Б.М. ӘСКӘРОВ

БӘРК ҸИСИМЛӘР НӘЗӘРИЈЈӘСИ

I ҺИССӘ

ФОНОНЛАР

*Али мәктәбләр үчүн
дәрс вәсаити*

*Азәрбајҹан Республикасы Тәһсил
Назиринин 06 март 2001-ҹи ил тарихли
196 сајлы әмри илә тәсдиг едилмишдир*

Бакы Университети нәшријјаты

БАКЫ – 2001

Китаба рә'ј верәнләр: **1. Азәрбајҹан ЕА-нын мүхбир үзвү, физика-ријазијјат елмләри доктору, проф. Ф.М.Һәшимзадә**
2. Физика-ријазијјат елмләри доктору Т.Һ.Исмајылов

Елми редакторлар: **Азәрбајҹан ЕА-нын мүхбир үзвү, ф.р.е.д., проф. Ф.М.Һәшимзадә вә ф.р.е.н. Х.А.Һәсәнов**

Бу китаб јазылмасы нәзәрдә тутулан бөјүк һәҹмли дәрс вәсаитинин ики фәсилдән ибарәт биринҹи һиссәсидир. Биринҹи фәсилдә бәрк ҹисимләрин квант нәзәријјәсиндә мәсәләнин үмуми гојулушу, кристал гәфәсин рәгсләри, фонон газынын термодинамик хассәләри шәрһ олунмушдур. Икинҹи фәсил бәрк ҹисмин истилик тутумунун квант нәзәријјәси, бәрк ҹисимләрин һал тәнлији вә фонон истиликкечириҹилијинин нәзәријјәсинә һәср едилмишдир.

Дәрс вәсаити мүәллифин узун илләр Бакы Дөвләт Университетинин физика факүлтәсиндә вә Түркијәнин Һаҹәттәпә Университетинин физика бөлүмүндә охудугу мүһазирәләр әсасында јазылмышдыр.

Китаб Университетләрин физика факүлтәләринин јухары курс тәләбәләри, макистрантлар, аспирантлар вә елми ишчиләр үчүн нәзәрдә тутулмушдур.

$Ә\frac{3802010000-08}{658(07)-029}-2001$

Мүндәричат

I ФӘСИЛ

КРИСТАЛ ГӘФӘСИН РӘГСЛӘРИ. ФОНОН ГАЗЫ

§ 1. Бәрк чисимләр нәзәријјәсинин үмуми нәзәри физикада јери

Истәнилән макроскопик систем (чисим) јалныз ики нөв зәррәчикдән, нүвә вә електронлардан тәшкил едилмишдир. Кристаллик бәрк чисимләр макроскопик системләрин хүсуси һалыдыр. Беләки, бу һалда ағыр зәррәчикләр (нүвәләр) фәзада мүәјјән бир гајдада дүзүләрәк кристал гәфәс јарадырлар.

Бәрк чисимләрин бүтүн физики хассәләри (електрик, истилик, оптик, магнит вә с.) гәфәсин дүјүнләриндәки нүвәләрин вә гәфәс дахилиндә пајланмыш електронлар системинин һәрәкәтләри илә мүәјјән олунур.

Бәрк чисимләр нәзәријјәсинин әсас мәгсәди, електронларын вә гәфәси тәшкил едән нүвәләрин һәрәкәтләрини өјрәнән классик вә квант механикасы, ејни заманда статистик физика ганунларына әсасланараг, бәрк чисимләрин тәчрүбәдә өлчүлән макроскопик хассәләрини изаһ етмәк вә ја јени хассәләри әввәлчәдән мүәјјән етмәкдир. Бунун үчүн бәрк чисми әмәлә кәтирән зәррәчикләрин һәрәкәтләринин һансы тәнликләрлә тәсвир олундуғуну билмәк лазымдыр.

Мүасир нәзәри физикада дөрд фундаментал һәрәкәт тәнлији мөвчуддур.

1.Классик гејри-релјативистик механиканын тәнлији (Нјутон һәрәкәт тәнлији)

$$m_0 \cdot \frac{d^2\boldsymbol{r}}{dt^2} = \boldsymbol{F}. \tag{1.1}$$

Бурада m_0 - зәррәчијин күтләси, $\boldsymbol{F}$-она тә'сир едән гүввә, $\boldsymbol{r}$ - зәррәчијин радиус векторудур.

2. Релјативистик классик механиканын тәнлији (Ејнштејн тәнлији)

$$\frac{m_0}{\sqrt{1-\frac{\boldsymbol{v}^2}{c^2}}} \cdot \frac{d^2\boldsymbol{r}}{dt^2} = \boldsymbol{F}. \tag{1.2}$$

Бурада c - ишығын вакуумда јајылма сүр'әти, $\boldsymbol{v}$-зәррәчијин һәрәкәт сүр'әтидир.

3. Гејри-релјативистик квант механикасынын тәнлији (Шрединкер тәнлији)

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{\mathscr{H}}\Psi. \tag{1.3}$$

Бурада $\Psi(\boldsymbol{r},t)$ - зәррәчији тәсвир едән далға функсијасы, $\left(\hbar = \frac{h}{2\pi},\right) h$-Планк сабити, $\hat{\mathscr{H}}$ - Һамилтон операторудур.

4.Релјативистик квант механикасынын тәнлији (Дирак тәнлији)

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left[c\,(\hat{\alpha}\hat{p}) + m_0c^2\,\hat{\beta}\right]\Psi. \tag{1.4}$$

Бурада $\hat{\alpha}$ вә $\hat{\beta}$ - мә'лум Дирак матрисләри, $\hat{p} = -i\hbar\nabla$- импулс операторудур. Сәрбәст зәррәчик һалында (1.4) тәнлијинин мәхсуси енержиси

$$E = \pm(m_0{}^2 c^4 + c^2 p^2)^{1/2} \tag{1.5}$$

ифадәси илә верилир.

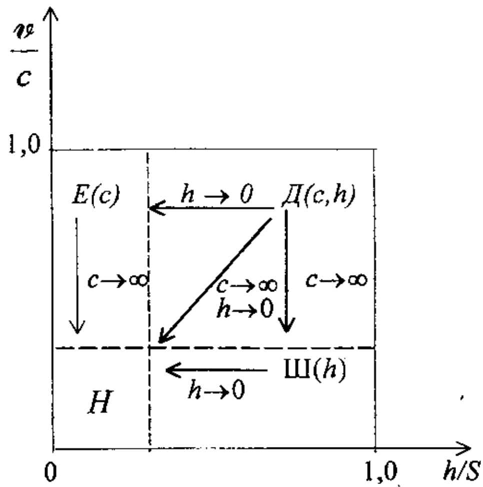
Бу тәнликләрдә ики универсал сабитин, c- ишыг сүр'әти вә h - Планк сабитинин иштирак етдији көрүнүр. Бу сабитләр јухарыдакы тәнликләрә белә дахилдир.

Нјутонун һәрәкәт тәнлијиндә һеч бир сабит јохдур. Ејнштејн тәнлијиндә јалныз ишыг сүр'әти вардыр. Шрединкер тәнлијиндә јалныз h- Планк сабити, Дирак тәнлијиндә исә һәр ики сабит (c вә h) иштирак едир.

Бу дөрд һәрәкәт тәнлијинин һәр биринин тәтбиг саһәләри вардыр. Тәтбиг саһәси һәрәкәтин характеристикасы олан сүр'әт (υ) вә һәрәкәтин тә'сиринин ($S = m_0 \upsilon d$, һарадакы d- һәрәкәтин баш вердији фәзанын хәтти өлчүсүдүр) ујғун олараг ишыг сүр'әтинә вә Планк сабитинә олан нисбәтләри илә тә'јин олунур. Ишыг сүр'әти ән бөјүк сүр'әт, h исә ән кичик тә'сир олдуғундан мүмкүн олан бүтүн механики һәрәкәтләри ашағыдакы диаграмда көстәрмәк олар (шәкил 1.1).

Бу диаграмда олан квадратын ичәрисиндә мә'лум һәрәкәт тәнликләринин јерләри вә онларын бир-биринә лимит кечидләри көстәрилмишдир. Көрүндүјү кими, ән үмуми һал Дирак тәнлији илә тәсвир олунур. Нјутон тәнлији исә чох кичик областы әһатә едир.

Инди гәфәсдәки нүвә вә електронларын һәрәкәтләринин шәкил 1.1 - дә верилән диаграмын һансы областына дүшдүјүнү араштыраг. Әввәлчә електронларын һәрәкәтинә бахаг; бәрк чисимләрдә електронун сүр'әти $\upsilon \sim 10^8 \dfrac{см}{сан} << c$ олдуғундан онун һәрәкәти гејри-релјативистикдир. Електронун һәрәкәт тә'сири $S = m_0 \upsilon a \approx$ $\approx 10^{-27} \cdot 10^8 \cdot 10^{-8} = 10^{-27}\, ерг \cdot сан \approx h$ олур.Бурада $m_0 \approx 10^{-27}\, г$ - електронун күтләси, $a \approx 10^{-8}\, см$ - електронун һәрәкәт областынын, јә'ни атомун өлчүсүдүр. Беләликлә, електрон системинин һәрәкәти Шрединкер тәнлијинин тәтбиг олунма областына дүшүр (шәкил 1.1), јә'ни електронларын һәрәкәтини өјрәнмәк үчүн гејри-релјативистик квант механикасынын тәнлијини (Шрединкер тәнлијини) сечмәк лазымдыр. Нјутон тәнлији бәрк чисимләрдә електронларын һәрәкәтини тәсвир етмәк үчүн јарамыр.



шәкил 1.1.

Кристал гәфәсин дүјүн нөгтәләриндә олан нүвәләр јалныз рәгси һәрәкәт едә билирләр. Бу рәгси һәрәкәтин сүр'әтинин ишыг сүр'әтиндән чох кичик олдуғу мә'лумдур. Нүвәләрин һәрәкәт тә'сирини гијмәтләндирәк.

$$S_{н} \sim MVX . \qquad (1.6)$$

Бурада M- нүвәнин күтләси, V- сүр'әти, X- рәгси һәрәкәт заманы нүвәнин таразлыг вәзијјәтиндән јердәјишмәсидир. Нүвәнин јердәјишмәси $X = A\cos\omega t$ олсун, бурада ω- рәгсин тезлиjидир.

$$V = \dot{X} \sim \omega X \tag{1.7}$$

олдуғундан, $X \sim \frac{V}{\omega}$ вә

$$S \sim \frac{MV^2}{\omega} \tag{1.8}$$

олур. $MV^2 \approx k_0 T$ олдуғуну нәзәрә алсаг,

$$S \sim \frac{k_0 T}{\omega} \tag{1.9}$$

аларыг. Бурада k_0 – Болсман сабити, T - мүтләг температурдур. Нүвәнин һәрәкәтинин классик олмасы үчүн $S >> h$ олмалыдыр, jә'ни

$$\frac{k_0 T}{\omega} >> h \quad \text{вә jа} \quad k_0 T >> h\omega \tag{1.10}$$

олмалыдыр. Температурун (1.10) шәртинин өдәдиjи областда, jә'ни jүксәк температурларда нүвәләрин һәрәкәти классик олур. Әксинә, $k_0 T \approx h\omega$ олдугда

$$S \approx h \tag{1.11}$$

олур, jә'ни ашағы температурларда нүвәләрин һәрәкәти квант характерлидир вә Шрединкер тәнлиjи васитәсилә тәдгиг олунмалыдыр.

Демәли, муәjjән бир рәгс тезлиjи ω үчүн jүксәк температурларда нүвәләрин һәрәкәтини араштырмаг үчүн Нjутон тәнлиjиндән истифадә етмәк олар. Ашағы температурларда исә нүвәләрин һәрәкәти квант тәбиәтли олдуғундан Шрединкер тәнлиjиндән истифадә олунмалыдыр.

Нәтичә: Үмуми һалда кристал бәрк чисим нәзәријјәсиндә гејри-релјативистик квант механикасынын һәрәкәт тәнлији әсас көтүрүлмәлидир, јә'ни нәзәријјә квант нәзәријјәси олмалыдыр. Бәрк чисим макроскопик систем олдуғуна көрә квант механикасы вә еһтимал нәзәријјәси әсасында статистик физика, үмуми һалда квант статистикасы гурулмалыдыр.

§ 2. Бәрк чисимләр нәзәријјәсиндә мәсәләнин үмуми гојулушу

N атомдан ибарәт кристала бахаг. Бир атомдакы електронларын сајы Z оларса, кристалда N сајда нүвә вә ZN сајда електрон вардыр. Бундан әввәлки параграфда көстәрдик ки, белә бир системин нәзәријјәсини гурмаг үчүн Шрединкер тәнлијинә истинад етмәк лазымдыр. Нүвәләри вә електронлары нөгтәви јүкләр кими гәбул етсәк, стасионар һалда Шрединкер тәнлији белә јазылыр:

$$\hat{\mathscr{H}}\,\psi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{R})=\mathscr{E}\,\psi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{R})\,. \qquad (2.1)$$

Бурада $\hat{\mathscr{H}}$ - системин Һамилтон оператору, $\mathscr{E}$ мәхсуси енержиси, $\psi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{R})$ - системин далға функсијасыдыр, $\boldsymbol{r},\boldsymbol{R}$ - ујғун олараг електронларын вә нүвәләрин радиус векторларыдыр. Һамилтон оператору

$$\hat{\mathscr{H}}=-\frac{\hbar^2}{2m_0}\sum_{i=1}^{ZN}\nabla^2_{r_i}-\frac{\hbar^2}{2M}\sum_{k=1}^{N}\nabla^2_{R_k}+V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{R}) \qquad (2.2)$$

шәклиндәдир. Бурада m_0 -електронун күтләси, M-нүвәнин күтләси, ∇^2-ујғун Лаплас оператору вә

$$V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{R})=\sum_{i<\ell}\frac{e^2}{r_{i\ell}}+\sum_{n<k}\frac{Z_kZ_ne^2}{R_{kn}}-\sum_{i,k}\frac{Z_ke^2}{r'_{ik}} \qquad (2.3)$$

електрон вә нүвәләрин Кулон гаршылыглы тә'сир енержисидир. Бу ифадәдә $r_{i\ell}$ -нөмрәләри i вә ℓ олан електронлар арасындакы мәсафә, R_{kn}-нүвәләр арасындакы мәсәфә, r'_{ik} нөмрәси i олан електрон илә нөмрәси k олан нүвә арасындакы мәсафәдир.

(2.1) тәнлијинин һәлли олан далға функсијасы $\Psi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{R})=\Psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,...,\boldsymbol{r}_{ZN};\ \boldsymbol{R}_1,\boldsymbol{R}_2,...,\boldsymbol{R}_N)$ әслиндә $3(ZN+N)$ сајда дәјишәнләрдән асылыдыр. Макроскопик кристалда атомларын сајы $N\approx10^{23}\ см^{-3}$ олдуғуну хатырласаг, (2.1) тәнлијинин дәгиг һәллинин практики олараг мүмкүн олмадығына әмин оларыг.

Мәсәләни тәгриби дә олса һәлл етмәк үчүн бә'зи јахынлашмалар етмәк лазымдыр. Биринчи јахынлашма *адиабатик јахынлашмадыр.* Бу јахынлашмада електронун күтләсинин нүвәләрин күтләсиндән чох кичик олдуғуну нәзәрә алсаг $(m_0<<M)$, (2.2) ифадәси илә верилән Һамилтон операторунда нүвәләрин кинетик енержисинә ујғун кәлән $-\dfrac{\hbar^2}{2M}\sum\limits_{k=1}^{N}\nabla^2_{R_k}$ һәдди ата биләрик. Јә'ни нүвәләр гәфәсдә һәрәкәтсиз гәбул едилир вә електрон системи сүкунәтдә олан нүвәләрин саһәсиндә һәрәкәт едир. Бу һәрәкәт

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}\sum_{i=1}^{ZN}\nabla^2_{r_i}+V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{R})\right]\psi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{R})=\varepsilon(\boldsymbol{R})\psi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{R}) \qquad (2.4)$$

тәнлији илә верилир. Бурада $\boldsymbol{R}$-ләр артыг дәјишән олмајыб, сүкунәтдә олан нүвәләрин верилмиш координатларына ујғун кәлир, јә'ни параметрләрдир. $\varepsilon(\boldsymbol{R})$-кәмијјәти радиус векторлары $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2, ..., \boldsymbol{R}_N)$ олан вә гаршылыглы тә'сирдә олан нүвәләрин Кулон саһәсиндә һәрәкәт едән електрон системинин енержиси, $\psi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{R})$- електрон системинин далға функсијасыдыр.

Нүвәләр системинин һәрәкәт тәнлијини јазмаг үчүн кристалын далға функсијасыны, јә'ни (2.1) тәнлијини һәллини

$$\Psi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{R}) = \phi(\boldsymbol{R})\psi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{R}) \qquad (2.5)$$

шәклиндә ахтараг. Бу функсијаны (2.1)-дә јеринә јазыб вә (2.4) тәнлијини нәзәрә алсаг,

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\sum_{k=1}^{N}\left[\psi\nabla^2_{\boldsymbol{R}_k}\phi + 2(\nabla_{\boldsymbol{R}_k}\psi\nabla_{\boldsymbol{R}_k}\phi) + \phi\nabla^2_{\boldsymbol{R}_k}\psi\right] +$$
$$+\varepsilon(\boldsymbol{R})\psi\phi = E\psi\phi \qquad (2.6)$$

аларыг.

Електронун далға функсијасынын нормаллашдырма шәртинә көрә

$$\int \psi^2 d\boldsymbol{r} = 1. \qquad (2.7)$$

Бурадан чыхыр ки,

$$\nabla_{\boldsymbol{R}_k}\int \psi^2 d\boldsymbol{r} = 2\int \psi\nabla_{\boldsymbol{R}_k}\psi d\boldsymbol{r} = 0. \qquad (2.8)$$

(2.6) тәнлијини ψ функсијасына вуруб $d\boldsymbol{r}$-ә көрә интегралласаг,

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\sum_{k=1}^{N}\nabla^2_{\boldsymbol{R}_k}\phi + \left[\varepsilon(\boldsymbol{R}) - \frac{\hbar^2}{2M}\sum_{k=1}^{N}\int \psi\nabla^2_{\boldsymbol{R}_k}\psi\, d\boldsymbol{r}\right]\phi = E\phi \qquad (2.9)$$

аларыг. Бурада (2.7) вә (2.8) шәртләри нәзәрә алынмышдыр.

Електронун енержиси $\varepsilon(R) \approx \dfrac{1}{m_0}, M >> m_0$ вә ψ функсиjасынын $\boldsymbol{R}$-дән зәиф асылы олдуғуну нәзәрә алсаг, (2.9) тәнлиjинин сол тәрәфиндә орта мө'тәризә ичиндәки икинчи һәдди атмаг олар. Беләликлә, нүвәләр системинин далға тәнлиjи

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\sum_{k=1}^{N}\nabla^2_{\boldsymbol{R}_k}+\varepsilon(\boldsymbol{R})\right]\phi(\boldsymbol{R})=E\phi(\boldsymbol{R}) \qquad (2.10)$$

шәклинә дүшүр.

Беләликлә, адиабатик jахынлашмада електрон-нүвә һәрәкәтинин дәгиг квантмеханики мәсәләси ики мүстәгил мәсәләjә аjрылыр:

а) һәрәкәтсиз нүвәләрин әтрафында jаратдығы Кулон саһәсиндә електронларын һәрәкәти ((2.4) тәнлиjи).

б) нүвәләрин $\varepsilon(R)$ потенсиал саһәдә һәрәкәти ((2.10) тәнлиjи), һарадакы $\varepsilon(R)$ кәмиjjәти вәзиjjәтләри фиксә олунмуш нүвәләрин саһәсиндә һәрәкәт едән електрон системинин мәхсуси енержиси вә тәрпәнмәз нүвәләрин кулон гаршылыглы тә'сир енержисидир.

Көрүндүjү кими, нүвәләрин һәрәкәтини араштдырмаздан, jә'ни (2.10) тәнлиjини һәлл етмәкдән әввәл електронларын (2.4) һәрәкәт тәнлиjини һәлл едиб $\varepsilon(R)$ потенсиалыны тапмаг лазымдыр.

§ 3. Квазизәррәчикләр

Jухарыда көрдүк ки, адиабатик jахынлашманын көмәjи илә нүвә-електрон системи үчүн проблем ики jерә аjрылыр. Jә'ни (2.1) тәнлиjинин әвәзинә (2.4) вә (2.10) тәнликләрини һәлл етмәк лазымдыр. Апарылан бу ишләр проблеми садәләшдирмир. Проблем јенә дә чохзәррәчикли проблем олараг галыр. Әслиндә (2.4) вә (2.10) тәнликләри квант механикасынын јарандығы илк илләрдә јазылмышдыр. Анҹаг онун аналитик һәлли мүмкүн олмамышдыр.

Бу чәтинлији арадан галдырмаг вә бәрк ҹисимләр нәзәријјәсини гурмаг үчүн нәзәријјәјә *квазизәррәҹикләр* анлајышы дахил едилмишдир. Бу анлајышын мејдана кәлмәси квант механикасындакы дуализм принсипинә әсасланыр. Зәррәчик-далға икилији (дуализм) принсипинә көрә, һәр бир микроскопик варлыг һәм зәррәҹик, һәм дә далға хүсусијјәтинә маликдир. Мәсәлән, електрон өзүнү бә'зән зәррәҹик кими, бә'зән дә далға кими апарыр. Зәррәҹијин характеристикалары енержи (ε) вә импулсдур ($\boldsymbol{p}$); далғанын характеристикалары исә тезлик (ω) вә далға векторудур ($\boldsymbol{k}$)-дыр. Бу кәмијјәтләр Ејнштејн вә Де-Бројл ифадәләри илә әлагәләнирләр:

$$\begin{aligned} \varepsilon &\Longleftrightarrow \hbar\omega, \\ \boldsymbol{p} &\Longleftrightarrow \hbar\boldsymbol{k}. \end{aligned} \tag{3.1}$$

Көрүндүјү кими, зәррәҹик вә далға характеристикалары бир-биринә Планк сабити h илә бағлыдыр. Јухарыдакы (3.1) ифадәләрини һәм солдан саға, һәм дә сағдан сола охумаг олар.

Солдан сага - Енержиси ε, импулсу $\boldsymbol{p}$ олан зәррәҹијә тезлији ω вә далға вектору $\boldsymbol{k}$ олан бир далға ујғун кәлир.

Сагдан сола - Тезлији ω вә далға вектору $\boldsymbol{k}$ олан далғаја енержиси ε вә импулсу $\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}$ олан зәррәҹик гаршы гојулур.

Квазизәррәҹик анлајышы сағдан сола охуна әсасланыр. Белә ки, кристаллик бәрк ҹисимдә бир далға һәрәкәти варса, бу һәрәкәт бир квазизәррәҹиклә тәсвир едилә биләр вә бәрк чисмин бу һәрәкәтлә мүәјјән олунан бүтүн хүсусијјәтләрини арашдырмаг үчүн статистик физиканын ганунларыны бу квазизәррәчикләрдән ибарәт идеал газа тәтбиг етмәк кифајәтдир. Бу јолла бәрк чисимләрин квант нәзәријјәси чох вахт идеал газ нәзәријјәси дәрәчәсинә гәдәр садәләшир. Бурада бә'зи квазизәррәчикләрә тә'риф верәк.

Фонон - кристал гәфәсдә јајылан истилик вә ја еластик (сәс) далғалара ујғун квазизәррәчикләрдир. Башга сөзлә, фонон бәрк чисимләрдә истилик вә ја механики рәгсләрин јајылмасындан әмәлә кәлән далға саһәсинин квантыдыр. Фонон кристал гәфәсин елементар һәјачанланмасы кими дә баша дүшүлә биләр. Акустик вә оптик фононлар олур. Фононлар Бозе-Ејнштејн статистикасына табедир вә бозондурлар.

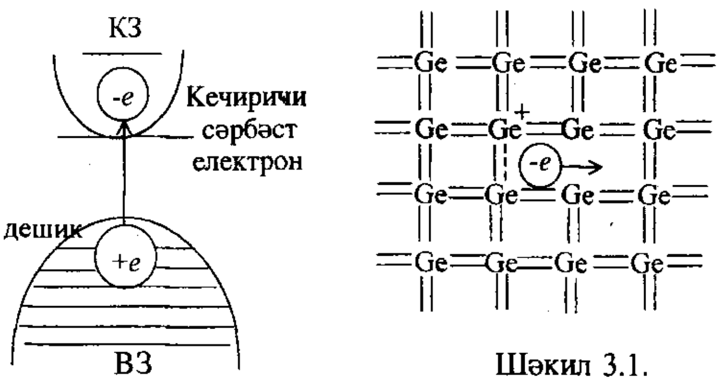
Магнон - магнит дүзүлүшү олан гәфәсләрдә (ферромагнетик вә ја антиферромагнетик) јајылан спин далғаларына гаршы гојулан квазизәррәчикләрдир. Башга сөзлә, магнон мә'лум бир дүзүлүшдә истигамәтләнмиш спин системинин елементар һәјачанланмасыдыр. Магнонлар да бозондур.

Плазмон- плазмада електрик локал јүк сыхлығынын далға шәклиндә јајылмасы нәтичәсиндә јаранан плазма далғаларына ујғун квазизәррәчикләрдир.

Кечиричилик електронлары вә дешикләр- јарымкечиричи кристалларда електрон системинин елементар ојанмаларыдыр. Бу кристалларда ашағы температурларда електронлар валент зонасына гәдәр олан бүтүн енержи зоналарыны долдурмушлар вә валент зонасындан јухарыдакы зоналар бошдур. Фәрз едәк ки, истилик вә ја фотонларын тә'сири илә бир електрон валент зонасындан кечиричи зонаја кечир. Бу һәјачанланма нәтичәсиндә кечиричи зонада бир сәрбәст електрон, валент зонасында исә бир сәрбәст дешик (*hole*=бош квант һалы) јаранcourыр.

Кечиричилик електронлары вә сәрбәст дешикләр мүстәви далға функсијасы илә тәсвир олунурлар. Електрон (-e) вә дешик (+e) бу далғалара ујғун мүәјјән күтләјә малик квазизәррәчикләрдир.

Дөрдвалентли Ge кристалында електрон вә дешикләрин јаранмасы шәкил 3.1- дә схематик олараг көстәрилмишдир. Јарымкечиричиләрдә кечиричилији бу квазизәррәчикләр тә'мин едир. Һәјәчанланма нәтичәсиндә валент електронларындан бири ковалент рабитәдән гопур вә кристалда "сәрбәст" олараг һәрәкәт едир. Електрон сајы бир ваһид азалан рабитәнин өзү мүсбәт јүк әлдә едир вә кристал дахилиндә сәрбәст олур. Електрон вә дешикләр фермиондур.

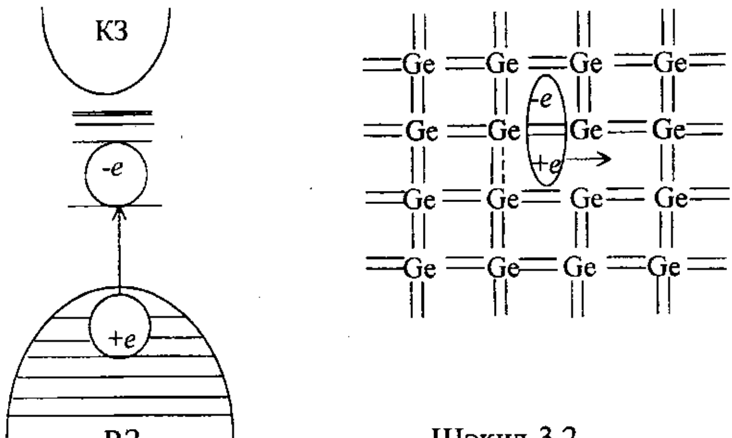


Шәкил 3.1.

Бу садә квазизәррәчикләрдән башга, онлардан тәшкил олунмуш комплекс квазизәррәчикләр вардыр. Бунлардан бә'зиләри ашағыдакы кимидир.

Екситон- јарымкечиричи вә кечиричи кристалларда електрон системинин елементар һәјәчанланмасыдыр. Бу тип һәјәчанланма, електрон-дешик чүтү јарадылмасындан бир гәдәр фәрглидир: екситон һалында валент зонасындан чыхан електрон дешик илә әлагәни итирмир, електрон вә дешик бир квазиатом јарадыр. Һәр икиси ејни импулс p

илә һәрәкәт едирләр (шәкил 3.2), лакин бу квазиатомун өлчүләри һидрокен атомунун өлчүләриндән чох-чох бөјүк олур. Бу квазиатом позитрониума охшајыр вә онун енержи спектри һидрокен атомунун спектрини хатырладыр. Екситон нејтрал квазизәррәчикдир, башга сөзлә, кечиричиликдә иштирак едә билмәз, анчаг онлар кристалда истилик енержисини дашыјырлар. Екситонлар да бозондур. Температурун артмасы нәтичәсиндә екситонлар (квазиатом) електрон вә дешик чүтләринә парчалана биләр.

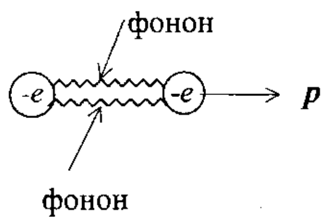


Шәкил 3.2.

Полјарон – ион кристалларда мејдана кәлир. Сәрбәст електрон ион кристалында өз әтрафыны гүтбләшдирәрәк полјаризасија чухуру јарадыр вә өзү дә бу чухура дүшүр.

Полјарону фонон булуду илә әһатә олунмуш (фонон күркү кејмиш) сәрбәст електрон кими дә тәсәввүр етмәк мүмкүндүр. Електрон ион кристалда һәрәкәт етдикчә полјаризасија чухуру (фонон күркү) да онунла бирликдә һәрәкәт етдијиндән полјаронун јүрүклүјү кичик олур. Полјаронлар фермиондурлар.

Купер чүтләри – ифрат кечиричиләрдә јүк дашыјычысы олан квазизәррәчикдир. Нәзәријјәјә көрә ифраткечиричи металларда нормал металлардан фәргли олараг електрик ахыныны сәрбәст електронлар јеринә онлардан әмәлә кәлмиш електрон чүтләри дашыјыр. Електронлары бир-биринә бағлајыб Купер чүтү јарадан електрон-фонон гаршылыглы тә'сиридир. Електронлардан бири фонон шүаландырыр, икинчи електрон исә бу фонону удур; икинчи електрон фонон бурахыр, биринчи електрон удур (шәкил 3.3).



Шәкил 3.3

Беләликлә, бир електрон чүтү јарадылыр вә бу чүтү әмәлә кәтирән һәр ики електрон ејни импулса малик бир зәррәчик кими һәрәкәт едир. Електрон фермион олдуғу һалда Купер чүтү бозондур. Бозон системиндә исә ифратахычылыг, јә'ни ифраткечиричилик мүмкүн олур. Температур артдыгча Купер чүтү ики сәрбәст електрона парчаланыр вә ифраткечиричи метал нормал метала чеврилир.

Бәрк чисимләрдә јухарыда садалананлардан әлавә дә квазизәррәчик ола биләр. Кристалда мүмкүн олан һәр бир һәрәкәтә бир квазизәррәчик гаршы гојулур. Бәрк чисимләр јалныз ики нөв зәррәчикдән (нүвә вә електрон) јарандығына бахмајараг, квазизәррәчикләрин сајы чохдур. Белә ки, һәр бир квазизәррәчик кристалда бир һәрәкәтин дашыјычысыдыр. Квазизәррәчикләр һәгиги зәррәчик дејил, бир зәррәчијин һәрәкәтинә охшар шәкилдә давранышыдыр. Квазизәррәчијин һәгиги зәррәчикдән әсас фәрги ашағыдакылардыр:

(i) квазизәррәчикләр кристалы тәрк едә билмәз вә (ii) импулслары бир гијмәтли ола билмәзләр, јә'ни квазизәррәчикләрин импулсу тәрс гәфәс вектору дәгиглији илә тә'јин олунур (бах. § 7).

Кечиричи електронларын нијә һәгиги зәррәчик олмајыб, квазизәррәчик олдуғу суал олуна биләр. Доғрудан да кристалдакы кечиричи електронлар сәрбәст вә ја изолә олунмуш атомда олан електронлардан чох фәрглидир.

§ 4. Дүз вә тәрс гәфәсләр

Кристал гәфәсин рәгсләри вә фонон газынын термодинамикасына кечмәздән әввәл кристал гәфәсләрин нөвләри вә тәрс гәфәс анлајышы илә таныш олаг.

Кристал вә ја дүз гәфәс. Браве гәфәсләри. Бәрк чисимләри тәшкил едән нүвәләр фәзада мүәјјән бир низамла дүзүләрәк кристал гәфәс тәшкил едирләр. Бу гәфәсләрин әсасыны паралелепипед шәклиндә һәндәси фигур тәшкил едир. Паралелепипедин бир тәпәсиндә кәсишән үч тәрәфин узунлугларыны a,b,c илә ишарә едәк. a,b,c тәрәфләри арасындакы бучаглар $\hat{ac}=\alpha$, $\hat{bc}=\beta$ вә $\hat{ab}=\gamma$ олсун (шәкил 4.1).

a,b,c тәрәфләрин узунлугларынын бир-биринә нисбәтләри вә α, β, γ бучагларынын гијмәтләриндән асылы олараг једди мүхтәлиф кристаллик систем мөвчуддур.

1. Кубик систем. Бу ән садә системдир: $a=b=c$; $\alpha=\beta=\gamma=90^0$. Нүвәләрин јерләшмәсинә көрә үч нөв кубик гәфәс вардыр.

Примитив кубик гәфәс (P). Бу гәфәсдә нүвәләр јалныз кубун тәпәләриндә јерләшир вә бир куба бир атом дүшүр (шәкил 4.2).

Һәчмәмәркәзләшмиш кубик гәфәс (I). Бу гәфәсдә тәпәләрдән башга кубун мәркәзиндә дә бир нүвә вардыр вә бир куба ики атом дүшүр (шәкил 4.2).

Үзәмәркәзләшмиш кубик гәфәс (F) тәпәләрдән башга кубун алты сәтһинин һәр биринин мәркәзиндә бир нүвә вардыр вә бир куба дөрд атом дүшүр (шәкил 4.2).

2. *Тетрагонал систем.* $a=b\neq c$; $\alpha=\beta=\gamma=90^0$. Бу системин ики модификасијасы вардыр. Бунлар примитив (P) вә һәчмәмәркәзләшмиш (I) тетрагонал гәфәсләрдир (шәкил 4.3).

3. *Орторомбик систем.* $a\neq b\neq c$; $\alpha=\beta=\gamma=90^0$. Бу системин дөрд модификасијасы мөвчуддур. Бунлар примитив (P), базајамәркәзләшмиш (C), һәчмәмәркәзләшмиш (I) вә үзәмәркәзләшмиш (F) орторомбик гәфәсләрдир (шәкил 4.4).

4. *Моноклиник систем.* $a\neq b\neq c$; $\alpha=\gamma=90^0$; $\beta\neq 90^0$. Бу системин ики модификасијасы мөвчуддур. Бунлар примитив (P) вә базајамәркәзләшмиш (C) гәфәсләрдир (шәкил 4.5).

5. *Тригонал систем.* $a=b=c$; $\alpha=\beta=\gamma<120^0$; $\neq 90^0$. Бу системин јеканә бир ромбоһедрал примитив гәфәси вардыр (шәкил 4.6).

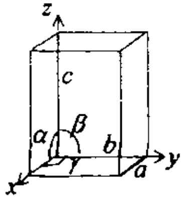
6. *Һексагонал систем.* $a=b\neq c$; $\alpha=\beta=90^0$; $\gamma=120^0$. Бу системин примитив өзәји алтыүзлү призма шәклиндә кристал гәфәсдир (шәкил 4.7).

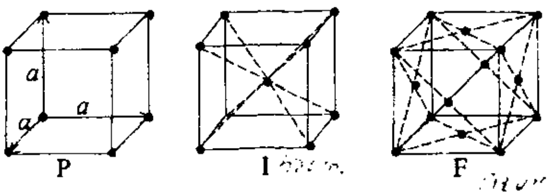
7. *Триклиник систем.* Бу ән үмуми примитив кристал гәфәсдир $a\neq b\neq c$; $\alpha\neq\beta\neq\gamma$ (шәкил 4.8).

Јухарыда садаланан једди кристал системинә дахил олан он дөрд кристал гәфәс *Браве гәфәсләри* адланыр.

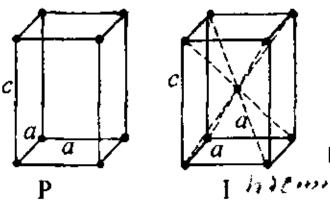
Кристал гәфәсдә бир сәтһ үзәриндә олмајан вә ејни гәфәс дүјүнүндә кәсишән $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ векторларыны елә

шәкил 4.1

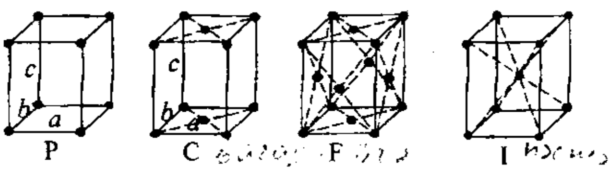




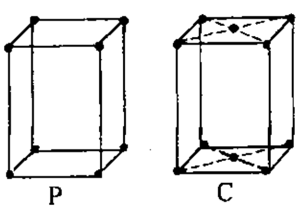
шәкил 4.2



шәкил 4.3



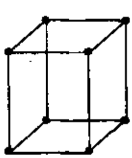
шәкил 4.4

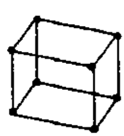


шәкил 4.6

шәкил 4.5

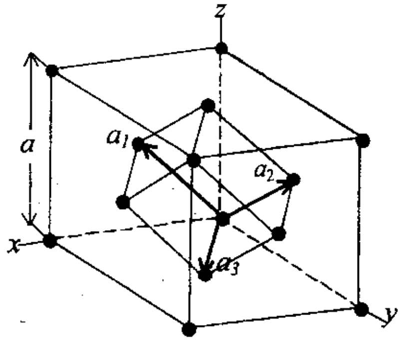
шәкил 4.7





шәкил 4.8

сечәк ки, бу векторлар үзәриндә гурулмуш паралелепипедә ән аз сајда атом дүшсүн. Бу шәкилдә гурулмуш паралелепипед кристал гәфәсин елементар өзәји, $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ векторлары исә *базис векторлары* адланыр. Базис өзәјә јалныз бир атом дүшәрсә, буна садә өзәк вә бу чүр өзәкләрдән тәшкил олунмуш кристаллик гәфәсә исә садә гәфәс дејилир. Диггәт етсәк, көрәрик ки, 14 Браве гәфәсиндән јалныз једдиси садә өзәкдир. Анчаг дикәр једди Браве гәфәси үчүн дә садә өзәкләр гурмаг мүмкүндүр. Мәсәлән, кубик системләрдә Р-типли өзәкләрдән тәшкил олунмуш кристалын базис өзәји садә кубдур (шәкил 4.2). F вә I-типли озәкләрдән тәшкил олунмуш кристал гәфәсләр үчүн дә белә базис өзәк сечилә биләр ки, бу өзәк садә олсун, јә'ни она јалныз бир атом дүшсүн. Мисал олараг, F - типли кубик гәфәсләр үчүн базис өзәк шәкил 4.9-да көстәрилмишдир. Үзәмәркәзләшмиш кубун бир тәпәсини башланғыч олараг гәбул етсәк, базис векторлары олараг бу тәпәдән башланан вә үзләрин мәркәзләриндәки атомлара гәдәр олан $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ векторлары сечилир. Бу вәзијјәтдә базис векторлары арасында галан бучаглар 60^0 олур. Онда F- типли кубик гәфәсин базис векторлары шәкил 4.9-дан көрүндүјү кими



шәкил 4.9

$$\boldsymbol{a}_1 = \frac{a}{2}(\boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{y}_0),\ \boldsymbol{a}_2 = \frac{a}{2}(\boldsymbol{y}_0 + \boldsymbol{z}_0),\ \boldsymbol{a}_3 = \frac{a}{2}(\boldsymbol{z}_0 + \boldsymbol{x}_0) \qquad (4.1)$$

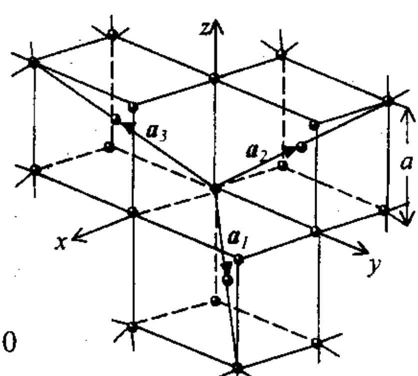
олар, бурада $\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{y}_0, \boldsymbol{z}_0$- координат охлары бојунча ваһид векторлардыр. Асанлыгла костәрмәк олар ки, бу гәфәс үчүн базис өзәјинин һәчми

$$\Omega = \boldsymbol{a}_1(\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3) = \frac{a^3}{4}. \qquad (4.2)$$

Һәчмәмәркәзләшмиш (I-тип) гәфәсин садә базис өзәји шәкил 4.10 -да көстәрилмишдир. Бу һалда $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ базис векторлары олараг кубун бир тәпәсиндән гоншу кубларын мәркәзиндәки атомлара гәдәр олан векторлар көтүрүлүр. Һәмин векторлар арасындакы бучаг $109^0 28'$ -дир. Һәчмәмәркәзләшмиш кубик гәфәсин базис векторлары ашағыдакы кими ифадә едилир

$$\boldsymbol{a}_1 = \frac{a}{2}(\boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{y}_0 - \boldsymbol{z}_0), \quad \boldsymbol{a}_2 = \frac{a}{2}(\boldsymbol{y}_0 + \boldsymbol{z}_0 - \boldsymbol{x}_0),$$

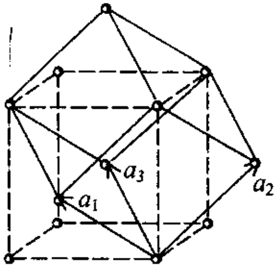
$$\boldsymbol{a}_3 = \frac{a}{2}(\boldsymbol{z}_0 + \boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{y}_0) \qquad (4.3)$$



шәкил 4.10

Бу базис векторлары үзәриндә гурулмуш садә базис өзәји шәкил 4.11-дә көстәрилмишдир. Бу өзәјин һәчми

$$\Omega = \boldsymbol{a}_1(\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3) = \frac{a^3}{2} \,. \qquad (4.4)$$



шәкил 4.11

(4.2) вә (4.4) ифадәләрини аларкән ортогонал ваһид векторларын вурулмасы гајдасындан истифадә едилмишдир.

Көрүндүјү кими, F вә I-типли кубик гәфәсләрдә садә базис өзәкләри куб шәклиндә дејилдир.

Кубик гәфәсләрин бә'зи характеристикалары чәдвәл 4.1-дә верилмишдир.

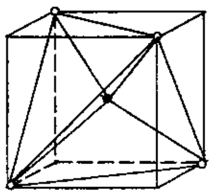
Ајдындыр ки, һәјатда ән чох истифадә олунан маддәләр Браве гәфәсләриндә дејил, даһа мүрәккәб шәкилдә кристаллашырлар. Буна әјани мисал олараг Ge, Si, InSb вә башга $A^{III}B^{V}$ бирләшмәләридир. Бу маддәләр алмаз типли гәфәсдә кристаллашырлар. Алмаз типли гәфәсләрдә һәр бир атом бир дүзкүн тетраедрин мәркәзиндә јерләшир вә тетраедрин тәпәләриндә јерләшмиш дөрд атомла (Ge вә Si үчүн) әһатәләнмишдир. InSb кристалында һәр бир In атому дөрд Sb атому илә вә әксинә һәр бир Sb атому дөрд In атому илә әһатәләнмишдир (шәкил 4.12). Мәркәздәки атому тетраедрин тәпәләриндә јерләшмиш атомларла бирләшдирән хәтләр арасындакы бучаг $109^{0}28'$ -дир.

Ҹәдвәл 4.1.

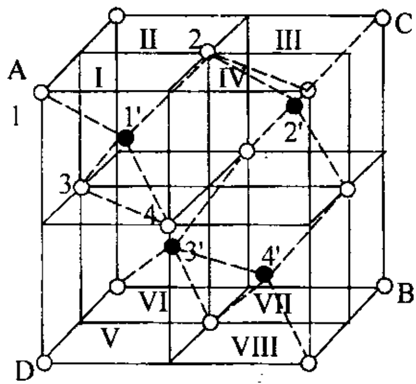
	P-типли кубик гәфәс	I-типли кубик гәфәс	F-типли кубик гәфәс
Кубик өзәјин һәчми	a^3	a^3	a^3
Кубик өзәкдә олан атомларын сајы	1	2	4
Садә базис өзәјин һәчми	a^3	$\frac{a^3}{2}$	$\frac{a^3}{4}$
Гәфәсдә ваһид һәчмә дүшән атомларын сајы	$\frac{1}{a^3}$	$\frac{2}{a^3}$	$\frac{4}{a^3}$
Биринҹи (ән јахын) гоншуларын сајы	6	8	12
Биринҹи јахын гоншулара гәдәр олан мәсафә	a	$\frac{\sqrt{3}}{2}a$	$\frac{a}{\sqrt{2}}$
Икинҹи јахын гоншуларын сајы	12	6	6
Икинҹи јахын гоншулара гәдәр олан мәсафә	$\sqrt{2}a$	a	a

Алмаз гәфәсини тәсвир етмәк үчүн бир-бири илә тамам ич-ичә кечмиш ики үзәмәркәзләшмиш куб тәсәввүр едәк (ики гат F-типли куб). Инди бу кублардан бирини дикәринин дахилиндән фәза диагоналы бојунҹа диагоналын узунлуғунун 1/4-и гәдәр сүрүшдүрәк. Бу һалда мејдана кәлән гәфәс алмаз гәфәси олачаг (шәкил 4.13).

Бу әмәлијјаты тәрсинә јеринә јетирсәк, јә'ни шәкил 4.13 -дә көстәрилән кубу АВ диагоналы бојунҹа онун 1/4 гәдәр сыхышдырсаг 1→1′, 2→2′, 3→3′, 4→4′ кечидләри олур вә F-типли куб әлдә едилир.



шәкил 4.12



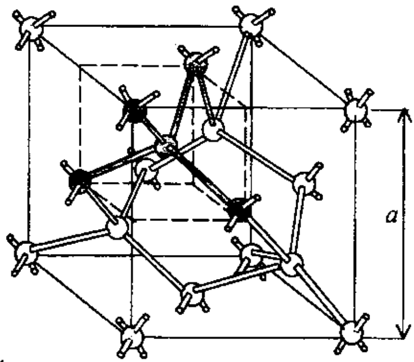
шәкил 4.13

Шәкил 4.13-дә көстәрилән үзәмәркәзләшмиш куб 18 атомдан ибарәтдир вә онун дахилинә 8 атом дүшүр. Бу үзәмәркәзләшмиш кубу 8 куба (I-VIII) бөлмәк мүмкүндүр, белә ки, бунларын дөрдүнүн мәркәзиндә бир атом јерләшмиш олсун (шәкил 4.13-дә гара атомлар). Алмаз гәфәси Браве гәфәси дејилдир вә бу гәфәсдә садә базис өзәкләри сечмәк мүмкүн дејилдир. Алмаз гурулушда бир базис өзәјә ән азы ики атом дүшүр. Шәкил 4.13-да InSb типли бирләшмәләрин гурулушу көстәрилмишдир. Бурада о - In атомларыны, • - Sb атомларыны көстәрир. Ge вә Si кристаллары үчүн алмаз гәфәсдә бүтүн атомлар ејнидир (шәкил 4.14). Бу вәзијјәтдә һәр бир атом дөрд дикәр атомла әһатә олунмушдур вә садә базис өзәкдә ән азы ики атом олур.

Көрүндүјү кими, гәфәсин әсасыны $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ базис векторлары үзәриндә гурулмуш паралелепипед, јә'ни елементар (базис) өзәк тәшкил едир. Бу өзәји $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ векторлары бојунча көчүрәрәк, макроскопик гәфәс әлдә едилир. Бу кристал гәфәсдәки һәр һансы бир атомун вәзијәти транслјасија вектору илә

$$\boldsymbol{a}_n = n_1\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_2 + n_3\boldsymbol{a}_3 \qquad (4.5)$$

тә'јин едилир. Бурада n_1, n_2, n_3 - там әдәдләрдир: $n_i = 0, \pm 1, \pm 2...$



шәкил 4.14

Базис векторлары $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ үзәриндә гурулмуш бу гәфәсә *кристаллик гәфәс* вә ја *дүз гәфәс* дејилир.

• **Тәрс гәфәс**. Бәрк ҹисимләр нәзәријјәсиндә тәрс гәфәс анлајышы әсас јерләрдән бирини тутур. Бу анлајышы нәзәријјәјә дахил етмәк үчүн кристаллик гәфәсләрдә транслјасија симметријасындан истифадә олунур. Бу симметријаја көрә гәфәсдә $\boldsymbol{r}$ вә $(\boldsymbol{r} + \boldsymbol{a}_n)$ нөгтәләриндә гәфәс потенсиалы V ејнидир, јә'ни бу нөгтәләр еквивалентдирләр:

$$V(\boldsymbol{r}) = V(\boldsymbol{r} + \boldsymbol{a}_n). \qquad (4.6)$$

Бурада $\boldsymbol{a}_n$ - дүз гәфәсин ихтијари векторудур. (4.6) шәрти гәфәсин идеал олмасынын ријази ифадәсидир. $V(\boldsymbol{r})$ - потенсиалы үчөлчүлү периодик функсија олдуғундан ону Фурје сырасына ајыра биләрик:

$$V(\boldsymbol{r}) = \sum_{\boldsymbol{b}} V_{\boldsymbol{b}} e^{i(\boldsymbol{br})} . \tag{4.7}$$

Бурада $V_{\boldsymbol{b}}$ -гәфәс потенсиалынын Фурје әмсалы, $\boldsymbol{b}$ - (*узунлуг*)$^{-1}$ өлчүсүнә малик олан вектордур. Бу вектору тапмаг үчүн (4.6) шәртиндән истифадә едәк:

$$V(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}_n) = \sum_{\boldsymbol{b}} V_{\boldsymbol{b}}\, e^{i\boldsymbol{b}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}_n)} = \sum_{\boldsymbol{b}} V_{\boldsymbol{b}} e^{i(\boldsymbol{br})} \cdot e^{i(\boldsymbol{ba}_n)} = V(\boldsymbol{r}) . \tag{4.8}$$

Бурадан көрүнүр ки, (4.6) шәртинин өдәнилмәси үчүн $e^{i(\boldsymbol{ba}_n)}=1$ олмалыдыр, јә'ни

$$(\boldsymbol{ba}_n)=n_1(\boldsymbol{ba}_1)+n_2(\boldsymbol{ba}_2)+n_3(\boldsymbol{ba}_3)=2\pi g . \tag{4.9}$$

Бурада $g = 0, \pm 1, \pm 2...$- там әдәдләрдир. (4.9) шәртинин өдәнмәси үчүн исә

$$(\boldsymbol{ba}_1) = 2\pi g_1; \quad (\boldsymbol{ba}_2) = 2\pi g_2; \quad (\boldsymbol{ba}_3) = 2\pi g_3 \tag{4.10}$$

олмалыдыр; бурада $g_i = 0, \pm 1, \pm 2...$ там әдәдләрдир.

Мә'лум олдуғу кими, һәр һансы бир ихтијари вектор мә'лум үч векторун чәми кими көстәриләбиләр. Она көрә дә $\boldsymbol{b}$ вектору үч мә'лум $(\boldsymbol{a}_1\times\boldsymbol{a}_2), (\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3), (\boldsymbol{a}_3\times\boldsymbol{a}_1)$ векторлар бојунча компонентләрә ајыра биләрик:

$$\boldsymbol{b} = A(\boldsymbol{a}_1\times\boldsymbol{a}_2) + B(\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3) + C(\boldsymbol{a}_3\times\boldsymbol{a}_1) . \tag{4.11}$$

Бурада A, B, C әмсаллары тапылмалы олан скаљар кәмијјәтләрдир. Бу үч кәмијјәти (4.10) шәртләриндән истифадә едәрәк тапа биләрик. Бунун үчүн (4.11) бәрабәрлијинин һәр ики тәрәфини нөвбә илә $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2$ вә $\boldsymbol{a}_3$ векторларына скаљар оларaг вурсаг,

$$(\boldsymbol{b}\boldsymbol{a}_1) = B\boldsymbol{a}_1(\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3) = 2\pi g_1,$$

$$(\boldsymbol{b}\boldsymbol{a}_2) = C\boldsymbol{a}_2(\boldsymbol{a}_3\times\boldsymbol{a}_1) = 2\pi g_2, \qquad (4.12)$$

$$(\boldsymbol{b}\boldsymbol{a}_3) = A\boldsymbol{a}_3(\boldsymbol{a}_1\times\boldsymbol{a}_2) = 2\pi g_3$$

алырыг. Нәтичәдә

$$\mathrm{A} = \frac{2\pi}{\Omega_0}\mathrm{g}_3; \quad \mathrm{B} = \frac{2\pi}{\Omega_0}\mathrm{g}_1; \quad \mathrm{C} = \frac{2\pi}{\Omega_0}\mathrm{g}_2 \qquad (4.13)$$

олар, һарадакы $\Omega_0 = \boldsymbol{a}_1(\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3)$ - елементар өзәјин һәчмидир. A, B, C үчүн алынмыш ифадәләри (4.11) дә јеринә јазсаг,

$$\boldsymbol{b}_g \equiv \boldsymbol{b} = g_1\boldsymbol{b}_1 + g_2\boldsymbol{b}_2 + g_3\boldsymbol{b}_3 \qquad (4.14)$$

алынар. Бурада

$$\boldsymbol{b}_1 = 2\pi\frac{(\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3)}{\Omega_0}, \qquad \boldsymbol{b}_2 = 2\pi\frac{(\boldsymbol{a}_3\times\boldsymbol{a}_1)}{\Omega_0},$$

$$\boldsymbol{b}_3 = 2\pi\frac{(\boldsymbol{a}_1\times\boldsymbol{a}_2)}{\Omega_0}. \qquad (4.15)$$

$\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2, \boldsymbol{b}_3$ векторлары үзәриндә гурулан паралелепипедин "һәчми" (*узунлуг*)$^{-3}$ өлчүсүндәдир. Бу паралелепипеди $\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2, \boldsymbol{b}_3$ векторлары бојунча транслјасија етсәк, бир гәфәс әлдә едәрик. Бу гәфәс *тәрс гәфәс* адланыр. Бурада $\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2, \boldsymbol{b}_3$ тәрс гәфәсин базис векторлары; бу векторлар үзәриндә гурулан паралелепипед исә тәрс гәфәсин базис өзәјидир. $\boldsymbol{b}_g$ вектору тәрс гәфәсдә ихтијари бир дүјүнүнүн координатларыны тә'јин едән тәрс гәфәс векторудур.

(4.15) бәрабәрлиjи илә тә'jин олунан тәрс гәфәс базис векторлары

$$\boldsymbol{a}_i\boldsymbol{b}_k = 2\pi\delta_{ik} = \begin{cases} 0, & i \neq k \\ 2\pi, & i = k \end{cases} \qquad (4.16)$$

хассәләринә маликдир. Дикәр тәрәфдән

$$\boldsymbol{b}_g\boldsymbol{a}_n = 2\pi(n_1 g_1 + n_2 g_2 + n_3 g_3) = 2\pi\times \text{там әдәд} \qquad (4.17)$$

олдуғу аjдындыр.

(4.15) бәрабәрлиjиндән көрүндүjү кими, $\boldsymbol{b}_1$ вектору $\boldsymbol{a}_2$ вә $\boldsymbol{a}_3$ векторларына, $\boldsymbol{b}_2$ вектору $\boldsymbol{a}_3$ вә $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{b}_3$ исә $\boldsymbol{a}_1$ вә $\boldsymbol{a}_2$ векторларына перпендикулjардыр. Әкәр дүз гәфәсин елементар өзәjи дүзкүн паралелепипеддирсә, $\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2, \boldsymbol{b}_3$ тәрс гәфәс базис векторлары уjғун олараг $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ дүз гәфәс базис векторларына паралелдир вә тәрс гәфәс векторларынын өлчүсү $|b_i| = 2\pi / a_i$ олур.

P- типли/садә кубик гәфәсә гаршы гоjулан тәрс гәфәсин елементар өзәjи садә кубдур. Бу һалда тәрс гәфәсин базис векторлары ашағыдакы кимидир:

$$\boldsymbol{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\boldsymbol{x}_0, \quad \boldsymbol{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\boldsymbol{y}_0, \quad \boldsymbol{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\boldsymbol{z}_0. \qquad (4.18)$$

Тәрс гәфәсин базис өзәjинин һәчми:

$$\boldsymbol{b}_1(\boldsymbol{b}_2\times\boldsymbol{b}_3) = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3 = \frac{(2\pi)^3}{\Omega_0}. \qquad (4.19)$$

Инди F- типли дүз гәфәсин тәрс гәфәсинин I- типли вә I- типли дүз гәфәсин тәрс гәфәсинин исә F- типли олдуғуну көстәрәк. Бунун үчүн тәрс гәфәсләрин базис векторларыны тапаг. F- типли кубик гәфәсә гаршы гојулан тәрс гәфәсин базис векторларыны (4.1), (4.2) вә (4.15) бәрабәрликләриндән истифадә едәрәк ашағыдакы кими аларыг:

$$\boldsymbol{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(\boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{y}_0 - \boldsymbol{z}_0), \quad \boldsymbol{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\boldsymbol{y}_0 + \boldsymbol{z}_0 - \boldsymbol{x}_0),$$
$$\boldsymbol{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\boldsymbol{z}_0 + \boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{y}_0). \tag{4.20}$$

I- типли кубик гәфәсә ујғун тәрс гәфәсин базис векторлары (4.3), (4.4) вә (4.15) бәрәбәрликләриндән истифадә едәрәк ашағыдакы кими аларыг:

$$\boldsymbol{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(\boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{y}_0), \quad \boldsymbol{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\boldsymbol{y}_0 + \boldsymbol{z}_0),$$
$$\boldsymbol{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\boldsymbol{z}_0 + \boldsymbol{x}_0). \tag{4.21}$$

Инди (4.20) илә (4.3) вә (4.21) илә (4.1)-и мүгајисә едәк. F- типли гәфәсин тәрс гәфәсинин базис векторлары I- типли дүз гәфәсин базис векторлары истигамәтиндәдир. I- типли гәфәсин тәрс гәфәс векторлары исә F- типли дүз гәфәсин базис векторлары истигамәтиндәдир. Беләликлә, јухарыда дедијимизи исбат етдик.

(4.20) вә (4.21) бәрабәрликләри илә тапылан базис векторларындан истифадә едәрәк, F- вә I -типли гурулушлара гаршы гојулан тәрс гәфәсләрин елементар өзәјинин һәчмини асанча һесабламаг олар:

$$\boldsymbol{b}_1(\boldsymbol{b}_2 \times \boldsymbol{b}_3) = \frac{(2\pi)^3}{\Omega_0}. \tag{4.22}$$

Бурада Ω_0- дүз гәфәсин елементар өзәјинин һәчмидир: Р- типли куб үчүн $\Omega_0 = a^3$, F- типли куб үчүн $\Omega_0 = a^3/4$, I- типли куб үчүн исә $\Omega_0 = a^3/2$ -дир.

(4.22) бәрабәрлији илә верилән ифадә садәчә кубик системләр үчүн дејил, бүтүн кристаллик системләр үчүн доғрудур, лакин үмуми һалда дүз гәфәсдә базис өзәјинин һәчми $\Omega_0 = \boldsymbol{a}_1(\boldsymbol{a}_2\times \boldsymbol{a}_3)$-дир.

Һәгигәтән дә, үмуми һалда тәрс гәфәсин елементар өзәјинин һәчми (4.15) бәрабәрлијиндән

$$\boldsymbol{b}_1(\boldsymbol{b}_2\times \boldsymbol{b}_3) = \frac{(2\pi)^3}{\Omega_0^3}(\boldsymbol{a}_2\times \boldsymbol{a}_3)\left[(\boldsymbol{a}_3\times \boldsymbol{a}_1)\times(\boldsymbol{a}_1\times \boldsymbol{a}_2)\right]=$$

$$= \frac{(2\pi)^3}{\Omega_0^3}(\boldsymbol{a}_2\times \boldsymbol{a}_3)\left\{\left[\boldsymbol{a}_3(\boldsymbol{a}_1\times \boldsymbol{a}_2)\right]\boldsymbol{a}_1 - \left[\boldsymbol{a}_1(\boldsymbol{a}_1\times \boldsymbol{a}_2)\right]\boldsymbol{a}_3\right\}= \qquad (4.22a)$$

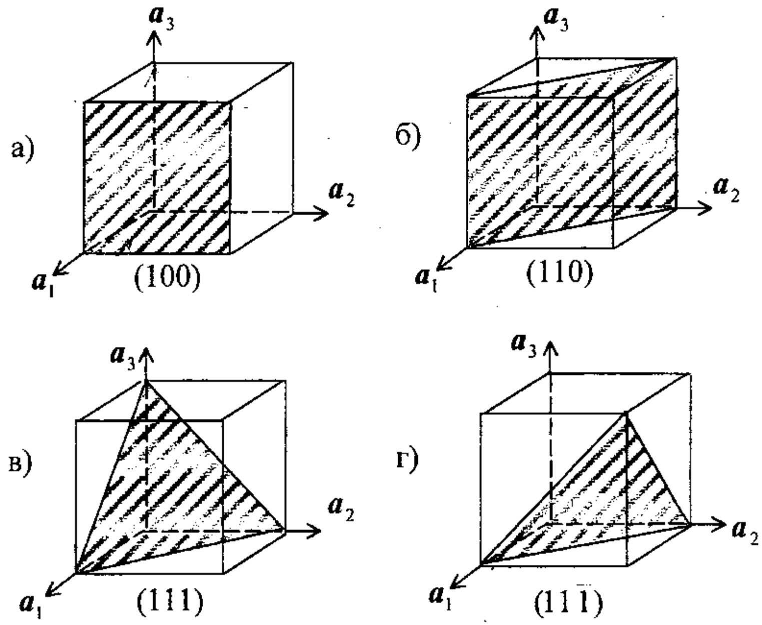
$$= \frac{(2\pi)^3}{\Omega_0^3}\left[(\boldsymbol{a}_2\times \boldsymbol{a}_3)\boldsymbol{a}_1\right]\left[\boldsymbol{a}_3(\boldsymbol{a}_1\times \boldsymbol{a}_2)\right] = \frac{(2\pi)^3}{\Omega_0^3}\cdot\Omega_0^2 = \frac{(2\pi)^3}{\Omega_0}$$

алыныр. Демәли, үмуми һалда тәрс гәфәсин елементар өзәјин һәчми (4.22) дүстуру илә тә'јин олунур.

Тәрс гәфәс анлајышы вә тәрс гәфәс векторлары, рентген шүаларынын кристал гәфәсләрдән сәпилмәсиндә вә квазизәррәчикләрин квазиимпулсларынын тә'јин олунмасында истифадә едилир.

Миллер индексләри. Кристаллографијада симметрија мүстәвиләринин вәзијјәтини вә охларын истигамәтләрини көстәрмәк үчүн Миллер индексләриндән истифадә едилир.

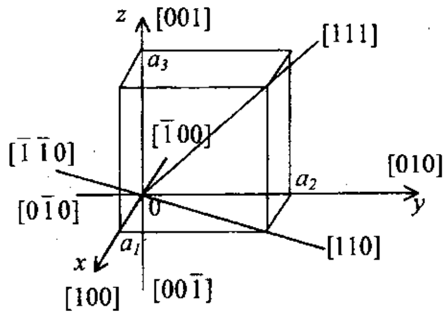
Кристал гәфәсин дүјүнләриндән кечән мүстәви тәсәввүр едәк. Кубик гәфәс үчүн белә мүстәвиләрдән дөрдү



шәкил 4.15

шәкил 4.15-дә көстәрилмишдир. Бу мүстәвиләрин вәзиј-јәтини тә'јин едән Миллер индексләри (hlk) ашағыдакы кими тапылыр: тутаг ки, бахдығымыз мүстәви координат башланғычындан S_1a_1, S_2a_2 вә S_3a_3 мәсафәсиндә јерлә-шән атомлардан кечир, бурада S_1, S_2, S_3-там әдәдләрдир. Бу әдәдләрдән дүзәлдилмиш $\frac{1}{S_1}:\frac{1}{S_2}:\frac{1}{S_3}$ нисбәтләрини ән кичик там әдәдләрин нисбәтләри кими, јә'ни $\frac{1}{S_1}:\frac{1}{S_2}:\frac{1}{S_3}=h:k:l$ кими ифадә етсәк (hlk) әдәләри бахдығымыз мүстәвинин вәзијәтини тә'јин едән *Миллер* *индексләри* адланыр. Шәкил 4.15, а-да штрихләнмиш $\boldsymbol{a}_1$ охуна перпендикулјар мүстәвинин Миллер индекси $\frac{1}{S_1}:\frac{1}{S_2}:\frac{1}{S_3}=\frac{1}{1}:\frac{1}{\infty}:\frac{1}{\infty}=1:0:0$, јә'ни $(hkl)=(100)$ олар. Ујғун олараг 4.15, б, в, г мүстәвиләринин Миллер индексләри (100), (111), $(11\bar{1})$ кими ишарә едилир. Бурада $\bar{1}$ шәкил 4.15, г –дә көстәрилән мүстәви $\boldsymbol{a}_3$ охунун әкс истигамәтиндә a мәсафәсиндә кечдијини көстәрир. Ајдындыр ки, верилмиш (hkl) Миллер индексләри јалныз бир мүстәвини дејил, бир-биринә паралел мүстәвиләр аиләсини тә'јин едир. Физики олараг еквивалент мүстәвиләрин топлусу $\{hkl\}$ символу илә ишарә едилир. Мәсәлән, кубун алты үзү $\{100\}$ илә көстәрилир.

Кристалын дүјүнләриндән кечән охларын истигамәтләри $[u,\upsilon,w]$ символу илә ишарә едилир. Һардакы u,υ вә w әдәдләри ашағыдакы кими тә'јин едилир: тутаг ки, бахылан истигамәт үзрә јөнәлмиш векторун $\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\boldsymbol{a}_3$ охлары бојунча топланлары $n_1\boldsymbol{a}_1, n_2\boldsymbol{a}_2, n_3\boldsymbol{a}_3$-дүр. Бурада n_1,n_2,n_3 там әдәдләрдир. Бу әдәдләрдән дүзәлдилмиш $n_1:n_2:n_3$ нисбәт ән кичик u,υ,w там әдәдләрин нисбәти кими, јә'ни $n_1:n_2:n_3=u:\upsilon:w$ оларса, $[u\upsilon w]$ символу һәмин истигамәти көстәрир. Белә симметрик истигамәтләрдән бир нечәси шәкил 4.16-дә көстәрилмишдир. Мәсәлән, кубун OX истигамәтиндә тили $[100]$, кубун отурачағынын диагоналы $[110]$, кубун фәза диагоналы бојунча олан истигамәт $[111]$ символлары илә ишарә олунур. Бу истигамәтләрин әкси исә ујғун олараг $[\bar{1}00]$, $[\bar{1}\,\bar{1}0]$ вә $[\bar{1}\,\bar{1}\,\bar{1}]$ символлары илә көстәрилир.



шәкил 4.16

Кристалда физики еквивалент истигамәтләр топлусу $\langle u, \upsilon, w\rangle$ символу илә ишарә едилир. Белә ки, $\langle 100\rangle$ кубун тилләри бојунча 6 истигамәти, $\langle 110\rangle$ кубун үзләринин диагоналы бојунча 12, $\langle 111\rangle$ исә кубун 8 фәза диагоналы бојунча истигамәтләри көстәрир.. Кубик кристалларда $[u, \upsilon, w]$ истигамәти (u, υ, w) мүстәвисинә перпендикулјардыр.

Инди исә садә, лакин вачиб ~~ики~~ теореми исбат едәк.

Теорем 1. $g_1 : g_2 : g_3 = h : k : l$ *шәрти өдәнәрсә, тәрс гәфәс вектору* $\boldsymbol{b}_g = g_1\boldsymbol{b}_1 + g_2\boldsymbol{b}_2 + g_3\boldsymbol{b}_3$ *Миллер индексләри* (hkl) *олан мүстәвијә перпендикулјардыр.*

$\frac{\boldsymbol{a}_1}{h}, \frac{\boldsymbol{a}_2}{k}, \frac{\boldsymbol{a}_3}{l}$ векторларынын учлары (hkl) мүстәвиси үзәриндә олдуғуна көрә $\boldsymbol{a}_{12} = \left(\frac{\boldsymbol{a}_1}{h} - \frac{\boldsymbol{a}_2}{k}\right)$ вә $\boldsymbol{a}_{13} = \left(\frac{\boldsymbol{a}_1}{h} - \frac{\boldsymbol{a}_3}{l}\right)$ векторлары да (hkl) мүстәвиси үзәриндәдир. Теоремин шәртинә көрә $\boldsymbol{b}_{hkl} = h\boldsymbol{b}_1 + k\boldsymbol{b}_2 + l\boldsymbol{b}_3$ вектору $\boldsymbol{b}_g$ векторуна паралелдир. Одур ки, теореми исбат етмәк үчүн $\boldsymbol{b}_{hkl}$ векторунун (hkl) мүстәвисинә перпендикулјар олдуғуну көстәрмәк кифајәтдир. Бунун үчүн $(\boldsymbol{b}_{hkl} \cdot \boldsymbol{a}_{12})$ вә $(\boldsymbol{b}_{hkl} \cdot \boldsymbol{a}_{13})$ векторларынын скалјар һасилләри сыфыр олмалыдыр. Дүз вә тәрс гәфәсләрин базис векторларынын (4.16) хассәсиндән истифадә етсәк,

$$
\begin{aligned}
(\boldsymbol{b}_{hkl} \cdot \boldsymbol{a}_{12}) &= (h\boldsymbol{b}_1 + k\boldsymbol{b}_2 + l\boldsymbol{b}_3)\left(\frac{\boldsymbol{a}_1}{h} - \frac{\boldsymbol{a}_2}{k}\right) = 0 \\
(\boldsymbol{b}_{hkl} \cdot \boldsymbol{a}_{13}) &= (h\boldsymbol{b}_1 + k\boldsymbol{b}_2 + l\boldsymbol{b}_3)\left(\frac{\boldsymbol{a}_1}{h} - \frac{\boldsymbol{a}_3}{l}\right) = 0
\end{aligned}
\tag{4.23}
$$

олдуғуну көрәрик. Беләликлә, биринҹи теорем исбат олунду.

Теорем 2. (hkl) мүстәвиләр аиләсиндә ики гоншу мүстәви арасындакы мәсафә $2\pi / b_{hkl}$ -дир.

Јухарыда $\boldsymbol{b}_{hkl}$ векторунун (hkl) мүстәвисинә перпендикулјар олдуғуну көстәрдик. Буна көрә $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{b}_{hkl}/b_{hkl}$ ваһид вектор да (hkl) мүстәвисинә перпендикулјардыр. $\frac{\boldsymbol{a}_1}{h}$, $\frac{\boldsymbol{a}_2}{k}$, $\frac{\boldsymbol{a}_3}{l}$ векторларынын һәр бири гоншу мүстәвиләри бирләшдирдијиндән, бу векторларын һәр биринин $\boldsymbol{n}$ ваһид вектор истигамәтиндәки проjексиjасы мүстәвиләр арасындакы d_{hkl} мәсафәсини верир. Беләликлә, (4.16) ифадәсиндән истифадә едәрәк,

$$
d_{hkl} = \frac{\boldsymbol{a}_1}{h}\boldsymbol{n} = \frac{1}{h}\frac{1}{b_{hkl}}\boldsymbol{a}_1(h\boldsymbol{b}_1 + k\boldsymbol{b}_2 + l\boldsymbol{b}_3) = \frac{2\pi}{b_{hkl}} \tag{4.24}
$$

аларыг. Мисал олараг кубик кристалларда симметриіа мүстәвиләри арасындакы мәсафәләри һесаблаіаг. Кубик гәфәсләрдә (100) мүстәвиләри арасындакы мәсафә $d_{100}=2\pi/b_{100}$; $b_{100}=b_1=2\pi/a$ олдуғундан, $d_{100}=a$ олур. (110) мүстәвиләри арасындакы мәсафә $d_{110}=2\pi/b_{110}$; $b_{110}=(b^2+b^2)^{1/2}=2\pi\sqrt{2}/a$ олдуғундан, $d_{110}=a/\sqrt{2}$ олур. (111) мүстәвиләри арасындакы мәсафә $d_{11}=2\pi/b_{111}$; $b_{111}=(b^2+b^2+b^2)^{1/2}=2\pi\sqrt{3}/a$ олдуғундан $d_{111}=a/\sqrt{3}$ аларыг.

Рентген шүаларынын дифраксиіасы үчүн Лауе вә Брегг-Вулф шәрти. Рентген шүаларынын кристал гәфәсләрдән дифраксиіа шәртинин іазылмасында тәрс гәфәс векторларынын нечә истифадә олунмасына бахаг. Шәкил 4.17 -дә $\boldsymbol{a}$ векторуна перпендикуліар олан ики кристал мүстәвисиндән рентген шүаларынын гаіытмасы көстәрилмишдир. $\boldsymbol{k}$ дүшән, $\boldsymbol{k}'$ гаіыдан шүанын далға векторларыдыр.

Гаіыдан шүаларын бир-бирини күчләндирмәси үчүн $BO+OC$ іоллар фәрги далға узунлуғу λ-нын там мисилләринә бәрабәр олмалыдыр. Іоллар фәргинин $BO+OC=$ $=-\boldsymbol{a}_1\left(\frac{\boldsymbol{k}}{k}\right)+\boldsymbol{a}_1\left(\frac{\boldsymbol{k}'}{k'}\right)$ олдуғуну вә $k'=k$ олдуғуну нәзәрә алараг:

$$\boldsymbol{a}_1(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\frac{1}{k}=g_1\lambda \qquad (4.25)$$

мүәііән едилир. Бурада g_1-там әдәддир. $\boldsymbol{a}_2$ вә $\boldsymbol{a}_3$ истигамәтләри үчүн дә бу шәрти іазсаг,

$$\boldsymbol{a}_2(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\frac{1}{k}=g_2\lambda \qquad \boldsymbol{a}_3(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\frac{1}{k}=g_3\lambda \qquad (4.26)$$