

**ÓZBEKISTAN RESPUBLIKASÍ JOQARÍ HÁM ORTA ARNAWLÍ
BILIMLENDIRIW MINISTRILIGI**

**BERDAQ ATÍNDAGÍ QARAQALPAQ MÁMLEKETLIK
UNIVERSITETI**

MAGISTRATURA BÓLIMI

Qol jazba huqíqunda

UDK 621.382:53

Madaminov Baxtiyar Nurullaevich

**FAZALÍQ AYLANÍSLARDAĞÍ HÁM DOMENLERDÍN
TRANSFORMACIYALARÍNDAGÍ DEFEKTLERDÍN STRUKTURANÍ
TÚRLENDIRIWSHI ELEMENTLERISÍPATÍNDÁ**

5A140204 – Kondensaciyalanğan ortalıqlar fizikası hám
materialtanıw qánigeligi boyınsha magistr akademiyalıq dárejesin alıw ushın
jazılğan dissertaciya

MAK da jaqlawğa ruxsat

Magistratura bólimi baslıǵı:

_____ doc. Gulimov A.

Ilimiy basshı: _____ prof. B.A. Abdikamalov

Kafedra baslıǵı: _____ prof. B.A. Abdikamalov

Nókis-2017

Mazmunı

| | |
|---|-----------|
| Kirisiw..... | 3 |
| I BAP. Sırtqı tásirler astında júzege keletuǵın fazalıq ótiwlerdegi kristallıq denelerdiń atomlıq-kristallıq strukturasınıń hám substrukturasınıń qáliplesiw nızamlıqları..... | 7 |
| 1.1-§. Kristallıq denelerdegi fazalıq ótiwlerdiń kristallofizikalıq aspektleri..... | 7 |
| 1.2-§. Domenler sistemaları arasındaqı strukturalıq transformacijalar.... | 14 |
| 1.3-§. Strukturalıq qayta qurıwlar processiniń qaytımlıǵı hám formanı este saqlaw effekti..... | 17 |
| 1.4-§. Juvmaqlar hám máseleniń qoyılıwı..... | 21 |
| II BAP. Eksperimentallıq izertlewler usılları..... | 24 |
| 2.1-§. Rentgen difraktometriyası..... | 24 |
| 2.2-§. Rentgenografiyalıq aylanıw hám terbeliw usılları..... | 26 |
| 2.3-§. Polikristallardı izertlew usılları..... | 38 |
| 2.4-§. Mathematica kompyuterlik algebra hám Delphy programmalaw tilleriniń járdeminde rentgendifrakciyalıq eksperimentlerdi modellestiriw.... | 42 |
| III BAP. Samariy monosulfidi, SmS hám GdS birikpeleriniń quymasındaǵı fazalıq ótiwlerdi rentgenografiyalıq izertlewler..... | 49 |
| 3.1-§. Samariy monosulfidi (SmS) kristallarındaǵı metall-yarım ótkizgish fazalıq ótiwleri..... | 49 |
| 3.2-§. SmS hám $Sm_{1-x}Gd_xS$ quymalarındaǵı fazalıq ótiwdiń saldarınan payda bolatuǵın mexanikalıq kernewlerdiń mánisin esaplaw..... | 58 |
| 3.3-§. $Sm_{0.85}Gd_{0.15}S$ quymasındaǵı fazalıq ótiw..... | 61 |
| 3.4-§. Hidrostatikalıq basım astındaǵı hám temperatura ózgergendegi $Sm_{0.8}Gd_{0.2}S$ quymasındaǵı izomorflıq fazalıq ótiwler..... | 64 |
| Juvmaqlaw..... | 72 |
| Paydalanılǵan ádebiyatlardıń dizimi..... | 73 |

Kirisiw

Dissertaciya jumısının tiykarlanıwı hám aktuallıǵı. Kristallıq denelerdegi strukturalıq defektler haqqındaǵı maǵlıwmatlar menen bul mashqala boyınsha orınlangan eksperimentallıq hám teoriyalıq jumislardıń nátiyjeleri kondensaciyalangan ortalıqlar fizikası hám onıń menen tikkeley baylanıslı bolǵan fizika menen texnikanıń tarawlarında islewshi qánigeler ushın oǵada áhmiyetli. Kristallardaǵı strukturalıq defektler haqqındaǵı tálimat qattı deneler fizikasınıń keń bóliminiń birine aylandı.

Jer júzindegi eń aldınǵı laboratoriyalarında tabıslı túrde islep atırǵan izertlewshilerdiń miynetleriniń nátiyjesinde fazalıq ótiw, elastik deformaciya, elektromagnitlik maydanlardıń, radiaciyanıń tásiiri sıyaqlı qubılıslar menen baylanıslı bolǵan kristallıq reshetkanıń qurılısınıń ózgerisleri haqqındaǵı kóz-qaraslardıń rawajlanıwında júdá úlken tabıslar qolǵa kirgizildi. Ferrokrystallardi, yarım ótkizgishlerdi, metallardı, nanokrystallardı, formanı este saqlaw effekti orın alatuǵın kristallar menen quymalardı keń túrde paydalanıw hár qıylı sırtqı tásirlerdegi fazalıq ótiwlerdi hám olardaǵı strukturalıq domenler arasındaǵı transformacijalardı úyreniw islerin aldınǵı qatarlarǵa qoyadı. Biraq usınday jaǵdaydıń orın alıwına qaramastan kristallıq qattı denelerde substrukturalıq qáddide bolıp ótetuǵın processler jetkilikli dárejede úyrenilmey atır dep esaplawǵa boladı. Bul situaciya kristallıq denelerde orın alatuǵın fazalıq ótiwlerdiń hám strukturalıq domenlerdiń transformacijalarındaǵı kristallostrukturalıq ózgerislerdiń nızamlıqların eksperimentallıq úyreniw islerin aktuallıq ekenligin ayqın túrde kórsetedi.

Izertlew obyektı hám predmeti. Kristallıq pánjere qáddindegi strukturalıq qubılıslardı úyreniw ushın monokrystallıq yamasa ápiwayı polidomenlik strukturaǵa iye úlgiardi paydalanıwdıń artıqmashlıǵın atap ótiw kerek. Usı tiykarda jumıstı orınlaw ushın tómendigidey kristallıq obyektler paydalanıldı:

Samariydiń monosulfidi SmS hám $\text{Sm}_{1-x}\text{Gd}_x\text{S}$ (bunda $x = 0.15, 0.20$) quyması – metall – yarım ótkizgish. Bul obyektte joqarı basımlarda hám tómengi temperaturalarda izomorflıq fazalıq ótiwler orınaladı.

Jumistiń maqseti hám wazıypaları. Bul dissertaciyalıq jumistiń maqseti sıpatında samariy monosulfidi SmS kristallarındaǵı hám SmS-GdS quymalarındaǵı izomorflıq fazalıq ótiwlerdi rentgenografıyalıq usıllardıń kompleksiniń járdeminde izertlew qabıl etildi.

Izertlew nátiyjeleriniń ilimiy tárepten jańalıǵı. Dissertaciyalıq jumısta SmS kristallarındaǵı, $\text{Sm}_{0,8}\text{Gd}_{0,2}\text{S}$ hám $\text{Sm}_{0,85}\text{Gd}_{0,15}\text{S}$ quymalarındaǵı úlken basımlarda hám temperaturalar ózgergende júzege keletuǵın izomorflıq fazalıq ótiwler rentgenografıyalıq usıllardıń (rentgen difraktometriyası, Debay-Sherer, Laue hám basqa da usıllar) járdeminde izertlendi. Fazalıq ótiwlerde, substrukturanıń transformaciyalarında kristallıq strukturanıń defektleri strukturanı túrlendiriwshi elementler sıpatında qaraldı hám bul boljawdıń durıs ekenligi ótkerilgen eksperimentlerdiń barısında tastıyıqlandı.

Mathematica kompyuterlik algebra hám Delphy programmalaw tilleriniń járdeminde rentgendifrakciyalıq eksperimentlerdi, atap aytqanda Laue hám aylanıw (terbeliw) usılların modellestiriw máseleleri sheshildi.

Alınǵan eksperimentallıq nátiyjeler úlken kólemlik effekt orın alatuǵın mort materiallardaǵı izomorflıq fazalıq ótiwlerdegi jańa kooperativlik mexanizminiń bar ekenligin kórsetti. Bul mexanizm termoqaytımlı mikrojarıqlardıń payda bolıwınan ibarat bolıp, olardıń átirapında bunnan keyingi jarıqlardıń payda bolıwı menen jańa fazanıń kristallarınıń ósiwi orın aladı.

Joqarı basımdaǵı metastabillı fazadan dáslepki fazaǵa ótiwdiń bir qatar aralıqlıq hallardıń payda bolıwı menen júretuǵınlıǵı kórsetildi. Bul aralıqlıq hallar ekinshi áwlad strukturalıq defektlerdiń poziciyalarında táriyiplenedi.

Izertlewdiń tiykarǵı máseleleri hám boljawları. Izertlewerdiń barısında tiykarǵı dıqqat kristallarda bar hám jańadan payda bolǵan strukturalıq defektlerdiń temperatura hám sırttan túsirilgen gidrostatikalıq jáne kvazigidrostatikalıq basımlardaǵı fazalıq ótiwlerge tásiri dıqqat orayına alındı. Sonlıqtan dissertaciyalıq jumısta strukturalıq defektler strukturanı túrlendiriwshi elementler sıpatında qaraldı. Bul kózqarastı ele de tereńirek úyreniw tiykarında basqa da kóplegen

kristallar ústinde eksperimentler júrgiziw arqali teoriyalıq hám ámeliy nátiyjeler alıw múmkin.

Izertlew teması boyınsha ádebiyatlar túsindirmesi (analizi). Ádebiy maǵlıwmatlardı bayanlawdın barısında tiykarǵı dıqqat tómendegidey máselelerge qaratıldı:

1. Kristallardaǵı polidomenlik haldın payda bolıwı qattı haldaǵı fazalıq ótiwlerdin tiykarǵı túrleriniń biri martensitlik fazalıq ótiwlerdin nátiyjesi bolıp tabıladı. Fazalıq ótiwlerdin saldarınan kristallardın substrukturasınıń ózgeriwini izertlew aktualıq másele bolıp tabıladı. Al substrukturanı izertlew fazalıq ótiwlerdin kristallografiyalıq mexanizmlerin hám payda bolǵan fazanıń strukturasını bir mánisli anıqlawǵa múmkinshilik beredi. Polidomenlik strukturalardı izertlew domenlerdi baqlaw, olar arasındaǵı orientaciyalıq qatnaslardı dál anıqlaw islerinde jetkilikli dárejede múmkinshiliklerge iye emes usıllardıń járdeminde júrgizilip kelindi. Bul jaǵday difrakciyalıq usıllardıń kompleksin paydalangan halda hár qıylı sırtqı tásirlerde (temperatura, gidrostatikalıq basım, elektr maydanları) kristallıq denelerdegi substrukturalıq ózgerislerdi izertlewge úlken qızıǵıwları oyatadı.

2. Baǵıtlangan sırtqı tásirler (mexanikalıq kernew, elektr maydanı) astında strukturalıq domenler arasında bir birine ótiwler orın aladı. Usınıń nátiyjesinde sırtqı tásiridin baǵıtına qolaylı túrde jaylasqan strukturalıq domenler qalıpsedi (monodomenizaciya qubılısı orın aladı). Bul jaǵday strukturalıq processlerdin nızamlıqların polidomenlik kristallardaǵı óziniń mexanizmleri boyınsha fazalıq ótiwlerdin mexanizmleri menen birdey bolǵan strukturalıq ózgerislerdi (domenlerdin bir birine aylanıwın yamasa transformaciyların) úyreniw arqalı tabıwǵa bolatuǵınlıǵın kórsetedi. Biraq usınday awaldın orın alıwına qaramastan polidomenlik kristallardaǵı domenler arasındaǵı transformaciylardı úyreniwge az kewil bólinip atır.

Izertlewde qollanılǵan metodika. Fazalıq ótiwlerdin kristalgeometriyasın hám fazalıq ótiwlerdegi strukturanıń ózgerislerin izertlew ushın rentgenografiyalıq usıllardıń kompleksi baslı metod sıpatında alındı. Bunday eksperimentallıq

usullardıń kompleksı fazalıq ótiwlerdegi strukturanıń ózgerislerin tikkeley baqlawğa hám strukturalıq domenler arasındagı orientaciyalıq qatnaslardı joqarı dálliklerde anıqlawğa múmkinshilik beredi.

Izertlew nátiyjeleriniń teoriyalıq hám ámeliy áhmiyeti. Ózbekistan Respublikası Prezidentiniń “Ózbekistandı rawajlandırıwdıń háreketler strategiyası¹”nıń bes baǵdarınan biri jámiyetlik tarawdı rawajlandırıwǵa qaratılǵan bolıp, ol tálim hám pán tarawın rawajlandırıwǵa baǵdarlanǵan. Bul baǵdardıń tiykarǵı bólimlerinen biri ilimiy-izertlew hám innovaciya iskerligin qollap-quwatlaw, ilimiy hám innovaciya jetiskenliklerin ámeliyatqa engiziwdiń nátiyjeli mexanizimin jaratıw, joqarı oqıw orınları hám ilimiy-izertlew institutları qasındagı qánigelestirilgen ilimiy-eksperimental laboratoriyalar, joqarı texnologiya orayların hám texnoparklardı shólkemlestiriwge baǵdarlanǵan. Bul izertlew jumısınınıń nátiyjeleri házirgi zaman ilimi menen texnikası ushın berilgen strukturaǵa hám qásiyetlerge iye jańa materiallardı alıwda áhmiyetli orındı iyeleydi. Bul jańa bir texnologiyanıń jaratılıwı ushın tiykar bolıp, islep shıǵarılıp atırǵan materiallardıń sapasın arttırıwǵa óz úlesin qosadı.

Bul izertlew jumısınınıń nátiyjeleri házirgi zaman ilimi menen texnikası ushın berilgen strukturaǵa hám qásiyetlerge iye jańa materiallardı alıwda áhmiyetli orındı iyeleydi. Qattı deneler fizikası menen fizikalıq materialtanıwdıń rawajlanıwınıń ózgeshelikleriniń biri qayta qurılıwlarınınıń mikromexanizmlerin tereń úyreniw bolıp tabıladı. Bul jumıstıń nátiyjeleri aldagı izertlew jumısları ushın teoriyalıq maǵlıwmatlar deregi xizmetin atqaradı.

Jumıstıń dúzilisi hám quramı. Dissertaciya jumısı kirisiw, tiykarǵı bólim, juwmaqlaw hám paydalanılǵan ádebiyatlar diziminen ibarat. Tiykarǵı bólim 3 bap, 12 paragraftan turadı.

¹ O'zbekiston Respublikasi Prezidentining 2017-yil 7-fevraldagi "O'zbekiston Respublikasini yanada rivojlantirish bo'yicha harakatlar strategiyasi to'g'risida" gi PF-4947-sonli Farmoni. O'zbekiston Respublikasi qonun hujjatlari to'plami, 2017-y., 6-son, 70-modda.

I BAP. Sırtqı tásirler astında júzege keletuǵın fazalıq ótiwlerdegi kristallıq denelerdiń atomlıq-kristallıq strukturasınıń hám substrukturasınıń qáliplesiw nızamıqları

1.1-§. Kristallıq denelerdegi fazalıq ótiwlerdiń kristallofizikalıq aspektleri

Fazalıq ótiwler (bul dissertaciyalıq jumısta strukturalıq fazalıq ótiwler haqqında gáp etiledi) hár qıylı sırtqı fizikalıq tásirlerdiń astında júzege keledi. Nátiyjede kristallıq denelerdiń strukturası qaytadan qurıladı. Bunday jaǵdaylarda qáliplesken kristallıq qattı denelerdiń tómendegidey xarakteristikaları ózgeriwi múmkin: simmetriyası, kristallıq pánjereniń turaqlılıarı (biz "kristallıq pánjereniń parametrleri" sózlerin de paydalanamız) hám substrukturası (mexanikalıq dvoyniklerdiń payda bolıwı, polidomenlik kristallardaǵı strukturalıq monodomenizaciya yamasa bir orientaciyalıq haldıń (strukturalıq domenniń) ekinshi orientaciyalıq halǵa (basqasha baǵıtlanǵan domenlerge) aylanıwı, kristallıq strukturanıń defektleriniń jańa sistemasınıń payda bolıwı hám basqa da ózgerislerdiń orın alıwı múmkin. Tómengi temperaturalarda kristallıq strukturanıń qálegen ózgerisiniń diffuziyalıq jollar menen emes, al atomlar menen molekullardıń kooperativlik qozǵalıslarınıń saldarınan júretuǵınlıǵı málim. Usınıń nátiyjesinde strukturalıq qayta qurıwlar tómendegidey mexanizmler boyınsha ámelge asadı [1-12]:

1. Bazı bir kristallografiyalıq baǵıtlar boyınsha atomlıq tegisliklerdiń qońsılas atomlıq tegisliklerge salıstırǵanda dáslepki pánjereniń turaqlılısına salıstırǵanda ádewir kishi aralıqqa jılısıwları (ápiwayı birtekli hám birtekli emes jılıwlar). Strukturanıń usılay ózgeriwi kristaldıń simmetriyasınıń ózgerisin támiyinleydi (KOK → QOK, QOK → KOK, KOK → TJG hám taǵı basqa da ótiwler).

Biz bul jumısta mınaday qısqartıwları paydalanamız:

QOK – qaptalda oraylasqan kub (F-pánjere).

KOK – kólemde oraylasqan kub (I-pánjere).

TJG – tıǵız jaylastırılǵan geksagonallıq.

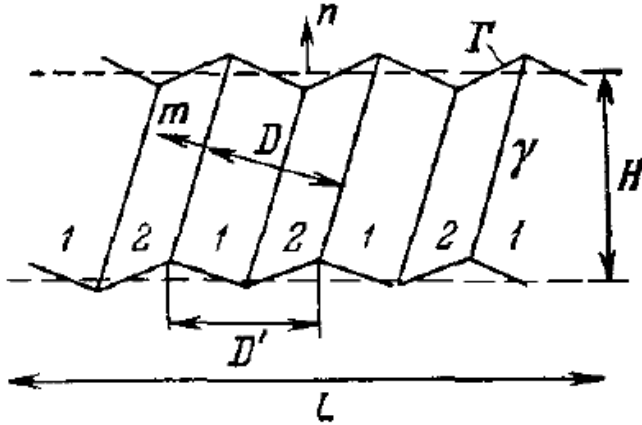
Sonıń menen birge kooperativlik mexanizm menen júretuǵın strukturalıq fazalıq ótiwlerdiń saldarınan kristaldıń substrukturasınıń ózgeriwi múmkin (kristallıq qurılıstıń defektleriniń sistemasınıń payda bolıwı).

2. Atomlıq tegisliklerdiń qońsılas atomlıq tegisliklerge salıstırǵandaǵı kristallıq pánjereniń turaqlılıarınıń shaması menen barabar aralıqlarǵa ápiwayı túrde jılıwı. Bunday strukturalıq ózgerisler ádette tıǵız jaylasqan strukturalarǵa iye kristallarda QOK→TJG tipindegi fazalıq ótiwlerde orın aladı (mısalı $A^{II}B^{VI}$ kristallarındaǵı joqarı temperaturalı fazadan tómengi temperaturalı fazaǵa yamasa aralıqlıq politiplik fazalardıń birine ótiwi [13]).

3. Elementar qutılardıń ólshemleriniń ózgerisleri (atomlardıń kristallografiyalıq baǵıt boyınsha jılıwları yamasa taza dilataciya, yaǵnıy elementar qutılardıń tek ólshemleriniń ózgerisleri). Fazalıq ótiwdiń usınday dilataciyalıq mexanizmi nikel sulfidi NiS kristallarındaǵı fazalıq ótiwlerdi baqlaǵanda anıqlandı [14]. Fazalıq ótiwdiń tap usınday mexanizmi usı dissertaciyalıq jumısta izertlengen SmS kristallarında hám SmS-GdS quymalarında da tabıldı.

Struktura atomlardıń yamasa molekularardıń ápiwayı awıswıwı menen júretuǵın strukturalıq fazalıq ótiwdi qaraymız. Atomlıq tegisliklerdiń kooperativlik jılıswları (eń keń tarqalǵan ataması – martensitlik mexanizm menen júretuǵın fazalıq ótiw yamasa martensitlik aylanıs) atomlıq kristallıq qurılıs ózgergende kristaldıń hár qıylı modifikaciyaları (fazaları) arasındaǵı shegarada serpimli energiyanıń payda bolıwına alıp keledi. Onıń shaması hár qıylı fazalardıń kristallıq pánjeresiniń bir biri menen baylanısına hám kristaldıń serpimli konstantalarınan gárezli boladı. Payda bolǵan energiya kristaldıń jańa modifikaciyasınıń (fazasınıń) payda bolıwınıń termodinamikasına hám payda bolǵan kristallıq modifikaciyanıń substrukturasına kúshli tásirin tiygizedi. A.L.Roytburdtıń jumıslarında [15-16] kristaldıń simmetriyasınıń tómenlewi menen júretuǵın bolsa, onda polisintetikalıq dvoyniklerdiń – polidomenli fazanıń payda bolıwı keń tarqalǵan qubılıs bolıp tabıladı. Polidomenli fazada strukturalıq domenler dvoynikler arasındaǵı

qatnaslarday jaǵdayda qalıpleseǵı. Bul kóplegen polimorfıǵ ótiwler ushın xarakterli bolǵan jaǵday sxemalıq túrde 1-súwrette keltirilgen. Bul súwrette fazalıq ótiwdiń saldarınan payda bolǵan 1- hám 2-oblastlar bir birine parallel hám tegis qatlamlar túrine iye hám olar óz gezeginde baslanǵısh fazanıń ishindegi (0-faza) tegis-parallel qatlamlar bolıp tabıladı.



1-súwret.
Tegis hám parallel domenlerdiń qurılısı [15].

QOK→aralıqlıq fazalar (kópshilik jaǵdaylarda politiplik fazalar)→TJG (yamasa QOK→TJG) fazalıq ótiwleri kópshilik jaǵdayda baslanǵısh pánjereniń geypara oblastlarında xaotik túrde tarqalǵan jaylastırıw defektleriniń (rus tilinde "дефекты упаковки") payda bolıwı menen baslanadı [17]. Bunday process tıǵız jaylastırılǵan atomlıq qatlamlardıń QOK pánjereniń oktaedrlik tegisliginde $\langle 112 \rangle$ baǵıtlarınıń biri boyınsha (bunday baǵıtlardıń sanınıń úshke teń ekenligin bilemiz) $\sqrt{2}a/\sqrt{3}$ shamasına jılıwınıń saldarınan júredi [8-9]. Bunday strukturalıq qayta qurılıslardıń kristallıq úlgilerdiń formalarınıń ádewir ózgeriwine hám usıǵan sáykes úlken mexanikalıq kernewlerdiń payda bolıwına alıp keletuǵınlıǵı óz-ózinen túsiniqli. Usı jaǵdayǵa baylanıslı payda bolǵan kernewlerdiń kemeyiwiniń úsh variantı atap ótilgen [18]:

1. TJG-fazanıń júdá juqa kristallarınıń payda bolıwı (tiykarı temir bolǵan quymalarda usınday kristallardıń qalınlıqları 10^{-5} - 10^{-6} sm shamasında boladı).
2. TJG-fazanıń plastinkalarınıń paketiniń payda bolıwı.
3. Payda bolǵan mexanikalıq kernewlerdiń elastik deformaciyanıń júriwi sebepli kemeyiwi.

Joqarıda keltirilgen maǵlıwmatlar kristallardıń simmetriyasınıń tómenlewi hám martensitlik mexanizm menen júretuǵın fazalıq ótiwlerde jańa substrukturanıń – polidomenlik haldıń payda bolatuǵınlıǵın kórsetedi (biz tómende SmS hám GdS kristallarınıń quymalarda júretuǵın izomorflıq fazalıq ótiwlerde (bunday fazalıq ótiwlerde kristaldıń simmetriyası ózgerissiz qaladı, al kristallıq pánjereniń parametrleriniń ózgerisi orın aladı) polidomenlik haldıń payda bolmaytuǵınlıǵın kóremiz).

Polidomenlik kristaldıń qurılısın úyreniwdegi eń baslanǵısh noqat hám tiykarǵı princip kristallofizikadan keńnen belgili bolǵan Kyuri principi bolıp tabıladı [19]. Bul princip boyınsha simmetriyaları hár qıylı bolǵan qubılıslar qosılǵan jaǵdayda qosılıwshı qubılıslardıń ekewinde de bar hám olar ushın ulıwmalıq bolǵan simmetriya elementleri ǵana saqlanadı (yaǵnıy qosılıwshı qubılıslardıń disimmetriyaları qosıladı). Demek temperaturanıń bir tekli ózgeriwiniń saldarınan júzege keletuǵın fazalıq ótiwlerde kristaldıń dáslepki modifikaciyasınıń simmetriyasınıń saqlanıwın kútiw kerek. Haqıyqatında da, kóp sanlı eksperimentler polidomenlik kristallardıń ózleriniń statistikalıq ortalastırılǵan simmetriyası boyınsha ([20]-jumısta paydalanılǵan terminologiya boyınsha makrosimmetriyası boyınsha) óziniń eń dáslepki monodomenlik fazasınıń simmetriyasın qaytadan tikleytuǵınlıǵın kórsetedi. Bul jaǵday birinshi ret ferroelektriklik kristallardaǵı ferroelektriklik fazalıq ótiwlerdiń kristallografiyalıq aspektlerin izertlewdiń barısında I.S.Jeludev hám L.A.Shuvalov (Rossiya Ilimler Akademiyasınıń Kristallografiya institutınıń ilimiy xızmetkerleri) tárepinen ashılǵan edi [21] (biraq mimetikalıq kristallardıń noqatlıq simmetriyasına salıstırǵandaǵı joqarı simmetriyaǵa iye bolıwı XIX ásirde baqlanǵanlıǵın atap ótemiz [22]). Olar strukturalıq domenlerdiń dvoynikler bolıp tabılatuǵınlıǵı, al fazalıq ótiwdiń saldarınan joǵalatuǵın simmetriya elementleriniń dvoynikleniw elementlerine aylanatuǵınlıǵın kórsetti. Usı jaǵdayǵa baylanıslı [23] niń avtorları geometriyalıq tallawdıń tiykarında ferroelektriklik bariy titanatı $BaTiO_3$ kristallarındaǵı orientaciyalıq hallardıń (orientaciyalıq hal dep belgili bir

kristallografiyalıq orientaciyağa iye domenlerdiń sistemasına aytamız) kristaldıń eń baslanǵısh simmetriyasın este saqlaytuǵınlıǵın atap ótti.

Geypara kristallarda strukturalıq fazalıq ótiwdiń saldarınan monodomenlik kristallardıń payda bolatuǵınlıǵın da atap ótiw kerek. Olar óziniń mikro- hám makrosimmetriyaları boyınsha dáslepki kristallardıń simmetriyasınan ayrıldı. Biraq usınday kristallardıń jıynaǵın qarap shıǵıp sol kóp sanlı kristallardıń kópliginiń simmetriyasınıń fazalıq ótiwdiń saldarınan ózgermegenligine iseniwge boladı [24].

Kristallografiyalıq jaqtan kristalda polidomenlik haldıń payda bolıwı atomlıq qatlamlardıń kooperativlik awıswıwı múmkin bolǵan bir neshe birdey kristallografiyalıq baǵıtlardıń bar bolıwı menen baylanıslı. Ferroelektriklik fazalıq ótiwlerge dıqqat awdarǵanda sonday birdey bolǵan kristallografiyalıq baǵıtlardıń jıynaǵı ayırım domenlerdegi spontan elektr polyarizaciyalarınıń jıynaǵı ekenligine iseniwge boladı [25]. Sol jıynaqtıń sanı $N = N_1/N_2$ formulasınıń járdeminde anıqlanadı. Bul qatnasta N_1 menen N_2 arqalı kristaldıń paraelektriklik hám ferroelektriklik modifikaciyalarınıń simmetriyalarınıń noqatlıq gruppalarınıń tártipleri belgilengen. Bul ańlatpanıń mánisi mınadan ibarat: ferroelektriklik fazalıq ótiwde kristaldıń joqarı simmetriyağa iye fazası tómen simmetriyalı strukturağa iye fazağa N jol menen ótedi. Bunday jaǵdayda payda bolǵan modifikaciyanıń simmetriya elementleri hár bir domendi ózi ózine ótkeredi. Fazalıq ótiwde kristall joǵaltqan simmetriya elementleri bir tiptegi domendi ekinshi tiptegi domenge ótkeredi.

Bariy titanatı $BaTiO_3$ kristallarındaǵı ferroelektriklik fazalıq ótiwdi kristallgeometriyasın úyreniwdiń barısında antifazalıq domenlerden turatuǵın sistemalarda $N = N_1/N_2$ ańlatpasınıń járdeminde orientaciyalıq hallardıń sanın esaplawdıń qáteliklerge alıp keletuǵınlıǵın kórsetti [23]. Usınıń nátiyjesinde domenlik sistemalardıń sanın esaplawdıń qatań túrdegi usılınıń bar ekenligi kelip shıqtı. Bunday jaǵdayda joqarı temperaturalı paraelektriklik fazanıń simmetriyasına hám kristallıq pánjereniń deformaciyalıq sxemasın qatań túrde esapqa alıw kerek boladı eken. Ulıwma jaǵdayda atomlıq tegisliklerdiń

jiljıwlarınıń (awısıwlarınıń) quramalı sisteması dáslepki fazanıń noqatlıq simmetriya gruppasınıń tártibinen úlken bolǵan orientaciyalıq hallardıń payda bolıwına alıp keledi. Mısalı rentgenografiyalıq izertlewler BaTiO₃ kristallarında $P_{kub} \rightarrow P_{tetr}$ fazalıq ótiwinde (120°Cda júretuǵın ferroelektriklik fazalıq ótiw) payda bolǵan orientaciyalıq hallardıń sanınıń 12 ge teń ekenligin kórsetti (elektrik domenlerdiń sanı 24). Al bul jaǵdayda $N = 6$ teńligi orın aladı. Sonlıqtan kristallardıń polidomenlik halın izertlegende fazalıq ótiwlerdiń kristall geometriyasın tallaǵanda kristallıq pánjereniń qayta qurılıwlarınıń múmkin bolǵan barlıq deformaciyalıq sxemaların esapqa alıw kerek boladı.

Endi fazalıq ótiw ferroelektriklik polidomenlik kristalda bolıp ótetuǵın jaǵdaydı qaraymız. Bunday jaǵday orın alatuǵın hám jetkilikli dárejede jaqsı úyrenilgen obyekt bariy titanatı BaTiO₃ kristallı bolıp tabıladı [25-26].

Ótkerilgen rentgenografiyalıq izertlewler T_{s2} temperaturasındaǵı $R_{tetr} \rightarrow V_{orto}$ hám T_{s3} temperaturasındaǵı $V_{orto} \rightarrow R_{trig}$ ótiwlerinde domenlik sistemalardıń ózgeriske ushıramaytuǵınlıǵın kórsetti. Bunday jaǵdayda hár bir ferroelektriklik fazadaǵı difrakciyalıq súwretti (yaǵnıy payda bolǵan strukturalıq domenlerdiń qurılısın) [23]-jumısqa sáykes BaTiO₃ kristallarınıń dáslepki paraelektriklik fazasınıń kublıq strukturasınıń deformaciýaları tiykarında túsindiriw múmkin ekenligi kórsetilgen. Bul qubılıstı [23] jumıstıń avtorları kristaldıń prototiplik haldı este saqlaw qásiyeti dep atadı (yaǵnıy ayırım orientaciyalıq hallar domenlerdiń kelesi áwladlarınıń payda bolıwınıń sisteması bolıp tabılmaydı eken).

Taza dilataciyalıq mexanizm boyınsha ótetuǵın strukturalıq aylanıslarda polidomenlik haldıń payda bolıwı baqlanbadı. Bunday jaǵdayda hár qıylı fazalardı ayırıp turatuǵın shegarada payda bolǵan mexanikalıq kernewler mikrojarıqlar hám basqa da kristallıq qurılıstıń defektleriniń payda bolıwı menen relaksaciyalanadı [27].

Difrakciyalıq izertlewlerde keńnen paydalanılatuǵın polidomenlik kristallardıń keri keńisligi (kristallar rentgenografiyasındaǵı F^2 -dene) ayırım orientaciyalıq hallardıń keri keńislikleriniń superpoziciyası sıpatında qurıladı [28-29]. Sonlıqtan bunday keri keńislik joqarı simmetriyaǵa – fazalıq ótiwge shekemgi kristaldıń laue

simmetriyasına iye boladı. Bul jaǵdayda joqarı simmetriyaǵa iye bolǵan noqatlıq gruppanıń operaciyalarınń obyektleri bolıp hár bir orientaciyalıq haldıń individuallıq kerı pánjereleri xızmet etedi [30]. Bul jaǵday kerı keńisliktiń simmetriyasınıń kristaldıń fazalıq ótiwlerde ózgermeytuǵın xarakteristikası bolıp tabılatuǵınlıǵın kórsetedi.

Joqarıda keltirilgen maǵlıwmatlardı juwmaqlap polidomenlik haldıń payda bolıwınıń martensitlik mexanizm menen bolatuǵın fazalıq ótiwlerdiń nátiyjesi dep esaplaymız. Domenlik sistemalardıń sanı menen orientaciyaların biliw arqalı fazalıq ótiwlerdiń kristallgeometriyasın, usıǵan sáykes kristaldıń payda bolǵan modifikaciyasınıń strukturasını anıqlawǵa boladı. Strukturalıq domenler payda bolǵanda kristallıq obyektlerdiń áhmiyetli qásiyetleriniń biri – baslanǵısh modifikaciyasını simmetriyasın este saqlaw hám prototiplik haldı este saqlaw qásiyetleri kórinedi.

Ekinshi tárepten polidomenlik kristaldıń payda bolıwı kristallıq pánjereniń jańa defektleriniń payda bolıwına alıp keledi. Bunday defektlerdiń qatarına domenler arasındaqı, polisintetikalıq dvoynikler arasındaqı shegaralar kiredi. Olar kristallarda joqarı kernewli lokallıq oblastlardıń payda bolıwına hám sonlıqtan ádewir elastik deformaciyalardıń yamasa basqa túrdegi strukturalıq defektlerdi payda bolıwına alıp keliwi múmkin. Biraq, fazalıq ótiwler menen baylanıslı bolǵan kristallıq qattı denelerdiń haqıyqıy strukturasınıń evolyuciyası strukturalıq processlerdi izertlewshi qánigelerdiń dıqqatın usı waqıtlarǵa shekem ózine jetkilikli dárejede qarata alǵan joq. Sonıń menen birge polidomenlik strukturanı izertlewler optikalıq, elektronlıq-mikroskoplıq hám basqa da strukturalıq emes usıllardıń járdeminde alıp barıldı [31-34]. Ayırım jaǵdaylarda jeke domenlerdi baqlaw ushın rentgen topografiyası qollanıldı [35-38]. Bul usıllardıń hár qıylı fizikalıq qásiyetlerge iye kristallardaǵı strukturalıq domenler arasındaqı orientaciyalıq qatnaslardı hám mikroskopiyalıq strukturalıq defektlerdi temperaturanıń keń intervalında izertlegendeǵi múmkinshilikleri biraz sheklengen. Sonıń menen birge kópshilik jaǵdaylarda fazalıq ótiwlerdi izertlegende monokristallıq úlgieler emes, al poroshok tárizli kristallar yamasa polikristallar

paydalanıladı. Bunday obyektlerdi strukturalıq fazalıq ótiwlerdiń kristallografiyalıq aspektlerin izertlew ádewir qıyın eksperimentallıq máselelerdiń birine aylanadı. Usı jaǵdayǵa baylanıslı fazalıq ótiwlerdiń kristalgeometriyasın izertlew ushın monokristallardıń paydalanılıwınıń hám sonıń menen birge bunday izertlew islerine rentgenografiyalıq usıllardıń kompleksin paydalanıwdıń maqsetke muwapıq bolatúǵınlıǵın atap ótemiz. Bunday eksperimentallıq usıllardıń kompleksi fazalıq ótiwlerdegi strukturanıń ózgerislerin tikkeley baqlawǵa hám strukturalıq domenler arasındaǵı orientaciyalıq qatnaslardı joqarı dálliklerde anıqlawǵa múmkinshilik beredi.

1.2-§. Domenler sistemaları arasındaǵı strukturalıq transformaciýalar

Mexanikalıq qısqıw menen elektr maydanlarınıń tásirindegi kristallıq pánjereniń strukturasınıń qaytadan qurılıwı processlerin qarap ótemiz.

Mexanikalıq tásir astındaǵı strukturalıq ózgerisler. Mexanikalıq kernewler astında júzege keletúǵın strukturalıq processlerdiń ishindegi eń belgilisi mexanikalıq dvoynikleniw processi bolıp tabıladı. Bunday jaǵdayda qattı denelerdiń kristallıq strukturası ózgerissiz qaladı, al kristaldıń ayırım bólimleriniń kristallografiyalıq orientaciyası (baǵıtı) ǵana ózgeriske ushıraydı. Mexanikalıq dvoynikleniwdiń kalcitte, β -qalayıda, kvarcte [3], ferroelektriklerde [39-41] hám formanı este saqlaw effekti orın alatuǵın metallar menen quymalardıń kópshiliginde orın alatuǵınlıǵı keńnen málim [50-54].

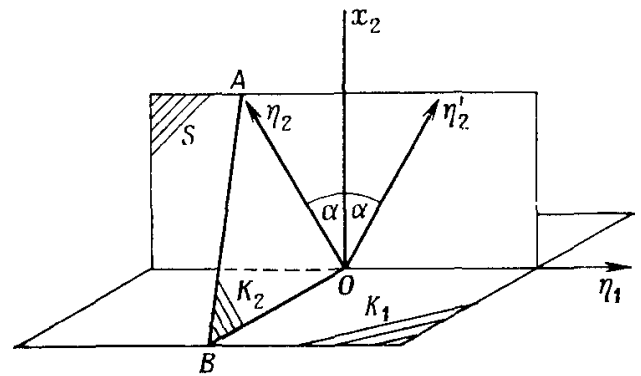
Bazı bir mısallardı keltiremiz.

Kalcittiń romboedrlik kristallarında mexanikalıq dvoynikleniwdi pıshaqtıń júzin kristallıq úlginiń qabırǵasına basqanda ańsat júzege keltiriwge boladı. Usınday jaǵdayda kristall dvoynikleniw tegisligi $K_1=(101)$, jılıw baǵıtı $\eta_1 = [010]$, ekinshi mayıspaǵan tegislik $K_2=(010)$, tiykarǵı zonanıń kósheri $\eta_2 = [101]$ sxeması boyınsha dvoyniklenedi [8].

Dvoynikleniw processin táriyiplewdi túsindiriw ushın 2-súwrettegi sxema keltirilgen.

2-súwret. Dvoynikleniw processin formallıq jaqtan táriyiplew.

Dvoynikleniw elementleri: K_1 – dvoynikleniw tegisligi, S – jıljıw tegisligi, η_1 – jıljıwdıń baǵıtı, K_2 – ekinshi mayıspaǵan tegislik, η_2 – tiykarǵı zonanıń kósheri[11].



Belgili bolǵan barlıq geksagonallıq metallar (tıǵız jaylastırılǵan geksagonallıq metallar) $K_1=(10.2)$, $\eta_1 = [\bar{1}0.0]$, $K_2=(10.\bar{2})$, $\eta_2 = [10.1]$ nızamı boyınsha dvoyniklenedi [8].

Mexanikalıq dvoynikleniw processinde martensitlik fazalıq aylanıslardaǵıday kristallıq pánjereniń bir tekli qaytadan qurılıwları orın aladı. Usınıń nátiyjesinde sırtqı tásirlerdiń baǵıtına qolaylı jaylasqan kristaldıń orientaciyaları qalıpleseedi [45]. Demek usınday qubılıstı izertlewdiń barısında mexanikalıq dvoynikleniwlerdegi strukturalıq processlerdiń nızamlılıqların úyreniw múmkin. Bunday processler óziniń mexanizmi boyınsha strukturalıq fazalıq ótiwlerge uqsas.

Ayırım kristallarda mexanikalıq dvoynikleniwdiń "serpimli" ráwishte ótetuǵınlıǵın atap ótemiz. Bunday kristallarda sırttan túsirilgen mexanikalıq kernew alıp ketilgennen keyin kristaldıń substrukturasınıń dáslepki túri qaytadan tiklenedi. Bunday kristallardıń qatarına kalcit, cink, grafit, kvarc [3,47], segnet duzı [3,90] hám basqalar kiredi. Kvarctaǵı dáslepki strukturanıń qaytadan tikleniw qubılısına E.V.Cinzerling "kvarctıń este saqlawı" degen atama berdi [47, 48].

Bir qatar jaǵdaylarda mexanikalıq kernewler túsirilgende basqa tásirlerdiń astında (temperaturanıń ózgerisi yamasa basqa da sırtqı tásirler) baqlanbaytuǵın kristaldıń taza fazaları payda boladı. Mısalı, tómengi temperaturalardaǵı mexanikalıq deformaciyanıń saldarınan ayırım polatlarda, Li, Na, Cs, Be, Bi [3] kristallarında fazalıq ótiwler júzege keledi. Tıǵız etip jaylastırılǵan kóp qatlamlı

metallar menen quymalarda elastik deformaciyanıń saldarınan barlıq aralıqlıq fazalar geksagonallıq tıǵız etip jaylastırılǵan strukturaǵa iye fazaǵa ótedi [49-50].

Solay etip, joqarıda keltirilgen faktler mexanikalıq tásirlerdiń astında bazı bir kristallarda basqarılatuǵın strukturalıq ózgerislerdiń júzege keletuǵınlıǵın kórsetedi. Bul jaǵday berilgen strukturaǵa hám usıǵan sáykes berilgen fizikalıq hám texnologiyalıq xarakteristikalarǵa iye kristallardı alıwǵa múmkinshilik beredi. Biraq qattı denelerdiń reallıq (haqıyqıy) strukturası, yaǵnıy kristallarda hár qıylı strukturalıq defektlerdiń bolıwı kristallıq pánjereniń ózgeriw processine úlken tásirin jasawı kerek. Usınıń nátiyjesinde fazalıq ótiwlerdiń saldarınan belgili substrukturalardıń payda bolıwın kútiw kerek boladı.

Usı jaǵdayǵa jáne bir jańa jaǵdaydı qosamız. Mexanikalıq dvoynikleniwge alıp keletuǵın bir kósherli mexanikalıq tásir hám urınba baǵıtındaǵı kernew sáykes ∞/mmm hám $2/m$ noqatlıq simmetriyasına iye. Usı jaǵdayǵa baylanıslı belgili kristallofizikalıq Kyuri principi boyınsha dvoynikleniwdiń saldarınan qalıplesken kristaldıń simmetriyası sırttan túsirilgen tásirdiń simmetriyası menen kristaldıń dáslepki fazasınıń simmetriyasınıń eń joqarǵı podgruppası bolıwı kerek. Bunday máseleni sheshiw ushın difrakciyalıq usıllardıń kompleksiniń járdeminde izertlewler júrgiziw jáne sırtqı tásirler menen úyrenilip atırılǵan materiallardıń simmetriyaların tereń tallaw júrgiziw talap etiledi.

Elektr maydanınıń tásirinde júretuǵın strukturalıq ózgerisler. Ferroelektrikler elektr maydanın túsirgende domenlerdiń hár qıylı variantları arasında strukturalıq ótiwlerdi ámelge asırıwda úlken artıqmashlıqlarǵa iye. Bul gáplerdiń durıslıǵınıń dálili retinde segnet duzı, $BaTiO_3$, TGS, KDP hám basqa da kóplegen kristallardı atap ótiw múmkin.

Elektr tásirleri astındaǵı strukturanıń ózgeriw nızamları tiykarınan polyarizaciyalıq-optikalıq usıllardıń járdeminde izertlenildi. Sonıń menen birge kristallardıń dielektriklik gisterezisi túsirildi. Ferroelektriklerdegi domenlik sistemalardıń transformaciyaları menen ferroelektriklik fazalıq ótiwlerdi rentgenografıyalıq izertlewler $BaTiO_3$ hám KDP kristalların izertlewlerdi esapqa almaǵanda derlik joq dep esaplawǵa boladı. Usı jaǵdaylarǵa baylanıslı elektr

maydanındağı strukturalıq ózgerislerdiń reallıq mexanizmleri hám monodomenlestirilgen ferroelektriklerdiń substrukturasın tolıq rentgendifrakciyalıq izertlewler usı waqıtlarǵa shekem tereń izertlenbegen dep esaplawǵa boladı. Bul máseleń sheshiliwi elektr maydanınıń tásiri astında turǵan ferroelektriklik kristallardı difrakciyalıq izertlewlerdiń júrgiziliwi menen tikkeley baylanıslı.

1.3-§. Strukturalıq qayta qurıwlar processiniń qaytımlıǵı hám formanı este saqlaw effekti

Biz joqarıda tiykarǵı dıqqattı baǵıtlanbaǵan (temperatura ózgergendegi fazalıq ótiwler) hám baǵıtlanǵan tásirlerdegi (mexanikalıq dvoynikleniw, ferroelektriklerdegi strukturalıq monodomenizaciya) strukturalıq ózgerislerge qarattıq. Endi sol qubılıslardıń qaytımlıǵı haqqındağı ilimiy ádebiyattan belgili bolǵan maǵlıwmatlarǵa qaratamız. Bunday qaytımlıq kristallıq úlgiwlerdi qızdıırǵanda (keri) fazalıq ótiwdiń nátiyjesinde júzege keledi.

Eń birinshi ret strukturalıq jaqtan qaytımlı bolǵan fazalıq aylanıslar Cu-Al quymalarınıń b' fazasın qızdıırǵanda baqlandı [51-53]. Mıstıń tiykarındağı basqa quymalardağı (Cu-Sn, Cu-Zn) keri aylanıslardı (yaǵnıy qızdıırǵandağı fazalıq ótiwlerdi) izertlegende keri ótiwlerdiń tuwrı ótiwlerdiń barlıq ózine tán belgilerine iye bolatuǵınlıǵı anıqlandı [54-57]. Keltirilgen jumıslardıń avtorları kristallıq úlgiwlerdiń temperaturası tómenlegende baqlanatuǵın fazalıq ótiwlerdegi atomlar qalay jiljiytuǵın bolsa, onda keri ótiwlerde de tap sonday bolıp, biraq keri baǵıtta jiljiytuǵınlıǵın atap ótti.

Jańa fazanıń kristalları martensitlik túrde qalıpleskende payda bolatuǵın serpimli deformaciya fazalıq ótiwdiń gisterezisiniń payda bolıwına alıp keledi. Bul jaǵday fazalıq ótiwdiń júriwi ushın kristallardı fazalıq ótiw temperaturasınan tómenlew temperaturalarǵa shekem salqınlatıwdıń kerek bolatuǵınlıǵın ańǵartadı. Sebebi fazalıq ótiwdiń saldarınan júzege keletuǵın erkin energiyadağı utıw serpimli energiyanı kompensaciyalaw ushın jumсалıwı kerek. Sonlıqtan serpimli energiyanıń payda bolıwına (yamasa serpimli energiyanıń joǵalıwına) alıp

keletuǵın sırtqı tásirler (mexanikalıq kernewlerdiń túsiwi yamasa elastik deformaciya) hám kristallıq strukturanıń hár qıylı defektleri fazalıq aylanıstıń temperaturalıq intervalın hám usıǵan sáykes temperaturalıq gisterezisin ózgeritiwi múmkin.

Martensitlik fazalıq ótiwlerdi basınan keshirgen kristallardıń substrukturasın kóp sanlı izertlewler atomlıq-kristallıq struktura ózgergende qaytımlı emes strukturalıq ózgerislerdiń de orın alatuǵınlıǵın kórsetti. Bul birinshi gezekte fazalıq ótiwge baylanıslı júzege kelgen elastik deformaciya bolıp tabıladı.

Fazalıq ótiwlerdiń saldarınan payda bolǵan kristallıq pánjereniń defektleri qattı denelerdiń fizikalıq hám basqa da qásiyetleriniń ózgeriwine alıp keledi. Mısalı tuwrı hám kerı martensitlik aylanıslardıń saldarınan quymalardıń bekkemleniwi (uprochneniya, bul qubılıstı fazalıq naklep dep te ataydı) kóp sanlı metall materiallardıń bekkemligin joqarılatıw ushın ámelde keńnen paydalanıladı.

Fe-Ni quymalarındaǵı $\gamma \rightarrow \alpha \rightarrow \gamma$ (QOK \rightarrow KOK \rightarrow TJG) tipindegi aylanıslardı izertlewge baǵıshlanǵan [58]-jumısta fazalıq ótiwlerdiń bir ciklında dislokaciyanıń tıǵızlıǵı mınlaǵan ese ($3 \cdot 10^{11} \text{ sm}^{-2}$ shamasına shekem) úlkeyetuǵınlıǵı keltirilgen. Usınıń menen birge α -fazanıń kristallıq blokları arasındaqı múyeshler hám usı bloklardıń ólshemleri ózgerissiz qaladı. Sonıń menen birge α -fazadan payda bolǵan γ -fazanıń kristallıq blokları da ózgeriske ushıramaydı (bul qubılıstı martensitlik aylanıslardaǵı bloklıq strukturanıń miyras qalıwı sıpatında traktovkalaydı [59]).

Kóp sanlı izertlewshiler Fe-Mn-C quymasında ójire temperaturalarınan tómen temperaturalarǵa shekem salqınlatqanda $\gamma \rightarrow \varepsilon$ (QOK \rightarrow TJG)-fazalıq aylanısınınıń bolatuǵınlıǵın hám sol aylanıstıń saldarınan kristallıq pánjereniń defektleriniń sistemasınıń qalıplesetuǵınlıǵın kórsetti. Fazalıq aylanıs noqatı átirapında temperaturanı 400-196 C intervalında cikllı túrde ózgeritiw (termociklew) strukturanıń qayta qurılıw processiniń ótiwine sezilerliktey tásir jasaydı eken: 10 cikldan keyin ε -fazanıń muǵdarı kemeyedi hám 18 qatlamlıq ε' -faza payda boladı. Onıń muǵdarı cikllardıń sanınıń úlkeyiwi menen kóbeyedi. 30 fazalıq ótiwden keyin Fe-Mn-C quymasında tek $\gamma \rightleftharpoons \varepsilon'$ fazalıq ótiwi orın aladı.

Mexanikalıq kúshlerdiń tásirinde júretuǵın strukturalıq ózgerisler hám olardıń qaytımlıǵı menen baylanıslı bolǵan strukturalıq processler formanı este saqlaw effekti túrinde kórinedi.

Formanı este saqlaw effekti deformaciyalawdıń saldarınan forması ózgerilgen kristallıq denelerdiń kerı fazalıq ótiwdiń yaǵnıy bunnan keyingi fazalıq ótiwdiń nátiyjesinde kristallıq úlgininń dáslepki formasın qaytadan tiklewdi óz ishine aladı. Bul effektke ilimiy ádebiyatlarda hár qıylı atamalardı bergen (formanı este saqlaw effekti, martensitlik este saqlaw effekti, martensitlik jılıwlardıń annigilyaciyası effekti, mexanikalıq este saqlaw effekti yamasa este saqlaw). Bul effekt birinshi ret nitinol-55 dep atalatuǵın (titannın muǵdarı 55%) nikeldiń titan menen quymasında baqlandı. Bul quyma intermetallıq birikpe bolıp tabıladı. Keyinirek nitinol-55 quymasında baqlanǵan effektinń martensitlik fazalıq ótiw menen baylanıslı ekenligi anıqlandı [47].

Geypara avtorlar formanı este saqlaw effektiniń martensitlik fazalıq ótiw orın alatuǵın qálegen kristallıq materialda orın alıwınıń múmkin ekenligin atap ótedi. [60-62].

Ádebiy maǵlıwmatlar boyınsha kristallıq denelerdiń formasın este saqlaw effektiniń kórinewine alıp keletuǵın processler mınalardan ibarat:

1. Sırttan túsirilgen mexanikalıq kernewlerdiń tásirinde polidomenlik kristallardaǵı domenler arasındaǵı transformaciyalardıń orın alıwı (yaǵnıy elastik deformaciyanıń martensitlik mexanizm boyınsha ótiwi) hám sol kristallıq úlgiardiń temperaturasın joqarılatqanda kerı fazalıq ótiwdiń saldarınan bolıp ótken transformaciyalardıń kerı baǵıtta júriwi [45]. Bunday jaǵdayda fazalıq ótiwdiń kristallgeometriyasına dıqqat awdarıw kerek. Temperatura joqarılaǵanda júzege keletuǵın fazalıq ótiwde kristallıq pánjerenin qayta tikleniwinde tek birden-bir variant bar bolatuǵın jaǵdaylarda formanıń tolıq qayta tikleniwi orın aladı (mısalı Cu-Al-Ni quymasında). Al joqarıda atap ótilgen Fe-Ni quymasında kerı KOK→TJG strukturalıq ótiwde strukturalıq qayta qurılıwlardıń bir neshe jolı (variantı) bar bolıp, usınday sebeplerge baylanıslı kristallıq úlgininń forması tolıq tiklenbeydi. Bul jaǵday formanı qayta tiklew qábiletligine iye kristallıq denelerdi

formasın tolıq qayta tikleytuǵın hám formasın tolıq qayta tiklemeytuǵın kristallar dep eki tipke bóliwge múmkinshilik beredi.

Bir qatar avtorlar formanı qaytadan tiklew ushın haqıyqıy elastik deformaciyanıń, yaǵnıy kristallıq pánjereniń defektleriniń payda bolmawınıń zárúr ekenligin atap ótedi [63]. Jılıw yamasa basqa da jollar menen deformaciyalanǵan kristallar ózleriniń dáslepki formaların "tolıq este saqlay almaydı".

Ádette kristallıq pánjereniń defektleriniń payda bolıwı kristallıq úlgilerdiń ishinde lokallıq kernewli oblastlardıń qalıplesiwine alıp keledi. Bul situaciya óz gezeginde qaytımlı túrdegi formanı este saqlaw effektiniń kóriniwin támiyinleydi. Usınday kernewlerdiń tásirinde payda bolǵan lokallıq kernewlerdiń tásirinde usı kernewlerdi múmkin bolǵanısha jaqsı kompensaciyalaytuǵın polidomenlik struktura qalıpleseı. Bul process kristallardıń formasınıń spontan túrde ózgeriwin támiyinleydi. Mısalı Cu-Mn quymasındaǵı antiferromagnitli TJG→qaptalda oraylasqan tetragonallıq fazalıq ótiwinde qaytımlı túrdegi formanı este saqlaw effekti baqlanadı. Bul effektinń ózine tán ózgesheligi sonnan ibarat, fazalıq ótiw noqatınan tómengi temperaturalarında deformaciyalanǵan úgiler qızdırıw processinde keri fazalıq ótiwdiń saldarınan fazalıq ótiw noqatınan tómengi temperaturalarda berilgen formasın tolıq emes túrde qaytadan tikleydi. Bul formanı ózgertiw processı bunnan keyingi termocillawlarda tolıq (turaqlı) túrde qaytalanadı [64]. Bul jaǵdayda da kristallıq pánjereniń defektleriniń tutqan ornı ayqın túrde kórinedi. Olar kristallardıń substrukturasınıń qalıplesiwinde anıqlawshı orınlardı iyeleydi.

2. Fazalıq ótiwdiń sırttan túsirilgen baǵıtlanǵan tásirlerdiń saldarınan elastik deformaciya mexanizmi boyınsha júriwi hám jańa fazanıń payda bolǵan kristallarınıń keri fazalıq ótiw processinde joǵalıwı. Bul jaǵday temir tiykarında jatatuǵın quymalarda júredi (bunday materiiallarda tómengi temperaturalardaǵı deformaciyanıń saldarınan payda bolǵan ε -fazanıń dáslepki γ -fazaǵa ótiwi orın aladı) [65].

Joqarıda atap ótilgen faktlerdiń barlıǵı da formanı este saqlaw effektiniń kristallardıń fazalıq ótiwlerde dáslepki atomlıq-kristallıq hám substrukturasın qayta tiklewi menen baylanıslı ekenligin kórsetedi.

Solay etip fazalıq ótiwlerdi hám fazalıq ótiwlerdi basınan keshirgen kristallardıń substrukturasın izertlew jumısları kóp sanlı texnikalıq máselelerdi sheshiwge múmkinshilik beredi eken. Biraq fazalıq ótiwlerdi ádette hám kóbinese polikristallıq materiallarda izertleydi. Usınday izertlewlerde tiykarǵı dıqqat atomlıq-kristallıq strukturanıń hám materiallardıń fizikalıq qásiyetleriniń ózgerislerine tiykarǵı dıqqat qoyladı. Fazalıq ótiwlerdiń saldarınan payda bolǵan defektlerdi izertlewge baǵıshlanǵan ilimiy izertlewler kristallostrukturalıq proceslerdiń haqıyqıy kartinasın ashıp bere almaydı. Sonlıqtan fazalıq ótiwler menen domenler sistemasınıń transformaciýalarınıń strukturalıq aspektlerin tereńirek úyreniw ushın kristallardıń substrukturası menen fazalıq aylanıslar processin kompleksli túrde rentgenografiyalıq usıllardıń járdeminde tereńirek izertlewlerdiń júrgiziliwiniń zárúr ekenligin ayqın túrde kórsetedi.

1.4-§. Juwmaqlar hám máseleń qoyılıwı

Ádebiy maǵlıwmatlardı bayanlawdıń barısında tiykarǵı dıqqat tómendegidey máselelerge qaratıldı:

1. Kristallardaǵı polidomenlik haldıń payda bolıwı qattı haldaǵı fazalıq ótiwlerdiń tiykarǵı túrleriniń biri martensitlik fazalıq ótiwlerdiń nátiyjesi bolıp tabıladı. Fazalıq ótiwlerdiń saldarınan kristallardıń substrukturasınıń ózgeriwin izertlew aktualıq másele bolıp tabıladı. Al substrukturanı izertlew fazalıq ótiwlerdiń kristallografiyalıq mexanizmlerin hám payda bolǵan fazanıń strukturasın bir mánisli anıqlawǵa múmkinshilik beredi. Polidomenlik strukturalardı izertlew domenlerdi baqlaw, olar arasındaqı orientaciyalıq qatnaslardı dál anıqlaw islerinde jetkilikli dárejede múmkinshiliklerge iye emes usıllardıń járdeminde júrgizilip kelindi. Bul jaǵday difrakciyalıq usıllardıń kompleksin paydalanǵan halda hár qıylı sırtqı tásirlerde (temperatura,

gidrostatikalıq basım, elektr maydanları) kristallıq denelerdegi substrukturalıq ózgerislerdi izertlewge úlken qızıǵıwları oyatadı.

2. Baǵıtlanǵan sırtqı tásirler (mexanikalıq kernew, elektr maydanı) astında strukturalıq domenler arasında bir birine ótiwler orın aladı. Usınıń nátiyjesinde sırtqı tásirdeń baǵıtına qolaylı túrde jaylasqan strukturalıq domenler qalıplese (monodomenizaciya qubılısı orın aladı). Bul jaǵday strukturalıq processlerdeń nızamlıqların polidomenlik kristallardaǵı óziniń mexanizmleri boyınsha fazalıq ótiwlerdeń mexanizmleri menen birdey bolǵan strukturalıq ózgerislerdi (domenlerdeń bir birine aylanıwın yamasa transformacijaların) úyreniw arqalı tabıwǵa bolatuǵınlıǵın kórsetedi. Biraq usınday awaldıń orın alıwına qaramastan polidomenlik kristallardaǵı domenler arasındaǵı transformacijalardı úyreniwge az kewil bólinip atır. Sonıń menen birge ótkerilgen izertlew jumıslarında kristallostrukturalıq processlerdeń haqıyqıy kartinasın ashıp kórsete alatuǵın obyektler menen usıllar qollanılıp kelmekte.

3. Ulıwma jaǵdaylarda martensitlik mexanizm menen júretuǵın strukturalıq processler qaytımlı. Usınıń saldarınan kerı fazalıq ótiwlerde (ádette temperatura tómenlegende bolıp ótetuǵın fazalıq ótiwlerdi tuwrı, al temperatura joqarılaganda baqlanatuǵın fazalıq ótiwlerdi kerı fazalıq ótiwler dep ataymız) kristallardıń baslanǵısh orientacijaları qaytadan tiklenedi hám formanı este saqlaw effekti kórinedi. Biraq ilimiy ádebiyatta kerı fazalıq ótiwdegi kristallıq pánjereniń qaytadan qurılıwı, fazalıq aylanıslardıń saldarınan qaytımlı emes strukturalıq defektlerdeń qalıplesiwi haqqındaǵı eksperimentallıq maǵlıwmatlar kem ushırasadı. Bul jaǵday da óz gezeginde hár qıylı fizikalıq qásiyetlerge iye monokristallıq denelerde atomlıq-kristallıq strukturanıń hám substrukturanıń ózgeriwiniń nızamlıqların úyreniw islerin tereńlestiriwdiń zárúrli ekenligin kórsetedi.

Joqarıda atap ótilgen strukturalıq qubılıslardı izertlewler óz ishine fazalıq ótiwlerdi tikkeley baqlawdı, payda bolǵan substrukturanı vizualizacijalawdı hám sol substrukturanıń hár qıylı sırtqı tásirler túskendegi ózgerislerin úyreniwdi óz ishine aladı. Usı jaǵdayǵa baylanıslı strukturalıq aylanıslardı atomlıq-kristallıq struktura qáddinde izertlew ushın hár qıylı difrakciyalıq usıllardıń kompleksin

(rentgenstrukturalıq analizdiń hár qıylı usılları) birden paydalanıwdıń maqsetke muwapıq keletuǵınlıǵı bir neshe ret atap ótildi.

Ayırım izertlewshiler tárepinen difrakciyalıq usıllardıń kompleksin strukturalıq processlerdi izertlew ushın paydalanılıp atırǵanlıǵın atap ótken orınlı dep esaplaymız. Mısalı kóp izertlewshiler tárepinen ayırım domenlerdi, kristallıq qurılıstıń defektlerin (dislokaciyalardı, dvoynikler arasındaqı shegaranı, noqatlıq defektlerdiń komplekslerin, disklinaciyalardı) baqlaw boyınsha optikalıq hám elektronlıq-mikroskopiyalıq usıllardıń járdeminde tabıslı túrde jumıslar júrgizilmekte. Al rentgenografiyalıq usıllardı usınday izertlewler ushın paydalanıw ushın bir qansha jańalıqlardı, mısalı sızıqlı ólshemleri kishi bolǵan quwatlı rentgen nurlarınıń dereklerin (anodtıń ólshemleri 1 - 10 mkm dan úlken emes bolǵan) paydalanıw talap etiledi.

Sońǵı waqıtları jetilistirilgen rentgendifrakciyalıq súwretler alıwdıń hár qıylı sxemaları (keń tarqalatuǵın dáste usılı, múyeshlik skannerlew usılı, basqa da topografiyalıq usıllar, rentgen difraktometriniń járdeminde kerı pánjereniń kesimlerin dúziw usılları) kristaldıń haqıyqıy strukturasını tikkeley izertlew ushın paydalanılıp atır. Bul usıllar rentgenografiyanıń basqa da bárshege málim usılları menen (Laue usılı, rentgengoniometrlik usıllar, rentgen dilatometriyası, aylanıw hám terbeliw usılları) birgelikte kristallıq pánjereniń strukturasınıń qaytadan qurılıwın izertlew ushın paydalanıw maqsetke muwapıq keledi.

Joqarıdaǵı paragraflarda kristallıq pánjere qáddindegi strukturalıq qubılıslardı úyreniw ushın monokristallıq yamasa ápiwayı polidomenlik strukturaǵa iye úlgilerdi paydalanıwdıń artıqmashlıǵı atap ótilgen edi. Usı tiykarda jumıstı orınlaw ushın tómendigidey kristallıq obyektler paydalanıldı:

Samariydiń monosulfidi SmS hám $\text{Sm}_{1-x}\text{Gd}_x\text{S}$ (bunda $x = 0.15, 0.20$) quyması – metall – yarım ótkizgish. Bul obyektte joqarı basımlarda hám tómengi temperaturalarda izomorflıq fazalıq ótiw orın aladı.

II BAP. Eksperimentallıq izertlewler usılları

2.1-§. Rentgen difraktometriyası

Hár qıylı strukturalıq domenler arasındaqı dál orientaciyalıq qatnaslar, fazalıq ótiwlerdegi kristallıq pánjereniń turaqlıları menen kristaldıń simmetriyasınıń keńisliktegi gruppasınıń ózgeriwleri, kristallardıń fazalıq quramın anıqlaw, fazalıq ótiwlerdiń kinetikalıq ózgesheliklerin úyreniw rentgen difrakciyalıq usıllar járdeminde salıstırmalı ańsat ámelge asırıladı. Usı aytılganlarǵa baylanıslı DRON-UM1 rentgen difraktometrinde tómendegidey eksperimentallıq máseleler sheshildi:

1. Kristallıq pánjereniń turaqlılıarınıń temperaturadan gárezlilikigi ózinen-ózi jazıp alatuǵın ásbaptıń lentasındaqı difrakciyalıq múyeshtiń mánisin anıqlaw menen ámelge asırıldı. Ólshew ushın $\theta > 50^\circ$ bolǵan (múyeshlik gradus) difrakciyalıq maksimumlar saylap alındı.

Difrakciyalıq múyeshti anıqlaw ushın sol difrakciyalıq sızıqtıń biyikliginiń teń yarımındaǵı piktiń teń yarımına sáykes keliwshi múyesh anıqlandı. Lentaǵa múyeshlik belgiler 1 múyeshlik gradustan berildi. Esaplaǵısh (счетчик) tıń tezligi ($1^\circ/\text{min}$ tan artıq emes) hám ózi jazatuǵın ásbaptıń lentasınıń tezligi lantadaǵı 2θ shkalasınıń hár bir múyeshlik minutına keminde 1 mm qashıqlıq sáykes keletuǵında etip alındı.

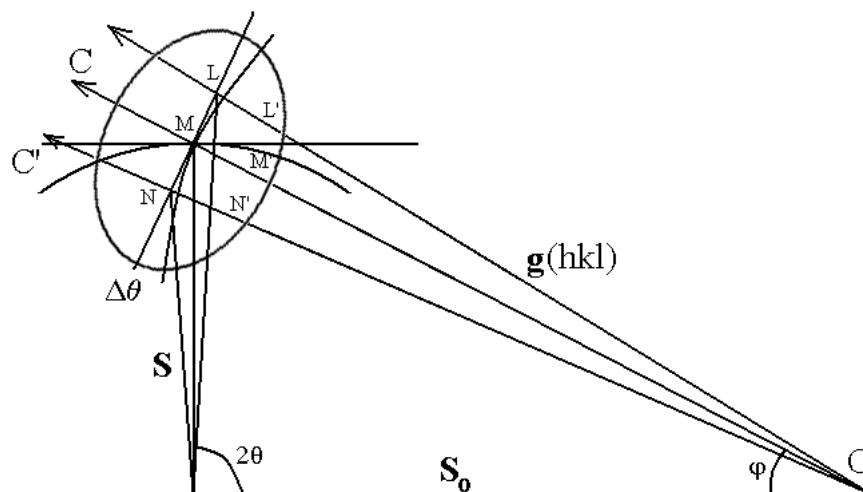
Difrakciyalıq pik hár temperaturada eki ret jazıldı: esaplaǵısh bir baǵıtta hám soǵan qarama-qarsı baǵıtta qozǵalganda. Esapqa alıwshı dúzilistiń inerciyasınıń nátiyjesinde hám lyuftlerdiń esabınan sol eki ret jazıwdaqı alınǵan shamalar 2-3' ke parıq qıldı. Al anıqlanıwı kerek bolǵan difrakciyalıq múyesh sol eki shamanıń arifmetikalıq ortasha mánisi sıpatında alındı.

2. Fazalıq ótiwler barısındaǵı difrakciyalıq maksimumlardıń intensivlikleriniń ózgerislerin tikkeley baqlaw shaǵılısqan rentgen nurlarınıń intensivliklerin ólshew menen ámelge asırıldı. Bunda rentgen goniometriniń esaplaǵısh(счетчик)ı bir yamasa ekinshi fazanıń difrakciyalıq maksimumına qoyıldı. Temperaturanıń hár bir mánisinde ásbap 10 – 40 sekund ishinde kelip túsetuǵın rentgen impulsların

esapladı. Eksperimenttiń nátiyjesi fazalıq ótiw dárejesiniń temperaturadan yamasa waqıttan gárezlilikin ólshew bolıp tabıldı. Bul usıl birinshi ret prustit kristallındaǵı fazalıq ótiwlerdi izertlegende qollanılǵan edi. Al bul jumısta orınlaw barısında gáp etilip atırǵan usıl qorǵasın ortovanadatındaǵı $\gamma \rightarrow \beta$ fazalıq ótiwin baqlaǵanda qollanıldı.

3. Keri pánjereniń kesimlerin dúziw keri pánjereniń túyinleriniń topografıyasın úyreniw ushın qollanıldı. Eksperimentler noqatlar boyınsha skanerlew sxeması boyınsha ámelge asırıldı.

Keri pánjereniń túyinleriniń kesimlerin túsiriwdiń optikalıq sxeması 3-súwrette berilgen. Eksperimentler bılayınsha ótkerildi: nurlanıw intensivligin ólshew birdey adım menen (2θ múyeshi boyınsha $0,1^\circ$) múyeshlik tezlikleriniń qatnası $\frac{1}{2}$ bolǵandaǵı esaplaǵısh penen izertleniwshi kristaldıń birgeliktegi qozǵalıwında 4 sekund dawamında ólshendi ($1/2$ skanerlew). Skanerlewdiń tolıq intervalı $2-4^\circ$. Súwretke alıw barısında intensivligi ólshenetuǵın noqat **ON** vektorı boylap qozǵaladı (bul keri pánjereniń vektorı) hám $N'N''$ intervalın ótedi. Ólshewdiń cikli tamam bolǵannan keyin izertlenip atırǵan kristal turaqlı **ON** da φ múyeshine burıladı (ádette $\varphi = 0.1^\circ$) (θ skannerlew) hám bunnan keyingi $\frac{1}{2}$ skannerlew $M'M''$ sheklerinde ámelge asırıldı.



3-súwret. Keri pánjereniń túyiniń kesimlerin alıwdıń optikalıq sxeması.

Eger burılıw múyeshi φ kishi bolsa **OM** hám **ON** vektorların óz-ara parallel dep esaplawğa boladı.

Joqarıdağı operaciyalardıń juwmaqları boyınsha keri pánjereniń túyinlik tegisliginiń koordinatalarındağı sanlıq maydan dúziledi. Izosızıqlardıń alınğan kartası kristaldıń aylanıw kósherine perpendikulyar bolğan tegislik penen túyinniń kesilisiw tegisligindegi túyinniń kesimleri bolıp tabıladı. Aylanıw kósheri KM zonasınıń qanday da bir kósheri menen sáykes kelse keri pánjerede belgili bir bağıttı beriwge boladı.

Bunday usıl menen ótkerilgen eksperimentlerde tegis, bağıtlangan kristallar paydalanıladı.

Sanlar maydanlarında individuallıq domenlerdiń keri pánjereleriniń superpoziciyası dáslepki pánjereniń túyinleriniń bóleklerge bóliniwı túrinde kórinedi. Payda bolğan polidomenlik strukturaniń tájiriýbeden alınğan geometriyalıq xarakteristikası bóliniw vektorı $\Delta\mathbf{g}$ bolıp tabıladı. Bul vektordıń qurawshıları $\Delta\mathbf{g}_\parallel$ hám $\Delta\mathbf{g}_\perp$ sáykes tegislikler arasındağı qashıqlıqtıń ózgeriwini (Δd_{hkl}) hám ekileniw múyeshine sáykes keledi. Strukturalıq ózgerislerdiń (túrleiwlerdiń) basqa parametrleri: ekileniw tegisligi, invariantlıq tegislik, orientaciyalıq qatnaslar bir neshe túyinlerdiń qurawshılarga bóliniwı boyınsha anıqlanadı.

Eksperimentler usı usıldı qollanganda júdá kishi bolğan ekileniw múyeshlerin anıqlawğa bolatuǵınlıǵın kórsetti (gradustıń júzlerden bir bólegi).

2.2-§. Rentgenografiyalıq aylanıw hám terbeliw usılları

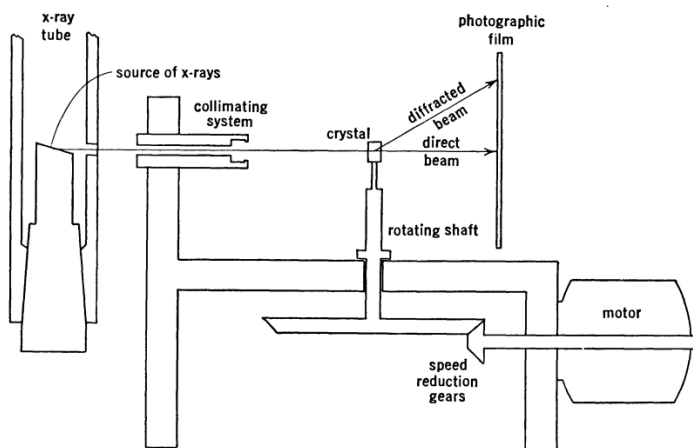
Rentgenostrukturalıq analizdiń (rentgenostrukturalıq tallawdıń) hár qıylı usılları (metodları) keri pánjereniń túyinlerin Evald sferasına (rentgen nurlarınıń tarqalıw sferasına) alıp keliwdiń usılları menen tikkeley baylanıslı.

Aylanıw usılında bunday shárt tolqın uzınlıǵı λ bolğan xarakteristikalıq rentgen nurların paydalanıw hám belgili bir kristallografiyalıq bağıttıń dógeresinde

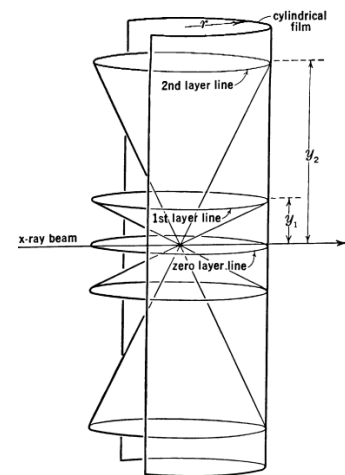
aylanıwshı monokristaldı paydalanıw arqalı ámelge asırıladı. Al terbeliw usında bolsa monokristallıq úlgi usı kristallıq bağıttıń dógeresinde terbeledi.

Shın mánisinde eksperimentte mınaday jaǵday orın aladı: aylanıw usılında ólshemleri 1 mm diń átirapında bolǵan monokristallıq úlgi belgili bir kristallografiyalıq bağıttıń dógeresinde aylanadı (mısalı aylanıw rentgenogrammasın alıw ushın ekspoziciya waqıtında bir neshe onlaǵan ret aylanıwı múmkin). Al terbeliw usılında bolsa tap sol rentgen kamerasında aylanıw múyeshlerdiń belgili bir intervalında ǵana ámelge asırıladı (mısalı biziń qolımızda bolǵan rentgen RKV-86A tipindegi kamerada kristallıq úlginı 3, 10 hám 15 gradusqa alǵa hám keri baǵıtlarda aylandırıw múmkin). Sonlıqtan terbeliw usılınıń matematikalıq mayatniktiń terbeliwı sıyaqlı terbeliwge qatnası joq.

Aylanıw yamasa terbeliw rentgenogramaların túsiriw ushın RKV-86A tipindegi rentgen kamerası paydalanıldı (cilindrlik rentgen plenkasınıń diametri 86 mm, 4-hám 5-súwretler).



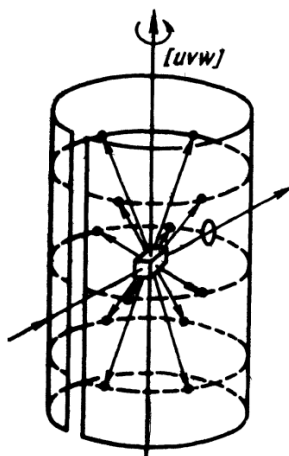
4-súwret. Aylanıw (terbeliw) rentgenogramaların alıw ushın paydalanılatuǵın kameranıń principiallıq sxeması. Sxemada tegis plenkaǵa interferenciyalıq kartınanı túsiriw názerde tutılǵan [91].



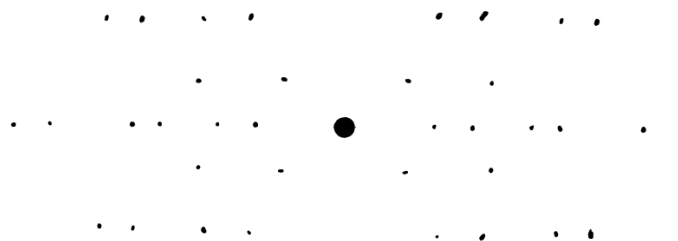
5-súwret. Aylanıw rentgenogramalarında qatlamlıq sızıqlarınıń payda bolıwın túsindiretuǵın sxema.

RKV-86A kamerası goniometrlik golovkaǵa hám eki tiptegi kassetaǵa (rentgen plenkası salıp qoyılatuǵın dúziliske) iye: eki tegis (birewi lauegramma túsiriw, al

ekinshisi epigramma túsiriw ushın arnalğan) hám bir cilindr tárizli. Cilindr tárizli kassetanıń kósheri goniometrlik golovkanıń vertikallıq kósherine sáykes keledi. Al bul kósher kristaldıń aylanıw (terbeliw) kósheri bolıp tabıladı. Tegis plenkağa túsirilgen epigramma yamasa lauegrammanıń járdeminde kristaldıń orientirovkası aldın ala anıqlanadı. Bunnan keyin goniometrlik golovkanıń járdeminde saylap alınğan kristallografiyalıq bağıttıń kristaldıń aylanıw (terbeliw) kósherine parallel etip qoyılıwı ámelge asırıladı, al tegis kasseta cilindr tárizli kasseta menen almasırladı. Aylanıw yamasa terbeliw rentgenogrammasın túsiriw 6-súwrette kórsetilgendeý sxema boyınsha alıp barıladı. Nátiyjede túri 7-súwrette keltirilgendeý rentgenogramma alınadı. Rentgenogrammadağı refleksler qatlamlıq sızıqlar dep atalatuǵın sızıqlar boyınsha jaylasadı. Tuwrı kelip túsetuǵın rentgen nurınıń plenkadaǵı izi arqalı ótetuǵın qatlamlıq sızıqtı nollık, al onıń ústindegi qatlamlıq sızıqtı birinshi, onnan keyingi qatlamlıq sızıqtı ekinshi qatlamlıq sızıq hám t.b. dep ataydı. Al nolınshi qatlamlıq sızıqtıń astındaǵı qatlamlıq sızıqlardı sáykes minus birinshi, minus ekinshi hám t.b. qatlamlıq sızıqlar dep ataw kerek. Qatlamlıq sızıqlar kristaldıń aylanıw kósherine perpendikulyar hám kópshilik jaǵdaylarda nollık qatlamlıq sızıqqa qarata simmetriyalı boladı. Bunday qatlamlıq sızıqlardı birinshi áwlad qatlamlıq sızıqları dep ataydı. Al ortogonallıq kerı pánjere izertlengende rentgen refleksleri (fotoplenkanıń betinde payda bolǵan difrakciyalıq daqlar) quramalı profilge iye bolǵan vertikal baǵıttaǵı sızıqlar boyınsha jaylasadı. Bul vertikallıq sızıqlar birinshi áwlad (I) qatlamlıq sızıqların kesip ótedi. Bunday sızıqlar ekinshi áwlad (II) qatlamlıq sızıqları dep ataladı. I hám II áwlad qatlamlıq sızıqlarınıń payda bolıwın kerı pánjere hám tarqalıw sferası (Evald sferası, radiusı $1/\lambda$ ge teń sfera) haqqındaǵı kóz-qaraslardı paydalanǵanda túsiniikli boladı (5-7 súwretler). Tap usınday kóz-qaraslar rentgenogrammalardı indekslew processin de ádewir jeńillestiredi. Reflekslerdiń interferenciyasınıń óshiw nızamın esapqa alıp tallawdan izertlenip atırǵan kristallıq obyektıń Brave pánjeresiniń tipi anıqlanadı.



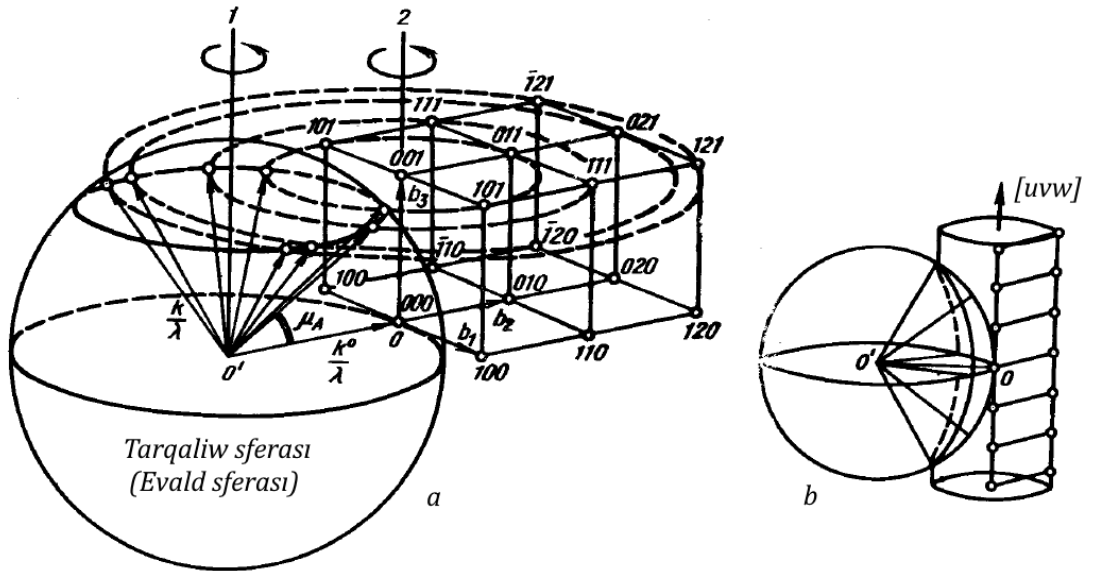
6-súwret. $[uvw]$ kósheriniń dógeresinde aylanıwshı kristaldı cilindrlik plenkaǵa túsiriwdiń sxeması.



7-súwret. NaCl kristallarıń aylanıw rentgenogramması. Aylanıw kósheri $[001]$. Co K_α nurlanıwı paydalanılǵan. Rentgenogrammanıń súwreti ádewir kishireytilgen.

8-súwrette aylanıw kósheri $[uvw]$ ǵa perpendikulyar bolǵan keri pánjereniń bir neshe túyinlik tegislikleri kórsetilgen. Keri pánjereniń koordinata bası 0 arqalı belgilengen. Usı O noqatı arqalı radiusı $1/\lambda$ ge teń Evald sferası ótkerilgen. Onıń orayı O' arqalı belgilengen hám ol O noqatı arqalı ótiwshi kristalǵa kelip túsıwshi rentgen nurınıń baǵıtında jaylasqan. O' noqatınan shıǵatuǵın shashıraǵan nurlar (yaǵnıy difrakciyaǵa ushıraǵan nurlar) keri pánjereni $[uvw]$ kósheriniń dógeresinde aylandırǵanda Evald sferasınıń betin kesip ótetuǵın keri pánjereniń túyinlerine (kesip ótiw noqatlarına) qaray baǵıtlanǵan. Keri pánjereniń túyini Evald sferasın kesip ótken momentte shaǵılısqan (difrakciyaǵa ushıraǵan) nur payda boladı.

Demek, pánjereniń berilgen tipi ushın I áwlad qatlamlıq sızıqlar boyınsha jaylasqan refleksler keri pánjereniń $[uvw]$ kósherine perpendikulyar bolǵan sáykes tegisliklerinde jatqan "ruqsat etilgen" túyinleriniń tarqalıw sferasın kesip ótken momentke sáykes keliwshi shaǵılısqan nurlardıń rentgen plenkasına proekciyalaǵanda qaldırǵan izleri boladı eken (8-a súwret).



8-súwret. Aylanıw (terbeliw) rentgenogrammasındaǵı qatlamlıq sızıqlardıń payda bolıwın túsindiretuǵın Evald qurılıwı. *a* – I áwlad qatlamlıq sızıqları, *b* – II áwlad qatlamlıq sızıqları. 1 – kristaldıń hám ishine plenka salınǵan cilindrlık kassetanıń hám kristaldıń aylanıw (terbeliw) kósheri, 2 – kerı pánjereniń aylanıw kósheri.

[*uvw*] aylanıw kósherinen birdey uzaqtaǵı kerı pánjereniń túyinleri aylanıw kósherine parallel bolǵan qatarlardı payda etedi. Kristal aylanǵanda bul qatarlar cilindrlardıń betinde jatatuǵın saqıynalardı payda etedi. Saqıynalardıń tarqalıw sferası menen kesilisiwleri quramalı profilge iye sızıqlardı payda etedi. Bul sızıqlardıń shaǵılısqan nurlar tárepinen rentgen plenkasına túsirilgen proekciyası II áwlad qatlamlıq sızıqların beredi (8-b súwret).

I áwlad *n*-qatlamlıq sızıqta jaylasqan interferenciyalardıń indeksleri (HKL) aylanıw kósheri [*uvw*] menen

$$Hu + Kv + Lw = n \quad (1)$$

túrindegi ańlatpa arqalı baylanısqan. Bul teńleme

$$\mathbf{g}_{hkl} = H\mathbf{a}^* + K\mathbf{b}^* + L\mathbf{c}^*$$

hám

$$\mathbf{I}_{uvw} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}$$

eki vektorınıń skalyar kóbeymesi bolıp tabıladı.

$$Hu + Kv + Lw = |g_{hkl}| |I_{uvw}| \cos \alpha_n = \frac{n}{d_{hkl}} I_{uvw} \cos \alpha_n = I^* I n = n. \quad (2)$$

Mına jaǵdaylardı atap ótemiz:

Eger aylanıw kósheri [001] bolsa, onda nollik qatlamlıq sıızıq ushın $L = 0$, al birinshi qatlamlıq sıızıq ushın $L = 1$ teńligi orınlanadı.

Eger aylanıw kósheri [110] bolsa, onda nollik qatlamlıq sıızıq ushın $H + K = 0$, teńligi, al birinshi qatlamlıq sıızıq ushın $H + K = 1$ teńligi orınlanadı.

Eger aylanıw kósheri [111] bolıp tabılatuǵın bolsa, onda nollik qatlamlıq sıızıq ushın $H + K + L = 0$, al birinshi qatlamlıq sıızıq ushın $H + K + L = 1$ teńligi orınlanadı.

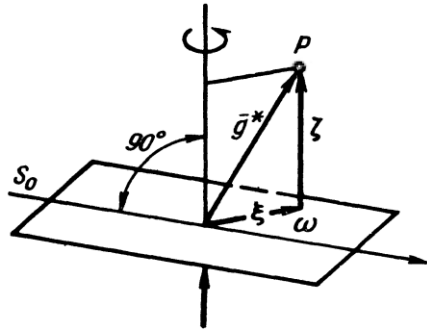
Bul qatnaslar Braveniń ápiwayı P-pánjeresi ushın durıs. Al Braveniń quramalı pánjereleri ushın qatlamlıq sıızıqtıń nomerlerin (qatar sanların) anıqlaǵanda óshiw qaǵıydaların paydalanıw kerek.

Aylanıw (terbeliw) rentgenogrammaları cilindr tárizli plenkaǵa túsiriletuǵın bolǵanlıqtan keri pánjereniń vektorı bolǵan g_{hkl} vektorın cilindrlik koordinatalarda ańlatadı (9-súwret):

$$g_{hkl} = \xi + \zeta. \quad (3)$$

Bul ańlatpada ξ hám ζ arqalı g_{hkl} vektorınıń sáykes vertikalıq hám gorizontallıq proekciyaları belgilengen. Bunday koordinatalardı anıqlaw ushın Bernal tárepinen usınılǵan tor qollanıladı (10-súwret). Bul tor ξ hám ζ shamalarınıń turaqlı mánislerine sáykes keletuǵın sıızıqlardıń eki sistemasınan turadı. Tordı ádette keri pánjereniń masshtabınıń onnan birine hám cilindrlik plenkanıń belgili bir radiusına sáykes etip dúzedi. ζ shamasınıń mánisi -1 den +1 ge shekem ózgeredi (tarqalıw sferasınıń diametriniń ózgeriw shekleri). Al ξ shamasınıń mánisi -2 den +2 ge shekem ózgeredi (tarqalıw sferasınıń ekiletilgen diametriniń sheklerinde). Paydalanıwdı ańsatlastırıw ushın tordı móldir plenkanıń betine sıızadı.

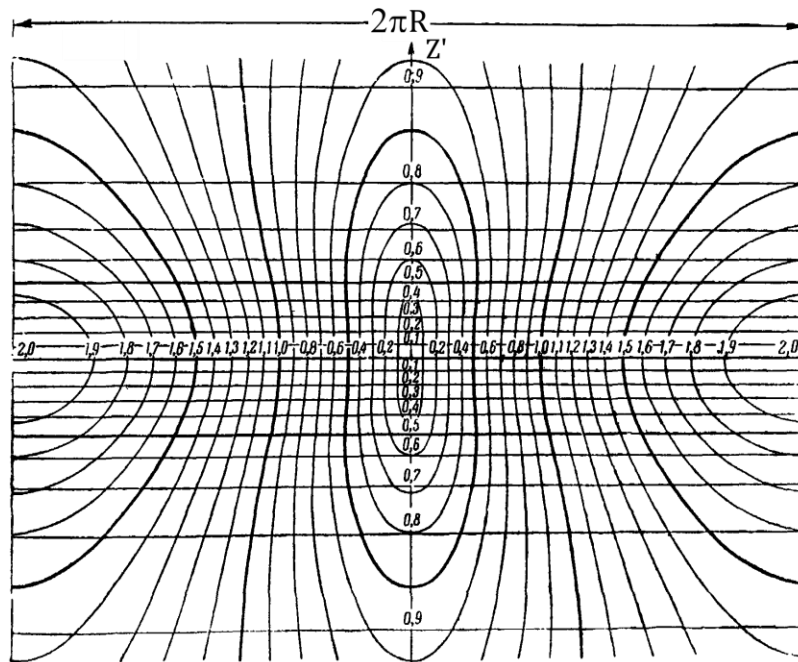
Translyaciýalar sisteması – Brave pánjeresi [001], [110], [111] baǵıtları boyınsha kristallıq pánjereniń turaqlılıarına (birdeylik dáwirlerine, “период идентичност”) qatnası boyınsha anıqlanadı.



9-súwret.

Keri pánjereniń g_{HKL} radius-vektoriniń cilindrik koordinataları.

Birdeylik dáwiri translyaciyalıq vektor, yaǵnıy belgili bir kristallografiyalıq baǵıt boyınsha eń minimallıq qashıqlıq bolıp tabıladı. Bunday qashıqlıqqa jılıtıp qoyǵanda sheksiz pánjere óziniń dáslepki iyelegen ornında y orınǵa túsedı.



10-súwret. Aylanıw yamasa terbeliw rentgenogrammındaǵı ξ hám ζ cilindrik koordinataların ólshew ushın arnalǵan tor (Bernal torı).

Aylanıw kósheri baǵıtındaǵı birdeylik dáwiri qatlamlıq sızıqlardıń ζ koordinatası boyınsha anıqlanadı:

$$I_{[uvw]} = \frac{n\lambda}{\zeta}. \quad (4)$$

Hár qıylı Brave pánjereleri ushın birdeylik dáwirleriniń mánisleri

| Brave pánjeresi | I_{001} | I_{110} | I_{111} |
|-----------------|-----------|-----------------------|-----------------------|
| P , ápiwayı | a | $a\sqrt{2}$ | $a\sqrt{3}$ |
| I , KOK | a | $a\sqrt{2}$ | $\frac{a\sqrt{3}}{2}$ |
| F , QOK | a | $\frac{a\sqrt{2}}{2}$ | $a\sqrt{3}$ |

Eskertiw: bul jumısta mınaday qısqartıwlardıń paydalanılıp atırǵanlıǵın eske túsiremiz: KOK – kólemde oraylasqan kublıq hám QOK – qaptalda oraylasqan kublıq.

$x = [100], y = [010], z = [001]$ koordinatalıq kósherler baǵıtındaǵı birdeylik dáwirleri pánjereniń dáwirleri (turaqlıları) bolıp tabıladı.

Kublıq singoniya ushın birdeylik dáwirleriniń mánisleri 1-kestede berilgen. Bul kestedeki kórinip turǵanıday, translyaciyalar sistemasın bir mánisli anıqlaw ushın $[110]$ hám $[111]$ baǵıtlarındaǵı birdeylik dáwirlerin biliw kerek boladı. Olardıń qatnasları Brave pánjeresiniń tipin bir mánisli túrde anıqlaydı. Mısalı F qutısı ushın (QOK)

$$\frac{I_{110}}{I_{111}} = \frac{a\sqrt{2}}{2a\sqrt{3}} = \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{3}} = \frac{1}{\sqrt{6}}$$

al I qutısı ushın (KOK)

$$\frac{I_{110}}{I_{111}} = a\sqrt{2} \cdot \frac{2}{a\sqrt{3}} = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}}$$

Ulıwma jaǵdayda elementar qutınıń ólshemleri kristaldıń koordinatalıq kósherlerdiń átirapında aylandırıw arqalı alınǵan úsh rentgenogrammanıń járdeminde anıqlanadı. Al kublıq singoniyaǵa kırıwshi kristallardıń ólshemlerin úsh ortogonallıq kósherdiń qálegen birewiniń dógeriginde aylandırıw jolı menen alınǵan bir rentgenogrammanıń járdeminde anıqlaw múmkin. Elementar qutınıń

ólshemlerin anıqlaǵannan keyin bir elementar qutıǵa sáykes keliwshi strukturalıq birliklerdín (atomlardín, ionlardín, molekulalardıń) sanın anıqlaydı. Onıń ushın

$$n = \frac{V\rho}{A \cdot 1,65 \cdot 10^{-24}} \quad (5)$$

qatnasın paydalanadı. Bul ańlatpada V arqalı elementar qutınıń kólemi, ρ arqalı izertlenip atırǵan zattıń tıǵızlıǵı, A arqalı izertlenip atırǵan zattıń atomlıq (molekulalıq) massası, n arqalı bir elementar qutıǵa sáykes keliwshi strukturalıq birliklerdín sanı belgilengen.

Bunnan keyin difrakciyalıq gruppanı hám Brave pánjeresin anıqlaw ushın interferenciyalıq reflekslerdín indekslerin anıqlaw kerek. Bul máseleni sheshiwdi jeńillestiriw ushın ádette koordinatalıq baǵıtlar bolǵan [100], [010] [001] kósherleriniń dógeresinde kristallıq úlgiardi aylandırıw jolı menen alınǵan rentgenogrammalar paydalanıladı. Bunday jaǵdayda (1)-teńlemeden kórinip turǵanıday interferenciyanıń indekslerdín birewi usı refleks jatqan qatlamlıq sıziqtıń qatar sanına (nomerine) teń. Demek aylanıw kósheri [100] bolǵan jaǵdayda $H = n$, al aylanıw kósheri [001] bolsa, onda $L = n$ hám taǵı basqalar.

Aylanıw yamasa terbeliw rentgenogrammaların indekslew ádette grafikalıq jollar menen alıp barıladı. Bunday jaǵdayda kristaldıń aylanıw (terbeliw) kósherine perpendikulyar bolǵan keri pánjereniń túyinlik tegisligi (nollık tegislik) dúziledi. Bul jumıstı orınlaw ushın koordinatalardıń ortogonallıq sisteması paydalanıladı. Demek tek ǵana aylanıw kósheri [uvw] keri pánjereniń túyinlik tegisligindegi abscissa [$H_1K_1L_1$] hám ordinatası [$H_2K_2L_2$] menen tuwrı múyesh jasap qoymay, olardıń arasındaǵı múyeshtiń shaması da 90° qa teń bolǵanı maqul. Oндаy bolsa

$$H_1u + K_1v + L_1w = 0, \quad (6)$$

$$H_2u + K_2v + L_2w = 0,$$

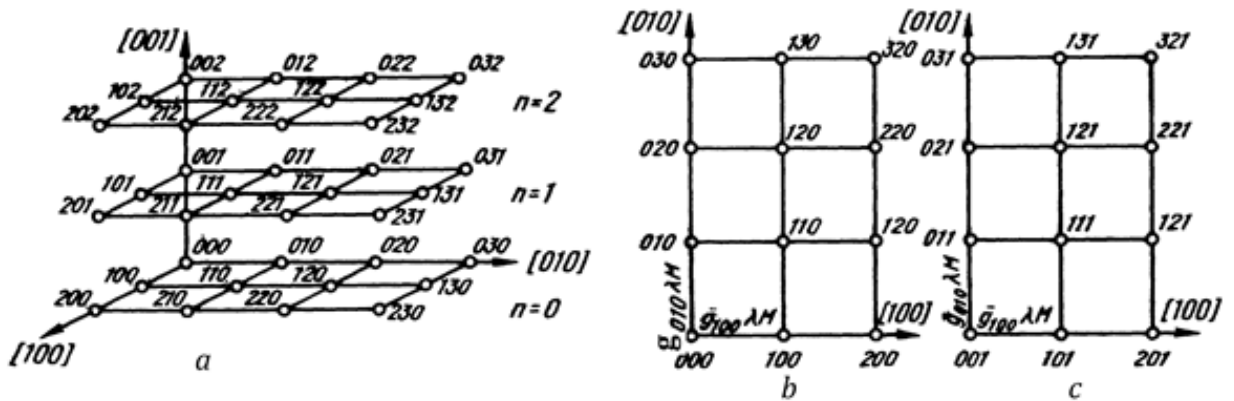
$$H_3u + K_3v + L_3w = 0$$

teńlikleriniń orınlanıwı kerek. Bunnan [001] aylanıw kósheri ushın [100] kósheri abscissanıń, [010] kósheri ordinatanıń ornın iyeleydi. Tap sol sıyaqlı aylanıw kósheri [110] bolǵanda abscissa [100], ordinata [001], al aylanıw kósheri [111] bolǵanda abscissa [110], al ordinata [112] boladı. Biz bul jazıwlarda indekslerdín

tóbesine qoyılatuǵın minuslardı esapqa almadıq (mısalı $[111]$, $[1\bar{1}0]$ hám $[11\bar{2}]$ baǵıtları bir birine perpendikulyar boladı, 11-13 súwretler). Ayırım jaǵdaylarda kerı pánjereniń túyinlik tegisligindegi koordinatalar kósherlerin saylap alǵanda olar arasındaǵı ortogonallıq shártinen bas tartqan maqul. Mısalı aylanıw kósheri $[111]$ bolǵanda koordinatalıq kósherler sıpatında $[110]$ hám $[101]$ baǵıtların saylap alıw múmkin. Bunday jaǵdayda koordinatalıq kósherler arasındaǵı múyeshtiń mánisi

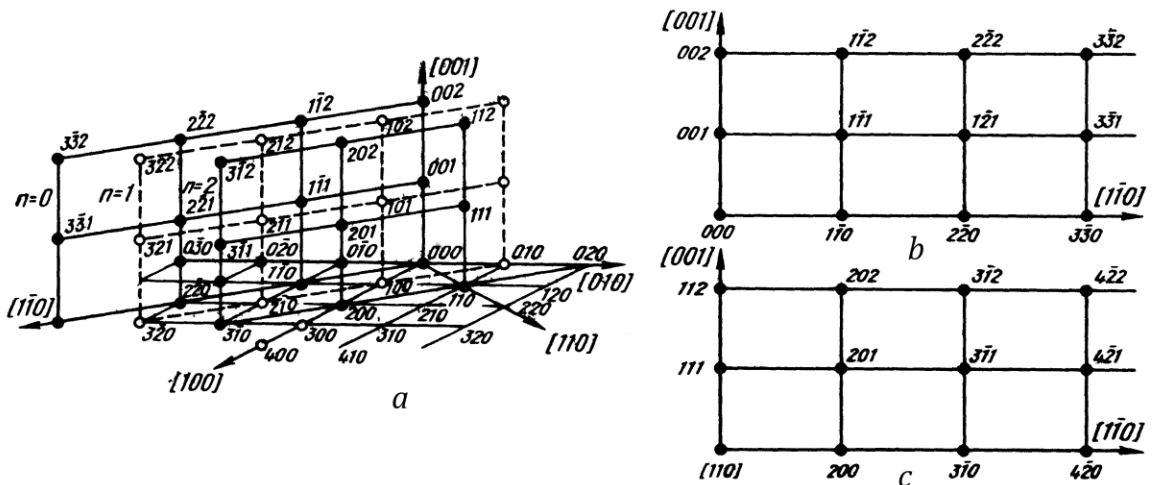
$$\cos \alpha = \frac{H_1 H_2 + K_1 K_2 + L_1 L_2}{\sqrt{H_1^2 + K_1^2 + L_1^2} \sqrt{H_2^2 + K_2^2 + L_2^2}} \quad (7)$$

formulasınıń járdeminde esaplanadı.



11-súwret. Aylanıw kósheri $[001]$ bolǵan jaǵdayda aylanıw

rentgenogrammaların indekslew ushın kerı pánjereniń túyinlik tegisligin saylap alıw. a) túyinlik tegisliktiń koordinatalıq kósherlerin saylaw, b) nollik túyinlik tor, $n=0$; c) birinshi túyinlik tor, $n=1$.



12-súwret. Aylanıw kósheri $[110]$ bolǵan jaǵdayda aylanıw rentgenogrammaların indekslew ushın kerı pánjereniń túyinlik tegisligin saylap alıw.

[110], [101] koordinatalıq kósherleri ushın múyeshtiń shaması $\alpha = 60^0$ qa teń (9-súwret).

Abscissa hám ordinatalar boyınsha berilgen [HKL] bağıtı ushın kerı pánjereniń vektorları $|\mathbf{g}_{HKL}|$ lerdıń tolqın uzınlıgınıń shaması menen masshtablıq kóbeytiwshi M niń kóbeymesiniń mánisleri qoyıladı (kópshilik jaǵdaylarda M niń mánisi 100 ge teń dep qabıl etiledi hám bul shama Evald sferasınıń radiusı bolıp tabıladı).

Berilgen [HKL] bağıtındaǵı $|\mathbf{g}_{HKL}|$ vektorlarınıń sanlıq mánisin anıqlaw ushın kristaldıń pánjeresiniń dáwirlerin biliw kerek. Bul jaǵdayda kublıq pánjere ushın

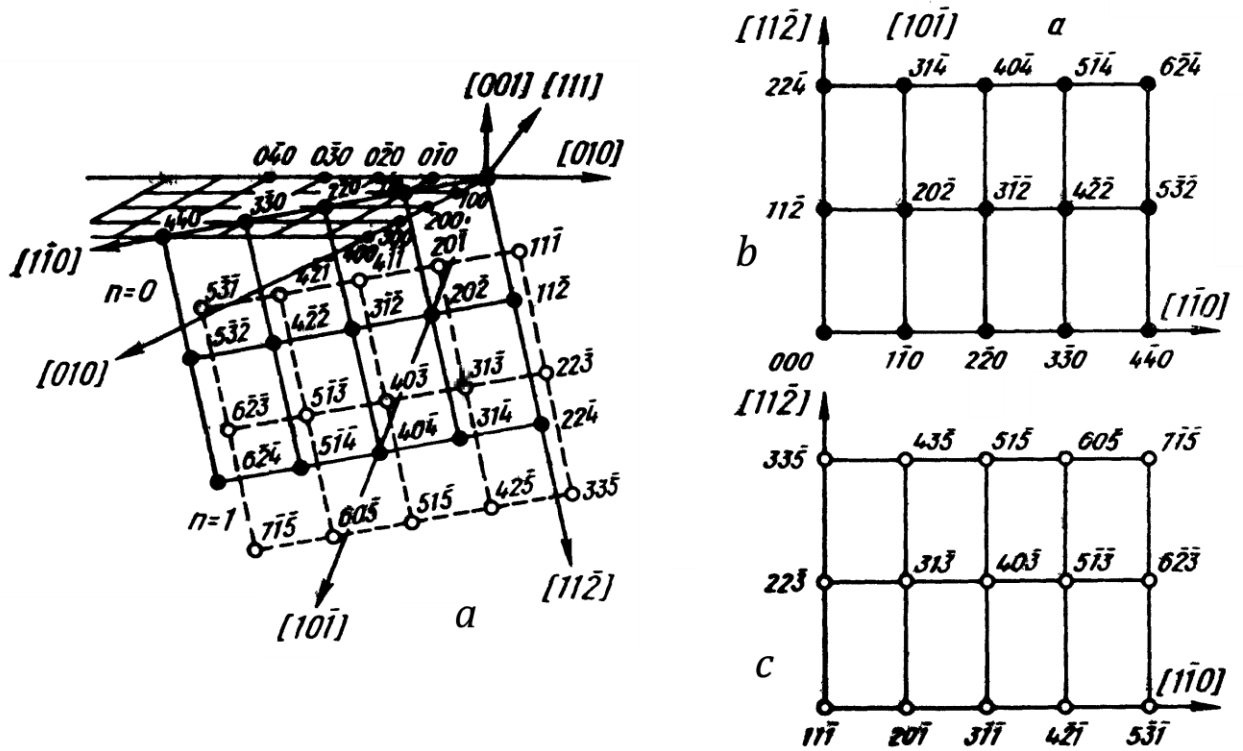
$$|\mathbf{g}_{HKL}| = \frac{H^2 + K^2 + L^2}{a}. \quad (8)$$

Basqa singoniyalar ushın $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}, \alpha, \beta, \gamma, \mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^*, \alpha^*, \beta^*, \gamma^*$ arasındaǵı qatnaslardı kristallografiyalıq kestelerdenyaması kitaplardan alıwǵa boladı (mısalı [28-29, 65]).

Kósherler arasındaǵı maydandaǵı tiykarǵı túyinlerdiń indeksleriniń summası sıpatında anıqlanadı. Eger birinshi, ekinshi hám basqa da qatlamlıq sızıqlarda jaylasqan reflekslerdi indekslew zárúrligi payda bolsa kerı pánjereniń nollik tegisligi paydalanıladı. Bunday tegislikte jatqan túyinlerdiń indeksleriniń mánislerine kerı pánjereniń n -túyinlik tegisliginiń eń baslanǵısh túyiniń indeksleriniń mánisleri qosıladı. Mısalı, n -qatlamlıq tegisliktiń baslanǵısh túyiniń indeksleri bılayınsha tabıladı:

| Aylanıw kósheri | $n=1$ | $n=2$ | $n=3$ |
|-----------------|-------|-------|-------|
| [001] | (001) | (002) | |
| [110] | (010) | (110) | (120) |
| [111] | (111) | (020) | (111) |

Hár qıylı aylanıw kósherleri ushın kerı pánjereniń túyinlik tegisligin dúziwge mısallar 11-13 súwretlerde berilgen.



13-súwret. Aylanıw kósheri $[111]$, koordinatalar kósherleri arasındagı múyesh $\alpha = 60^\circ$ bolǵan jaǵdaydagı túyinlik tegisliklerdiń túri. *a*– nollık túyinlik tegislik, $n = 0$,
b – birinshi túyinlik tegislik, $n = 1$.

Interferenciyalardıń indekslerin joqarıda keltirilgen tártipte anıqlaw tek ápiwayı kristallıq pánjereler (p-tipindegi pánjereler) ushın ǵana durıs. Quramalı elementar qutı bolǵan jaǵdaylarda interferenciyanıń indeslerin anıqlaǵanda óshiw qaǵıydaların esapqa alıw kerék.

12-súwretten kórinip turǵanıday, $[110]$ kósheri ushın birinshi túyinlik tegisliktiń barlıq túyinleri hár qıylı juplıqtaǵı mánislerge iye boladı. Eger kristall QOK lıq strukturaǵa iye bolsa, onda olar rentgen nurların shashırata almaydı. Sonlıqtan usınday kristaldan alınǵan aylanıw (yamasa terbeliw) rentgenogrammalarındaǵı nollık qatlamlıq sızıqqa eń jaqın jaylasqan qatlamlıq sızıqtaǵı reflekslerdi keri pánjereniń ekinshi túyinlik tegisliginen ($n=2$) alınatuǵın refleksler dep esaplaw kerék.

Keri pánjereniń túyinlik tegisligi qurılǵannan keyin bir qatlamlıq sızıqtıń boyında jatqan rentgen refleksleriniń indeksleri bılayınsha anıqlanadı:

Túyinlik tordıń basınan (oraydan) cirkuldiń járdeminde radiusı $\xi \times M$ bolǵan doǵa sızıladı. Doǵa ótken túyinniń indeksleri sáykes qatlamlıq reflekske beriledi (jazıladı). Usınday jollar menen nollik qatlamlıq sızıqtıń barlıq refleksleri indekslenedi. Bunnan keyin kelesi qatlamlıq sızıqtıń reflekslerin indekslewge ótedi. Indekslew processiniń durıs yamasa durıs emes ekenligi qatlamlıq sızıqtıń teńlemesiniń hám óshiw qaǵıydasınıń járdeminde orınlanadı.

Joqarıda atap ótilgenindey, interferenciyanıń indekslerin bilgennen keyin difrakciyalıq gruppanı anıqlaw múmkin.

Eger interferenciyalıq maksimumlardıń intensivligin tallansa hám elektronlıq tıǵızlıqtıń tarqalıwınıń súwreti salınsa, onda difrakciyalıq gruppanıń járdeminde simmetriyanıń keńisliktegi gruppasın saylap alıw múmkinshigi tuwıladı.

Interferenciyanıń indekslerin tallaǵanda integrallıq óshiwlerdiń óz ishine seriallıq hám zonalıq óshiwlerdi alatuǵınlıǵın esapqa alıw kerek. Biz bul jerde integrallıq óshiwlerdiń Brave pánjeresi tárepinen anıqlanatuǵın sóniw, seriallıq óshiwdiń strukturada vintlik kósherlerdiń bar bolıwınıń nátiyjesinde payda bolǵan óshiw, al zonallıq óshiwdiń jılıp shaǵılıstırıwshı simmetriya tegislikleriniń bar bolıwınıń saldarınan payda bolǵan sóniw ekenligin atap ótemiz.

Ámelde interferenciyanıń indekslerin tallaǵanda jáne Brave pánjeresiniń tipin anıqlaǵanda dáslep integrallıq sóniwdiń bar yamasa joq ekenligin, al bunnan keyin qosımsha seriallıq hám zonalıq óshiwlerdiń bar yamasa joq ekenligin anıqlaydı.

2.3-§. Polikristallardı izertlew usılları

Biz endi kristallıq úlgielerdiń strukturasını attestaciyalaw termininen paydalanamız. Bunday jaǵdayda atomlıq-kristallıq strukturanı anıqlaw isleri názerde tutıladı.

Ilimiy hám ámeliy máselelerdi sheshkende kristallıq úlgiiniń strukturasını attestaciyalaw máselesi júdá keń túrde tarqalǵan máselelerdiń biri bolıp tabıladı. Sxemanıń atamasında avtorlardıń familiyaları (mısalı Debay-Sherer usılı) yamasa

izertlenetuǵın úlginin tipi (mısalı "poroshok usılı" yamasa "polikristallar usılı") paydalanıladı. Bul usıllardıń mánisi qısqasha túrde bılayınsha aytıladı:

- obyekt sıpatında mikrokristallıq agregat xızmet etedi (sım, shlif, untalǵan kristall – poroshok, shliftaǵı poroshok, trubkadaǵı poroshok);
- rentgen trubkasınıń sızıqlı spektri (xarakteristikalıq spektr) paydalanıladı;
- difrakciyalıq súwretti kameradaǵı plenkaǵa registracijalaw (debaegrammalardı túsiriw) yamasa difraktometrdiń detektorınıń járdeminde registracijalaw (difraktogrammalardı túsiriw).

Bul jaǵdayda optikalıq sxemanıń ózgesheligi kollimacijalangan dásteniń zonasında jaylasqan tártipsiz túrde orientacijalangan mikrokristallardaǵı tegis monoxromat rentgen tolqınlarınıń difrakciyası bolıp tabıladı. Difrakciya qubılısınıń geometriyasın kerı pánjereniń hám Evald sferasınıń qabıl etilgen terminlerinde túsindiriw qolaylı. Kerı keńislikte polikristallıq obyektke koordinata basları ulıwmalıq bolǵan bir birine salıstırǵanda qálegen múyeshke burılǵan kerı pánjerelerdiń jıynaǵı sáykes keledi. Bul jaǵday obyektin kerı keńisliginde bar bolǵan hám bir (hkl) túyiniń orayı (000) bolǵan sferanıń betine jayılatuǵınlıǵın ańǵartadı. Difrakciyalıq eksperimentte tolqın uzınlıǵı, yaǵnıy shaǵılıstırıw sferasınıń diametri berilgen. Bunday jaǵdayda berilgen kristallografiyalıq tegislikler arasındaǵı qashıqlıq d ushın $2d \sin \theta = 0$ Vulf-Bregg shártiniń orınlanıwı usı túyinniń sferası menen shaǵılıstırıw sferasınıń kesilisiwin ańǵartadı (14-súwret). Nátiyjede konuslıq bet boyınsha difrakciyaǵa ushıraǵan nurlar tarqaladı. Konustıń tóbesindegi múyeshtiń shaması 4θ ǵa teń. Difrakciyaǵa ushıraǵan nurlardıń cilindr tárizli rentgen plenkasınıń beti menen kesilisiw sızıǵı rentgenogrammadaǵı difrakciyalıq sızıqqa sáykes keledi.

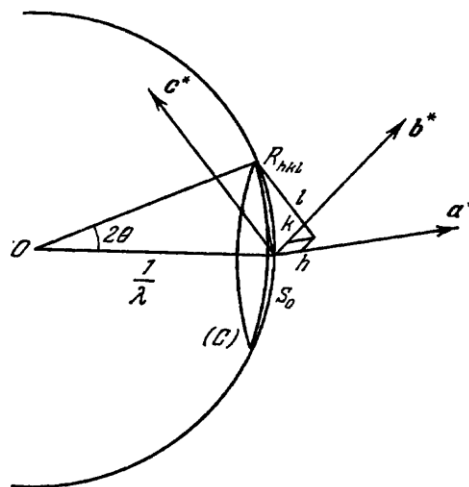
Demek, polikristallardıń rentgenogrammalarınıń kerı pánjeneniń vektorlarınıń uzınlıǵın beretuǵınlıǵın kóremiz hám súwretlerde (rentgenogrammalarda) uzınlıǵı $2/\lambda$ den kem bolǵan vektorlardı ǵana kóremiz.

Debaegrammalardıqayta islegendegi (indekslegendegi) eń startlıq procedura difrakciyalıq sızıqlardıń plenkadaǵı orınları boyınsha difrakciyalıq múyeshtiń mánisin hám olardıń intensivliklerin vizuallıq túrde anıqlawdan ibarat boladı.

Difraktometrde islegende múyeshlerdi ólshewde hám intensivliklerdi (difrakciyalıq maksimum astındaǵı maydan) anıqlaǵanda standart dállik támiyinlenedi jáne difrakciyalıq sızıqlardıń formaları (biyikliktiń yarımındaǵı keńlik) anıqlanadı.

14-súwret.

Polikristallar (yamasa untaǵan kristallar) ushın Evald qurılıwı.



Strukturanı modellestiriw, anıqlaw hám dálligin arttırıw maqsetinde qollanılatuǵın untaǵan materiallardıń (poroshok tárizli materiallardıń) joqarı dálliktegi difraktometriyası kristallar rentgenografiyasınıń jańa baǵdarlarınıń biri bolıp tabıladı. Ótken ásirdeń 60-jıllarınıń aqırında Ritveld tárepinen eksperimentte hám esaplaw járdeminde alınǵan difraktogrammalardı sanlıq jaqtan salıstırıw ideyası usınıldı [10]. Bul jerde aldın-ala quramlıq reflekslerge bóliw procedurasın joq etiw názerde tutıldı. Bul usıldıń bunnan keyingi rawajlanıw barısında strukturalıq izertlewlerdiń kólemi pútkilley rawajlanıp ketti hám poroshok metodı materiallardıń strukturalıq xarakteristikaların izertlewdiń tiykarǵı usıllarına aylandı.

Metodtıń ideyası tómendegidey: esaplanılǵan difrakciyalıq iymeklik eksperimentte alınǵan iymeklikke salıstırılǵanda tolıq difrakciyalıq profildiń hár bir noqatındaǵı rentgen nurlarınıń shashıraw intensivligi paydalanıladı, bul procedura modeldiń strukturalıq parametrlerin eń kishi kvadratlar járdeminde variaciyalaw járdeminde ámelge asırıladı. Metodtıń matematikalıq formulirovkası Nyuton-Gausstıń klassikalıq eń kishi kvadratlar usılı bolıp tabıladı jáne eksperimentte hám esaplawlar járdeminde alınǵan profiler arasındaǵı ayırmanıń kvadratınıń minimallıǵın kózde tutadı:

$$M = \sum_{i=1}^N W_i [y_{i0} - f_i(x)]^2 \rightarrow \min.$$

Bul ańlatpada y_{i0} hám $f_i(x) = f(\theta_i, x_1, x_2, \dots)$ arqalı θ_i noqatlarındaqı eksperimentallıq hám esaplanılǵan difraktorgammalardıń intensivlikleri berilgen, x bolsa optimallastırılǵan profillik hám strukturalıq parametrlerdiń jıynaǵı, N arqalı difraktogrammanı payda etiwshi noqatlardıń sanı, w_i arkalı salmaqlıq kóbeytiwshi (весовой множитель) belgilengen.

Difraktogrammanıń i –noqatındaǵı esaplanılǵan intensivlik mına formula járdeminde anıqlanadı:

$$f_i(x) = S \sum_k |F_k|^2 m_k L(\theta_i) G(\Delta\theta_{ik}) P_k + B(2\theta_i).$$

Bul ańlatpada S arqalı masshtablıq koefficient, F_k arqalı strukturalıq faktor, m_k arqalı qaytalanıw faktori, P_k arqalı tekstura ushın beriletuǵın qosımta, $L(\theta_i)$ arqalı Lorenc hám polyarizaciya faktori, $G(\Delta\theta_{ik})$ arqalı sıziq profilineń funkciyası, $B(2\theta_i)$ arqalı fondı esapqa alıw funkciyası belgilengen. $\Delta\theta_{ik} = \theta_i - \theta_k$ hám θ_i arqalı difraktogrammanıń i –noqatına sáykes keliwshi shashıraw múyeshi, θ_k arqalı Bregg múyeshi belgilengen. Eń keyingi ańlatpa boyınsha summalaw i –noqattaǵı intensivlikke úles qosatuǵın barlıq refleksler boyınsha júrgiziledi (Hár qıylı difrakciyalıq sıziq belgili bir matematikalıq funkciyanıń grafigi bolıwı kerek. Sonlıqtan joqarıda keltirilgen sıziqtıń profilineń funkciyası $G(\Delta\theta_{ik})$ anıqlanıwı zárúr bolǵan áhmiyetli funkciyalardıń biri bolıp tabıladı).

Ayırım sıziqtıń profilineń forması ayqın materialdıń individuallıq ózgeshelikleri menen difrakciyalıq ásbaptıń parametrlerinen kelip shıǵatuǵın shashılawdıń fizikalıq faktorlarınıń qosındı kórinisi bolıp tabıladı.

Esapqa individuallıq sıziqtıń (difrakciyalıq sıziqtıń) profilineń funkciyasın alıw principiallıq áhmiyetke iye bolǵan qádem bolıp tabıladı. Bul ideyada bir birinen jaman ayırılauǵın sıziqlardaǵı informaciyalardı da paydalanıw názerde tutıladı. Bul metodtı (usıldı) Ritveld tárepien birinshi ret paydalanılǵannan beri funkciyalardıń oǵada kóp sanlı funkciyalar sınap kóridi hám profildıń funkciyası joqarı dálliktegi

nátijjelerge erisiwdegi tiykarǵı faktor bolıp tabılatuǵınlaǵı málim boldı. Sızıqtıń formasınıń eń adekvat bolǵan formasın arnawlı túrde izlew ámeliy jaqtan derlik hár bir izertlewdiń usı funkciyanıń túrin jáne profillik parametrlerdi anıqlawshı etapların óz ishine alatuǵınlıǵın kórsetedi.

Ádette profillik funkciyanı eki qurawshıǵa bóledi: formanıń profiliniń simmetriyalıq funkciyası hám asimmetriyalıq funkciyası.

Asimmetriyalıq funkciyası mına túrge iye:

$$G(\Delta\theta_{ik})=g(\Delta\theta_{ik})\cdot A(\Delta\theta_{ik})$$

Difrakciyalıq sızıqlardıń asimmetriyalıǵı tiykarınan dásteniń parallelliginiń joqlıǵında (dásteniń shashıraytuǵınlıǵında). Esaplawlarda kópshilik jaǵdaylarda assimmetriya analitikalıq túrde esapqa aladı. Bul jerde Ritveld tárepinen berilgen mına ańlatpa jetkilikli dárejede effektivli bolıp tabıladı:

$$A(\Delta\theta_{ik}) = 1 - \frac{a \cdot \text{sign}(\Delta\theta_{ik}) \cdot (2\theta_{ik})^2}{\tan\theta_k}$$

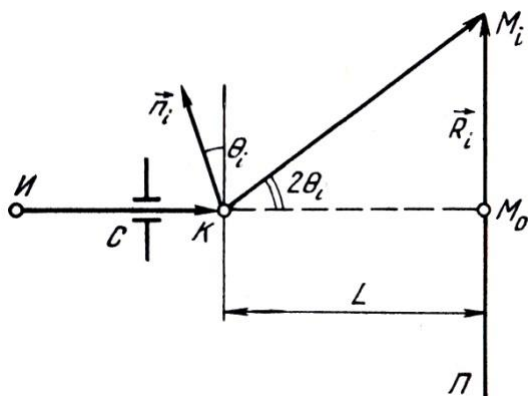
Bul ańlatpada a arqalı assimetriya parametri belgilengen.

2.4-§. Mathematica kompyuterlik algebra hám Delphy programmalaw tilleriniń járdeminde rentgendifrakciyalıq eksperimentlerdi modellestiriw

Rentgendifrakciyalıq eksperimentlerdi kompyuterlik modellestiriw házirgi waqıttaǵı kondensaciyalanǵan hallar fizikasınıń áhmiyetli wazıypalarınan biri bolıp esaplanadı. Kristallar rentgenogrammasınıń sanlı modelin qurıw arqalı hár qıylı qattı materiallardıń atomlıq-kristallıq strukturaların anıqlastırıw, jáne de rentgendifrakciyalıq súwretlerdiń payda bolıw processin kóp sanlı geometriyalıq sxemalar hám arnawlı nurlanıw spektrleriniń járdeminde demonstraciyalaw ámelge asırıladı.

Bul jumısta Mathematica kompyuterlik algebranıń 11-versiyası járdeminde, jáne de imperativlik, strukturalıq obyektlik-orientirlik Delphy tilin qollanıw arqalı Laue hám aylanıw (terbeliw) usıllarında difrakciyalıq súwretlerdi qurıw háreketi ámelge asırıldı.

Qağıydağa muwapıq, eń dáslep sáykes sızıqlı túrlendiriwlerdi ámelge asırıw arqalı kristallografiyalıq koordinatalar sistemasınan rentgen kamerası menen baylanısqañ laboratoriyalıq dekartlıq koordinatalar sistemasına ótiw talap etiledi. Bunda monokristaldı eki kósher boylap burıwdı ámelge asırıw názerde tutıladı: birlenshi rentgen nurları dástesi boylap hám rentgen kamerasına vertikal kósher boylap burıw. Barlıq tallawlar kerı pánjere tilinde alıp barıladı hám sonlıqtan bul jumısta paydalanılğan tiykarǵı shamalar rentgen nurları tolqın uzınlıǵı (polixromatlıq nurlanıw jaǵdayında λ_{\max} hám λ_{\min}), kristallıq pánjere turaqlısı (kerı pánjere vektorı qurawshıları H_x , H_y hám H_z ke sáykes), rentgen kamerasına salıstırǵandaǵı kristaldıń baǵıtın kórsetiwshi eki múyesh, rentgen kassetasınıń ólshemleriniń shaması, úlgi hám plenka ara qashıqlıǵı, jáne de aylanıw (terbeliw) usılındaǵı terbeliw intervalı bolıp esaplanadı.



15-súwret. Difrakciyanıń sxeması:

H – nurlanıw dereǵı; C – kollimator;
 K – kristall; Π – plenka; M_0 –
 plenka orayı; M_i –
 rentgenogrammadǵı refleks; \vec{n}_i –
 shaǵılısıw tegisliklerine túsirilgen
 normal. Laboratoriyalıq
 koordinatalar sistemasınıń Z kósheri
 birlenshi rentgen nurları dástesine
 qarama-qarsı baǵıtlanǵan, XY
 tegisligi plenka tegisligi menen
 parallel.

Lauegramma hám epigrammanı túsiriw jaǵdayında fotoplenkadaǵı X hám Y rentgen refleksleriniń koordinataları tómendegi formulalar járdeminde esaplanadı [91]:

$$X = R \cos \delta, Y = R \sin \delta, R = -L \operatorname{tg} (2\alpha).$$

$$\delta = \arccos \left[\frac{H_x}{\sqrt{H_x^2 + H_y^2}} \right] \text{sign } H_y, \alpha = \arccos \left(\frac{H_z}{H} \right), 2\theta = \pi - 2\alpha.$$

Formulada keltirilgen H_x, H_y, H_z - kerı pánjere vektorı qurawshıları, α – Z kósheri hám kerı pánjere vektorı \mathbf{H} arasındadı múyesh.

Bunda tómendegi shártler esapqa alınırıwı kerek:

1. Barlıq qurıwlarda Z kósheri rentgen nurları ađısına qarama-qarsı bađıtlanadı (yađnıy $H_z \geq 0$).

2. $0 \leq \pi - 2 \arccos \left(\frac{H_z}{H} \right) < \arctg \left(\frac{A^2 + B^2}{2} L \right)$ yamasa

$$\pi \geq \pi - 2 \arccos \left(\frac{H_z}{H} \right) > \pi - \arctg \left(\frac{A^2 + B^2}{2} L \right).$$

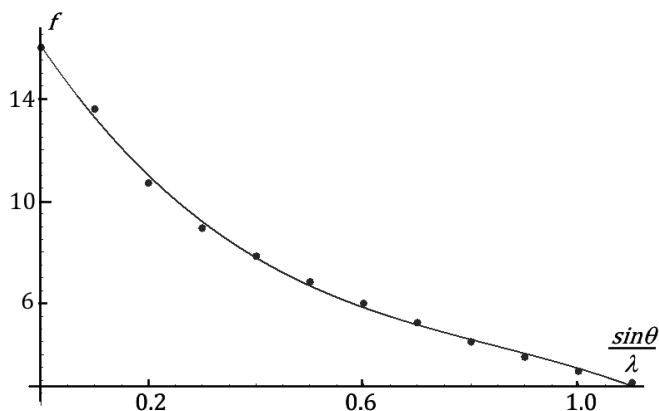
3. $\frac{H^2}{2H_z} \leq \frac{1}{\lambda_{min}}$ hám qosımsha $\frac{H^2}{2H_z} \geq \frac{1}{\lambda_{max}}$.

Álbette, rentgendifrakciyalıq súwretlerdi modellestirgende rentgen nurlarınıń shađılısıwına hám payda bolđan difrakciyalıq daqlardıń intensivliklerine tásir etiwshi strukturalıq faktor hám qaytalanıw faktorın esapqa alıw kerek. Strukturalıq faktordı esaplaw kristallar rentgenografiyasındađı elementar qutıda jaylasqan atomlar koordinataların esaplawshı belgili formulalar járdeminde ámelge asırıladı [92]. Bunda atomlıq shashırav faktorı shamasın esaplap shıđarıw ushın Fit (Mathematica tilin qollanđanda) buyırđı járdeminde tablıcalıq mađlıwmatlar interpolyciyası arqalı alınđan mađlıwmatlar paydalanıladı. Bul jađdayda kúkirt S atomları ushın tómendegi ańlatpa alındı (figuralıq qawsırma ishindegi birinshi san $\frac{\sin \theta}{\lambda}$, shamasına, al ekinshisi atomlıq shashırav faktorı mánisine sáykes keledi):

$$\text{Data} = \{\{0,16\}, \{0.1,13.6\}, \{0.2,10.7\}, \{0.3,8.95\}, \{0.4,7.85\}, \{0.5,6.85\}, \\ \{0.6,6.0\}, \{0.7,5.25\}, \{0.8,4.5\}, \{0.9,3.9\}, \{1.0,3.35\}, \{1.1,2.9\}\};$$

`Line=Fit[Data, {1,x,x2,x3},x]; s=Plot[%, {x,0,1.1}]; f=ListPlot[Data]; Show[{s,f}]`

Alınđan nátiyeler 16-súwrette kórsetilgen.



16-súwret.

Kúkirt ushın atomlıq shashıraw faktorınıń gárezliligi.

Noqatlar – ádebiyatta berilgen maǵlıwmatlar, iymek sızıq - Fit (Mathematica) buyırǵı járdeminde interpolyaciyalaw arqalı alınǵan funkciya grafigi.

Qaytalanıw faktorınıń mánisi rentgen plenkasınıń bir noqatına kelip túsken rentgenlik shaǵılısıwlardıń sanın summalaw arqalı anıqlanadı.

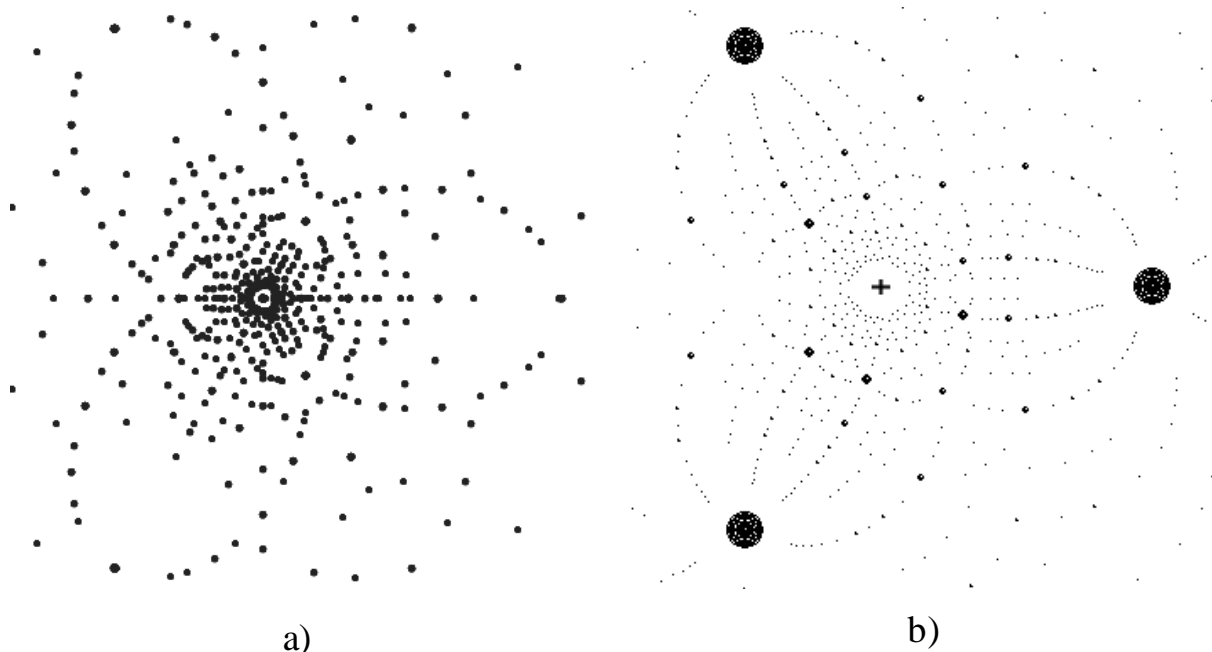
Mathematica programmalaw tili Manipulate buyırǵı járdeminde izertlenip atırǵan materialdın kristallıq pánjere parametrlerin, túsiriw geometriyasın, rentgen kamerası boylap kristaldı burıw múyeshin ózgeriwge múmkinshilik jaratadı. Bıraq, Delphy tilin paydalanǵanda bunday múmkinshilikti ámelge asırıw salıstırmaı quramaı ekenligi kórinedi.

17-súwrette kublıq kristallar ushın alınǵan esaplaw lauegrammaları keltirilgen.

Aylanıw rentgenogrammasın modellestiriw ushın rentgen plenkasındaǵı refleksler koordinataları tómendegi formulalar járdeminde esaplap shıǵarıladı:

$$X = R \arccos\left(\frac{1 - \frac{H^2 \lambda^2}{2}}{\sqrt{1 - H_y^2 \lambda^2}}\right) \text{sign}(H_x), \quad Y = R \frac{H_y \lambda}{\sqrt{1 - H_y^2 \lambda^2}}.$$

Aylanıw rentgenogrammasın qurıwda rentgen refleksleriniń óshiw shártlerin, strukturalıq faktor shamasın, jáne de qaytalanıw faktori mánisin de esapqa alıw kerek boladı. Terbeliw rentgenogrammasına ótiwde izertlenip atırǵan kristall úlgisiniń terbeliw intervalın esapqa alıw tiyis.



17-súwret. Mathematica 11 (a) hám Delphy (b) tilleri járdeminde alınǵan esaplaw lauegrammaları. Birlemshi dáste baǵıtı [111] baǵıtına sáykes keledi. b súwrette difrakciyalıq shaǵılısıw intensivlikleri esapqa alınǵan.

18-súwrette qorǵasın ortovanadatı $Pb_4(VO_4)_2$ ferroelastigi kristalınıń joqarı temperaturalı monodomenlik hám tómen temperaturalı polidomenlik fazaları ushın esaplap shıǵılǵan modellik terbeliw rentgenogrammaları keltirilgen.

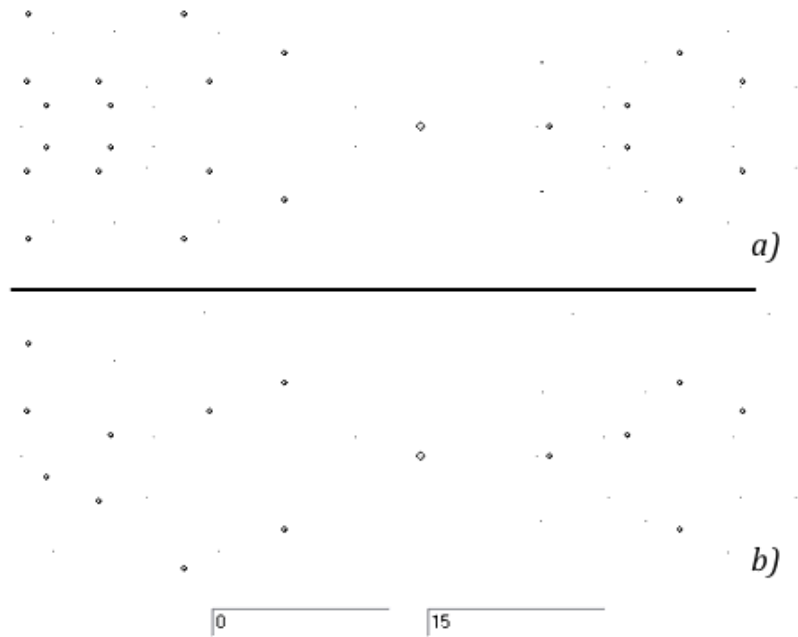
Bul jerde qorǵasın ortovanadatınıń polidomenlik fazasınıń rentgenogramması onıń monodomenlik fazasınıń rentgenogrammasına salıstırǵanda bir qansha quramalı ekenligi kórinip tur. Álbette, rentgendifrakciyalıq súwrettiń quramalılıǵı kóp sanlı orientaciyalıq hallardıń payda bolıwı menen baylanıslı. Haqıyqatında da, 373 K nen joqarı temperaturalarda qorǵasın ortovanadatı trigonallıq strukturaǵa iye boladı. Bunnan tómen temperaturada I áwlad fazalıq ótiw nátiyjesinde monoklinlik struktura qáliplesedi. Monoklinlik strukturanıń payda bolıwı quramalı dvoynikleniw mexanizmi saldarınan júriwshi fazalıq ótiw menen baylanıslı. Bunda kristallıq pánjere parametrleri sezilerli dárejede ózgeredi hám ójire temperaturasında dvoynikleniw múyeshiniń shaması $5 \cdot 10^{-4}$ qa teń boladı. Demek, modellik difrakciyalıq súwret barlıq orientaciyalıq hallardıń difrakciyalıq súwretleri superpoziciyasınan turadı eken. Sonlıqtan, 18b súwrette kórsetilgen

modellik rentgenogrammanı qurıw ushın $Pb_4(VO_4)_2$ kristalındaǵı fazalıq ótiwler kristallgeometriyası haqqındaǵı bilimler zárúr hám bunda modellik rentgenogrammanı qurıw boyınsha barlıq kristallografiyalıq maǵlıwmatlardı esapqa alıw kerek boladı.



18-súwret. Qorǵasın ortovanadatı $Pb_4(VO_4)_2$ ferroelastigi kristalınıń joqarı temperaturalı monodomenlik hám tómen temperaturalı polidomenlik fazaları ushın esaplap shıǵılǵan modellik terbeliw rentgenogrammaları.

19-súwrette kúkirtli cink ZnS kristalınıń polidomenlik (19a súwret) hám baǵıtlı deformaciyalanǵan jaǵdaylarında alınǵan modellik terbeliw rentgenogrammaları kórsetilgen. Cink sulfidi kristalında 1900-1500°C shamasındaǵı temperaturalarda kublıq kristaldıń eki orientaciyalıq halı payda bolıwı nátiyesinde joqarı temperaturalı vyurcitlik modifikaciyasınan tómen temperaturalı sfaleritlik modifikaciyaǵa qaray fazalıq ótiwi júretuǵınlıǵı belgili. Sonlıqtan polidomenlik jaǵday ushın alınǵan difrakciyalıq súwret kristaldıń kublıq modifikaciyasına tiyisli eki difrakciyalıq súwrettiń superpoziciyasınan quraladı. Eki birdey difrakciyalıq súwrettiń superpoziciyası simmetriyanıń jańa (jalǵan) elementleriniń payda bolıwına alıp keledi.



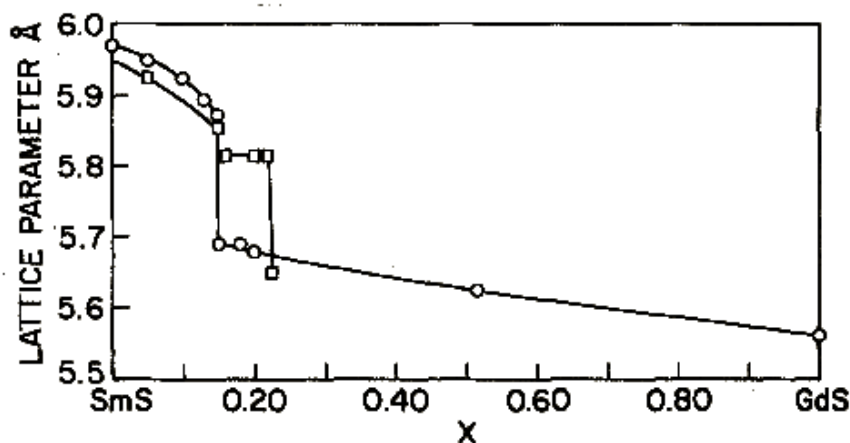
19-súwret. ZnS kristalınıń polisintetiklik (a) hám monokristallıq (b) modellik terbeliw rentgenogrammaları. Terbeliw kósheri [111]. Terbeliw intervalınıń 15° qa teń ekenligi kórinip tur.

Strukturalıq ózgerisler processleriniń kristallgeometriyasın difrakciya qubılısındaǵıday etip ayqın kórsetiwge múmkinshilik jaratıwshı rentgendifrakciyalıq eksperimentlerdi modellestiriwde bunday programmalardı qollanıw arqalı rentgen nurları optikası menen baylanıslı tálim beriwde jaqsı hám paydalı nátiजेge erisiw múmkin dep esaplawǵa boladı.

III BAP. Samariy monosulfidi, SmS hám GdS birikpeleriniń quymasındaǵı fazalıq ótiwlerdi rentgenografiyalıq izertlewler

3.1-§. Samariy monosulfidi (SmS) kristallarındaǵı metall-yarım ótkizgish fazalıq ótiwleri

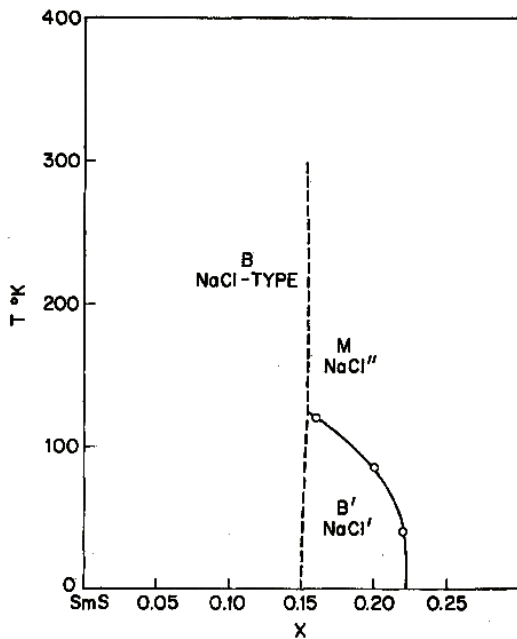
SmS birikpesi ionlıq baylanısqa iye boladı hám NaCl tipinde kristallanadı (simmetriyasınıń keńisliktegi gruppası $O_h^5 = Fm3m$, Debay temperaturası 247 K [67], balqıw temperaturası 2210 K [68]) [153]. Shaması ~ 7 kbar bolǵan gidrostatikalıq basım túsirilgende birinshi áwlad fazalıq ótiwi orın aladı. Usınıń saldarınan baslanǵısh yarım ótkizgish faza (B-faza) metallıq fazaǵa ótedi (M-faza) [70]. Bunday fazalıq ótiw izomorflıq fazalıq ótiw bolıp tabıladı (izomorflıq fazalıq ótiwde kristaldıń simmetriyasınıń noqatlıq gruppası ózgermeydi, al kristallıq pánjereniń turaqlılıarınıń mánisleri ǵana ózgeriske ushıraydı). Házirgi waqıtları samariy monosulfidi kristallarındaǵı yarım ótkizgish \rightarrow metall (B \rightarrow M) fazalıq ótiwin 4f \rightarrow 5d elektronlıq ótiwi, yaǵnıy samariy ionnınıń valentliginiń 2 den 2,62 ge shekem úlkeyiwi menen baylanıstıradı [71].



20-súwret. Lattice-parameter data as a function of Gd concentration at 298°K (circles) and 4.2°K (squares). The parameter is independent of concentration in the range $15 < x < 22$ at. %.

[70]-jumısta alınğan maǵlıwmatlar $B \rightarrow M$ fazalıq ótiwinde elementar qutınıń kóleminiń ~ 16 procentke kemeyetuǵınlıǵın kórsetedi. Usınday úlken kólemlik effektin nátiyjesinde monokristallıq úlqiler hár tárepleme basımnın (gidrostatikalıq basımnın) tásirinde poroshokqa (mayda kristallǵa) aylanadı. Bul jaǵday SmS monokristalların izertlew processinde úlken qıyınshılıqlardı payda etedi.

Bir qatar jumıslarda (mısalı [72]) ójire temperaturalarında $B \rightarrow M$ fazalıq ótiwiniń 5,7 kbar, al kerı ótiwdiń 2,0 kbar basımlarda júzege keletuǵınlıǵı kórsetilgen.



21-súwret.
Phase-stability regions in the T-x
diagram
for $\text{Sm}_{1-x}\text{Gd}_x\text{S}$.

[73-74] jumıslardıń avtorları SmS kristallarınıń metallıq fazasın hár qıylı deformaciyalardıń járdeminde atmosferalıq basımlarda stabillestiriwdiń múmkinshiliklerin taptı. Mısalı samariy monosulfidi kristalların almaz pastanıń járdeminde polirovkalaǵanda monokristallıq úlqilerdiń betinde serpimli kernewlerdiń payda bolıwınıń nátiyjesinde metallıq fazanıń qalıplesetuǵınlıǵı tabılǵan. Al usı betti lazer nurı menennurlandırganda kerı metall \rightarrow yarım ótkizgish fazalıq ótiwi orın aladı eken [74-75]. M- hám B-fazalardıń jaqtılıqtı shaǵılistırıw koefficientleriniń pútkilley hár qıylı bolıwınıń sebebinen usınday kristallardı informaciyalardı jazıw ushın arnalǵan dúzilislerdi soǵıw ushın qollanıw múmkinshilikleri payda boladı.

Eń birinshi bolıp A.Jayaraman hám onıń soavtorları SmS kristalların GdS birikpesi menen legirlegende kristallıq pánjereniń parametrleriniń sekirmeli túrde ózgeretuǵınlıǵın kórsetti (20-súwret)[76]. Bul jumısta Sm atomlarınıń orınların Gd atomları iyelegende samariy monosulfidi kristallarınıń ishinde ishki qısqılıwdıń payda bolatuǵınlıǵı kórsetilgen. Jetkilikli dárejedegi koncentraciyalarda (15-16 mollik % GdS qatnasqanda) effektivlik ishki basım $B \rightarrow M$ izomorflıq fazalıq ótiwiniń júriwine alıp keledi (gidrostatikalıq basımınıń astında fazalıq ótiwdiń júrgenindey). Bunday jaǵdayda gadolinydiń valentlik halı ózgeriske ushıramaydı. Koncentraciyanıń $x = 0.12 - 0.15$ diapazonında $Sm_{1-x}Gd_xS$ quymasınıń yarım ótkizgish fazası gidrostatikalıq basımınıń tásirinde metallıq M-fazaǵa qaytımsız túrde ótedi.

Izertlewler ótkerilgen dáwirge shekem $Sm_{1-x}Gd_xS$ sistemasınıń xal diagramması tolıq túrde dúzilgen joq. A.Jayaraman tárepinen usınılǵan hal diagrammasınıń dáligin jetilistiriw máselesi orın aldı (21-súwret).

Solay etip ilimiy ádebiyatta bar maǵlıwmatlardı tallaǵanda samariy monosulfadı kristallarında gidrostatikalıq basımınıń táhiri astında yarım ótkizgish \rightarrow metall izomorflıq fazalıq ótiwiniń orın alatuǵınlıǵın kórsetti. Bul fazalıq ótiw samariy ionınıń valentliginiń ózgeriwi menen baylanıslı. Bunday kristallardı GdS birikpesi menen legirlegende kristalda effektivlik ishki basımınıń payda bolıwınıń sebebinen fazalıq ótiwdiń júzege keliwi ushın zárúrli bolǵan gidrostatikalıq basımınıń shaması kishireyedi. Fazalıq ótiwde úlken kólemlik effektitiń baqlanıwınıń saldarınan monokristallıq úlgiler qıyraydı. Sonlıqtan usı waqıtlarǵa shekem samariy monosulfidi kristallardaǵı strukturalıq aylanıslardıń ózgesheliklerin tolıq izertlewdiń sáti túspegen.

Biziń izertlewlerimiz SmS kristallarındaǵı fazalıq ótiwlerdiń kristallgeometriyasın úyreniwden baslandı. Bunnan keyin rentgen difraktometriniń hám terbeliw kamerasınıń járdeminde járdeminde kóp ret qaytalanǵan fazalıq ótiwlerdi izertlew jumısları júrgizildi.

$Sm_{1-x}Gd_xS$ birikpelerindegi fazalıq ótiwlerdi izertlegende pyezometrlik ásbaptı paydalanǵanda (ortalıq sıpatında qorǵasın xızmet etti) monokristallardıń

qıyramaytuǵınlıǵı anıqlandı. Sonlıqtan bunday kristallardaǵı eki fazalıq haldı atmosferalıq basımlarda úyreniwdiń múmkinshiligi payda boldı.

Bul fakt ótkerilgen izertlewlerdiń tiykarın quradı.

Rentgenografiyalıq jollar menen hám optikalıq mikroskoptıń járdeminde ójire temperaturalarında tómendegidey obyektler izertlendi:

1) pyezometrlik ásbapta aralıqlıq eki fazalı (B+M) halǵa ótkerilgen $\text{Sm}_{0.87}\text{Gd}_{0.13}\text{S}$ monokristalları $\text{Sm}_{0.87}\text{Gd}_{0.13}\text{S}$;

2) baslanǵısh B fazadaǵı hám gidrostatikalıq basımnıń tásirinde qaytımsız túrde M fazaǵı ótkerilgen $\text{Sm}_{0.85}\text{Gd}_{0.15}\text{S}$ monokristalları;

3) porshen-cilindr tipindegi (ortalıq – qorǵasın) pyezometrlik dúziliste gidrostatikalıq basımlar astında bir neshe $\text{B} \rightleftharpoons \text{M}$ fazalıq ótiwler ciklların bastan ótkergen SmS monokristalları.

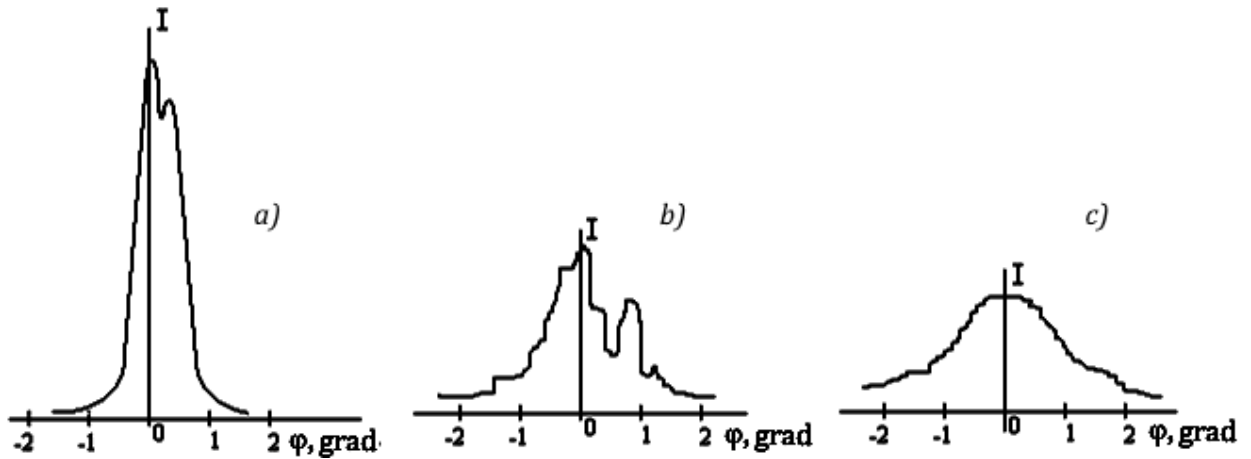
Joqarıda atap ótilgenindey, barlıq kristallar NaCl tipindegi strukturaǵa iye boldı.

SmS , $\text{Sm}_{0.87}\text{Gd}_{0.13}\text{S}$ hám $\text{Sm}_{0.85}\text{Gd}_{0.15}\text{S}$ kristalların rentgenografiyalıq izertlewler RKV-86A kamerasında hám DRON-2.0 difraktometrde CuK_α hám FeK_α nurların paydalanıw jolı menen júrgizildi.

$\text{Sm}_{0.87}\text{Gd}_{0.13}\text{S}$ kristallarınıń baslanǵısh B-fazasınıń strukturası jetkilikli dárejede joqarı boldı. Bunday monokristallardaǵı kristallıq bloklar arasındaqı orientaciylar arasındaqı múyeshlerdiń shaması 1^0 tan úlken emes. Pyezometrde izertlew ushın úlgiler almaz keskishtiń járdeminde kesildi hám ximiyalıq jaqtan qayta islendi (травление). Usınday mexanikalıq tásirlerde úlginıń betinde M-fazaǵa tiyisli bolǵan monokristallıq plenka payda boldı hám bul kristallıq plenkanıń strukturası B-fazaǵa tiyisli bolǵan matrica menen kogerentli túrde baylanısqan edi.

Izertlenilgen kristallıq úlgiler keyin pyezometrde aralıqlıq eki fazalıq (B+M) halǵa ótkerildi. Rentgenogrammalardı tallaw hám difraktometriyanıń maǵlıwmatları $\text{B} \rightarrow \text{M}$ fazalıq ótiwinde kristallografiyalıq baǵıtlardıń 6 múyeshlik minut dállikte ózgermeytuǵınlıǵın kórsetti. Bul maǵlıwmatlar izomorflıq fazalıq ótiwde metallıq hám yarım ótkizgish fazalarınıń α kristallografiyalıq baǵıtlarınıń

özgermeytúǵınlıǵın tastıyıqlaydı. Demek B-fazanıń a baǵıtı M-fazanıń a baǵıtı menen parallel ekenligine iye bolamız. Usınıń nátiyjesinde M-fazanıń hár bir refleksine M-fazanıń bir refleksi sáykes keledi.



22- súwret. $\text{Sm}_{0.87}\text{Gd}_{0.13}\text{S}$ kristallı ushın bir kristallıq spektrometr usılınıń járdeminde alınǵan difrakciyalıq iymeklikler. a – B-faza baslanǵısh halda, b – B-faza eki fazalıq halda (B+M fazalar), c – M-faza eki fazalıq halda.

Ekinshiden, eki fazanıń da kristallıq úlginıń kólemi boyınsha bir tekli tarqalıwınıń orın alatuǵınlıǵı anıqlandı. Bul jaǵdaydıń orın alatuǵınlıǵın anıqlaw ushın hám qıylı (hkl) shamalarına teń rentgen refleksleriniń intensivlikleri hám kristallıq úlginıń betiniń rentgen nurları túsip turǵan hár qıylı maydanlarında difrakciyaǵa ushıraǵan rentgen nurlarınıń intensivlikleriniń qatnasları izertlendi. Kóp qaytalanǵan difrakciyalıq eksperimentler hám qıylı fazalarǵa tiyisli bolǵan rentgen pikleriniń biyiklikleri menen maydanlarınıń qatnaslarınıń ózgerissiz qalatuǵınlıǵın kórsetti (demek kristallıq úlgilerdegi hár qıylı fazalar iyelegen kólemlerdiń shamalarınıń qatnasları turaqlı degen sóz).

Úshinshiden, (B+M) halda B- hám M-fazalar monokristallıqtı saqladı. Biraq mınaday jaǵdaylardıń orın alatuǵınlıǵı anıq boldı: eki faza ushın da bloklar boyınsha maksimallıq razorientaciyanıń (bloklar arasındadı múyeshlerdiń) shaması birdey bolsa da (shama menen 4° tan úlken emes) B- hám M-fazalardaǵı subtúyirtpeklerdiń (rus tilinde subzerna) tarqalıwı hár qıylı bolıp shıqtı. B faza

ayqın túrdegi strukturaǵa iye emes ushın kóp sanlı iri hám mayda bloklarǵa bóliniw tán. Al M fazanıń subtúyirtpekleriniń olar arasındaǵı razorientaciya múyeshleri boyınsha tarqalıwı simmetriyalıq iyemekliktiń járdeminde táriyiplewge boladı. Bul iyemekliktiń forması ayqın túrde kórinip turatuǵın substrukturanıń payda bolıwına sáykes keledi. Bul jaǵday bir kristallıq spektrometr usılı boyınsha alınǵan difraktogrammalarda hám terbeliw rentgenogrammalarında anıq kórinedi (22-súwret).

B→M fazalıq ótiwde rentgen refleksleriniń bir neshe reflekske bóliniwi baqlanbadı. Bul jaǵday fazalıq ótiwde strukturanıń izomorflıq ózgeriwiniń dilataciyalıq mexanizm menen júretuǵınlıǵınan derek beredi. Eger bir reflektiń bir neshe reflekslerge bóliniwi orın alatuǵın bolsa, onda fazalıq ótiwdiń basqa kristallgeometriyası – ekileniw menen júzege keliw mexanizmi haqqında aytıwǵa tuwrı kelgen bolar edi. Biraq bir reflekslerdiń ekiden aslam reflekslerge aylanıwınıń baqlanbaǵanlıǵı sebepli fazalıq ótiwdiń dilataciyalıq mexanizmi haqqında gáp etiwge múmkinshilik beredi.

Solay etip $\text{Sm}_{0.87}\text{Gd}_{0.13}\text{S}$ kristallarındaǵı eki fazaǵa iye úlgiardi izertlewdiń barısında B→M fazalıq ótiwinin dilataciyalıq mexanizm menen júretuǵınlıǵı, yaǵnıy elementar qutılardıń qabırǵalarınıń uzınlıqlarınıń ózgeretuǵınlıǵı, al olardıń orientaciyalarınıń (baǵıtlarınıń) ózgermeytuǵınlıǵı haqqında juwmaqqa kelemiz.

Tómende keltirilgen kestedeki kristaldıń túraqılılarınıń mánisleri hám alınǵan difrakciyalıq piklerdiń yarım keńligi haqqındaǵı maǵlıwmatlar keltirilgen. Kestede eń dáslepki kristallıq úlgidegi B- hám M-fazalardıń (M-faza kristallıq úlginiń betinde jaylasqan) túraqılılarınıń hám bir neshe fazalıq ótiwlerdi basınan keshirgen úlgiarderdekristallıq pánjereniń túraqılılarınıń $\pm 5 \cdot 10^{-4}$ Å dállikte birdey ekenligin kóriwge boladı. Biraq difrakciyalıq piklerdiń yarım keńligi ádewir keńeygen. Bul jaǵday kvazigidrostatikalıq basım menen qayta islengennen keyin eki fazanıń da kernewli awhalda jaylasatuǵınlıǵı haqqında derek beredi. Sonıń menen birge M-fazaǵa tiyisli bolǵan difrakciyalıq piktiń yarım keńliginiń kóbirek úlkeygenligi ($0,097^\circ$ qa, al B-fazaǵa juwap beretuǵın difrakciyalıq reflekslerdiń yarım keńligi $0,038^\circ$ qa) dıqqattı tartatuǵınlıǵın atap ótemiz. Kórinip turǵanıday, bul jaǵday óz

gezeginde B-fazada kernewlerdiń kristallıq bloklardıń payda bolıwı menen relaksacijalanatuǵınlıǵı menen baylanıslı bolsa kerek.

B- hám M-fazalardıń kristallıq pánjereleriniń turaqlılıarı (angstremlerde)

| $a \pm 0,005\text{Å}$ (200) difrakciya- lıq piginiń yarım keńligi, $\pm 0.005 \text{ Å}$ | Dáslepki úlgi | | Basım menen qayta islengen kristallıq úlgi | |
|--|---------------|--------------------|---|--------|
| | B-faza | M-faza (plenka) | B-faza | M-faza |
| | | 5.8936 | 5.6878 | 5.8924 |
| | 0.175 | 0.219 | 0.213 | 0.300 |

SmS, $\text{Sm}_{0.85}\text{Gd}_{0.15}\text{S}$ kristalların RKV-86A kamerasında izertlewdiń barısında lauegrammalar hám terbelis rentgenogrammaları túsirildi. $\text{Sm}_{0.85}\text{Gd}_{0.15}\text{S}$ birikpesiniń lauegrammaları monokristallardıń qabırǵalarına salıstırǵandaǵı kristallografiyalıq kósherlerdiń baǵıtları fazalıq ótiwge shekem qanday bolsa, fazalıq ótiwden keyin de sonday ekenligin kórsetti. B→M ótiwindegi kristallografiyalıq baǵıtlardıń ózgerissiz qalıwın terbelis rentgenogrammaları da kórsetti. Reflekslerdiń jayılwı fazalıq ótiwde kristallıq bloklar arasındadıǵı múyeshlerdiń 4^o qa shekem úlkeyetuǵınlıǵın kórsetti.

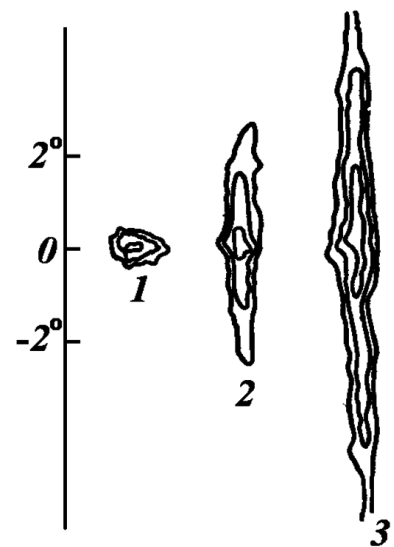
23-súwret.

SmS kristallarınıń (400) túyininiń kese-
kesimleri.

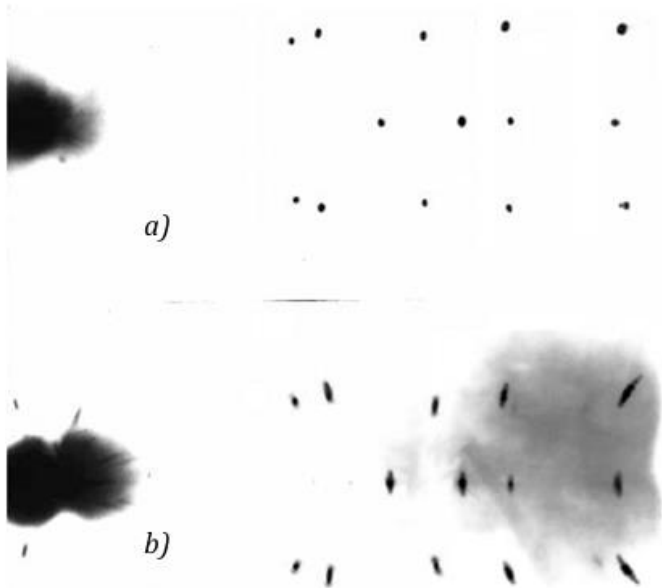
1 - dáslepki kristallıq úlgi.

2 - B⇌M fazalıq ótiw ciklın bir ret basınan
keshirgen úlgi,

3 - fazalıq ótiwdiń 10 ciklın basınan
keshirgen úlgi.



SmS kristallarının (400) túyinleriniń kese-kesimlerin rentgen difraktometriniń járdeminde dúziwdiń nátiyjesinde alınan grafikler 23-súwrette berilgen. Bul súwrette úlgilerdegi kristallıq bloklardıń bir birine salıstırǵandaǵı tártipsiz túrde burılıwlarınń shamasınıń fazalıq ótiwdiń birinshi ciklınan keyin $\sim 4^\circ$ qa, al 10 cikldan keyin $\sim 8^\circ$ qa jetetuǵınlıǵı kórinip tur.



24-súwret.

SmS kristallarının PKB-86A kamerasında túsirilgen terbelis rentgenogrammaları. *a* - dáslepki monokristall, *b* - bir neshe $B \rightleftharpoons M$ fazalıq ótiwlerdi basınan keshirgen kristall.

SmS monokristallarının úlgilerin monokristallıq bloktan kublıq pánjereniń qaптallarına parallel túrde qaǵıp alıw (выкалывание) jolı menen tayarlandı. Optikalıq baqlawlardı ótkeriw ushın olardıń betleri jetkilikli dárejede tegisedi. Bunday baslanǵısh úlgilerdiń tek B-fazadan turatuǵınlıǵı rentgenografiyalıq hám optikalıq izertlewlerdiń barısında anıqlandı.

SmS kristallarının úlgileriniń terbelis rentgenogrammalarında birinshi $B \rightleftharpoons M$ ótiwiniń ciklınan keyin reflekslerdiń bir bólimi eki qurawshıǵa bólinedi. Bul jaǵday $M \rightarrow B$ ótiwinde M fazasınıń qaldıqlarınıń saqlanıwı menen baylanıslı (15 procentke shekem). Fazalıq ótiwlerdiń birinshi ciklınan keyin M-fazanıń qaldıqlarınıń barekenligi optikalıq mikroskoptıń járdeminde de kórinedi. Bul qaldıqlar kubtıń qabırǵalarına parallel fazalıq ótiwlerdiń 10 ciklınan keyin M-fazanıń bar ekenligi rentgenogrammalarda da, optikalıq mikroskopta da sezilmeydi (24-súwret).

SmS kristallarındaǵı kvazistatikalıq (qısqıwshı) basındaǵı fazalıq ótiwlerdi úyrengende (qısqıwshı ortalıq qorǵasın) úlgilerdiń ózine tán "shınıǵıwınıń"

("trenirovkasınıń") orın alatuǵınlıǵı dálillendi. Eger fazalıq ótiwlerdiń birinshi hám ekinshi ciklarında $B \rightleftharpoons M$ fazalıq ótiwleri 4,7 kbar basımda júretuǵın hám sekirmeli túrde ámelge asatuǵın bolsa, onda "shınıǵıwdan" keyin izertlenip atırǵan qubılıs stabillesedi hám $V(P)$ ǵárezligi (kólemniń basımnan ǵárezligi) barlıq detalları boyınsha qaytalanadı. Kristallıq bloklar arasındadıǵı múyeshlerdiń mánisi 8 gradusqa shekem jetedi hám bunnan keyingi fazalıq ótiwlerdi bul múyeshtiń mánisi ózgerissiz qaladı. Basım alıp ketilgennen keyin M-fazanıń qaldıqları baqlanbaytuǵın boladı. Bul qubılıstıń sebebin "shınıǵıwdan" keyin kernewlerdiń relaksaciyasınıń jeńilleniwı menen baylanıstırıwǵa boladı. Al kristallıq bloklar arasındadıǵı múyeshtiń shamasınıń ósiwin hár qıylı kólemlerge iye eki izomorflıq fazanıń arasındadıǵı ayırıp turıwshı betlerdegi strukturalıq defektlerdiń ornıqlı sistemasınıń payda bolıwı menen baylanıslı bolıwınıń itimallıǵı joqarı. Biz defektlerdiń bir bóliminiń mikrojarıqlar túrine iye dep boljaymız. Bul mikrojarıqlar gidrostatikalıq basımniń saldarınan kristallıq úlgilerdiń qıyrawın támiyinleydi. Al pyezometrde bolsa monokristallıq úlgilerdi jabısqaq órtalıq bolǵan qorgásın qıyrawdan saqlaydı. Ol mikrojarıqlardıń kritikalıq ólshemlerdey ólshemlerge shekem ósiwine tosqınlıq qıladı.

Monokristallıq úlgilerdiń gidrostatikalıq basım astındadıǵı qıyrawı (mayda bóleklerge ebóliniwı) $M \rightarrow B$ kerı fazalıq ótiw menen baylanıslı. Bunday fazalıq ótiwde úlken kólemge iye faza ayırılıp shıǵadı. $Sm_{0.87}Gd_{0.13}S$ quymasında bolsa $B \rightarrow M$ ótiwinde monokristallıq úlgilerdiń qıyrawı (untalıwı) orın almaydı.

Ótkerilgen tájiriybeler $M \rightleftharpoons B$ ótiwleriniń waqıt boyınsha rawajlanbaytuǵınlıǵın kórsetti (bul jaǵday pyezometrlik izertlewlerdiń barısında anıq kórindi). Al fazalıq ótiwdiń gisterezisi bolsa temperaturadan júdá ázzi túrdegi ǵárezlikke iye. Usınıń saldarınan $M \rightleftharpoons B$ ótiwleriniń diffuziyalıq emes ekenligine kóz jetkeriwge boladı. Bunday diffuziyalıq emes fazalıq ótiwlerde (yaǵnıy martensitlik fazalıq ótiwlerde) jańa hám eski fazalar arasında kogerentlik baylanıs saqlanadı. Al bunday martensitlik fazalıq ótiwdiń saldarınan payda bolǵan ishki kernewler fazalıq ótiwlerdiń gisterezisi ushında, kristallıq úlgilerdiń qıyrawı ushın da juwapker.

Fazalıq ótiwdiń dilataciyalıq mexanizmi orın alǵanda úlken múyeshli shegaralarǵa iye haqıyqıy polikristaldıń payda bolıwınıń múmkin emesekenligin atap ótemiz. Bunday fazalıq ótiw tek kristallıq bloklardıń burılıwına yamasa dezintegraciyaǵa alıp kele aladı.

3.2-§. SmS hám Sm_{1-x}Gd_xS quymalarındaǵı fazalıq ótiwdiń saldarınan payda bolatuǵın mexanikalıq kernewlerdiń mánisin esaplaw

Fazalıq ótiwlerdiń saldarınan payda bolatuǵın ishki mexanikalıq kernewlerdiń mánisi tiykarınan eki faktordan ǵárezli boladı:

- a) fazalıq ótiwdiń saldarınan kristaldıń kóleminiń ózgerisinen (yaǵnıy elementar qutınıń kóleminiń ózgerisiniń shamasınan),
- b) kristaldıń serpimli modulleriniń mánislerinen.

Usınday kóz-qaraslardan SmS, Sm_{1-x}Gd_xS ($x > 0.15$) quymalarınń hám Sm_{0.81}Y_{0.19}S, Sm_{0.77}Y_{0.23}S quymalarınń qásiyetlerin bir biri menen salıstırıw ilimiy jaqtan úlken qızıǵıw payda etedi.

SmS kristallarınıń úlgileri gidrostatikalıq basım menen qayta islewdiń saldarınan qıyraydı. Al gadolinıy menen baylanıslı bolǵan birikpeler atmosferalıq basımda salqınlatıw processinde $M \rightarrow B$ ótiwiniń saldarınan kúshli dezintegrallanadı hám sonıń menen birge eki jaǵdayda da ádewir úlken bolǵan gısterezis orın aladı. Al ittriıy qatnasatuǵın birikpelerde $M \rightleftharpoons B$ fazalıq ótiwlerinde gısterezis penen kristallıq úlgilerdiń qıyrawı (untalıwı) pútkilley baqlanbaydı. Fazalıq ótiwlerde payda bolatuǵın serpimli energiya menen fazalıq ótiwde baqlanatuǵın gısterezistiń usı faktler menen sáykes keletuǵınlıǵın kórsetiwdi maqul kórdik.

J.D.Eshelby tárepinen keltirilip shıǵarılǵan belgili formulaǵa sáykes [77] izotrop qásiyetke iye bolǵan dene ushın $G_1 = G_2 = G$ shárti orınlanadı (G arqalı jılıw moduli belgilengen) hám bunday jaǵdayda jańa faza dilataciyalıq mexanizm menen payda bolǵanda payda bolatuǵın serpimli energiyanıń shaması

$$E_{serp} = \frac{2}{9} G \alpha^2 \frac{1 + \nu}{1 - \nu} V \omega \quad (1)$$

añlatpasınıń járdeminde esaplanadı. Bul añlatpada α arqalı fazalıq ótiwdegi kólemniń salıstırmalı ózgerisi (úlesi), ω arqalı jańa fazanıń úlesi, V arqalı kristallıq úlginiń ulıwmalıq kólemi belgilengen. Poisson koefficienti ν shamasınıń mánisin $1/3$ ke teń dep shamalap hám

$$G = \frac{3(1 - 2\nu)}{2(1 + \nu)} K$$

túrindegi belgili qatnastı paydalanıp (K arqalı hár tárepleme qısqılıw moduliniń shaması belgilengen)

$$E_{serp} = \frac{1}{6} K \alpha^2 V \omega \quad (2)$$

formulasına iye bolamız.

SmS monokristalların pyezometrik izertlewler eki fazanıń da hár tárepleme qısqılıw modulleriniń shama menen birdey ekenligin kórsetti. Bul jaǵday (2)-añlatpanı paydalanıwdıń durıs ekenligin bildiredi. Sol formulaǵa biz alǵan $K = 400$ kbar, $\alpha = 0.13$ shamaların qoyıp jáne SmS kristallınıń bir gramm-moliniń kóleminiń $39,2$ g/sm³ ekenligin esapqa alıp

$$E_{serp} = 1000\omega \text{ kal/mol}$$

shamasın alamız.

Sm_{0,77}Y_{0,23}S birikpesi ushın $\alpha = 0.045$, al $K = 71$ kbar [78], sonlıqtan bul jaǵdayda

$$E_{serp} = 23\omega \text{ kal. mol}$$

shamasına teń boladı.

Ittriy qatnasatuǵın fazalıq ótiwlerdegi E_{serp} shamasınıń kishi ekenligi monokristallıq haldıń saqlanıwına alıp keledi.

Demek E_{serp} shaması kishi bolǵan kristallıq úlgilerde izomorflıq fazalıq ótiwler orın alǵanda monokristallar saqlanadı eken. Al $E_{serp} = 1000\omega \text{ kal/mol}$ bolǵan kristallıq úlgiler fazalıq ótiwde mayda bólekshelerge bólinip ketedi (untaladı yamasa poroshokqa aylanadı).

Basım túsirilgende hám basım alıp ketilgende, yaǵnıy "teń salmaqlıq emes" fazalıq aylanıstaǵı termodinamikalıq potencialdın ózgerisi

$$\Delta G = \Delta P \alpha V \omega$$

shamasına teń. Bul shama serpinli energiya bolǵan E_{serp} shamasın kompensaciyalawı kerek. Sonlıqtan

$$E_{serp} = \Delta G,$$

al

$$\Delta P = \frac{1}{6} K \alpha.$$

Bul ańlatpada ΔP shamasınıń mánisi basım boyınsha gisterezistń yarımına teń.

SmS hám $Sm_{0.77}Y_{0.23}S$ kristallıq úlgilerindegi gisterezis ΔP nıń mánisin bahalaymız. Onıń mánisi:

SmS kristalları ushın 8.7 kbar,

$Sm_{0.77}Y_{0.23}S$ kristalları ushın 0.52 kbar.

Kristallıq bloklardıń bir birine salıstırǵandaǵı burılıwlarınıń saldarınan kernewlerdiń relaksaciyası E_{serp} shamasın kishireytedi. Sonlıqtan ΔP shamasınıń mánisi eksperimentlerde alınǵan nátiyjelerden úlken bolıwı múmkin. Eger SmS kristalları ushın ΔP_{eksp} shamasınıń mánisi 2.5 kbar ǵa teń bolsa, onda $Sm_{0.77}Y_{0.23}S$ quyması ushın baqlanatuǵın gisterezistń mánisi ádewir kishi bolıwı kerek [78].

$Sm_{0.77}Y_{0.23}S$ kristalları ushın bahalaw atmosferalıq basımlardaǵı fazalıq ótiwlerdigi sezilerliktey gisterezistń joq ekenligine tolıq sáykes keledi [79].

Biz qarap ótken itriy qatnasatuǵın birikpedegi kólemniń sekiriwiniń kishi ekenligide, K moduliniń kishi ekenligide bul birikpelardıń quramınıń ekinshi kritikalıq noqatqa jaqın ekenligi menen baylanıstırıwǵa boladı. Al ekinshi kritikalıq noqattıń bar ekenligi [80] niń avtorları tárepinen ayılǵan edi.

3.3-§. $\text{Sm}_{0.85}\text{Gd}_{0.15}\text{S}$ quymasındaǵı fazalıq ótiw

$\text{Sm}_{1-x}\text{Gd}_x\text{S}$ sistemasında $x > 0.15$ shárti orınlanǵanda yarımótkizgishli qara faza I metallıq sarı faza II ge ótedi. Bul fazalardıń ekewinińde strukturası NaCl tipindegi struktura bolıp tabıladı (bunday fazalıq ótiwlerdi izomorflıq fazalıq ótiwler dep ataytuǵınlıǵımızdı eske túsiremiz). Atmosfera basımındaǵı izomorflıq fazalardıń teńsalmaqlıq diagrammasınıń juwıq túrdegi túri belgili. I-II fazalarınıń teńsalmaqlıq iymekligi C tárizli formaǵa iye. Bunnan II fazanıń gadolinydiń belgili bir koncentraciyalarında temperaturanıń sheklengen intervalında ǵana bar bolatuǵınlıǵın ańǵartadı.

$\text{Sm}_{0.85}\text{Gd}_{0.15}\text{S}$ quyması 90-473 K temperaturalar intervalında normal atmosferalıq basımda rentgenografiyalıq usıllar (rentgendifraktometriyası) menen izertlendi.

Birikpe (quyma) ápiwayı zatlardan 600°C temperaturada sintezlendi hám 1000°C temperaturada kúydirildi. Bunnan keyin indukciyalıq pechtiń ishindegi molibdennen islengen tigelde 30 mm/saat tezlikte kóteriw jolı menen monokristallıq halǵa alıp kelindi. Alınǵan quyma bir birine salıstırǵanda derlik hesh qanday múyeshlerge burılmaǵan monokristallıq bloklardan turdı. Kristallıq pánjereniń turaqlısı 300 K temperaturada $a = 5.855 \pm 0.005$ Åshamasına teń. Bunday kristallarda I faza menen bir qatarda 15 procentke shekem metallıq II fazanıń da qatnasqanlıǵı rentgenografiyalıq jollar menen anıqlandı. Kristallıq pánjereniń dáwiriniń shaması boyınsha quymanıń quramın juwıq túrde bahalaw $x = 0.15 \pm 0.01$ shamasın berdi.

Rentgenografiyalıq izertlewler DRON-UM-1 difraktometrinde temir anodtıń nurlanıwında júrgizildi. Ójire temperaturalarınan joqarı temperaturalarda YPHT-180 tipindegi kriostat paydalanıldı. Bunday kriostattıń berilgen temperaturanı uslap turıw dálligi $\pm 3^\circ$ shamasına teń. 20°C temperaturadan joqarı temperaturalardaǵı rentgendifrakciyalıq izertlewler geliydiń atmosferasında “Rigaku Denku” firmasınıń A-4 kamerasında ótkerildi. Ójire temperaturasında kristallıq pánjereniń dáwiriniń mánisin anıqlawdıń absolyut dálligi ± 0.004 Å shamasına teń. 90-473 K

temperaturalar intervalındağı kristallıq pánjereniń salıstırmalı ózgerisiniń shaması $\pm 0.001 \text{ \AA}$ ge teń.

I faza halında turǵan monokristallıq hám untalǵan úlqiler úlken gidrostatikalıq basım astında (ortalıq – benzin) qaytımsız túrde II fazaǵa ótkerildi. Bunday qayta islewden keyin kristall ólshemleri $\sim 100 \text{ mkm}$ bolǵan kristallıq bloklarǵa bólindi. Sol bloklar arasındağı múyeshtiń mánisi 4^0 qa shekem jetti.

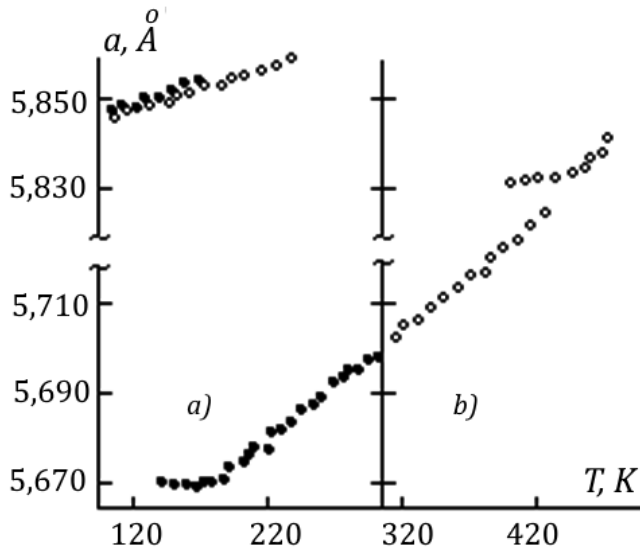
Qara I fazanıń qatnasıwı baqlanbadı. 300 K temperaturada $a = 5.682 \pm 0.003 \text{ \AA}$ shaması alındı.

25-súwrette 90-300 K temperaturalar intervalındağı altın-sarı reńdegi poroshok tárizli kristaldıń pánjeresiniń dáwiriniń temperaturalıq ǵárezligi berilgen [$a(T)$ funkciyası]. Súwrette II→I ótiwiniń $\sim 160 \text{ K}$ temperaturasında júretuǵınlıǵı hám pánjereniń dáwiriniń $a = 5.852 \text{ \AA}$ shamasına shekem úlkeyetuǵınlıǵı kórinip tur. 180 K temperaturada $a(T)$ ǵárezliginiń minimumı baqlanadı. Biraq bul minimum $\text{Sm}_{0.80}\text{Gd}_{0.20}\text{S}$ quymasın izertlegende alınatuǵın minimumday bolıp ayqın túrde kórinip turǵan joq. 300-190 K temperaturalar intervalında jıllılıq keńeyiwi koefficientiniń mánisi $(2.5-1.8) \cdot 10^{-5} \text{ grad}^{-1}$ shamasına teń.

25-b súwrette 300-473 K temperatura intervalındağı altın-sarı reńge iye bolǵan II fazadan turatuǵın monokristaldıń kristallıq pánjeresiniń temperaturadan ǵárezligi berilgen. Bul intervaldağı jıllılıq keńeyiwi koefficientiniń mánisi $5.6 \cdot 10^{-5} \text{ grad}^{-1}$. 393 K temperaturada qara fazanıń shama menen 30 procenti payda boladı. Onıń muǵdarı 393-426 K temperaturalarda ózgerissiz qaldı (fazalardıń muǵdarı sáykes difrakciyalıq piklerdiń qatnasınıń járdeminde esaplandı). 426 K shamasındağı temperaturada sekirmeli túrde hám 2-3⁰ sheklerinde II tiykarǵı fazanıń I fazaǵa ótiwi orın aladı. Usınıń menen kristallıq pánjereniń dáwiri 0.12 \AA shamasına, al elementar qutınıń kóleminiń 8.2 % ke úlkeyiwi orın aladı.

Ójire temperaturalarında ótkrilgen vizuallıq baqlawlar II→I ótiwinde kristallıq úlginin qıyramaǵınlıǵın kórsetti. RKV-86A kamerasında túsirilgen terbeliw rentgenogrammaları I fazanıń 80 % shamada, al II fazanıń 20 % shamada bar ekenligin kórsetti. Kristaldıń ólshemleri $\sim 100 \text{ mkm}$ bolǵan bloklardan

turatuǵınlıǵı anıqlandı. Olar arasındaqı bir birine salıstırǵandaǵı burılıw múyeshleriniń (razorientaciya múyeshleriniń) shamaları 10^0 qa shekem jetti.



25-súwret.

$\text{Sm}_{0.85}\text{Gd}_{0.15}\text{S}$ úlgisiniń kristallıq pánjeresiniń turaqlısınıń temperaturadan gárezligi. Úlginiń baslanǵısh halı II metastabillı faza. Noqatlar – salqınlatqanda, al dóńgelekler úlgilerdi qızdırǵanda alınǵan. *a* – untalǵan kristall, *b* – monokristall.

Eń baslanǵısh úlgi deǵı I hám II fazalardıń bir waqıtta bar bolıwın hám qızdırıw processinde $\text{II} \rightarrow \text{I}$ fazalıq ótiwiniń sekirmeli ekenligi (basqıshlı ekenligin) $\text{Sm}_{0.85}\text{Gd}_{0.15}\text{S}$ kristallarındaǵı gadolinıy menen bay hám gadolinıy kem oblastlardıń bar ekenligi menen túsindiriwge bolmaydı. Bir tekliktiń bolmawın monokristaldı ósirgende teń salmaqlıq sharayatlardıń támiyinlenbegenligi menen túsindiriw múmkin. SmS-GdS sisteması ushın teń salmaqlıq diagramması yamasa diagramma haqqındaǵı tolıǵıraq maǵlıwmatlar usı waqıtlarǵa shekem dúzilmeǵen yamasa jıynalmaǵan. Sonıń menen birge "shegaralıq" quram ushın ($x = 0.15$) úlgilerdiń bir tekli bolmaytuǵınlıǵı ilimiy ádebiyatlarda bir neshe ret atap ótildi.

Solay etip, joqarıda keltirilgen maǵlıwmatlar $\text{Sm}_{0.85}\text{Gd}_{0.15}\text{S}$ birikpesindeǵı I fazadan gidrostatikalıq basım menen qayta islewdiń nátiyjesinde alınǵan II fazanıń 160 tan 426 K temperaturaǵa shekem bar bolatuǵınlıǵın kórsetti. Bul jaǵday óz gezeginde $\text{II} \rightarrow \text{I}$ ótiwiniń sızıǵınıń C tárizli formaǵa iye bolatuǵınlıǵınıń eksperimentallıq tastıyıqlanıwı bolıp tabıladı. Sonıń menen birge fazalıq ótiwler qubılısınıń júriwinde kristallıq úlgilerdiń tariyxınıń (yaǵnıy fazalıq ótiwlerdi neshe ret basınan ótkergenliginiń) úlken áhmiyetke iye ekenligi ayqın túrde kórindi.

Demek fazalıq ótiwlerdiń kristallıq denelerde jańa strukturalıq defektlerdiń sistemasınıń payda bolıwına alıp keletuǵınlıǵı haqqında boljaw aytıwǵa tolıq múmkinshilikler tuwıladı dep ayta alamız.

3.4-§. Hidrostatikalıq basım astındaǵı hám temperatura ózgergendeǵi $\text{Sm}_{0.8}\text{Gd}_{0.2}\text{S}$ quymasındaǵı izomorflıq fazalıq ótiwler

A. Jayaraman hám basqalardıń jumısında SmS birikpesin GdS birikpesi menen legirlegende B-fazadan (yarım ótkizgish qara fazadan) metallıq M-faza alındı (altınıń reńindeǵi) [76]. Burınları SmS kristallarındaǵı B→M fazalıq ótiwin tek sırtqı basım túsirilgende ǵana baqlaǵan edi [81]. $\text{Sm}_{1-x}\text{Gd}_x\text{S}$ quymalarında M-faza $x \geq 0,15$ bolǵan jaǵdayda payda boladı hám $0,15 \leq x \leq 0,22$ diapazonlarında temperatura tómenlegende B'-fazaga ótedi. M→B' fazalıq ótiwi sekirmeli júredi, kólemniń úlkeyiwi orın aladı hám sonlıqtan baslanǵısh monokristallar maydalanıp ketedi. Barlıq úsh faza NaCl tipindeǵi strukturaga iye, al qarap atırılǵan izomorflıq fazalıq aylanıs $\text{Sm}^{2+} \rightleftharpoons \text{Sm}^{3+}$ ótiwi menen baylanıslı bolǵan "elektronlıq" fazalıq aylanıs dep traktovkalanadı.

Biz bul paragrafta $\text{B}' \rightleftharpoons \text{M}$ izomorflıq fazalıq ótiwin rentgenografiyalıq izertlelerdiń nátiyjelerin bayanlaymız. Yarım ótkizgish fazanı B', al metall fazanı M arqalı belgileyemiz.

$\text{Sm}_{0.8}\text{Gd}_{0.2}\text{S}$ quyması (kristalları) baslanǵısh halda altın reńge iye monokristall túrinde paydalanıldı. Bunday kristallardaǵı B'→M fazalıq ótiwleri izertlendi. Quyma úsh halda:

- 1 - monokristallıq,
- 2 – poroshok tárizli halda (poroshok M→B fazalıq ótiwi processinde monokristaldan alındı,
- 3 – untaw (ısqılap untaw) arqalı alınǵan poroshok halında (2-punktte keltirilgen poroshok qaytadan untaldı).

Rentgenografiyalıq izertlewler eski DRON-1 hám DRON-UM-1 difraktometrlerinde mis hám temir anodlardıń nurlarında ótkerildi. Tómengi

temperaturalardı alıw ushın URNT-180 azot kriostatı paydalanıldı. Kristallıq pánjereniń a parametriniń 250-100 K temperaturalar intervalındaǵı absolyut mánisin anıqlaǵandaǵı absolyut dálik $\text{Sm}_{0.85}\text{Gd}_{0.15}\text{S}$ quyması izertlegendeǵı dálik penen birdey boldı.

Úsh baslanǵısh halda aldın ala M-fazanıń kristallıq pánjeresiniń a parametriniń mánisleri 293 K temperaturada ólshendi hám ólshewlerdiń dáligi sheklerinde olardıń barlıǵınıń da birdey mániske iye ekenligi anıqlandı (tómendegi kestede berilgen).

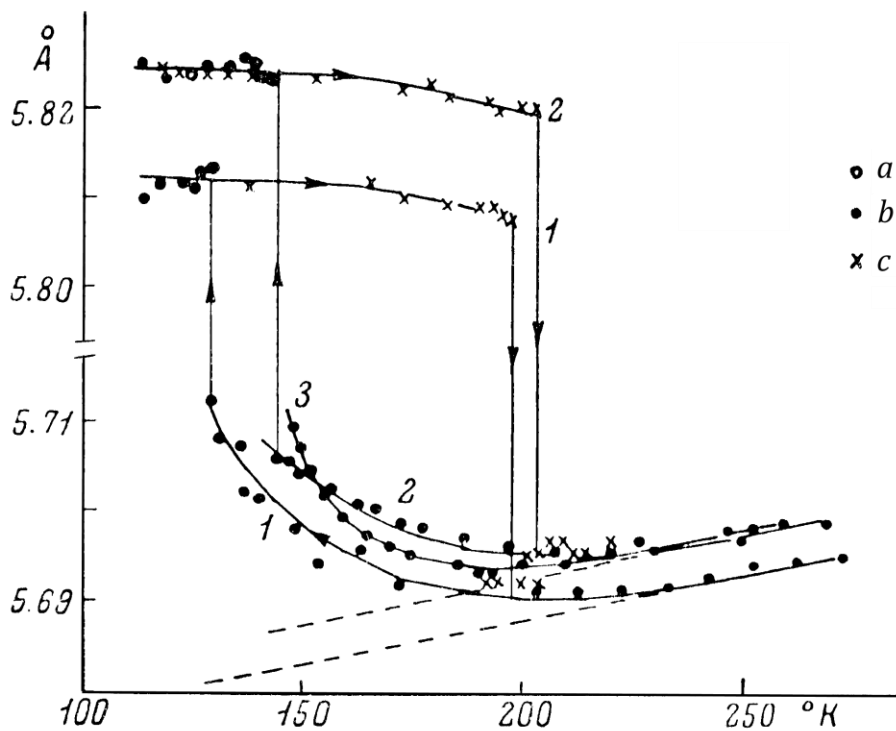
$\text{Sm}_{0.8}\text{Gd}_{0.2}\text{S}$ birikpesiniń qásiyetleri

| Úlgi | Ótiw temperaturası | | | | | | 293 K deǵı pánje-reniń parametri, Å | Fazalıq ótiwdeǵı parametr-diń ózgerisi, Å | | Fazalıq ótiwdeǵı kólemniń ózgerisi $\frac{\Delta V}{V} \cdot 100\%$ | | α |
|---------------------|--------------------|--------|-------|------------|--------|-------|-------------------------------------|---|-----------|---|----------|----------------------|
| | Salqımlatıw | | | Qızdırıw | | | | salqın-latıw | qızdırıw | salqın-latıw | qızdırıw | |
| | baslanǵısh | ortası | aqırı | baslanǵısh | ortası | aqırı | | | | | | |
| Mono-kristall | 147 | - | - | - | - | - | 5.70 ± 0.03 | - | - | - | - | $10.1 \cdot 10^{-6}$ |
| Untalmaǵan poroshok | 153 | 140 | 127 | 186 | 199 | 212 | 5.699 ± 0.005 | 0.11 7 | 0.12 4 | 6.15 | 6.51 | $8.5 \cdot 10^{-6}$ |
| Untalǵan poroshok | 144 | 131 | 117 | 182 | 195 | 208 | 5.696 ± 0.008 | 0.10 2 | 0.11 7 | 5.37 | 6.15 | $9 \cdot 10^{-6}$ |

Eskertiw: eń aqırǵı α menen belgilengen baǵana M-fazanıń oblasti 270-200 K temperaturalar intervalındaǵı jıllılıq keńeyiwı koefficienti (grad^{-1}) bolıp tabıladı.

~147 K temperaturadaǵı $M \rightarrow B$ ótiwi monokristallıq úlgiardiń qıyrawı menen (untalıwı menen) júredi. Vizualıq baqlawlar qıyrawdıń sekiriwler menen júretuǵınlıǵın kórsetti. Biziń pikirimizshe monokristallıq úlgiardiń untalıwı quymanıń quramınıń flukuaciyaları menen emes, al $M \rightarrow B$ ótiwindeǵı payda

bolǵan mexanikalıq kernewlerdiń relakciyası menen baylanıstırıw kerek. Eksperimentlerdiń nátiyjeleri monokristallardıń óz-ózinen untalǵan payda bolǵan kishi kristallardıń ólshemleri hám fazalıq ótiwdiń kinetikası úlgilerdi salqınlatıw tezligi menen baylanıslı bolsa kerek dep juwmaq shıǵarıwǵa múmkinshilik beredi. Anıq rentgendifrakciyalıq pikti beretuǵın jetkilikli dárejedegi mayda poroshok 77-293 K temperaturalar intervalında monokristallardı bir neshe ret úlken tezlik penen salqınlatıw hám qızdırıwdıń nátiyjesinde alındı.

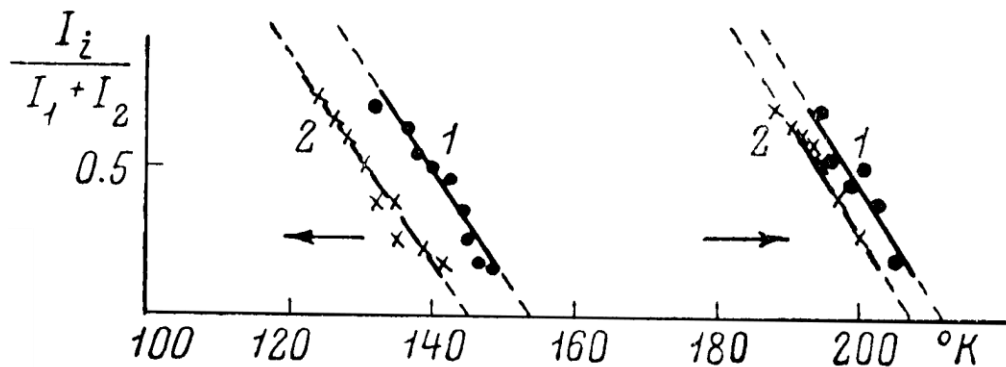


26-súwret. $\text{Sm}_{0.8}\text{Gd}_{0.2}\text{S}$ quymasınıń kristallıq pánjeresiniń turaqlıslınıń temperaturadan ǵárezligi. 1- untalǵan (ısqılanǵan) poroshok, 2 - ısqılanbaǵan poroshok, 3-monokristall, a - salqınlatıw, b - qızdırıw.

M-fazadaǵı monokristaldıń, ısqılanǵan hám ısqılanbaǵan poroshok tárizli kristallardıń pánjeresiniń parametriniń temperaturadan ǵárezziligi derlik birdey formaǵa iye. Dúzilgen grafiklerdegi sáykesliktiń joqlıǵı ólshewlerdiń dálliginiń sheklerin shıqpaydı (22-súwrette kórinip tur). Temperatura tómenlegende 270 – 220 K oblastındaǵı pánjereniń parametriniń derlik sızıqlı kemeyiwi $(8-10) \cdot 10^{-6}$ 1/grad shamasına teń jıllılıq keńeyiwi koefficientine sáykes keledi (bul shama siyrek jer metallarınıń jıllılıq keńeyiwi koefficientine teń). Temperaturanıń

tómenlewiniń barısında 210-195 K oblastında tereń emes minimum orın aladı. $M \rightarrow B$ fazalıq ótiwine jaqınlaǵanda kristallıq pánjereniń parametriniń keskin túrdegi úlkeyiwi menen almasadı. B fazada qızdıırǵanda pánjereniń parametriniń bazı bir kishireyiwi baqlanadı (26-súwretke qarańız). Ísqılanǵan hám ısqılanbaǵan poroshoklardıń parametrleriniń sekiriwi Δa nıń hár qıylı bolıwı, 26-súwrette kórinip turǵanıday, tiykarınan B-fazanıń kristallıq pánjeresiniń ózgeriwi menen baylanıslı.

$M \rightleftharpoons B$ fazalıq ótiwi shama menen 30 graduslıq intervalda júredi (27-súwret). Bul interval barlıq jaǵdaylarda da birdey bolıp shıqtı. Eki fazanıń muǵdarlarınıń qatnasına teń bolǵan salıstırmalı intensivlikler bolǵan $\frac{I_i}{I_B + I_M}$ shamasınıń temperaturadan ǵárezligi (keltirilgen qatnasta I_i arqalı B- hám M-fazalardıń intensivlikleri belgilengen) bir birine parallel bolǵan sızıqlar menen táriyiplenedi (27-súwret). $M \rightarrow B$ fazalıq ótiwinde de, $B' \rightarrow M$ fazalıq ótiwinde de jańa fazanıń muǵdarınıń temperaturaǵa baylanıslı sızıqlı túrde ózgeriwi kútilmegen fakt bolıp tabıladı. Biraq paydalanılǵan rentgenografiyalıq usıldıń jańa fazanı 0 den 100% ke shekemgi intervalda emes, al 20 dan 80 % ke shekemgi intervalda registraciyalǵanlıǵın atap ótemiz.



27-súwret. "Jańa fazada" difrakciyaǵa ushıraǵan rentgen nurlarınıń intensivliginiń temperaturadan ǵárezligi.

I_i - arqalı difrakciyalıq piktiń intensivligi belgilengen, 1 – ısqılanbaǵan poroshok, 2 - ısqılanǵan poroshok.

$B' \rightarrow M$ fazalıq ótiwiniń temperaturası burınları anıqlanǵan joq hám ótiwdiń waqıttıń ótiwi menen júretuǵınlıǵı kórsetilgen edi [82]. Biz tárepinen qızdıruwdıń barısında 0,5 saat dawamında 200 K temperaturadaǵı izotermalıq uslap turıw M-fazanıń muǵdarınıń ózgermeytuǵınlıǵın kórsetti (yaǵnıy waqıttıń ótiwi menen fazalıq ótiw júrmeydi degen sóz).

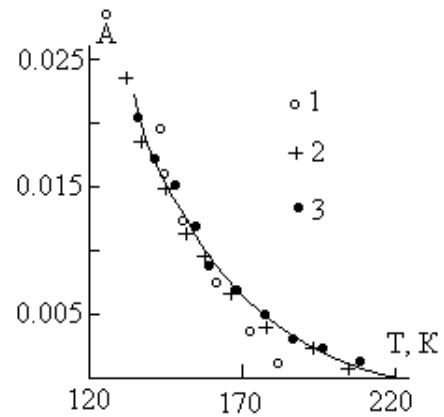
26- hám 27-súwretlerde hám joqarıda keltirilgen kesteden tuwrı (salqınlatqandaǵı) hám keri (temperatura joqarılaǵandaǵı) fazalıq ótiwlerde temperaturalıq gisterezistiń baqlanatuǵınlıǵı kórinip tur. Ísqılangan úlgidegi alınatuǵın gisterezistiń shaması $M \rightarrow B$ fazalıq ótiwiniń temperaturasınıń tómenlewiniń saldarınan ısqılanbaǵan úlgide baqlanǵan gisterezisten kishi. $\Delta\alpha$ sekiriwiniń shamasınıń kishireyiwi hám $M \rightarrow B$ fazalıq ótiwiniń baslanıw temperaturasınıń ózgerisi hár qıylı deformacijalardaǵı M-fazanıń stabillesiw faktı menen sáykes keledi (yaǵnıy biz keltirgen faktler arasında korrelyaciya baqlanadı).

Monokristallıq úlgilerde 200 K temperaturadan tómeni temperaturalarǵa salqınlatqanda kristallıq pánjereniń parametriniń "anomallıq" úlkeyiwi oblastında M-fazaǵa sáykes keliwshi difrakciyalıq piktiń formasınıń bazı bir ózgeriwleri baqlandı. Piktiń tómeni bólimindegi kishi múyeshler tárepke qaray simmetriyalı emes awısıw $T \sim 210$ K temperaturada baslandı, al fazalıq ótiw temperaturasınıń janında pánjereniń parametriniń 0,012 Å shamasına kemeyiwge sáykes keletuǵın úlken emes difrakciyalıq pik payda boldı. Utnaq kristallarda bunday qubılıs baqlanbadı.

Kristallıq pánjereniń parametriniń ózgerisiniń "anomallıq" bólimin ayırıp alıw biraz qızıǵıw payda etti. Usınday maqsette berilgen temperaturaǵa sáykes keliwshi pánjereniń parametrleri hám joqarı temperaturalar oblastınan ekstrapolyaciyalaw jolı menen alınǵan "sızıqlı keńeyiwdiń normal bolǵan júrisine" sáykes keliwshi parametrdiń mánisleriniń ayırması tabıldı (28-súwret). Bul pánjereniń faza ishindegi parametriniń ózgerisi ádewir úlken mániske - $M \rightarrow B$ fazalıq ótiwindegi pánjereniń parametriniń ózgerisiniń shama menen 20 procentin quradı. 28-súwrette M-fazanı salqınlatqanda $M \rightarrow B$ fazalıq ótiwi qasında pánjereniń parametriniń ósiwi intensivli túrde ámelge asadı.

28-súwret.

Temperatura tómenlegende pánjere parametriniń ózgerisiniń "anomallıq" bóliminiń temperaturadan gárezligi [jıllılıq keńeyiwiniń shaması $(8-10) \cdot 10^{-6}$ grad⁻¹ bolğan "normal" ózgerisine salıstırǵandaǵı].



Házirgi waqıtları M-fazada Sm ionları "aralas" gibridlesken halda turadı hám usı jaǵdayǵa sáykes olar aralıqlıq valentlikke iye boladı (bunı konfiguraciýalar aralıq fluktuaciýalar modeli dep ataydı) [83]. Bul model boyınsha Sm ionları Sm²⁺ konfiguraciýası menen Sm³⁺ konfiguraciýası arasında $\sim 10^{12}$ s⁻¹ jiyiligi menen fluktuaciýalanadı.

Bir qatar eksperimentallıq maǵlıwmatlar Sm ionlarınıń Sm²⁺ ionlarınan da, Sm³⁺ ionlarınan da ózgeshe qásiyetlerge iye ózine tán menshikli qásiyetlerge iye ekenligin kórsetedi [84]. Bul jumısta Sm_{1-x}Gd_xS sistemasındaǵı M-fazadaǵı usınday Sm ionlarınıń valentligi ~ 2.63 shamasına teń ekenligi hám bul shamanıń $0.12 \leq x \leq 0.30$ diapazonında ózgerislerge ushıramay tuǵınlığı kórsetilgen. $P \geq 6$ kbar basımlarda M-fazadaǵı SmS tin valentligi de tap usınday. Usınıń menen bir qatarda M-faza halında turǵan GdS hám YS birikpelerindegi kristallıq pánjereniń parametrlerin baylanıstıratuǵın tuwrı sızıqlar M-fazadaǵı Sm_{1-x}Gd_xS [83] hám Sm_{1-x}Y_xS [79] birikpeleriniń pánjeresiniń parametrleri haqqındaǵı eksperimentallıq maǵlıwmatlardı jaqsı táriyipleydi. Bul jaǵday SmS kristallarınıń M-fazasın Gd hám Y elementleriniń sulfidleri menen legirlegende Sm ionlarınıń ólshemleriniń derlik ózgerissiz qalatuǵınlığın kórsetedi. Sm_{1-x}R_xS birikpeleriniń M-fazasınıń ójire temperaturalarına jaqın temperaturalardaǵı pánjeresiniń parametriniń temperaturadan sızıqlı hám ázzi gárezligi [jıllılıq keńeyiwi koefficientiniń mánisi $\alpha = (8-10) \cdot 10^{-6}$] bunday intervallardaǵı ionlardın valentliginiń sezilerliktey ózgerislerge ushıramaytuǵınlığın ańǵartadı. [85] jumısına sáykes SmS kristallarınıń qabıllaǵıshlıǵı 300 K hám 7,5-12 kbar basımlar diapazonında derlik

özgermeydi hám magnitlik emes halğa sáykes keledi. Eger usınday temperaturalarda hám basımlar oblastında Sm ionlarınıń valentligi ózgergende joqarıda atap ótilgendey qubılıslardıń orın alıwı múmkin emes. Sonlıqtan M-faza halında turǵan SmS kristalların hár qıylı sıyrek jer metallarınıń sulfidleri menen legirlegende Sm ionlarınıń qásiyetleri ózgerissiz qaladı dep juwmaq shıǵaramız. Sm ionlarınıń SmB₆ hám Ce menen gibridlengen haldaǵı valentligin bahalaw SmB₆ ushın 2,77-2,65 hám Ce ushın 2,66 mánislerin beredi [85].

Joqarıda keltirilgen maǵlıwmatlardıń barlıǵında keltirilgen temperaturalar, basımlar hám quramlar diapazonında Sm ionlarınıń M-fazaǵa birdey aralıqlıq valentlikke hám birdey fizikalıq qásiyetlerge (radius, magnit momenti hám basqalar) iye bolıp kiretuǵınlıǵınan derek beredi.

SmS hám onıń tiykarındaǵı quymalar stabilli bolǵan basım, temperatura hám quram diapazonlarında B- hám B'-fazada Sm²⁺ ionları kóbirek boladı. Sonlıqtan bir fazanıń ekinshi fazaǵa ástelik penen ótiwi orın alatuǵın B- hám M-fazalardıń arasında (300<T<900 K) Sm ionlarınıń bir bólimi gidbridlik halda jaylasadı, al qalǵan bólimi Sm²⁺ ionları bolıp tabıladı. Kristallıq pánjereniń turaqlıslarınıń temperaturadan gárezliginiń minimumı hám temperatura tómenlegende tik kóteriliwi Sm_{0,8}Gd_{0,2}S birikpesiniń M-fazasındaǵı Sm²⁺ ionlarınıń sanınıń úlkeyiwi menen baylanıslı bolıwı kerek (súwretlerde kórsetilgen). Bunday birikpede 220-300 K temperaturalar intervalında derlik barlıq Sm ionları aralıqlıq halda jaylasadı.

SmS kristallın hár qıylı valentlikke iye bolǵan "kvazibinarlı" eritpe dep qaraw (burınları tap usınday kóz-qaras ceriy Ce kristallarındaǵı izomorflıq fazalıq ótiwlerdi hám kritikalıq qubılıslardı izertlegende bassılıqqa alınǵan edi [86]). Bul jaǵday SmS kristallarındaǵı kritikalıq noqattı anıqlaw ushın stimul boldı [87]. Bar ekenligi "kvazibinarlıq" eritpe haqqındaǵı kóz-qaraslardan kelip shıǵatuǵın konfiguraciyalıq entropiyanı [87] niń avtorları kritikalıq noqattı bar bolıwınıń bas faktori dep esaplaydı. Biziń kóz-qaraslarımız boyınsha bar bolǵan eksperimentallıq maǵlıwmatlar Sm_{1-x}R_xS birikpelerindegi Sm ionları gibridlengen halda turatuǵın Sm²⁺ túrinde qatnasadı (alayırım avtorlar bolsa Sm²⁺ hám Sm³⁺ hallarında turadı dep esaplaydı). $a(T)$ gárezligin fenomenologiyalıq túrde táriyiplegende

konfiguratsiyalıq entropiyanı aralıqlıq valentlik hal menen baylanıstırıw (tap usınday kóz-qaras J.N.Jefferson nın jumısında orın alǵan [88]) pútkilley durıs emes. Sebebi konfiguratsiyalıq entropiya menen baylanıslı bolǵan Bolcman tarqalıwın bul "aralıqlıq" haldın qurawshıları ushın paydalanıwǵa bolmaydı [89].

Juwmaqlaw

Dissertaciya jumısı nátiyjelerine tiykarlanıp tómendegidey juwmaqqa kelindi:

1. Dissertaciyalıq jumısta SmS kristallarındaǵı, $Sm_{0,8}Gd_{0,2}S$ hám $Sm_{0,85}Gd_{0,15}S$ quymalarındaǵı úlken basımlarda hám temperaturalar ózgergende júzege keletuǵın izomorflıq fazalıq ótiwler rentgenografiyalıq usıllardıń járdeminde izertlendi. Bul fazalıq ótiwlerde kristallıq pánjereniń simmetriyası ózgermeydi, al onıń elementar qutılarınıń kólemi 10-13 procentke ózgeredi. Fazalıq ótiwlerde de, substrukturanıń transformacijalarında da kristallıq strukturanıń defektleri strukturanı túlendiriwshi elementler sıpatında qaraldı hám bul boljawdıń durıs ekenligi ótkerilgen eksperimentlerdiń barısında tastıyıqlandı.

2. Mathematica kompyuterlik algebra hám Delphi programmalaw tilleriniń járdeminde rentgendifrakciyalıq eksperimentlerdi, atap aytqanda Laue hám aylanıw (terbeliw) usılların modellestiriw máseleleri sheshildi. Mathematica kompyuterlik algebra tiliniń járdeminde ortorombalıq kristallar ushın modellik lauegrammalar, al qorǵasın ortovanadatı kristalları ushın aylanıw rentgenogrammaları alındı.

3. Alınǵan eksperimentallıq nátiyjeler úlken kólemlik effekt orın alatuǵın mort materiallardaǵı izomorflıq fazalıq ótiwlerdegi jańa kooperativlik mexanizminiń bar ekenligin kórsetti. Bul mexanizm termoqaytımlı mikrojarıqlardıń payda bolıwınan ibarat bolıp, olardıń átirapında bunnan keyingi jarıqlardıń payda bolıwı menen jańa fazanıń kristallarınıń ósiwi orın aladı.

4. Joqarı basımdaǵı metastabilli fazadan dáslepki fazaǵa ótiwdiń bir qatar aralıqlıq hallardıń payda bolıwı menen júretuǵınlıǵı kórsetildi. Bul aralıqlıq hallar ekinshi áwlad strukturalıq defektlerdiń poziciyalarında táriyiplenedi. Bunday defektler joqarı fazanıń kristallıq pánjeresi menen kogerentli baylanısqa dáslepki fazanıń zarodıshlarınan turadı. Bunday oblastlar qızdırıw processinde úziksiz hám qaytımlı túrde normal túrdegi kristallıq pánjerege ótedi. Usınıń nátiyjesinde elementar qutılarınıń kólemleri arasında úlken ayırma bolǵan ornıqlı kristallıq pánjereler arasında teń salmaqlıq hal payda boladı.

Paydalanilgan ádebiyatlardín dizimi

I. Normativ hújjetler hám baslı ádebiyatlar

1. O'zbekiston Respublikasi Konstitutsiyasi. Toshkent «O'zbekiston», 2014.
2. Kadrlar tayyorlash Milliy dasturi // O'quvchi ma'naviyatini shakllantirish. – T.: Sharq, 2000. – B. 20 –55.
3. Mirziyoev Sh.M. Erkin va farovon demokratik O'zbekiston davlatini birgalikda barpo etamiz. Toshkent, “O'zbekiston” NMIU, 2017. - 29 b.
4. Mirziyoev Sh.M. Qonun ustuvorligi va inson manfaatlarini ta'minlash yurt taraqqiyoti va xalq farovonligining garovi. “O'zbekiston” NMIU, 2017. - 47 b.
5. O'zbekiston Respublikasi Prezidentining 2017-yil 20-apreldagi “Oliy ta'lim tizimini yanada takomillashtirish chora-tadbirlari to'g'risida”gi №2909-sonli qarori.
6. O'zbekiston Respublikasi Prezidentining 2017-yil 7-fevraldagi “O'zbekiston Respublikasini yanada rivojlantirish bo'yicha harakatlar strategiyasi to'g'risida” gi PF-4947-sonli Farmoni. O'zbekiston Respublikasi qonun hujjatlari to'plami, 2017-y., 6-son, 70-modda.
7. O'zbekiston Respublikasi qonun hujjatlar to'plami, Magistratura to'g'risida nizom. Vazirlar Mahkamasining 2015-yil 2-mart 36-sonli qarori. 9 (665)-son.

II. Tiykargı ádebiyatlar

1. Курдюмов Г.В. Без диффузионные (мартенситные) превращения в сплавах. В сб. “Проблемы металловедения и физики металлов”. Металлургиздат. 1949. Вып 1. Стр. 132.; К теории мартенситных превращений. 1952. Вып. 3. Стр. 9. Roitburd A.L., Kurdjumov G.V., The nature of martensitic transformations (Природа мартенситных превращений). “Mater. Sci and Eng.”. 1979. 39. No 2. P. 141-167. Курдюмов Г.В. Мартенситные превращения (обзор). Металлофизика. 1979. Т. 1. № 1. С. 81-91.
2. Билби Б.А., Христиан И.В. Мартенситные превращения. УФН. 1960. 70 С. 515.
3. В.М.Классен-Неклюдова. Механическое двойникование кристаллов. М. Изд. АН СССР. 1960. 261 с.

4. Л.Кауфман, М.Коэн. Термодинамика и кинетика мартенситных превращений. В кн. “Успехи физики металлов”. Metallurgizdat. 1961. Вып. IV. С. 192. Л.Кауфман, М.Коэн. В сб. “Успехи физики металлов”. М. 1964. вып 4.
5. С.М.Wayman. J. Less-Common Metals. 1971. Vol. 28. P. 97. Wayman С. On Memory Effects related to martensitic transformations and observations in β -brass and Fe_3Pt (Об эффекте памяти при мартенситных превращениях и наблюдения в β -латуни и Fe_3Pt). Scr.Met. 1971. Vol. 5. No. 6. P. 489-496.
6. Инденбом В.Л. Кристаллография. 1963. Т. 5. С. 515.
7. М.Дж.Бюргер. Фазовые переходы. Кристаллография. 1971. Т. 16. № 6. С. 1084-1090.
8. А.Келли, Г.Гровс. Кристаллография и дефекты в кристаллах. М. “Мир”. 1974. 496 с.
9. Лысак Л.И. Кристаллометрия образования ε -, ε' -, k - и k' -мартенситных фаз в стали. ФММ. 1978. Т. 45. Вып. 6. 1230-1243.
10. Б.И.Николин. Принципы образования многослойных (длиннопериодных) мартенситных структур в металлических сплавах. ФММ. 1978. Т. 45. Вып. 1. С. 110-117.
11. Т.В.Щеголева. О перестройке кубической гранецентрированной решетки в гексагональную плотноупакованную. ФММ. 1975. Т. 40. Вып. 6. С. 1198-1203.
12. Леванюк А.П., Санников Д.Г. Несобственные сегнетоэлектрики. УФН. 1974. Т. 112. № 43. С. 561.
13. Верма А., Кришна П. Полиморфизм и политипизм в кристаллах. М. “Мир”. 1969. 274 с.
14. Аптекарь И.Л., В.А.Бабаянц, Л.Г.Шабельников, В.Ш.Шехтман. Структурный механизм низкотемпературного фазового перехода гексагональной модификации сульфида никеля. ФТТ. 1977. Т. 19. № 11. С. 3239.

15. А.Л.Ройтбурд. Современное состояние теории мартенситных превращений. В сб. “Несовершенства кристаллического строения и мартенситные превращения”. М.: “Наука”. 1972. С. 7-33. А.Л. Ройтбурд «Теория формирования гетерофазной структуры при фазовых превращениях в твердом состоянии». Успехи физических наук. 113. 69–104. (1974).

16. А.Л.Ройтбурд. Об ориентационных и габитусных соотношениях между кристаллическими фазами при превращениях в твердом состоянии. Кристаллография. 1967. Т. 12. № 4. С. 567. А.Л.Ройтбурд. О доменной структуре кристаллов, образующихся в твердой фазе. ФТТ. 1968. Т. 10. № 12. С. 3619. A.L.Roitburd. Domain Structure Caused by Internal Stresses in Heterophase Solids. Phys. Stat. Sol. (a). 1973. Vol. 16. No. 2. P. 329.

17. Лысак Л.И., А.И.Устинов. Механизм образования мартенситных структур в сплаве медь-кремний. ФММ. 1977. Т. 44. Вып. 5. С. 1050 (см.также Л.И.Лысак, А.И.Устинов. Механизм перехода ГЦК → ГПУ в сплаве Cu-Si. Докл АН СССР. 1976. Т. 231. № 2. С. 339-341). Л.И.Лысак, А.И.Устинов. Образование плотноупакованных мартенситных фаз в условиях внешних воздействий. Металлофизика. 1976. Вып. 64. С. 5-15.

18. Schumann Hermann. Влияние напряжений и деформаций на мартенситное превращение решетки ГЦК → ГП. “Neue Hutte”. 1974. Vol. 19. No. 8. P. 492-487.

19. П.Кюри. Избранные труды. М. “Наука”. 1966. 399 с.

20. И.С.Желудев, Л.А.Шувалов. Изв. АН СССР. Сер.физическая. 1957. Т. 21. С. 264.

21. И.С.Желудев, Л.А.Шувалов. Сегнетоэлектрические фазовые переходы и симметрия кристаллов. Кристаллография. 1956. 1. Вып. 6. С. 681-688. И.С.Желудев, Л.А.Шувалов. Кристаллография. 1959. Т. 4. Вып. 3. С. 459. И.С.Желудев. Четыре правила симметрии. В кн. «Проблемы кристаллографии». Изд. «Наука». М. 1987. С. 56-68.

22. П.Грот. Физическая кристаллография и введение к изучению физических свойств важнейших соединений. Изд. Риккера. С.-Петербург. 1897. Стр. 305.
23. Л.Г.Шабельнико, В.Ш.Шехтман, О.М.Царев. Физика твердого тела. 1976. Т. 18. С. 1529.
24. Ю.И.Сиротин, М.П.Шаскольская. Основы кристаллофизики. М. “Наука”. 1975.
25. И.С.Желудев. Основы сегнетоэлектричества. М.Атомиздат. 1973. 472 С.
26. Ф.Иона, Д.Ширане. Сегнетоэлектрические кристаллы. М. “Мир”. 1965. 543 с.
27. Аптекарь И.Л., В.А.Бабаянц, Л.Г.Шабельников, В.Ш.Шехтман. Структурный механизм низкотемпературного фазового перехода гексагональной модификации сульфида никеля. ФТТ. 1977. Т. 19. № 11. С. 3239.
28. А.Гинье. Рентгенография кристаллов. М. Гос.изд. физико-математической литературы. 1961. 604 с.
29. Р.Джеймс. Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей. М. Издательство иностранной литературы. 1950. 572 с.
30. Афоникова Н.С., Шмытько И.М., Шехтман В.Ш. Свойства симметрии полидоменных кристаллов и взаимное переключение доменов при внешних воздействиях. Изв. АН СССР. Сер. физическая. 1979. 43. № 8. С. 1611-1618.
31. В.А.Малешина, И.С.Желудев, И.С.Рез. Кристаллография. 1960. Т. 5. С. 322.
32. Furuhashi Y., Toriyama K. J. Appl. Phys. Lett. 1973. Vol. 23. P. 361.
33. Nomura S., Asao Y., Sawada S. J. Phys. Soc. Japan. 1961. Vol. 19. P. 917.
34. В.А.Копчик, С.Д.Тошев. Изв. АН СССР. Сер. физическая. 1965. Т. 29. С. 956.
35. Sugii K., Jwasaki H., Jtoh Y. J. Cryst. Growth. 1972. Vol. 16. P. 291.

36. Polcarova M., Janta J. Рентген-топографическое наблюдение дефектов решетки в кристаллах ТГС. "Czechos. J. Phys.". 1973. В23. № 3. 331-340.
37. Krausslich J., Mohrig H. Исследование сегнетоэлектрических доменов в монокристаллах LiNbO_3 с помощью рентгеновской топографии. "Krist. und Techn.". 1974. 9. № 7. 811-815.
38. Authier A., Petroff J.P. J. Phys. Soc. Japan. 1970. Vol. 28. Suppl. P. 373.
39. Н.Р.Иванов, Л.Ф.Кирпичникова, В.П.Константинова, Л.В. Соболева, Л.А.Шувалов. Кристаллография. 1978. Т. 23. С. 788.
40. Flippen R.V. J. Appl. Phys. 1975. Vol. 46. P. 1068.
41. В.Л.Инденбом. Сегнетоэластики и история развития теории двойникования и теории сегнетоэлектричества. Изв. АН СССР. Сер. физическая. 1979. Т. 43. № 8. С. 1631-1640.
42. И.И.Корнилов, О.К.Белюсов, Е.В.Качур. Никелид титана и другие сплавы с эффектом "памяти". М. "Наука". 1977. 199 с.
43. Delaey L., Krishnan R.V., Tas H., Wariimont H. Thermoelasticity, pseudoelasticity and the memory effects associated with martensitic transformations. Part I. Structural and microstructural changes associated with the transformations. [Термоупругость, псевдоупругость и эффекты памяти, связанные с мартенситными превращениями. Ч. I. Структурные и микроструктурные изменения, связанные с превращениями]. J.Mater.Sci. 1974. Vol. 9. P. 1521-1535. Delaey L., Krishnan R.V., Tas H., Wariimont H. Thermoelasticity, pseudoelasticity and the memory effects associated with martensitic transformations. Part II. The macroscopic mechanical behaviour [Термоупругость, псевдоупругость и эффекты памяти, связанные с мартенситными превращениями. Ч. II. Макроскопические механические свойства]. J.Mater.Sci. 1974. Vol. 9. P. 1536-1544. Delaey L., Krishnan R.V., Tas H., Wariimont H. Thermoelasticity, pseudoelasticity and the memory effects associated with martensitic transformations. Part III. Thermodynamics and kinetics [Термоупругость, псевдоупругость и эффекты памяти, связанные с

мартенситными превращениями. Ч. III. Термодинамика и кинетика]. J.Mater. Sci. 1974. Vol. 9. P. 1545-1555.

44. Owen Walter S. Эффект запоминания формы и его применение. ShapeMemEff. Alloys. NewYork-London. 1975. P. 305-325.

45. Л.Г.Хандрос, И.А.Арбузова. Мартенситное превращение, эффект памяти и сверхупругость. В сб. “Металлы, электроны, решетка”. “Наукова думка”. Киев. 1975. С. 109-143.

46. Wasilewski R.J. Scr. Met. 1975. Vol. 9. P. 417.

47. Е.В.Цинзерлинг. Искусственное двойникование кварца. М. Издательство АН СССР. 1961. 160 с.

48. Е.В.Цинзерлинг. ДАН СССР. 1953. Т. 40. С. 785.

49. Б.И.Николин. Многослойные структуры и политипизм в металлических кристаллах. К. “Наукова думка”. 1984. 240 с.

50. Б.И.Николин. Принципы образования многослойных (длиннопериодных) мартенситных структур в металлических сплавах. ФММ. 1978. Т. 45. Вып. 1. С. 110-117.

51. Э.З.Каминский, Г.В.Курдюмов, В.Неймарк. О превращениях β - фазы в медно-алюминиевых сплавах. ЖТФ. 1934. Т. 4. Вып. 9. С. 1774-1775.

52. Gridnev V. N., Kurdjumov G.V. Kleingefuge der metastabilen g' -phase von Cu-Al Legierungen. Metallwirtschaft. 1935. Vol. 15. No. 3. P. 437-440.

53. Гриднев В.Н., Курдюмов Г.В. Микроструктурная характеристика метастабильных фаз Cu-Al сплавов. В кн. “Рентгенография в применении к исследованию металлов. М. ОНТИ. 1936. С. 259-261.

54. Курдюмов Г.В. Общие закономерности фазовых превращений в эвтектоидных сплавах. Изв. АН СССР. Сер. химическая. 1936. № 2. С. 271-284.

55. Курдюмов Г.В., Мирецкий В.И., Стеллецкая Т.И. Превращения в эвтектоидных сплавах. ЖТФ. 1938. Т. 8. № 22/23. С. 1959-1972.

56. C.Rodrigues, L.C.Brown. Shape Memory Effects in Alloys. New York-London. 1975. p. 29.

57. Г.В.Курдюмов. Явления закалки и отпуска стали. М. "Металлургия". 1960. 64 с.
58. В.Г.Горбач. Явление фазового наклепа при $g \rightarrow a \rightarrow g$ - превращениях. Металлофизика. 1970. Вып. 27. С. 5.
59. В.Д.Садовский. Структурная наследовательность в стали. М. "Металлургия". 1973.
60. A.Nagasawa. J. Phys. Soc. Japan. 1971. Vol. 31. No. 6. P. 1683-1688.
61. Akira Nagasawa, Keisuke Kawachi. J. Phys. Soc. Japan. 1971. Vol. 30. No. 1. P. 296.
62. Akira Nagasawa. Эффект памяти в сплаве In-Tl. J.Phys. Soc.Japan. 1971. Vol. 30. No. 4. P. 1200-1206.
63. J.Perkins. Martensitic substructural prerequisite for shape memory effect (SME). (Субструктура мартенсита - необходимое условие для проявления эффекта памяти формы (ЭПФ)). Scr. Met. 1975. Vol. 9. No. 2. P. 121-127.
64. Е.М.Савицкий, Г.С.Бурханов, И.М.Заливин. Эффект механической памяти в сплавах марганец-медь. ДАН СССР. 1972. Т. 204. № 3. С. 593-595.
65. И.А.Арбузова, Ю.Н.Коваль, В.В.Мартынов, Л.Г.Хандрос. Эффект "памяти формы" в стали 1X18H10T. ФММ. 1974. Т. 37. Вып. 5. С. 1103-1105.
66. В.Ш.Шехтман, Р.Диланян. Введение в рентгеновскую кристаллографию. Учебное пособие для аспирантов и студентов, обучающихся по специальностям "физика конденсированных сред" и "физическое материаловедение". ИФТТ РАН. Подмосковный филиал МГУ имени М.В.Ломоносова. Релакционно-издательский отдел ИПХФ РАН. Черноголовка. 2002. 144 с.
67. vonMolnar, S., Holtzberg, F.: AIPConf. Proc. 29 (1976) 394.
68. Goryachev, Yu. M., Kutsenok, T. G.: High Temp. High Press. 4 (1972) 663.
69. В.П.Жузе, А.В.Голубков, Е.В.Гончарова, В.М.Смирнова. ФТТ. 1964. Т. 6. С. 257.

70. Jaraman A., Narayanamirithi V., Bucher E., Maines R.G. Phys. Rev. Lett. 1979. Vol. 25. P. 1430.
71. А.Е.Совестнев, Г.А.Крутов, А.О.Рыльников, В.А.Шубарев. ЖЭТФ. 1977. Т. 73. С. 961.
72. Е.Ю.Тонков, И.Л.Аптекарь. ФТТ. 1974. Т. 16. С. 1507.
73. Т.Л.Бажалова, Т.Б.Жукова, И.А.Смирнов, С.Г.Шульман, Н.А.Яковлева. ФТТ. 1974. Т. 16. С. 1507.
74. Каминский В.В., А.И.Шелых, Т.Т.Дедегкаев, Т.Б.Жукова, С.Г.Шульман, И.А.Смирнов. Фазовый переход металл-полупроводник в SmS под действием лазерного облучения. ФТТ. 1975. Т. 17. № 5. С. 1546.
75. Каминский В.В. Энергия фазового перехода металл-полупроводник в SmS и пороговая плотность энергии записи. ФТТ. 1978. Т. 20. № 6. С. 1742.
Каминский В.В., Соломонов Ю.Ф., Егоров В.Е., Смирнов Б.И., Смирнов И.А. Энергия фазового перехода металл-полупроводник в моносulfиде самария. ФТТ. 1976. Т. 18. № 10. С. 3135-3137.
76. A.Jayaraman, E.Bucher, P.D.Dernier, L.D.Longinetti. Temperature-induced explosive first-order electronic phase transition in Gd-doped SmS (Скачкообразный электронный переход первого рода в SmS с примесью Gd, обусловленный понижением температуры). Phys. Rev. Lett. 1973. Vol. 31. No. 11. P. 700-703.
77. J.D.Eshelby, рус тилинде Дж.Эшельби. Континуальная теория дислокаций. Издательство Иностранной литературы. Москва. 1963. 248 с.
78. S.VonMolnar, T.Penney, F.Holtzberg. J. dePhys., 37, Suppl., C4-241, 1976.
79. L.J.Tao, F.Holtzberg. Valence transitions of Sm in monosulfide solid solutions. Phys. Rev. 11, 3842, 1975.
80. И.Л.Аптекарь, Е.Ю.Тонков. ФТТ, 21, 189, 1979.
81. A.Jayaraman, V.Narayamurti, E.Busher, R.G.Maines. Continuous and discontinuous semiconductor-metal transition in samarium monochalcogenides under pressure // Phys. Rev. Lett.- 1970.- V.25.- P.1430-1433.

82. В.А.Шабуров, А.И.Егоров, Г.А.Крутов, А.С.Рыльников, А.Е.Совестнов, О.И.Сумбаев. ЖЭТФ. 1975. Т. 68. С. 326.
83. A.Jayaraman, P.D.Dernier, L.D.Longinotti. High Temp. – High Press., 7, 1, 1975. L.L.Hirst. J.Phys. Chem. Sol., 35, 1285, 1974.
84. V. A. Shaburov, A. I. Egorov, G. A. Krutov, A. S. Ryl'nikov, A. I. Sovestnov, and O. I. Sumbaev. Electron mechanism of the isomorphic phase transition in SmS JETP, Vol. 41, No. 1, May 1975. 326-334.
85. B.M.Maple, D.Wohlleben. Nonmagnetic 4f Shell in the High-Pressure Phase of SmS. Phys. Rev. Lett. 27. 511. 1971.
86. И.Л.Аптекарь, Е.Г.Поятовский. Физика металлов и металловедение. 25. 777. 1968.
87. H.S.Wio, B.Alaseio, A.Lopez. Sol. St. Common. 15. 1933. 1974.
88. J.N.Jefferson. J. Phys. C: Sol. St. 9. 269. 1976.
89. Абдикамалов Б.А., Аптекарь И.Л., Сергеева В.М., Тонков Е.Ю. Фазовый переход в сплаве $\text{Sm}_{0.8}\text{Gd}_{0.2}\text{S}$ при низких температурах. ФТТ. 1976. Т. 18. № 10. С. 2975-2979.
90. И.С.Желудев, Н.А.Романюк. Кристаллография. 1959. Т. 4. С. 708.56.
91. Д.Е.Батова, В.И.Иванов, А.В.Копыл, С.С.Хасанов, В.Ш.Шехтман, Е.В.Шулаков. Моделирование рентгенограмм монокристаллов с помощью ЭВМ. Заводская лаборатория. 1984. 3 6. С. 53-56.
92. А.Гинье. Рентгенография кристаллов. М. Государственное издательство физико-математической литературы. Москва. 1961. 604 с.

III. Internet resurslari.

1. www.ziyonet.uz
2. www.physics.riew.com
3. www.ujp.org
4. www.fistsolar.com
5. www.karsu.uz
6. www.edu.uz