakka burab, bu chiziqqa perpendikulyar ko'zguli tekislikda qaytarilsa, jism boshlang'ich holatiga qaytadi. Moddalarda bo'lishi mumkin bo'lgan ko'zguli burama o'qlar $1, 2, 3, \dots, \infty$ tartibli bo'ladi. Ko'zguli burama o'qlar Λ harfi bilan belgilanadi. Demak, moddalarda $\Lambda_1, \Lambda_2, \dots, \Lambda_\infty$ tartibli

o'qlar bo'ladi. Lekin, tekshirishlarning ko'rsatishicha bu o'qlarning jism elementiga ta'siri, xuddi inversion simmetriya o'qlari ta'siri kabi bo'ladi. Jumladan 1- tartibli ko'zguli burama simmetriya o'qining ta'siri ikkinchi tartibli inversion o'qi ta'siri kabi, ikkinchi tartibli ko'zguli burama simmetriya o'qining ta'siri birinchi tartibli inversion simmetriya o'qining ta'siri kabi bo'ladi. Umuman, bizga kristallar simmetriyasini o'rganish uchun birinchi 6 ta simmetriya o'qlari uchun quyidagi tengliklar bajarilishini ko'rsatish mumkin.

$$\Lambda_1 = L_{2i} = m; \quad \Lambda_2 = L_{2i} = C; \quad \Lambda_3 = L_{6i} = L_3P = L_3 + P; \quad \Lambda_4 = 4_{4i}; \quad \Lambda_6 = L_{3i} = L_3C = L_3 + C.$$

Shunday qilib, biz chekli jismlarning simmetriyasi quyidagi simmetriya elementlari bilan aniqlanar ekan, degan xulosaga kelamiz.

Oddiy o'qlar $L_1, L_2, L_3, \dots, L_\infty$, inversion o'qlar $L_{1i} = C, L_{2i} = P = m; L_{3i}, L_{4i}, \dots, L_{\infty i}$. Shuni alohida qayd qilish lozimki, bu simmetriya elementlariga tegishli simmetriya amallari bajarilganda, jismda hech bo'lmaganda bitta nuqta o'z o'rnida qoladi. Masalan, simmetriya tekisligiga tegishli amal bajarilganda butun tekislik, simmetriya o'qiga tegishli amal bajarilganda o'qda yotuvchi nuqtalar va nihoyat, inversiya markaziga tegishli amal bajarilganda jismdagi inversiya markazi bilan ustma-ust tushuvchi bitta nuqta qo'zg'almasdan qoladi.

Shuning uchun bunday simmetriya elementlariga *nuqtaviy simmetriya elementlari* deyiladi. Nuqtaviy simmetriya elementlari har xil mualliflar tomonidan har xil belgilangan. Lekin ikki xil belgilash dunyo olimlari tomonidan qabul qilingan belgilar hisoblanadi.

1. Xalqaro belgilar. Xalqaro belgilashda oddiy o'qlar 1, 2, 3, 4, 6, ... ∞ kabi, inversion o'qlar esa, $\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}, \dots, \bar{\infty}$; kabi belgilansa, simmetriya tekisligi m harfi bilan va inversiya markazi i harfi bilan belgilanadi.

2. Shenflis belgilari. Shenflis oddiy o'qlarni $C_1, C_2, C_3 \dots$ kabi, inversion o'qlarni $C_{1i}, C_{2i}, C_{3i} \dots$ kabi, simmetriya tekisligini P harfi bilan va simmetriya markazini C_i harfi bilan belgilaydi.

Kristallar simmetriyasini qarayotganda simmetriya elementlarini belgilashga to'liqroq to'xtalamiz. Shunday qilib, cheklangan jismlarning simmetriya elementlari xalqaro belgilar bo'yicha quyidagilar bo'lar ekan, degan xulosaga kelamiz. 1, 2, 3, 4, 6, $\dots \infty$, m, i, $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\dots$

Bu elementlarning sxemasi 1-jadvalda keltirilgan.

1-jadval. Simmetriya elementlarini sxemada belgilash.

Simmetriya elementlari		2	3	4	6	$\bar{3}$	$\bar{4}$	$\bar{6}$
Elementlardagi tasviri	Perpendikulyar							
	Parallel							

1.3. SIMMETRIYA SINFLARINI BELGILASH

Simmetriya sinflari - turlarini belgilashning asosan shakli va turi mavjud: Xalqaro belgilar va Shenflis belgilari.

1. Xalqaro belgilar.

n – n - tartibli simmetriya o'qi.

$\bar{n}$ - n - tartibli inversiya o'qi.

m - simmetriya tekisligi.

nm - n - tartibli simmetriya o'qi va bu o'q bo'ylab yo'nalgan simmetriya tekisliklari (tekisliklar soni n - ta bo'ladi).

$\frac{n}{m}$ yoki n / m - n -tartibli simmetriya o'qi va unga tik joylashgan simmetriya tekisligi.

$n^2 - n$ - tartibli simmetriya o'qi va unga perpendikulyar yo'nalgan ikkinchi tartibli simmetriya o'qlari ($n - 2$ ta).

$\frac{n}{m}$, n/mm - n - tartibli simmetriya o'qi va bu o'qqa parallel ($n - 2$ ta) va perpendikulyar (bitta) joylashgan simmetriya tekisliklari.

$\bar{n}$ va n oldin ta'kidlanganidek 1, 2, 3, 4 va 6 qiymatlar qabul qiladi.

Simmetriya sinflarini xalqaro belgilashda simmetriya elementlarini yozish tartibi ham katta rol uynaydi. Simmetriya elementini ifodalovchi son yoki harfning ma'nosi uning yozuvda tutgan o'rniga qarab aniqlanadi. Kristallografik sinfni ifodalovchi belgi - simvolda bir xil simmetriya elementlari albatta birinchi o'rinda, boshqalari ikkinchi o'rinda, uchinchi o'rinda yozilishlari kerak. Masalan: o'rta kategoriyaga kiruvchi sinflarda birinchi o'rinda albatta bosh o'q joylashtirilishi kerak. Ikkinchi va uchinchi o'rinlarda boshqa simmetriya elementlari joylashtiriladi. Kubik kristallarda koordinata o'qlari bo'ylab yo'nalgan simmetriya elementlari (3 ta L_4 va L_2) birinchi o'rinda, uchinchi tartibli simmetriya o'qlari istisno sifatida ikkinchi o'rinda va diagonal simmetriya elementlari uchinchi o'rinda joylashtiriladi. Masalan: kubik kristallografik singoniyaga kiruvchi belgi bilan trigonal kristallografik singoniyaga kiruvchi $3m$ belgi bir - biridan tubdan farq qiladi. $m\bar{3}$ sinfda birinchi o'rinda koordinata o'qlari bo'ylab joylashgan simmetriya elementi m turishi kerak. Belgida birinchi o'rinda m turibdi. Bunday tekisliklar soni 3 ta bo'lishi kerak (chunki o'qlar soni 3 ta x, y, z). Demak, $3m$ sinfda 3 ta simmetriya tekisligi bo'lishi kerak. Ikkinchi o'rinda 3-tartibli simmetriya o'qlari turishi kerak. Ular soni 4 ta. Keyin boshqa simmetriya elementlari turadi. Sinfda yana qanday simmetriya elementlari bo'ladi? Buni yuqorida keltirilgan teoremlar asosida aniqlash mumkin.

1-teoremaga ko'ra tekisliklarining kesishish chizig'i 3 ta L_2 dan iborat. Demak, sinfda 3 L_2 bo'ladi. 2-teoremaga ko'ra, L_2 bilan m ning kesishish nuqtasida simmetriya markazi C bo'ladi. Demak, kubik singoniyadagi $m\bar{3}$ sinfda 3

ta L_2 , 4 ta L_3 , 3 ta P va C bo'lar ekan.

$$m3 \rightarrow 3 L_2 4 L_3 3PC$$

Lekin trigonal singoniyaga kiruvchi 3m sinfda L_3 , va 3P bo'ladi. Chunki, qoidaga ko'ra, bunday singoniyadagi xalqaro belgisida birinchi o'rinda yagona bosh o'q L_3 turadi. Ikkinchi o'rinda esa simmetriya tekisligi turadi. Bu tekislik belgiga ko'ra, L_3 ga parallel bo'lib, 4-teoremaga ko'ra, ularning soni 3 ta bo'lishi kerak. Demak,

$$3m \rightarrow L_3 3P$$

Bu $m3$ dan tubdan farq qiladi. Simmetriya sinflarining xalqaro yozuvini tushunish uchun bu qoidalarni albatta bilish kerak.

2. Shenflis belgisi.

C_n - n - chi tartibli vertikal simmetriya o'qi

C_{nv} - n - chi tartibli vertikal simmetriya o'qi va unga parallel bo'lgan

n ta simmetriya tekisligi (tekisliklar gorizontga vertikal).

C_{nh} - n - chi tartibli simmetriya o'qi va unga perpendikulyar bo'lgan simmetriya tekisligi.

$\mathcal{H}_n$ - n - chi tartibli vertikal simmetriya o'qi va bu o'qqa perpendikulyar bo'lgan n ta 2 - chi tartibli simmetriya o'qlari.

D_{nh} - n - chi tartibli vertikal simmetriya o'qi va unga parallel bulgan n - ta simmetriya tekisligi va bu n - chi tartibli o'qqa perpendikulyar (gorizontalg parallel) bo'lgan simmetriya tekisligi.

$C_n(C_{nL})$ - n - chi tartibli ko'zguli burama (inversion) o'q.

$D_2 = V = 3$ ta bir - biriga tik bo'lgan L_2 o'qlar.

$D_{2h} = V_h$ 3 ta bir - biriga perpendikulyar bo'lgan ikkinchi tartibli o'qlar va bu o'qlarning har biriga tik bo'lgan simmetriya tekisliklari.

$D_{2d} = V_h$ - 3 ta o'zaro perpendikulyar bo'lgan L_2 o'qlar va diagonal tekisliklar.

T_d - tetraedrning simmetriya o'qlari va diagonal tekisliklar.

T_h - tetraedrning simmetriya o'qlari va koordinata tekisliklari.

O_h - oktaedrning simmetriya o'qlari va koordinata tekisliklari.

Simmetriya formulalari.

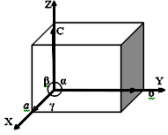
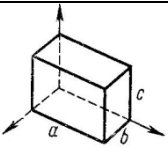
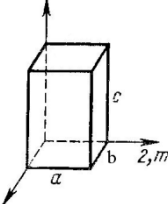
Berilgan sinfga kiruvchi qator simmetriya elementlari mavjud bo'lib, ular ma'lum tartibda yoziladi. Simmetriya elementlarining ma'lum qoida asosida yozilgan to'plami *simmetriya formulasi* deyiladi. Simmetriya formulasida birinchi o'rinda simmetriya o'qlari, o'qlar tartibining pasayib borishi tartibida, ikkinchi o'rinda simmetriya tekisliklari va oxirgi o'rinda simmetriya markazi yoziladi. Masalan: kubning simmetriya formulasi quyidagicha yoziladi:

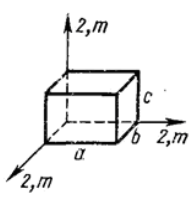
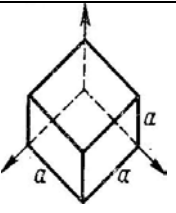
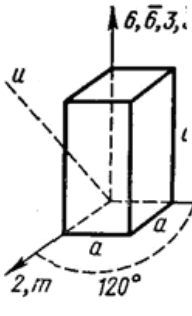
$$3L_4 4L_3 6L_2 9PC.$$

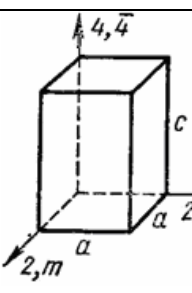
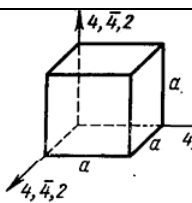
Kristallografik sinflarning xalqaro va Shenflis belgilari, hamda ularning simmetriya formulalari quyidagi jadvalda keltirilgan.

3-jadval. Kristallografik sinflarning Xalqaro va Shenflis belgilari va singoniyalarni o'rnatish qoidalari.

Singoniya	Xalqaro belgi		Simmetriya formulasi	Shenflis belgisi	Sinfning xarakterli	O'qlarning joylashishi	Kristallografik koordinata o'qlari sistemasi
	Qisqa	to'liq					
	a						

					sim me triy a ele me nti		va kristallar ni o'rnatish qoidasi
1	2	3	4	5	6	7	8
Triklin	1	1	L_1	C_1	1	Kristallar qirralari bo'ylab	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$
							
	$\bar{1}$	$\bar{1}$	C	C_i	$\bar{1}$		
Monoklin in	2	2	L_2	C_2	L_2 o'q yo ki m	Y o'qi // L_2 yoki $\perp m$	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
	m	m	P	C_{1h}			
	2/m	$\frac{2}{m}$	L_2PC	C_{2h}			
	222	222	$3L_2$	D_2 =V	3 ta	X,Y,Z// L_2 yoki X,Y,Z $\perp$	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
	mm2	2mm	$L_2 2P$	C_{2x}			

Rombik	mm m	mm ²	3L ₂ 3PC	D _{2h} = V _h	L ₂ yo ki 3 ta m	m	
		$\frac{2 \ 2 \ 2}{m \ m \ m}$					
Trigona l	3	3	L ₃	C ₃	L ₃ yo ki L _{3i}	Bosh o'q Z o'qi bo'ylab qolganlar i XY tekisligid a	$a=b=c;$ $\alpha=\beta=90^0$ $\gamma=120^0$
	$\bar{3}$	$\bar{3}$	L ₃ C=L _{3i}	C _{3i}			
	32	32	L ₃ 3L ₂	D ₃			
	3m	3m	L ₃ 3P	C _{3x}			
	$\bar{3}m$	$\bar{3}\frac{2}{m}$	L ₃ 3L ₂ 3PC	D _{3d}			
Geksog onal	6	6	L ₆	C ₆	L ₆ yo ki L _{6i}	Bosh o'q Z o'qi bo'ylab qolganlar i XY tekisligid a	$a=b \neq c$ $\alpha=\beta=\gamma \neq 90^0$ $\gamma=120^0$
	$\bar{6}$	$\bar{6}$	L ₃ P	C _{3h}			
	6/m	$\frac{6}{m}$	L ₆ PC	C _{6h}			
	622	622	L ₆ 6L ₂	D ₆			
	6mm	6mm	L ₆ 6P	C _{6x}			
	$\bar{6}m2$	$\bar{6}m2$	L _{6i} 3L ₂ 3P	D _{3h}			

	$\frac{6}{m}$ mm	$\frac{6}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$	$L_6 6L_2 7PC$	D_{6h}			
Tetragonal	4	4	L_4 yoki L_{4i}	$\bar{S}_4$	L_4 yo ki L_{4i}	Bosh o'q Z o'qi bo'ylab Qolganla ri XY tekisligid a	$a=b \neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$
	$\bar{4}$	$\bar{4}$	$L_4 PC$	C_{4h}			
	$\frac{4}{m}$	$\frac{4}{m}$	$L_4 4L_2$	D_4			
	422	422	$L_4 4P$	C_{4x}			
	4mm	4mm	$L_4 2L_2 2P$	$D_{2d} = V_d$			
	$\bar{4} 2m$	$\bar{4} 2m$	$L_4 4L_2 5PC$	D_{4h}			
	$\frac{4}{m}$ mm	$\frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$					
Kubik	23	23	$3L_2 4L_3$	T	4 ta L_3	X,Y,Z o'qlar bir- biriga nisbatan $\perp$ joylashg an L_4, L_{4i} yoki L_2 bo'ylab	$a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$
	m3	$\frac{2}{m} \bar{3}$	$3L_2 4L_3 3PC$	T_h			
	432	432	$3L_4 4L_3 6L_2$	O			
	$\bar{4} 3m$	$\bar{4} 3m$	$3L_4 4L_3 6P$	T_d			
	m3m	$\frac{4}{m} \bar{3} \frac{2}{m}$	$3L_4 4L_3 6L_2 9PC$	O_h			

II-BOB. KRISTALLOGRAFIYA ASOSLARIGA OID MASALALAR

2.1. Kristallografiya asoslariga oid masalalar va ularning yechimlari

1. NaCl kristalining zichligi $2,18 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3$ ga teng. Natriyning atom og'irligi 23, xlorniki esa 35,46. Panjara doimiysini aniqlang.

Yechish:

NaCl kristali elementar yacheykasining massasi

$$M = d^3 \rho,$$

bu yerda, ρ — kristall zichligi. Ammo, ikkinchi tomondan

$$M = m_H (N_{Na} A_{Na} + N_{Cl} A_{Cl}).$$

Bu yerda m_H —vodorod atomining massasi; N_{Na} —elementar yacheykadagi natriy atomlari soni; N_{Cl} — elementar yacheykadagi xlor atomlari soni; A_{Na} —natriyning atom og'irligi; A_{Cl} —xlorning atom og'irligi.

Ikkala ifodaning ung tomonlarini tenglashtirib, NaCl ning bitta elementar yacheykasiga yarimta natriy atomi va yarimta xlor atomi to'g'ri kelishini hisobga olgan holda quyidagi ifodani hosil qilamiz:

$$d^3 \rho = \frac{m_H}{2} (A_{Na} + A_{Cl}),$$

$$\text{bundan } d = \sqrt[3]{\frac{m_H}{2\rho} (A_{Na} + A_{Cl})};$$

$$d = \sqrt[3]{\frac{1,66 \cdot 10^{-27} (23 + 35,46)}{2 \cdot 2,18 \cdot 10^3}} = 2,81 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 2,81 \text{ \AA}$$

2. Birlik hajmdagi alyuminiy atomlarining sonini toping. Alyuminiy zichligi

$$\rho = 2,7 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3.$$

Yechish:

Bir kilomol alyuminiyda $6,02 \cdot 10^{26}$ ta atom joylashagan. Bir kilogramm molekulaning hajmi

$$V_1 = \frac{A}{\rho},$$

Bu yerda A — atom og'irligi; ρ —zichlik. U holda birlik hajmdagi atomlar soni

$$n = \frac{N}{V_1} = \frac{N}{A} \cdot \rho;$$

$$n = \frac{6,02 \cdot 10^{26} \cdot 2,7 \cdot 10^3}{27} = 6,02 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}.$$

3. Kub sistemada kristallangan temirning elementar yacheykasidagi atomlar sonini aniqlang. Kubning tomoni $a = 2,27 \text{ \AA}$ temirning atom og'irligi 55,84 va uning zichligi esa 7800 kg/m^3 .

Yechish:

Zichlik formulasini qullab, elementar yacheykadagi atomlar sonini aniqlaymiz

$$N = \frac{\rho a^3}{A_{Fe}};$$

$$N = \frac{7800(2,27)^3 \cdot 10^{-30}}{55,84 \cdot 1,66 \cdot 10^{-27}} \approx 1,99,$$

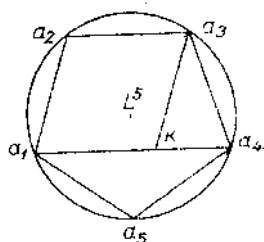
Demak, bitta elementar yacheykaga 2 ta atom tug'ri kelar ekan.

4. Kristall panjarada beshinchi tartibli simmetriya o'qi mavjud emasligini isbotlang.

Yechish:

Aytaylik kristall panjarada beshinchi tartibli simmetriya o'qi L^5 mavjud bo'lsin (13-rasm). Bu o'qqa eng yaqin bo'lgan panjara tuguni a_1 ni qaraylik. Bu tugunni 72° ga buraganimizda u o'z navbatida ketma-ket a_2 a_3 a_4 va a_5 nuqtalarni egallaydi. Beshburchakning a_1 tugunni a_4 tuguni bilan tutashtirib, a_2 a_3 tomoniga parallel bo'lgan a_1 a_4 tomon hosil qilamiz. Panjaraning parallel atomlar qatorida atomlar orasidagi masofa bir xil bo'lishi kerak. Buning uchun esa a_1 a_4 tomonida panjaraning k tuguni ham joylashishi kerak. Bu tugun esa simmetriya o'qiga barcha a_2 a_3 a_4 va a_5 tugunlardan eng yaqin joylashganidir. Bizning 5- tartibli o'qqa eng yaqin panjara tuguni a_1 deb, qaragan farazimiz noto'g'ri chiqdi. Bundan

ko'rinadiki kristallda 5-tartibli simmetriya o'qi bo'lmas ekan.

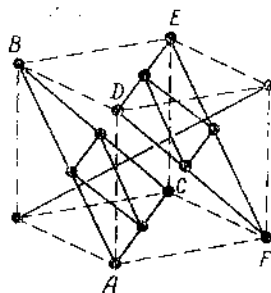


13-rasm

5. Qirralari markazlashgan kub panjaraning qo'shni tugunlari ichida doimo teng tomonli uchburchakning uchlari bo'lgan uchta tugundan iborat guruh bo'lishini ko'rsating.

Yechish:

Qirralari markazlashgan kub panjaraning qo'shni tugunlari, teng tomonli uchburchakning uchlari bo'lgan uchta tugundan iborat bo'lgan guruh bo'lishini osongina ko'rsatish mumkin, masalan, 14-rasmdagi A,B,C yoki D,E,F tugunlarni ko'rsatish mumkin. ABC uchburchakning tomonlari bir-biriga tengligi 14-rasmda osongina ko'rinib turibdi, ya'ni $AB=AC=BC$.

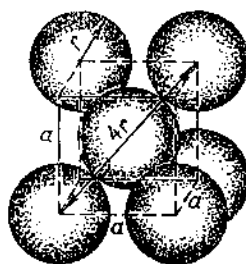


14-rasm

6. Teng hajmli sharlarning radiuslari orqali zich joylashish yuzaga kelgandagi quyidagi holatlar uchun elementar yacheykaning hajmlarini aniqlang. 1) hajmi markazlashgan, 2) qirrasi markazlashgan va 3) geksagonal panjara.

Yechish:

1) Elementar yacheykaning parametri shar radiusi orqali quyidagicha ifodalanadi (15-rasm):



15-rasm

$$3a^2 = (4r)^2 \text{ ёку } a = \frac{4r}{\sqrt{3}}.$$

U holda

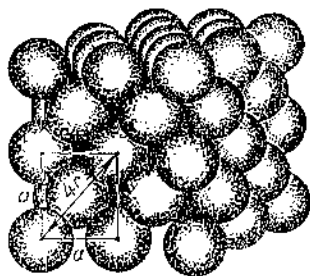
$$V = a^3 = \frac{64r^3}{3\sqrt{3}}.$$

2) Elementar yacheyka parametrini zich joylashuv hosil qilgan shar radiusi orqali ifodalash mumkin (16-rasm).

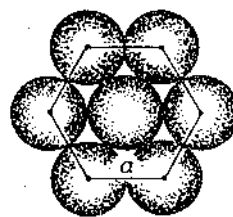
$$2a^2 = (4r)^2 \text{ уму } a = 2\sqrt{2}r.$$

U holda,

$$V = a^3 = 8\sqrt{8}r^3 = 16\sqrt{2}r^3.$$



16-rasm



17-rasm

3) Panjara parametrining kattaligi $a = 2r$ bo'lganda, elementar yacheyka asosining yuzasi (17-rasm).

$$S = 6 \cdot \frac{a^2}{4} \cdot \sqrt{3} = 6r^2 \sqrt{3}.$$

$$\frac{c}{a} = 2\sqrt{\frac{2}{3}} \text{ булганлигидан } c = 4r\sqrt{\frac{2}{3}}$$

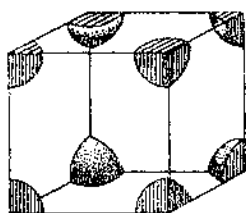
U holda elementar yacheykaning hajmi

$$V = 6r^2 \sqrt{3} \cdot 4r \sqrt{\frac{2}{3}} = 24\sqrt{2}r^3.$$

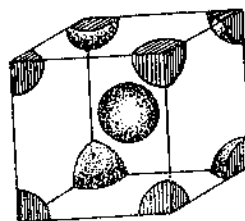
7. 1) oddiy, 2) hajmi markazlashgan va 3) qirradi markazlashgan kub panjaralar hollarida elementar yacheykadagi atomlar soni nechaga teng.

Yechish:

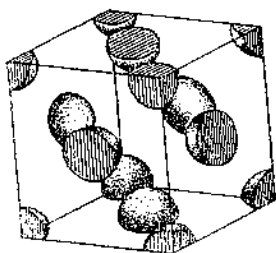
1) Sodda kubik panjarada atomlar faqat yacheyka burchagining qirralarida joylashadi. Bitta qirrasiga elementar yacheykaning sakkizta parallelopipedi to'g'ri keladi. Shu sababli yacheykaning bitta qismiga atomning sakkizdan bir qism to'g'ri keladi (18-rasm). Yacheyka sakkizta burchakka ega bo'lib, o'z navbatida bitta atom to'g'ri keladi.



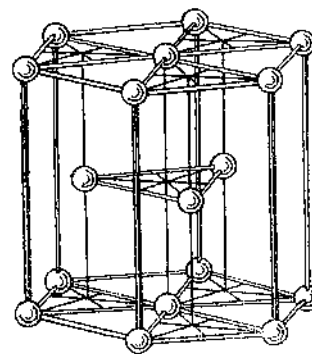
18-rasm



19-rasm



20-rasm



21-rasm

2) Hajmi markazlashgan kubik panjaraga yacheyka burchaklarida joylashgan atomlardan tashkari yacheyka markazida joylashgan bitta atom to'g'ri keladi (19-rasm). Shunday qilib, hajmi markazlashgan elementar yacheykaga ikkita atom

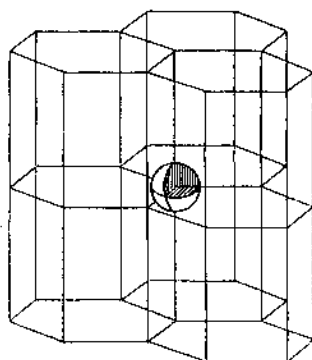
to'g'ri keladi.

3) Tomonlari markazlashgan kubik panjarada atomlar ikkita yacheykaga qarashli bo'lgan atom joylashgan bo'ladi (20-rasm). Shu sababli tomonlari markazlashgan kubik elementar yacheykaga to'rtta atom to'g'ri keladi.

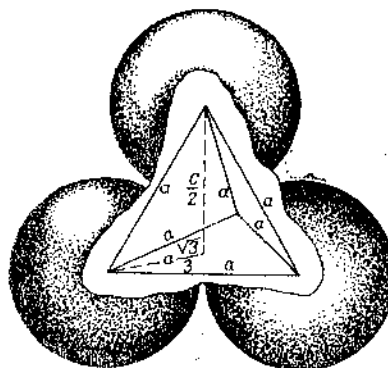
8. Geksagonal zich joylashgan panjaraning elementar yacheykasidagi atomlar soni nechaga teng.

Yechish:

Geksogonal zich joylashgan elementar yacheykaga oltita atom to'g'ri keladi. Uchta trigonal prizma markazida joylashgan uchta ichki atom (21-rasm) to'liq elementar yacheykada yotadi. Tomon asosi markazida joylashgan ikkita atomlarning yarimi bitta atomga to'g'ri keladi. Geksogonal prizma qirrasida joylashgan har bitta atom oltita elementar yacheykaga to'g'ri keladi (22-rasm). Bu o'n ikkita atomlarning hissi bitta elementar yacheykada ikkita atomga to'g'ri keladi.



22-rasm.



23-rasm.

Shunday qilib geksogonal panjara elementar yacheykasiga oltita atom to'g'ri keladi.

9. Zich joylanganli ideal geksagonal struktura uchun $\frac{c}{a}$, $\left(\frac{8}{3}\right)^{1/2} = 1,633$ ga

tengligini ko'rsating.

Yechish:

Geksagonal zich joylashgan panjara atomlari AVA sxema bo'yicha joylashib qatlam hosil qiladi . Bu panjarada uchta atom birinchi qatlamda va bitta atom ikkinchi qatlamda joylashib, $s/2$ balandlikka ega bo'lgan to'rt tomonli piramida hosil bo'ladi (23-rasm). Bunda

$$\frac{c}{2} = \sqrt{a^2 - \left(\frac{a\sqrt{3}}{3}\right)^2} = a\sqrt{\frac{2}{3}},$$

panjara davri $a=2g$, bo'lsa

$$c = 4r\sqrt{\frac{2}{3}}.$$

U holda

$$\frac{c}{a} = \frac{4r\sqrt{\frac{2}{3}}}{2r} = 2\sqrt{\frac{2}{3}} = 1.633.$$

10. Radiusi r bo'lgan qattiq sferadan iborat bir xil atomlardan oddiy kub panjara tuzilgan bo'lsin. Elementar yacheykaning yoni $a = 22$ (atomlar bir-biriga tegib turibdi). Bunday joylashishda, hajmni atomlar egallagan qismi $\frac{\pi}{6} = 0,523$ ga teng ekanligini ko'rsating.

Yechish:

Oddiy kub panjara elementar yacheykasining hajmi $V=a^3=8r^3$. Bunday yacheykaga bitta atom to'g'ri keladi va uning hajmi

$$V_1 = \frac{4}{3}\pi r^3$$

To'ldirish koeffitsiyenti elementar yacheykada joylashgan barcha atomlar hajmining elementar yacheyka hajmiga nisbati bilan xarakterlanadi.

$$k = \frac{NV_1}{V},$$

Bu yerda N - yacheykadagi atomlar soni, V_1 – atomning hajmi, V -elementar yacheyka hajmi. U holda oddiy kristall panjarani atomlar bilan to'ldirish koeffitsiyenti

$$k = \frac{V_1}{V} = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{8r^3} = \frac{\pi}{6} = 0,523.$$

11. Hajmi markazlashgan kub panjara, radiusi r bo'lgan bir xil atomlardan tashkil topgan. Kub markazidan o'tuvchi diagonal bo'yicha joylashgan atomlar bir-biriga tegib turgan bo'lsin. Bunday joylashishda hajmni atomlar egallagan qismi $\frac{\pi\sqrt{3}}{8} = 0,68$ ga tengligini ko'rsating.

Yechish:

Hajmi markazlashgan panjara (N = 2) elementar yacheykasining hajmi $\left(\frac{4}{\sqrt{3}}r\right)^3$

Bo'lsa, u holda

$$k = \frac{2 \cdot \frac{4}{3}\pi r^3}{\left(\frac{4}{\sqrt{3}}r\right)^3} = \frac{\pi\sqrt{3}}{8} = 0.68.$$

12. Qirralari markazlashgan va geksagonal panjaralar, radiusi r bo'lgan qattiq sferalardan iborat bo'lgan bir xil atomlardan tuzilgan bo'lsin. Bunday o'rnashishda hajmni atomlar egallagan qismi $\frac{\pi\sqrt{2}}{6} = 0,74$ ga tengligini ko'rsating.

Yechish:

Qirralari markazlashgan kub panjara (N=4) elementar yacheykasining hajmi yacheyka $16\sqrt{2}r^3$

U holda

$$k = \frac{4 \cdot \frac{4}{3}\pi r^3}{16\sqrt{2}r^3} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0,74.$$

Geksagonal panjara elementar yacheykasida 6 ta atom joylashgan, shu sababli to'ldirish koeffitsiyenti quyidagi ifoda orqali ifodalanadi

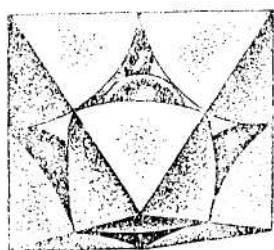
$$k = \frac{6 \cdot \frac{4}{3}\pi r^3}{24\sqrt{2}r^3} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0,74.$$

Shunday qilib, geksagonal panjarada ham qirralari markazlashgan kub

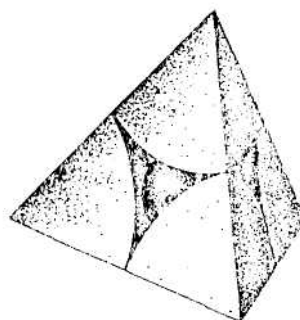
elementar yacheyka kabi panjara umumiy hajmining 74% ni atomlar bilan to'ldirar ekan

Yuqorida keltirilgan hisoblarga ko'ra eng atomlari zich joylashgan panjarada pajara umumiy hajmining 26% to'lmasdan qolar ekan

13. Teng hajmli sharlar zich o'rnashgan holdagi oktaedr (A) va tetraedr (B) bo'shliqlarda joylasha oladigan atomlarning radiusini aniqlang.



A)



B)

Yechish:

Oktaedr bo'shliqda joylashgan atom asosiy panjaraning oltita atomi bilan o'rab olingan. Oktaedr ko'ndalang kesimidan to'rtta atom markazidan va bo'shlig'ida joylashgan atom orqali tekislik o'tkazamiz.

(24-rasm). Rasmdan ko'rinib turibdiki,

$$4R^2 + 4R^2 = (2R + 2r)^2,$$

Bu yerda R - asosiy panjara atomining radiusi; r - oktaedrik bo'shliqda joylashgan atomning radiusi. Hosil bo'lgan tenglamani r ga nisbatan yechib quyidagini hosil qilamiz

$$r = R(\sqrt{2} - 1) \approx 0.41R,$$

ya'ni oktaedrik bo'shliqqa joylashtirish mumkin bo'lgan atomning radiusi 0,41 panjara atomi radiusiga teng bo'ladi.

Tetroedrik bo'shliqqa joylashgan atom bu bo'shliqni o'rab turgan barcha asosiy atomlarga tegib turishi kerak. Bu atomning markazi barcha qo'shni atomlar

markazidan bir xil uzoqlikda bo'lishi kerak, ya'ni tetraedrik bo'shliq markazi bo'shliqni o'rab turgan asosiy sharlar markazidan o'tuvchi to'g'ri chiziqlarni birlashtiruvchi tetraedr markazi hisoblanadi. Tegib turish sharti quyidagicha bo'ladi.

$$R : r = d$$

Bu yerda R – katta sharning radiusi; r - tetraedrik bo'shliqda joylashagan uncha katta bo'lmagan sharning radiusi; d -tetraedr markazidan uning uchigacha bo'lgan masofa. Shunday qilib,

$$OA = \frac{2\sqrt{3}}{3}R \text{ va}$$

$$OB = \sqrt{4R^2 \frac{4}{9} \cdot 3R^2} = 2R\sqrt{\frac{2}{3}}$$

(25-rasm), u holda bu yerdan:

$$(OB - d)^2 + OA^2 = d^2$$

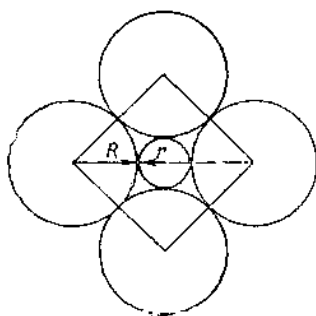
yoki

$$\left[2R\sqrt{\frac{2}{3}} - (R + r) \right]^2 + \frac{4}{3}R^2 = (R + r)^2$$

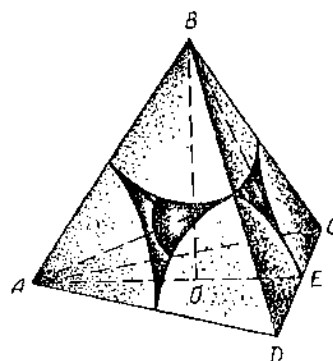
Bu tenglamani k ga nisbatan yechib

$$r = \frac{4R^2 \left(1 - \sqrt{\frac{2}{3}} \right)}{4R\sqrt{\frac{2}{3}}} = R \left(\sqrt{\frac{2}{3}} - 1 \right) = 0,22R$$

ni hosil qilamiz.



24-rasm.



25-rasm.

14. a va b atomlar r_a hamda r_b radiusli qattiq sferalardan iborat va CaCl strukturaga ega bo'lgan kristallni tashkil qilgan bo'lsin. Agar $\frac{r_a}{r_b}$ yoki $\frac{r_b}{r_a}$, 1,37 dan katta bo'lsa, kubning markazidan o'tuvchi diagonal bo'yicha joylashgan atomlar bir-biriga tega olmasligini ko'rsating.

Yechish

Struktura tipe Cs Cl turdagi strukturalarning koordinatsion soni 8 ga teng Bunday struktura turg'unligining quyi chegarasi quyidagi tenglamadan aniqlanadi.

$$2r_a + 2r_b = 2r_b\sqrt{3}$$

(26-rasm), bu yerda $\frac{r_a}{r_b} = 0,73$.

Koordinatsion soni 8 ga teng bo'lgan strukturalar turg'unligining yuqori chegarasi teskari kattalik bilan aniqlanadi.

$$\frac{r_b}{r_a} = \frac{1}{0,73} = 1,37.$$

15. Ikkita a va b element panjarasi NaCl tipida bo'lgan ab kristallni tashkil etgan. Atomlar radiuslari r_a hamda r_b bo'lgan qattiq sfera ko'rinishida deb hisoblang. $\frac{r_a}{r_b}$, 2,44 dan katta bo'lsa, kub tomonining diagonal bo'yicha joylashgan atomlar bir-biriga tega olmasligini ko'rsating.

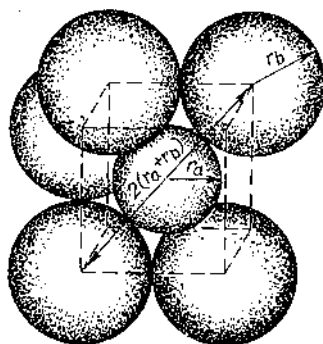
Yechish:

NaCl turidagi strukturalarning koordinatsion soni 6 ga teng. Kationni o'rab turuvchi oltita anion oktaedrning qirralari bo'ylab joylashgan. Anionlar markazlari orqali o'tuvchi oktaedr kesimi 27-rasmda ko'rsatilgan, bundan ko'rinadiki,

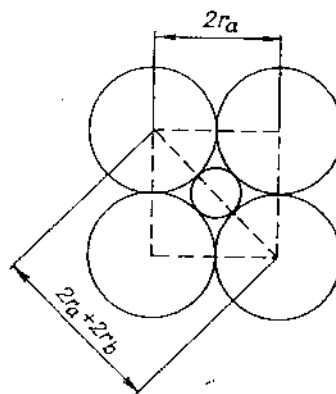
$$2r_a + 2r_b = 2r_a\sqrt{2}.$$

Bu yerdan

$$1 + \frac{r_a}{r_b} = \frac{r_a}{r_b}\sqrt{2}.$$



26-rasm.



27-rasm.

U holda

$$\frac{r_a}{r_b} = \frac{1}{\sqrt{2}-1} = 2,44.$$

Bu nisbat kordinatsion soni 6 ga teng bo'lgan mustaxkam strukturaning eng yuqori chegarasi hisoblanadi.

16. Ionli kristall panjara zaryadlari $z_1=4$ va $z_2=1$ bo'lgan ionlardan tashkil topgan. Bunday holda koordinasion soni 6 bo'lgan kristall panjaraning yuzaga kelish ehtimoli yuqoriroq ekanligini ko'rsating.

Yechish:

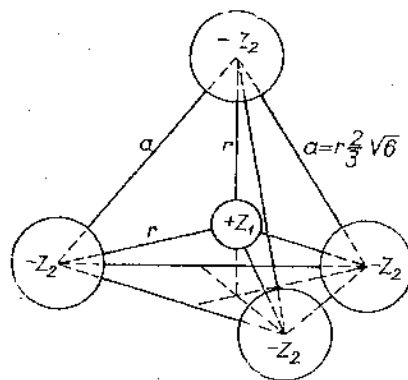
Agar zaryadlari z_1e va z_2e bo'lgan ikkita ion dielektrik singdiruvchanligi ϵ ga teng bo'lgan muhitda bir-biridan x masofada joylashgan bo'lsa, ular o'rtasida kuch ta'sirlashadi

$$F = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\epsilon x^2}.$$

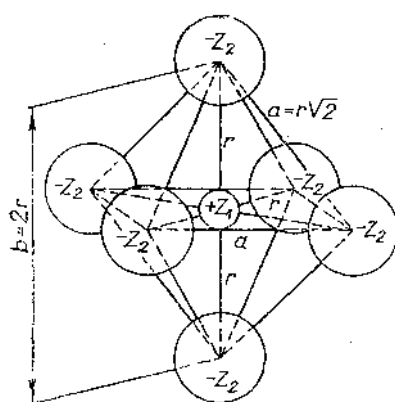
Ularni cheksizlikdan r masofagacha yaqinlashtirganda potensial energiya quyidagi kattalikka o'zgaradi.

$$A = \int_r^\infty F dx = -\frac{Z_1 Z_2 e^2}{\epsilon} \int_r^\infty \frac{dx}{x^2} = -\frac{Z_1 Z_2 e^2}{\epsilon r}.$$

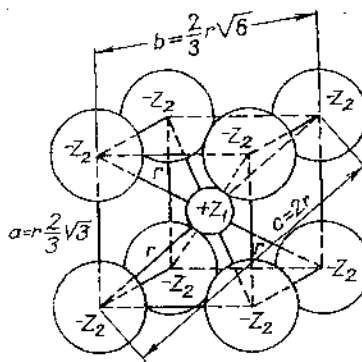
Zaryadlar sistemasidagi energiyani alohida ionlar sistemasi energiyalari yig'indisidan iborat deb qarash mumkin.



28-rasm.



29-rasm.



30-rasm.

Agar ionlar yaqinlashishi bilan koordinatsion soni 4 ga teng bo'lgan kristall panjara hosil qilsa (28-rasm) u holda bunday sistemaning potensial energiyasi

$$A_4 = -\frac{e^2}{\varepsilon} \left(4 \frac{z_1 z_2}{r} - 6 \frac{z_2 z_2}{a} \right) = -\frac{e^2}{\varepsilon r} (4z_1 z_2 - 3,68z_2^2).$$

Koordinatsion soni 6 va 8 teng bo'lgan panjaralar uchun potensial energiya mos ravishda quyidagiga teng bo'ladi:

$$A_6 = -\frac{e^2}{\varepsilon} \left(6 \frac{z_1 z_2}{r} - 12 \frac{z_2 z_2}{a} - 3 \frac{z_2 z_2}{b} \right) = \frac{e^2}{\varepsilon r} (6z_1 z_2 - 10z_2^2),$$

$$A_8 = -\frac{e^2}{\varepsilon} \left(8 \frac{z_1 z_2}{r} - 12 \frac{z_2 z_2}{a} - 12 \frac{z_2 z_2}{b} - 4 \frac{z_2 z_2}{c} \right) =$$

$$= -\frac{e^2}{\varepsilon r} (8z_1 z_2 - 19,75z_2^2)$$

$z_1 = 4$ va $z_2 = 1$, bo'lsa,

$$A_4 = -12,32 \frac{e^2}{\epsilon r}, \quad A_6 = -14 \frac{e^2}{\epsilon r}, \quad A_8 = -12,25 \frac{e^2}{\epsilon/r},$$

ya'ni koordinatsion soni 6 ga teng bo'lgan sistema energiya jihatidan eng turg'un bo'ladi.

17. Panjara o'qlarida (125) tekislikni kesib o'tuvchi kesmalarni aniqlang.

Yechish:

Kattalikni tekislikning teskari indeksi kabi yozib olamiz: $\frac{1}{1}, \frac{1}{2}, \frac{1}{5}$. Umumiy

maxraj 10 ga teng bo'ladi. Shunday qilib

$$A:B:C = \frac{1}{1} : \frac{1}{2} : \frac{1}{5}.$$

U holda $A=10, B=5, C=2$ bo'ladi.

18. Agar panjara parametrlari $a=3, b=5, c=6$ bo'lsa, kristall panjaraning 9 10 30 koordinatali tugun nuqtalaridan o'tuvchi tekisliklarning indekslarini aniqlang.

Yechish:

Kristall panjara nazariyasidan $h:k:l = \frac{a}{A} : \frac{b}{B} : \frac{c}{C}$

h, k, l – Miller indekslari

U holda

$$h:k:l = \frac{a}{A} : \frac{b}{B} : \frac{c}{C} = \frac{3}{9} : \frac{5}{10} : \frac{6}{30} = \frac{1}{3} : \frac{1}{2} : \frac{1}{5} = 10 : 15 : 6$$

Shunday qilib izlanayotgan tekislik indekslari (10 15 6).

19. (320) va (110) tomonlar berilgan. Ularning kesishishdagi yonlarining belgisini toping.

Yechish:

Ma'lumki, agar qirralarning belgilari bir xil ($h_1 k_1 l_1$) va ($h_2 k_2 l_2$) bo'lsa, u holda qirraning umumiy belgisi quyidagicha ifodalanadi:

$$h:k:l = (k_1 l_2 - l_1 k_2) : (l_1 h_2 - l_2 h_1) : (h_1 k_2 - h_2 k_1)$$

Yechimni quyidagi sxemadan ham olish mumkin

$$\begin{array}{c|ccc|c} h_1 & k_1 & l_1 & h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 & h_2 & k_2 & l_2 \end{array}$$

Bizning hol uchun

$$\begin{array}{c|ccc|c} 3 & 2 & 0 & 3 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{array}$$

Bu yerdan $h=0-0=0$, $k=0-0=0$, $l=3-2=1$

Qidirilayotgan qirraning belgisi $[001]$

20. $[130]$ va $[201]$ yon qirralar berilgan. Ular bir vaqtda yotadigan tomonning belgisini toping.

Yechish:

Yechimni quyidagi sxema bo'yicha amalga oshiramiz

$$\begin{array}{c|ccc|c} \bar{1} & 3 & 0 & \bar{1} & 3 & 0 \\ 2 & 0 & 1 & 2 & 0 & 1 \end{array}$$

U holda

$$h = 3 - 0 = 3, \quad k = 0 - \bar{1} = 1, \quad l = 0 - \bar{6} = \bar{6}.$$

Bu yerdan tomon belgisi $(31\bar{6})$ bo'ladi.

21. Geksagonal sistemadagi tekisliklarning o'rnini to'rtta indeks yordamida aniqlanadi. Geksagonal sistemaning (100) , (010) , (110) va (211) tekisliklaridagi i indeksni toping.

Yechish:

Geksagonal sistemalarda tekislikning holati to'rtta indeks yordamida aniqlanadi $(h\ k\ i\ l)$, bu yerda i indeks bog'liqmas bo'lmaydi va u h indeks orqali quyidagicha ifodalanadi: $k; -i = h + k$

Geksagonal sistemalarda ko'rsatilgan belgilar quyidagicha bo'ladi: (1010) , (0110) , (1120) va (2131)

22. Agar to'rt valentli triaminoxlorid platinani yacheykasining parametrlari va triklin burchaklari quyidagi qiymatlarga teng bo'lgan elementar yacheykasining hajmini hisoblang.

$$(a = 11,13 \text{ \AA}, b = 9,83 \text{ \AA}, c = 8,17 \text{ \AA}, \alpha = 94^\circ 9,5', \beta = 95^\circ 40', \gamma = 96^\circ 58')$$

Yechish:

Elementar yacheykaning hajmi miqdor jihatdan $\vec{a}, \vec{b}$ va $\vec{c}$ vektorlarning aralash ko'paytmasidan iborat bo'ladi:

$$V = \vec{a}[\vec{b}\vec{c}]$$

yoki

$$V = \begin{vmatrix} a_x & a_y & a_z \\ b_x & b_y & b_z \\ c_x & c_y & c_z \end{vmatrix}. \quad (*)$$

Bu yerda a_x, a_y, a_z va b.-uchta $\vec{a}, \vec{b}$ va $\vec{c}$ vektorlarning o'zaro perpendikulyar bo'lgan koordinata o'qlardagi proyeksiyasi. (*) formulaning o'ng va chap tomonlarini kvadratga ko'taramiz:

$$V^2 = \begin{vmatrix} a_x^2 + a_y^2 + a_z^2 & a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z & a_x c_x + a_y c_y + a_z c_z \\ b_x a_x + b_y a_y + b_z a_z & b_x^2 + b_y^2 + b_z^2 & b_x c_x + b_y c_y + b_z c_z \\ c_x a_x + c_y a_y + c_z a_z & c_x b_x + c_y b_y + c_z b_z & c_x^2 + c_y^2 + c_z^2 \end{vmatrix}.$$

Yig'indini determinantdagi skalyar kupaytma bilan almashtirib quyidagi ko'rinishda yozish mumkin:

$$V^2 = \begin{vmatrix} a^2 & (\vec{a}\vec{b}) & (\vec{a}\vec{c}) \\ (\vec{b}\vec{a}) & b^2 & (\vec{b}\vec{c}) \\ (\vec{c}\vec{a}) & (\vec{c}\vec{b}) & c^2 \end{vmatrix} = a^2 b^2 c^2 \begin{vmatrix} 1 & \cos \gamma & \cos \beta \\ \cos \gamma & 1 & \cos \alpha \\ \cos \beta & \cos \alpha & 1 \end{vmatrix}.$$

Determinantni yoyib chiqib ushbuga ega bo'lamiz:

$$V = abc \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma};$$

$$V = 11,13 \cdot 9,83 \cdot 8,17 (1 - \cos^2 94^\circ 9,5' - \cos^2 95^\circ 40' -$$

$$\cos^2 96^\circ 58' + 2 \cos 94^\circ 9,5' \cos 95^\circ 40' \cos 96^\circ 58')^{\frac{1}{2}} = 881 \text{ Å}^3.$$

23. Triklin sistemaning elementar yacheykasi hajmini hisoblash formulasidan foydalanib, 1) monoklin, 2) geksagonal va 3) romboedr sistemalarning elementar yacheykasi hajmini hisoblash formulasini keltirib chiqaring.

Yechish:

1) Monoklin sistemada $\alpha = \gamma = 90^\circ$. U holda

$$V = abc \sqrt{1 - \cos^2 \beta} = abc \sin \beta.$$

2) Geksagonal sistemada $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$. Bu holda

$$V = abc \sqrt{1 - \cos^2 \gamma} = abc \sin \gamma,$$

$$V = a^2 c \sin 120^\circ = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c.$$

3) Romboedrik sistemada $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$.

$$\text{U holda } V = a^3 \sqrt{1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha}.$$

24. Panjara parametrlari $a = 3,20 \text{ Å}$, $c = 5,20 \text{ Å}$ bo'lgan magniy kristallining 1 cm^3 da nechta elementar yacheyka bor.

Yechish:

Magniyning panjarasi geksagonal sistemaga oid bo'lganligi sababli, uning elementar yacheykasi hajmi

$$V = 3 \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c \approx 138,3 \cdot 10^{-24} \text{ cm}^3.$$

Bu yerdan 1 cm^3 dagi elementar yacheykalar sonini topamiz:

$$n = \frac{V_1}{V} = \frac{1}{138,3 \cdot 10^{-24}} \approx 7,2 \cdot 10^{24}.$$

25. Magniyning elementar yacheykasi geksagonal sistemaga tegishli va $a = 3,20 \text{ \AA}$, $c = 5,20 \text{ \AA}$ parametrlarga ega. Teskari panjara vektorlarini aniqlang.

Yechish:

Teskari panjara vektorlari quyidagicha aniqlanadi:

$$\vec{a}^* = \frac{[\vec{b}\vec{c}]}{a[\vec{b}\vec{c}]}, \quad \vec{b}^* = \frac{[\vec{c}\vec{a}]}{b[\vec{c}\vec{a}]}, \quad \vec{c}^* = \frac{[\vec{a}\vec{b}]}{c[\vec{a}\vec{b}]},$$

V- elementar yacheyka hajmi. $\vec{a}[\vec{b}\vec{c}] = \vec{b}[\vec{c}\vec{a}] = \vec{c}[\vec{a}\vec{b}]$ bo'lganligi sababli geksagonal panjara elementar yacheykasi hajmi

$$V = \frac{3}{2}\sqrt{3}a^2c,$$

$[\vec{b}\vec{c}] = bc$, $[\vec{c}\vec{a}] = ca$, $\alpha = \beta = 90^\circ$ bo'lganligidan

va

$$[\vec{a}\vec{b}] = ab \sin 120^\circ = \frac{ab\sqrt{3}}{2},$$

Bo'ladi, u holda

$$a^* = \frac{bc}{\frac{3}{2}\sqrt{3}a^2c} = \frac{2\sqrt{3}}{9a}, \quad a^* = \frac{2 \cdot 1,73}{9 \cdot 3,20} \approx 0,12 \text{ \AA}^{-1};$$

$$b^* = \frac{ca}{\frac{3}{2}\sqrt{3}a^2c} = \frac{2\sqrt{3}}{9a}, \quad b^* = \frac{2 \cdot 1,73}{9 \cdot 3,20} \approx 0,12 \text{ \AA}^{-1};$$

$$c^* = \frac{\frac{ab\sqrt{3}}{2}}{\frac{3}{2}\sqrt{3}a^2c} = \frac{1}{3c} \quad c^* = \frac{1}{3 \cdot 5,20} \approx 0,064 \text{ \AA}^{-1};$$

26. Hajmi markazlashgan kub panjaraning teskari tomonlari markazlashgan kub panjara bo'lishini ko'rsating.

Yechish:

Dastlab teskari kub panjaraning oddiy kub panjarasi kabi bo'lishini ko'rsatamiz.

Buning uchun burchaklar o'rtasidagi munosabatlarni yozamiz:

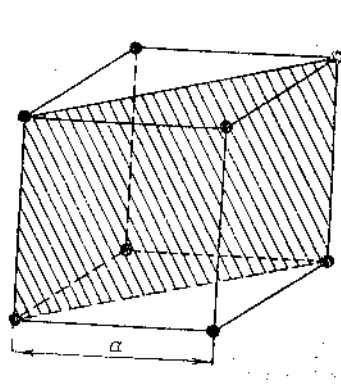
$$\cos \alpha^* = \frac{\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha}{\sin \beta \sin \gamma}.$$

$$\cos \beta^* = \frac{\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma}{\sin \alpha \sin \beta}.$$

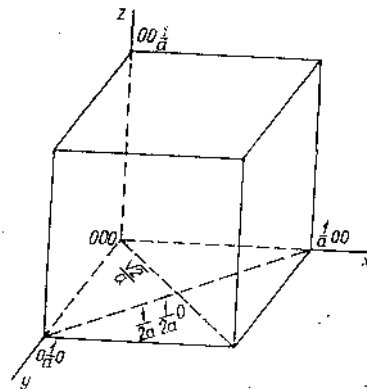
$$\cos \gamma^* = \frac{\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma}{\sin \alpha \sin \beta}.$$

Shunday qilib kub panjarada $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, u holda keltirilgan formulaga ko'ra $\alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90^\circ$ bo'ladi.

Hajmi markazlashgan panjarada kubning qirralari bo'ylab yo'nalgan tekisliklar orasidagi masofa a ga teng. O'z navbatida kubning to'g'ri panjarasi uchlaridagi atomlar teskari panjarada bir-biridan $\frac{1}{a}$ masofada joylashadi.



31-rasm.



32-rasm.

Bundan tashqari hajmi markazlashgan kub panjarada uchta tekisliklar sistemasi mavjud (110), (011) va (101) bo'lib, ular bir-biridan $\frac{a\sqrt{2}}{2}$ masofada joylashgan bo'ladi. Masalan, teskari panjaradagi (110) tekisliklar oilasiga (31-rasm) (110)

yo'nalishdagi koordinata boshidan $\frac{\sqrt{2}}{a}$ masofada joylashagan nuqta mos keladi (32-rasm). Bu nuqta teskari panjaradagi (001) tomonning markaziga mos tushadi.

27. Agar $a = 6,36 \text{ \AA}$, $\alpha = 46^\circ 6'$ bo'lsa, kalsiyning (CaCO_2) romboedr kristalli uchun teskari panjaraning vektorlarini toping.

Yechish:

Romboedrik panjarada $a = b = c$ va $\alpha = \beta = \gamma$ bo'ladi. Bunday holatda (27-masalaga qarang) teskari panjara ham xuddi romboedrik panjaradagi kabi bo'ladi, ya'ni

$$a^* = b^* = c^* \text{ va } \alpha^* = \beta^* = \gamma^*.$$

Elemantar yacheyka panjarasi hajmini topamiz:

$$V = a^3 \sqrt{1 - 3\cos^2 \alpha + 2\cos^3 \alpha} = 0,47 \cdot 6,36^3 \approx 121 \text{ \AA}^3.$$

Teskari panjara vektori

$$a^* = \frac{a^2 \sin \alpha}{V} = \frac{\sin \alpha}{0,47 \cdot 6,36} \approx 0,24 \text{ \AA}^{-1}.$$

Bulsa, u holda

$$\cos \alpha^* = \frac{\cos^2 \alpha - \cos \alpha}{\sin^2 \alpha} = \frac{\cos \alpha (\cos \alpha - 1)}{1 - \cos^2 \alpha} = -\frac{\cos \alpha}{1 + \cos \alpha},$$

$$\text{Bundan } \cos \alpha^* = -0,409. \quad \alpha^* = 114^\circ 5'.$$

28. Teskari panjaraning koordinata boshidan hkl nuqtasiga o'tkazilgan r_{hkl}^* vektor uzunligining teskari qiymati, kristall panjarasining (hkl) tekisliklari orasidagi masofaga teng ekanligini isbotlang.

Yechish:

$(h \ k \ l)$, tekislikka tushirilgan normal $\vec{n}$ birlik vektor orqali ifodalansa, u holda tekisliklar orasidagi masofa

$$d_{hkl} = \frac{(\vec{n}|\vec{a})}{h} = \frac{(\vec{n}|\vec{b})}{k} = \frac{(\vec{n}|\vec{c})}{l}.$$

Ammo

$$\vec{n} = \frac{\vec{r}_{hkl}^*}{|\vec{r}_{hkl}^*|}.$$

U holda

$$d_{hkl} = \frac{(\vec{r}_{hkl}^* \vec{a})}{|\vec{r}_{hkl}^*|}.$$

Ma'lumki $\vec{r}_{hkl}^* = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$,

U holda

$$(\vec{r}_{hkl}^* \vec{a}) = h.$$

Shunday qilib

$$d_{hkl} = \frac{h}{h|\vec{r}_{hkl}^*|} = \frac{1}{|\vec{r}_{hkl}^*|}.$$

29. ($Al_2O_3 \cdot SiO_2$) kianitning triklin panjarasidagi elementar yacheykaning a, b, c parametrlari va α, β, γ burchaklari mos ravishda $7,09; 7,72; 5,56 \text{ \AA}$ 90° $55'$; $101^\circ 2'$; $105^\circ 44'$ ga teng. (102) tekisliklar orasidagi masofani aniqlang.

Yechish:

Indeksi **(hkl)** bo'lgan tekisliklar orasidagi masofa teskari fazoda koordinata boshi **(hkl)** o'tuvchi nuqta bilan tutashtiruvchi $\vec{r}_{hkl}^*$ vektorning uzunligini aniqlash bilan topiladi. Bunda

$$d_{hkl} = \frac{1}{|\vec{r}_{hkl}^*|}.$$

Xuddi shunday

$$\vec{r}_{hkl}^* = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*,$$

bu yerda $\vec{a}^*, \vec{b}^*, \vec{c}^*$ - teskari panjaraning birlik vektori, u holda (30 masalaga qarang) quyidagini yozish mumkin:

$$\left(\frac{1}{d_{hkl}}\right)^2 = h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2} + 2hk(\vec{a}^* \vec{b}^*) + 2kl(\vec{b}^* \vec{c}^*) + 2lh(\vec{c}^* \vec{a}^*).$$

Teskari panjara vektori asosiy panjara vektori orqali quyidagicha ifodalanadi:

$$\vec{a}^* = \frac{[\vec{b}\vec{c}]}{V}, \quad \vec{b}^* = \frac{[\vec{c}\vec{a}]}{V}, \quad \vec{c}^* = \frac{[\vec{a}\vec{b}]}{V},$$

Bu yerda V -a, b va c vektorlar yordamida qurilgan elementar yacheykaning hajmi.
U holda

$$\left(\frac{1}{d_{hkl}}\right)^2 = \frac{h^2 [\vec{b}\vec{c}]^2 + k^2 [\vec{c}\vec{a}]^2 + l^2 [\vec{a}\vec{b}]^2 + 2hk([\vec{b}\vec{c}][\vec{c}\vec{a}]) + 2kl([\vec{c}\vec{a}][\vec{a}\vec{b}]) + 2lh([\vec{a}\vec{b}][\vec{b}\vec{c}])}{V^2}.$$

Belgilash kiritamiz

$$[\vec{b}\vec{c}]^2 = S_{11}, \quad [\vec{c}\vec{a}]^2 = S_{22}, \quad [\vec{a}\vec{b}]^2 = S_{33}, \\ ([\vec{b}\vec{c}][\vec{c}\vec{a}]) = S_{12}, \quad ([\vec{c}\vec{a}][\vec{a}\vec{b}]) = S_{23}, \quad ([\vec{a}\vec{b}][\vec{b}\vec{c}]) = S_{13}.$$

Vektorli va aralash kupaytirish formulalari yordamida:

$$[\vec{b}\vec{c}]^2 = b^2 c^2 \sin^2 \alpha, \quad [\vec{c}\vec{a}]^2 = c^2 a^2 \sin^2 \beta, \quad [\vec{a}\vec{b}]^2 = a^2 b^2 \sin^2 \gamma, \\ ([\vec{b}\vec{c}][\vec{c}\vec{a}]) = (\vec{b}\vec{c})(\vec{c}\vec{a}) - (\vec{b}\vec{a})(\vec{c}\vec{c}) = abc^2(\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma), \\ ([\vec{c}\vec{a}][\vec{a}\vec{b}]) = (\vec{c}\vec{a})(\vec{a}\vec{b}) - (\vec{c}\vec{b})(\vec{a}\vec{a}) = a^2 bc(\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha), \\ ([\vec{a}\vec{b}][\vec{b}\vec{c}]) = (\vec{a}\vec{b})(\vec{b}\vec{c}) - (\vec{a}\vec{c})(\vec{b}\vec{b}) = ab^2 c(\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta).$$

Quyidagini hosil qilamiz

$$\left(\frac{1}{d_{hkl}}\right)^2 = \frac{1}{V^2} (S_{11}h^2 + S_{22}k^2 + S_{33}l^2 + 2S_{12}hk + 2S_{23}kl + 2S_{13}hl).$$

Bu yerda

30. a parametrli kub panjarada (100), (110), (111) tekisliklar orasidagi masofa qanchaga teng.

Yechish:

Kub panjaradagi tekisliklar orasidagi masofa quyidagi formula yordamida aniqlanadi:

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} .$$

Bunda

$$d_{100} = a .$$

$$d_{110} = \frac{a}{\sqrt{2}} .$$

$$d_{111} = \frac{a}{\sqrt{3}} .$$

31. Panjara parametrlari $a = 10,437 \text{ \AA}$, $b = 12,845 \text{ \AA}$, $c = 24,369 \text{ \AA}$, bo'lgan romb oltingugurtdagi (201) va (310) tekisliklar orasidagi burchakni aniqlang.

Yechish:

Umumiy holda $(h_1 k_1 l_1)$ va $(h_2 k_2 l_2)$ tekisliklar o'rtasidagi burchak xuddi teskari panjara ikkita vektorlari orasidagi burchakni topish kabi aniqlanadi:

$$\cos \varphi = \frac{(\vec{r}_1^* \vec{r}_2^*)}{r_1^* r_2^*}$$

$$\vec{r}_1^* = h_1 \vec{a}^* + k_1 \vec{b}^* + l_1 \vec{c}^*$$

$$\vec{r}_2^* = h_2 \vec{a}^* + k_2 \vec{b}^* + l_2 \vec{c}^*$$

U holda

$$\begin{aligned} (\vec{r}_1^* \vec{r}_2^*) = & h_1 [h_2 (\vec{a}^* \vec{a}^*) + k_2 (\vec{b}^* \vec{a}^*) + l_2 (\vec{c}^* \vec{a}^*)] \\ & + k_1 [h_2 (\vec{a}^* \vec{b}^*) + k_2 (\vec{b}^* \vec{b}^*) + l_2 (\vec{c}^* \vec{b}^*)] \\ & + l_1 [h_2 (\vec{a}^* \vec{c}^*) + k_2 (\vec{b}^* \vec{c}^*) + l_2 (\vec{c}^* \vec{c}^*)] . \end{aligned}$$

Bu yerda

$$\vec{a}^* = \frac{[\vec{b}\vec{c}]}{V}, \quad \vec{b}^* = \frac{[\vec{c}\vec{a}]}{V}, \quad \vec{c}^* = \frac{[\vec{a}\vec{b}]}{V},$$

Bo'lsa, u holda

$$\begin{aligned} (\vec{r}_1^* \vec{r}_2^*) &= \frac{h_1}{V^2} \{h_2([\vec{b}\vec{c}][\vec{b}\vec{c}]) + k_2([\vec{c}\vec{a}][\vec{b}\vec{c}]) + l_2([\vec{a}\vec{b}][\vec{b}\vec{c}])\} + \\ &+ \frac{k_1}{V^2} \{h_2([\vec{b}\vec{c}][\vec{c}\vec{a}]) + k_2([\vec{c}\vec{a}][\vec{c}\vec{a}]) + l_2([\vec{a}\vec{b}][\vec{c}\vec{a}])\} + \\ &+ \frac{l_1}{V^2} \{h_2([\vec{b}\vec{c}][\vec{a}\vec{b}]) + k_2([\vec{c}\vec{a}][\vec{a}\vec{b}]) + l_2([\vec{a}\vec{b}][\vec{a}\vec{b}])\}. \end{aligned}$$

Vektor kupaytmani ochib chiqamiz:

$$\begin{aligned} (\vec{r}_1^* \vec{r}_2^*) &= \frac{1}{V^2} [S_{11}h_1h_2 + S_{22}k_1k_2 + S_{33}l_1l_2 + S_{23}(k_1l_2 + k_2l_1) + \\ &+ S_{13}(l_1h_2 + l_2h_1) + S_{12}(h_1k_2 + h_2k_1)], \end{aligned}$$

Bu yerda $S_{11}, S_{12}, S_{13}, S_{22}, S_{23}$ va S_{33} 31 masaladagidek qiymatlarni qabul qiladi. U holda

$$\begin{aligned} \cos \varphi &= \frac{d_1 d_2}{V^2} [S_{11}h_1h_2 + S_{22}k_1k_2 + S_{33}l_1l_2 + S_{23}(k_1l_2 + k_2l_1) + \\ &+ S_{13}(l_1h_2 + l_2h_1) + S_{12}(h_1k_2 + h_2k_1)] \end{aligned}$$

Yoki d_1 va d_2 ga ularning qiymatlarini (32 masaladagi) keltirib qo'ysak,

$$\begin{aligned} \cos \varphi &= [S_{11}h_1h_2 + S_{22}k_1k_2 + S_{33}l_1l_2 + S_{23}(k_1l_2 + k_2l_1) + \\ &+ S_{13}(l_1h_2 + l_2h_1) + S_{12}(h_1k_2 + h_2k_1)] (S_{11}h_1^2 + S_{22}k_1^2 + \\ &+ S_{33}l_1^2 + 2S_{12}h_1k_2 + 2S_{23}k_1l_1 + 2S_{13}h_1l_1)^{-\frac{1}{2}} (S_{11}h_2^2 + \\ &+ S_{22}k_2^2 + S_{33}l_2^2 + 2S_{12}h_2k_2 + 2S_{23}k_2l_2 + 2S_{13}h_2l_2)^{-\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

Hosil qilingan formula yordamida ixtiyoriy kristallografik sistemadagi ikkita tekislik orasidagi burchakni topish mumkin.

Rombik sistemlarda, ya'ni $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ булганда, formula ancha soddalashadi va quyidagicha ko'rinishga ega bo'ladi:

$$\cos \varphi = - \frac{\frac{h_1 h_2}{a^2} + \frac{k_1 k_2}{b^2} + \frac{l_1 l_2}{c^2}}{\sqrt{\left(\frac{h_1^2}{a^2} + \frac{k_1^2}{b^2} + \frac{l_1^2}{c^2}\right) \left(\frac{h_2^2}{a^2} + \frac{k_2^2}{b^2} + \frac{l_2^2}{c^2}\right)}};$$

$$\cos \varphi = \frac{\frac{2 \cdot 3}{10,437^2}}{\sqrt{\left(\frac{4}{10,437^2} + \frac{1}{24,369^2}\right) \left(\frac{9}{10,437^2} + \frac{1}{12,845^2}\right)}} \approx 0,9565, \quad \varphi \approx 17^\circ.$$

32. Panjara parametrlari $a = 4,50 \text{ \AA}$, $c = 7,64 \text{ \AA}$ bo'lgan galliyning tetragonal kristallining (110) va (102) tekisliklari orasidagi burchakni aniqlang.

Yechish:

Tetragonal kristallardagi tekisliklar orasidagi burchak (34 masaladagi) umumiy formula yordamida hisoblanadi. Tetragonal panjaralar uchun $a = b \neq c$ va $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ bo'lsa, u holda

$$\begin{aligned} \cos \varphi &= \frac{\frac{h_1 h_2}{a^2} + \frac{k_1 k_2}{a^2} + \frac{l_1 l_2}{c^2}}{\sqrt{\left(\frac{h_1^2 + k_1^2}{a^2} + \frac{l_1^2}{c^2}\right) \left(\frac{h_2^2 + k_2^2}{a^2} + \frac{l_2^2}{c^2}\right)}}; \\ \cos \varphi &= \frac{\frac{1 \cdot 1}{4,50^2} + \frac{1 \cdot 0}{4,50^2} + \frac{1 \cdot 2}{7,64^2}}{\sqrt{\left(\frac{1+1}{4,50^2} + \frac{1}{7,64^2}\right) \left(\frac{1}{4,50^2} + \frac{4}{7,64^2}\right)}} = \\ &= \frac{0,049 + 0,034}{\sqrt{(0,098 + 0,017)(0,049 + 0,068)}} \approx 0,7167, \quad \varphi \approx 44^\circ 13'. \end{aligned}$$

33. Kub kristallning (100) va (010) tomonlari hosil qilgan burchakni toping. Romboedr sistemada ikkita $(h_1 k_1 l_1)$ va $(h_2 k_2 l_2)$ tekisliklarning o'zaro perpendikulyarlik shartini aniqlang.

Yechish:

Kub kristallar uchun

$$\cos \varphi = \frac{\frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{a^2}}{\sqrt{\left(\frac{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2}{a^2}\right) \left(\frac{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}{a^2}\right)}} =$$

$$= \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{\sqrt{(h_1^2 + k_1^2 + l_1^2)(h_2^2 + k_2^2 + l_2^2)}}.$$

Son qiymatlari qo'yilgandan so'ng

$$\cos \varphi = 0, \quad \varphi = \frac{\pi}{2},$$

ya'ni, kub kristallarda (100) va (010) tekisliklar o'zaro perpendikulyar bo'lar ekan.

34. Parametrlari $a = 11,13 \text{ \AA}$, $b = 9,83 \text{ \AA}$, $c = 8,17 \text{ \AA}$, $\alpha = 94^\circ 9,5'$, $\beta = 95^\circ 40'$, $\gamma = 96^\circ 58'$,

bo'lgan triklin panjarada, [332] yo'nalish bo'ylab, koordinata boshidan birinchi atomgacha bo'lgan kesmaning uzunligini aniqlang.

Yechish:

Umumiy holda ikkita tekislik o'zaro perpendikulyar bo'lishi uchun quyidagi shart bajarilishi kerak

$$S_{11}h_1h_2 + S_{22}k_1k_2 + S_{33}l_1l_2 + S_{23}(k_1l_2 + k_2l_1) +$$

$$+ S_{13}(l_1h_2 + l_2h_1) + S_{12}(h_1k_2 + h_2k_1) = 0.$$

Romboedrik sistemalarda $a = b = c$, $\alpha = \beta \neq 90^\circ$ bo'lganligi uchun

$$S_{11} = a^4 \sin^2 \alpha,$$

$$S_{22} = a^4 \sin^2 \alpha,$$

$$S_{33} = a^4 \sin^2 \alpha$$

$$S_{12} = a^4 (\cos^2 \alpha - \cos \alpha) = a^4 \cos \alpha (\cos \alpha - 1),$$

$$S_{23} = a^4 \cos \alpha (\cos \alpha - 1),$$

$$S_{13} = a^4 \cos \alpha (\cos \alpha - 1).$$

Romboedrik sistemalarda ikkita tekislik o'zaro perpendikulyarlik sharti quyidagicha yoziladi:

$$\sin^2 \alpha (h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2) - \cos \alpha (\cos \alpha - 1)(k_1 l_2 + k_2 l_1 + l_1 h_2 + l_2 h_1 + h_1 k_2 + h_2 k_1) = 0.$$

35. Parametrlari $a = 11,13 \text{ \AA}$, $b = 9,83 \text{ \AA}$, $c = 8,17 \text{ \AA}$, $\alpha = 94^\circ 9,5'$, $\beta = 95^\circ 40'$, $\gamma = 96^\circ 58'$, bo'lgan triklin panjarada, [332] yo'nalish bo'ylab, koordinata boshidan birinchi atomgacha bo'lgan kesmaning uzunligini aniqlang.

Yechish:

Aytaylik berilgan nuqtaning koordinatasi $u v \omega$ bo'lsin. U holda $\vec{I}_{u v \omega}$ vektor affin koordinatalar sistemasida (33-rasm) quyidagi tenglik bilan aniqlanadi:

$$\vec{I}_{u v \omega} = u\vec{a} + v\vec{b} + \omega\vec{c}.$$

$\vec{I}_{u v \omega}$ vektorni o'z-o'ziga skalyar ko'paytiramiz, ya'ni bu vektorni kvadratga ko'taramiz. Analitik geometriya formulalariga ko'ra

$$\vec{I}_{u v \omega}^2 = \sum_{k=1}^3 \sum_{i=1}^3 a_i a_k q_{ik}$$

yoki yoyilgan ko'rinishi

$$\vec{I}_{u v \omega}^2 = u[u(\vec{a}\vec{a}) + v(\vec{b}\vec{a}) + \omega(\vec{c}\vec{a})] + v[u(\vec{a}\vec{b}) + v(\vec{b}\vec{b}) + \omega(\vec{c}\vec{b})] + \omega[u(\vec{a}\vec{c}) + v(\vec{b}\vec{c}) + \omega(\vec{c}\vec{c})].$$

$$(\vec{a}\vec{a}) = (\vec{b}\vec{b}) = (\vec{c}\vec{c}) = 1, (\vec{b}\vec{a}) = \cos \gamma, (\vec{c}\vec{a}) = \cos \beta,$$

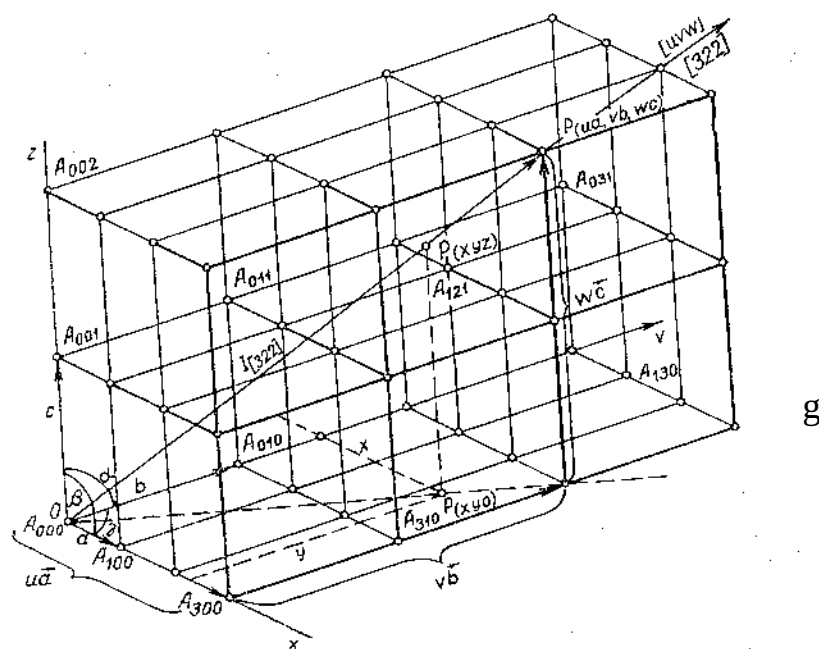
$$(\vec{b}\vec{c}) = \cos \alpha.$$

Bo'lsa, u holda

$$\vec{I}_{u v \omega}^2 = a^2 u^2 + b^2 v^2 + c^2 \omega^2 + 2bcv\omega \cos \alpha + 2ca\omega u \cos \beta + 2abuv \cos \gamma,$$

Bu yerdan

$$I_{u v \omega} = (a^2 u^2 + b^2 v^2 + c^2 \omega^2 + 2bcv\omega \cos \alpha + 2ca\omega u \cos \beta + 2abuv \cos \gamma)^{\frac{1}{2}};$$



33-rasm.

$$I_{uvw} = (11,13^2 \cdot 9 + 9,83^2 \cdot 4 + 8,17^2 \cdot 4 + 2 \cdot 9,83 \cdot 8,17 \cos 94^\circ 9' + \\ + 2 \cdot 8,17 \cdot 11,13 \cos 95^\circ 40' + 2 \cdot 11,13 \cdot 9,83 \cos 96^\circ 58')^{\frac{1}{2}} \approx 41,36$$

36. 1) monoklin, 2) romb, 3) tetragonal va 4) geksagonal kristallarda aynan o'xshashlik davri uchun formulalarni yozing.

Yechish:

Oldingi masalada hosil qilingan formula $\vec{I}_{uvw}$ ixtiyoriy koordinata o'quqida xisoblashga mo'ljallangan:

1) Monoklin sistemada, $\alpha = \gamma = 90^\circ$

$$I_{uvw} = \sqrt{a^2 u^2 + b^2 v^2 + c^2 \omega^2 + 2ca\omega u \cos \beta}$$

2) Romb sistemada, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

$$I_{uvw} = \sqrt{a^2 u^2 + b^2 v^2 + c^2 \omega^2}$$

3) Tetragonal sistemalarda $a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$,

$$I_{uvw} = \sqrt{a^2 (u^2 + v^2) + c^2 \omega^2}$$

4) Geksagonal sistemalarda

$$a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$$

$$I_{uv\omega} = a \sqrt{u^2 + v^2 + \frac{c^2 \omega^2}{a^2} - uv}$$

37. β selenning monoklin panjarasi quyidagi parametrlarga ega:

$a = 12,85 \text{ \AA}$, $b = 8,07 \text{ \AA}$, $c = 9,31 \text{ \AA}$, $\beta = 93^\circ 8'$. **Koordinata boshi va 100 koordinatali nuqtadan o'tuvchi to'g'ri chiziq bilan (102) tekislik orasidagi burchakni aniqlang.**

Yechish

To'g'ri chiziq va tekislik orasidagi burchak xuddi teskari panjaraning (hkl) tekisligiga perpendikulyar bo'lgan to'g'ri chiziq va vektor orasidagi burchakni topish kabi aniqlanadi:

$$\cos \varphi = \frac{(\vec{I}_{uv\omega} \vec{r}_{hkl}^*)}{I_{uv\omega} r_{hkl}^*},$$

Bu yerda $\vec{I}_{uv\omega} = \vec{a}u + \vec{b}v + \vec{c}\omega$, $\vec{r}_{hkl}^* = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$

$\vec{a}^*, \vec{b}^*, \vec{c}^*$, – teskari panjaraning birlik vektori.

U holda

$$(\vec{I}_{uv\omega} \vec{r}_{hkl}^*) = h[(u(\vec{a}\vec{a}^*) + v(\vec{b}\vec{a}^*) + \omega(\vec{c}\vec{a}^*)) + k[u(\vec{a}\vec{b}^*) + v(\vec{b}\vec{b}^*) + \omega(\vec{c}\vec{b}^*)] + l[u(\vec{a}\vec{c}^*) + v(\vec{b}\vec{c}^*) + \omega(\vec{c}\vec{c}^*)].$$

Bu ifodani quyidagicha qayta o'zgartirish mumkin:

$$(\vec{I}_{uv\omega} \vec{r}_{hkl}^*) = \frac{hu(\vec{a}[\vec{b}\vec{c}])}{V} + \frac{hv(\vec{b}[\vec{b}\vec{c}])}{V} + \frac{h\omega(\vec{c}[\vec{b}\vec{c}])}{V} + \frac{ku(\vec{a}[\vec{c}\vec{a}])}{V} + \frac{kv(\vec{b}[\vec{c}\vec{a}])}{V} + \frac{k\omega(\vec{b}[\vec{c}\vec{a}])}{V} + \frac{lu(\vec{a}[\vec{a}\vec{b}])}{V} + \frac{lv(\vec{b}[\vec{a}\vec{b}])}{V} + \frac{l\omega(\vec{c}[\vec{a}\vec{b}])}{V}.$$

$$(\vec{b}[\vec{b}\vec{c}]) = (\vec{c}[\vec{b}\vec{c}]) = (\vec{a}[\vec{c}\vec{a}]) = (\vec{c}[\vec{c}\vec{a}]) = (\vec{a}[\vec{a}\vec{b}]) = (\vec{b}[\vec{a}\vec{b}]) = 0$$

Desak, u holda

$$(\vec{I}_{uv\omega} \vec{r}_{hkl}^*) = hu + kv + c\omega.$$

Shu sababli

trikliin panjara uchun

$$\cos\varphi = (hu + kv + c\omega)V(a^2u^2 + b^2v^2 + c^2\omega^2 + 2bcv\omega\cos\alpha + 2ca\omega u\cos\beta + 2abuv\cos\gamma)^{-\frac{1}{2}}(S_{11}h^2 + S_{22}k^2 + S_{33}l^2 + 2S_{12}hk + 2S_{23}kl + 2S_{13}hf)^{-\frac{1}{2}}.$$

Monoklin panjara uchun $\alpha = \gamma = 90^\circ$ bo'lsa, u holda

$$\cos\varphi = \frac{(hu + kv + l\omega)V}{\sqrt{a^2u^2 + b^2v^2 + c^2\omega^2 + 2ca\omega u\cos\beta}} \times \frac{1}{\sqrt{b^2c^2h^2 + a^2c^2k^2\sin^2\beta + a^2b^2l^2 - 2ab^2chl\cos\beta}}$$

Biz qarayotgan holda $v = \omega = 0$ i $k = 0$ ekanligini xisobga olsak

$$\cos\varphi = \frac{hV}{\sqrt{b^2c^2h^2 + a^2b^2l^2 - 2ab^2chl\cos\beta}}.$$

Kristalla elementar yacheykasi hajmini topamiz

$$V = abc \begin{vmatrix} 1 & 0 & \cos\beta \\ 0 & 1 & 0 \\ \cos\beta & 0 & 1 \end{vmatrix}^{\frac{1}{2}} = abc/\sin\beta;$$

$$V = 12,85 \cdot 8,07 \cdot 9,31 \sin 93^\circ 8' \approx 964 \text{ \AA}^2,$$

bunda

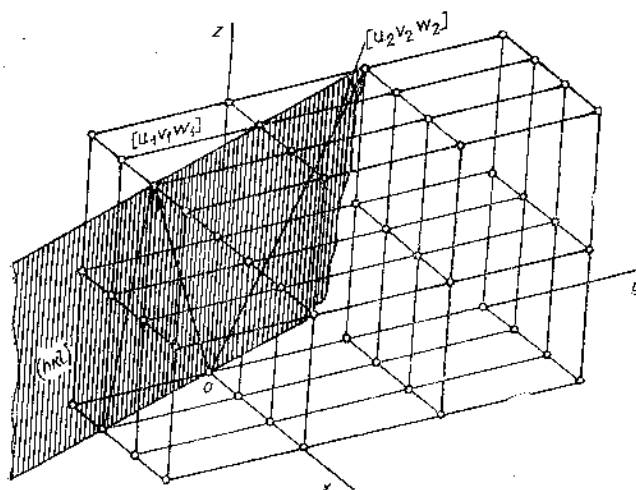
$$\cos\varphi = 964 \cdot 12,85^{-1} (8,07^2 \cdot 9,31^2 + 12,85^2 \cdot 8,07^2 \cdot 4 - 2 \cdot 12,85 \times 8,07^2 \cdot 9,31 \cos 93^\circ 8')^{\frac{1}{2}} = \frac{964}{1687,2} = 0,5713, \quad \varphi \approx 55^\circ 10'$$

38. Kub kristallda ixtiyoriy $[hkl]$ yo'nalish Miller indeksi qiymatlari xuddi shunday bo'lgan (hkl) tekislikka perpendikulyar ekanligini isbotlang.

Yechish

$[uvw]$ to'g'ri chiziq va (hkl) tekisliklarning perpendikulyarlik shartiga ko'ra

$$\cos\varphi = 1 \text{ i } \varphi = 0$$



34-rasm.

Kub sistemalar uchun (hkl) tekislik va ko'rsatilgan yo'nalish $[uvw]$ o'rtasidagi burchak quyidagi formula yordamida aniqlanadi

$$\cos\varphi = \frac{(hu + kv + l\omega)a^3}{\sqrt{u^2 + v^2 + \omega^2}a^2 \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} = \frac{hu + kv + l\omega}{\sqrt{u^2 + v^2 + \omega^2} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

$u = h, v = k, \omega = l$ bo'lganda formula quyidagi ko'rinishga ega bo'ladi:

$$\cos\varphi = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} = 1$$

Bu yerdan $\varphi = 0$, ya'ni (hkl) indeksdagi tekislik, xuddi shunday Miller indeksli yo'nalish bilan har doim perpendikulyar bo'ladi.

39. Panjara parametrlari $a = 4,88 \text{ \AA}$, $b = 6,66 \text{ \AA}$, $c = 8,32 \text{ \AA}$ bo'lgan, mis kuporosining romb panjarasidagi ikkita $[101]$ va $[102]$ to'g'ri chiziqlar orasidagi burchakni hisoblang.

Yechish:

Bir-biriga yaqin bo'lgan $[u_1 \ v_1 \ w_1]$ va $[u_2 \ v_2 \ w_2]$ belgili o'qlar berilgan bo'lsin (34-rasm). Berilgan yo'nalish bo'ylab olingan kesmalarning kattaligi kristal panjaraning koordinata boshidan to birinchi atomgacha bo'lgan masofa quyidagi ifoda orqali ifodalanadi:

$$\vec{l}_{u_1 v_1 w_1} = \vec{a}u_1 + \vec{b}v_1 + \vec{c}w_1,$$

$$\vec{I}_{u_2 v_2 \omega_2} = \vec{a}u_2 + \vec{b}v_2 + \vec{c}\omega_2.$$

U yolda

$$\cos\varphi = \frac{(\vec{I}_{u_1 v_1 \omega_1} \vec{I}_{u_2 v_2 \omega_2})}{|I_{u_1 v_1 \omega_1} I_{u_2 v_2 \omega_2}|},$$

Bu yerda $|I_{u_1 v_1 \omega_1}|$ va $|I_{u_2 v_2 \omega_2}|$ $-\vec{I}_{u_1 v_1 \omega_1} \vec{I}_{u_2 v_2 \omega_2}$ kesmalar moduli

$$\begin{aligned} (\vec{I}_{u_1 v_1 \omega_1} \vec{I}_{u_2 v_2 \omega_2}) &= u_1 [u_2 (\vec{a}\vec{a}) + v_2 (\vec{b}\vec{a}) + \omega_2 (\vec{c}\vec{a})] + \\ &+ v_1 [u_2 (\vec{a}\vec{b}) + v_2 (\vec{b}\vec{b}) + \omega_2 (\vec{c}\vec{b})] + \omega_1 [u_2 (\vec{a}\vec{c}) + v_2 (\vec{b}\vec{c}) + \omega_2 (\vec{c}\vec{c})] \end{aligned}$$

yoki

$$\begin{aligned} (\vec{I}_{u_1 v_1 \omega_1} \vec{I}_{u_2 v_2 \omega_2}) &= a^2 u_1 u_2 + b^2 v_1 v_2 + c^2 \omega_1 \omega_2 + bc(v_1 \omega_2 + v_2 \omega_1) \cos\alpha + \\ &+ ac(\omega_1 u_2 + \omega_2 u_1) \cos\beta + ab(u_1 v_2 + u_2 v_1) \cos\gamma \end{aligned}$$

Endi $\cos\varphi$ ni topamiz:

$$\begin{aligned} \cos\varphi &= [a^2 u_1 u_2 + b^2 v_1 v_2 + c^2 \omega_1 \omega_2 + bc(v_1 \omega_2 + v_2 \omega_1) \cos\alpha + \\ &+ ac(\omega_1 u_2 + \omega_2 u_1) \cos\beta + ab(u_1 v_2 + u_2 v_1) \cos\gamma] (a^2 u_1^2 + b^2 v_1^2 + c^2 \omega_1^2 + \\ &+ 2bcv_1 \omega_1 \cos\alpha + 2ac\omega_1 u_1 \cos\beta + 2abu_1 v_1 \cos\gamma)^{-\frac{1}{2}} (a^2 u_2^2 + b^2 v_2^2 + \\ &+ c^2 \omega_2^2 + 2bcv_2 \omega_2 \cos\alpha + 2ac\omega_2 u_2 \cos\beta + 2abu_2 v_2 \cos\gamma)^{-\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

Romb sistemalar uchun formula ancha soddalashadi: ($\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$)

$$\cos\varphi = \frac{u_1 u_2 a^2 + v_1 v_2 b^2 + \omega_1 \omega_2 c^2}{\sqrt{a^2 u_1^2 + b^2 v_1^2 + c^2 \omega_1^2} \sqrt{a^2 u_2^2 + b^2 v_2^2 + c^2 \omega_2^2}};$$

$$\cos\varphi = \frac{1 \cdot 2 \cdot 8,32^2}{\sqrt{4,88^2 + 8,32^2} \sqrt{6,66^2 + 4 \cdot 8,32^2}} \approx 0,810, \quad \varphi \approx 36^\circ 46'.$$

40. Elementar yacheykasi parametrlari $a = 9,42 \text{ \AA}$, $b = 12,64 \text{ \AA}$, $c = 5,73 \text{ \AA}$ **va**
monoklinlik burchagi $\beta = 110^\circ 23'$ **bo'lgan triglisinsulfat**

$(\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH})_3 \cdot \text{H}_2\text{SO}_4$ kristallidagi [102] va [210] yo'nalishlar orasidagi burchakni aniqlang.

Yechish

Monoklin panjaradagi ikkita $[u_1 v_1 \omega_1]$ va $[u_2 v_2 \omega_2]$ yo'nalishlar orasidagi burchak quyidagi formula orqali topiladi:

$$\cos \varphi = \frac{u_1 u_2 a^2 + v_1 v_2 b^2 + \omega_1 \omega_2 c^2 + ac(\omega_1 u_2 + \omega_2 u_1) \cos \beta}{\sqrt{a^2 u_1^2 + b^2 v_1^2 + c^2 \omega_1^2 + 2ac\omega_1 u_1 \cos \beta}} \times \\ \times \frac{1}{\sqrt{a^2 u_2^2 + b^2 v_2^2 + c^2 \omega_2^2 + 2ac\omega_2 u_2 \cos \beta}}.$$

Bizning holimizda $v_1 = \omega_2 = 0$ u holda

$$\cos \varphi = \frac{u_1 u_2 a^2 + ac\omega_1 u_2 \cos \beta}{\sqrt{a^2 u_1^2 + c^2 \omega_1^2 + 2ac\omega_1 u_1 \cos \beta} \sqrt{a^2 u_2^2 + b^2 v_2^2}}; \\ \cos \varphi = \frac{9,42^2 \cdot 2 - 9,42 \cdot 5,73 \cdot 4 \cos 69^\circ 37'}{\sqrt{9,42^2 + 5,73^2 \cdot 4 - 2 \cdot 5,73 \cdot 9,42 \cdot 2 \cos 69^\circ 37'}} \times \\ \times \frac{1}{\sqrt{9,42^2 \cdot 4 + 12,64^2}} = \frac{102,28}{\sqrt{46,37} \sqrt{514,71}} \approx 0,6623, \quad \varphi \approx 48,5^\circ.$$

41. Kubning qirrasi bilan fazoviy diagonali orasidagi burchakni aniqlang.

Yechish

Masalani yechish $[111]$ va $[100], [010], [001]$ yunalishlar orasidagi burchakni topish bilan amalga oshiriladi. Kub panjarada ikkita yo'nalish orasidagi burchak quyidagi formula yordamida aniqlanadi:

$$\cos \varphi = \frac{u_1 u_2 + v_1 v_2 + \omega_1 \omega_2}{\sqrt{u_1^2 + v_1^2 + \omega_1^2} \sqrt{u_2^2 + v_2^2 + \omega_2^2}}; \\ \cos \varphi = \frac{1}{\sqrt{3}} = \frac{\sqrt{3}}{3} = 0,5766, \quad \varphi = 54^\circ 48'.$$

Xulosa

Mazkur malakaviy bitiruv ishi yuzasidan bajarilgan ishlar ko'lamida quyidagi xulosalarga kelish mumkin:

1. Adabiyotlarni o'rganish asosida kristallar simmetriya elementlari (oddiy va murakkab simmetriya elementlari) to'g'risida ma'lumotlar to'plandi va ularning belgilanishlari o'rganib chiqildi.
2. Kristallar elementar yacheykalari turiga qarab kristalografik singoniyalarga ajratilishi va har bir singoniyaga tegishli elementar yacheykalar simmetriya elementlari keltirildi va o'rganib chiqildi.
3. Kristalda mavjud bo'lishi mumkin bo'lgan elementar yacheykalar soni chegaralanganligi va ular Bragg panjaralari deb atalishi o'rganildi.
4. Bragg panjaralarini to'liq tasavvur qilish maqsadida 3D MAX dasturi asosida ularning jonli harakatini tasvirlash animasiyasi tayyorlandi.
5. Kristallografiya asoslari bo'limiga oid 41 ta masala to'plandi va bu masalalarning yechimlari to'liq yechib ko'rsatildi.

ADABIYOTLAR

1. М.П. Шасколская. Кристаллография. «Висшая школа», М. 1976.
2. И.С. Желудев. Физика кристаллов и симметрий. «Наука», М. 1987.
3. Б.Ф. Ормонт. Введение в физическую химию и кристаллохимию полупроводников. «Висшая школа», М. 1973.
4. И.И. Шафрановский. Симметрия в природе. «Недра», Л. 1985.
5. Е. Вигнер. Етюды о симметрии. Перевод с английского под ред. Я. А. Смородинского. «Мир», М. 1971.
6. У. Бустер. Применение тензоров и теории групп для описания физических свойств кристаллов. «Мир», М. 1977.