

კრისფადოჟიჟიკის საჟუქვდეზი

მორე ჟეჟსეჟული გემოცემა

სეჟართელოს სსრ უმაღლესი და საშუალო სეჟეციალური
განათლების სამინისტროს მიერ დამტკიცებულია სანელმძღვა-
ნელოდ უმაღლესი სანსწაელებლების სტუდენტებისათვის

წიგნი წარმოადგენს კრისტალოფიზიკის სახელმძღვანელოს. მასში განხილულია კრისტალების ჩასახვისა და ზრდის საკითხები, მოცემულია ძირითადი ცნობები გეომეტრიული კრისტალოგრაფიიდან, კრისტალების სიმეტრიის თეორია, ანტისიმეტრიისა და მაგნიტური სიმეტრიის ჩვეულებები და მათი გამოყენება კრისტალოფიზიკაში. ტენზორების საშუალებით აღწერილია კრისტალების მიქანიკური, სითბური, ელექტრული, მაგნიტური და ოპტიკური თვისებები და ნაჩვენებია, თუ როგორ სახეს იღებენ ეს ტენზორები სხვადასხვა სიმეტრიის კრისტალებში. განხილულია კრისტალოქიმიის ელემენტები, ბმების სხვადასხვა ტიპი კრისტალურ მესერში და შესაბამისი კრისტალური სტრუქტურები.

წიგნი ძირითადად განკუთვნილია პოლიტექნიკური ინსტიტუტის საინჟინრო-ფიზიკური ფაკულტეტისა და აგრეთვე ქიმიური, მეტალურგიული და გეოლოგიური ფაკულტეტების სტუდენტებისათვის; იგი შეიძლება გამოიყენონ თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის ფიზიკის ფაკულტეტის მყარი სხეულების ფიზიკის, დაბალი ტემპერატურების ფიზიკისა და რადიოფიზიკის სპეციალობის სტუდენტებმაც.

რ ე ც ე ნ ე ნ ტ ე ბ ი: ფიზიკა-მათემატიკის მეცნიერებათა დოქტორი, პროფესორი ნ. კეკელიძე
ფიზიკა-მათემატიკის მეცნიერებათა კანდიდატი, დოცენტი შ. ბოჭორიშვილი.

მეორე ბამოცემისათვის

„კრისტალოფიზიკის საფუძვლების“ მეორე გამოცემაში შეტანილია რიგი მცირე დამატებებისა. ასე, მაგალითად, I თავის § 5-ში, რომელიც ეძღვნება ჭგუფთა თეორიის ელემენტების გადმოცემას, დამატებულია საკითხი დაყვანადი და დაუყვანი წარმოდგენების შესახებ, განხილული კრისტალოგრაფიული ჭგუფების მაგალითზე.

ყველაზე მნიშვნელოვანი დამატება, ჩვენი აზრით, გაკეთებულია III თავის ბოლოს, რომელიც მთავრდებოდა შებრუნებული მესრის შემოდებით და მისი გეომეტრიული თვისებების განხილვით. ახლა აქ დაემატა მთელი პარაგრაფი მიძღვნილი შებრუნებული მესრის გამოყენებისადმი რენტგენის სხივების დიფრაქციის აღწერისათვის.

იმისათვის, რომ გაეადვილოთ წერტილოვანი ჭგუფების ყველა ელემენტის პოვნა და მათი მატრიცული წარმოდგენა, დამატებულია 4.3 ცხრილი, რომელიც შეიცავს ჭგუფების გენერატორებს მატრიცული ფორმით.

დაბოლოს, VI თავში ლითონური ბმის განხილვა მთავრდებოდა მყარი ხსნარების სტრუქტურის და თვისებების აღწერით. ახლა აქ დამატებულია შუალედური ფაზების და მათი თვისებების აღწერა.

დანარჩენი საკითხები დატოვებულია უცვლელად.

ა ბ ტ ო რ ი ს ა ბ ა ნ

მყარი ტანის ფიზიკა და, კერძოდ, კრისტალოფიზიკა ფიზიკის იმ დარგს წარმოადგენს, რომელიც მჭიდროდ არის დაკავშირებული თანამედროვე ტექნიკასთან. კრისტალოფიზიკის სწრაფმა განვითარებამ უკანასკნელი ორი-სამი ათეული წლის მანძილზე ფაქტიურად გადატრიალება მოახდინა ტექნიკის მთელ რიგ დარგებში და ხელი შეუწყო სრულიად ახალი მიმართულებების შექმნას. ნახევარგამტარი ხელსაწყოთმშენებლობა, მიკროელექტრონიკა, კვანტური ელექტრონიკა, ლაზერული ტექნიკა, მასალათმცოდნეობა, მაგნიტური მასალების შექმნა და მრავალი სხვა წარმოადგენენ მეცნიერებისა და ტექნიკის იმ სრულიად ახალ დარგებს, რომლებიც განვითარდნენ კრისტალოფიზიკის მიღწევების საფუძველზე.

ცხადი გახდა, რომ მთელი რიგი ტექნიკური პრობლემების გადაწყვეტა შეუძლებელი იქნება, თუ ამ დარგებში მომუშავე ინჟინერ-ტექნიკოსები არ დაეუფლებიან თანამედროვე ექსპერიმენტული და თეორიული ფიზიკის საფუძვლებს. ახალი ტექნიკური დარგები მოითხოვენ ახალი ტიპის ინჟინერების, ინჟინერ-ფიზიკოსების მომზადებას. ამიტომ ბუნებრივია ის დიდი დაინტერესება, რომელიც წარმოიშვა მეცნიერების ამ დარგის მიმართ უმაღლეს ტექნიკურ სასწავლებლებში, სადაც კრისტალებისა და მათი თვისებების შესწავლა ახლა გათვალისწინებულია სასწავლო პროგრამებით, როგორც საინჟინერო-ფიზიკური ფაკულტეტის, ასევე ქიმიური, გეოლოგიური, მეტალურგიული და რადიოელექტრონიკის სპეციალობათა სტუდენტებისათვის. რა თქმა უნდა, ის აუცილებელი რჩება უნივერსიტეტის ფიზიკის ფაკულტეტის ისეთი სპეციალობის სტუდენტებისათვის, როგორიც არის მყარი ტანის ფიზიკა, დაბალი ტემპერატურების ფიზიკა და რადიოფიზიკა.

მიუხედავად ასეთი დიდი დაინტერესებისა, დღეისათვის ქართულ ენაზე თითქმის არ მოგვეპოვება სამეცნიერო ან სასწავლო ხასიათის ლიტერატურა კრისტალების აღნაგობისა და მათი ფიზიკური თვისებების შესახებ, თუ არ ჩავთვლით პოპოვის და შაფრანოვსკის გეომეტრიული კრისტალოგრაფიის საკმაოდ მოძველებულ და ელემენტარულ

კურსს და ბოკის კრისტალოქიმიას, რომელიც ძირითადად ეძღვნება ცნობილი კრისტალური სტრუქტურების კლასიფიკაციას და მათ კრისტალოქიმიურ განხილვას. თუ კლასიკურ კრისტალოგრაფიაში რუსულ ენაზე არსებობს ფუნდამენტური სახელმძღვანელოების საკმაოდ დიდი რაოდენობა და, მათ შორის, ამ ბოლო წლებში დიდი პოპულარობით სარგებლობს ბულგარულიდან თარგმნილი კოსტოვის კრისტალოგრაფიის კურსი, კრისტალოფიზიკაში ლიტერატურა საკმაოდ ღარიბია. აქ შეიძლება დავასახელოთ ინგლისურიდან თარგმნილი ნაის ცნობილი კურსი, რომელშიც არ განიხილება გეომეტრიული კრისტალოგრაფიისა და კრისტალების სიმეტრიის საკითხები და ახლახან (1975) გამოსული სიროტინის და შასკოლსკაიას მონოგრაფიული ხასიათის წიგნი კრისტალოფიზიკაში, რომელიც, თვით ავტორების აზრით, საკმაოდ რთულია საგნის პირველი გაცნობისათვის.

წინამდებარე წიგნი შეიქმნა იმ ლექციების საფუძველზე, რომლებსაც ავტორი რიგი წლების განმავლობაში უკითხავდა საინჟინრო-ფიზიკური ფაკულტეტის ლითონების ფიზიკის და ნახევარგამტარებისა და დიელექტრიკების ფიზიკის სპეციალობის სტუდენტებს. ამიტომ წიგნი ძირითადად სახელმძღვანელოს ხასიათს ატარებს და ეძღვნება კრისტალებისა და მათი ფიზიკური თვისებების აღწერას მაკროსკოპულ ასპექტში.

I თავი მათემატიკურ შესავალს წარმოადგენს. აქ განხილულია ისეთი საკითხები, რომლებსაც სტუდენტები საკმარისი მოცულობით არ გადიან მათემატიკის ზოგად კურსში. კერძოდ, ტენზორული აღრიცხვის დიდი მასალიდან აღებულია კრისტალოფიზიკისათვის საჭირო საკითხები და მოცემულია ჭკუფთა თეორიის ელემენტები. ეს თავი, უმთავრესად, განკუთვნილია არაფიზიკური სპეციალობის სტუდენტებისათვის.

II თავი ეხება კრისტალების წარმოშობის საკითხს. ადრინდელი და თანამედროვე თეორიების მოკლე განხილვის საფუძველზე ნაჩვენებია, თუ როგორ ვითარდებოდა ჩვენი წარმოდგენა კრისტალების ზრდის მექანიზმის შესახებ.

III თავი მიძღვნილია უკვე გაზრდილი კრისტალის აგებულების გეომეტრიისადმი. გეომეტრიული კრისტალოგრაფიიდან აქ განხილულია მხოლოდ ის საკითხები, რომლებიც აუცილებელია იცოდეს ფიზიკოსმა. კერძოდ, მოცემულია კრისტალური მესრის თეორია, დაწვრილებით არის ახსნილი კრისტალოგრაფიული სიმბოლოები, სტრუქტურული გეგმილები და შებრუნებული მესერი.

კრისტალების სიმეტრია მთელი წიგნის ძირითადი თემაა. ამიტომ კრისტალების ყველა ფიზიკური თვისების განხილვა ხდება მათი სიმეტრიასთან კავშირში. კრისტალების სიმეტრიის თეორია მოცემულია IV თავში. აქ მაკროსიმეტრიასთან ერთად განიხილება დისკონტინუუმის

სიმეტრია და სივრცობრივი ჯგუფები. ეს იმიტომ, რომ კრისტალოფიზიკის კურსი წინ უსწრებს რენტგენოსტრუქტურული ანალიზის კურსს, რომლის შეთვისებისათვის სტუდენტმა უნდა იქონიოს წარმოდგენა სივრცობრივ ჯგუფებზე.

მოცულობით მცირე V თავში განვითარებულია ზოგადი მოსაზრებები კრისტალების სიმეტრიის გავლენის შესახებ მათ ფიზიკურ თვისებებზე.

VI თავში განხილულია სხვადასხვა ტიპის ბმები კრისტალურ მესერში და კრისტალების სტრუქტურა. შეისწავლება კოვალენტური, იონური, ლითონური და მოლეკულური ბმები.

VII—XI თავები ეძღვნება კრისტალების კონკრეტული თვისებების შესწავლას წინა თავებში მოცემული ზოგადი თეორიის გამოყენებით. აქ განხილულია კრისტალების მექანიკური, სითბური, ელექტრული, მაგნიტური და ოპტიკური თვისებები. ეს თვისებები აღწერილია სხვადასხვა ტენზორების საშუალებით. ნაჩვენებია, თუ როგორ სახეს ღებულობენ ეს ტენზორები კრისტალების სიმეტრიის მიხედვით.

ავტორი მადლობას უძღვნის პროფ. გ. გორდაძეს წიგნის რეცენზირებისათვის, პროფ. ა. რუხაძეს და დოც. მ. ჯიბუტს, რომლებმაც წაიკითხეს ამ წიგნის ცალკეული თავები, რადიოქიმიური ლაბორატორიის უფროს მეცნ. თანამშრომელს ი. სტამატელს ცხრილებისა და ფორმულების დაწერილებით შემოწმებისათვის. ავტორი აგრეთვე მადლობას უხდის ლაბორატორიის თანამშრომლებს: თ. ძიგრაშვილს, თ. ჭრელაშვილს და დ. ჩარკვიანს, რომლებმაც დიდი მონდომებით შეასრულეს წიგნში მოყვანილი ყველა ნახაზი, და საინჟინრო-ფიზიკური ფაკულტეტის ყოფილ სტუდენტს არჩილ მათითაშვილს, რომელმაც მოგვაწოდა ლექციების შესანიშნავად გაფორმებული კონსპექტი.

წრფივი გარდაქმნები, ტენზორები, მატრიცები, ჯგუფები

კრისტალების ფიზიკის მრავალი პრობლემა არსებით კავშირშია მათემატიკური ანალიზის ზოგიერთ საკითხთან, რომლებსაც ჩვენ ამ თავში მოკლედ განვიხილავთ.

§ 1. წრფივი ორთოგონალური გარდაქმნები სამგანზომილებიან სივრცეში

ავიჩინოთ ევკლიდეის სამგანზომილებიან სივრცეში რომელიმე მართკუთხა კოორდინატთა $OX_1X_2X_3$ სისტემა. $\vec{i}_1, \vec{i}_2, \vec{i}_3$ იყოს მისი ბაზისის ერთეულოვანი ვექტორები, ე.ი. OX_1, OX_2, OX_3 ღერძების მგეზავები. ვუწოდოთ მათ ძირითადი ან გამოსავალი ბაზისი. მაშინ ამ სისტემაში ნებისმიერი M წერტილი განისაზღვრება მისი x_1, x_2, x_3 კოორდინატებით.

გავავლოთ კოორდინატთა სათავეზე სხვა, აგრეთვე მართკუთხა, OX'_1, OX'_2, OX'_3 ღერძები, რომელთა მგეზავებიც იყოს $\vec{i}'_1, \vec{i}'_2, \vec{i}'_3$ ვუწოდოთ ამ სისტემას კოორდინატთა ახალი სისტემა. აღვნიშნოთ ახალი OX'_1 ღერძის მიერ ძველ ღერძებთან შედგენილი კუთხეების კოსინუსები (OX'_1 ღერძის მიმართულების კოსინუსები), შესაბამისად, a_{11}, a_{12}, a_{13} . ცხადია, a_{11}, a_{12}, a_{13} არის \vec{i}'_1 ვექტორის კოორდინატები ძველ სისტემაში; ასევე, a_{21}, a_{22}, a_{23} იქნება OX'_2 ღერძის მიმართულების კოსინუსები, ე.ი. \vec{i}'_2 ვექტორის კოორდინატები ძველ სისტემაში, ხოლო $a_{31}, a_{32}, a_{33} — OX'_3$ ღერძის მიმართულების კოსინუსები. სასურველია, ახალი ღერძების მიმართულების კოსინუსები მოვათავსოთ შემდეგ ცხრილში.

(1.1) ცხრილიდან უშუალოდ ჩანს, რომ a_{11}, a_{21}, a_{31} იქნება OX_1 ღერძის მიმართულების კოსინუსები ახალი ღერძების მიმართ, ან, რაც იგივეა, \vec{i}_1 ვექტორის კოორდინატები ახალ სისტემაში; ასევე, a_{12}, a_{22}, a_{32} არის \vec{i}_2 ვექტორის კოორდინატები, ხოლო $a_{13}, a_{23}, a_{33} — \vec{i}_3$ ვექტორის კოორდინატები ახალი სისტემის მიმართ.

ც ხ რ ი ლ ი 1.1

	x ₁	x ₂	x ₃
x' ₁	a ₁₁	a ₁₂	a ₁₃
x' ₂	a ₂₁	a ₂₂	a ₂₃
x' ₃	a ₃₁	a ₃₂	a ₃₃

როგორც ცნობილია, წერტილის ახალი კოორდინატები ძველი კოორდინატების საშუალებით გამოისახება შემდეგი წრფივი დამოკიდებულებით (კოორდინატთა გარდაქმნა);

$$\begin{aligned}x_1' &= a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3; \\x_2' &= a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3; \\x_3' &= a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3.\end{aligned}\quad (1.1)$$

ეს დამოკიდებულება მოკლედ შეიძლება ასე ჩაიწეროს

$$x_i' = \sum_{j=1}^3 a_{ij}x_j \quad (i = 1, 2, 3),$$

ან კიდევ, უფრო მოკლედ, როდესაც ჩამის ნიშანი არ იხმარება, ეს იგი შეიძლება ვიგულისხმოთ იმ ინდექსის მიმართ, რომელიც გამოსახულებაში მეორდება ორჯერ.

$$x_i' = a_{ij}x_j \quad (i, j = 1, 2, 3). \quad (1.2)$$

პირიქით, წერტილის ძველი კოორდინატები ახალი კოორდინატების საშუალებით ასე გამოისახება:

$$\begin{aligned}x_1 &= a_{11}x_1' + a_{21}x_2' + a_{31}x_3'; \\x_2 &= a_{12}x_1' + a_{22}x_2' + a_{32}x_3'; \\x_3 &= a_{13}x_1' + a_{23}x_2' + a_{33}x_3',\end{aligned}$$

ან, მოკლედ

$$x_i = a_{ji}x_j' \quad (i, j = 1, 2, 3). \quad (1.3)$$

მგეზავთა ნამრავლის თვისების თანახმად შეიძლება დავწეროთ.

$$\vec{i}_i' \cdot \vec{i}_j' = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{როდესაც } i=j; \\ 0, & \text{როდესაც } i \neq j. \end{cases}$$

ამიტომ მიმართულებების ცხრა a_{ij} კოსინუსს შორის არსებობს შემდეგი ექვსი დამოკიდებულება:

$$\begin{aligned}a_{11}^2 + a_{12}^2 + a_{13}^2 &= 1; \\a_{21}^2 + a_{22}^2 + a_{23}^2 &= 1; \\a_{31}^2 + a_{32}^2 + a_{33}^2 &= 1;\end{aligned}\quad (1.4)$$

$$\begin{aligned}a_{21}a_{31} + a_{22}a_{32} + a_{23}a_{33} &= 0; \\a_{31}a_{11} + a_{32}a_{12} + a_{33}a_{13} &= 0; \\a_{11}a_{21} + a_{12}a_{22} + a_{13}a_{23} &= 0.\end{aligned}\quad (1.5)$$

1) შედეგად კოეფიციენტებს შორის დამოუკიდებელი რჩება მხოლოდ ამი. შემოკლებულ აღნიშვნებში (1.4) და (1.5) ტოლობები ასე ება:

$$a_{ih}a_{jh} = \delta_{ij}, \text{ სადაც } \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{როდესაც } i=j; \\ 0, & \text{როდესაც } i \neq j \end{cases} \quad (1.6)$$

(1.5) დამოკიდებულებათა გარდა, ცხადია, გვექნება აგრეთვე დამოკიდებულებები:

$$a_{hi}a_{hj} = \delta_{ij}; \quad (i, j=1,2,3). \quad (1.7)$$

a_{ij} კოეფიციენტებისაგან შედგენილ მატრიცას

$$(a_{ij}) = M = \begin{pmatrix} a_{11}a_{12}a_{13} \\ a_{21}a_{22}a_{23} \\ a_{31}a_{32}a_{33} \end{pmatrix} \quad (1.8)$$

კოორდინატთა გარდაქმნის M მატრიცა ეწოდება. ის ორთოგონალურ მატრიცას წარმოადგენს. ასეთივე მატრიცის სახით შეიძლება წარმოვიდგინოთ δ_{ij} -ს მნიშვნელობები:

$$J = \begin{pmatrix} \delta_{11}\delta_{12}\delta_{13} \\ \delta_{21}\delta_{22}\delta_{23} \\ \delta_{31}\delta_{32}\delta_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.9)$$

J მატრიცას ერთეულოვანი მატრიცა ეწოდება.

მატრიცების გამოყენებით კოორდინატთა (1.3) გარდაქმნა მიიღებს შემდეგ სახეს

$$x' = Mx, \quad (1.10)$$

1.

$$x' = \begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \end{pmatrix} \text{ და } x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \text{ ვექტორ-სვეტებია.}$$

კოორდინატთა გარდაქმნის მატრიცის დებარდინანტი

განვიხილოთ კოორდინატთა გარდაქმნის M მატრიცის დეტერმინანტი, რომელიც $|a_{ij}|$ ან Δ სახით აღვნიშნოთ:

$$\Delta = \begin{vmatrix} a_{11}a_{12}a_{13} \\ a_{21}a_{22}a_{23} \\ a_{31}a_{32}a_{33} \end{vmatrix}$$

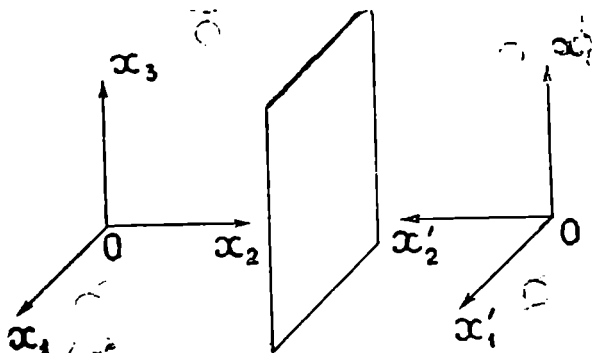
გამოვიყვანოთ ამ დეტერმინანტის ერთი მნიშვნელოვანი თვისება. ამისათვის განვიხილოთ $\vec{i}'_1, \vec{i}'_2, \vec{i}'_3$ ორტების შერეული $(\vec{i}'_1 \times \vec{i}'_2) \cdot \vec{i}'_3$

ნამრავლი. იგი მათზე აგებული პარალელებიპედის მოცულობის ტოლია:

$$(\vec{i}'_1 \times \vec{i}'_2) \cdot \vec{i}'_3 = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} \\ a_{12} & a_{22} & a_{32} \\ a_{13} & a_{23} & a_{33} \end{vmatrix}$$

და, მაშასადამე,

$$\det M = \Delta = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = \pm 1. \quad (1.11)$$



ნახ. 1. 1. მარცხენა და მარჯვენა კოორდინატა სისტემები.

ახლა საჭიროა დავაზუსტოთ როდის იქნება გარდაქმნის დეტერმინანტი $+1$ და როდის -1 . ამისათვის განვიხილოთ ორი სახის მართკუთხა კოორდინატა სისტემა: მარჯვენა და მარცხენა (ნახ. 1.1). ამ ორი კოორდინატა სისტემის ღერძები შეიძლება შეუთავსდნენ ერთმანეთს მხოლოდ ორი სიმეტრიული გარდაქმნის შედეგად: როდესაც ერთი სისტემა გადადის სარკულად სიმეტრიულ სისტემაში (ირეკლება სიმეტრიის სიბრტყეში), ან სისტემაში სრულდება ინვერსია კოორდინატა სათავის მიმართ. განვიხილოთ ეს შემთხვევები ცალ-ცალკე. წარმოვიდგინოთ, რომ კოორდინატა ღერძების გარდაქმნა ხდება სარკული არეკვლის შედეგად, ისე როგორც ეს ნაჩვენებია 1.1 ნახაზზე. ასეთ შემთხვევაში $x'_1 = x_1$; $x'_2 = -x_2$; $x'_3 = x_3$ და გარდაქმნის მატრიცას ექნება სახე

$$(a_{ij}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ზოლო გარდაქმნის დეტერმინანტი $\Delta = -1$.

მეორე შემთხვევაში ინვერსია წერტილში ცვლის ყველა კოორდინატის ნიშანს საწინააღმდეგო ნიშნით $x'_1 = -x_1$; $x'_2 = -x_2$; $x'_3 = -x_3$ და გარდაქმნის დეტერმინანტი ამ შემთხვევაშიც $\Delta = -1$. ამგვარად, ყო-

ველგვარი გარდაქმნისათვის, რომელიც ცვლის კოორდინატთა სისტემის სახეს, ე. ი. მართკუთხა მარჯვენა კოორდინატთა სისტემა გადაყავს მართკუთხა მარცხენა სისტემაში, ან, პირიქით, გარდაქმნის დეტერმინანტი მინუს ერთის ტოლია. თუ გარდაქმნა დაკავშირებულია მხოლოდ კოორდინატთა სისტემის ბრუნვასთან და არ ცვლის მის სახეს, მაშინ ერთი სისტემის ღერძები ბრუნვის საშუალებით შეიძლება შეუთავსდნენ მეორე სისტემის ღერძებს და გარდაქმნის დეტერმინანტი იქნება $\Delta = +1$.

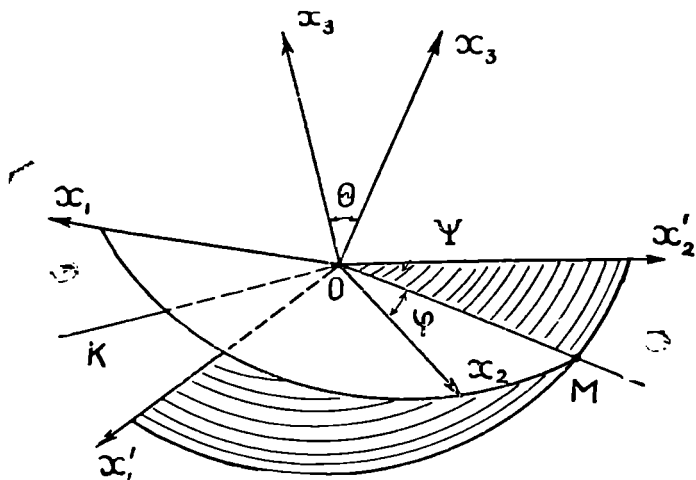
აქვე აღვნიშნოთ წრფივი ორთოგონალური (1.2) ან (1.3) გარდაქმნების კიდევ ერთი მნიშვნელოვანი თვისება. რადგან \vec{OM} რადიუსვექტორის კოორდინატები იგივეა, რაც M წერტილის კოორდინატები, (2) ან (3) ფორმულების მიხედვით გარდაიქმნებიან არა მარტო წერტილის კოორდინატები, არამედ ვექტორის კოორდინატებიც, და ვინაიდან $|\vec{OM}|^2 = \vec{OM} \cdot \vec{OM}$, ხოლო სკალარული ნამრავლი ინვარიანტულია კოორდინატთა სისტემის არჩევის მიმართ, ამიტომ

$$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = x_1'^2 + x_2'^2 + x_3'^2.$$

როგორც ვხედავთ, წრფივი ორთოგონალური გარდაქმნა არ ახდენს სივრცის დეფორმაციას; ამიტომ ყოველი სიმეტრიული ოპერაცია, რომელიც კრისტალს, როგორც მთლიანს, გადაიყვანს გეომეტრიულად იდენტურ მდგომარეობაში და შეუთავსებს თავის თავს, წარმოადგენს წრფივ ორთოგონალურ გარდაქმნას. ცხადია, სიმეტრიული ოპერაცია, რომელიც კრისტალების წმინდა ბრუნვასთან იქნება დაკავშირებული, ასეთი ტიპის გარდაქმნას მიეკუთვნება და მისთვის $\Delta = +1$. ამ თვალსაზრისით, გარდაქმნები, რომელთა დეტერმინანტი $\Delta = -1$, წარმოადგენენ სივრცის, როგორც მთლიანის, ბრუნვას და მის შემდგომ ინვერსიას კოორდინატთა სათავის მიმართ ან არეკვლას სიბრტყეში.

ვილერის კუთხეები

როგორც დავინახეთ, (1.2) ან (1.3) ორთოგონალური გარდაქმნის 9 კოეფიციენტიდან, ორთოგონალობის (1.4) და (1.5) ექვსი პირობის გამო, დამოუკიდებელი კოეფიციენტების რიცხვი 3-ის ტოლი ხდება. თუ საქმე გვაქვს სისტემის ბრუნვასთან კოორდინატთა სათავის ირგვლივ, მაშინ ასეთი სამი დამოუკიდებელი პარამეტრის როლში ირჩევენ სამ კუთხეს: Θ , ψ და φ , რომლებსაც ვილერის კუთხეები ეწოდება. ვილერის კუთხეების განსაზღვრისათვის ავირჩიოთ კოორდინატთა ორი სისტემა: ერთი $ox_1x_2x_3$ კოორდინატთა სისტემა, რომელიც უძრავია სივრ-



ნახ. 1.2. ვილერის კუთხეები.

ცეში, ხოლო მეორე $ox_1'x_2'x_3'$ სისტემა, დაკავშირებული O წერტილის ირგვლივ მბრუნავ სივრცესთან (ნახ.წ1.2). დაუშვათ, რომ ორივე ეს სისტემა მარჯვენაა და საწყის მომენტში ღერძები თანხვედებიან ერთმანეთს. სხეულის ნებისმიერი შემობრუნება O წერტილის ირგვლივ შესაძლებელია წარმოვიდგინოთ სამი თანამიმდევრული ბრუნვით სხვადასხვა ფიქსირებული ღერძების მიმართ. პირველი შემობრუნება იქნება x_3 ღერძის ირგვლივ x_1, x_2 სიბრტყეში φ კუთხით. ამ ბრუნვის შედეგად x_1 ღერძი დაიკავებს ox_1' მიმართულებას, ხოლო x_2 ღერძი შეუთავსდება გადაკვეთის OM ხაზს.

მეორე ბრუნვა მოხდება OM ღერძის ირგვლივ θ კუთხით. ამის შემდეგ x_2 ღერძი დაიკავებს x_2' ღერძის მდებარეობას, ხოლო x_1 ღერძი ok მდგომარეობიდან დაეშვება იმავე კუთხით ქვემოთ. ბოლოს მესამე ბრუნვას ადგილი ექნება ox_3' ღერძის ირგვლივ ψ კუთხით, რის შედეგად x_1 ღერძი დაიკავებს ox_1' მიმართულებას, ხოლო x_2 გადავა x_3' ღერძად.

თუ ცნობილია φ, θ, ψ ვილერის კუთხეები, შესაძლებელია გარდაქმნის ყველა a_{ij} კოეფიციენტის განსაზღვრა ამ კუთხეების საშუალებით. ეს განსაზღვრა ცნობილია ანალიზური გეომეტრიიდან. აქ მოგვყავს მხოლოდ საბოლოო შედეგი გარდაქმნის (1.1) ცხრილის შესაბამისად.

ცხრილი 1.2

	x_1	x_2	x_3
x_1'	$\cos \psi \cos \theta \cos \varphi - \sin \psi \sin \varphi$	$\cos \psi \cos \theta \sin \varphi + \sin \psi \cos \varphi$	$-\cos \psi \sin \theta$
x_2'	$-\sin \psi \cos \theta \cos \varphi - \cos \psi \sin \varphi$	$-\sin \psi \cos \theta \sin \varphi + \cos \psi \cos \varphi$	$\sin \psi \sin \theta$
x_3'	$\cos \varphi \sin \theta$	$\sin \varphi \sin \theta$	$\cos \theta$

განვიხილოთ ახლა (1.2) ტიპის წრფივი გარდაქმნა ნებისმიერი a_{ij} კოეფიციენტებით და ვიგულისხმობთ, რომ გარდაქმნის დეტერმინანტი განსხვავებულია ნულისაგან

$$\Delta = |a_{ij}| \neq 0.$$

ასეთ გარდაქმნებს საკუთრივი ეწოდება.

თუ გარდაქმნის კოეფიციენტები არ აკმაყოფილებენ ორთოგონალობის (7) პირობას, მაშინ სივრცის გარდაქმნის

$$x_i' = a_{ij}x_j \quad (i, j = 1, 2, 3)$$

შედეგად ვექტორის სიგრძის ინვარიანტობა ირღვევა და გარდაქმნა, ამ შემთხვევაში, დაკავშირებულია ამ სივრცის დეფორმაციასთან. რადგან გარდაქმნის დეტერმინანტი $\Delta \neq 0$, განტოლებათა (1.2) სისტემა შესაძლებელია ამოიხსნას x_1, x_2, x_3 ცვლადების მიმართ და მივიღებთ:

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{A_{11}}{\Delta} x_1' + \frac{A_{21}}{\Delta} x_2' + \frac{A_{31}}{\Delta} x_3'; \\ x_2 &= \frac{A_{12}}{\Delta} x_1' + \frac{A_{22}}{\Delta} x_2' + \frac{A_{32}}{\Delta} x_3'; \\ x_3 &= \frac{A_{13}}{\Delta} x_1' + \frac{A_{23}}{\Delta} x_2' + \frac{A_{33}}{\Delta} x_3', \end{aligned} \quad (1.12)$$

სადაც A_{ik} წარმოადგენს Δ დეტერმინანტის a_{ik} ელემენტის ალგებრულ დამატებას. (1.12) გარდაქმნას (1.2)-ის შებრუნებული გარდაქმნა ეწოდება. თუ პირდაპირი გარდაქმნის მატრიცა არის M , მაშინ შებრუნებული გარდაქმნისათვის მას აღნიშნავენ M^{-1} . მოკლედ, ეს ასე შეიძლება ჩაიწეროს

$$\vec{x}' = M\vec{x}; \quad \vec{x} = M^{-1}\vec{x}';$$

აქედან

$$MM^{-1} = M^{-1}M = J. \quad (1.13)$$

სადაც J ერთეულოვანი მატრიცაა.

ვთქვათ, გვაქვს ორი წრფივი თანამიმდევრული გარდაქმნა. პირველი გარდაქმნის შედეგად $x_1x_2x_3$ წერტილი გადადის $x_1'x_2'x_3'$ წერტილში

$$\vec{x}' = \vec{A}x \quad (x_i' = a_{ij}x_j), \quad (1.14)$$

ხოლო შემდეგ $x_1'x_2'x_3'$ წერტილი გადადის $x_1''x_2''x_3''$ წერტილში B მატრიცის საშუალებით

$$\vec{x}'' = \vec{B}\vec{x}' \quad (x_i'' = b_{ij}x_j'). \quad (1.15)$$

ასეთი თანამიმდევრული გადასვლა შეიძლება შეცვლილ იქნას ერთი C გარდაქმნით, რომელიც $x_1 x_2 x_3$ წერტილს $x_1'' x_2'' x_3''$ წერტილში გადაიყვანს

$$\vec{x}'' = C\vec{x} (x''_i = c_{ij}x_j). \quad (1.16)$$

საჭიროა მხოლოდ c_{ij} კოეფიციენტების განსაზღვრა a_{ij} და b_{ij} კოეფიციენტების საშუალებით; ამისათვის (15) გამოსახულებაში ჩავსვათ x_j' მნიშვნელობა (14)-დან, მაშინ

$$x_i'' = b_{ikh} a_{hj} x_j$$

(სადაც, ჩვენი შემოკლების მიხედვით, მარჯვენა მხარეში აჩამვის ინდექსებია k და j).

თუ შევადარებთ (16)-ს, მივიღებთ

$$c_{ij} = b_{ikh} a_{hj} \quad (i, j = 1, 2, 3). \quad (1.17)$$

(1.16) ფორმულით მოცემულ წრფივ გარდაქმნას (1.14) და (1.15) გარდაქმნების ნამრავლი (ან კომპოზიცია) ეწოდება. ამ გარდაქმნის კოეფიციენტები c_{ij} დაკავშირებულია A და B მატრიცების კოეფიციენტებთან (1.17) გამოსახულების საშუალებით; ასე რომ

$$C = BA \quad \text{და} \quad \vec{x}'' = BA\vec{x}. \quad (1.18)$$

წერტილის კოორდინატების ნამრავლის გარდაქმნა

წერტილის კოორდინატების გარდაქმნის კანონი განსაზღვრულია (1.2) გამოსახულებით

$$x_i' = a_{ij} x_j.$$

ავიღოთ წერტილის x_i' კოორდინატები კოორდინატთა ox_i' სისტემაში და განვიხილოთ ამ კოორდინატების $x_i' x_j'$ ნამრავლი. ამავე წერტილის კოორდინატები ox_i კოორდინატთა სისტემაში იქნება x_i . (1.3) განტოლებების გამოყენებით, $x_i' x_j'$ ნამრავლი შეიძლება გამოსახულ იქნას x_i კოორდინატების საშუალებით. მართლაც, თუ დავწერთ ამ განტოლებებს გამწვანებით და შევადგენთ ნამრავლს, მაგალითად, $x_1' x_2'$, დავინახავთ, რომ ორი ნებისმიერი კოორდინატის ნამრავლი გარდაიქმნება შემდეგი ფორმულის მიხედვით

$$x_i' x_j' = a_{ih} a_{je} x_h x_e. \quad (1.19)$$

ანალოგიურად, სამი კოორდინატის ნამრავლისათვის მივიღებთ

$$x_i' x_j' x_k' = a_{ie} a_{jm} a_{kn} x_e x_m x_n. \quad (1.20)$$

§ 2 სკალარები და ვექტორები

ბუნებაში ხშირად გვხვდება სიდიდეები, რომელნიც არ არიან დაკავშირებულნი რაიმე მიმართულებასთან. ასეთები არიან, მაგალითად, ტემპერატურა, ელექტრული ველის პოტენციალი, სიმკვრივე, მასა, ენერგია და მრავალი სხვა. ასეთ სიდიდეებს სკალარული სიდიდეები ეწოდება. სკალარული სიდიდე იზომება ერთი რიცხვით. მაგალითისათვის ავიღოთ ტემპერატურა, რომელიც შეიძლება გაიზომოს სივრცის ნებისმიერ P წერტილში და ყოველ წერტილში მას გარკვეული T მნიშვნელობა ექნება. მეორე მხრივ, თვით P წერტილი არჩეულ კოორდინატთა სისტემაში განისაზღვრება სამი რიცხვის (x_1, x_2, x_3) ერთობლიობით, რომელნიც მის კოორდინატებს შეადგენენ. სხვა კოორდინატთა სისტემაზე გადასვლა გამოიწვევს P წერტილის კოორდინატების შეცვლას, მაგრამ ტემპერატურის მნიშვნელობა ამ წერტილში არ შეიცვლება. ამიტომ შეიძლება დავასკვნათ, რომ ფიზიკური სიდიდე, რომელსაც ჩვენ ამ შემთხვევაში ვზომავთ, არ არის დამოკიდებული კოორდინატთა სისტემის არჩევისაგან, ან, როგორც ამბობენ, ინვარიანტულია კოორდინატთა სისტემის გარდაქმნის მიმართ. ეს დასკვნა შეიძლება ჩათვალოს სკალარული სიდიდის განსაზღვრად.

სკალარებისაგან განსხვავებით, გვხვდება ფიზიკური სიდიდეების მეორე ჯგუფი, რომელნიც დაკავშირებულნი არიან გარკვეულ მიმართულებასთან. ასეთი სიდიდეების მაგალითებს წარმოადგენენ — მექანიკური ძალა, ელექტრული ველის დაძაბულობა რომელიმე წერტილში, დიპოლის მომენტი, სიჩქარე, აჩქარება და მრავალი სხვა. ასეთ სიდიდეებს ვექტორები ეწოდება. იმისათვის, რომ განვსაზღვროთ წერტილის სიჩქარე, საჭიროა ვიცოდეთ მისი სიდიდე და მიმართულება. გეომეტრიულად ამ თვისებების გამოსახვა შეიძლება სიჩქარის შესაბამისი სიდიდის მქონე მონაკვეთით, რომელსაც გარკვეული მიმართულება ექნება აღნიშნული ისრის საშუალებით. ამგვარად, მონაკვეთი და ისარი შეადგენენ ნებისმიერი ვექტორის წარმოდგენის გეომეტრიულ ფორმას. გარდა მონაკვეთისა და ისრისა, ვექტორი შეიძლება წარმოვიდგინოთ თავისი კომპონენტების საშუალებით. ამისათვის ავირჩიოთ მართკუთხა კოორდინატთა სისტემა $Ox_1x_2x_3$ და ამ სისტემაში ვექტორი \vec{OM} , რომელიც გავლებულია კოორდინატთა სათავიდან M წერტილამდე. მაშინ ვექტორის პროექციები კოორდინატთა ღერძების გასწვრივ წარმოადგენენ მის კომპონენტებს. ნებისმიერი ვექტორი განსაზღვრული იქნება, თუ არჩეულ კოორდინატთა სისტემაში მოცემულია მისი სამი კომპონენტი, ან, სხვაგვარად, ყოველი ვექტორული სიდიდე განისაზღვრება სამი სიდიდის ერთობლიობით. თუ \vec{OM} ვექტორის კომპონენტებია M_1, M_2, M_3 , იგი ასე ჩაიწერება: $\vec{OM} (M_1, M_2, M_3)$ და

$$\vec{OM} = \vec{i}_1 M_1 + \vec{i}_2 M_2 + \vec{i}_3 M_3, \quad (1.21)$$

სადაც $\vec{i}_1, \vec{i}_2, \vec{i}_3$ კოორდინატთა ღერძების მგეზავებია. წარმოვიდგინოთ, რომ $ox_1x_2x_3$ კოორდინატთა სისტემაში მოცემული გვაქვს ვექტორი \vec{A} კომპონენტებით $(A_1A_2A_3)$ და გვინდა მოვანხოთ ამავე ვექტორის კომპონენტები (A_1', A_2', A_3') , ახალ $(x_1'x_2'x_3')$ კოორდინატთა სისტემაში (ნახ.1.3). ზემოთ უკვე აღვნიშნეთ, რომ ვექტორის კომპონენტების გარდაქმნა ხდება ისეთივე წესით, როგორც წერტილის კოორდინატების, ამიტომ:

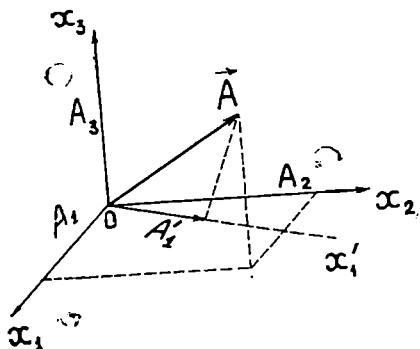
$$\begin{aligned} A_1' &= a_{11}A_1 + a_{12}A_2 + a_{13}A_3; \\ A_2' &= a_{21}A_1 + a_{22}A_2 + a_{23}A_3; \\ A_3' &= a_{31}A_1 + a_{32}A_2 + a_{33}A_3, \end{aligned} \quad (1.22)$$

ან მოკლე აღნიშვნებში

$$A_i' = a_{ij}A_j. \quad (1.23)$$

ჩვენ ვიხილავთ ერთ გარკვეულ \vec{A} ვექტორს, რომლის კომპონენტები $(A_1A_2A_3)$ და $(A_1'A_2'A_3')$ ორ სხვადასხვა $ox_1x_2x_3$ და $ox_1'x_2'x_3'$ კოორდინატთა სისტემებში დაკავშირებულია ერთიმეორესთან (1.22) გარდაქმნებით. ეს საშუალებას გვაძლევს შემოვიღოთ ვექტორის ახალი განსაზღვრა: თუ ყოველი მართკუთხა $ox_1x_2x_3$ კოორდინატთა სისტემისათვის არსებობს სამი სიდიდის ერთობლიობა (A_1, A_2, A_3) , რომელიც გარდაიქმნება ახალ $ox_1'x_2'x_3'$ კოორდინატთა სისტემაში სამი რიცხვის A_1', A_2', A_3' ერთობლიობად. (1.22) ფორმულების საშუალებით, მაშინ ეს სამი სიდიდე ქმნის \vec{A} სიდიდეს, რომელსაც ვექტორი ეწოდება, ხოლო A_1, A_2, A_3 ამ ვექტორის შემდგენელია.

განვიხილოთ მაგალითისათვის რომელიმე ფიზიკური სიდიდე, მაგალითად, ელექტრული ველის დაძაბულობა ველის მოცემულ წერტილში. ველის დაძაბულობა ვექტორული სიდიდეა და ხასიათდება სამი კომპო-



ნახ. 1.3. ვექტორის კომპონენტების გარდაქმნა.

ნენტით ღერძების გასწვრივ. ცხადია, დაძაბულობა ველის მოცემულ წერტილში არ იქნება [დამოკიდებული კოორდინატთა სისტემის არჩევინსაგან, თუმცა კომპონენტებს სხვადასხვა კოორდინატთა სისტემებში სხვადასხვა მნიშვნელობა ექნებათ. ეს მნიშვნელობები დაკავშირებული იქნებიან ერთიმეორესთან (1.23) გარდაქმნის საშუალებით და გამოხატავენ ერთ ფიზიკურ სიდიდეს—ველის დაძაბულობის ვექტორის მოცემულ წერტილში.

ჩვენ არ შევჩერდებით ვექტორების მთელ რიგ თვისებებზე, რომლებიც იგულისხმება ცნობილად ვექტორული ანალიზის კურსიდან. მხოლოდ აღვნიშნავთ რამდენიმე მათგანს, რომელნიც დაგვეჭირდება მომავალში კრისტალებთან დაკავშირებული რიგი თვისებების განხილვის დროს.

\vec{A} და \vec{B} ვექტორების სკალარული ნამრავლი წარმოადგენს სკალარულ სიდიდეს და გამოისახება როგორც

$$\vec{A} \cdot \vec{B} = AB \cos \theta = A_i B_i, \quad (1.24)$$

სადაც θ კუთხეა \vec{A} და \vec{B} ვექტორების დადებით მიმართულებათა შორის. ორი ვექტორის სკალარული ნამრავლი უდრის ნულს, როდესაც რომელიმე ვექტორი უდრის ნულს, ან $\vec{A}_1 \perp \vec{B}$. ორი ვექტორის სკალარული ნამრავლი კომუტატური სიდიდეა, ე. ი. $\vec{A} \cdot \vec{B} = \vec{B} \cdot \vec{A}$.

ვექტორის აბსოლუტური სიდიდე (ან მოდული) განისაზღვრება ფორმულით

$$A^2 = \vec{A} \cdot \vec{A} = A_i A_i = A_1^2 + A_2^2 + A_3^2. \quad (1.25)$$

ორი \vec{A} და \vec{B} ვექტორის ვექტორული ნამრავლი წარმოადგენს \vec{C} ვექტორს, რომელიც ამ ვექტორებზე გავლებული სიბრტყის მართობია.

\vec{C} ვექტორის სიდიდე განისაზღვრება ფორმულით

$$\vec{C} = \vec{A} \times \vec{B} = AB \sin \theta, \quad (1.26)$$

სადაც $\vec{n} \perp \vec{A}$ და \vec{B} ვექტორების მართობი ერთეულოვანი ვექტორია, მიმართული ისე, რომ \vec{A} , \vec{B} და \vec{n} შეადგენენ კოორდინატთა მარჯვენა სისტემას.

ვექტორული ნამრავლი არ არის კომუტატური სიდიდე, რადგან $\vec{A} \times \vec{B} = -\vec{B} \times \vec{A}$. $\vec{C} (C_1, C_2, C_3)$ ვექტორის კომპონენტები შეიძლება გამოისახონ $\vec{A} (A_1, A_2, A_3)$ და $\vec{B} (B_1, B_2, B_3)$ ვექტორების კომპონენტების საშუალებით:

$$C_1 = A_2 B_3 - A_3 B_2; \quad C_2 = A_3 B_1 - A_1 B_3; \quad C_3 = A_1 B_2 - A_2 B_1. \quad (1.27)$$

$\vec{A} \times \vec{B} = 0$, როდესაც $\vec{A} = 0$ ან $\vec{B} = 0$, ანდა $\vec{A} \parallel \vec{B}$.

ვექტორი, რომელიც ორი ვექტორის ვექტორულ ნამრავლს წარმოადგენს, განსხვავდება ჩვეულებრივი ვექტორებისაგან. გამოვარკვიოთ ამ განსხვავების შინაარსი.

როგორც აღინიშნა, ჩვეულებრივად ვექტორი დაკავშირებულია ისეთ ფიზიკურ თვისებასთან, რომელიც გარკვეული მიმართულებით ხასიათ-

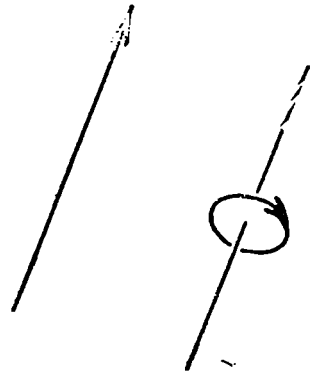
დება. მაგალითად, წერტილის სიჩქარე, აჩქარება, სხეულზე მოქმედი ძალა ასეთი ვექტორების მაგალითებს წარმოადგენენ. ამ ვექტორებს პოლარული ვექტორები ეწოდება. პოლარული ვექტორის გამომხატველია გარკვეული სიგრძის მონაკვეთი, რომელსაც მიმართულების მაჩვენებელი ისარი აქვს გაკეთებული (ნახ. 1.4). ასეთი ტიპის ვექტორები გარდაიქმნებიან (1.23) ფორმულების საშუალებით.

როცა ფიზიკური სიდიდე, რომელსაც პოლარული ვექტორი წარმოადგენს, ირეკლება ვექტორისადმი მართობ სიბრტყეში, ის იღებს საწინააღმდეგო მიმართულებას. ასე, მაგალითად, თუ წერტილის სიჩქარის ვექტორს ავრეკლავთ მისდამი მართობ სიბრტყეში, არეკლილ ვექტორს საწინააღმდეგო მიმართულება ექნება და წერტილიც საწინააღმდეგო მხარეს იმოძრაავებს.

დავაკავშიროთ პოლარული ვექტორი რაიმე კოორდინატთა სისტემასთან; მაშინ, იმის გამო, რომ ვექტორის კომპონენტები გარდაიქმნებიან როგორც წერტილის კოორდინატები, (1.23) ფორმულების საშუალებით, არეკლა ნებისმიერ კოორდინატულ სიბრტყეში გამოიწვევს ვექტორის კომპონენტების ნიშნების ისეთ ცვლილებას, როგორც ექნებათ თვით კოორდინატებს. მაგალითად, თუ არეკლა ხდება x_1 ო x_2 სიბრტყეში და გარდაქმნას აქვს $x'_1 = x_1$, $x'_2 = x_2$; $x'_3 = -x_3$ სახე, პოლარული $\vec{A} (a_1, a_2, a_3)$ ვექტორის კომპონენტებიც გარდაიქმნებიან $a'_1 = a_1$; $a'_2 = a_2$; $a'_3 = -a_3$ წესით. იგივე მდგომარეობას ექნება ადგილი კოორდინატთა ლერძების ინვერსიის შემთხვევაში სათავეს მიმართ, როდესაც $x'_1 = -x_1$; $x'_2 = -x_2$; $x'_3 = -x_3$. ასეთი გარდაქმნის შესაბამისად პოლარული ვექტორის ყველა შემდგენი ერთდროულად იღებს საწინააღმდეგო ნიშნებს და ამიტომ, როგორც არეკლის, ისე ინვერსიის შედეგად, პოლარული ვექტორის განლაგება ახალი ლერძების მიმართ ისეთივე იქნება, როგორც მას ჰქონდა ძველ კოორდინატთა სისტემაში. მეორე მხრივ, როგორც ზემოთ იყო ნაჩვენები, არეკლა სიბრტყეში და ინვერსია ისეთი სახის გარდაქმნებია, რომლებიც ცვლიან კოორდინატთა სისტემის სახეს. როგორც ჩანს, ყოველი გარდაქმნა, რომლის შედეგად მარჯვენა კოორდინატთა სისტემა გადადის მარცხენა სისტემაში, ან, პირიქით, პოლარულ ვექტორს ტოვებს უცვლელად.

ახლა ისევ დავუბრუნდეთ ორი პოლარული ვექტორის ვექტორულ ნამრავლს. როგორც დავინახეთ, ეს ნამრავლი კომუტატურ სიდიდეს არ წარმოადგენს და დამოკიდებულია აღებული ვექტორების მიმდევრობაზე, ან მათი შემოვლის მიმართულებაზე. სიდიდეებს, რომელნიც დაკავშირებული არიან შემოვლასთან და ამ შემოვლის მიმართულებასთან, პოლარული ვექტორებისაგან განსხვავებით, აქსიალურ ვექტორებს ან ფსევდოვექტორებს უწოდებენ. ასე, მაგალითად, მყარი სხეულის ბრუნ-

ვის კუთხური სიჩქარე აქსიალური ვექტორის მაგალითს წარმოადგენს, იმიტომ, რომ ის შეიძლება წარმოვიდგინოთ ბრუნვის ღერძის გასწვრივ მიმართული ვექტორით, რომლის მიმართულება დამოკიდებული იქნება ბრუნვის ღერძის ირგვლივ შემოვლის მიმართულებაზე. ნებისმიერი ფართობი, წარმოდგენილი ვექტორით, რომლის მიმართულება დაკავშირებულია ამ ფართობის შემოვლის მიმართულებასთან, აქსიალურ ვექტორს წარმოადგენს. ძალის მომენტი, მოძრაობის რაოდენობის მომენტი და მრავალი სხვა, — აქსიალური ვექტორებია.



ნახ. 1.4. პოლარული და აქსიალური ვექტორების სიმბოლოები.

ასეთი ვექტორების სიმბოლურ გამოსახულებას წარმოადგენს წრფის მონაკვეთი, რომლის ირგვლივ რგოლითა და ისრით ნაჩვენებია შემოვლის მიმართულება (ნახ. 1.4). თუ ორი პოლარული ვექტორის ვექტორულ ნამრავლს ავრეკლავთ ამ ვექტორებზე გავლებულ სიბრტყეში, ამით ვექტორები არ შეიცვლება და, მაშასადამე, უცვლელი დარჩება მათი ვექტორული ნამრავლიც. თუ სხეულის ბრუნვა რომელიმე ღერძის ირგვლივ არეკვლილი იქნება ღერძის მართობ სიბრტყეში, ბრუნვის მიმართულება არ შეიცვლება და უცვლელი დარჩება კუთხური სიჩქარის ვექტორიც. ჩვენ ვხედავთ, რომ სიბრტყეში არეკვლის დროს აქსიალური ვექტორი არ იცვლის თავის მიმართულებას. ასევე შეიძლება ნაჩვენები იყოს, რომ კოორდინატთა ღერძების ინვერსია არ იწვევს აქსიალური ვექტორის კომპონენტების შეცვლას. მაგრამ არეკვლა და ინვერსია იწვევს გადასვლას ერთი კოორდინატთა სისტემიდან მეორეზე, მაგალითად, მარჯვენა სისტემიდან მარცხენა სისტემაზე. აქსიალური ვექტორის კომპონენტები, როგორც დავინახეთ, ასეთი გარდაქმნის შედეგად რჩება უცვლელი. ამიტომ ახალ კოორდინატთა სისტემაში ვექტორის ასაგებად მოგვიხდება იგივე კომპონენტების გადაზომვა ახალ ღერძებზე. ამის შედეგად მიღებული ახალი აქსიალური ვექტორი იქნება იმავე სიდიდის, როგორც ძველი ვექტორი, მაგრამ მიმართული მის საწინააღმდეგოდ. საბოლოოდ შეიძლება დავასკვნათ, რომ, როდესაც ხდება გადასვლა ერთი სახის კოორდინატთა სისტემიდან მეორეზე, აქსიალური ვექტორი იცვლის თავის მიმართულებას საწინააღმდეგოდ მხარეს იმ დროს, როდესაც პოლარული ვექტორი უცვლელი რჩება.

თუ პოლარული ვექტორების გარდაქმნა ხდება (1.23) ფორმულე-
ბის საშუალებით, ანალოგიური კანონი შეიძლება მოინახოს აქსიალური
ვექტორების გარდაქმნისათვის. ამისათვის განვიხილოთ ორი პოლარუ-
ლი ვექტორის ვექტორული ნამრავლი. (1.27) ფორმულის თანახმად:

$$C_1 = A_2 B_3 - A_3 B_2; \quad C_2 = A_3 B_1 - A_1 B_3; \quad C_3 = A_1 B_2 - A_2 B_1.$$

ახალ კოორდინატთა სისტემაში \vec{A} და \vec{B} ვექტორების კომპონენტები იქ-
ნება (A_1', A_2', A_3') და (B_1', B_2', B_3') ; მაშინ $C_1' = A_2' B_3' - A_3' B_2'$ და
(1.23) ფორმულების გამოყენების შედეგად მივიღებთ $C_1' = a_{2i} a_{3j} (A_i B_j -$
 $A_j B_i)$ ან გაშლილი სახით $C_1' = (a_{22} a_{33} - a_{23} a_{32}) (A_2 B_3 - A_3 B_2) +$
 $+ (a_{23} a_{31} - a_{21} a_{33}) (A_3 B_1 - A_1 B_3) + (a_{21} a_{32} - a_{22} a_{31}) (A_1 B_2 - A_2 B_1)$.

ამ გამოსახულებაში კოეფიციენტები $(a_{22} a_{33} - a_{23} a_{32})$ და ა. შ.
წარმოადგენენ $|a_{ij}|$ დეტერმინანტის a_{11} , a_{12} , a_{13} კოეფიციენტების შე-
საბამის მინორებს, ე. ი.

$$|a_{ij}| = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = a_{11}(a_{22}a_{33} - a_{23}a_{32}) + a_{12}(a_{23}a_{31} - a_{21}a_{33}) +$$

$$+ a_{13}(a_{21}a_{32} - a_{22}a_{31})$$

და ვინაიდან $|a_{ij}| = \pm 1$, (1.4) ფორმულის თანახმად, მივიღებთ:

$$\begin{aligned} a_{11} &= \pm (a_{22}a_{33} - a_{23}a_{32}); \\ a_{12} &= \pm (a_{23}a_{31} - a_{21}a_{33}); \\ a_{13} &= \pm (a_{21}a_{32} - a_{22}a_{31}). \end{aligned} \quad (1.28)$$

აქ ნიშანი „+“ აღებულია იმ შემთხვევისათვის, როდესაც $|a_{ij}| = +1$,
ე. ი. ადგილი აქვს კოორდინატთა სისტემის მხოლოდ შემობრუნებას სა-
თავის ირგვლივ, ხოლო ნიშანი „-“, შეესაბამება $|a_{ij}| = -1$, როდესაც
მარჯვენა კოორდინატთა სისტემა გადადის მარცხენაში ან შებრუნებით.
ახლა გვექნება

$$C_1' = \pm a_{11} C_1 \pm a_{12} C_2 \pm a_{13} C_3$$

და, ზოგადად

$$C_i' = \pm a_{ij} C_j. \quad (1.29)$$

ეს არის აქსიალური ვექტორების გარდაქმნის კანონი. როგორც ვთქვით,
დადებითი ნიშანი აიღება ისეთი გარდაქმნისათვის, რომელიც მარჯვენა
სისტემას ტოვებს ისევ მარჯვენად (ან მარცხენას — მარცხენად). ასეთი
გარდაქმნისათვის $\Delta = +1$. უარყოფითი ნიშანი აიღება გარდაქმნისა-
თვის, რომელსაც მარჯვენა სისტემა გადაჰყავს მარცხენაში (ან პირიქით),
და რომლისთვის $\Delta = -1$. (1.23) და (1.29) ფორმულები¹⁾ შედარება გვი-
ჩვენებს, რომ, თუ გარდაქმნის შედეგად კოორდინატთა სისტემის შეცვ-
ლა არ ხდება, არავითარი განსხვავება პოლარულსა და აქსიალურ ვექტო-
რებს შორის არ არსებობს.

§ 3. ტენზორები

მრავალი ფიზიკური თვისების განხილვის დროს ჩვენ ვხვდებით სიდიდეებს, რომლებიც არ შეიძლება განსაზღვრულ იქნას სკალარის მსგავსად ერთი რიცხვით, ან სამი რიცხვის ერთობლიობით, როგორც ეს ვექტორების შემთხვევაში იყო. ზოგ შემთხვევაში საჭირო ხდება სიდიდის განსაზღვრა 9 რიცხვით, ზოგჯერ 27,81 და ა. შ. თუმცა სიმეტრიის ან სხვა რაიმე ფიზიკური თვისებების გავლენით კოეფიციენტების ეს რიცხვი შეიძლება საგრძნობლად შემცირდეს. ასეთი ფიზიკური თვისებების მაგალითებს წარმოადგენენ ძაბვები დრეკადი სხეულის რომელიმე წერტილში, ანიზოტროპიული სხეულების ელექტროგამტარობა, დიელექტრიკული შეღწევადობა და მრავალი სხვა. ასეთ ფიზიკურ სიდიდეებს ტენზორები ეწოდება. ტენზორები, ისევე როგორც ვექტორები, სხეულების გარკვეულ ფიზიკურ თვისებებს გამოხატავენ, მაგრამ თუ ვექტორი აღწერს თვისებას, რომელიც ერთი რომელიმე მიმართულებით ხასიათდება, ტენზორი აღწერს ისეთ ფიზიკურ თვისებას, რომელიც არ ხასიათდება ერთი განსაზღვრული მიმართულებით, არამედ გარკვეული კანონზომიერებით ნაწილდება სივრცეში. ტენზორის განსაზღვრა შეიძლება მიღებულ იქნას ვექტორის მცნების შემდგომი განზოგადების შედეგად, ისევე, როგორც სკალარის ცნებიდან მივედით ვექტორის განზოგადებულ ცნებამდე. ამისათვის ჭერ შემოვიღოთ ტენზორის კომპონენტები და დავადგინოთ ამ კომპონენტების გარდაქმნის ფორმულები. ავიღოთ $ox_1x_2x_3$ კოორდინატთა სისტემაში სამი ვექტორი $\vec{P}_1, \vec{P}_2, \vec{P}_3$, რომელნიც $ox_1'x_2'x_3'$ კოორდინატთა სისტემაში გადასვლისას გარდაიქმნებიან $\vec{P}_1', \vec{P}_2', \vec{P}_3'$ ვექტორებად, შემდეგი ფორმულების საშუალებით:

$$\begin{aligned} \vec{P}_1' &= \vec{P}_1 \cos(x_1 \hat{x}_1') + \vec{P}_2 \cos(x_2 \hat{x}_1') + \vec{P}_3 \cos(x_3 \hat{x}_1'); \\ \vec{P}_2' &= \vec{P}_1 \cos(x_1 \hat{x}_2') + \vec{P}_2 \cos(x_2 \hat{x}_2') + \vec{P}_3 \cos(x_3 \hat{x}_2'); \\ \vec{P}_3' &= \vec{P}_1 \cos(x_1 \hat{x}_3') + \vec{P}_2 \cos(x_2 \hat{x}_3') + \vec{P}_3 \cos(x_3 \hat{x}_3'). \end{aligned} \quad (1.30)$$

ამბობენ, რომ სამი $\vec{P}_1, \vec{P}_2, \vec{P}_3$ ვექტორის ერთობლიობა ქმნის ახალ სიდიდეს, რომელსაც მეორე რანგის ტენზორი $|T|$ ეწოდება, ხოლო თვით $\vec{P}_1, \vec{P}_2, \vec{P}_3$ ვექტორები ამ ტენზორის მდგენელებს წარმოადგენენ კოორდინატთა ღერძების გასწვრივ; ამიტომ ვექტორების ანალოგიურად ტენზორებისათვის შეიძლება დაიწეროს

$$T = \vec{i}_1 \vec{P}_1 + \vec{i}_2 \vec{P}_2 + \vec{i}_3 \vec{P}_3;$$

თითოეული ვექტორი, თავის მხრივ, გამოისახება სამი კომპონენტით:

$$\begin{aligned}\vec{P}_1 &= \vec{i}_1 p_{11} + \vec{i}_2 p_{12} + \vec{i}_3 p_{13}; \\ \vec{P}_2 &= \vec{i}_1 p_{21} + \vec{i}_2 p_{22} + \vec{i}_3 p_{23}; \\ \vec{P}_3 &= \vec{i}_1 p_{31} + \vec{i}_2 p_{32} + \vec{i}_3 p_{33}.\end{aligned}\quad (1.31)$$

სადაც, მაგალითად, p_{23} მეორე ვექტორის შემდგენია მესამე ღერძის გასწვრივ. აქედან, ცხადია, რომ მეორე რანგის ტენზორი განისაზღვრება აგრეთვე 9 სიდიდით, რომლებსაც ტენზორის კომპონენტები ეწოდება. ეს კომპონენტები შეიძლება წარმოვიდგინოთ მატრიცის სახით:

$$[p_{ij}] = \begin{bmatrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} \\ p_{31} & p_{32} & p_{33} \end{bmatrix} \quad (1.32)$$

შემოვიღოთ აღნიშვნები: $a_{ik} = \cos(x'_i, x_k)$, მაშინ (1.30) მოკლედ ასე ჩაიწერება:

$$\vec{P}'_i = a_{ik} \vec{P}_k \quad (i, k = 1, 2, 3). \quad (1.33)$$

ახლა გამოვარკვეოთ როგორ გარდაიქმნება ტენზორის p_{ij} კომპონენტები, როდესაც გადავივარტოთ ახალ კოორდინატა სისტემაზე, თუ $ox_1x_2x_3$ და $ox'_1x'_2x'_3$ სისტემები დაკავშირებული არიან a_{ik} კოსინუსებით. შტრიხოვან კოორდინატა სისტემაში ტენზორის შემდგენები იქნება $\vec{P}'_1, \vec{P}'_2, \vec{P}'_3$ ვექტორები, ხოლო კომპონენტები p'_{ij} . განსაზღვრის თანახმად, p'_{ij} წარმოადგენს \vec{P}'_i სექტორის პროექციას x'_j ღერძზე. მაგრამ, (1.33)-ის მიხედვით,

$$\vec{P}'_i = a_{ik} \vec{P}_k.$$

ავიღოთ ამ ტოლობის ორივე მხარის პროექცია x'_j ღერძზე. \vec{P}'_i ვექტორის პროექცია x'_j ღერძზე წარმოადგენს p'_{ij} კომპონენტის სიდიდეს, ხოლო \vec{P}_k ვექტორის შემდგენლები ახალ კოორდინატა ღერძებზე განისაზღვრებიან (1.23) ფორმულის თანახმად,

$$a_{jm} P_{km}.$$

საბოლოოდ მივიღებთ

$$p_{ij}' = a_{ik} a_{jm} p_{km}. \quad (1.34)$$

თვითნებურად ვხედავთ, ტენზორის ახალი კომპონენტები ძველი კომპონენტების წრფივ კომბინაციებს წარმოადგენენ. (1.34) გამოსახულება ტენზორის ახალი განსაზღვრის საშუალებას იძლევა. ვთქვათ, ნებისმიერი მართკუთხა $ox_1x_2x_3$ კოორდინატა სისტემაში განსაზღვრულია ცხრა p_{ij} სიდიდე; თუ ეს სიდიდეები ახალ $ox'_1x'_2x'_3$ კოორდინატა სისტემაში გადასვლისას გარდაიქმნებიან p_{ij}' სიდიდეებად (1.34) ფორ-

მულის მიხედვით, მაშინ მათი ერთობლიობა სამ განზომილებიან სივრცეში განსაზღვრავს ახალ სიდიდეს, რომელსაც მეორე რანგის ტენზორი ეწოდება. ეს განსაზღვრა წინა განსაზღვრის ეკვივალენტურია.

მიღებული შედეგები შეიძლება გავავრცელოთ ნებისმიერი რანგის ტენზორების განსაზღვრისათვის. სახელდობრ, ამბობენ, რომ სამგანზომილებიან სივრცეში განსაზღვრულია n -ური რანგის ტენზორი, თუ ყოველ მართკუთხა კოორდინატთა სისტემაში არსებობს 3^n რიცხვთა ერთობლიობა $p_{i_1 i_2 \dots i_n}$ ($i_1, i_2, \dots, i_n = 1, 2, 3$), რომელიც ერთი კოორდინატთა სისტემიდან მეორეზე გადასვლისას გარდაიქმნება ფორმულით

$$p'_{i_1 i_2 \dots i_n} = a_{i_1 j_1} a_{i_2 j_2} \dots a_{i_n j_n} p_{j_1 j_2 \dots j_n} \quad (1.35)$$

სადაც a_{ij} ერთი კოორდინატთა სისტემიდან მეორეზე გადასვლის მატრიცაა.

განვიხილოთ ტენზორის რამდენიმე მაგალითი. თუ $n=0$, $3^0=1$: ნულოვანი რანგის ტენზორს გააჩნია მხოლოდ ერთი კომპონენტი, რომელიც ერთი მართკუთხა სისტემიდან მეორეზე გადასვლისას არ იცვლება $p'=p$ და ამგვარად ნულოვანი რანგის ტენზორი სკალას წარმოადგენს. როდესაც $n=1$, $3^1=3$. პირველი რანგის ტენზორი ხასიათდება სამი კომპონენტით, რომელიც, (1.35)-ის თანახმად, გარდაიქმნებიან ფორმულით

$$p'_i = a_{ij} p_j \quad (i, j = 1, 2, 3);$$

ეს კი ვექტორის კომპონენტების გარდაქმნის ფორმულაა და, ვაშასა-დამე, პირველი რანგის ტენზორი ვექტორს წარმოადგენს. თუ $n=2$, მაშინ $3^2=9$ კომპონენტს. ეს კომპონენტები გარდაიქმნებიან შემდეგი სახით

$$p'_{ij} = a_{ik} a_{jm} p_{k m}.$$

ამ შემთხვევაში საქმე გვაქვს მეორე რანგის ტენზორთან. შესაბამე რანგის ტენზორისათვის გარდაქმნის ფორმულები ასე დაიწერება

$$p'_{ij e} = a_{ik} a_{jm} a_{en} p_{k m n}; \quad (1.36)$$

ასევე შეიძლება დაიწეროს მეოთხე და უფრო მაღალი რანგის ტენზორების კომპონენტების გარდაქმნის ფორმულები.

ტენზორის კოვარიანტობისა და წარტილის კოვარიანტობის ნამრავლის გარდაქმნა

ჩვენ დავინახეთ, რომ პირველი რანგის ტენზორის კომპონენტების გარდაქმნის ფორმულა

$$p'_i = a_{ij} p_j$$

ისეოიჯია, როგორც წერტილის კოორდინატების გარდაქმნის კანონი

$$x'_i = a_{ij} x_j.$$

(1.19) და (1.20) ფორმულების თანახმად, კოორდინატების ნამრავლი გარდაიქმნება ფორმულებით

$$x_i' x_j' = a_{ik} a_{je} x_{kei}$$

$$x_i' x_j' x_k' = a_{ic} a_{jm} a_{kn} x_c x_m x_n \text{ და ა. შ.}$$

ამ შედეგების შედარება მეორე და მესამე რანგის ტენზორების კომპონენტების გარდაქმნის (1.34) და (1.36) ფორმულებთან გვიჩვენებს, რომ ისინი თანხვედრიან ერთმანეთს. ამიტომ შეიძლება ითქვას, რომ მეორე რანგის ტენზორის კომპონენტები გარდაიქმნებიან ისე, როგორც h_i^j კოორდინატების ნამრავლი, ხოლო მესამე რანგის ტენზორის კომპონენტები გარდაიქმნებიან სამი კოორდინატის ნამრავლის მსგავსად და ა. შ. გარდაქმნის ფორმულების მსგავსება კოორდინატების ნამრავლსა და ტენზორის კომპონენტებს შორის ვრცელდება უფრო მაღალი რანგის ტენზორებზეც. ამ წიგნში ჩვენ ვისარგებლებთ ტენზორებით მეოთხე რანგის ჩათვლით, ამიტომ მიღებული შედეგები შეიძლება შეევაჯამოთ შემდეგი ცხრილით:

ცხრილი 1.3

ტენზორის რანგი	ტენზორის კომპონენტების გარდაქმნა	წერტილის კოორდინატების და მათი ნამრავლის გარდაქმნა
0	$p' = p$	—
1	$p_i' = p_{ij} p_j$	$x_i' = a_{ij} x_j$
2	$p'_{ij} = a_{ik} a_{jm} p_{km}$	$x_i' x_j' = a_{ik} a_{jm} x_k x_m$
3	$p'_{ijk} = a_{ic} a_{jm} a_{kn} p_{cmn}$	$x_i' x_j' x_k' = a_{ic} a_{jm} a_{kn} x_c x_m x_n$
4	$p'_{ijke} = a_{im} a_{jn} a_{ko} a_{el} p_{mnol}$	$x_i' x_j' x_k' x_e' = a_{im} a_{jn} a_{ko} a_{el} x_m x_n x_o x_l$

ტენზორების ზოგირთი თვისება

ტენზორს, რომლის მატრიცას აქვს სახე

$$|\delta_{ij}| = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (1.37)$$

ერთეულოვანი ტენზორი ეწოდება. ერთი კოორდინატთა სისტემიდან მეორეზე გადასვლის დროს ერთეულოვანი ტენზორის კომპონენტები ინვარიანტულია, მართლაც

$$\delta_{ij}' = a_{ik} a_{jm} \delta_{km} = a_{ik} a_{jk}$$

ეს უკანასკნელი კი, (1.7) ფორმულის თანახმად, უდრის δ_{ij} . ორი ტენზორის ჯამი განისაზღვრება როგორც ტენზორი, რომლის კომპონენტები

ბი მოცემული ტენზორების სათანადო კომპონენტების ჯამს წარმოადგენენ

$$\rho_{ij} = \rho_{ij}' + \rho''_{ij}. \quad (1.38)$$

როგორც ჩანს, ერთი და იგივე რანგის ორი ტენზორის ჯამი ან სხვაობა იქნება იმავე რანგის ტენზორი. ასევე, ცხადია, რომ თუ რომელიმე $[T]$ ტენზორის ყველა ρ_{ij} ელემენტს გავამრავლებთ ერთსა და იმავე სკალარულ m სილიდებზე, მივიღებთ იმავე რანგის ახალ ტენზორს, რომლის ელემენტები იქნება $m\rho_{ij}$ და მდგენელები კოორდინატთა ღერძებზე $m\vec{P}_1$, $m\vec{P}_2$, $m\vec{P}_3$. ასეთი ტენზორი აღინიშნება $[mT]$. აქედან გამოდის, რომ ერთი და იგივე რანგის ტენზორების ნებისმიერი წრფივი კომბინაცია გვაძლევს იმავე რანგის ტენზორს.

განვსაზღვროთ ახლა ტენზორისა და ვექტორის სკალარული ნამრავლი. მოცემულია ტენზორი $[T]$, მდგენელებით \vec{P}_1 , \vec{P}_2 , \vec{P}_3 .

$$T = \vec{i}_1 \vec{P}_1 + \vec{i}_2 \vec{P}_2 + \vec{i}_3 \vec{P}_3 = \begin{bmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{13} \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \rho_{23} \\ \rho_{31} & \rho_{32} & \rho_{33} \end{bmatrix} \quad (1.39)$$

და ვექტორი $\vec{a} = \vec{i}_1 a_1 + \vec{i}_2 a_2 + \vec{i}_3 a_3$.

აღვნიშნოთ ეს ნამრავლი $T \cdot \vec{a}$, მაშინ:

$$T \cdot \vec{a} = \vec{i}_1 (\vec{P}_1 \vec{a}) + \vec{i}_2 (\vec{P}_2 \vec{a}) + \vec{i}_3 (\vec{P}_3 \vec{a}) = \vec{i}_1 (\rho_{11} a_1 + \rho_{12} a_2 + \rho_{13} a_3) + \vec{i}_2 (\rho_{21} a_1 + \rho_{22} a_2 + \rho_{23} a_3) + \vec{i}_3 (\rho_{31} a_1 + \rho_{32} a_2 + \rho_{33} a_3);$$

აღვნიშნოთ:

$$\begin{aligned} q_1 &= \rho_{11} a_1 + \rho_{12} a_2 + \rho_{13} a_3; \\ q_2 &= \rho_{21} a_1 + \rho_{22} a_2 + \rho_{23} a_3; \\ q_3 &= \rho_{31} a_1 + \rho_{32} a_2 + \rho_{33} a_3. \end{aligned} \quad (1.40)$$

როგორც ვხედავთ ტენზორის და ვექტორის სკალარული ნამრავლი წარმოადგენს ახალ \vec{q} ვექტორს.

$$\vec{q} = T \cdot \vec{a} = \vec{i}_1 q_1 + \vec{i}_2 q_2 + \vec{i}_3 q_3. \quad (1.41)$$

მეორე რანგის ტენზორის ვექტორზე სკალარულად გამრავლების შედეგად ხდება ტენზორის რანგის დაწვევა. საზოგადოდ, თუ ნებისმიერი რანგის ტენზორის და ვექტორის სკალარული ნამრავლის შედეგი წარმოადგენს $(n-1)$ რანგის ტენზორს, მაშინ თვით ეს ტენზორი n რანგის იქნება. (1.40) ფორმულების მოკლედ ჩაწერის შემდეგ მივიღებთ

$$q_i = \rho_{ij} a_j \quad (i, j = 1, 2, 3). \quad (1.42)$$

(1.42) გამოსახულებაში \vec{q} და a ვექტორების კომპონენტები დაკავშირებულია ტენზორის p_{ij} კომპონენტებით. ეს შედეგი შესაძლებელია განვაზოგადოდ შემდეგი სახით: თუ o რიგების მიერ ვექტორული სიდიდე დაკავშირებულია T სიდიდით, რომლის კომპონენტები (1.39) მატრიცას შეადგენენ, მაშინ ეს სიდიდე წარმოადგენს მეორე რანგის ტენზორს.

ავიღოთ m რანგის ტენზორი A , რომლის კომპონენტებია $A_{i_1 \dots i_m}$ და n რანგის ტენზორი B კომპონენტებით $B_{j_1 \dots j_n}$. შეიძლება დამტკიცდეს, რომ სიდიდეები, რომელნიც წარმოადგენენ ერთი ტენზორის ყველა კომპონენტის ნამრავლს მეორე ტენზორის კომპონენტებზე, ე. ი. $A_{i_1 \dots i_m} B_{j_1 \dots j_n}$ ქმნიან ახალ ტენზორს, რომლის რანგი არის $(m+n)$. ამ ტენზორს A და B ტენზორების ნამრავლი ეწოდება. ამის საჩვენებლად დავეწროთ გარდაქმნის ფორმულები ორივე ტენზორისათვის:

$$A'_{i_1 i_2 \dots i_m} = a_{i_1 k_1} a_{i_2 k_2} \dots a_{i_m k_m} A_{k_1 k_2 \dots k_m};$$

$$B'_{j_1 \dots j_n} = a_{j_1 p_1} a_{j_2 p_2} \dots a_{j_n p_n} B_{p_1 p_2 \dots p_n}.$$

ამიტომ

$$(A_{i_1 \dots i_m} \cdot B_{j_1 \dots j_n})' = a_{i_1 k_1} \dots a_{i_m k_m} a_{j_1 p_1} \dots a_{j_n p_n} A_{k_1 \dots k_m} B_{p_1 \dots p_n}.$$

ასე, მაგალითად, მეორე რანგის ტენზორების შემთხვევაში

$$A'_{i_1 i_2} \cdot B'_{j_1 j_2} = (a_{i_1 e} a_{i_2 h} A_{eh}) (a_{j_1 m} a_{j_2 n} B_{mn}) = a_{i_1 e} a_{i_2 h} a_{j_1 m} a_{j_2 n} A_{eh} B_{mn}.$$

როგორც გარდაქმნის ფორმულების ცხრილიდან ჩანს, $A_{eh} B_{mn}$ გარდაიქმნება როგორც მეოთხე რანგის ტენზორი.

ავიღოთ n -ური რანგის ტენზორი $T_{ijk \dots}$. თუ ამ ტენზორის კომპონენტებში ორ ნებისმიერ ინდექსს, მაგალითად, i და j -ს გავუტოლებთ ერთმანეთს და ჩავატარებთ შეჯამებას ამ ინდექსის ყველა შესაძლებელი მნიშვნელობისათვის, მივიღებთ ტენზორს, რომლის რანგი იქნება $n-2$. ამ ოპერაციას ტენზორის დაქვეითება ეწოდება. ასე, მაგალითად, მეოთხე რანგის A_{ijkl} ტენზორისათვის გარდაქმნის ფორმულა იქნება

$$A'_{ijke} = a_{im} a_{jn} a_{kp} a_{es} A_{mnpes}.$$

თუ გავუტოლებთ i და j ერთმანეთს, მივიღებთ

$$A'_{iike} = a_{im} a_{in} a_{kp} a_{es} A_{mnpes}.$$

მაგრამ

$$a_{im} a_{in} = \delta_{mn}, \text{ ასე რომ, } A'_{iike} = a_{kp} a_{es} A_{mnpes}.$$

ეს იმას ნიშნავს, რომ A_{iike} არის მეორე რანგის ტენზორი, როგორც ვხედავთ, ინდექსების გატოლების მაგივრად შესაძლებელია კომპონენტების გამრავლება δ_{ij} — მეორე რანგის ერთეულოვან ტენზორზე და შემდეგ შეჯამება. მართლაც, თუ ვვაქვს \vec{A} და \vec{B} ვექტორები A_i და B_j

კომპონენტებით, მაშინ $A_i B_j$ მეორე რანგის ტენზორის კომპონენტები იქნება. შევადგინოთ გამოსახულება $\delta_{ij} A_i B_j$ და შევკრიბოთ ინდექსის ყველა მნიშვნელობისათვის. მივიღებთ, რომ

$$\delta_{ij} A_i B_j = A_i B_j = \vec{A} \cdot \vec{B}$$

წარმოადგენს სკალარს (ნულოვანი რანგის ტენზორს).

სიმეტრიული და ანტისიმეტრიული ტენზორები

ამბობენ, რომ $[T]$ მეორე რანგის სიმეტრიული ტენზორია, თუ $T_{ij} = T_{ji}$. ტენზორს ეწოდება ანტისიმეტრიული, თუ $T_{ij} = -T_{ji}$. სიმეტრიულობის ან ანტისიმეტრიულობის თვისება არ არის დამოკიდებული კოორდინატთა ლერძების არჩევანზე (ინვარიანტულია კოორდინატთა გარდაქმნის მიმართ). მართლაც:

$$T'_{ij} = a_{ik} a_{jc} T_{ke}$$

$$T'_{ji} = a_{je} a_{ik} T_{ek}$$

შევკრიბოთ ეს ტოლობები (ანტისიმეტრიული ტენზორებისათვის) ან გამოვავლოთ (სიმეტრიული ტენზორებისათვის); მაშინ მივიღებთ

$$T'_{ij} \pm T'_{ji} = a_{ik} a_{je} (T_{ke} \pm T_{ek}).$$

აქედან, ცხადია, რომ $T'_{ij} \pm T'_{ji} = 0$ და, მაშასადამე, $T'_{ij} = T'_{ji}$ ან $T'_{ij} = -T'_{ji}$.

თუ ტენზორი ანტისიმეტრიულია, მაშინ $T_{11} = T_{22} = T_{33} = 0$, ხოლო დიაგონალის მიმართ სიმეტრიული ელემენტები სიდიდით ტოლი და საწინააღმდეგო ნიშნის არიან:

$$T_{21} = -T_{12}; \quad T_{13} = -T_{31}; \quad T_{32} = -T_{23}.$$

ასე რომ, ანტისიმეტრიული ტენზორი მთლიანად განისაზღვრება სამი სიდიდით, რომლებისთვის მოსახერხებელია შემდეგი აღნიშვნების შემოღება:

$$\omega_1 = T_{32} = -T_{23};$$

$$\omega_2 = T_{13} = -T_{31};$$

$$\omega_3 = T_{21} = -T_{12}.$$

შეიძლება დამტკიცდეს, რომ $\omega_1, \omega_2, \omega_3$ აქსიალური ვექტორის კომპონენტებია. ამისათვის საკმარისია ვაჩვენოთ, რომ $\omega_1, \omega_2, \omega_3$ გარდაიქმნებიან ისე, როგორც აქსიალური ვექტორის კომპონენტები. ავიღოთ, მაგალითად, $\omega_1 = T_{32}$ და გადავიღეთ ახალ კოორდინატთა სისტემაზე, მაშინ

$$\omega_1' = T_{32}' = a_{3k} a_{2m} T_{km} = T_{32} (a_{33} a_{22} - a_{23} a_{32}) + T_{13} (a_{23} a_{31} - a_{21} a_{33}) + T_{21} (a_{21} a_{32} - a_{22} a_{31}).$$

თუ გავითვალისწინებთ (1.28) ფორმულებს, მიღებული შედეგი შეიძლება ასე დაიწეროს

$$\omega_1' = \pm(\omega_1 a_{11} + \omega_2 a_{12} + \omega_3 a_{13}).$$

ასეთივე გარდაქმნის მიღება შეიძლება ორი დანარჩენი კომპონენტისათვის, ამიტომ საბოლოოდ მივიღებთ

$$\omega_i' = \pm a_{ik} \omega_k. \quad (1.43)$$

მიღებული ტოლობა თანხვედრა აქსიალური ვექტორის გარდაქმნის (1.29) ფორმულას, რაც იმის დამადასტურებელია, რომ მეორე რანგის ანტისიმეტრიული ტენზორი აქსიალურ ვექტორს წარმოადგენს.

ახლა განვიხილოთ სიმეტრიული ტენზორები. როგორც აღენიშნეთ, ამ შემთხვევაში $T_{ij} = T_{ji}$; ამიტომ მეორე რანგის სიმეტრიულ ტენზორს $[T]$ აქვს ექვსი დამოუკიდებელი კომპონენტი: $T_{11}, T_{22}, T_{33}, T_{12}, T_{13}, T_{23}$. ასეთი ტენზორის წარმოდგენა ვექტორის საშუალებით უკვე შეუძლებელია. მაგრამ შეიძლება მოიძებნოს მეორე რანგის სიმეტრიული ტენზორის თვისებების გამომსახველი სათანადო გეომეტრიული ფორმა; ამისათვის გავიხსენოთ, რომ მეორე რიგის ცენტრალური ზედაპირი აგრეთვე განისაზღვრება ექვსი დამოუკიდებელი პარამეტრით და ამ ზედაპირის ზოგადი განტოლება შემდეგი სახით იწერება

$$Ax_1^2 + Bx_2^2 + Cx_3^2 + Dx_1x_2 + Ex_1x_3 + Fx_2x_3 = 1. \quad (1.44)$$

შევადგინოთ განტოლება

$$T_{ij}x_i x_j = 1. \quad (1.45)$$

თუ (1.45) განტოლებას დავწერთ გაშლილი სახით, მივიღებთ

$$T_{11}x_1^2 + T_{12}x_1x_2 + T_{13}x_1x_3 + T_{21}x_2x_1 + T_{22}x_2^2 + T_{23}x_2x_3 + \\ + T_{31}x_3x_1 + T_{32}x_3x_2 + T_{33}x_3^2 = 1.$$

სიმეტრიული ტენზორისათვის: $T_{ij} = T_{ji}$ და განტოლება (1.45) მიიღებს სახეს

$$T_{11}x_1^2 + T_{22}x_2^2 + T_{33}x_3^2 + 2T_{23}x_2x_3 + 2T_{31}x_3x_1 + \\ + 2T_{12}x_1x_2 = 1. \quad (1.45')$$

შედარება გვიჩვენებს, რომ განტოლებები (1.45) და (1.45)' წარმოადგენენ მეორე რიგის ზედაპირის განტოლებებს, რომლის ცენტრი მოთავსებულია კოორდინატთა სათავეში. ზოგად შემთხვევაში ეს იქნება ელიფსოიდის ან ჰიპერბოლოიდების განტოლება. ახლა საჭიროა დავამტკიცოთ, რომ კოეფიციენტები T_{ij} , რომელნიც ამ განტოლებაში შედიან, გარდაიქმნებიან ისე, როგორც მეორე რანგის ტენზორის კომპონენტები. ამისათვის განვსაზღვროთ x_i და x_j (1.4) ფორმულის საშუალებით და შევიტანოთ მათი მნიშვნელობები (1.45) განტოლებაში, მივიღებთ:

$$x_i = a_{hi}x'_h; \quad x_j = a_{mj}x'_m; \quad T_{ij}a_{hi}a_{mj}x'_h x'_m = 1.$$

ეს განტოლება შეიძლება დაიწეროს ასეთი სახით

$$T'_{hm}x'_h x'_m = 1,$$

სადაც შემოღებულია აღნიშვნა.

$$T'_{hm} = a_{hi} a_{mj} T_{ij}.$$

მიღებული ტოლობა წარმოადგენს მეორე რანგის ტენზორის კომპონენტების გარდაქმნის ფორმულას. ჩენი დაშვების თანახმად, $T_{ij} = T_{ji}$ და, მაშასადამე, (1.45) განტოლებით მოცემული მეორე რიგის ზედაპირის კოეფიციენტები გარდაიქმნებიან ისე, როგორც მეორე რანგის სიმეტრიული ტენზორის კომპონენტები. ეს იმას ნიშნავს, რომ ყოველთვის, როდესაც საჭიროა ტენზორის კომპონენტების გარდაქმნის დადგენა, საკმარისია განხილულ იქნას შესაბამისი მეორე რიგის ზედაპირის გარდაქმნა. ამგვარად, ნებისმიერი მეორე რანგის სიმეტრიული ტენზორის აღწერისათვის შესაძლებელია გამოვიყენოთ მეორე რიგის ზედაპირი (1.45), რომელსაც ამ შემთხვევაში ტენზორის მეორე რიგის მახასიათებელ ზედაპირს ან, მოკლედ, ტენზორულ ზედაპირს უწოდებენ.

მეორე რიგის მახასიათებელი ზედაპირის თვისებები

როგორც აღვნიშნეთ, (1.45) განტოლება გამოხატავს მეორე რიგის ზედაპირს, რომლის ცენტრი მოთავსებულია კოორდინატთა სათავეში (ნახ. 1.5 ა). ეს ცენტრი მეორე რიგის ზედაპირის სიმეტრიის ცენტრს წარმოადგენს. ამ ცენტრზე გადის სამი ურთიერთმართობი სიმეტრიის სიბრტყე, რომლებსაც მთავარი სიბრტყეები ეწოდება, ხოლო ამ სიბრტყეების მართობ მიმართულებებს — მთავარი მიმართულებები ან მთავარი ღერძები. თუ კოორდინატთა ღერძები მიმართულია სამი ურთიერთმართობი მთავარი ღერძის გასწვრივ, მაშინ მეორე რიგის ზედაპირის (1.45) განტოლება მარტივდება

$$T_{11}x_1^2 + T_{22}x_2^2 + T_{33}x_3^2 = 1;$$

ან, თუ აღვნიშნავთ $T_{11} = T_1$, $T_{22} = T_2$, $T_{33} = T_3$, მივიღებთ

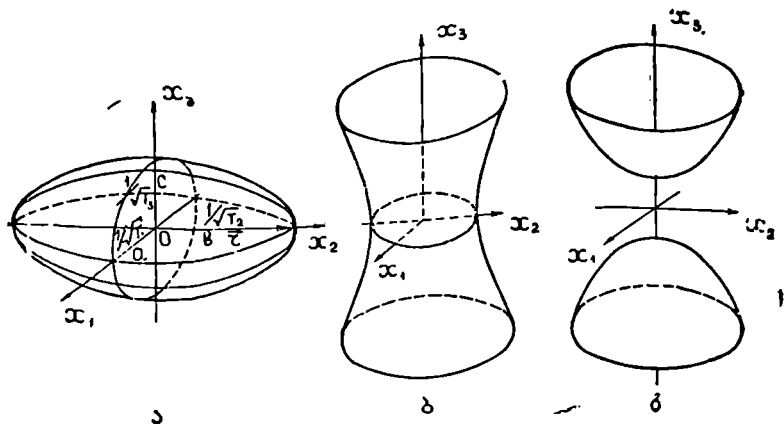
$$T_1 x_1^2 + T_2 x_2^2 + T_3 x_3^2 = 1; \quad (1.46)$$

როცა T_1 , T_2 , T_3 სამივე დადებითია და შემოვიღებთ აღნიშვნებს

$$T_1 = \frac{1}{a^2}, \quad T_2 = \frac{1}{b^2}, \quad \dots, \quad T_3 = \frac{1}{c^2},$$

(1.46) განტოლება მიიღებს ელიფსოიდის განტოლების სახეს (ნახ.1,5 ა)

$$\frac{x_1^2}{a^2} + \frac{x_2^2}{b^2} + \frac{x_3^2}{c^2} = 1. \quad (1.47)$$



ნახ.1.5. $[T_{ij}]$ ტენზორის მახასიათებელი ზედაპირები.

თუ ყველა კოეფიციენტი T_1, T_2, T_3 უარყოფითია, მივიღებთ წარმოსახვით ელიფსოიდს

$$\frac{x_1^2}{a^2} + \frac{x_2^2}{b^2} + \frac{x_3^2}{c^2} = -1;$$

ორი კოეფიციენტი დადებითია, მაგ., T_1 და $T_2 > 0$, ხოლო $T_3 < 0$, გვექნება

$$\frac{x_1^2}{a^2} + \frac{x_2^2}{b^2} - \frac{x_3^2}{c^2} = 1;$$

ეს ერთკალთა ჰიპერბოლოიდის განტოლებაა (ნახ. 1.5 ბ). თუ ორი კოეფიციენტი უარყოფითია, ხოლო ერთი დადებითი — მივიღებთ ორკალთა ჰიპერბოლოიდის განტოლებას (ნახ. 1.5 გ).

ყველა ფიზიკურ მოვლენაში, რომლებსაც ჩვენ განვიხილავთ, კოეფიციენტები T_{ij} დადებითი იქნება, ამიტომ განვიხილოთ (1.47) განტოლებით მოცემული ელიფსოიდი უფრო დაწვრილებით. ცხადია, რომ ელიფსოიდის ყველა წერტილისათვის მართებული იქნება.

$$|x_1| \leq a, |x_2| \leq b, |x_3| \leq c.$$

ვინაიდან ელიფსოიდის ნებისმიერი კვეთა სიბრტყით მეორე რიგის მრუდს წარმოადგენს და ელიფსოიდის ზედაპირი შემოსაზღვრულია, კვეთას ექნება ელიფსის სახე. კოორდინატთა სიბრტყეების მიერ ელიფსოიდის გადაკვეთის შედეგად მიიღება სამი ელიფსი, რომლებსაც მთავარი

ელიფსები ეწოდება. ასე, მაგალითად, ax_1x_2 ($x_3=0$) სიბრტყე გადაკვეთს ელიფსოიდს ელიფსზე

$$\frac{x_1^2}{a^2} + \frac{x_2^2}{b^2} = 1.$$

ჩვენ მიერ შემოღებული აღნიშვნების $T_1 = \frac{1}{a^2}$, $T_2 = \frac{1}{b^2}$, $T_3 = \frac{1}{c^2}$ თანახმად, მახასიათებელი ზედაპირის ნახევარღერძების სიგრძე

განისაზღვრება როგორც $\frac{1}{\sqrt{T_{11}}}$, $\frac{1}{\sqrt{T_{22}}}$, $\frac{1}{\sqrt{T_{33}}}$ (ნახ. 1,5 ა). საზოგადოდ, კოორდინატთა ღერძად შეიძლება არჩეულ იქნას ნებისმიერი რადიუსი, რომელიც სათავიდან გამომდის რაიმე \vec{n} მიმართულებით, მაშინ, აღნიშნულის თანახმად, ეს რადიუსი გადაკვეთს (1.45) ზედაპირს წერტილში, რომელიც დაშორებულია კოორდინატთა სათავიდან მანძილით

$$r_n = \frac{1}{\sqrt{|T_{nn}|}}. \quad (1.48)$$

ამგვარად, თუ ყოველ წრფეზე, რომელიც კოორდინატთა სათავიდან იქნება გავლებული, გადავზომავთ მონაკვეთს, რომლის სიგრძე ტოლია $|T_{nn}|$ -ის კვადრატული ფესვის შებრუნებული სიდიდის, მაშინ ამ მონაკვეთების ბოლოების გეომეტრიული ადგილი მოგვცემს (1.45) ფორმულის შესაბამის მეორე რიგის ზედაპირს. ვინაიდან T_{nn} სიდიდეები ტენზორის კომპონენტებს წარმოადგენენ, რომელნიც სხეულის გარკვეულ ფიზიკურ თვისებას გამოხატავენ, შეიძლება ითქვას, რომ ტენზორული ზედაპირის ნებისმიერი რადიუს-ვექტორის სიგრძე რიცხობრივად ტოლია ერთი გაყოფილი კვადრატული ფესვი T_{nn} სიდიდიდან, რომელიც რადიუს-ვექტორის მიმართულებით ახასიათებს აღნიშნულ ფიზიკურ თვისებას.

თუ ნებისმიერი რადიუს-ვექტორის მგეზავ კოსინუსებს აღვნიშნავთ $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$, მაშინ $x_i = r\alpha_i$ და ტენზორული ზედაპირის განტოლება (1.45) მიიღებს სახეს

$$T_{ij} r^2 \alpha_i \alpha_j = 1.$$

ვინაიდან, (1.48)-ის თანახმად, $r^2 = \frac{1}{T}$, საბოლოოდ მივიღებთ

$$T_{ij} \alpha_i \alpha_j = T \quad (1.49)$$

(1.49) წარმოადგენს ზოგად განტოლებას, რომელიც ნებისმიერი მიმართულებისათვის განსაზღვრავს T ფიზიკური სიდიდის მნიშვნელობას. თუ რომელიმე მიმართულებისათვის T_n იღებს უარყოფით მნიშვნელობას,

მ. ი. სათანადო ზედაპირი წარმოადგენს წარმოსახვით ელიფსოიდს ან ჰიპერბოლოიდებს, უნდა განვიხილოთ ზედაპირი, რომლის განტოლება იქნება

$$T_{ij}x_i x_j = -1.$$

ამ ზედაპირის რადიუს-ვექტორებს ექნებათ ნამდვილი მნიშვნელობა. ამიტომ ზოგად შემთხვევაში (1.45) განტოლება უნდა დაიწეროს ასეთი სახით

$$T_{ij}x_i x_j = \pm 1. \quad (1.50)$$

განვიხილოთ მახასიათებელი ზედაპირის რადიუს-ვექტორისა და ნორმალის თვისებები (ნახ. 1,6). ამისათვის გავიხსენოთ, რომ ნებისმიერი ვექტორი \vec{q} შეიძლება წარმოვიდგინოთ სიბრტყით, რომელიც ამ ვექტორის მართობულია და დაცილებულია კოორდინატთა სათავედან $1/q$ სი-
დილით. ასეთი სიბრტყის განტოლება იქნება

$$\vec{r} \cdot \vec{q} = 1, \quad (1.51)$$

სადაც \vec{r} სიბრტყის ნებისმიერი წერტილის რადიუს-ვექტორია.

ანალოგიურად მოვიქცეთ მეორე რანგის სიმეტრიული $[T]$ ტენზორის შემთხვევაში. განვიხილოთ სკალარული ნამრავლი

$$\vec{r} \cdot (T \vec{r}) = 1. \quad (1.52)$$

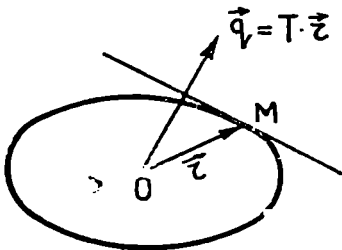
აქ $(T \vec{r})$ ტენზორისა და ცვლადი წერტილის რადიუს-ვექტორის სკალარული ნამრავლია და, (1.41)-ის თანახმად, წარმოადგენს ახალ \vec{q} ვექტორს, რომლის კომპონენტები განისაზღვრება (1.40) ფორმულებით. ახლა (1.52) მიიღებს სახეს

$$\vec{r} \cdot \vec{q} = 1. \quad (1.52)'$$

თუ გავშლით ამ სკალარულ ნამრავლს, მივიღებთ (1.45)' განტოლებების მსგავს მეორე რიგის ზედაპირის განტოლებას, რომლის ნებისმიერი წერტილის რადიუს-ვექტორი იქნება \vec{r} ვექტორი. (1.51)-თან შედარება

გვიჩვენებს, რომ როდესაც \vec{r} მეორე რიგის ზედაპირის ნებისმიერი M წერტილის რადიუს-ვექტორია (ნახ. 1,6), მაშინ ვექტორი $\vec{q} = T \vec{r}$ ნორმალს იქნება სიბრტყისა, რომელიც M წერტილზე გაივლის მახასიათებელი ზედაპირის მხებდალ. ამ შედეგს აქვს ზოგადი ხასიათი. თუ ორ ვექტორს შორის არსებობს დამოკიდებულება

$$q_i = T_{ij} p_j \quad (1.53)$$



ნახ. 1.6. მახასიათებელი ზედაპირის რადიუს-ვექტორი და ნორმალი.

და \vec{P} ვექტორი მიმართულია T_{ij} ტენზორის მახასიათებელი ზედაპირის რადიუს-ვექტორის გასწვრივ ზედაპირის რომელიმე M წერტილში, \vec{q} ვექტორს ამ წერტილში ზედაპირისადმი ნორმალის მიმართულება ექნება.

ტენზორის მთავარი ლერძები და მთავარი მნიშვნელობები

როგორც დავინახეთ, მეორე რიგის ზედაპირი და, კერძოდ, სამღერძა ელიფსოიდი წარმოადგენს მეორე რანგის სიმეტრიული ტენზორის გეომეტრიულ გამოსახულებას. ზედაპირის განტოლება ზოგად შემთხვევაში ასე გამოისახება

$$T_{11}x_1^2 + T_{22}x_2^2 + T_{33}x_3^2 + 2T_{23}x_2x_3 + 2T_{31}x_3x_1 + 2T_{12}x_1x_2 = 1. \quad (1.45)'$$

სადაც T_{ij} ტენზორის კომპონენტებია. თუ კოორდინატთა ლერძები მიმართული იქნება ელიფსოიდის მთავარი ლერძების გასწვრივ, ეს განტოლება მარტივდება და იღებს სახეს

$$T_1x_1^2 + T_2x_2^2 + T_3x_3^2 = 1. \quad (1.46)$$

მთავარი ლერძის ძირითად დამახასიათებლად უნდა ჩათვალოს ის, რომ მისი ელიფსოიდთან გადაკვეთის წერტილში რადიუს-ვექტორი და ნორმალი ურთიერთპარალელურები არიან, მაგრამ, (1.52)-ის თანახმად, თუ $r(x_i)M$ წერტილის რადიუს-ვექტორია, რომელიც მთავარი ლერძის ელიფსოიდთან გადაკვეთაზე მდებარეობს (ნახ. 1,5 ა), მაშინ ვექტორი $T \cdot \vec{r}$ კომპონენტებით $T_{ij}x_j$ M წერტილში ზედაპირის მართობული იქნება და ამ ვექტორების პარალელურობისათვის მათი შესაბამისი კომპონენტები ურთიერთპროპორციული უნდა იყოს

$$T_{ij}x_j = \lambda x_i; \quad (1.54)$$

აქ λ პროპორციულობის კოეფიციენტია.

(1.54) წარმოადგენს სამ წრფივ ერთგვაროვან განტოლებათა სისტემას x_i ცვლადების მიმართ:

$$T_{11}x_1 + T_{12}x_2 + T_{13}x_3 = \lambda x_1;$$

$$T_{21}x_1 + T_{22}x_2 + T_{23}x_3 = \lambda x_2;$$

$$T_{31}x_1 + T_{32}x_2 + T_{33}x_3 = \lambda x_3.$$

განტოლებათა ამ სისტემას ექნება ნულისაგან განსხვავებული ამონახსნი მხოლოდ იმ შემთხვევაში, თუ სისტემის დეტერმინანტი Δ უდრის ნულს.

$$\Delta = \begin{vmatrix} T_{11} - \lambda, & T_{12} & T_{13} \\ T_{21}, & T_{22} - \lambda, & T_{23} \\ T_{31}, & T_{32} & T_{33} - \lambda \end{vmatrix} = 0. \quad (1.55)$$

ეს არის კუბური განტოლება λ -ის მიმართ. მისი სამი ფესვი $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ გვაძლევს λ -ას სამ შესაძლებელ მნიშვნელობას, რომელთა შესაბამისად განსაზღვრული იქნება სამი მთავარი ღერძის მიმართულება.

ამბობენ, რომ \vec{a} ვექტორის მიმართულება წარმოადგენს $[T]$ ტენზორის მთავარ მიმართულებას, თუ ტენზორის ამ ვექტორზე სკალარულად გადამრავლების შედეგად ვექტორის მიმართულება უცვლელი რჩება და იცვლება მხოლოდ ვექტორის სიდიდე, ე. ი.

$$T \cdot \vec{a} = \lambda \vec{a}. \quad (1.56)$$

პროპორციულობის λ კოეფიციენტს ეწოდება ტენზორის მთავარი მნიშვნელობა. თუ \vec{a} ვექტორის ნაცვლად აღებული იქნება მეორე რიგის ზედაპირის რადიუს-ვექტორი, (1.56) თანხვდება (1.54) განტოლებას, რაც იმას ნიშნავს, რომ მეორე რანგის ტენზორის მთავარი მიმართულება თანხვდება მეორე რიგის ზედაპირის მთავარი ღერძების მიმართულებას. იმისათვის, რომ დავადგინოთ მთავარი ღერძების სიგრძეები, ვისარგებლოთ (1.54) ფორმულით და გავამრავლოთ ტოლობის ორივე მხარე x_i -ზე, მაშინ

$$T_{ij} x_i x_j = \lambda x_i x_i = 1;$$

აქედან

$$\sqrt{x_i x_i} = \frac{1}{\sqrt{|\lambda|}}$$

და იმ რადიუს-ვექტორის სიგრძე, რომელიც შეესაბამება λ_1 ფესვს, ტოლი იქნება $\sqrt{x_i' x_i'} = \frac{1}{\sqrt{|\lambda_1|}}$, მაგრამ ვინაიდან მეორე რიგის ზედაპირის ნახევარღერძების სიგრძეები განსაზღვრული იყო როგორც

$$\frac{1}{\sqrt{T_1}}, \quad \frac{1}{\sqrt{T_2}}, \quad \frac{1}{\sqrt{T_3}},$$

მივიღებთ, რომ

$$T_1 = \lambda_1, \quad T_2 = \lambda_2, \quad T_3 = \lambda_3.$$

ამგვარად, (1.55) განტოლების სამი ფესვი წარმოადგენს ტენზორის სამ მთავარ მნიშვნელობას— T_1, T_2, T_3 და განტოლება (1.46) ამის საფუძველზე შეიძლება ასე დაიწეროს

$$\lambda_1 x_1^2 + \lambda_2 x_2^2 + \lambda_3 x_3^2 = 1. \quad (1.57)$$

როგორც ჩანს, ამგვარად არჩეულ კოორდინატთა სისტემაში დიაგონალური ელემენტების გარდა ტენზორის ყველა დანარჩენი კომპონენტი ნულს უტოლდება, და ამიტომ

$$T = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{bmatrix}. \quad (1.58)$$

ხოლო (1.55) განტოლება

$$\Delta = \begin{vmatrix} T_1 - \lambda & 0 & 0 \\ 0 & T_2 - \lambda & 0 \\ 0 & 0 & T_3 - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

აბ

$$(T_1 - \lambda)(T_2 - \lambda)(T_3 - \lambda) = 0.$$

და, ბოლოს, განვიხილოთ კიდევ ერთი ზედაპირი, რომელიც დაკავშირებულია მეორე რანგის ტენზორთან. როგორც ვიცით, მეორე რანგის სიმეტრიული ტენზორის მახასიათებელ ზედაპირს წარმოადგენს ელიფსოიდი, რომლის ნახევარღერძების სიგრძე განისაზღვრება ტენზორის

მთავარი მნიშვნელობების საშუალებით: $\frac{1}{\sqrt{T_1}}$, $\frac{1}{\sqrt{T_2}}$, $\frac{1}{\sqrt{T_3}}$; როდესაც ტენზორი მიყვანილია მთავარ ღერძებზე.

ამავე დროს ტენზორთან შეიძლება დავაკავშიროთ კიდევ ერთი ელიფსოიდი, რომლის ნახევარღერძების სიგრძე იქნება: $|T_1|$, $|T_2|$, $|T_3|$.

$$\frac{x_1^2}{T_1^2} + \frac{x_2^2}{T_2^2} + \frac{x_3^2}{T_3^2} = 1. \quad (1.59)$$

გამოვარკვეით რას წარმოადგენს ეს ელიფსოიდი. ამისათვის გავიხსენოთ, რომ, (1.53) ფორმულის თანახმად, თუ $|T_{ij}|$ ტენზორი აკავშირებს ორ ვექტორულ \vec{P} და \vec{q} სიდიდეს ისე, რომ \vec{P} ვექტორი მიმართულია ტენზორული ელიფსოიდის რომელიმე რადიუს-ვექტორის გასწვრივ, მაშინ \vec{q} ვექტორს ამ ზედაპირისადმი ნორმალის მიმართულება ექნება. (1.54) განტოლება $q_i = T_{ij}p_j$ ტენზორის მთავარი ღერძების გასწვრივ არჩეულ კოორდინატთა სისტემაში მარტივდება და იღებს სახეს:

$$q_1 = T_1 p_1, \quad q_2 = T_2 p_2, \quad q_3 = T_3 p_3.$$

ახლა დავუშვათ, რომ \vec{P} ვექტორის სიგრძე უდრის ერთს; მაშინ ცხადი იქნება, რომ როდესაც $|T_{ij}|$ ტენზორის მახასიათებელი ზედაპირის რადიუს-ვექტორი ქვემოწერს ტენზორულ ელიფსოიდს, ნახევარღერძებით

$\frac{1}{\sqrt{T_1}}$, $\frac{1}{\sqrt{T_2}}$, $\frac{1}{\sqrt{T_3}}$, \vec{P} ვექტორის ბოლო შემოწერს ერთეუ-

ლოვანი რადიუსის მქონე სფეროს, ხოლო \vec{q} ვექტორის ბოლო შემოწერს ელიფსოიდს, რომლის ნახევარღერძების სიგრძე იქნება T_1, T_2, T_3 ; მართლაც, ვინაიდან $\rho_1^2 + \rho_2^2 + \rho_3^2 = 1$, მივიღებთ

$$\frac{q_1^2}{T_1^2} + \frac{q_2^2}{T_2^2} + \frac{q_3^2}{T_3^2} = 1 \quad (1.60)$$

და, მაშასადამე, \vec{q} ვექტორის ბოლო მოთავსებულია ელიფსოიდზე. ეს ელიფსოიდი საშუალებას იძლევა განისაზღვროს \vec{q} ვექტორის სიგრძე, როდესაც დადგენილია ამ ვექტორის მიმართულება.

§ 4. მ ა ტ რ ი ც ე მ ბ ი

კრისტალების ფიზიკური თვისებების აღწერის დროს ხშირად ხელსაყრელია ე. წ. მატრიცული აღნიშვნების შემოღება. $m \times n$ რიცხვთა ერთობლიობას, განლაგებულს სტრიქონებისა და სვეტების მქონე ცხრილის სახით, მატრიცა ეწოდება და აღინიშნება $A = (a_{ij})$.

$$A = (a_{ij}) = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

a_{ij} რიცხვები მატრიცის ელემენტებია. თუ $m = n$, მატრიცა კვადრატულია. მატრიცას, რომელიც მხოლოდ ერთი სვეტისაგან შედგება ($m \times 1$), ვექტორ-სვეტი ეწოდება, ხოლო ვექტორ-სტრიქონი — მატრიცას, რომელიც ერთი სტრიქონისაგან შედგება.

კვადრატულ მატრიცებს შორის საინტერესოა დიაგონალური მატრიცა, როდესაც მატრიცის ყველა ელემენტი ნულია, გარდა მთავარ დიაგონალზე მდგომი ელემენტებისა

$$(k_1 \ k_2 \ \dots \ k_n) = \begin{pmatrix} k_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & k_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & k_n \end{pmatrix} \quad (1.61)$$

ეს მატრიცა შეესაბამება შემდეგ გარდაქმნას: $x_i' = k_i x_i (i = 1 \dots n)$. ორი დიაგონალური მატრიცის ნამრავლი არ არის დამოკიდებული თანამრავლების მიმდევრობისაგან

$$(k_1, k_2 \dots k_n)(d_1 \dots d_n) = (k_1 d_1, k_2 d_2 \dots k_n d_n);$$

კერძოდ, თუ $k_1=k_2=\dots=k_n=k$, მივიღებთ

$$(k, k, \dots, k) = \begin{pmatrix} k & 0 & \dots & 0 \\ 0 & k & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & k \end{pmatrix} \quad (1.62)$$

ამ მატრიცის საშუალებით ხდება გარდაქმნა $x_i' = kx_i$ ($i=1,2,3$). ერთეულოვანი მატრიცა დიაგონალური მატრიცის კერძო შემთხვევას წარმოადგენს და აღინიშნება J ასოთი

$$J = (\delta_{ij}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & & & 1 \end{pmatrix} \quad (1.63)$$

სამკუთხა მატრიცები, რომელთა a_{ij} ელემენტები ნულის ტოლია, როცა $i > j$ ან პირიქით.

თუ მოცემულია ორი მატრიცა $A = (a_{ij})$ და $B = (b_{ij})$, რომლებსაც აქვთ ერთნაირი რაოდენობის სვეტები და ერთნაირი რაოდენობის სტრიქონები, მაშინ $A+B$ ჯამი განისაზღვრება ტოლობით

$$A+B = (a_{ij} + b_{ij}); \quad (1.64)$$

ასევე $A = (a_{ij})$ მატრიცის k რიცხვზე ნამრავლი განმარტებულია ტოლობით

$$kA = (ka_{ij}). \quad (1.65)$$

აღნიშნულ ოპერაციებს ახასიათებს კომუტატიურობა, ასოციაციურობა და შეკრების ოპერაციის დისტრიბუტობა რიცხვზე გამრავლების მიმართ, ე. ი.

$$A+B = B+A;$$

$$(A+B)+C = A+(B+C);$$

$$k(A+B) = kA + kB.$$

ახლა განვიხილოთ მატრიცები $A = (a_{ij})$ და $B = (b_{ij})$, სადაც პირველი მატრიცის სვეტების რაოდენობა უდრის მეორე მატრიცის სტრიქონების რაოდენობას. მაშინ AB ნამრავლი წარმოადგენს ისეთ C მატრიცას, რომლის c_{ij} ელემენტი არის A მატრიცის i -ური სტრიქონისა და B მატრიცის j -ური სვეტის ელემენტების ნამრავლთა ჯამი, ე. ი.

$$c_{ij} = a_{ik} b_{kj}. \quad (1.66)$$

ამრიგად, AB მატრიცის სტრიქონების რაოდენობა A მატრიცის სტრიქონების რაოდენობის ტოლია, ხოლო სვეტების რაოდენობა — B მატრიცის სვეტების რაოდენობის ტოლი.‡

ცხადია, გამრავლების ოპერაცია არ არის კომუტატიური, ე. ი. საზოგადოდ $AB \neq BA$, მეტიც, შეიძლება ისიც, რომ AB -ს ქონდეს აზრი, ხოლო BA -ს არა.

კერძოდ, როდესაც პირველი მატრიცა ვექტორ-სტრიქონია, ხოლო მეორე — ვექტორ-სვეტი. მაშინ ნამრავლი იქნება სკალარი. მაგალი-

თად, $A = (a_1, a_2, a_3)$; $B = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix}$, მაშინ $AB = a_1b_1 + a_2b_2 + a_3b_3$ წარ-

მოადგენს ორი ვექტორის სკალარულ ნამრავლს. ასევე, წრფივი გარდაქმნები (1.3) $x'_i = a_{ij}x_j$ შეიძლება წარმოვიდგინოთ მატრიცების სახით:

$$\begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \quad \text{ან} \quad \begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

ან კიდევ უფრო მოკლედ $x' = Ax$.

აღვნიშნოთ მატრიცების გადამრავლების კიდევ ერთი თვისება. ჩვეულებრივი a და b რიცხვების გადამრავლების დროს ტოლობა $ab = 0$ სრულდება, როდესაც a ან b ან ორივე ერთად ნულის ტოლია. მატრიცების შემთხვევაში ნულოვანი მატრიცა (მატრიცა, რომლის ყველა ელემენტი ნულის ტოლია შეიძლება მივიღოთ ორი მატრიცის გადამრავლების შედეგად მაშინაც, როდესაც ორივე თანამამრავლი ნულისაგან განსხვავდება, მაგალითად

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

შეიძლება აგრეთვე ჩვენება, რომ $JA = AJ = A$. ასეთი სახით განმარტებული გამრავლების ოპერაციას ახასიათებს შემდეგი თვისებები:

$$(A \ B)C = A(BC);$$

$$(A+B)C = AC+BC.$$

მატრიცას, რომელშიც სტრიქონები შეცვლილია მისივე სვეტებით ან, პირიქით, აღებული მატრიცის ტრანსპონირებული მატრიცა ეწოდება. A მატრიცის ტრანსპონირებული მატრიცა A^+ აღინიშნება. ელემენტებს შორის ადგილი აქვს ტოლობას $a_{ij}^+ = a_{ji}$.

შეიძლება ჩვენება, რომ

$$(AB)^+ = B^+A^+. \quad (1.67)$$

ცხადია, რომ ვექტორ-სვეტის ტრანსპონირებული მატრიცა ვექტორ-სტრიქონი იქნება და, პირიქით.

კვადრატულ A მატრიცას ეწოდება სიმეტრიული, თუ $a_{ij} = a_{ji}$.

სიმეტრიული მატრიცა თავისი ტრანსპონირებულის ტოლია, ე. ი. $A = A^+$.

თუ $A = (a_{ij})$ კვადრატული მატრიცაა, მაშინ დეტერმინანტს

$$\det A = \Delta = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix}$$

A მატრიცის დეტერმინანტი ეწოდება. იმ შემთხვევაში, როდესაც $\det A \neq 0$, A მატრიცა არასაკუთრივია. ცხადია, თუ A და B ერთნაირი რიგის კვადრატული მატრიცებია, მაშინ

$$\det(AB) = \det A \cdot \det B. \quad (1.68)$$

ორი მატრიცის ნამრავლს დეტერმინანტი უდრის ამ მატრიცების დეტერმინანტების ნამრავლს.

ავიღოთ არასაკუთრივი მატრიცა A . თუ B მატრიცა აკმაყოფილებს პირობას

$$A \cdot B = J,$$

მაშინ მას A მატრიცის შებრუნებული მატრიცა ეწოდება და A^{-1} -ით აღინიშნება. ამრიგად,

$$A \cdot A^{-1} = J; \quad (1.69)$$

შევნიშნოთ, რომ

$$(A^{-1})^{-1} = A; \quad (A \cdot B)^{-1} = B^{-1} \cdot A^{-1}. \quad (1.70)$$

ახლა განვიხილოთ $A = (a_{ij})$ კვადრატული მატრიცა, რომლის დეტერმინანტია

$$\Delta = \begin{vmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix}$$

თუ A_{ij} -ით აღვნიშნავთ a_{ij} ელემენტის შესაბამის ალგებრულ დამატებას, მაშინ მატრიცას

$$A^* = \begin{vmatrix} A_{11} & A_{21} & \dots & A_{n1} \\ A_{12} & A_{22} & \dots & A_{n2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_{1n} & A_{2n} & \dots & A_{nn} \end{vmatrix}$$

A მატრიცის მიკავშირებული მატრიცა ეწოდება. თუ ვისარგებლებთ დეტერმინანტის თვისებებით, მივიღებთ

$$A \cdot A^* = \begin{pmatrix} \Delta & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \Delta & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \Delta \end{pmatrix} = \Delta \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} = \Delta \cdot J;$$

სადაც Δ არის A მატრიცის დეტერმინანტი, მაშასადამე

$$A^{-1} = \frac{A^*}{\Delta}. \quad (1.71)$$

ყოველ არასაკუთრივ მატრიცას აქვს თავისი შებრუნებული მატრიცა. ამიტომ შებრუნებული მატრიცის ელემენტისათვის გვექნება

$$(A^{-1})_{ij} = \frac{A_{ji}}{\Delta}. \quad (1.72)$$

მაგალითად, თუ გვაქვს მესამე რიგის კვადრატული მატრიცა $A = (a_{ij})$, რომლის დეტერმინანტი $\Delta \neq 0$, არსებობს მისი შებრუნებული A^{-1} მატრიცა.

$$A^{-1} = \frac{1}{\Delta} \begin{pmatrix} a_{22}a_{33} - a_{32}a_{23}, & a_{13}a_{32} - a_{12}a_{33}, & a_{12}a_{23} - a_{22}a_{13} \\ a_{23}a_{31} - a_{21}a_{33}, & a_{11}a_{33} - a_{13}a_{31}, & a_{13}a_{21} - a_{11}a_{23} \\ a_{21}a_{32} - a_{22}a_{31}, & a_{12}a_{31} - a_{11}a_{32}, & a_{11}a_{22} - a_{21}a_{12} \end{pmatrix}$$

განვიხილოთ ე. წ. ორთოგონალური მატრიცები. კვადრატულ $A = (a_{ij})$ მატრიცას ვუწოდოთ ორთოგონალური, თუ

$$a_{ik}a_{jk} = \delta_{ij} \quad (i, j = 1, 2, 3).$$

ცხადია, კოორდინატთა გარდაქმნის მატრიცა, რომელსაც შემდეგში L -ით აღვნიშნავთ, წარმოადგენს ორთოგონალურ მატრიცას. შეიძლება დავამტკიცოთ, რომ ორთოგონალური მატრიცის თავის ტრანსპონირებულზე ნამრავლი უდრის ერთეულოვან მატრიცას

$$LL^* = J, \quad (1.73)$$

ე. ი. ორთოგონალური მატრიცის ტრანსპონირებული და შებრუნებული მატრიცები ერთმანეთის ტოლია. თუ L_1 და L_2 ორთოგონალური მატრიცებია, მათი ნამრავლი L_1L_2 აგრეთვე ორთოგონალურ მატრიცას წარმოადგენს

$$(L_1L_2)^* = (L_2L_1)^* = L_2^*L_1^* = L_2^*L_1^* = J.$$

მატრიცების ღაჟანა დიაგონალურ სახეზე

ზოგჯერ სასურველია მატრიცის დაყვანა დიაგონალურ სახეზე. ვთქვათ, $\vec{i}_1, \vec{i}_2, \vec{i}_3$ ბაზისში გვაქვს წრფივი გარდაქმნა, რომელსაც \vec{x} ვექტორი გადაყავს \vec{y} ვექტორად; გარდაქმნის მატრიცა იყოს A , ე. ი. $\vec{y} = A\vec{x}$ ან მატრიცული სახით $y = Ax$.

მოვახდინოთ კოორდინატთა გარდაქმნა და $\vec{i}_1, \vec{i}_2, \vec{i}_3$ ბაზისიდან გადავიღეთ $\vec{i}'_1, \vec{i}'_2, \vec{i}'_3$ ბაზისში. საინტერესოა როგორ სახეს მიიღებს $\vec{y} =$

$= \vec{Ax}$ გარდაქმნა ახალ ბაზისში, თუ კოორდინატთა გარდაქმნის მატრიცა არ.ს L , ხოლო \vec{x} და \vec{y} ვექტორები ახალ ბაზისში გადადიან \vec{x}' და \vec{y}' ვექტორებად, ე. ი.

$$x' = Lx; y' = Ly.$$

აქედან

$$x = L^{-1}x', y' = LAx = LAL^{-1}x'$$

ამგვარად, გამოსავალ ბაზისში წრფივ $y = Ax$ გარდაქმნას $\vec{i}'_1, \vec{i}'_2, \vec{i}'_3$ ბაზისში ეთანადება წრფივი გარდაქმნა

$$y' = LAL^{-1}x'. \quad (1.74)$$

LAL^{-1} მატრიცას ეწოდება A მატრიცის მსგავსი მატრიცა. როგორც ჩანს, ერთსა და იმავე წრფივ გარდაქმნას სხვადასხვა ბაზისში მსგავსი მატრიცები აწარმოებენ.

შიძლება მოიძებნოს A მატრიცის ელემენტებისაგან შემდგარი ისეთი გამოსახულება, რომელიც ერთნაირი იქნება მსგავსი მატრიცებისათვის. ასეთ გამოსახულებებს ეწოდება ინვარიანტები მსგავსების გარდაქმნის მიმართ. მატრიცის დეტერმინანტი ერთ-ერთ ასეთ ინვარიანტს წარმოადგენს. მსგავსი მატრიცების სხვა ინვარიანტობის მოსაძებნად A მატრიცის ყველა დიაგონალურ ელემენტს გამოვაკლოთ რაიმე λ პარამეტრი და შევადგინოთ ასეთი მატრიცის დეტერმინანტი, მაშინ n განზომილებაანი შემთხვევისათვის მივიღებთ

$$\Delta = \begin{vmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} - \lambda \end{vmatrix}$$

განტოლებას $\Delta = |A - \lambda J| = 0$ მატრიცის მახასიათებელი განტოლება (საუკუნეობრივი განტოლება) ეწოდება. ამ განტოლების მარცხენა მხარე წარმოადგენს n -ური რივის პოლინომს λ პარამეტრის მიმართ.

$$\lambda^n + S_1 \lambda^{n-1} + \dots + S_{n-1} \lambda + S_n = 0.$$

აქ S_n თავისუფალი წევრია, რომელიც A მატრიცის დეტერმინანტს უდრის. S_1 კოეფიციენტი დიაგონალური წევრების ჯამია; $S = a_{11} + a_{22} + \dots + a_{nn}$. მას მატრიცის კვალი ეწოდება. პოლინომის ფესვები $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ A მატრიცის მახასიათებელ რიცხვებს ან მის საკუთარ მნიშვნელობებს წარმოადგენენ. თუ ასეთივე მახასიათებელ განტოლებას შევადგენთ მსგავსი LAL^{-1} მატრიცისათვის, შიძლება დამტკიცდეს, რომ

$$|LAL^{-1} - \lambda J| = |A - \lambda J|.$$

ეს იმას ნიშნავს, რომ მსგავს მატრიცებს აქვთ ერთნაირი მახასიათებელი განტოლებები და მაშასადამე ერთნაირი მახასიათებელი რიცხვები. პოლინომების თანხვედრიდან გამომდინარეობს აგრეთვე მათი ყველა კოეფიციენტის ინვარიანტობა მსგავსი გარდაქმნების მიმართ. კერძოდ, მატრიცების კვალიც ინვარიანტულ სიდიდეს წარმოადგენს.

ახლა წარმოვიდგინოთ, რომ მოცემულია $x' = Ax$ გარდაქმნის A მატრიცა და ჩვენ გვინდა მოვინახოთ ისეთი კოორდინატთა სისტემა, სადაც ამ მატრიცას ექნება დიაგონალური სახე. ეს იმას ნიშნავს, რომ უნდა მოინახოს ისეთი მატრიცა L , რომელიც ახალ კოორდინატთა სისტემაში მოახდენს სივრცის გარდაქმნას A მატრიცის მსგავსად და ამავე დროს იქნება დიაგონალური. ასეთი მატრიცისათვის შეიძლება დაიწეროს $LAL^{-1} = \lambda$, სადაც λ დიაგონალური მატრიცაა ($\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$). აქედან მივიღებთ $LA = \lambda L$. ეს მატრიცული ტოლობა კომპონენტებში წარმოადგენს განტოლებათა სისტემას

$$L_{ik}a_{kj} = \lambda_i L_{ij} \quad (\text{აქ შეჯამება } i\text{-ინდექსით არ ხდება)}$$

ან

$$L_{ik}(a_{kj} - \lambda_j \delta_{kj}) = 0.$$

დავკმაყოფილოთ სამგანზომილებიანი შემთხვევით. დავაფიქსიროთ i -ინდექსი, ხოლო j -ინდექსს მივცეთ მნიშვნელობა 1, 2, 3. მაშინ მივიღებთ წრფივ და ერთგვაროვან განტოლებათა სისტემას L_{i1}, L_{i2}, L_{i3} მიმართ:

$$\begin{aligned} (a_{11} - \lambda_i)L_{i1} + a_{21}L_{i2} + a_{31}L_{i3} &= 0; \\ a_{12}L_{i1} + (a_{22} - \lambda_i)L_{i2} + a_{32}L_{i3} &= 0; \\ a_{13}L_{i1} + a_{23}L_{i2} + (a_{33} - \lambda_i)L_{i3} &= 0. \end{aligned} \quad (1.75)$$

იმისათვის, რომ ამ სისტემას ქონდეს ნულისაგან განსხვავებული ამოხსნა, L_{i1}, L_{i2}, L_{i3} ელემენტების მიმართ აუცილებელი და საკმარისია, რომ სისტემის დეტერმინანტი უდრიდეს ნულს

$$\Delta = \begin{vmatrix} a_{11} - \lambda_i & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda_i & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} - \lambda_i \end{vmatrix} = 0. \quad (1.76)$$

როგორც ვიცით, (1.76) განტოლება A მატრიცის მახასიათებელ განტოლებას წარმოადგენს, ხოლო ამ განტოლების ფესვები მატრიცის მახასიათებელი რიცხვებია ან მისი საკუთარი მნიშვნელობები. ეს განტოლება მოკლედ ასე შეიძლება ჩაიწეროს

$$(a_{ij} - \lambda \delta_{ij}) = 0. \quad (1.77)$$

(1.77) განტოლება λ -ს მიმართ წარმოადგენს მესამე რიგის პოლინომს. მისი სამი ფესვი $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ A მატრიცის საკუთარი მნიშვნელობებია. თუ მატრიცა სიმეტრიულია, საუკუნოვანი განტოლების ფესვები ნამდვი-

ლი რიცხვებია. ფესვის თითოეული მნიშვნელობისათვის (1.75) განტოლებათა სისტემიდან განისაზღვრება L_{i1}, L_{i2}, L_{i3} ($i=1, 2, 3$). თუ ამ ელემენტებს ჩავთვლით ვექტორის კომპონენტებად, მაშინ ფესვის სამი მნიშვნელობისათვის მივიღებთ ვექტორებს, რომლებსაც მატრიცის საკუთარი ვექტორები ეწოდება. საზოგადოდ, ყოველ λ_i საკუთარ მნიშვნელობას შეიძლება ეთანადებოდეს უამრავი (ერთმანეთის პარალელური) საკუთარი ვექტორი, ამიტომ ყოველთვის არის შესაძლებელი λ_i ფესვის შესაბამისი საკუთარი ვექტორის ნორმირება ისე, რომ ადგილი ქონდეს ტოლობას

$$L^2_{i1} + L^2_{i2} + L^2_{i3} = 1.$$

ამასთანავე, შეიძლება დამტკიცდეს, რომ სხვადასხვა საკუთარი მნიშვნელობების შესაბამისი საკუთარი ვექტორები ურთიერთმართობები არიან და, მაშასადამე, A მატრიცის საკუთარ ვექტორთა სისტემა წრფივად დამოუკიდებელია. ახლა შესაძლებელია შედგენილ იქნას A მატრიცის მსგავსი მატრიცა LAL^{-1} , რომელიც დიაგონალური იქნება, თუ კორდინატთა ახალი სისტემის ბაზისად, ე. ი. $\vec{i}_1, \vec{i}_2, \vec{i}_3$ ვექტორებად მივიღებთ A მატრიცის ნორმირებულ საკუთარ ვექტორებს. მაშინ ამ მატრიცის დიაგონალზე მდგომი ელემენტები A მატრიცის მახასიათებელი $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ რიცხვები იქნება.

$$LAL^{-1} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix} \quad (1.78)$$

ზოგიერთი გარდაქმნის წარმოშობა მატრიცების საშუალებით

ა) ფიზიკური თვისება ნებისმიერი მიმართულებით.

ზემოთ ნაჩვენები იყო, რომ ფიზიკური თვისების გამომხატველი სიდიდის მნიშვნელობა, რომელიც ტენზორულ ხასიათს ატარებს, ნებისმიერი მიმართულებით განისაზღვრება (1.49) ფორმულით

$$T_{ij} \alpha_i \alpha_j = T.$$

წარმოვადგინოთ ეს გამოსახულება მატრიცული სახით. ამისათვის გადავწეროთ ის ისე, რომ ერთნაირი ინდექსები მოთავსდნენ ერთმანეთის გვერდით

$$T = \alpha_i T_{ij} \alpha_j.$$

ახლა შესაძლებელია გადავიღოთ მატრიცებზე (მატრიცების გადამრავლების წესის გამოყენებით)

$$T = \alpha_i T \alpha, \quad (1.79)$$

სადაც α_i წარმოადგენს α -ს ტრანსპონირებულ მატრიცას. გაშლილი სახით, (1.79) შეიძლება გადაწეროთ ასეთი ფორმით

$$T = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix}$$

ბ) კოორდინატთა ლერძების შემობრუნება.

კოორდინატთა ლერძების შემობრუნების შედეგად წერტილის კოორდინატების $x'_i = \alpha_{ij}x_j$ გარდაქმნა შეიძლება მატრიცების საშუალებით ასე დაიწეროს

$$\begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \quad \text{ან} \quad x' = Ax.$$

ასევე, ვექტორის გარდაქმნა $P'_i = \alpha_{ij}P_j$ მიიღებს სახეს

$$P' = AP.$$

x' , x , P' , P — ვექტორ-სვეტები.

თუ ადგილი აქვს ორ ერთმანეთის მიმდევრობით შემობრუნებას, შეიძლება გამოვიყენოთ (1.18) ფორმულა ორი თანამიმდევრული გარდაქმნისათვის

$$x' = BAx;$$

აქ BA მატრიცული ნამრავლია.

ასევე შეიძლება მატრიცული სახე მიეცეს მეორე რანგის ტენზორის კომპონენტების გარდაქმნის (1.35) ფორმულას

$$P_{ij}' = a_{ik}a_{jm}P_{km}.$$

იმისათვის, რომ შესაძლებელი გახდეს ამ შემთხვევაში მატრიცების გადამრავლების წესის გამოყენება, საჭიროა წევრები გადავაჯგუფოთ ისე, რომ ერთნაირი ინდექსები ერთიმეორის გვერდზე აღმოჩნდნენ. ამისათვის საკმარისია P_{km} და a_{jm} გადავადგილოთ და მოვახდინოთ a_{jm} -ის ტრანსპონირება, მაშინ

$$P_{ij}' = a_{ik}P_{km}a_{mj}.$$

ეს განტოლება შეიძლება ჩაიწეროს მატრიცების სახით

$$P' = APA_t. \quad (1.80)$$

§ 5. ჯგუფთა თეორიის ელემენტები

ჯგუფი ეწოდება a, b, c, d, \dots ელემენტების G სიმრავლეს, რომელიც აკმაყოფილებენ შემდეგ პირობებს:

1. განსაზღვრულია გარკვეული ოპერაცია, რომელსაც პირობით ეწოდება გამრავლება. ამ ოპერაციის შედეგად G სიმრავლის ყოველი ორი ელემენტისაგან მიიღება ახალი ელემენტი, რომელიც იმავე სიმრავლეს ეკუთვნის, ეს ასე ჩაიწერება

$$a \cdot b = c;$$

2. გამრავლების ოპერაცია ექვემდებარება ასოციაციურობის კანონს, ე. ი.

$$a(bc) = (ab)c;$$

3. G სიმრავლის ყველა ელემენტს შორის არსებობს ერთი და მხოლოდ ერთი ისეთი ელემენტი e , რომ სიმრავლის ნებისმიერი a ელემენტისათვის სრულდება ტოლობა

$$ea = ae = a;$$

e ელემენტს ნეიტრალური ან ერთეულოვანი ელემენტი ეწოდება;

4. სიმრავლის ნებისმიერი a ელემენტისათვის არსებობს მისი შებრუნებული (ან მოპირდაპირე) ელემენტი a^{-1} ისეთი, რომ

$$a \cdot a^{-1} = a^{-1} \cdot a = e.$$

თუ ჯგუფში ელემენტების რიცხვი სასრულია, მას სასრული ჯგუფი ეწოდება, ელემენტების უსასრულო რიცხვის დროს ჯგუფიც უსასრულოა. სასრული ჯგუფის ელემენტების რიცხვს ამ ჯგუფის რიგი ეწოდება.

ოპერაცია, რომელიც შემოღებულია ჯგუფში გამრავლების სახელწოდებით, შეიძლება წარმოადგენდეს ჩვეულებრივ გამრავლებას ან შეკრებას, თუ ჯგუფის ელემენტები რიცხვებია, ან იყოს რაიმე უფრო რთული ოპერაცია, თუ ჯგუფის ელემენტებს სხვა რთული ბუნება აქვთ. განვიხილოთ ჯგუფების რამდენიმე მაგალითი.

1. ყველა მთელი რიცხვის ერთობლიობა ადგენს ჯგუფს. ჯგუფური ოპერაცია, რომელსაც გამრავლება ეუწოდეთ, წარმოადგენს ჩვეულებრივ შეკრებას. ნეიტრალური ელემენტი არის რიცხვი ნული. ყოველ დადებით რიცხვს ეთანადება მისი მოპირდაპირე — უარყოფითი.

2. ყველა მთელი ლუწი რიცხვები და ნული ადგენენ ჯგუფს. ჯგუფური ოპერაციაა შეკრება.

3. რაციონალური რიცხვების ერთობლიობა ნულის გამოკლებით ადგენს ჯგუფს. ჯგუფური ოპერაციაა გამრავლება.

4. ჯგუფის ელემენტებია n -განზომილებიანი სივრცის წრფივი ორთოგონალური გარდაქმნები $x_i' = a_{ij}x_j$ ($i, j = 1, 2, \dots, n$). როგორც ვიცით,

ასეთ შემთხვევაში შებრუნებული გარდაქმნაც იქნება წრფივი და ორ-
თოგონალური. ერთეულოვან ელემენტად ვიღებთ იგივეურ გარდაქმნას,
რომელიც სივრცეს ტოვებს უცვლელად ($x_i' = x_i$). ნებისმიერი ორი
გარდაქმნის თანმიმდევრული მოქმედება გვაძლევს ახალ გარდაქმნას,
რომლის მატრიცა მიიღება აღებული გარდაქმნის მატრიცების გადამ-
რავლების წესით (1,17). ამ ჯგუფს სრული ორთოგონალური ჯგუფი ეწო-
დება.

5. სივრცის ნებისმიერ ბრუნვათა ერთობლიობა უძრავი ღერძის
ირგვლივ ბრუნვის დროს შეადგენს ჯგუფს. თუ გვაქვს ორი შემობრუ-
ნება α და β კუთხით, ამ შემობრუნებათა ნამრავლი იქნება შემობრუნება
 $\alpha + \beta$ კუთხით. ერთეულოვანი ელემენტის როლს აქ ასრულებს ბრუნვა
 0° ან $(2\pi n)^\circ$ კუთხით, სადაც n მთელი რიცხვია.

6. არასაკუთრივი მატრიცების ერთობლიობა. ჯგუფური ოპერაციაა
მატრიცების გადამრავლება. ამ ჯგუფის ერთეულოვანი ელემენტი იქ-
ნება n -ური რიგის დიაგონალური მატრიცა, რომლის ყველა დიაგონა-
ლური ელემენტი ერთის ტოლია. შებრუნებული მატრიცის ელემენტები
მიიღება (1.72) ფორმულის მიხედვით.

7. n საგნის ნებისმიერი გადანაცვლებები $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \dots & n \\ P_1 & P_2 & P_3 & \dots & P_n \end{pmatrix}$, რო-
მელთა რიცხვი შეადგენს $n!$, აგრეთვე შეადგენენ ჯგუფს.

8. ჯგუფის ელემენტებია $e=1$ და $a=-1$. ჯგუფური ოპერაციაა გამ-
რავლება. მართლაც, $e \cdot e = e$, $ea = a$, $a \cdot a = a^2 = 1 = e$. 'მაშასადამე,
 $a = a^{-1}$, ე. ი. a ელემენტი თანხვდება თავის შებრუნებულს.

თუ ელემენტების გადამრავლების შედეგი არ არის დამოკიდებული
თანამამრავლების მიმდევრობისაგან, ე. ი. ყველა ელემენტისათვის ად-
გილი აქვს ტოლობას

$$ab = ba,$$

ამბობენ, რომ ჯგუფი კომუტატურია (აბელის ჯგუფი).

ჯგუფის განსაზღვრის თანახმად, ელემენტების ნებისმიერი რიცხვის
ნამრავლი ისევ ჯგუფის ელემენტს გვაძლევს, კერძოდ, თუ a ელემენტს
თავისთავზე გადავამრავლებთ, მივიღებთ a^2 ელემენტს; $a^2 = a \cdot a$, ამი-
ტომ მომავალში a^2 ელემენტში ვიგულისხმებთ a ელემენტის თავისთავზე
 n -ჯერ გადამრავლების შედეგს. ასევე, უარყოფითი ხარისხებისათვის

$$a^{-m} = (a^{-1})^m = (a^m)^{-1}.$$

თუ a ელემენტის ნებისმიერი ხარისხისათვის a , a^2 , $a^3 \dots a^n$ და ასე
უსასრულოდ, ვიღებთ განსხვავებულ, მნიშვნელობებს, ე. ი. ჯგუფის
ახალ წევრებს, მაშინ ამბობენ, რომ a ელემენტი უსასრულო რიგისაა.
უმცირეს რიცხვს p -ს, რომლისთვისაც $a^p = e$, a ელემენტის რიგი ეწო-
დება. ეს იმას ნიშნავს, რომ თუ a ელემენტი p რიგისაა, მიმდევრობაში

$a, a^2 \dots a^n = e$ ყველა ელემენტი ერთიმეორისაგან განსხვავდება, ამ მიმდევრობას a ელემენტის პერიოდი ეწოდება.

თუ ჯგუფის განხილვის დროს ჩვენ არ გვაინტერესებს მისი ელემენტების კონკრეტული ბუნება, ჯგუფს აბსტრაქტული ეწოდება.

განვიხილოთ რამდენიმე მაგალითი:

პირველი რიგის ჯგუფი შეიცავს მხოლოდ ერთ ელემენტს. ეს იქნება ერთეულოვანი e ელემენტი; $e = e$.

მეორე რიგის აბსტრაქტულ ჯგუფში უნდა იყოს ორი ელემენტი. ერთეულოვანი e და a , მაშინ: $ae = a$ და $a \cdot a = a^2$, ეს არ შეიძლება თანხვედბოდეს a -ს, რადგან მაშინ $a = e$, ამიტომ $a^2 = e$ და, მაშასადამე, $a = a^{-1}$.

მეორე რიგის ჯგუფის კონკრეტული მაგალითისათვის წრფივი ორთოგონალური გარდაქმნებიდან ავირჩიოთ ორი გარდაქმნა: იგივეური გარდაქმნა $x_i' = x_i$ და გარდაქმნა $x_i' = -x_i$, რომელიც ახდენს წერტილის ინვერსიას კოორდინატთა სათაის მიმართ. ეს ორი გარდაქმნა ქმნის მეორე რიგის ჯგუფს. თუ პირველს ავირჩევთ e ერთეულოვან ელემენტად, მაშინ მეორე იქნება ელემენტი a . ცხადია, $a \cdot a = a^2$ მიიყვანს წერტილს საწყის მდგომარეობაში და, მაშასადამე, e გარდაქმნის ტოლი იქნება.

განვიხილოთ კიდევ ერთი მაგალითი. ავიღოთ მესამე რიგის აბსტრაქტული ჯგუფი. ასეთი ჯგუფი შედგება სამი ელემენტისაგან: e, a, b . ერთეულოვანი ელემენტის განსაზღვრიდან: $ea = a, eb = b$; ამიტომ $a \cdot b$ არ შეიძლება უდრიდეს a ან b -ს, ვინაიდან მაშინ $a = e$ და $b = e$, რაც შეუძლებელია. რჩება ერთი შესაძლებლობა — $a \cdot b = e$. ახლა განვიხილოთ $a \cdot a = a^2$. ეს არ შეიძლება უდრიდეს e -ს, ვინაიდან, თუ $a \cdot a = e, a = b$, ამიტომ $a^2 = b$. აქედან გამოდის, რომ $a^3 = a^2 \cdot a = b \cdot a = e$. ხოლო $b^2 = a^2, a^2 = a^3, a = ea = a$. ამგვარად, მესამე რიგის ჯგუფი შედგება ელემენტებისაგან: $a, a^2, a^3 = e$.

ჯგუფს, რომლის ყველა ელემენტი წარმოადგენს ერთი რომელიმე ელემენტის ხარისხებს, ციკლური ჯგუფი ეწოდება. ამ შემთხვევაში ჩვენ გვაქვს მესამე რიგის ციკლური ჯგუფი, რომლის კონკრეტული მაგალითია სამგანზომილებიანი სივრცის ბრუნვა Z ლერძის ირგვლივ, $0, 120$ და 240° ; ან ტოლგვერდა სამკუთხედის ბრუნვა სიბრტყეში, თავისთავთან შეთავსებამდე და ა. შ. ასევე შეიძლება ჩვენება, რომ კვადრატის ან სწორი ექვსკუთხედის ბრუნვა თავისთავთან შეთავსებამდე ეთანადება მეოთხე და მეექვსე რიგის ციკლურ ჯგუფებს. ელემენტს, რომლის ახარისხებით იქმნება დანარჩენი ელემენტები, ჯგუფის შემქმნელი ელემენტი ეწოდება.

ჯგუფში შემავალი ელემენტების ურთიერთქმედების, ან ჯგუფური ოპერაციის მკაფიოდ გამოვლინება შეიძლება ჯგუფური ცხრილის საშუალებით.

მაგალითად, მესამე რიგის ჯგუფისათვის გვექნება:

	e a b
e	e a b
a	a b e
b	b e a

აქ ზემო სტრიქონში მოცემულია ელემენტები, რომელნიც გადამრავლების დროს დგანან მარჯვნივ, ხოლო მარცხენა სვეტში — ის ელემენტები, რომლებიც გადამრავლების დროს დგანან მარცხნივ. მეოთხე რიგის აბსტრაქტული ჯგუფის e, a, b, c ელემენტებისათვის შესაძლებელია ორი სხვადასხვა სტრუქტურის მქონე ჯგუფური ცხრილის შედგენა. ერთი მათგანი არის მეოთხე რიგის ციკლური $a, a^2, a^3, a^4=e$ ჯგუფი ცხრილით (ცხრილი მოცემულია შემოკლებული ჩაწერით, გამოტოვებულია პირველი სტრიქონი და პირველი სვეტი)

e	a b c
a	b c e
b	c e a
c	e a b

და ჯგუფი, რომელიც V ასოთი აღინიშნება და კლეინის მეოთხე რიგის ჯგუფს წარმოადგენს. მისი ცხრილია

e	a b c
a	e c b
b	c e a
c	b a e

ორივე ეს ჯგუფი კომუტატურია.

იზომორფული და აომომორფული ჯგუფები

ავიღოთ ორი G და G' ჯგუფი $g_1 \dots g_n$ და $g'_1 \dots g'_n$ ელემენტებით და დაუშვათ, რომ ელემენტებს შორის დამყარებულია ცალსახა ურთიერთშესაბამისობა.

$$g_1 \leftarrow \rightarrow g'_1 \quad g_2 \leftarrow \leftarrow g'_2.$$

და ა. შ. ყველა ელემენტისათვის.

თუ G და G' ჯგუფში არსებული ჯგუფური ოპერაციებისათვის გამრავლების შედეგი G ჯგუფის ნებისმიერ ორ ელემენტს შორის ინარჩუნებს თავის სახეს G' ჯგუფის შესაბამისი ელემენტებისათვის, ე. ი.

$$g_1 \cdot g_2 = g_3 \leftarrow \rightarrow g'_1 \cdot g'_2 = g'_3 \quad (1.81)$$

ამბობენ, რომ ადგილი აქვს იზომორფულ ურთიერთშესაბამისობას, ხოლო ჭგუფებს, რომელთა ელემენტებს შორისაც არსებობს იზომორფული შესაბამისობა, იზომორფული ეწოდება. ამ განსაზღვრის თანახმად, იზომორფულ ჭგუფებს ერთნაირი ჭგუფური ცხრილები უნდა ქონდეთ, მხოლოდ საკმარისია ერთი ჭგუფის ელემენტების აღნიშვნები შეიცვალოს მეორე ჭგუფის ელემენტებას აღნიშვნებით. პირაქით, ჭგუფებს, რომლებსაც ერთნაირი ჭგუფური ცხრილები აქვთ, იზომორფული ჭგუფებაა და, მაშასადამე, როგორც აბსტრაქტული ჭგუფები, ისინი ერთიმეორისაგან არაფრით არ განსხვავდებიან. იზომორფული ჭგუფები ერთნაირი სტრუქტურით ხასიათდებიან.‡

‡ცხადია, იზომორფული ჭგუფები უნდა იყვნენ ერთი და იგივე რიგის. ამასთანავე, შეიძლება დამტკიცდეს, რომ ერთი ჭგუფის ერთეულოვანი (ნეიტრალური) ელემენტი შეესაბამება მეორე ჭგუფის ერთეულოვან ელემენტს და ელემენტებს ურთიერთმოპირდაპირე წყვილებს (ელემენტი და მისი მოპირდაპირე) შეესაბამება ასეთივე ურთიერთმოპირდაპირე ელემენტების წყვილები. მეორე ჭგუფში, ამიტომ ჰქონკრეტული ჭგუფის სტრუქტურას განხილვის შემთხვევაში პირველ რიგში არკვევენ რომელი აბსტრაქტული ჭგუფის იზომორფულია ეს ჭგუფი.

ჩვენ ქიერ განხილულა მაგალითებიდან ორთოგონალური გარდაქმნების ჭგუფი და ამ გარდაქმნების შესაბამისი მატრიცების ჭგუფი იზომორფულ ჭგუფება წარუადგენენ. ეს მეტად მნიშვნელოვანი ფაქტი საშუალებას მოგვცემს წრფივი ორთოგონალური გარდაქმნების ჭგუფები წარმოვიდგინოთ მატრიცების იზომორფული ჭგუფის საშუალებით.

ახლა განვიხილოთ ორი სხვადასხვა რიგის $G_1 (a_1, a_2 \dots)$ და $G_2 (b_1, b_2 \dots)$ ჭგუფი. G_1 ჭგუფი უფრო მაღალი რიგისაა, ვიდრე G_2 და ამიტომ G_2 ჭგუფს თათბულ ელემენტს შეიძლება შეესაბამებოდეს G_1 ჭგუფის ერთი ან რამდენიმე ელემენტი. თუ ეს შესაბამისობა ისეთია, რომ G_1 ჭგუფის ორი ნებისმიერი ელემენტის ნამრავლი შესაბამისი რჩება G_2 ჭგუფის შესაბამისი ორი ელემენტის ნამრავლთან, ამბობენ, რომ G_1 ჭგუფის ელემენტები ჰომომორფულად არიან გადასახული G_2 ჭგუფის ელემენტებზე, ე. ი. თუ

$$a_1 \rightarrow b_1, a_2 \rightarrow b_2, a_1 a_2 \rightarrow b_1 b_2 (a_1 a_2 \in G_1; b_1 b_2 \in G_2),$$

ჰომომორფული გადასახვა ცალმხრივია და არ მოითხოვს ცალსახა ურთიერთშესაბამისობას, როგორც ეს მოთხოვნილი იყო იზომორფულ ჭგუფებში. ამიტომ იზომორფიზმი წარმოადგენს ჰომომორფიზმის კერძო შემთხვევას.

განვიხილოთ მაგალითი:

G_1 იყოს ყველა რიცხვის ჭგუფი — $n, \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots, n$. ჭგუფური ოპერაცია ჩვეულებრივი შეკრებაა. ეს ჭგუფი უსასრულო რიგისაა.

საა. G_2 მეორე რიგის ჯგუფია, ელემენტებით a_0, a . ის მონაკვეთის თავისი ცენტრის ირგვლივ ბრუნვის ჯგუფის იზომორფულია, ე.ი. a_0 შეესაბამება ბრუნვას 0° და a — ბრუნვას 180° . ჯგუფურ ცხრილს ექნება სახე: $a_0 \quad a_0 = a_0; \quad a_0 \cdot a = a; \quad a \cdot a = a_0$. მოვახდინოთ G_1 ჯგუფის გადასახვა G_2 ჯგუფზე ისე, რომ G_1 ჯგუფის ყოველ ლუწ რიცხვს შეესაბამებოდეს a_0 ელემენტი G_2 ჯგუფში, ხოლო ყოველ კენტ რიცხვს — a ელემენტი. ასეთი გადასვლა ჰომომორფულია. მართლაც, ავიღოთ G_1 ჯგუფში ორი ნებისმიერი მთელი რიცხვი n და n' . ჯერ დავუშვათ, რომ ორივე რიცხვი ლუწია, მაშინ $n \quad n'$ აგრეთვე ლუწია. G_2 ჯგუფში მას შეესაბამება $a_0 \cdot a_0 = a_0$; ახლა, დავუშვათ, რომ n ლუწია, ხოლო n' — კენტი, მაშინ $n \cdot n' =$ იქნება კენტი და შივილებთ:

$$n \rightarrow a_0; \quad n' \rightarrow a; \quad n \quad n' \rightarrow a_0 \quad a = a.$$

ბოლოს განვიხილოთ შემთხვევა, როდესაც n და n' ორივე კენტია; მაშინ $n \cdot n'$ იქნება ლუწი:

$$n \rightarrow a; \quad n' \rightarrow a; \quad n \quad n' \rightarrow a \cdot a = a_0.$$

ჰომომორფიზმი

G ჯგუფის ელემენტების ქვესიმრავლეს, რომელიც თავისთავად ქმნის ჯგუფს იმავე ჯგუფური ოპერაციით, ქვეჯგუფი ეწოდება. ყოველ ჯგუფს აქვს ორი ტრივიალური ქვეჯგუფი: ჯგუფი, რომელიც შემდგება მხოლოდ ერთეულოვანი ელემენტისაგან, და მთლიანად G ჯგუფი; ამ ქვეჯგუფებს არასაკუთრივი ქვეჯგუფები ეწოდება. განვიხილოთ ქვეჯგუფების რამდენიმე მაგალითი: n -განზომილებიანი სივრცის წრფივი ორთოგონალური გარდაქმნების ერთობლიობა ქმნის ჯგუფს, რომელსაც სრული ორთოგონალური ჯგუფი ეწოდება. გამოვყოთ გარდაქმნების ამ სიმრავლიდან წრფივი ორთოგონალური გარდაქმნები, რომელთა დეტერმინანტი $\Delta = +1$. ეს გარდაქმნები თავისთავად ქმნიან ჯგუფს იმავე ჯგუფური ოპერაციით, რაც მთლიანად ჯგუფში. ერთეულოვანი ელემენტი ორივე ჯგუფისათვის იქნება იგივეური გარდაქმნა. როგორც ვიცით, გარდაქმნა, რომლის დეტერმინანტი $\Delta = +1$, დაკავშირებულია სივრცის ბრუნვასთან რომელიმე ღერძის ირგვლივ, ამიტომ ასეთი გარდაქმნების ერთობლიობა გამოხატავს სივრცის ბრუნვას ნებისმიერი ღერძების ირგვლივ, რომელნიც ერთ ფიქსირებულ O წერტილში გაივლიან. ცხადია, მოპირდაპირე ელემენტი ამ შემთხვევაში იქნება ბრუნვა საწინააღმდეგო მიმართულებით და გარდაქმნის დეტერმინანტი ისევ $+1$ -ის ტოლია. ორი g_1 და g_2 ბრუნვის ნამრავლი $g_1 \quad g_2$ წარმოადგენს სივრცის შემობრუნებას, რომელიც შიილება ჯერ g_2 ბრუნვისა, ხოლო შემდეგ g_1 ბრუნვების შედეგად. ამ ჯგუფს ბრუნვების ჯგუფი ეწოდება და,

მაშასადამე, ბრუნვების ჯგუფი სრული ორთოგონალური ჯგუფის ქვე-ჯგუფს წარმოადგენს. ბრუნვები ერთი რომელიმე ფიქსირებული ლერძის ირგვლივ ასევე განხილული ბრუნვების ჯგუფის ქვეჯგუფი იქნება და ა. შ.

ავიღოთ ყველა მთელი რიცხვის ჯგუფი: $-n, \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots, +n$ შეკრების ოპერაციით. ცხადია, ლუწი რიცხვების ჯგუფი იგივე შეკრების ოპერაციით მთელი რიცხვების ჯგუფის ქვეჯგუფია.

საზოგადოდ, 1, 2 და 3 რიგის აბსტრაქტულ ჯგუფებს საკუთრივი ქვეჯგუფები არ აქვთ. მეოთხე რიგის ციკლურ ჯგუფს ($a, a^2, a^3, a^4 = e$) აქვს ერთი მეორე რიგის ქვეჯგუფი (a^2, e), ვინაიდან $a^2 \cdot a^2 = e$. მეოთხე რიგის კლეინის ჯგუფს აქვს სამი მეორე რიგის ქვეჯგუფი:

$$(a, e), (b, e), (c, e).$$

როგორც ვხედავთ, ორივე შემთხვევაში, მეოთხე რიგის ჯგუფის ქვე-ჯგუფებს აქვთ რიგი 2. ამ შედეგს აქვს ზოგადი ხასიათი და გამოხატავს სასრული ჯგუფების ერთ შესანიშნავ თვისებას. | ს ა ს რ უ ლ ი ჯ გ უ ფ ი ს ქ ვ ე ჯ გ უ ფ ი ს რ ი გ ი, | ქ გ უ ფ ი ს რ ი გ ი ს | გ ა მ ყ ო ფ ი ა (ლ ა გ რ ა ნ ე ე ს თ ე ო რ ე მ ა).

თუ G სასრული ჯგუფია 'და მისი რიგი (ელემენტების რიცხვი) უდრის N -ს, ხოლო H ქვეჯგუფის რიგი არის h , მაშინ, თეორემის თანახმად,

$$N = mh, \quad (1.82)$$

სადაც m მთელი რიცხვია და მას H ქვეჯგუფის ინდექსი ეწოდება G ჯგუფში. ამ თეორემიდან გამომდინარეობს კრამდენიმე საინტერესო შედეგი.

ჯგუფს, რომლის რიგი მარტივი რიცხვია, არ შეიძლება ქონდეს საკუთრივი ქვეჯგუფები. ასეთ ჯგუფებს მიეკუთვნება 3, 5, 7, 11, 13 და ა. შ. რიგის ჯგუფები. აქ მესამე რიგის ჯგუფი ციკლური ჯგუფია, ელემენტებით $a, a^2, a^3 = e$. როგორც ჩანს, ყველა მარტივი რიგის ჯგუფი უნდა იყოს ციკლური ჯგუფი, რომელიც ერთ-ერთი თავისი ელემენტის ხარისხებით იქმნება. ასე, მაგალითად, მეხუთე რიგის ჯგუფი შედგება a, a^2, a^3, a^4 და $a^5 = e$ ელემენტებისაგან. ამავე დროს ელემენტის რიგი ჯგუფში თანხედება ამ 'ელემენტის მიერ შექმნილი ციკლური ჯგუფის რიგს. | თუ ციკლური ჯგუფი წარმოადგენს რომელიმე ჯგუფის ქვეჯგუფს, მაშინ, ცხადია, ელემენტის რიგი იქნება ჯგუფის რიგის გამყოფი. ვინაიდან ციკლური ქვეჯგუფი ' შეიძლება შეიქმნას ნებისმიერი ელემენტის მიერ, სასრული ჯგუფის ყველა ელემენტის რიგი უნდა იყოს ჯგუფის რიგის გამყოფი. ეს შეტად მნიშვნელოვანი შედეგი საშუალებას იძლევა დადგინდეს სხვადასხვა რიგის ჯგუფების სტრუქტურა.

აელოთ G ჯგუფს ორი ნებისმიერი a და b ელემენტი. თუ $ჯგუფის$ ელემენტებს შორის არსებობს ისეთი u ელემენტი, რომ $ქდგილი აქვს $ქოლობას$!$

$$uau^{-1}=b, \tag{1.83}$$

ამბობენ, რომ a ელემენტი b ელემენტის $ქეუღ-$ ლებულია, $ქნ$, სხვაგვარად: b ელემენტი $ქარმო-$ ადგენს a ელემენტის ტრანსფორმირებას $ქu$ ელემენტის $ქსაშუალე$ ბით. ასევე, a ელემენტი $ქარმოად-$ გენს b -ელემენტის ტრანსფორმირებას u^{-1} ელემენტის $ქსაშუალე$ ბით; $ქმართლაც$, $b=uau^{-1}$ $ქტოლობის$ ორივე $ქმხარე$ გავმრავლოთ $ქმარცხნიდან$ u^{-1} და $ქმარცხნიდან$ u , $ქმაშინ$ $ქu^{-1}bu=a$. $ქთუ$ $ქტრანსფორმირე-$ ბის $ქვედე$ გად $ქელემენტი$ $ქჩე$ ბა $ქუცვლელ$ ქ, $ქე.ი.$ $uau^{-1}=a$, $ქმაშინ$ $ua=au$ $ქდა$ $ქჯგუფი$ $ქკომუტატური$ ია.

შეუღლებული $ქელემენტების$ $ქმე$ მოღება $ქსაშუალე$ ბას $ქიძლე$ ვა G ჯგუფში $ქმე$ მავალი $ქელემენტების$ $ქსამრავლე$ $ქვანაქი$ ღებს $ქმე$ უღლებული $ქელე-$ მენტების $ქკლასე$ ბად. G ჯგუფში $ქმე$ მავალი რომელიმე $ქa$ ელემენტის $ქკლასი$ $ქმე$ დგება $ქყველა$ ამ ელემენტის $ქსადმი$ $ქმე$ უღლებული ელემენტების $ქსაგან$, $ქე.ი.$ ელემენტების $ქსაგან$, რომელიც $ქმი$ იღება a ელემენტის $ქტრანსფორმირე$ ბით G ჯგუფის $ქყველა$ $ქდანარჩენი$ ელემენტების $ქსაშუალე$ ბით. ასეთი ელემენტების $ქრი$ ცხვი $ქკლასში$ $ქგანაზღვრავს$ ამ $ქკლასის$ $ქრი$ გს. როგორც $ქდა$ $ქვანახე$ თ, $ქკომუტატურ$ ჯგუფში $ქთათუ$ ეული ელემენტი $ქთვი$ თონ $ქკმნის$ $ქკლასს$, რადგან $ax^{-1}=b$ $ქსრუ$ ლება a და b -ს $ქყველა$ $ქმნიშვნელობისათ-$ ვის. ასევე, $ქცხადია$, რომ ნებისმიერი ჯგუფს $ქერათუ$ ლოვანი ელემენტი e $ქთავისთავთან$ $ქკმნის$ $ქკლასს$. $ქერთ$ $ქკლასში$ $ქმე$ მავალი $ქყველა$ ელემენტის $ქრი$ გი $ქერთ$ ანირავ; $ქმართლაც$, $ქთუ$ a ელემენტი $ქკმნის$ $ქკლასს$ და $ქმისი$ $ქრი$ გი არას k , $ქე.ი.$ $a^k=e$, $ქმაშინ$ $ქმისი$ $ქმე$ უღლებული ელემენტი $b=$
 $=uau^{-1}$ აგრეთვე k რავის $ქიქნება$: $b^k=(uau^{-1})^k=uau^{-1} \cdot uau^{-1} \dots =$
 $=u^k a^k u^{-k}=e$. ასევე, $ქთუ$ b ელემენტი a -ს $ქმე$ უღლებულია, ხოლო c ელემენტი $ქმე$ უღლებულია b -ს, $ქმაშინ$ c $ქმე$ უღლებულია a -ს, $ქე.ი.$ $ქთუ$ $b=$
 $=t_1 a t_1^{-1}$; $c=t_2 b t_2^{-1}$, $ქმაშინ$ $c=t_1 t_2 t_1^{-1} t_2^{-1}= (t_1 t_2) a (t_1 t_2)^{-1}$. $ქვანა-$ ზღვრიდან $b=uau^{-1}$ $ქგამო$ ღის, რომ $a=u^{-1}b(u^{-1})^{-1}$; აქით, $ქთუ$ b ელემენტი a -ს $ქმე$ უღლებულია, $ქთავის$ $ქმხრი$ ვ, a $ქმე$ უღლებულია b -ს.

ორთოგონალური გარდაქმნების მატრიცების ჯგუფში, მაგალითად, მსგავსი მატრიცები შეუღლებული ელემენტის კლასებს ქმნიან.

შეიძლება დამტკიცდეს, რომ შეუღლებული ელემენტების კლასის რიგი ჯგუფის რიგის გამყოფს წარმოადგენს. განვიხილოთ მაგალითი: წარმოვიდგინოთ, რომ გვაქვს ჯგუფი, რომლის ერთი a ელემენტი წარმოადგენს ბრუნვა m ღერძის ირგვლივ და კუთხით, ხოლო მეორე ელემენტი b ჩვეულებრივი ტრანსლაციაა. მაშინ b ტრანსლაცია გადაადგილებს m ღერძს ახალი m' ღერძის მდგომარეობაში. გარდაქმნა bab^{-1} იმოქმედებს შემდეგნაირად: ჯერ b^{-1} m' ღერძს დააბრუნებს უკან m ღერძის მდგომარეობაში. a ბრუნვა m ღერძის ირგვლივ და კუთხით და ის m ღერძის წერტილებს ტოვებს უცვლელად. ბოლოს b გადაიყვანს m ღერძს ისევ m' მდგომარეობაში და საბოლოოდ bab^{-1} , რომელიც a ელემენტის შეუღლებულს წარმოადგენს, იქნება ბრუნვა და კუთხით m' ღერძის ირგვლივ. ამგვარად, ბრუნვის შეუღლებული ელემენტი ისევ ბრუნვაა იგივე კუთხით ღერძის ირგვლივ, რომელმაც განიცადა ტრანსფორმირება.

გ ა დ ა ნ ა ც ვ ლ ე ბ ა ნ ი

აიღოთ n საგანი, რომელიც განწილებულია სივრცეში გარკვეულ ადგილებზე. მივაწვროთ თითოეულ საგანს გარკვეული ნომერი და მომავალში ვილაპარაკოთ $1... n$ საგნის სიმრავლეზე. თუ ადგილებს ასევე დავნომრავთ, მაშინ საგნის ყველა ნომერს ეთანადება ადგილის გარკვეული ნომერი. შეიძლება საწყისი მდგომარეობა ავიჩიოთ ისე, რომ საგნისა და ადგილის ნომრები თანხედებოდნენ ერთმანეთს; მაგალითად, პირველი საგანი მოთავსებულია № 1 ადგილზე და ა.შ. ის შეიძლება ასე ჩაიწეროს

$$\begin{pmatrix} 1. & 2 & \dots & n \\ 1, & 2 & & n \end{pmatrix}$$

აქ ზედა სტრიქონში მოცემულია საგნის ნომრები, ხოლო მეორე სტრიქონში—ადგილების. სადგენის მიერ ადგილების შეცვლა მოგვცემს ახალ გადანაცვლებას, მაგალითად,

$$\begin{pmatrix} 1. & 2, & & n \\ 3, & 5, & \dots & n, & 1 \end{pmatrix}$$

ნიშნავს, რომ პირველმა საგანმა ახლა დაიკავა № 3 ადგილი, მეორემ — № 5 ადგილი და ა. შ. აქვე უნდა აღინიშნოს, რომ ჩაწერის თანმიმდევრობას არ აქვს არავითარი მნიშვნელობა. მთავარია შევინარჩუნოთ საგნის ნომრისა და დაკავებული ადგილის ნომრის ურთიერთშესაბამისობა.

გადანაცვლებაში შემავალი ელემენტების რიცხვს გადანაცვლების ხარისხი ეწოდება. $1... n$ რიცხვის მქონე გადანაცვლება n ხარისხისაა

და ასეთი გადანაცვლებათა რიცხვი უდრის $n!$. შეიძლება დამტკიცდეს, რომ $n!$ გადანაცვლებათა ერთობლიობა ქმნის ჯგუფს, რომელსაც n ხარისხის სიმეტრიული S_n ჯგუფი ეწოდება. გადანაცვლება შეიძლება ჩაიწეროს ციკლების საშუალებით. მაგალითად, განვიხილოთ მეექვსე ხარისხის გადანაცვლება

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 2 & 3 & 1 & 5 & 4 & 6 \end{pmatrix}$$

ავიღოთ ამ გადანაცვლების ზედა სტრიქონში ციფრი 1. ჩვენ ვხედავთ, რომ გადანაცვლებას გადაყავს ის 2-ში. შემდეგ მოვქებნოთ ზედა სტრიქონში ციფრი 2, რომელიც გადადის 3-ში, ხოლო 3 ისევ 1-ში და ამით ციკლი მთავრდება. შემდეგ ციკლში 4 გადადის 5-ში, ხოლო 5—4-ში. სიმბოლო 6 რჩება უცვლელი გადაჯგუფების მიერ, ამიტომ

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 2 & 3 & 1 & 5 & 4 & 6 \end{pmatrix} = (1\ 2\ 3)(4\ 5)(6).$$

ისეთი სიმბოლო, რომელიც უცვლელი რჩება, როგორც, მაგალითად, 6, შეიძლება საერთოდ გამოვტოვოთ გადანაცვლების ჩაწერის დროს

$$P = (123)(45);$$

მაგრამ, უნდა გვახსოვდეს, რომ გადანაცვლება მე-6 ხარისხისაა; ვინაიდან ციკლებს საერთო სიმბოლოები არ გააჩნიათ, ისინი კომპუტატიურები არიან, ე. ი.

$$(123)(45) = (45)(123);$$

ასევე, ცხადია, რომ ციკლი შეიძლება ნებისმიერი ელემენტით იწყებოდეს, მაგ.,

$$(123) = (231) = (312).$$

თუ გადანაცვლება შეიცავს მხოლოდ ერთ ციკლს, მას ციკლური გადანაცვლება ეწოდება $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 3 & 4 & 1 \end{pmatrix} = (1234)$. ციკლს, რომელიც შეიცავს

მხოლოდ ორ ელემენტს, ტრანსპოზიცია ეწოდება. ყოველი ციკლი შეიძლება წარმოადგენდეს ტრანსპოზიციების ნამრავლს; მაგ., $(1234) = (14)(13)(12)$, ან, საზოგადოდ,

$$(1, 2, \dots, n) = (1\ n) \dots (13)(12).$$

განვსაზღვროთ გადანაცვლებათა ნამრავლი. ვთქვათ, მოცემულია ორი გადანაცვლება — P_1 და P_2 . ამბობენ, რომ გადანაცვლების ნამრავლი $P = P_1 P_2$ არის გადანაცვლება, რომელიც მიიღება ჯერ P_2 , ხოლო შემდეგ P_1 გადანაცვლების თანამიმდევრულად შესრულებით. გან-

ვიხილოთ მაგალითი: ავიღოთ ორი მეხუთე ხარისხის გადანაცვლება $P_1=(13)(254)$ და $P_2=(12435)$. მათი ნამრავლი

$$P=(13)(254) \times (12435)=(1534)(2).$$

მართლაც, P_2 გადანაცვლებას 1 გადაყავს 2-ში, ხოლო P_1 -ს 2 გადაყავს 5-ში. ამიტომ, საბოლოოდ, 1 გადავა 5-ში და ა. შ.

ამ მაგალითიდან ჩანს, რომ გადანაცვლებათა ნამრავლი კომუტატიური არ არის, ვინაიდან

$$(12435) \times (13)(254)=(1532)(4).$$

უშუალო გამოთვლით შეიძლება შემოწმდეს, რომ გადანაცვლებების ნამრავლება აკმაყოფილებს ასოციაციურობის კანონს

$$P_1(P_2P_3)=(P_1 P_2)P_3.$$

ნებისმიერი გადანაცვლებისათვის არსებობს მისი შებრუნებული გადანაცვლება, რომელიც საგნებს დააბრუნებს იმ ადგილებზე, სადაც ისინი გადანაცვლებამდე იმყოფებოდნენ. მაგალითად, ჩვენ მიერ აღებული $P_1=(13)(254)$ გადანაცვლებისათვის შებრუნებული გადანაცვლება იქნება: $P^{-1}=(31)(452)$; მართლაც,

$$P_1 P_1^{-1}=(13)(254) \times (31)(452)=(1)(2)(3)(4)(5).$$

აღაც გადანაცვლება $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \end{pmatrix}=(1)(2)(3)(4)(5)$ საგნებს ტოვებს

უცვლელად და მას ერთეულოვანი გადანაცვლება ეწოდება.

როგორც აღვნიშნეთ, n რიცხვის მქონე გადანაცვლებათა ერთობლიობა ქმნის ჯგუფს, რომლის ელემენტებს $n!$ გადანაცვლება წარმოადგენს. ეს არის n ხარისხის სიმეტრიული S_n ჯგუფი.

ავიღოთ სამი რიცხვი — 1, 2, 3, როგორც სამი საგნის სიმბოლო. შევადგინოთ გადანაცვლებანი. მივიღებთ $3!=6$ გადანაცვლებას და, მაშასადამე, S_3 იქნება მეექვსე რიგის ჯგუფი ელემენტებით:

$$P_1=e=(1)(2)(3); P_2=(1)(23); P_3=(2)(13);$$

$$P_4=(3)(12); P_5=(123); P_6=(132).$$

გადანაცვლებებს, რომელნიც ამ ჯგუფში შედიან, სხვადასხვა აღნაგობა აქვთ. თუ სიმბოლოს, რომელიც უცვლელი რჩება, მხედველობაში არ მივიღებთ, მაშინ

$$P_1=e; P_2=(23); P_3=(13); P_4=(12); P_5=(123); P_6=(132).$$

P_2, P_3, P_4 გადანაცვლებებში უშუალო გადაადგილებაში მონაწილეობს ორი სიმბოლო, ხოლო დამოუკიდებელი ციკლების რიცხვი უდრის 1-ს. P_5, P_6 გადანაცვლებაში მონაწილეობს სამივე სიმბოლო და ციკლების

რიცხვი აქაც ერთის ტოლია. თუ სხვაობა გადანაცვლებაში უშუალოდ მონაწილე სიმბოლოების რიცხვსა და დამოუკიდებელი ციკლების რიცხვს შორის ლუწი (კენტი) რიცხვია, გადანაცვლებას ლუწი (კენტი) ეწოდება. ამის მიხედვით გადანაცვლებები P_2, P_3, P_4 კენტი გადანაცვლებებია, ხოლო P_1 და P_5 — ლუწი. შეიძლება დამტკიცდეს, რომ ლუწი გადანაცვლება ყოველთვის შეიცავს ტრანსპოზიციების ლუწ რიცხვს, ხოლო კენტი გადანაცვლება — კენტს. ამიტომ ნებისმიერი გადანაცვლების გამრავლება ერთ ტრანსპოზიციასზე ლუწ გადანაცვლებას გახდის კენტად და პირიქით, კენტს — ლუწად. ორი ლუწი ან კენტი გადანაცვლების გამრავლების შედეგად მიიღება ლუწი გადანაცვლება. ლუწი და კენტი გადანაცვლების ნამრავლი გეძლევენ კენტ გადანაცვლებას. ლუწი გადანაცვლების შებრუნებული გადანაცვლება ლუწია. ხოლო კენტი გადანაცვლების შებრუნებული — კენტი.

აქედან ცხადია, რომ კენტი გადანაცვლებანი ჯგუფს ვერ ქმნიან, რადგან მათი ნამრავლი ლუწი გადანაცვლებაა. რაც შეეხება ლუწ გადანაცვლებებს, ისინი ერთეულოვან გადანაცვლებასთან ერთად ქმნიან ჯგუფს. ასე, მაგალითად, ჩვენს მაგალითში გადანაცვლებანი P_1, P_3, P_5 ქმნიან ჯგუფს, რომელიც S_3 ჯგუფის ქვეჯგუფს წარმოადგენს და შეიცავს $\frac{3!}{2}$ ელემენტს.

ეს შედეგი ზოგადია. n ხარისხის მქონე გადანაცვლებათა S_n ჯგუფში ლუწი გადანაცვლებები ქმნიან ქვეჯგუფს, რომელიც $\frac{n!}{2}$ რიგისა და აღინიშნება A_n ასოთი. მას ნიშანცვლადი ჯგუფი ეწოდება.

გადანაცვლებათა სიმეტრიული S_n ჯგუფი მეტად მნიშვნელოვანია იმის გამო, რომ, როგორც ირკვევა, ის შეიცავს ყველა სასრული ჯგუფის შესაძლებელ სტრუქტურებს. ეს გამომდინარეობს შემდეგი თეორემიდან, რომელსაც ჩვენ მივიღებთ დამტკიცების გარეშე:

ნებისმიერი სასრული ჯგუფი იზომორფულია გადანაცვლებების რამდენიმე ჯგუფის მიმართ (კელის თეორემა).

ამ თეორემის საფუძველზე ყველა სასრული ჯგუფების გამოკვლევა დაიყვანება გადანაცვლებათა ჯგუფების შესწავლაზე.

აქლა შესაძლებელია გადანაცვლებათა თვის შემოვიღოთ შეუდლებული a ელემენტის ცნება, ისე როგორც ეს იყო ზემოთ. მოცემული გადანაცვლების შედეგად მიღებული იქნება გადანაცვლება PaP^{-1} , სადა $P \in S_n$.

მაგალითად, თუ

$$a = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 3 & 4 & 5 & 2 & 1 \end{pmatrix}, \quad \text{ხოლო} \quad P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 4 & 5 & 1 & 2 & 3 \end{pmatrix},$$

მაშინ შეუღლებული PaP^{-1} გადანაცვლების მისაღებად საჭიროა ავიღოთ გადანაცვლება P^{-1} , გადავამრავლოთ ის a -ზე, ხოლო შედეგი გადავამრავლოთ P გადანაცვლებაზე. მაგრამ ამისათვის არსებობს უფრო მოკლე ხერხი, რომლის თანახმად, PaP^{-1} გადანაცვლების მისაღებად საჭიროა P გადანაცვლება ვამოქმედოთ a გადანაცვლების ზედა და ქვედა სტრიქონებზე ცალ-ცალკე. ჩვენი მაგალითის შემთხვევაში P გადანაცვლების მოქმედება a გადანაცვლების ზედა სტრიქონზე გადაიყვანს 12345—45123-ში. ეს იქნება PaP^{-1} გადანაცვლების ზედა სტრიქონი. ახლა ვამოქმედოთ P : გადანაცვლება a გადანაცვლების ქვედა სტრიქონზე, მაშინ 34521 გადავა 12354-ში და ამგვარად მივიღებთ PaP^{-1} გადანაცვლების ქვედა სტრიქონს

$$PaP^{-1} = \begin{pmatrix} 4 & 5 & 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 & 5 & 4 \end{pmatrix}$$

იგივე ოპერაცია, კიდევ უფრო მოკლედ, შეიძლება ჩატარდეს იმ შემთხვევაში, როდესაც გადანაცვლება მოცემულია ციკლების სახით; მაგალითად

$$|a = (135)(24), |P = (14253);$$

მაშინ

$$PaP^{-1} = (413)(52).$$

ამ მაგალითიდან ჩანს, რომ a და მის შეუღლებულ PaP^{-1} გადანაცვლებებს ქაჩეთ ერთნაირი სტრუქტურა მათი ციკლებად დაყოფის თვალსაზრისით. ეს იმას ნიშნავს, რომ თუ გადანაცვლებებს დაეყოფთ შეუღლებული ელემენტების კლასებად, ერთ კლასში მოთავსდება ყველა ლუწიან ყველა კენტი გადანაცვლება. მაგალითად, S_5 ჯგუფში შემავალი 6 გადანაცვლება იყოფა შეუღლებული ელემენტების სამ კლასად. ერთ კლასს ქმნის ერთეულოვანი გადანაცვლება $P_1 = e$, მეორე კლასში შედიან $P_2 = (23)$, $P_3 = (13)$, $P_4 = (12)$, რომლებიც, როგორც ვიცით, კენტ გადანაცვლებებს წარმოადგენენ. ქმსამე კლასს ქმნიან ლუწი გადანაცვლებანი $P_5 = (123)$ და $P_6 = (132)$.

ინვარიანტული კვანძულები, შაპრო-ჯგუფი

ქვეჯგუფების განხილვის დროს აღნიშნული იყო, რომ თუ მოცემულია G ჯგუფი $g_1 \dots g_n$ ელემენტებით და ამ ელემენტების სიმრავლიდან გამოვიყოფთ $H \subset G$ ქვესიმრავლეს $h_1, h_2 \dots h_k$ ელემენტებით, ისე, რომ ეს ქვესიმრავლე ქმნის თავისთავად ჯგუფს იგივე ჯგუფური ოპერაციით, მაშინ მას G ჯგუფის ქვეჯგუფი ეწოდება. ამგვარად, $H(h_1, h_2 \dots h_k)$ ქვეჯგუფის ელემენტები იმავე დროს $G = \{g_1 \dots g_n\}$ ჯგუფის ელემენტებია, მხოლოდ სხვა ასობით აღნიშნული. ჯგუფს და მის ქვეჯგუფს აქვთ საერთო ერთეულოვანი ელემენტი; მაგ., $g_1 = h_1 = e$. ავიღოთ G ჯგუფის

რომელიმე g_i ელემენტი, რომელიც არ შედის H ქვეჯგუფში და შევადგინოთ ნამრავლები:

$$g_i h_1 = g_i; \quad g_i h_2; \quad g_i h_3 \dots$$

ცხადია, $g_i H$ სიმრავლის ყველა ელემენტი ამავე დროს G ჯგუფის ელემენტს წარმოადგენს. თუ ამით G ჯგუფის ელემენტები არ ამოიწურება, ვიღებთ ახალ ელემენტს g_j ისეთს, რომ $g_j \neq e$; $g_j \notin H$; $g_j \in G$ და ვადგენთ ნამრავლს $g_j H$ და ა. შ. მანამ, სანამ G ჯგუფის ყველა ელემენტი არ ამოიწურება. ამის შედეგად G ჯგუფის ელემენტების სიმრავლე დაიყოფა ქვესიმრავლეებად: $g_i H, g_j H, g_m H \dots$ თითოეული მათგანი ელემენტების ერთ და იგივე რიცხვს შეიცავს, რომელიც H ქვეჯგუფის რიგის ტოლია. საბოლოოდ შეიძლება დაიწეროს

$$G = H \cup g_i H \cup g_j H \cup \dots \cup g_k H.$$

$g_i H$ ტიპის ელემენტების სიმრავლეს მარცხენა მოსაზღვრე კლასი ეწოდება. კლასი არ წარმოადგენს ქვეჯგუფს, ვინაიდან არ შეიცავს ერთეულოვან ელემენტს. G ჯგუფის ელემენტების სიმრავლის დაყოფა შეიძლება, აგრეთვე, მარჯვენა მოსაზღვრე კლასებად, თუ ავიღებთ: $H g_1 \dots$ სახის ნამრავლებს, ქაშინ

$$\{G = H \cup H g_1 \cup H g_2 \cup \dots \cup H g_k\}.$$

ამ ტოლობებიდან ჩანს, რომ ყველა მარჯვენა ან მარცხენა მოსაზღვრე კლასებიდან ქვეჯგუფს მხოლოდ H კლასი წარმოადგენს. H ქვეჯგუფი $|x|$ ხდენს G ჯგუფის ელემენტების დაყოფას მარცხენა ან მარჯვენა მოსაზღვრე კლასებად. თუ G ჯგუფი სასრული n რიგისაა, $H \subset G$ ქვეჯგუფის რიგი $k < n$ და, ლაგრანჟეს თეორემის თანახმად, n -ის გამყოფს წარმოადგენს. აქედან გამომდის, რომ ზემოთ განსაზღვრული H ქვეჯგუფის ინდექსი $m (n = mk)$ წარმოადგენს მარცხენა ან მარჯვენა მოსაზღვრე კლასების რიცხვს.

H ქვეჯგუფს ($H \subset G$) ეწოდება ინვარიანტული ქვეჯგუფი ან G ჯგუფის ნორმალური გამყოფი, თუ ამ ქვეჯგუფის მიხედვით შექმნილი მარცხენა და მარჯვენა მოსაზღვრე კლასები თანხვედრება ერთმანეთს, ე. ი.

$$\{H g_i = g_i H \quad (g_i \in H \text{ და } H \Delta G)\}$$

(აღნიშვნა Δ ინვარიანტულ ქვეჯგუფს ნიშნავს)

ან, გაშლილი სახით, ეს ასე დაიწერება:

$$!h_1 g_i = g_i h_1;$$

$$!h_2 g_i = g_i h_2;$$

$$!h_n g_i = g_i h_n.$$

ამ ტოლობებიდან გამოდის, რომ ქვეჩვეუნი H კომუტირებს G ჩვეულის ყველა ელემენტთან. ასეთ შემთხვევაში, როგორც ვიცით, ტრანსფორმირების შედეგად ელემენტი რჩება უცვლელი, ე. ი. G ჩვეულის ყველა ელემენტისათვის ადგილი აქვს ტოლობას

$$!g_i H g_i^{-1} = H. \quad (1.84)$$

ეს შეიძლება ჩაითვალოს H ქვეჩვეულის ინვარიანტობის კიდევ ერთ განსაზღვრად. აქ H -ში იგულისხმება ქვეჩვეულებაში შემავალი ყველა ელემენტი $h_1 \dots h_n$; ამიტომ G ჩვეულის ნებისმიერი g_i ელემენტისათვის $g_i h_i g_i^{-1}$ აგრეთვე H ქვეჩვეულის ელემენტი იქნება. ასეთი ელემენტები შეადგენენ შეუღლებული ელემენტების კლასებს; ამიტომ სწავლობთ შეიძლება ითქვას, რომ G ჩვეულის ქვეჩვეუნი H იქნება ინვარიანტული მაშინ, თუ ის შეიცავს G ჩვეულის ელემენტებს შეუღლებული ელემენტების კლასების სახით.

| თუ ინვარიანტულ H ქვეჩვეულებაში შევადგენთ მოსაზღვრე კლასებს $g_i H$, ავიღებთ ამ კლასებს, როგორც ელემენტებს, და განვსაზღვრავთ მათთვის გამრავლების ოპერაციას შემდეგი სახით

$$!g_i H \quad g_j H = g_i g_j H,$$

მაშინ ირკვევა, რომ ინვარიანტული ქვეჩვეულის მოსაზღვრე კლასები თვითონ აღდგენენ ჩვეულებას, რომელსაც ფაქტორ-ჩვეულება და აღინიშნება G/H ფაქტორ-ჩვეულის რიგი უდრის H ქვეჩვეულის ინდექსს G ჩვეულებაში. მაგალითისათვის განვიხილოთ მეოთხე რიგის ციკლური $G(a, a^2, a^3, |a^4 = e)$ ჩვეულება. როგორც ვიცით, მას აქვს ერთი $H(ea^2)$ ქვეჩვეულება. ვინაიდან G ჩვეულება კომუტატურია, H წარმოადგენს ინვარიანტულ ქვეჩვეულებას. შევადგინოთ H ქვეჩვეულების მარცხენა მოსაზღვრე კლასები G ჩვეულებაში. ამისათვის ავირჩიოთ G ჩვეულის ის ელემენტი, რომელიც არ შედის H ქვეჩვეულებაში, მაგ., a და შევადგინოთ გამრავლებული $H(ea^2)$ ქვეჩვეულების ელემენტებთან. მივიღებთ aH ელემენტების სიმრავლეს:

$$ae = a; \quad aa^2 = a^3; \quad aH(aa^3).$$

ამგვარად, aH ელემენტების სიმრავლე შეიცავს ორ ელემენტს — a და a^3 . ორი კლასი H და aH მთლიანად ამოწურავენ G ჯგუფს

$$|G| = |H| + |aH|.$$

ახლა $G|H$ ფაქტორ-ჯგუფის მისაღებად ელემენტებად უნდა ავირჩიოთ მოსაზღვრე კლასები:

$$|e = (e, a^2) \text{ და } A = (a, a^3).$$

ეს ელემენტები შეადგენენ ჯგუფს, ვინაიდან $e \cdot A = A$ და $A \cdot A = e$. ფაქტორ-ჯგუფი $G|H$ მეორე რიგისაა, რადგან H ინვარიანტული ქვეჯგუფის ინდექსი G ჯგუფში = 2.

ჯგუფების გადამრავლება

არჩევენ ორი სახის ნამრავლს. როდესაც მრავლდება ერთ ჯგუფში შემავალი ქვეჯგუფები (შინაგანი ნამრავლი), და როდესაც მამრავლებს წარმოადგენენ თვითონ ჯგუფები (პირდაპირი ნამრავლი).

ვთქვათ, მოცემულია $G (g_1 \dots g_n)$ ჯგუფი და მისი ქვეჯგუფები $H (h_1 \dots h_k)$ და $H' (h'_1 \dots h'_m)$. ამბობენ, რომ G ჯგუფი წარმოადგენს მისი ქვეჯგუფების პირდაპირ (შინაგან) ნამრავლს, ე. ი.

$$G = H \times H' = \{h_1, h_2, \dots, h_k \mid h'_1, h'_2, \dots, h'_m\} = \{h_1 h'_1, h_1 h'_2, \dots, h_2 h'_1, \dots\} \quad (1.85)$$

თუ: 1) ქვეჯგუფში შემავალი ელემენტები ერთიმეორეს ძენ ცალკეც ურნი არიან, $h_i h'_k = h'_k h_i$ და

2) G ჯგუფის თითოეული ელემენტი ცალსახად შეიძლება წარმოვიდგინოთ ნამრავლის სახით $g_i = h_j h'_e$.

ახლა ავიღოთ ორი $G (g_1 \dots g_m)$ და $G' (g'_1 \dots g'_n)$ ჯგუფი. ამ ორი ჯგუფის პირდაპირი ნამრავლი $G \times G' = C$ აგრეთვე წარმოადგენს ჯგუფს, რომლის ელემენტებიც $(g_i g'_k)$ სახის ყველა შესაძლებელი წყვილებია იმის გათვალისწინებით, რომ სხეადასხვა ჯგუფში შემავალი ელემენტები კომუტირებენ, ე. ი. $g_i g'_k = g'_k g_i$. ახალ C ჯგუფში ელემენტების გამრავლების ოპერაცია განისაზღვრება შემდეგი სახით

$$(g_i g'_j)(g_k g'_e) = (g_i g_k, g'_j g'_e) = g_m g'_n. \quad (1.86)$$

თუ G ჯგუფის რიგი არის m , ხოლო G' ჯგუფის რიგი — n . მაშინ $C = G \times G'$ ჯგუფის რიგი ტოლი იქნება $p = m \cdot n$.

ჯგუფების წარმოშობა

ავიღოთ $x, y, z \dots$ ელემენტების სიმრავლე. დავუშვათ, რომ ამ ელემენტებს შორის განსაზღვრულია შეკრებისა და ჩრცნეუ გზა-ეღების ოპერაციები, ე. ი. მივიღებთ ტოლობებს:

$$x + y = y + x; (x + y) + z = x + (y + z); \alpha(x + y) = \alpha x + \alpha y;$$

$$(\alpha\beta)x = \alpha(\beta x); (\alpha + \beta)x = \alpha x + \beta x,$$

სადაც a , β რიცხვებია და გამრავლების ან შეკრების შედეგად მიღებული ელემენტარი იმევე სამრავლეს ეკუთვნის. გარდა ამისა, სამრავლეში არსებობს ელემენტი 1 ისეთი, რომ $1 \cdot x = x$ და შეკრების შემთხვევაში ელემენტი 0 , რომელაც ყველა ელემენტას მიმართ აკმაყოფილებს ტოლობას $x + 0 = x$. ელემენტების ასეთ სამრავლეს წრფივი სივრცე ეწოდება, ხოლო სამრავლეს ელემენტებს — ვექტორები; კერძოდ, ჩვეულებრივი სამგანზომილებიანი სივრცე, რომლის ელემენტები ჩვეულებრივი ვექტორებია, წრფივ ვექტორულ სივრცეს წარმოადგენს. კვადრატული მატრიცებს ერთობლივად მატრიცული გამრავლების ოპერაციით ქმნის წრფივ ვექტორულ სივრცეს და ა. შ. შემოღებული განსაზღვრიდან ჩანს, რომ წრფივი ვექტორული სივრცის ელემენტები აბელის (კომუტატიურ) ჯგუფს ქმნიან.

ვექტორებს x_1, x_2, \dots ეწოდება წრფივად დამოუკიდებელი, თუ ტოლობა $\sum_{i=1}^n m_i \vec{x}_i = 0$ სრულდება მხოლოდ როდესაც ყველა $m_i = 0$. წრფივი ვექტორული სივრცის ბაზისი ეწოდება წრფივად დამოუკიდებელი e_1, e_2, \dots, e_k ვექტორების ისეთ სისტემას, როდესაც სივრცის ნებისმიერი სხვა ვექტორი შეიძლება წარმოკუდგინოთ ამ ვექტორების წრფივი კომბინაციის სახით $\vec{x} = \sum_{i=1}^n \eta_i \vec{e}_i$. მაგალითად: სამი ურთიერთმართობი ვექტორი წარმოადგენს სამგანზომილებიანი სივრცის ბაზისს. მატრიცების მიერ შექმნილ წრფივ სივრცეში ბაზისს ქმნიან მატრიცები, რომლებსაც მხოლოდ ერთი ელემენტი აქვთ ერთის ტოლი, ხოლო დანარჩენი ელემენტებია ნულებია და ა. შ. ამ მაგალითებიდან ჩანს, რომ ბაზისური ვექტორების განსაზღვრა ცალკეადაც არ ხდება და მათი არჩევა შეიძლება უპირავე საშუალებებია.

წრფივად დამოუკიდებელი ვექტორების რიცხვი განსაზღვრავს სივრცის განზომილებას. n -განზომილებიან სივრცეში აუცილებლად არსებობს n წრფივად დამოუკიდებელი ვექტორების ბაზისი. კვადრატული ($n \times n$) მატრიცებს სივრცის შემთხვევაში, მაგალითად, ბაზისური მატრიცებს რიცხვი უდრის $n \times n$ და, მაშასადამე, ამ სივრცის განზომილებაც $n \times n = n^2$.

აღნიშნულ M ასეთი ოპერაცია, რომლის შედეგად სივრცის ერთი რომელიმე \vec{X} ვექტორიდან მიიღება ამავე სივრცის მეორე \vec{Y} ვექტორი; მაშინ შესაძლებელია დაიწეროს

$$\vec{Y} = M\vec{X}.$$

ასეთ შემთხვევაში ამბობენ, რომ ვექტორული სივრცე გადაისახა ობიექტურად, ხოლო გადასახვას აწარმოებს M გარდაქმნა.

საზოგადოდ, n -განზომილებიან სივრცეში განსაზღვრულია M გარდაქმნა, თუ ცნობილია წესი, რომლის მიხედვით ამ სივრცის ნებისმიერ \vec{X} ვექტორს შეესაბამება ამავე სივრცის \vec{Y} ვექტორი; გარდაქმნას ეწოდება წრფივი, თუ აღგილი აქვს ტოლობებს:

$$M(\vec{X} + \vec{Y}) = M\vec{X} + M\vec{Y} \quad \text{და} \quad M(\lambda\vec{X}) = \lambda M\vec{X},$$

სადაც λ მუდმივი მამრავლია.

კერძოდ, თუ M გარდაქმნა \vec{X} ვექტორის ტოვებს უცვლელად, ე. ი. $\vec{X} = M\vec{X}$, მას ერთეულოვანი ან იგივეური გარდაქმნა ეწოდება.

წრფივი გარდაქმნების განსაზღვრიდან ჩანს, რომ ისინი აკმაყოფილებენ ქვირობებს, რომლებიც აუცილებელია წრფივი ვექტორული სივრცის ელემენტებისათვის და ამგვარად მოცემულ წრფივ სივრცეში განსაზღვრული წრფივი გარდაქმნების სიმრავლე თვითონ ქმნის წრფივ სივრცეს. ქვაგრამ. როგორც აღნიშნული იყო, წრფივი ვექტორული სივრცის ელემენტები ქმნიან კომუტატიურ ჯგუფს, ამიტომ ამ სივრცეში მოცემული წრფივი გარდაქმნების სიმრავლეც ქმნის ჯგუფს.

მეორე მხრივ, მატრიცების სიმრავლე აგრეთვე ქმნის წრფივ ვექტორულ სივრცეს და თუ მივიღებთ მხედველობაში, რომ მოცემულ ბაზისში წრფივი გარდაქმნა, რომელსაც \vec{X} ვექტორი გადაყავს \vec{Y} ვექტორად, ხდება $A = (A_{ij})$ მატრიცის საშუალებით, ე. ი. $\vec{Y} = A\vec{X}$, შეიძლება დავასკვნათ, რომ ჩვენს სივრცეში M გარდაქმნას ყოველთვის შეესაბამება გარკვეული A მატრიცა $M = (A_{ij})$. წრფივ გარდაქმნასა და შესაბამის მატრიცას შორის კავშირი მყარდება შემდეგი თეორემებით:

მოცემულ ბაზისში ყოველ წრფივ გარდაქმნას შეესაბამება გარკვეული მატრიცა. ქვართებულთა შემბრუნებულ დასკვნაც, ე. ი. |ფიქსირებულ ბაზისში ყოველ მატრიცას შეესაბამება გარკვეული წრფივი გარდაქმნა.| ეს მნიშვნელოვანი თეორემა საშუალებას გვაძლევს მატრიცებისათვის ჩამოყალიბებული ყველა კანონი გავავრცელოთ წრფივ გარდაქმნებზე.

თუ ხდება გადასვლა $\{\vec{i}_k\}$ ბაზისიდან $\{\vec{i}'_k\}$ ბაზისში, მაშინ წრფივ გარდაქმნას $y = Ax$ ახალ ბაზისში, (1.74)-ის თანახმად, ეთანადება აგრეთვე წრფივი გარდაქმნა $y' = LAL^{-1}x'$. აქ A და LAL^{-1} ეკვივალენტური (მსგავსი) მატრიცებია, რომელნიც ახდენენ ერთ და იმავე წრფივ გარდაქმნას სხვადასხვა ბაზისში, ე. ი. ერთი და იგივე წრფივი გარდაქმნა სხვადასხვა ბაზისში წარმოდგენილი იქნება ეკვივალენტური A და $A' = LAL^{-1}$ მატრიცებით.

როგორც აღნიშნეთ, წრფივი ვექტორული სივრცის გარდაქმნების ერთობლიობა $(M, N, P, Q\dots)$ ქმნის ჯგუფს. ამ ჯგუფში M და N გარდაქმნების ნამრავლს წარმოადგენს გარდაქმნა P , ისეთი, რომ ტოლობას

$$P\vec{X} = M(N\vec{X})$$

ადგილი აქვს ჩვენი სივრცის ნებისმიერი \vec{X} ვექტორისათვის. ჯგუფის ერთეულოვანი ელემენტის როლს ასრულებს იგივეური გარდაქმნა, რომელიც ელემენტს ტოვებს უცვლელად $E\vec{X} = \vec{X}$ და ყოველ გარდაქმნას გააჩნია შებრუნებული გარდაქმნა.

ავიღოთ G ჯგუფი $g_1, g_2 \dots g_n$ ელემენტებით. აღნიშნოთ L სივრცის გარდაქმნების ჯგუფი $D(R)$. დავუშვათ, რომ G ჯგუფი ჰომომორფულად არის გადასახული გარდაქმნების $D(R)$ ჯგუფზე. ეს იმას ნიშნავს, რომ 'თუ g_1 და g_2 ჯგუფის ელემენტებია, ხოლო $D(g_1)$ და $D(g_2)$ მათი შესაბამისი გარდაქმნები, მივიღებთ ტოლობებს:

$$D(g_1 g_2) = D(g_1) D(g_2);$$

$$D(g_1^{-1}) = [D(g_1)]^{-1}.$$

თუ ნებისმიერი G ჯგუფი ჰომომორფულად არის გადასახული L ვექტორულ სივრცეში მოქმედი გარდაქმნების $D(R)$ ჯგუფზე, მაშინ ამბობენ, რომ გარდაქმნების $D(R)$ ჯგუფი ქმნის G ჯგუფის წარმოდგენას L სივრცეში. წარმოდგენის განზომილება L სივრცის განზომილების ტოლია.

თუ n -განზომილებიან L სივრცეში არჩეულია არკვეული ბაზისი, მაშინ, როგორც ზემოთ იყო აღნიშნული, თითოეულ წრფივ ოპერატორს შეესაბამება $n \times n$ მატრიცა, სადაც n სივრცის განზომილებას წარმოადგენს. ასეთ შემთხვევაში G ჯგუფი შეიძლება გადაისახოს ჰომომორფულად მატრიცების $D(G)$ ჯგუფზე, რომლებიც ქმნიან G ჯგუფის მატრიცულ წარმოდგენას. L სივრცის ბაზისს, წარმოდგენის ბაზისი ეწოდება, ხოლო $D(G)$ მატრიცების გამრავლების ცხრილი (მატრიცული გამრავლების წესების დაცვით) შეესაბამება G ჯგუფის ელემენტების გამრავლების ცხრილს.

თუ G ჯგუფის გადასახვა ოპერატორების ან მატრიცების ჯგუფზე იზომორფულია, წარმოდგენას ზუსტი ეწოდება. ასეთ შემთხვევაში G და $D(G)$ ჯგუფები ერთნაირი რიგისაა. ჰომომორფული გადასახვის დროს G ჯგუფის რიგი მეტია მის წარმოდგენ $D(G)$ ჯგუფის რიგზე.

ჩვენ $n \times n$ მატრიცის A -ს n სვეტის ვექტორები x_1, x_2, \dots, x_n არის $Ax = 0$ სისტემის ნულოვანი ამონახაზები. ეს ვექტორები x_1, x_2, \dots, x_n არის A -ს n სვეტის ვექტორების n -ედიანი სისტემის ნულოვანი ამონახაზები. A -ს n სვეტის ვექტორების n -ედიანი სისტემის ნულოვანი ამონახაზების არსებობა ნიშნავს A -ს n სვეტის ვექტორების n -ედიანი სისტემის ნულოვანი ამონახაზების არსებობას. ეს ნიშნავს A -ს n სვეტის ვექტორების n -ედიანი სისტემის ნულოვანი ამონახაზების არსებობას. ეს ნიშნავს A -ს n სვეტის ვექტორების n -ედიანი სისტემის ნულოვანი ამონახაზების არსებობას.

ერთი ბაზისიდან მეორე ბაზისზე გადასვლის დროს L წრფივი გარდაქმნის საშუალებით, $D(R)$ მატრიცები იცვლებიან ეკვივალენტური (1.74) $D'R$ მატრიცებით.

$$D'(R) = LD(R)L^{-1}. \quad (1.87)$$

ეს მატრიცები ასევე ქმნიან G ჯგუფის წარმოდგენას, რომელიც $D(R)$ მატრიცებით წარმოდგენის ეკვივალენტურია. წარმოდგენები, რომელიც მოცემული წარმოდგენის ეკვივალენტურია, ერთიმეორის მიმართაც ეკვივალენტურები არიან და გამოხატავენ G ჯგუფის წარმოდგენას L -სივრცის სხვადასხვა ბაზისში. ამგვარად, G ჯგუფის ყველა წარმოდგენა შეიძლება დაეყოს ურთიერთ ეკვივალენტური \mathcal{D} წარმოდგენების კლასებად. თუ ცნობილია თუნდ ერთი წარმოდგენა მოცემული კლასიდან, შესაძლებელი ხდება ამავე კლასში სხვა ნებისმიერი წარმოდგენის მიღება. ამიტომ ჯგუფის ყველა წარმოდგენის პოვნის ამოცანა ახლა იფარგლება უფრო ვიწრო მოთხოვნით: მოიძებნოს ჯგუფის მხოლოდ არაეკვივალენტური წარმოდგენები.

დასავსადი და დაუსვანი წარმოდგენები.

ხასიათები

განვიხილოთ G ჯგუფი g_1, g_2, \dots, g_n ელემენტებით და მისი ვექტორული წარმოდგენა L სივრცეში. როგორც ცნობილია, ამ შემთხვევაში, G ჯგუფის თითოეული ელემენტი იზომორფულად უკავშირდება L სივრცეში მოქმედი M ოპერატორების ან მათი შესაბამისი $D(G)$ მატრიცების ჯგუფს. ზოგიერთ შემთხვევაში წრფივი ვექტორული L სივრცე შესაძლებელია

დაიშალოს L_1, L_2, \dots ქვესივრცეებად, რომელთა განზომილება უფრო დაბალია, ვიდრე L სივრცის განზომილება. ამბობენ, რომ L ვექტორული სივრცის L_1 ქვესივრცე ინვარიანტულია M ოპერატორების მიმართ, თუ ყველა გარდაქმნა, რომლებსაც ეს ოპერატორები ახდენენ L_1 ქვესივრცის ვექტორებზე, ამ ვექტორებს ისევ L_1 ქვესივრცეში ტოვებენ. მაგალითად, სათანადო ოპერატორების არჩევით, სამგანზომილებიანი ვექტორული სივრცე შესაძლებელია ამ ოპერატორების მიმართ დაიშალოს ორ ინვარიანტულ ქვესივრცედ: ორგანზომილებიანი — L_1 , შედგება პორიზონტალურ სიბრტყეში მდებარე ყველა ვექტორისაგან და ერთგანზომილებიანი L_2 — ყველა ვექტორი მიმართულია OZ ღერძის გასწვრივ. ცხადია, სამგანზომილებიანი L სივრცე წარმოადგენს ამ ორი ქვესივრცის ერთობლიობას

$$L = L_1 + L_2.$$

ვინაიდან L_1 ქვესივრცის თითოეული ვექტორი, M ოპერატორის მოქმედებით ისევ L_1 სივრცეში რჩება, შესაძლებელი ხდება ახალი M_1 ოპერატორის შემოღება, რომელიც მკვიდროდ არის დაკავშირებული M ოპერატორთან, მაგრამ მისგან განსხვავებით მოქმედებს მხოლოდ L_1 ქვესივრცის ვექტორებზე. ეს იმას ნიშნავს, რომ L_1 ქვესივრცეში, რომლის განზომილება m ნაკლებია, ვიდრე L სივრცის n განზომილება ($m < n$), შესაძლებელია ავირჩიოთ m ახალი ბაზისური ვექტორი და ამ ბაზისში M_1 გარდაქმნით ვიმოქმედოთ L_1 სივრცეში მდებარე ვექტორებზე. იგივე შეიძლება ითქვას L_2 და სხვა ინვარიანტული ქვესივრცეების მიმართაც. ამგვარად, L სივრცეში მოქმედი M ოპერატორების (გარდაქმნების) ნაცვლად მივიღებთ ინვარიანტულ ქვესივრცეებში მოქმედ M_1, M_2, \dots ოპერატორებს და მათს შესაბამის მატრიცებს. ეს მატრიცები გამოხატავენ G ჯგუფის ვექტორულ $D_1(R)$ წარმოდგენას L_1 ქვესივრცეში, იგივე ჯგუფის $D_2(R)$ წარმოდგენას L_2 სივრცეში და ა. შ., ხოლო G ჯგუფის ვექტორული $D(R)$ წარმოდგენა L სივრცეში ამ წარმოდგენების ერთობლიობა იქნება

$$D(R) = D_1(R) + D_2(R) + \dots \quad (1.88)$$

თუ ასეთი დამოკიდებულება არსებობს, ამბობენ, რომ $D(R)$ წარმოდგენა იშლება $D_1(R), D_2(R)$ და ა. შ. წარმოდგენებად.

ახლა შესაძლებელია ჩამოვყალიბოთ შემდეგი განსაზღვრა:

G ჯგუფის $D(R)$ წარმოდგენას L სივრცეში ეწოდება დაყვანადი, თუ L სივრცეში არსებობს თუნდაც ერთი L_1 ქვესივრცე ინვარიანტული ყველა $M(g)$ ($g \in G$) ოპერატორის მიმართ. თუ ასეთი ინვარიანტული

რიანტული ქვესივრცე არ არსებობს, წარმოდგენას დაუყვანადი ეწოდება.

თუ გვაქვს ჯგუფის დაყვანადი წარმოდგენა, ყოველთვის არსებობს მისი დაშლის შესაძლებლობა დაუყვანი წარმოდგენების ერთობლიობად. გამოვარკვიოთ რა პირობებია ამისათვის საჭირო.

როგორც აღვნიშნეთ, ვექტორული $D(R)$ წარმოდგენა L სივრცეში, წარმოადგენს M ოპერატორების შესაბამისი $n \times n$ კვადრატული მატრიცების ჯგუფს, თუ L სივრცე n განზომილებისაა, ხოლო სამგანზომილებიან სივრცეში ეს იქნება 3×3 კვადრატული მატრიცების ერთობლიობა. ნებისმიერი კვადრატული მატრიცა შესაძლებელია წარმოდგენილ იქნას შემდეგი სახით:

$$\left(\begin{array}{cc|c} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & k \end{array} \right) \text{ ან } \frac{A_1}{C} \left| \frac{B}{A_2} \right., \quad (1.89)$$

სადაც $A_1 = \begin{pmatrix} a, b \\ d, e \end{pmatrix}$ ორგანზომილებიანი კვადრატული მატრიცაა, რომელიც შესაბამისი განზომილების წარმოდგენას ქმნის, ხოლო A_2 — ერთგანზომილებიანი წარმოდგენის შესაბამისი მატრიცაა.

თუ (1.87)-ის თანახმად, შესაძლებელია ბაზისის ისეთი L წრფივი გარდაქმნის პოვნა, რომლის დროს $B, C = 0$, მაშინ (1.89) კვადრატული მატრიცა იღებს სახეს

$$\left(\begin{array}{c|c} A_1 & 0 \\ 0 & A_2 \end{array} \right) \quad (1.90)$$

ახლა, ცხადია, სამგანზომილებიანი მატრიცების მიერ შექმნილი $D(R)$ დაყვანადი წარმოდგენა შესაძლებელია დაიშალოს ორგანზომილებიანი (A_1) და ერთგანზომილებიანი (A_2) დაუყვანი წარმოდგენებად, ვინაიდან ვექტორული წარმოდგენის თითოეული მატრიცა, მაგალითად (1.89), ასეთ შემთხვევაში, ორი მატრიცის პირდაპირ ჯამს წარმოადგენს.

$$\begin{pmatrix} a, b, 0 \\ d, e, 0 \\ 0, 0, k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a, b, 0 \\ d, e, 0 \\ 0, 0, 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0, 0, 0 \\ 0, 0, 0 \\ 0, 0, k \end{pmatrix}$$

საზოგადოდ, თუ G ჯგუფის $D(G)$ წარმოდგენა იშლება $D^{(1)}, D^{(2)}, D^{(k)}$ წარმოდგენებად, ეს იმას ნიშნავს, რომ არსებობს ბაზისის ისეთი (1.87) სახის გარდაქმნა, რომელიც D წარმოდგენის თითოეულ მატრიცას დაიყვანს (1.90) მატრიცის სახემდე. n -განზომილების სივრცეში $n \times n$ კვადრატული მატრიცებისათვის (1.90) დაიწერება შემდეგი სახით:

$$\begin{pmatrix} D^{(1)} & & & 0 \\ 0 & D^{(2)} & & 0 \\ 0 & 0 & D^{(3)} & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & & & D^{(k)} \end{pmatrix} \quad (1.91)$$

სადაც D^1, D^2, D^3 კვადრატული მატრიცებია.

მატრიცების თვისებების განხილვის დროს ნაჩვენები იყო, რომ არის სიდიდეები, რომელნიც უცვლელი რჩებიან ერთი ბაზისიდან მეორეზე გადასვლის დროს. ასეთ სიდიდეებს ეკუთვნის მატრიცის კვალი. როდესაც ვიხილავთ G ჯგუფის მატრიცულ წარმოდგენას, მაშინ რომელიმე R ელემენტის შესაბამისი $D(R)$ მატრიცის კვალს $\sum_i D_{ii}(R)$ ეწოდება ელემენტის ხასიათი D წარმოდგენაში და იგი აღინიშნება შემდეგი სახით

$$\chi(R) = \sum_i D_{ii}(R). \quad (1.92)$$

ვინაიდან ეკვივალენტურ მატრიცებს ერთნაირი კვალი აქვთ, ამიტომ ეკვივალენტურ წარმოდგენებში ჯგუფის ელემენტებს ერთნაირი ხასიათი ექნებათ.

განვიხილოთ G ჯგუფის ორი შეუღლებული ელემენტი s და t . ეს იმას ნიშნავს, რომ არსებობს ისეთი u ელემენტი, რომ $s=utu^{-1}$, მაშინ

$$D(S)=D(u)D(t)[D(u)]^{-1}.$$

ინდექსებით ჩაწერისას მამრავლები ნებისმიერად შეიძლება გადავანაცვლოთ, ამიტომ

$$\sum_i D_{ii}(S)=\sum_i D_{ii}(t),$$

ან

$$\chi(S)=\chi(t) \quad (1.93)$$

ჯგუფში შემავალი ელემენტების ხასიათი ერთნაირია, ამიტომ მოცემულ წარმოდგენაში ჯგუფის ელემენტები, რომელნიც ერთ კლასს მიეკუთვნებიან, ერთი ხასიათის არიან. თუ ჯგუფში შეუღლებული ელემენტების ν კლასია, მივიღებთ $\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_\nu$ ხასიათების ერთობლიობას. ერთეულოვანი ელემენტი E თვითონ ქმნის კლასს და მისი ხასიათი $\chi(E)$ განსაზღვრავს წარმოდგენის განზომილებას. რამდენიმე წარმოდგენის შემთხვევაში შემოაქვთ ზედა ინდექსები. ასე, მაგალითად, χ_ν^μ ნიშნავს ν კლასის ხასიათს μ წარმოდგენაში.

ჯგუფის წარმოდგენა შეიცავს სრულ ინფორმაციას ამ ჯგუფის თვისებების შესახებ და ამიტომ წარმოადგენს მძლავრ იარაღს ფიზიკური სისტემების სიმეტრიული თვისებების შესწავლის პროცესში.

მაგალითის სახით განვიხილოთ სიმეტრიული გარდაქმნების წერტილოვანი ჯგუფი $G\left(\frac{2}{m}\right)$. შემდეგში, კრისტალოგრაფიული ჯგუფების განხილისას, ჩვენ ამ ჯგუფს უფრო დეტალურად გავეცნობით. ახლა კი საკმარისია აღვნიშნოთ, რომ $G\left(\frac{2}{m}\right)$ მეოთხე რიგის ჯგუფია, რომლის ელემენტებია ერთეულოვანი ელემენტი E , მეორე რიგის ღერძი (ოპერატორი, რომელიც აწარმოებს ბრუნვას 180°), ღერძისადმი მართობული სიმეტრიის m სიბრტყე (სიბრტყეში არეკვლის ოპერატორი) და ღერძისა და სიბრტყის გადაკვეთის წერტილში მდებარე ინვერსიის ცენტრი $\bar{1}$ (ოპერატორი, რომელიც წერტილის ყველა კოორდინატს უცვლის ნიშანს). ამგვარად $G\left(\frac{2}{m}\right)$ ჯგუფის ელემენტებია $(E, 2, m, \bar{1})$. ავირჩიოთ კოორდინატთა სისტემა ისე, რომ ჰორიზონტალური სიმეტრიის m სიბრტყეში მოთავსდეს Ox_1 და Ox_2 ღერძები, ხოლო Ox_3 ღერძი m სიბრტყის მართობულ 2 ღერძის გასწვრივ მიემართოს. ასეთნაირად არჩეულ სივრცეში G ჯგუფის თითოეული ელემენტი წარმოდგენილი იქნება შესაბამისი მატრიცით.

$$G\left(\frac{2}{m}\right) = \{ E \quad 2 \quad m \quad \bar{1} \}$$

$$D(G) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.94)$$

ეს ოთხი მატრიცა ქმნის $G\left(\frac{2}{m}\right)$ ჯგუფის ზუსტ ვექტორულ წარმოდგენას.

ამის დასამტკიცებლად შევადგინოთ $\left(\frac{2}{m}\right)$ ჯგუფის ელემენტების გამრავლების ცხრილი, რომელსაც შემდეგი სახე ექნება:

	E	2	m	$\bar{1}$	
E	E	2	m	$\bar{1}$	
2	2	E	$\bar{1}$	m	
m	m	$\bar{1}$	E	2	
$\bar{1}$	$\bar{1}$	m	2	E	

ტების შესაბამისი მატრიცების ნამრავლიც იგივე შედეგს იძლევა და, მაშასადამე, არსებობს იზომორფული გადასახვა $\frac{2}{m}$ ჯგუფის ელემენტებისა და (1.94) მატრიცების ჯგუფს შორის.

ახლა შესაძლებელია ავირჩიოთ ახალი x_1', x_2', x_3' ორთოგონალური კოორდინატთა სისტემა. გარდაქმნის მატრიცა ძველ და ახალ სისტემებს შორის იყოს L . მაშინ, (1.87) გამოსახულების თანახმად, შესაძლებელია ამავე ჯგუფის ახალი ეკვივალენტური წარმოდგენების $D' \left(\frac{2}{m} \right) = LD \left(\frac{2}{m} \right) L^{-1}$ მიღება და ყველა წარმოდგენის დაჯგუფება ეკვივალენტური წარმოდგენების კლასებად. ეკვივალენტურ წარმოდგენებში მატრიცის კვალი ან წარმოდგენის ხასიათი, როგორც ზემოთ იყო ნაჩვენები, რჩება უცვლელი. ასე, მაგალითად, $\frac{2}{m}$ ჯგუფის ელემენტების $\chi(g)$ ხასიათი ყველა ვექტორულ, ორთოგონალურ — ეკვივალენტურ $D \left(\frac{2}{m} \right)$ წარმოდგენებში იქნება:

$$(1)=3; \quad (2)=-1; \quad (m)=1; \quad (\bar{1})=-3... \quad (1.95)$$

როგორც ვხედავთ, ერთეულოვანი ელემენტის ხასიათი წარმოდგენის განზომილების ტოლ სიდიდეს წარმოადგენს.

იმის შემდეგ, რაც ჯგუფი დაყოფილია ეკვივალენტური წარმოდგენების კლასებად, ჯგუფის ყველა დაუყვანი წარმოდგენის პონის ამოცანა მდგომარეობს იმაში, რომ მოიძებნოს ჯგუფის მხოლოდ არაეკვივალენტური წარმოდგენები. ცხადია, არაეკვივალენტური დაუყვანადი წარმოდგენების რიცხვი იქნება ეკვივალენტური წარმოდგენების კლასების რიცხვის ან, რაც იგივეა, შეუღლებული ელემენტების კლასების რიცხვის ტოლი.

$\frac{2}{m}$ ჯგუფის ელემენტების გადამრავლების ცხრილი გვიჩვენებს, რომ ეს ჯგუფი კომუტატურ (აბელის) ჯგუფს წარმოადგენს, ვინაიდან მისი ყველა ელემენტისათვის სრულდება პირობა: $ab=bc$. მაგრამ კომუტატური ჯგუფისათვის თითოეული ელემენტი თვითშეუღლებულს წარმოადგენს და ამიტომ თვითონ ქმნის კლასს, რადგან $aba^{-1}=b$ სრულდება a და b -ს ყველა მნიშვნელობისათვის. ამგვარად, კომუტატურ ჯგუფს ყოველთვის ექნება მისი რიგის ტოლი შეუღლებული ელემენტების კლასების რიცხვი.

ჩვენი მაგალითის შემთხვევაში, $\frac{2}{m}$ ჯგუფს ოთხი ელემენტი გააჩნია და მაშასადამე მას ექნება ოთხი დაუყვანი წარმოდგენა. ჩვენ დამტკიცების გარეშე მივიღებთ თეორემას იმის შესახებ, რომ კომუტატური ჯგუფის ნებისმიერი წარმოდგენა შესაძლებელია დაიშალოს ერთგანზომილებიან დაუყვან წარმოდგენათა ჯამად. ამიტომ $\frac{2}{m}$ ჯგუფის ყველა დაუყვან

ნი წარმოდგენა ერთგანზომილებიანი იქნება. ასეთ შემთხვევაში კი მატრიცა და ელემენტის ხასიათი ერთი მეორეს თანხვედება.

ახლა უშუალოდ განვიხილოთ როგორი იქნება $G \frac{2}{m}$ ჯგუფის დაუყვანი წარმოდგენები და შევადგინოთ ყველა წარმოდგენისათვის ჯგუფის ელემენტების ხასიათების ცხრილი. როგორც ჩანს, $D\left(\frac{2}{m}\right)$ წარმოდგენის (1.94) მატრიცებს უკვე აქვთ (1.90) კვადრატული მატრიცების ფორმა:

$$\begin{array}{c|c|c} E & 2 & m & \bar{1} \\ \hline 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \end{array}$$

აქედან უშუალოდ ვღებულობთ ორ ერთგანზომილებიან წარმოდგენას:

$$\Gamma_2 - 1, \quad 1, \quad -1, \quad -1.$$

$$\Gamma_3 - 1, \quad -1, \quad 1, \quad -1.$$

ამას უნდა დაემატოს ტრივიალური წარმოდგენა (Γ_1) — {1, 1, 1, 1}, როდესაც თითოეული ელემენტი (ოპერატორი) წარმოდგენილია ერთეულოვანი მატრიცით. კიდევ ერთი დაუყვანი წარმოდგენის მისაღებად ავიღოთ ჯგუფი $G' \{1, -1\}$, რომლის ჯგუფური ოპერაცია გამრავლებაა და ჰომომორფულად გადავსახოთ ის $G\left(\frac{2}{m}\right)$ ჯგუფზე შემდეგი წესით:

$$\begin{array}{ccccc} G & E & 2 & m & 1 \\ G' & 1 & -1 & -1 & 1 \end{array}$$

ამ ჯგუფის ჰომომორფული ურთიერთგადასახვა ადვილად შეიძლება შემოწმდეს G ჯგუფის ელემენტების გამრავლების ცხრილიდან, მართლაც:

$$\begin{array}{l} 2 \times m = 1 \quad \text{ან} \quad \bar{1} \times m = 2 \\ -1 \times -1 = 1 \quad \text{ან} \quad 1 \times -1 = -1 \end{array} \quad \text{სრულდება ყველა ელემენტისათვის.}$$

ამგვარად იქმნება კიდევ ერთი ერთგანზომილებიანი წარმოდგენა

$\Gamma_4 \{1, -1, -1, 1\}$. ვინაიდან ერთგანზომილებიანი წარმოდგენებისათვის თვით მატრიცა $D(R)$ თანხვედება ელემენტის $\chi(R)$ ხასიათს, ამიტომ

ხასიათების ცხრილს $G\left(\frac{2}{m}\right)$ ჯგუფისათვის ექნება შემდეგი სახე:

ცხრილში პირველი სტრიქონი უჭირავს ჯგუფის ელემენტებს, ხოლო პირველ სვეტში ერთგანზომილებიანი წარმოდგენებია აღნიშნული Γ_i სიმბოლოთი. ყოველ სტრიქონში მოცემულია თითოეული ელემენტის შესაბამისი ხასიათი $\chi(R) = D(R)$.

ც ხ რ ი ლ ი 1.4				
Γ_i	E	2	m	$\bar{1}$
Γ_1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	-1	-1
Γ_3	1	-1	1	-1
Γ_4	1	-1	-1	1

ყველა იზომორფულ ჯგუფებს, ცხადია, უნდა ჰქონდეთ ხასიათების ერთნაირი ცხრილები. ჩვენს მაგალითში, $\frac{2}{m}$ ჯგუფის იზომორფული ჯგუფებია 222 და $2mm$. ამ ჯგუფებს მართლაც გააჩნიათ ხასიათების ერთნაირი ცხრილები.

ლიტერატურა

1. Л и Ц з у и - д а о. Математические методы в физике. Изд-во «Мир», 1965.
2. А р ф к е и Г. Математические методы в физике. Атомиздат, 1970.
3. К о ч и н Н. Е. Векторное исчисление и начала тензорного исчисления. ГОНТИ, 1938.
4. Х а м е р м е ш М. Теория групп. Изд-во «Мир», 1966.
5. Л ю б а р с к и й Г. Я. Теория групп и ее применение в физике, Москва, 1958.
6. Н а й Д ж. Физические свойства кристаллов. Изд-во «Мир», 1967. (гл. I и II).

კრისტალების წარმოშობა

სიტყვა კრისტალი ბერძნული წარმოშობისაა და ნიშნავს გამჭვირვალე ყინულს. შემდეგში ამ სიტყვით აღინიშნებოდა არა მარტო ყინული, არამედ ყველა გამჭვირვალე მინერალი და, მათ შორის, პირველ რიგში, კვარცი (მთის ბროლი) (ნახ. 2.1). მყარი გამჭვირვალე სხეული არც თუ ისე ხშირად გვხვდება ბუნებაში. თავდაპირველად ადამიანს იზიდავდა კრისტალის გამჭვირვალობა, სისუფთაის გრძობა, რომელიც ამ გამჭვირვალობასთან იყო დაკავშირებული, ფერების შესანიშნავი თამაში კრისტალებში და მხოლოდ ამის შემდეგ მიაქცია მან ყურადღება იმას, რომ ეს მყარი სხეულები ხასიათდებიან გეომეტრიული ფორმების არაჩვეულებრივი სისწორით და მრავალფეროვნებით. აღმოჩნდა, რომ სწორი გეომეტრიული ფორმებით — სივრცეში გარკვეული კანონზომიერებით განლაგებული ბრტყელი წახნაგებით, სწორი წიბოებითა და წვეროებით — ხასიათდებიან არა მარტო გამჭვირვალე მინერალები, არამედ მთელი რიგი არაგამჭვირვალე მყარი სხეულებიც. ამიტომ შემდეგში კრისტალური ეწოდა ყველა იმ მყარ ნივთიერებას, რომლებიც ჩვეულებრივ პირობებში ზრდის სწორი გეომეტრიული ფორმით ხასიათდებიან.

ქიმიურ ნივთიერებათა დიდი უმრავლესობა, რომლებსაც ქიმიკოსები ხელოვნურად იღებენ და რომლებიც ჩვეულებრივი შეხედვით ფხვნილებს წარმოადგენენ, მიკროსკოპის ქვეშ კრისტალურ აღნაგობას ამჟღავნებენ. ჩვენ ყოველდღიურად ვხმარობთ შაქრის ფხვნილს, სუფრის მა-



ნახ. 2. 1. კვარცის კრისტალი.

რილს და მრავალ სხვა ნივთიერებას, რომელნიც უწერილესი კრისტალების ნარევეს წარმოადგენენ. მაგრამ, როგორი წვრილიც არ უნდა იყოს კრისტალები, ყოველთვის შეიძლება დავადგინოთ მათი სწორი გეომეტრიული ფორმა და წახნაგების გარკვეული სიმეტრიულობით განლაგება სივრცეში. სიმეტრია კრისტალების კიდევ ერთი ძირითადი დამახასიათებელი თვისებაა, რომელიც გარეგან გეომეტრიულ ფორმასთან ერთად განპირობებულია კრისტალების შინაგანი აღნაგობის ბუნებით.

ჯერ კიდევ დიდი ხნის წინათ იყო გამო-

თქმის აზრი იმის შესახებ, რომ კრისტალების სწორი გარეგანი ფორმები, მათი წახნაგების სარკისებურობა და სიმეტრია დაკავშირებულია კრისტალების შიგნით მიკროსკოპული ნაწილაკების სწორ სივრცობრივ განლაგებასთან. თანამედროვე რენტგენოგრაფიის და ელექტრონოგრაფიის მეთოდების საშუალებით ჩატარებულმა კვლევებმა ეს აზრი მთლიანად დაადასტურა. ახლა ჩვენ ვიცით, რომ კრისტალი მართლაც წარმოადგენს მოლეკულების, იონების, ცალკეული ატომების, ან ატომური ჯგუფების სივრცეში გარკვეული კანონზომიერებით განლაგების შედეგად მიღებულ სხეულს. ეს ნაწილაკები, დაწყობილი მჭკრივებად და მჭიდროდ განლაგებულნი, ქმნიან ერთ ძირითად დაჯგუფებას, რომელიც დამახასიათებელია თითოეული ნივთიერებისათვის და შემდეგ ზუსტი პერიოდულობით მეორდება სივრცეში ყველა მიმართულებით. სხვაგვარად რომ ვთქვათ, ნაწილაკების ეს კონფიგურაცია წარმოადგენს ძირითად აგურს, რომლის საშუალებითაც ხდება კრისტალის შენება, და გარე ბრტყელი წახნაგები, რომლებსაც ჩვენ ვამჩნევთ, ამ შენობის დაბოლოებას წარმოადგენენ.

მდგომარეობა აქ დაახლოებით ისეთივეა, როგორც ჩვეულებრივი შპალერის აგების შემთხვევაში. ცნობილია, რომ ნებისმიერი შპალერი შედგება ერთი ძირითადი სურათისაგან, მაგალითად, რომელიმე ყვავილისაგან, რომელიც წინასწარ არჩეული კანონზომიერებით მეორდება სიბრტყეზე. კრისტალიც ატომებისაგან შემდგარი ძირითადი სურათის განმეორებას წარმოადგენს, მაგრამ ამ შემთხვევაში გამეორება ხდება სამგანზომილებიან სივრცეში.

თუ წინათ კრისტალი განისაზღვრებოდა როგორც სწორა გარეგანი ფორმის მქონე მყარი სხეული, ახლა, როდესაც გამოირკვა მისი შინაგანი აღნაგობის ბუნება, შესაძლებელია ამ განსაზღვრის შემდგომი დაზუსტება. ჩვენს დროში კრისტალური ეწოდება ყოველ მყარ სხეულს, რომელიც თავისი ნაწილაკების განლაგების ზუსტი შინაგანი სტრუქტურით ხასიათდება. თუ ასეთი კრიტერიუმით მივუდგებით, ირკვევა, რომ ბუნებაში არსებული მყარი სხეულების დიდი უმრავლესობა კრისტალური ხასიათისაა. გამონაკლისს შეადგენენ მინა და მინისებრი ნივთიერებები სინთეტიკური პლასტმასები, მცენარეული და ცხოველური ქსოვილები და რამდენიმე სხვა მყარი ნივთიერება. ყველა დანარჩენი მასალა, რომლებისგანაც შექმნილია მთები და მთის ქანები, ნიადაგი და ზღვის ნაპირებზე გაბნეული ქვიშა, ყინულის ლოლუები და თოვლის ფიფქები, ლითონები და მათი შენადნობები, მყარი ქიმიური რეაქტივების უმრავლესობა და მრავალი სხვა, — კრისტალებს წარმოადგენენ.

დაკვირვება გვიჩვენებს, რომ არსებობს კრისტალების წარმოშობის სამი ძირითადი გზა. პირველ მათგანზე მივეთითებთ წყლის მაგალითით, რომელიც გაცივების შედეგად იქცევა ყინულის კრისტალებად. წყლის კრისტალიზაცია, რა თქმა უნდა, არ წარმოადგენს გამონაკლის მოვლენას. როგორც ჩანს, მრავალი კრისტალი, რომლებიც ჩვენ ბუნებაში გვხვდება, წარმოიშვა ოდესღაც გაღობილ მდგომარეობაში მყოფი ნივთიერების გაცივების შედეგად.

გარდა წმინდა ნივთიერებების მდნარებისა, არსებობს ნივთიერებათა ხსნარები, რომლებიც მიიღებიან ერთი ნივთიერების მეორე ნივთიერების მდნარში გახსნით. გარკვეულ პირობებში შესაძლებელი ხდება გახსნილი ნივთიერების გამოყოფა ხსნარიდან კრისტალების სახით. და, ბოლოს, კრისტალების მიღება შესაძლებელია უშუალოდ გაზური ფაზიდან თხევადი მდგომარეობის გავლის გარეშე. ამგვარი მოვლენის მაგალითს წარმოადგენს რთილი, რომელიც შედგება ჰაერში წყლის ორქლისაგან წარმოშობილი მცირე ზომის კრისტალებისაგან. ასეთივე წარმოშობის კრისტალებს ვხვდებით ვულკანების მახლობლობაშიც, როდესაც ამოფრქვეული გაზების გაცივების შედეგად ჩნდებიან გოგირდის, ამონიუმის ქლორიდისა და ზოგიერთი მინერალის კრისტალები.

საზოგადოდ, კრისტალი ჩაისახება სითხის (მდნარის ან ხსნარის) რომელიმე წერტილში და ეს წერტილი ხდება ცენტრად, საიდანაც მიმდინარეობს მისი შემდგომი ზრდა. ამ ფიზიკურ წერტილს კრისტალიზაციის ცენტრი ან კრისტალური ჩანასახი ეწოდება. კრისტალური ჩანასახის ზრდის პირობები მდნარებსა და ხსნარებში განსხვავდებიან ერთმეორისაგან. მდნარის დაკრისტალების დროს ერთბაშად წარმოიშობა კრისტალიზაციის ცენტრების დიდი რიცხვი. ზრდის პროცესში კრისტალები ხვდებიან ერთმანეთს და მათი გარეგანი ფორმა მახინჯდება. ასე, მაგალითად, ყველას უნახავს როგორ იყინება წყლის პატარა გუბე. ჯერ კრისტალდება გუბის ნაპირები, შემდეგ კრისტალური აპკი გადაეკვრება წყლის მთელს ზედაპირს და მხოლოდ ამის შემდეგ იწყება წყლის გაყინვა სიღრმეში. ამგვარად მიღებულ ყინულს სრულებით არ გააჩნია კრისტალებისათვის დამახასიათებელი სწორი გეომეტრიული ფორმა.

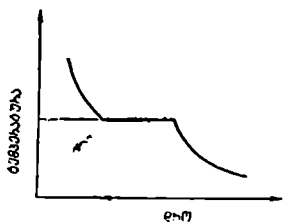
ხსნარების შემთხვევაში გახსნილი ნივთიერება შეიძლება გამხსნელი სითხის მცირე ნაწილს შეადგენდეს და ამიტომ ხსნარის აორთქლების პროცესში წარმოიშობა კრისტალიზაციის ცენტრების შედარებით მცირე რაოდენობა. ეს კი საშუალებას მისცემს თითოეულ კრისტალს განვითარდეს დამოუკიდებლად და ხსნარის სრული აორთქლების შემდეგ შეინარჩუნოს თავისი ზრდის ფორმა დამახინჯების გარეშე. ალბათ, სწორი გეომეტრიული ფორმის დიდი კრისტალები, რომლებსაც ჩვენ ბუნებაში ვპოულობთ, ასეთი წარმოშობის არიან.

ამგვარად, გარემო, რომელშიც კრისტალს უხდება ზრდა, დიდ გავლენას ახდენს მის გარეგან ფორმაზე. იმ შემთხვევაში, თუ ეს გარემო არ უშლის ხელს კრისტალის თავისუფალ ზრდას, ის ყოველთვის იღებს მოცემული ნივთიერებისათვის დამახასიათებელ სწორ გეომეტრიულ ფორმას.

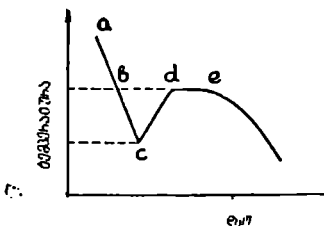
კრისტალის ჩანასახის პირობები

| ახლა განვიხილოთ რა პირობებში ხდება კრისტალიზაციის ცენტრის ან კრისტალური ჩანასახის წარმოშობა. მეცნიერებს დიდი ხანია აინტერესებთ კრისტალების ჩანასახისა და მათი ზრდის საწყისი სტადიების შესწავლა, მაგრამ ეს პრობლემა დღეისათვის, შეიძლება ითქვას, საბოლოოდ არ არის ამოხსნილი. პირველი სისტემატური ცდები ამ მიმართულებით ჩაატარა გერმანელმა მეცნიერმა ტამანმა, რომელმაც კრისტალების ზრდის საწყისი პროცესი შეისწავლა ზოგიერთ ორგანულ ნივთიერებაზე დაკვირვებით. ტამანმა გამოარკვია, რომ კრისტალური ნივთიერების გადნობის და სათანადო გადაცივების შემდეგ, გადაცივებული მდნარის სხვადასხვა წერტილში თავისთავად წარმოიქმნება კრისტალიზაციის ცენტრები — ჩანასახები. პირველ ხანებში ეს ჩანასახები თავისი სიმცირის გამო მიკროსკოპშიც უხილავნი არიან, მაგრამ ზრდის შედეგად თანდათან ხილულები ხდებიან და შესაძლებელია მათი დათვლა. თუ დავითვლით მდნარის ერთეულ მოცულობაში დროის ერთეულში გამოჩენილ კრისტალური ჩანასახების რიცხვს, მივიღებთ სიდიდეს, რომელსაც კრისტალური ჩანასახების წარმოშობის სიჩქარე (μ_n) ეწოდება. ეს სიდიდე ახასიათებს ნივთიერების უნარს გადავიდეს კრისტალურ მდგომარეობაში. იგი დამოკიდებულია სითხის გადაცივების ხარისხზე და ამის გამო უნდა განისაზღვროს გადაცივების გარკვეული ტემპერატურისათვის. გადაცივება არის აუცილებელი პირობა იმისათვის, რომ წმინდა ნივთიერებათა მდნარში გაჩნდეს კრისტალური ჩანასახები და დაიწყოს კრისტალიზაციის პროცესი. პრინციპულად იგივე მდგომარეობას აქვს ადგილი ხსნარების შემთხვევაში. ხსნარის კრისტალიზაცია იწყება მხოლოდ მაშინ, როდესაც მოცემულ ტემპერატურაზე ხსნარი ზენაჭერი ხდება. ამგვარად, ხსნარის ზენაჭერობა და მდნარის გადაცივება კრისტალიზაციის თვალსაზრისით წარმოადგენენ ანალოგიურ მდგომარეობებს.

გადაცივებული ისეთ სითხეს ეწოდება, რომლის ტემპერატურაც უფრო დაბალია, ვიდრე შესაბამისი მყარი ფაზის დნობის ტემპერატურა. ცხადია, სითხის ასეთი მდგომარეობა სტაბილური არ არის და ის გარკვეული დროის განმავლობაში კრისტალურ ფაზაში გადადის. ზოგიერთი პირობის დაცვით, რომლებზეც ქვემოთ გვექნება საუბარი, ეს



ნახ. 2.2. ტემპერატურის სკლა მდნარის გაცივების დროს, ვადაცივებს გარეშე.



ნახ. 2.3. ტემპერატურის სკლა მდნარის გაცივების დროს ვადაცივების შემთხვევაში.

დრო საკმაოდ დიდი შეიძლება აღმოჩნდეს. სითხის გადაცივებულ მდგომარეობას მეტასტაბილური მდგომარეობა ეწოდება.

ავიღოთ კრისტალური ნივთიერების მდნარი და დავიწყოთ მისი გაცივება. გადაუზომოთ ორდინატთა ღერძზე ტემპერატურა, ხოლო აბსცისთა ღერძზე დრო (ნახ. 2.2); მაშინ, ჩვეულებრივ, კრისტალიზაციის ტემპერატურის მიღწევისას, ტემპერატურის შემდგომი შემცირება შეწყდება და იგი უცვლელი რჩება (ჰორიზონტალური მონაკვეთი) მანამ, სანამ არ დამთავრდება მთელი ნივთიერების დაკრისტალება. ეს ხდება იმის შედეგად, რომ სითხის მყარ მდგომარეობაში გადასვლის დროს გამოიყოფა სითბოს გარკვეული რაოდენობა. როდესაც კრისტალიზაცია მთლიანად მთავრდება, ტემპერატურა კვლავ შემცირებას იწყებს. ცხადია, რომ ტემპერატურული მრუდის ასეთი სახე მიიღება მხოლოდ იმ შემთხვევაში, თუ კრისტალიზაციის ტემპერატურის მიღწევის შემდეგ მდნარში ან ხსნარში წარმოიშობა კრისტალური ჩანასახები და დაიწყება მისი დაკრისტალება. მაგრამ სინამდვილეში ასე არ ხდება. თუ ავიღებთ წმინდა ერთგვაროვან ნივთიერებას და დავიწყებთ მის გაცივებას, ტემპერატურულ მრუდს ექნება 2,3 ნახაზზე ნაჩვენები სახე. როგორც ნახაზი გვიჩვენებს, *b* წერტილი შეესაბამება კრისტალიზაციის დაწყების ტემპერატურას, მაგრამ ამ ტემპერატურაზე დაკრისტალება არ იწყება და თხევადი მდგომარეობა გრძელდება *c* წერტილამდე, რომლის ტემპერატურა გაცილებით დაბალია. *bc* მონაკვეთზე სითხე გადაცივებულ მდგომარეობაში იმყოფება. *c* წერტილის შესაბამის ტემპერატურაზე ის შეიძლება იმყოფებოდეს ხანგრძლივი დროის განმავლობაში. მაგრამ თუ აქ რაიმე მიზეზით გაჩნდება კრისტალიზაციის ცენტრი და დაიწყება დაკრისტალება, გამოყოფილი კრისტალიზაციის ფარული სითბოს შედეგად ტემპერატურა აიწევს და მიაღწევს *bde* ჰორიზონტალის შესაბამის

ტემპერატურას. ამის შემდეგ მრულ იღებს ისეთივე სახეს, როგორც 2.2 ნახაზზე იყო ნაჩვენები.

ტემპერატურების სხვაობა (ΔT) c და d წერტილებს შორის განსაზღვრავს სითხის გადაცივების ხარისხს. მცირე გადაცივების შემთხვევაში, კრისტალიზაციის ცენტრების სიმცირის გამო, კრისტალები სწორი მრავალწახნაგების სახით იზრდებიან.

სითხის მიერ გადაცივების ამა თუ იმ ხარისხის მიღწევა მრავალ მიზეზზეა დამოკიდებული. მათ შორის განსაკუთრებული მნიშვნელობა აქვს სითხის სიწმინდეს. მდნარში არ უნდა იყოს მტერის ან რაიმე სხვა მყარი ნაწილაკები, განსაკუთრებით კი—ალეზული მდნარის კრისტალური ფაზის ნარჩენები.

ყველა ეს ნაწილაკი დაბალი ტემპერატურის პირობებში შეიძლება გახდნენ კრისტალიზაციის ცენტრებად, მათზე წარმოიშობა კრისტალური ჩანასახები და გადაცივების მიღება შეუძლებელი ხდება. ამ მოვლენით ხშირად სარგებლობენ კრისტალების ხელოვნურად გაზრდის დროს. მდნარში შესაბამისი კრისტალური ნივთიერების მცირე ნაწილაკს ჩაუშვებენ. ეს ნაწილაკი იქცევა კრისტალიზაციის ცენტრად და მისი საშუალებით შესაძლებელი ხდება საჭირო სიდიდის, ფორმისა და ორიენტირების კრისტალის გაზრდა. ალბათ სითხეში მყარი ნაწილაკების გახსნასთან არის დაკავშირებული ის მოვლენაც, როდესაც სითხის წინასწარ გახურების შედეგად მისი გადაცივების ხარისხი მატულობს და ეს მატება იმდენად დიდია, რამდენადაც მალალია წინასწარი გახურების ხანგრძლივობა. გადაცივების მიღებას ხელს უწყობს აგრეთვე სითხის წინასწარი გაწმენდა ჰაერის ბუშტებისა და მასში გახსნილი გაზებისაგან, სითხის უძრავ მდგომარეობაში ყოფნა და ტემპერატურის თანდათანობითი შემცირება.

სითხეების გადაცივების მოვლენა ხშირად გვხვდება ბუნებაში. მაგალითად, წყლის წვეთების გადაცივება ღრუბლებში, ზოგიერთ შემთხვევაში, შეიძლება — 30° აღწევდეს. ეს იმას ნიშნავს, რომ სითხის გაცივების დროს კრისტალურ მდგომარეობაში გადასვლა ყოველთვის არ ხდება. ზოგიერთი ნივთიერება დიდ მიდრეკილებას იჩენს გადაცივებისადმი და ასეთ მდგომარეობაში ხანგრძლივად რჩება. გადაცივებულ სითხეებს ახასიათებთ დიდი სიბლანტე და ატომების დიფუზიური განაწილების მცირე სიჩქარე, რითაც ისინი ემსგავსებიან მყარ სხეულებს. მაგრამ კრისტალებისაგან განსხვავებით, მათი ატომების განლაგება სივრცეში კანონზომიერი არ არის, ის ქაოსურია და ამის შედეგად ყველა მიმართულებით საშუალოდ—ერთნაირი. სხეულის ამგვარ მდგომარეობას ამორფული ეწოდება. ამორფული ან გადაცივებული სითხის ყველაზე გავრცელებულ მაგალითს მინა წარმოადგენს. ამიტომ ხშირად ამორფულ მდგომარეობას მინისებრ მდგომარეობას უწოდებენ.

როგორც ვხედავთ, ამორფულ მდგომარეობაში გადასასვლელად საჭიროა ტემპერატურული შუალედი, ხოლო კრისტალურ მდგომარეობაში გადასვლა ერთ გარკვეულ ტემპერატურაზე ხდება.

კრისტალური ჩანასახების შექმნა

კრისტალიზაციის λ_n ცოტათი უფრო დაბალი ტემპერატურის მიღწევისას მდნარის მთელი მასა ერთბაშად არ გადადის კრისტალურ მდგომარეობაში. კრისტალიზაცია მდნარის ცალკეულ წერტილებში იწყება და აქედან მთელ მასაში ვრცელდება სასრული სიჩქარით. ეს წერტილები კრისტალურ ჩანასახებს წარმოადგენენ. კრისტალური ჩანასახების როლი შეიძლება პირველ რიგში შეასრულონ ამავე ნივთიერების კრისტალური ფაზის მიკროსკოპულმა ნაწილაკებმა, რომლებიც გაუხსნელი სახით დაცურავენ სითხეში, სხვა ნებისმიერი ნივთიერების მყარმა ნაწილაკებმა, რომლებიც მტერის სახით იმყოფებიან სითხეში და რომელთა კრისტალური ან ქიმიური აღნაგობა ახლოს არის მოცემული ნივთიერების აღნაგობასთან. და, ბოლოს, კრისტალური ჩანასახი შეიძლება წარმოიშვას ფლუქტუაციების შედეგად. უკანასკნელ შემთხვევაში მისი წარმოშობის სიჩქარე (λ_n) დამოკიდებული იქნება მდნარის გადაცივების ΔT ხარისხზე.

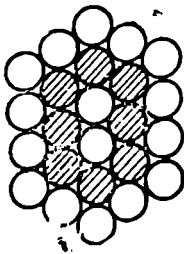
როგორც დაკვირვება გვიჩვენებს, მტერისა და სხვა სახის მყარ ნაწილაკებს უაღრესად დიდი მნიშვნელობა აქვს კრისტალური ჩანასახების შექმნის პროცესში. ამ მხრივ კრისტალური ჩანასახების შექმნა ემსგავსება ორთქლის კონდენსაციის პროცესს. ცნობილია, რომ თუ წყლის ორთქლით გაჯენითელ ჰაერს სწრაფად გავაფართოებთ, დაიწყება ორთქლის კონდენსაცია და წარმოიშობა ნისლი, მაგრამ თუ ეს ჰაერი წინასწარ იქნება გაფილტრული და გაწმენდილი მტერის ნაწილაკებისაგან, ნისლის წარმოშობას ადგილი არ ექნება. ასევე, წყლის დაკრისტალების პროცესში, თოვლის ფიფქისათვის ჩანასახის როლს ჰაერში მყოფი მტერის უმცირესი ნაწილაკები, განსაკუთრებით კი კვარცის უწყვილესი ნაწილაკები, ასრულებენ. თუ ხსნარს ან მდნარს წინასწარ გაფილტრავთ და მოვაცილებთ გაუხსნელ მყარ ან მტერის ნაწილაკებს, რომლებიც შეიძლება იქ იმყოფებოდნენ, მაშინ საკმაოდ დიდი გადაჯერების ან გადაცივების პირობებშიც კი სისტემა ხანგრძლივი დროის განმავლობაში კარგავს კრისტალურ მდგომარეობაში გადასვლის უნარს.

დიდი მნიშვნელობა კრისტალიზაციის პროცესის დაწყებისათვის აქვს აგრეთვე ჰურტლის კედლებს, რომელშიც კრისტალიზაციის პროცესი მიმდინარეობს. ზოგიერთ შემთხვევაში დაკრისტალება სწორედ ამ ჰურტლის კედლებიდან იწყება.

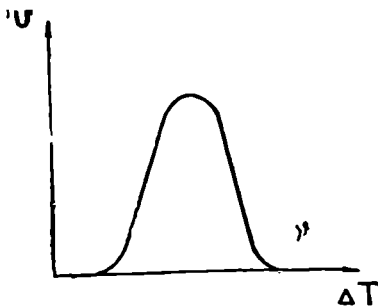
გარდა აღნიშნული მიზეზებისა, კრისტალური ჩანასახის წარმოშო-

ბა შეიძლება ფლუქტუაციების შედეგად იყოს. ცნობილია, რომ სითხის მოლეკულები განუწყვეტლივ ქაოსურ მოძრაობაში იმყოფებიან. ყოველ მოცემულ ტემპერატურაზე მოლეკულებს ახასიათებს გარკვეული საშუალო კინეტიკური და პოტენციური ენერგია, რომელიც მცირდება ტემპერატურის შემცირებასთან ერთად. სითხის მოლეკულების კინეტიკური ენერგია ყოველთვის გაცილებით მეტია, ვიდრე ამ მოლეკულების ენერგია შესაბამის კრისტალურ ფაზაში, ამიტომ მათ არ შეუძლიათ შექმნან რამდენადმე მდგრადი კონფიგურაცია და მოლეკულების ყოველი შემთხვევითი შეჯგუფება დროის მომდევნო მონაკვეთში ირღვევა-სითბური მოძრაობის გამო. თუ ხდება ტემპერატურის დაწვეა, ე. ი. მოლეკულების კინეტიკური ენერგია მცირდება მაშინ სითბური მოძრაობის შედეგად შექმნილი მოლეკულების შეჯგუფებანი შეიძლება უფრო მდგრადი გახდნენ და სითხის შემდგომი გაცივების პირობებში კრისტალური ჩანასახის როლი შეასრულონ. როგორც თანამედროვე გამოკვლევები გვიჩვენებენ, სითხის მოლეკულების განლაგებას, მიუხედავად ქაოსური მოძრაობისა, არ აქვს სრულიად უწყსრიგო და შემთხვევითი ხასიათი. ეს გამოწვეულია მოლეკულებს შორის არსებული ბმის ძალებით, რომლებიც; თავის მხრივ, მოლეკულების ბუნებაზე არიან დამოკიდებულნი. ასე, მაგალითად, წყლის მოლეკულა შედგება ორი დადებითად დამუხტული წყალბადის ატომისა და ერთი უარყოფითად დამუხტული ჟანგბადის ატომისაგან. ასეთი მოლეკულები პოლარულ მოლეკულებს წარმოადგენენ და მათ შორის მოქმედი ძალები ძირითადად ელექტრული ხასიათისაა. გასაგებია, რომ წყლის ყოველი მოლეკულა თავის მოძრაობის პროცესში ცდილობს, რომ მისი დადებითად დამუხტული წყალბადის ატომები იმყოფებოდნენ რაც შეიძლება ახლოს მეზობელი მოლეკულების უარყოფითად დამუხტულ ჟანგბადის ატომებთან. მოლეკულების ასეთი განლაგება ყველაზე მდგრადი იქნება და, თუ მათი შეჯგუფების პროცესში თითოეული მოლეკულა ამ პრინციპის მიხედვით განლაგდება მეზობლების მიმართ, წარმოიშობა განლაგების ერთი გარკვეული სურათი, რომლის განმეორების შედეგად გაჩნდება კრისტალური ჩანასახი.

პირველ ხანებში, სანამ ეს ჩანასახი იმდენად მცირეა, რომ მისი მოლეკულების უმრავლესობა ზედაპირულ ფენას შეადგენს, ის მდგრადი არ იქნება (ნახ. 2.4). ეს გამოწვეულია იმით, რომ ჩანასახის შიგნით მოთავსებული მოლეკულები განიცდიან ყველა მათ ირგვლივ მდებარე მოლეკულის ზემოქმედებას, მაშინ როდესაც ზედაპირულ ფენაში მყოფი მოლეკულები განიცდიან მხოლოდ შიგა ფენებში მყოფი მოლეკულების მოქმედებას. რა თქმა უნდა, ხსნარის სხვა მოლეკულებიც მოქმედებენ მათზე, მაგრამ ისინი გაცილებით შორს იმყოფებიან და მათი მოქ-



ნახ. 2.4. მცირე კრისტალური ჩანასახი. მოლეკულების უმრავლესობა ზედაპირულ ფენას შეადგენს.



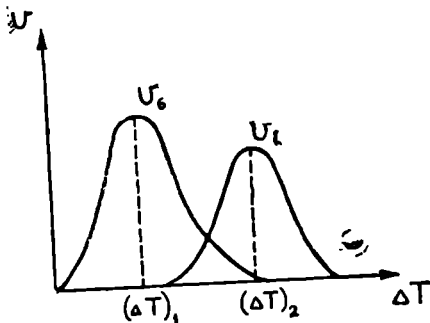
ნახ. 2. კრისტალურის ჩანასახის წარმოშობის სიჩქარი მრული.

მედება შედარებით სუსტია. ამის გამო ზედაპირულ ფენაში მოთავსებულ მოლეკულებს აქვთ მეტი პოტენციური ენერჯია შიგნით მყოფ მოლეკულებთან შედარებით. თავისუფალი ენერჯიის ეს სიჭარბე, რომელიც ზედაპირულ ფენას ახასიათებს, განაპირობებს მცირე ჩანასახის არამდგრადობას. ამიტომ, სანამ ზედაპირულ ნაწილაკთა რიცხვი შედარებით დიდია, ჩანასახი მდგრადი არ იქნება და შესაძლებელია სითბური მოძრაობის გამო ისევ დაიშალოს. როდესაც საკმაო გადაცივების პირობებში ჩანასახის ზომები იმდენად იზრდება, რომ ზედაპირული ნაწილაკების რიცხვი უმნიშვნელოა შიგა ფენებში მყოფ მოლეკულებთან შედარებით, ის უკვე აღარ ქრება და განაგრძობს ზრდას სითხის მოლეკულების ხარჯზე.

ამგვარად, გადაცივებულ სითხეში თავისთავად (სპონტანურად) სითბური ფლუქტუაციების შედეგად, შეიძლება გაჩნდეს კრისტალური ჩანასახი და გაიზარდოს კრისტალი. კრისტალური ჩანასახის წარმოშობის სიჩქარე (v), დამოკიდებულია სითხის გადაცივების ΔT ხარისხზე. ამ დამოკიდებულების ტიპური სახე ნაჩვენებია 2.5 ნახაზზე და წარმოადგენს მაქსიმუმის მქონე მრუდს.

როგორც გრაფიკიდან ჩანს, კრისტალური ჩანასახის სპონტანურად წარმოშობის სიჩქარე ჯერ სწრაფად იზრდება გადაცივების ხარისხის ზრდასთან ერთად, ხოლო შემდეგ მცირდება. ეს აიხსნება იმით, რომ კონდენსირებულ ფაზაში T ტემპერატურის შემცირებას თან ახლავს სიბლანტიის ზრდა და მოლეკულების მოძრაობის ხარისხის შემცირება, რაც დიფუზიური პროცესების შენელებას იწვევს და, მაშასადამე, ახალი ჩანასახების შექმნის ხელშემშლელ მიზეზად იქცევა.

კრისტალიზაციის პროცესის მეორე მნიშვნელოვან მახასიათებელს კრისტალიზაციის ხაზოვანა სიჩქარე (v_0) წარმოადგენს. ეს ის სიჩქარეა, რომლითაც ინაცვლებს საზღვარი მდნარსა და დაკრისტალებულ ნივთიერებას შორის, გამყოფი ზედაპირის მართობულად. როგორც ცდები გვიჩვენებენ, T_{∞} დნობის ტემპერატურაზე კრისტალიზაციის ხაზოვანი სიჩქარე ნულის ტოლია, ხოლო შემდეგ იზრდება გადაცივების ზრდასთან ერთად და აღწევს მაქსიმუმს. ძლიერი გადაცივების დროს ის ისევ ნულს უახლოვდება.



ნახ. 2.6. კრისტალური ჩანასახის წარმოშობის და ზრდის ხაზოვანი სიჩქარის მრუდები.

2.6 ნახაზზე მოყვანილია კრისტალიზაციის ხაზოვანი სიჩქარის და ჩანასახის წარმოშობის სიჩქარის გადაცივების ტემპერატურაზე დამოკიდებულების მრუდები. ნებისმიერი ნივთიერებისათვის, ამ ორი მრუდის ურთიერთგანლაგებას დიდი მნიშვნელობა აქვს კრისტალიზაციის პროცესის მსვლელობისათვის და ამიტომ ისინი ამ ნივთიერების დაკრისტალებიდან მიდრეკილებას ახასიათებენ. ასე, მაგალითად, თუ ორივე მრუდის მაქსიმუმები ერთიმეორესთან ახლოს იმყოფებიან ან ერთმანეთს ემთხვევიან, ეს იმაზე მიუთითებს, რომ გარკვეული გადაცივების პირობებში, როდესაც ჩანასახების მაქსიმალური რიცხვი წარმოიშობა, მათი ზრდის-ხაზოვანი სიჩქარეც მაქსიმალური იქნება. ასეთი ნივთიერება ადვილად კრისტალდება. მისი გადაცივება და, მაშასადამე, ამორფულ მდგომარეობაში გადასვლა, თითქმის შეუძლებელია. ყველა ლითონი ასეთ ნივთიერებებს მიეკუთვნება. თუ ნივთიერება ხასიათდება მაქსიმუმების ისეთი განლაგებით, როგორც 2.6 ნახაზზე არის ნაჩვენები, კრისტალურ ჩანასახთა მაქსიმალური რიცხვის მიღება შესაძლებელი ხდება მხოლოდ ძლიერი გადაცივების დროს, როდესაც ხაზოვანი ზრდის სიჩქარე თითქმის ნულის ტოლია. ასეთი გადაცივების შედეგად ნივთიერება ადვილად გადადის ამორფულ მდგომარეობაში. აღნიშნული მაქსიმუმების შუალედური მდგომარეობა შეესაბამება ისეთ შემთხვევას, როდესაც შესაძლებელია ნივთიერების გადასვლა როგორც კრისტალურ, ისე ამორფულ მდგომარეობაში.

ჩანასახის კრიტიკული ზომა

ახალი ფაზის წარმოშობისა და ზრდის თანამედროვე თეორიები დაკავშირებულია გიბსის იდეებთან, რომელნიც გამოთქმული იყო მის მიერ 1875—1878 წლებში. ცნობილია, რომ ყოველი იზოლირებული

სისტემა იმყოფება მდგრად მდგომარეობაში, თუ ენერჯის ერთი და იგივე მნიშვნელობისათვის მისი მდგომარეობის მცირედი შეცვლა ენტროპიას უცვლელად ტოვებს ან მის შემცირებას იწვევს. თუ ეს პირობა სრულდება სისტემის მდგომარეობის ყოველი სასრული ცვლილებისათვის, ამბობენ, რომ გვაქვს აბსოლუტური მდგრადობა. თუ სისტემის რომელიმე სასრული ცვლილებისათვის ენტროპია იზრდება, მდგომარეობას მეტასტაბილური ეწოდება. მეტასტაბილურ მდგომარეობებს მიეკუთვნება, მაგალითად, ზენაჭერი ორთქლის, ზენაჭერი ხსნარის, გადაცივებული ან გადახურებული სითხის მდგომარეობები. მოცემული ფაზა, ყოველგვარი ცვლილების გარეშე, მეტასტაბილურ მდგომარეობაში შეიძლება იმყოფებოდეს ნებისმიერად დიდი დროის განმავლობაში და ახალ უფრო მდგრად სტაბილურ მდგომარეობაში გადავა მხოლოდ იმის შემდეგ, როდესაც მასში სტაბილური ფაზის ჩანასახები გაჩნდება; მაგალითად, სითხის წვეთები ზენაჭერ ორთქლში, კრისტალიზაციის ცენტრები გადაცივებულ სითხეში ან ზენაჭერ ხსნარში და ა. შ. მაგრამ ახალი ფაზის ჩანასახების შექმნისათვის საჭიროა გარკვეული მუშაობის შესრულება, რომელიც დაიხარჯება მეტასტაბილური და ახალი სტაბილური ფაზის ჩანასახს შორის გაყოფი ზედაპირის შექმნაზე. ეს იმას ნიშნავს, რომ ახალი ფაზის ჩანასახის პირველ პერიოდში სისტემის თავისუფალი ენერჯია კი არ შემცირდება, არამედ გაიზრდება და, მაშასადამე, თუმცა მეტასტაბილური ფაზის გადასვლა სტაბილურ ფაზაში სისტემის წონასწორულ მდგომარეობასთან მიახლოებას ნიშნავს, ის დასაწყისში თავისთავად არ შესრულდება. მხოლოდ მაშინ, როდესაც ჩანასახის სიდიდე იმ ზომას მიაღწევს, რომ ზედაპირული თავისუფალი ენერჯის წილი უმნიშვნელო იქნება, ჩანასახი მდგრადი გახდება და განაგრძობს თავისუფალ ზრდას. ვინაიდან ეს პროცესი პრაქტიკულად მუდმივი ტემპერატურისა და მოცულობის პირობებში მიმდინარეობს, ჩანასახის შექმნაზე დახარჯული მუშაობა თავისუფალი ენერჯის ნაზრდით განისაზღვრება.

ანალოგიულად სისტემა, რომელიც სითხისა და კრისტალური ჩანასახის სივრცეში შედგება. თუ ფაზების შესაბამისი კუთრი მოცულობით თავისუფალ ენერჯიებს φ_1 და φ_2 აღვნიშნავთ და მხედველობაში მივიღებთ, რომ T_{∞} დნობის ტემპერატურაზე ადგილი აქვს ტოლობას $\varphi_1(T_{\infty}) = \varphi_2(T_{\infty})$, მაშინ გადაცივების რომელიმე T ტემპერატურისათვის კუთრი თავისუფალი ენერჯიების სხვაობა $\Delta\varphi = \varphi_2(T) - \varphi_1(T)$ შეიძლება ასე გამოისახოს

$$\Delta\varphi = [\varphi_2(T) - \varphi_2(T_{\infty})] - [\varphi_1(T) - \varphi_1(T_{\infty})]. \quad (2.1)$$

კვადრატულ ფორმულაში მოთავსებული სიდიდეები დაქვალვით მწყობრდება და გადაცივების $\Delta T = T_{\infty} - T$ მცირე ხარისხისათვის დავკმაყოფილებთ ამ დაშლის მხოლოდ პირველი წევრებს, ა. შ.

$$\varphi_2(T) - \varphi_2(T_{\text{ე}}) = \frac{\partial \varphi_2}{\partial T} (T - T_{\text{ე}});$$

$$\varphi_1(T) - \varphi_1(T_{\text{ე}}) = \frac{\partial \varphi_1}{\partial T} (T - T_{\text{ე}}).$$

ახლა ტოლობა (2.1) მიიღებს შემდეგ სახეს

$$\Delta \varphi = - \left(\frac{\partial \varphi_2}{\partial T} - \frac{\partial \varphi_1}{\partial T} \right) (T_{\text{ე}} - T) = - \left(\frac{\partial \varphi_2}{\partial T} - \frac{\partial \varphi_1}{\partial T} \right) \Delta T;$$

მაგრამ

$$\frac{\partial \varphi_2}{\partial T} = -S_2, \quad \frac{\partial \varphi_1}{\partial T} = -S_1,$$

სადაც S_1 და S_2 სითხისა და კრისტალის კუთრი ენტროპიებია კრისტალიზაციის არეში; მაშინ $\Delta \varphi = -(S_1 - S_2) \Delta T$.

შემოვიღოთ კრისტალიზაციის ფარული სითბო

$$\Delta h = T_{\text{ე}}(S_1 - S_2);$$

მივიღებთ

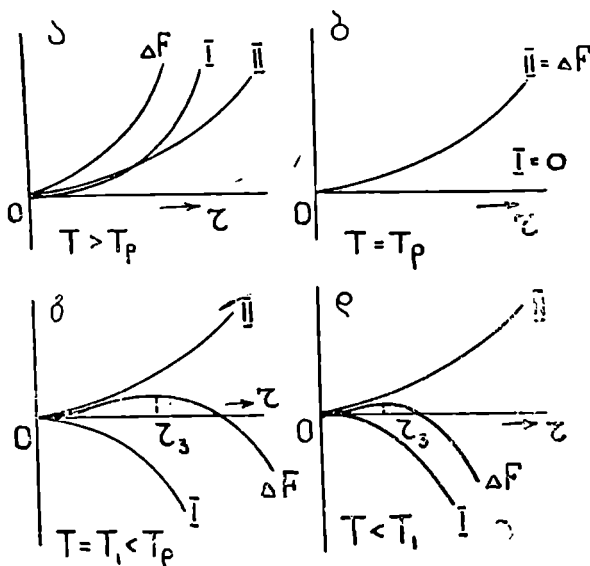
$$\Delta \varphi = - \frac{\Delta h}{T_{\text{ე}}} \Delta T. \quad (2.2)$$

(2.2) ფორმულაში არ არის მიღებული მხედველობაში ზედაპირული თავისუფალი ენერგია, რომელსაც არსებითი მნიშვნელობა აქვს მცირე ზომის კრისტალებისათვის. თუ ზედაპირულ დაკმეულობას კრისტალსა და სითხის გამყოფ ზედაპირზე აღვნიშნავთ σ -თი და მივიღებთ, რომ მცირე კრისტალური ჩანასახი r რადიუსის მქონე სფეროს წარმოადგენს (იგივე შედეგი იქნება კუბური კრისტალებისათვის, ხოლო სხვა ფორმის კრისტალებისათვის შესაძლებელია ფორმის კოეფიციენტის შემოღება) მაშინ ზედაპირული თავისუფალი ენერგია ტოლი იქნება $4\pi r^2 \sigma$, ხოლო მოცულობითი $\frac{4}{3} \pi r^3 \Delta \varphi$.

ამგვარად, როდესაც სითხეში $\frac{4}{3} \pi r^3$ მოცულობის კრისტალური ჩანასახი წარმოიშობა, სითხისა და კრისტალური ფაზის თავისუფალი ენერგიების სხვაობისათვის საბოლოოდ მივიღებთ

$$\Delta F = - \frac{4}{3} \pi r^3 \left(\frac{\Delta h}{T_{\text{ე}}} \cdot \Delta T \right) + 4\pi r^2 \sigma. \quad (2.3)$$

განტოლება (2.3) გამოხატავს სითხისა და კრისტალის თავისუფალი ენერგიების სხვაობის დამოკიდებულებას კრისტალური ჩანასახის ზომისაგან სხვადასხვა ტემპერატურის დროს. შესაბამისი მრუდები მოყვა-



ნახ. 2.7. თავისუფალი ენერგიების სხვაობის დამოკიდებულება კრისტალურა ჩანასახის ზომისაგან სხვადასხვა ტემპერატურების დროს (დარკენის და ჯერის მიხედვით).

ნლაა 2.7 ნახაზზე. ზედაპირული ენერგია ყოველთვის დადებითია, ამიტომ განტოლების მეორე (II) წევრაც ყოველთვის მეტია ნულზე. პირველი (I) წევრის ნაშანი დამოკიდებულაა ტემპერატურაზე. თუ ტემპერატურა $T > T_c$, საწყისი ფაზა თერმოდინამიკურად მდგრად მდგომარეობაში იმყოფება და მისი თავისუფალი ენერგია $\varphi_1(T) < \varphi_2(T)$. ამ შემთხვევაში (2.3) ტოლობას ორივე წევრი დადებითია და კრისტალის ნებისმიერა ზომისათვის $\Delta F = f(r)$ წარმოადგენს მონოტონურად მზარდ ფუნქციას (ნახ. 2.7 ა). ასეთვე მდგომარეობას ექნება ადგილი, როდესაც $T = T_c$, ვინაიდან ამ შემთხვევაში $\Delta \varphi = 0$ და (I) წევრი ნულის ტოლია (ნახ. 2,7 ბ).

ცხადია, რომ ამ პირობებში წარმოშობა კრისტალურა ჩანასახი მდგრადი არ იქნება და სითბური მოძრაობის შედეგად დროს მომდევნო მონაკვეთში დაიშლება. თუ კრისტალურა ჩანასახი გაიწლება გადაცივებულ სითხეში, როდესაც $T < T_c$, მაშინ კრისტალურა ფაზის თავისუფალი ენერგია φ_2 ნაკლები იქნება, ვიდრე სითხის თავისუფალი ენერგია φ_1 და (2.3) ტოლობის (I) წევრი გახდება უარყოფითი. ამის შედეგად

ფუნქცია $\Delta F=f(r)$ უკვე აღარ იქნება მონოტონური და რადიუსის ვარკვეული მნიშვნელობის დროს მიაღწევს მაქსიმუმს (ნახ. 2.7 გ). რადიუსის ამ მნიშვნელობის შესაბამისი კრიტალური ჩანასახის ზომას კრიტიკული ზომა ეწოდება. როდესაც ჩანასახის ზომა r_c კრიტიკულ რადიუსზე ნაკლებია, თავისუფალი ენერგია იზრდება ზედაპირული თავისუფალი ენერგიის სიჭარბის ხარჯზე. ამიტომ კრიტალური ჩანასახი მდგრადი არ იქნება და შეიძლება თავისუფლად დაიშალოს. თუ ჩანასახის ზომა r_c -ზე მეტი გახდება, ΔF იწყებს შემცირებას, ჩანასახი გახდება მდგრადი და განაგრძობს ზრდას. რაც მეტია გადაცივების ტემპერატურა, მით ნაკლები იქნება ჩანასახის კრიტიკული ზომა, რომლის მიღწევის შემდეგ ის სტაბილური გახდება (ნახ. 2.7დ). კრიტალური ჩანასახის კრიტიკული ზომა (r_c) განისაზღვრება $\Delta F=f(r)$ ფუნქციის მაქსიმუმის პირობიდან

$$\frac{\partial(\Delta F)}{\partial r}=0.$$

$$r_c = \frac{2\sigma T_g}{\Delta h \cdot \Delta T}. \quad (2.4)$$

კრიტალური ჩანასახის კრიტიკული ზომა გადაცივების ხარისხისა და გარდაქმნის ფარული სიბზის უკუპროპორციულია, ხოლო ზედაპირული თავისუფალი ენერგიის პირდაპირპროპორციული.

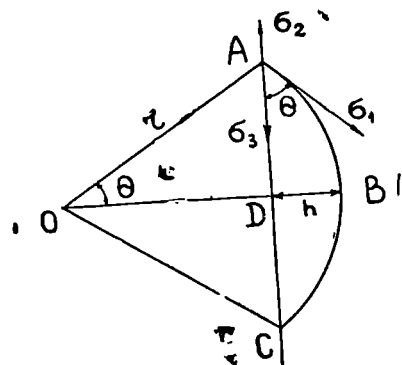
კრიტიკული ზომის მქონე ახალი ფაზის ჩანასახი გარემოსთან არამდგრად წონასწორულ მდგომარეობაში იმყოფება. მართლაც, საკმარისია მისი ზომა მცირედ გადაცილდეს კრიტიკულს, რომ მან განაგრძოს თავისთავად ზრდა, ვინაიდან ეს სროცესი მიმდინარეობს თავისუფალ ენერგიის შემცირების გზით. თუ, პირიქით, ჩანასახის ზომა კრიტიკულზე ნაკლები გახდება, ის თავისთავად განაგრძობს კლებას სრულ გახსნამდე. ამიტომ კრიტიკული ზომის მქონე ჩანასახს „წონასწორული“ ეწოდება. „წონასწორული“ ჩანასახის შექმნისათვის დახარჯული მუშაობა თავისუფალი ენერგიის ნაზრდის მაქსიმალური მნიშვნელობის ტოლია. ეს მაქსიმალური მნიშვნელობა განისაზღვრება (2.3) ტოლობიდან; თუ მასში ჩავსევამთ კრიტიკული რადიუსის სიდიდეს, მივიღებთ

$$(\Delta F)_{\max} = \frac{4\pi\sigma}{3} r_c^3 = \frac{1}{3} \sigma \cdot S, \quad (2.5)$$

სადაც S ჩანასახის ზედაპირის ფართობია.

| როგორც ვხედავთ, კრიტიკული ზომის ჩანასახის შექმნაზე დახარჯული მუშაობა ჩანასახის ზედაპირული ენერგიის ერთ მესამედს შეადგენს.

როგორც აღენიშნეთ, ახალი ფაზის ჩანასახის წარმოშობა განსაკუთრებით ადვილი ხდება, როდესაც უკვე არსებობს გამყოფი ზედაპირი გაუხსნელი ნაწილაკების ან ჭურჭლის კედლების სახით. ეს აიხსნება იმით, რომ ამ შემთხვევაში



ნახ. 2.8. სფერული ჩანასახი ჭურჭლის კედელთან.

ახალი ფაზის ჩანასახის შექმნაზე დახარჯული მუშაობა გაცილებით ნაკლები იქნება. ამის დასამტკიცებლად განვიხილოთ r რადიუსის მქონე სფერული ჩანასახი, წარმოშობილი ჭურჭლის ბრტყელ კედელზე (ნახ. 2.8). აღენიშნოთ σ_1 ჩანასახის ზედაპირული დაჭიმულობა წარმომშობ ფაზასთან გამყოფ ზედაპირზე; σ_2 — ზედაპირული დაჭიმულობა ჭურჭლის კედელსა და წარმომშობი ფაზის საზღვარზე და σ_3 — იმავე ჭურჭლის კედელსა და ჩანასახს შორის. მაშინ, როგორც ნახაზიდან

ჩანს, ზედაპირული დაჭიმულობის ძალების წონასწორობის პირობა იქნება $\sigma_2 - \sigma_3 = \sigma_2 \cos \theta$, ხოლო ჭურჭლის კედელთან ჩანასახის შექმნისათვის დახარჯული მუშაობა, (2.5) თანახმად, მიიღებს შემდეგ სახეს

$$A = \frac{1}{3} (\sigma_1 S_1 + \sigma_3 S_2 - \sigma_2 S_2), \quad (2.6)$$

სადაც S_1 ჩანასახის სფერული სეგმენტის ზედაპირის ფართობია, ხოლო S_2 — ამავე სეგმენტის ფუძის ფართობი. აღენიშნოთ სფერული სეგმენტის სიმაღლე h -ით, მაშინ $h = r - OD = r - r \cos \theta$ და ფართობებისათვის გვექნება:

$$S_1 = 2\pi r h = 2\pi r^2 (1 - \cos \theta);$$

$$S_2 = \pi (AD)^2 = \pi r^2 \sin^2 \theta.$$

ამიტომ

$$A = \frac{1}{3} [2\pi r^2 (1 - \cos \theta) \sigma_1 + \pi r^2 \sin^2 \theta \sigma_3 - \pi r^2 \sin^2 \theta \sigma_2].$$

თუ გავითვალისწინებთ წონასწორობის პირობას, საბოლოოდ მივიღებთ

$$A = \frac{1}{3} \pi r^2 \sigma_1 [2(1 - \cos \theta) - \sin^2 \theta \cos \theta]. \quad (2.7)$$

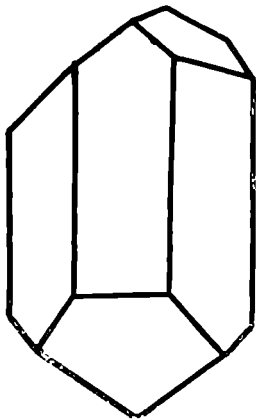
თუ ჩანასახი ქურკლის კედლის მაგივრად გაჩნდება თავისუფალ სივრცეში, მისი ზედაპირული თავისუფალი ენერგია ტოლი იქნება $4\pi r^2 \sigma_1$, ხოლო დახარჯული მუშაობა — $\frac{4}{3} \pi r^3 \sigma_2$. ეს შედეგი მიიღება

(2.7) ფორმულიდან, როდესაც ქურკლის კედელი აბსოლუტურად დაუსველებად ზედაპირს წარმოადგენს და ზღვრული კუთხე $\theta = \pi$. ნაწილობრივი დასველების შემთხვევაში $0 < \theta < \pi$ და $A < (\Delta F)_{\max}$ ე.ი. ქურკლის კედელთან ჩანასახის შექმნაზე დახარჯული მუშაობა ყოველთვის ნაკლები იქნება, ვიდრე მუშაობა, რომელიც იხარჯება ჩანასახის შექმნაზე თავისუფალ სივრცეში. როდესაც $\theta = 0, A = 0$ და, მაშასადამე, აბსოლუტურად დასველებად ზედაპირზე ორთქლის კონდენსაცია ან კრისტალიზაცია შეიძლება დაიწყოს უმნიშვნელო გადაცივების მდგომარეობაშიც კი.

§ 7. კრისტალეზის ზრდა

ზემოთ განსაზღვრული იყო გარემო, რომელშიც შეიძლება წარმოიშვას კრისტალური ჩანასახი და ამ ჩანასახის შექმნის პირობები. ჩვენ დავინახეთ, რომ გარკვეული კრიტიკული ზომის მიღწევის შემდეგ კრისტალურ ჩანასახს ეძლევა არსებობისა და თავისუფალი ზრდის უფლება. ახლა საჭიროა განვიხილოთ როგორია ზრდის ის მექანიზმი, რომელიც განაპირობებს ისეთი სწორი გარეგანი ფორმის მიღებას, როგორც დამახასიათებელია კრისტალებისათვის. გარეგანი ფორმა, რომელსაც საბოლოოდ ლებულობს ნებისმიერი რეალური კრისტალი, განისაზღვრება მისი შემადგენელი ნაწილაკების განლაგების სიმეტრიით. ნაწილაკთა შორის ბმის ძალებით, დეფექტებით, რომელნიც მესერში, შეიძლება წარმოიშვან ზრდის პროცესში, და იმ გარე პირობებით, რომელშიც კრისტალის ზრდა მიმდინარეობს (გადაცივების ხარისხი, ნაჯერობა, სითბოგამტარობა, დიფუზია, მინარევები).

როგორც დაკვირვება გვიჩვენებს, კრისტალებისათვის დამახასიათებელ ზრდის ფორმას პოლიედრი წარმოადგენს. ეს იმას ნიშნავს, რომ კრისტალები, საზოგადოდ, ბრტყელი წახნაგებით არიან შემოსაზღვრული, რომელნიც წიბოებში იკვებებიან (ნახ. 2.9). რა თქმა უნდა, სპეციალურ პირობებში შესაძლებელია სხვა ზრდის ფორმების მიღება, მაგალითად: ნემსისებური, ზოგიერთი დენდრიტული ფორმები და სხვ., რომლებიც, აგრეთვე, პოლიედრული ფორმის სახეცვლილებას წარმოადგენენ. ნებისმიერი კრისტალის ფორმა მთლიანად განსაზღვრული იქნება, თუ ცნობილია მასში შემავალი ყველა წახნაგის ტიპი და ამ წახნაგების სიდიდეების თანაფარდობა. ეს თანაფარდობა, თავის მხრივ, განსაზღვრავს კრისტალის გარეგან სახეს ან მის ჰაბიტუსს.



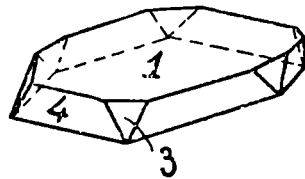
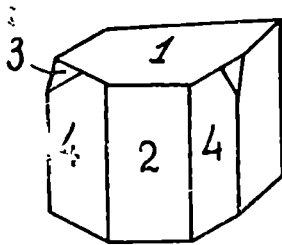
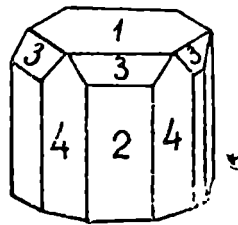
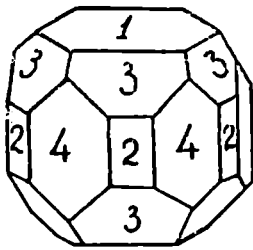
ნახ. 2.9. თურმალინის კრისტალი.

თუ დავაკვირდებით კრისტალის პოლიედრულ ზრდას უცვლელი გაჭრეზე პირობების დროს, დავინახავთ, რომ, როგორც არ უნდა იყოს მისი ფორმა ზრდის დასაწყისში, რამდენიმე ხნის შემდეგ ის იღებს ერთ გარკვეულ ფორმას, რომელიც შემდგომი ზრდის პროცესში უცვლელი რჩება. ეს ზრდის ფორმა წონასწორობაში იმყოფება მის შემქმნელ ფაზასთან და ამიტომ მას წონასწორული ზრდის ფორმა ეწოდება. ცხადია რომ კრისტალის წონასწორული ფორმის წახნაგების სიდიდეების თანაფარდობა შემდგომი ზრდის პროცესში რჩება უცვლელი და ამიტომ არ იცვლება მისი ჰაბიტუსიც.

თუ კრისტალის ზრდის ფორმა, მოცემულ ხსნარში, არ წარმოადგენს წონასწორულ ფორმას, ის თანდათანობით შეიცვლება. ზოგიერთი წახნაგი დროის განმავლობაში გაიხსნება და გაჭრება, ხოლო სხვა წახნაგები გაიზრდება და განვითარდება. ასეთი გზით მოხდება მიახლოება წონასწორულ მდგომარეობასთან.

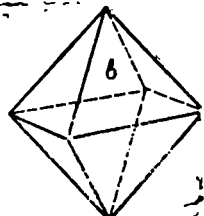
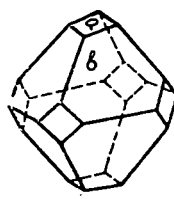
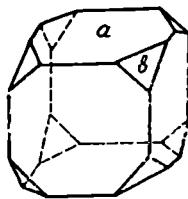
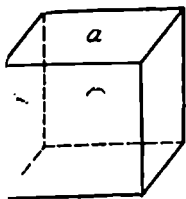
რეალური კრისტალების ზრდის პროცესში ზრდის ფორმა იშვიათად თანხვდება წონასწორულ ფორმას. ეს გამოწვეულია იმით, რომ, თუ არ იქნება მიღებული საგანგებო ზომები, მზარდი კრისტალის ირგვლივ ხსნარის კონცენტრაცია განუწყვეტლივ იცვლება საშენი მასალის ხარჭვის შედეგად, ხოლო გადაცივებულ მდნარში იცვლება ტემპერატურა. ამის გამო სხვადასხვა მიმართულებით წახნაგების ზრდის სიჩქარე სხვადასხვაა და, რა თქმა უნდა, ცვლილებას განიცდის კრისტალის ჰაბიტუსიც. საბოლოო ჯამში, თუმცა მაკროსკოპული კრისტალი დაიფარება წონასწორული ფორმის წახნაგებით, მათი შეფარდებითი სიდიდეები შეცვლილი იქნება. ამიტომ რეალური კრისტალის გაზომვით შესაძლებელი ხდება წონასწორული ზრდის ფორმის მხოლოდწახნაგების დადგენა, ხოლო ამ წახნაგების ფარდობითი სიდიდეების (ჰაბიტუსის) დადგენა შეუძლებელია.

გარეშე პირობების გავლენა კრისტალის ზრდის ფორმაზე კარგად ჩანს 2.10 ნახაზზე, სადაც ნაჩვენებია თუთიის კრისტალების ზრდის ფორმები. მოცემული ნივთიერების კრისტალების ზრდის ფორმებისათვის, მიუხედავად მათი სახესხვაობისა, დამახასიათებელია ერთი და იმავე ტიპის წახნაგების არსებობა, რომლებიც ნახაზზე აღნიშნულია ციფრებით, და ამ წახნაგებს შორის არსებული კუთხეების უცვლელობა.



ნახ. 2.10. თუთიის კრისტალების ზრდის ფორმები სხვადასხვა გარეშე პირობებში (სტრანსკის მიხედვით).

განსაკუთრებით დიდ გავლენას კრისტალების ზრდის ფორმებზე ახდენენ გარეშე მინარევეები. ცნობილია, მაგალითად, რომ სუფრის მარილის კრისტალებისათვის წონასწორული ზრდის ფორმა ჩვეულებრივი კუბია, რომელიც *a*-ტიპის წახნაგებით არის შემოსაზღვრული (ნახ. 2.11). ხსნარში შარდოვანას მცირედი დამატება იწვევს ახალი *b*-ტიპის წახნაგების წარმოშობას. შარდოვანას კონცენტრაციის გაზრდის შედეგად *b*-ტიპის წახნაგები იზრდება, ხოლო *a*-ტიპის წახნაგები მცირდება. საბოლოოდ შარდოვანას კონცენტრაციის სათანადო შერჩევით შესაძლებელია კუბური ზრდის ფორმის ნაცვლად მიღებულ იქნას ოქტაედრული ზრდის ფორმა, რომელიც დაფარული იქნება მხოლოდ *b*-ტიპის წახნაგებით.



ნახ. 2.11. სუფრის მარილის კრისტალების ზრდის ფორმები.

პირველი მოსაზრებები კრისტალების ზრდის შესახებ. ერთმანეთისაგან დამოუკიდებლად, გამოთქმულ იქნა გიბსის და პ. კიურის მიერ და ცნობილია როგორც გიბს-კიურის პრინციპი. ამ პრინციპის თანახმად, ხსნართან ან მდნართან წონასწორობაში მყოფი კრისტალი იღებს ისეთ გარეგან ფორმას, რომლის დროსაც მისი ზედაპირული ენერჯია მინიმუმს აღწევს.

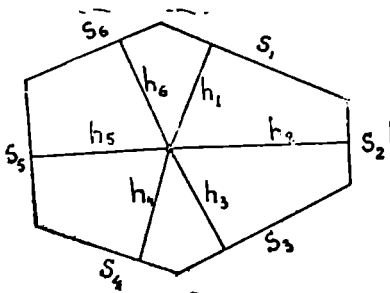
ამ პრინციპით პირველად იქნა აღნიშნული ის ფაქტი, რომ არსებობს გარკვეული კავშირი კრისტალის ზრდის ფორმასა და მის ზედაპირულ ენერჯიას შორის, რომელიც კრისტალის ყველა წახნაგის ზედაპირული ენერჯიების ჯამს წარმოადგენს. აქედან გამომდინარეობს, რომ თუ კრისტალს გააჩნია ერთი და იგივე მოცულობის მქონე რამდენიმე ზრდის ფორმა, მათ შორის წონასწორული იქნება ის, რომელიც თავისუფალი ზედაპირული ენერჯიის მინიმუმს შეესაბამება.

თუ აღვნიშნავთ V მოცულობის მქონე კრისტალის წახნაგების ფართობებს S_1, S_2, \dots , ხოლო ამ წახნაგების შესაბამის კუთრ ზედაპირულ თავისუფალ ენერჯიებს (ენერჯია ფართობის ერთეულზე) $\sigma_1, \sigma_2, \dots$ მაშინ

$$\sigma_i S_i = \min, \text{ როდესაც } V = \text{const.} \quad (2.8)$$

ამგვარად, მუდმივი მოცულობის მქონე ყველა შესაძლებელი მრავალწახნაგიდან უნდა მოიძებნოს ისეთი, რომლის ზედაპირის ფართობი იქნება მინიმალური. ეს ვარიაციული ამოცანა ამოხსნილი იყო ვულფის მიერ, რომლის თეორემა გიბს-კიურის პრინციპის შემდგომ განვითარებას წარმოადგენს.

ავირჩიოთ კრისტალში რომელიმე O წერტილი (ნახ. 2.12), რომელიც კრისტალის ჩანასახს ან კრისტალიზაციის ცენტრს თანხვდება, და ამ წერტილიდან აღვმართოთ მართობები კრისტალის ყველა წახნაგის მიმართ. მართობის მონაკვეთის სიგრძე O წერტილიდან წახნაგამდე აღვნიშნოთ h_i , ხოლო შესაბამისი წახნაგების კუთრი ზედაპირული ენერჯიები σ_i , მაშინ, ვულფის თეორემის თანახმად, მოცემული მოცულობის მქონე მრავალწახნაგისათვის ზედაპირული ენერჯიის მინიმუმი მიღწეული იქნება მისი წახნაგების ისეთი განლაგების დროს, როდესაც ამ წახნაგების მანძილები კრისტალის ერთი და იგივე წერტილიდან მათი კუთრი ზედაპირული ენერჯიების პროპორციული იქნება



ნახ. 2.12. ვულფის თეორემისათვის.

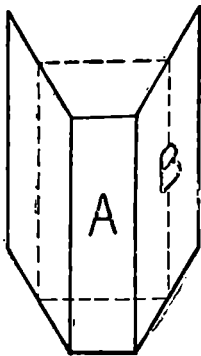
$$\sigma_1 S_1 = \sigma_2 S_2 = \sigma_3 S_3 = \dots = h_1 h_2 h_3 \dots \quad (2.9)$$

ვულფის თეორემა უშუალოდ იძლევა საშუალებას ავაგოთ ისეთი მრავალწახნაგი, რომლის ზედაპირული ენერგია მინიმალურია. ამისათვის საკმარისია ავირჩიოთ წერტილი O და ამ წერტილიდან აღვმართოთ მართობები კრისტალის ყველა შესაძლებელი წახნაგის მიმართ, ისე რომ ამ მართობების სიგრძე სათანადო წახნაგების ზედაპირული ენერგიების პროპორციული იყოს. ამგვარად აგებული მონაკვეთების ბოლოებზე მათ პერპენდიკულარულად გავატაროთ სიბრტყეები (ნახ. 2.12). ის სიბრტყეები, რომელნიც O წერტილიდან ახლოს იქნებიან განლაგებულნი, შექმნიან კრისტალის რეალურ ფორმას, რადგან მათი ზედაპირული ენერგია მინიმალური იქნება. ის წახნაგები, რომელნიც შორს აღმოჩნდებიან განლაგებულნი და ამის გამო სხვა წახნაგებთან შეიძლება არც კი გადაიკვეთონ, წარმოადგენენ მხოლოდ შესაძლებელ სიბრტყეებს და რეალურად არ იარსებებენ.

განვიხილოთ მცირე კრისტალური ჩანასახი, მოთავსებული ზენაჯერ ხსნარში. რამდენიმე ხნის შემდეგ გაიზრდება დიდი ზომის კრისტალი. კრისტალის ზრდა მიმდინარეობს მისი წახნაგების სივრცეში გადანაცვლების შედეგად, ამიტომ გადანაცვლების ეს სიჩქარე კრისტალური წახნაგის ზრდის სიჩქარედ შეიძლება მივიჩნიოთ და მაშინ მანძილი h_i კრისტალის ცენტრიდან მოცემულ წახნაგამდე ზრდის სიჩქარის პროპორციული იქნება. მაგრამ, ვულფის თეორემის თანახმად, მანძილები h_i შესაბამისი წახნაგების კუთრი ზედაპირული ენერგიების პროპორციულია და, მაშასადამე, წახნაგების ზრდის სიჩქარეებიც მათი კუთრი ზედაპირული ენერგიების პროპორციულია.

ვულფის თეორემის ეს შედეგი საშუალებას იძლევა გაიზომოს წახნაგების კუთრი ზედაპირული ენერგიების ფარდობითი მნიშვნელობები, ხსნარის მიმართ, თუ ცნობილი იქნება მათი ზრდის ფარდობითი სიჩქარეები. საზოგადოდ, ის წახნაგი, რომლის ზრდის სიჩქარე და, მაშასადამე, კუთრი თავისუფალი ენერგიაც დიდია, მალე ქრება, როგორც ეს გარკვევით ჩანს A წახნაგის მაგალითზე (ნახ. 2.13). ამ წახნაგის საწყისი მდებარეობა ნაჩვენებია ნახაზზე წყვეტილი ხაზით. ვინაიდან A წახნაგი უფრო სწრაფად მიიწევს წინ, ვიდრე B წახნაგი, მისი ფართობი თანდათან მცირდება, ხოლო ნელა მზარდი B წახნაგის ფართობი მატულობს. კრისტალის შემდგომი ზრდის პროცესში A სახის წახნაგები გაქრება, ხოლო კრისტალს საბოლოოდ შერჩება ის წახნაგები, რომლებიც ნელა იზრდებიან და, მაშასადამე, მცირე კუთრი ზედაპირული ენერგიით ხასიათდებიან. თუ ყველა წახნაგს ზედაპირული ენერგიის ერთი და იგივე მნიშვნელობა ექნება, მაშინ კრისტალი სფეროზე შემოწერილი მრავალწახნაგის ფორმას მიიღებს.

გობს-კუთრი-ვულფის თეორია ფართოდ გავრცელდა და საფუძველი ჩაუყარა ჩვენს წარმოდგენას კრისტალების ზრდის პროცესის შესა-

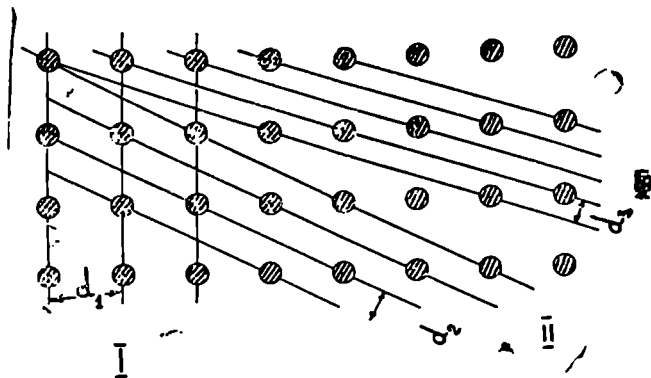


ნახ. 2.13. კრისტალური წახნაგის გადანაცვლება ზრდის პროცესში.

უფრო მარტივია კრისტალის ჰაბიტუსი. ასეთ შემთხვევაში კრისტალური მრავალწახნაგი, ხშირად, მხოლოდ ერთი მარტივი ფორმით არის წარმოდგენილი.

მიუხედავად იმისა, რომ შემდეგში წარმოიშვა კრისტალები ზრდის ახალი უფრო სრულყოფილი თეორიები, ძველი თეორიის ძირითადი დებულებები ზედაპირული ენერჯის როლის შესახებ დარჩა ძალაში. მაგრამ ამ შესწორებით, რომ ზედაპირული ენერჯია, რა თქმა უნდა, არ შეიძლება ჩაითვალოს კრისტალის ზრდისა და მისი გარეგანი სახის ფორმირების ერთადერთ და გადამწყვეტ ფაქტორად.

როდესაც ჩამოყალიბდა წარმოდგენა კრისტალების ატომური აღნაგობის შესახებ, ბრავე შეეცადა დაეკავშირებინა კრისტალის ატომური სტრუქტურა მისი წახნაგების ზრდის მექანიზმთან. ამ დროისათვის ცნობილი გახდა, რომ ნივთიერების დაკრისტალების პროცესში ატომები გარკვეული კანონზომიერებით ლაგდებიან სივრცეში და ქმნიან კრისტალურ მესერს. ჩვენ შემდეგში დაწვრილებით განვიხილავთ კრისტალური მესრის აღნაგობას; ახლა კი საკმარისია აღვნიშნოთ, რომ სივრცეში ატომების მოწესრიგებული განლაგების შედეგად ნებისმიერი ატომური მესერი შეიძლება დაიყოს ურთიერთპარალელური სიბრტყეებით ისე, რომ ამ მესრის ყველა შესაძლებელი კვანძი (ატომი) ამ სიბრტყეებზე მოთავსდეს. ასეთ სიბრტყეებს ატომური სიბრტყეები ეწოდება. 2.14 ნახაზზე მოყვანილია ასეთი მესრის კვეთი წახნაგის სიბრტყით, რომელიც, თავის მხრივ, ორგანზომილებიან მესერს წარმოადგენს. ცხადია, რომ ნებისმიერი ხაზი გატარებული მესრის კვანძებზე (ატომებზე) შესაძლებელი ატომური სიბრტყის კვალს წარმოადგენს. თუ მესერში არჩეული იქნება ერთი რომელიმე სიბრ-



ნახ 2.14. პარალელური ატომური სიბრტყეთა მწკრივები განსხვავდებიან სიბრტყეთა შორის მანძილებით (d_1 , d_2 , d_3) და რეტიკულარულა სიმკვრივით.

ტყე, მაგალითად, (I), მის პარალელურად შესაძლებელია უამრავი ასეთივე ტიპის სიბრტყეების გატარება. ყოველ ასეთ მწკრივში მყოფი სიბრტყეები ერთი და იგივე მანძილით არიან ერთმანეთისაგან დაშორებული. ამ მანძილს სიბრტყეთა შორის მანძილი ეწოდება. როგორც 2.14 ნახაზი გვიჩვენებს, მესერში პარალელურ სიბრტყეთა მრავალი მწკრივის გატარება არას შესაძლებელი და ყოველი ასეთი მწკრივი განსხვავდება დანარჩენებისაგან მხოლოდ სიბრტყეთა შორის მანძილით.

რამდენადაც მცირე იქნება სიბრტყეთა შორის მანძილი, იმდენად მეტი სიბრტყე მოთავსდება მოცემულ მანძილზე და, მაშასადამე, იმდენად ნაკლები იქნება თითოეულ სიბრტყეზე მოთავსებული ატომების რაოდენობა. ასე, მაგალითად, (I) ტიპის სიბრტყეები გაცილებით მჭიდროდ არიან „დასახლებული“ ატომებით, ვიდრე (II) და (III) სახეების სიბრტყეები, რომლებსაც სიბრტყეთა შორის მანძილი შედარებით მცირე აქვთ.

ატომების რაოდენობის კრისტალურა წახნაგის (ატომური სიბრტყის) ფართობის ერთეულზე რეტაქულარულა სიმკვრივე ეწოდება. ამგვარად, სიბრტყეებს, რომლებსაც სიბრტყეთა შორის შედარებით დიდი მანძილი აქვთ, რეტიკულარულა სიმკვრივეც მეტი ექნებათ.

ჭრავს მიხედვით, ზრდას ყველაზე მცირე სიჩქარე იმ წახნაგებს გააჩნიათ, რომლებსაც რეტაქულარულა სიმკვრივის დიდი მნიშვნელობა აქვთ. ამიტომ რეალურა კრისტალა ზრდის პროცესში იფარება ისეთი წახნაგებით, რომლებიც რეტაქულარული სიმკვრივის მაქსიმალური მნიშვნელობაზე ხაზააღებან. თუ ზრავს ამ დებულზეა დაუკავში-

რებთ გიბს-კიურ-ველფის თეორიას, რომლის თანახმადაც კრისტალი იფარება ნელა მზარდი და, მაშასადამე, მცირე ზედაპირული ენერგიის მქონე წახნაგებით, დაეინახავთ, რომ მაქსიმალურ რეტიკულარულ სიმკვრივეს შეესაბამება მინიმალური ზედაპირული ენერგია. ან, სხვაგვარად, კრისტალური წახნაგის ზედაპირული ენერგია მისი რეტიკულარული სიმკვრივის უკუპროპორციულია და ამიტომ კრისტალი იფარება ისეთი ატომური სიბრტყეებით, რომელნიც ყველაზე მჭიდროდ არიან ატომებით „დასახლებულნი“.

კრისტალების ზრდის თეორიის განვითარების შემდგომ საფეხურს წარმოადგენენ ე. წ. დიფუზიური თეორიები. დიფუზიური თეორიების თანახმად, საჭიროა მიღებულ იქნას მხედველობაში ის გარემოება, რომ მზარდი კრისტალის ირგვლივ ადგილი აქვს ხსნარის კონცენტრაციის განუწყვეტელ ცვალებადობას. ამიტომ იხილავენ სამ სხვადასხვა კონცენტრაციას c_0 , c_1 და c_2 . c_0 ისეთი ხსნარის კონცენტრაციაა, რომელიც წონასწორობაშია მასში მყოფ კრისტალთან (კრისტალი არც იხსნება და არც იზრდება); c_2 ზენაჭერი ხსნარის კონცენტრაციაა, რომლის დროს კრისტალი იზრდება. ეს კონცენტრაცია ძირითადად ახასიათებს მთელ ხსნარს კრისტალის ზრდის პროცესში. და, ბოლოს, c_1 წარმოადგენს ხსნარის კონცენტრაციას მზარდი კრისტალის წახნაგების უშუალო სიახლოეში. კრისტალის ზრდის შემთხვევაში $c_2 > c_1 > c_0$, ხოლო ხსნადობის შემთხვევაში, პირიქით $c_2 < c_1 < c_0$. კრისტალის ზრდა იწყებს მისი წახნაგების მახლობლად ხსნარის კონცენტრაციის შემცირებას. კონცენტრაციების სხვაობა, რომელიც ხსნარში ამის შედეგად წარმოიშობა, განაპირობებს ატომების გადაადგილებას, ანუ მათ დიფუზიას მაღალი კონცენტრაციის არიდან უფრო დაბალი კონცენტრაციის მქონე არეში, რომელიც მზარდი კრისტალის ზედაპირთან იმყოფება. მიუხედავად იმისა, რომ კრისტალის წახნაგების სიახლოეს კონცენტრაცია საგრძნობლად მცირდება, ის მაინც ნაჭერობის კონცენტრაციაზე მაღალი რჩება. ეს აიხსნება ადსორბციული ფენის არსებობით, რომელიც უშუალოდ კრისტალის წახნაგებთან იქმნება. ადსორბციული ფენის არსებობის იდეა და, მაშასადამე, კრისტალების ზრდის ახსნა თანამიმდევრული დაფენით, პირველად გამოითქვა ფოლმერის მიერ. ანალოგიური თეორია, მცირე ცვლილებით, შემდეგში ჩამოაყალიბა ბრანდესმა. ფოლმერის თანახმად, ხსნარის ნაწილაკი, როდესაც ის კრისტალის ზედაპირს მიაღწევს და მასზე დაილექება, კარგავს თავისი ფარული სითბოს მხოლოდ ნაწილს. ენერგიის მხოლოდ ნაწილობრივად დაკარგვის გამო, კრისტალის მყარ ზედაპირზე დალექილი ნაწილაკი ინარჩუნებს ამ ზედაპირზე მოძრაობისათვის საკმარის თავისუფლებას. სხვაგვარად რომ ვთქვათ. ასეთი ნაწილაკები მისრიალებენ კრისტალის ზედაპირზე ორგანოზონებიანი გაზის მსგავსად. სწორედ ასეთი მოძრა-

ვი (მოსრიანე) ნაწილაკების ერთობლიობა ქმნის შრეს, რომელიც მოთავსებულია კრისტალის მზარდ ზედაპირსა და ხსნარს შორის და რომელსაც ადსორბციული შრე ეწოდება. ადსორბციული შრის ნაწილაკებს შორის შესაძლებელია ადგილი ჰქონდეს არადრეკადი ხასიათის დაჯახებებს, რის შედეგად ისინი საბოლოოდ დაკარგავენ ჰარბ ენერგიას და შექმნიან ორგანზომილებიან კრისტალურ ფენას, რომელიც მკიდროდ მიეკვრება უკვე არსებული კრისტალური მესრის ზედაპირს. ადსორბციული შრიდან ნაწილაკების გამოყოფისა და მათი კრისტალის ზედაპირზე დაფენის შედეგად კონცენტრაციული წონასწორობა კრისტალის ზედაპირსა და ადსორბციულ შრეს შორის დაირღვევა. ამ წონასწორობის აღსადგენად ძირითადი ხსნარიდან მოხდება ახალი ნაწილაკების გადასვლა ადსორბციულ შრეში და ა. შ. ამგვარად, კრისტალის ზრდის პროცესში ადსორბციული შრე შუალედური საფეხურის როლს ასრულებს. კრისტალური წახნაგის ზრდის სიჩქარე დამოკიდებული იქნება იმაზე, თუ რამდენად სწრაფად მოხდება ადსორბციული შრის კონცენტრაციის აღდგენა, ე. ი. მკვებავი ნივთიერების მიწოდება გარეშე ხსნარიდან და სითხის მოლეკულების დალექვის შედეგად გამოყოფილი ჰარბი ენერგიის გაყვანა მზარდი კრისტალის სიახლოვიდან. თითოეული წახნაგის ზრდა მიმდინარეობს ორგანზომილებიანი კრისტალური ჩანასახების დაფენის საშუალებით და, მაშასადამე, ზრდის პროცესი არ წარმოადგენს უწყვეტ პროცესს — ის იწყება ცალკეული მონომოლეკულური (ორგანზომილებიანი) კრისტალური ფენის წარმოშობით და ამ ფენის შემდგომი ზრდით. ხშირად ზდება, რომ ახალი ფენა წარმოიშობა მაშინ, როდესაც ჰერ კიდევ წინა ფენის ზრდა მომთავრებული არ არის. ამის შედეგად კრისტალური წახნაგი იფარება საფეხურებით. ახალი საფეხურის ან ზედაპირული კრისტალური ჩანასახის გაჩენა, როგორც წესი, იწყება წახნაგის ცენტრში და აქედან ვრცელდება, ვიდრე არ მიადწევს კრისტალის საზღვრებს. ეს პროცესი საკმაოდ მკაფიოდ ჩანს ცილის კრისტალის ელექტრონომიკროსკოპულ სურათზე (ნახ. 2.15). აქ თითოეული შრე ერთი მოლეკულის სისქისა და ყოველი ახალი ფენის ზრდა კრისტალის წახნაგის ცენტრიდან იწყება.

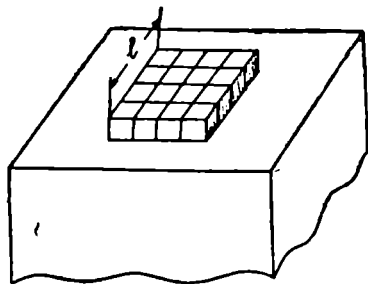
თუ ფენების ზრდისა და შევსების შედეგად შეიქმნება დასრულებული კრისტალური წახნაგი (ნახ. 2.16), კრისტალის შემდგომი ზრდა შეწყდება, სანამ წახნაგის ზედაპირზე არ წარმოიშობა ახალი საფეხურა:— მოლეკულების მდგრადი ჯგუფი, რომელიც ორგანზომილებიან კრისტალურ ჩანასახს წარმოადგენს. ამიტომ ბრანდისმა კრისტალური წახნაგის ზრდის პრობლემა დაუკავშირა იმ მუშაობას, რომელიც საჭიროა დაიხარჯოს ორგანზომილებიანი კრისტალური ჩანასახის შესაქმნელად დასრულებული კრისტალური წახნაგის წარმოქმნაზე ხსნარის



ნახ. 2.15. ცილას კრისტალის ელექტრონომიკროსკოპული სურათი, გადაღებული უ. უაიკოვის მიერ. გადიდება 50 000.

მოცემულ ნაჯერობის პირობებში. გამოირკვა, რომ ახალი ფენა შეიძლება დამკვიდრდეს და განვითარდეს ასეთ ზედაპირზე მხოლოდ იმ შემთხვევაში, თუ ის გარკვეულ კრიტიკულ ზომას მიაღწევს. უფრო მცირე ზომის დროს, მოლეკულების ეს ზედაპირული შეჯგუფება შეიძლება დაიშალოს დიდი ენერჯის მქონე სითხის მოლეკულების დაჯახების შედეგად. კრისტალის მზარდ წახნაზე ორგანოზომილებიანი კრისტალური ჩანასახის წარმოშობა გაინიხილება ბრანდესისა და ფოლმერის მიერ კონდენ აცრის პროცესის ანალოგიურად, რომლის დროს ზენაჯერ ორთქლში წარმოიშობა სფერული ფორმის სითხის წვეთები. ამ თვალსაზრისით იყო განხილული კრისტალური ჩანასახის შექმნა გატაცებულ სითხეში ან ზენაჯერ ხსნარში კრისტალიზაციის დროს. ამიტომ ის შედეგები, რომლებიც სითხეში კრისტალის ჩანასახისას არის მიღებული, ასევე შეიძლება გაერკვოდეს ორგანოზომილებიანი კრისტალური ჩანასახის შექმნის მექანიზმზეც.

განვიხილოთ მცირე ზომის ორგანზომილებიანი კვადრატული ფორმის ჩანასახი (ნახ. 2.16), წარმოშობილი კრისტალის ბრტყელ წახნაგზე. მისი სისქე მოლეკულის (ატომის) დიამეტრის ტოლია, ხოლო გვერდის სიგრძე — l . ასეთი ჩანასახის შექმნის შედეგად კრისტალის ზედაპირული თავისუფალი ენერგია გაიზრდება $4l\lambda$ სიდიდით. აქ $4l$ ჩანასახის პერიმეტრია, ხოლო λ — ახალი ფენის პერიმეტრის სიგრძის ერთეულის თავისუფალი ენერგია. თუ ორგანზომილებიანი კრისტალური ჩანასახის ერთეულოვანი ფართობის თავისუფალი ენერგიას აღვნიშნავთ ϕ_2' , ხოლო თხევადი ფაზის ატომების იმავე რიცხვისათვის — ϕ_1' , მაშინ ორგანზომილებიანი ჩანასახის წარმოშობის შედეგად სითხისა და კრისტალის თავისუფალი ენერგიების სხვაობა ფართობის ერთეულზე, (2.2) ფორმულის თანახმად, იქნება



ნახ. 2.16. ორგანზომილებიანი ჩანასახი დასრულებული კრისტალური წახნაგის ზედაპირზე.

$$\Delta\phi' = -\frac{q \cdot \Delta T}{T_{\text{e}}}, \quad (2.10)$$

სადაც q მონომოლეკულური შრის ერთეულოვანი ფართობის კრისტალიზაციის ფარული სითბოა.

ახლა თავისუფალი ენერგიის სრული ცვლილება ასეთი სახის კრისტალური ჩანასახის შექმნის შედეგად შეიძლება ასე ჩაიწეროს:

$$\Delta F' = l^2(\Delta\phi') + 4l\lambda; \quad (2.11)$$

ან

$$\Delta F' = -l^2 \left(\frac{q \cdot \Delta T}{T_{\text{e}}} \right) + 4l\lambda. \quad (2.11)'$$

როგორც სამგანზომილებიანი ჩანასახის შემთხვევაში, აქაც $\Delta F'$ წარმოადგენს ორგანზომილებიანი ჩანასახის ზომის ფუნქციას $\Delta F' = f(l)$: l -ის კრიტიკული სიდიდე განისაზღვრება ამ ფუნქციის მაქსიმუმის პირობიდან $\frac{\partial(\Delta F')}{\partial l} = 0$;

$$l_0 = \frac{2\lambda T_{\text{e}}}{q \cdot \Delta T}. \quad (2.12)$$

ორგანზომილებიანი წონასწორული ჩანასახის შექმნა დაკავშირებულია მუშაობის შესრულებასთან, რომელიც იხარჯება ამ ჩანასახის პერიმეტრზე. ვ. სანაძე

რის შექმნაზე. ამ მუშაობის მნიშვნელობას მივიღებთ, თუ (2.11)'-ში ჩავსვამთ კრიტიკული ზომის მნიშვნელობას l_c ; მაშინ

$$A = \frac{4\lambda^2 T_g}{q\Delta T} = 2\lambda l_c = \frac{1}{2} (\lambda 4l_c). \quad (2.13)$$

ამგვარად, ორგანოზომილებიანი ჩანასახის შექმნაზე დახარჯული მუშაობა უდრის მისი პერიმეტრის ენერჯის ნახევარს. ეს ფორმულა ანალოგიურია (2.5) ფორმულის, რომელიც სამგანზომილებიანი ჩანასახის შექმნაზე დახარჯულ მუშაობას გამოსახავს, მხოლოდ ზედაპირის ფართობის მაგივრად მონაწილეობს ორგანოზომილებიანი ჩანასახის პერიმეტრი, ხოლო ზედაპირული [დაქიმულობის მაგივრად — პერიმეტრის სიგრძის ერთეულის თავისუფალი ენერჯია.

როგორც ვხედავთ, ორგანოზომილებიანი წონასწორული ჩანასახის ზომები და მის შექმნაზე დახარჯული მუშაობა მდნარის გადაცივების ხარისხის უკუპროპორციულ სიდიდეებს წარმოადგენენ. სითბური ფლუქტუაციების შედეგად ასეთი ჩანასახის წარმოშობის ალბათობა განისა-

ლერება $c \cdot e^{-\frac{\Delta F'}{kT}}$ გამოსახულებით. თუ $\Delta F'$ -ის მნიშვნელობას ჩავსვამთ (2.13)-დან, ეს ალბათობა იქნება

$$c e^{-\frac{4\lambda^2 T_g}{q\Delta T kT}}.$$

კრიტიკულ ზომას გადაცილებული ორგანოზომილებიანი ჩანასახი განაგრძობს ზრდას. ზრდის პროცესში ის თანამიმდევრობით იერთებს ახალ-ახალ ატომებს, ისე რომ კრისტალის წახნაგი ბოლოს მთლიანად იფარება ახალი შრით. ამ შრის დამთავრებისას, ან ჯერ კიდევ მის დამთავრებამდე შეიძლება წარმოიშვას ახალი ორგანოზომილებიანი ჩანასახი. რამდენადაც დიდი იქნება ჩანასახის წარმოშობის ალბათობა, იმდენად ნაკლები დრო გაივლის შემდეგი ჩანასახის შექმნამდე.

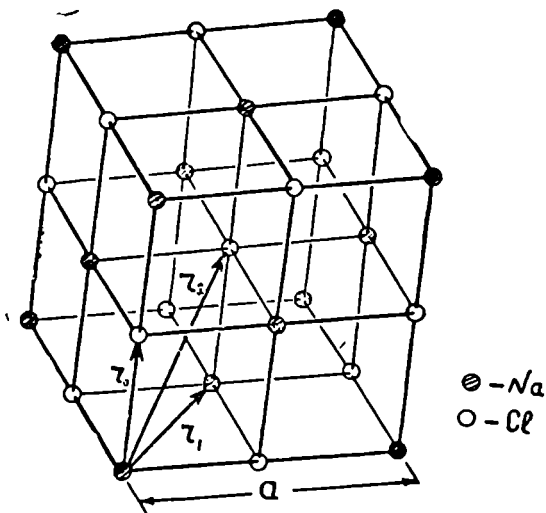
გამოირკვა, რომ ორგანოზომილებიანი ჩანასახის წარმოშობის ალბათობა დიდად არის დამოკიდებული ზენაჯერობის ან გადაცივების ხარისხზე. იმისათვის, რომ კრისტალი იზრდებოდეს შესამჩნევი სიჩქარით, საჭიროა ხსნარის საკმაოდ დიდი ზენაჯერობა. სინამდვილეში, რეალური კრისტალების ზრდის შემთხვევაში, ზრდა მიმდინარეობს უმნიშვნელო ზენაჯერობის ან გადაცივების პირობებშიც და კრისტალები ამ დროს უფრო სწორ და დასრულებულ ფორმას იღებენ. როგორც ჩანს, რეალური კრისტალების ზრდასა და თეორიის შედეგებს შორის არსებობს გარკვეული განსხვავება. ჩვენ შემდეგში განვიხილავთ ამ განსხვავების მიზეზებს.

კოსელი და შემდეგ სტრანსკი შეეცადნენ კრისტალების ზრდასთან დაკავშირებული მოვლენები უშუალოდ კრისტალის ზედაპირისა და სითხის (ან გაზის) მოლეკულების ურთიერთქმედებით აეხსნათ. ამ მიზნით ისინი იხილავდნენ იონური და ვალენტური ტიპის კრისტალებს. ასეთი ტიპის მესრები არჩეულია იმიტომ, რომ ამ შემთხვევაში ორი ნაწილაკის ურთიერთქმედების პოტენციური ენერგია მათ შორის მანძილის მარტივ ფუნქციას წარმოადგენს, ხოლო ნაწილაკის მესერთან ბმის ენერგია უდრის მისი ყველა მეზობელ ნაწილაკთან ურთიერთქმედების ენერგიების ჯამს. კოსელისა და სტრანსკის თეორიებს ბევრი საერთო აქვთ და ამიტომ მათ, ჩვეულებრივ, ერთად განიხილავენ. იმის გამო, რომ ურთიერთქმედების ძალები მანძილის ზრდასთან ერთად სწრაფად მცირდებიან, კოსელი მხედველობაში იღებს მხოლოდ მეზობელი უახლოესი ნაწილაკების მოქმედებას. კრისტალის ზრდის პროცესს იგი განიხილავს, როგორც ახალი იონის ან ატომის დალექვას მზარდი კრისტალის ზედაპირზე და ანგარიშობს ენერგიას, რომელიც გამოიყოფა, როდესაც ახალი ნაწილაკი მიეკვრება კრისტალური მესრის სხვადასხვა ადგილს. ცხადია, ეს ენერგია იქნება განსხვავებული და დამოკიდებული იმაზე, თუ რამდენი უახლოესი მეზობელი ეყოლება ნაწილაკს. რამდენად დიდია გამოყოფილი ენერგია, იმდენად ძლიერი იქნება კავშირი ახალ ნაწილაკსა და კრისტალურ მესერს შორის და დიდი იქნება ასეთი მიერთების ალბათობაც.

კრისტალების ზრდისა და ხსნადობის ასახსნელად სტრანსკი ანგარიშობს იმ მუშაობას, რომელიც საჭიროა დაიხარჯოს, რომ კრისტალური მესრის ზედაპირის სხვადასხვა ადგილზე მყოფი იონი მოცილებულ იქნას ამ ზედაპირიდან (ბმის ენერგია).

ორივე შემთხვევაში დეტალურად განხილული იყო $NaCl$ -ის ტიპის კრისტალების ზრდა. ამ შემთხვევაში კრისტალური მესერი აგებულია Na^+ და Cl^- იონების თანამიმდევრული წყობით (ნახ. 2.17). ენერგიის საზომ ერთეულად პირობით მიღებულია ენერგია, რომელიც საჭიროა ორი მეზობელი და სხვადასხვა ნიშნის იონის ერთიმეორისაგან დასაცილებლად. თუ მესერში ამ ორ იონს შორის მანძილს აღვნიშნავთ r_0 , მაშინ $r_0 = \frac{a}{2}$, სადაც a კრისტალური მესრის პარამეტრია. როდესაც

მანძილი ორ იონს შორის [საკმაოდ დიდია, ისინი ურთიერთქმედებენ როგორც წერტილოვანი მუხტები $\pm e$ და მაშინ მუშაობა, რომელიც საჭიროა შესრულდეს ამ ორი იონის r მანძილამდე დასაახლოებლად, კულო-



ნახ. 2.17. NaCl-ის კრისტალური მესრის ელემენტარული უჯრედი r_0 , r_1 , r_2 —მანძილები სამი სხვადასხვა სახის მეზობელი იონების განლაგებამდე.

ნის კანონის თანახმად, იქნება $\varphi(r) = -\frac{e^2}{r}$ თუ $r=r_0$, მიღებულ პირობით ერთეულებში ეს მუშაობა იქნება

$$\varphi(r_0) = -1 \left[\frac{e^2}{r_0} \right]. \quad (2.14)$$

იონების ურთიერთდაახლოების პროცესში ხდება მათი ელექტრონული გარსების გადათარვა, რის შედეგად წარმოიშობა განზიდვის ძალები. ბორნი და სხვა მეცნიერები ამ ძალების მოქმედებას გამოსახავენ წევრით b/r^n , სადაც b და n მუდმივებია. მაშინ ორი i და j იონის ურთიერთქმედების ენერგია მიიღებს სახეს

$$\varphi_{ij} = \frac{b}{r_{ij}^n} \pm \frac{e^2}{r_{ij}}. \quad (2.15)$$

ნიშანი „+“ აიღება ერთნაირი ნიშნის იონების შემთხვევაში, ხოლო „-“ სხვადასხვა ნიშნის იონებისათვის. როგორც გამოთვლები გვიჩვენებენ, NaCl-ისათვის n , დაახლოებით, 10-ის რიგისაა და ამიტომ შეიძ-

ლება ითქვას, რომ იონებს შორის ურთიერთქმედების ენერგია ძირითადად კულონური ურთიერთქმედების ხასიათს ატარებს $\left(\pm \frac{e^2}{r_{ij}}\right)$.

იმისათვის, რომ გამოვიანგარიშოთ e მუხტის მქონე იონის კრისტალურ მესერთან მისაერთებლად შესრულებული მუშაობა, საჭიროა შევჯამოთ ამ იონის ურთიერთქმედების ენერგია მესრის ყველა ნაწილაკთან; ამიტომ i -ური იონის სრული ენერგია წარმოადგენს Φ_i ენერგიების ჯამს, ალებულს ყველა დანარჩენი იონის მიმართ $\Phi_i = \sum \Phi'_{ij}$

(აჯამვის დროს გამორიცხულია შემთხვევა, როდესაც $i=j$). საზოგადოდ, ეს შეჯამება რთულ ამოცანას წარმოადგენს იმის გამო, რომ მანძილის ზრდასთან ერთად კულონური ურთიერთქმედება მცირდება შედარებით ნელა და ამიტომ ელექტროსტატიკური ურთიერთქმედების ენერგიის მწკრივები ნელკრებად მწკრივებს წარმოადგენენ. განვიხილოთ ყველაზე მარტივი შემთხვევა, როდესაც მოცემულია ერთმანეთისაგან ერთი და იმავე r_0 მანძილით დაცილებული ნიშანცვლადი იონების მწკრივი (ნახ. 2.18) და გამოვთვალოთ მუშაობა, რომელიც სრულდება დადებითი e მუხტის ამ მწკრივთან მისაერთებლად. პირველ საწინააღმდეგო ნიშნის მუხტთან მიახლოება, როგორც დავინახეთ, მოითხოვს მუშაობას — e^2/r_0 . შემდეგი დადებითი მუხტისათვის იქნება $+e^2/2r_0$ და ა. შ. საბოლოოდ მივიღებთ

$$\Phi' = \frac{e^2}{r_0} \left(-1 + \frac{1}{2} - \frac{1}{3} + \frac{1}{4} - \dots \right) = -\frac{e^2}{r_0} \ln 2 = -0,6931 \frac{e^2}{r_0} \quad (2.16)$$

ამგვარად, ნებისმიერი პერიოდული განლაგების დროს ახალი ერთვალენტური იონის მიერთების ენერგია შეიძლება ასე დაიწეროს

$$\Phi = -\frac{e^2}{r_0} \alpha, \quad (2.17)$$

სადაც α მუდმივი სიდიდეა, რომელიც ერთგანზომილებიანი მესრის შემთხვევაში უდრის $\ln 2$. ამ მუდმივ სიდიდეს მადელუნგის მუდმივა ეწოდება. ეს მუდმივა განსაზღვრავს კრისტალურ მესერში იონების ურთიერთქმედების ელექტროსტატიკურ ენერგიას, მაშინ როდესაც მიღებულია მხედველობაში ამ ურთიერთქმედების მხოლოდ კულონური ხასიათი.



ნახ. 2.18. ნიშანცვლადი იონების მწკრივი. მანძილი იონებს შორის უდრის r_0 .

ახლა N-იონის მიერთების შედეგად შექმნილი მესრის ენერჯისათვის მივიღებთ

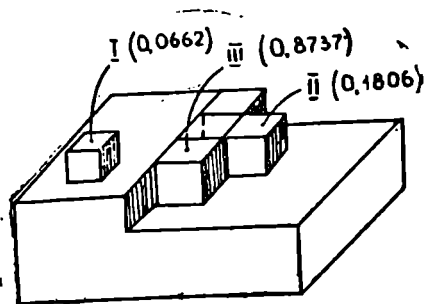
$$\Phi_{ii} = -N \frac{e^2}{r_0} \alpha. \quad (2.18)$$

მადელუნგის მუდმივა დამოკიდებულია მხოლოდ კრისტალური მესრის სტრუქტურაზე და მატულობს მესრის პარამეტრის ზრდასთან ერთად.

თუ ნიშანცვლადი იონური მწკრივის ბოლოზე ახალი იონის მიერთების ენერჯიას გამოვსახავთ e^2/r_0 ერთეულებში, მაშინ ის რიცხობრივად ტოლი იქნება $\Phi' = 0,6931$. ასევე შეიძლება გამოვთვალოთ ენერჯია, რომელიც საჭიროა იმისათვის, რომ ცალკეულ იონურ სიბრტყეს გვერდიდან მიუერთდეს ერთი იონი და სიბრტყის ფართობი გაიზარდოს ერთი ნაწილაკით $\Phi'' = 0,1144$. თუ იონი უერთდება NaCl-ის ტიპის კრისტალის წახნაგს და ამგვარად ახალი ფენის წარმოშობას აძლევს დასაბამს, ენერჯია ტოლი $\Phi''' = 0,0662$. ამ მონაცემებით შესაძლებელია განისაზღვროს მზარდი კრისტალის ზედაპირზე ის ადგილი, რომელიც ენერგეტიკული თვალსაზრისით უფრო ხელსაყრელია ახალი ნაწილაკის მისაერთებლად. ამისათვის თითოეული ნაწილაკი (იონი) წარმოვიდგინოთ პატარა კუბის სახით და კრისტალისათვის ავირჩიოთ უმარტივესი მოდელი, როდესაც ის აგებულია ასეთი პატარა კუბების დაწყობის შედეგად (ნახ. 2.19). როგორც დავინახეთ, ყველაზე მეტი ენერჯიის გამოყოფა ხდება იონების მწკრივის შექმნის პროცესში. ამიტომ იონების მწკრივი წარმოადგენს იონების მდგრად შენაერთს კრისტალიზაციის დაწყების მომენტში. კრისტალიზაციის მეორე ეტაპი იქნება იონური მწკრივების გაერთიანება იონურ სიბრტყეებში და ორგანოზომილებიანი ჩანასახების შექმნა, ხოლო შემდეგ ამ სიბრტყეების ერთმანეთზე დაფენა.

განვიხილოთ ახლა მზარდი კრისტალი, რომლის ზედაპირზე ილექება ახალი იონი (ნახ. 2.19). თუ კრისტალის წახნაგზე დაწყებულია ახალი

ფენის შენება, მაშინ ნაწილაკს აქვს შესაძლებლობა დაილექოს რამდენიმე სხვადასხვა მდგომარეობაში. მაგალითად, თუ ის ჯდება კრისტალის წახნაგზე (I) მდგომარეობაში, გამოიყოფა ენერჯია $\Phi''' = 0,0662$. იმ შემთხვევაში, როდესაც იონი დაიკავებს (II) პოზიციას, ის ერთდროულად იმყოფება კრისტალურ წახნაგზე და ამავე დროს აგრძელებს დაწყებული ფენის ზრდას, ამიტომ ენერ-



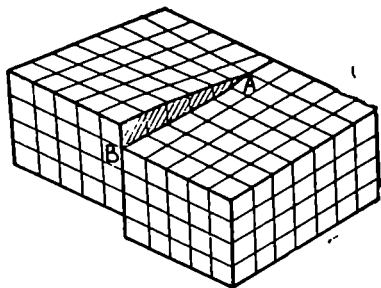
ნახ. 2. 19. NaCl-ის ტიპის კრისტალის მზარდი წახნაგის მიერ ახალი იონების მიერთების წერტილები.

გის მოგება ტოლი იქნება $\Phi'' + \Phi''' = 0,1806$. დაბოლოს, (III) მდგომარეობაში ის იმყოფება წახნაგზე, აგრძელებს ახალი ფენისა და იონების ახალი მწკრივის ზრდას. ამიტომ გამოყოფილი ენერგია შეადგენს ჯამს $\Phi' + \Phi'' + \Phi''' = 0,8737$. ამ მონაცემებიდან ჩანს, რომ გაცილებით ხელსაყრელია დაწყებული კრისტალური წახნაგის ზრდის დამთავრება, ვიდრე ახალი წახნაგის მშენებლობის დაწყება. (I) ტიპის იზოლირებული ნაწილაკები ნაკლებად არიან შეკავშირებულნი მესერთან და ამიტომ კრისტალის ხსნადობის პროცესში ყველაზე ადრე მოწყდებიან მესერს. პირიქით, (III) მდგომარეობაში მყოფი ნაწილაკები მკიდროდ არიან დაკავშირებულნი მესერთან და მათი მოწყვეტა უფრო ძნელია. გარდა ამისა, ნაწილაკის მიერთება და ახალი ფენის ზრდის დაწყება უფრო ხელსაყრელია წახნაგის კუთხეში ან წიბოსთან, ვიდრე წახნაგის ცენტრში.

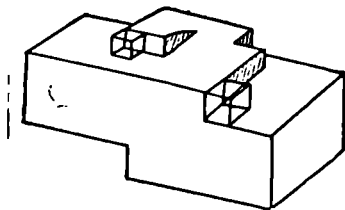
ვალენტურ კრისტალებში, როგორც კოსელი, ისე სტრანსკი განიხილავენ მხოლოდ უახლოესი მეზობელი ატომების ურთიერთქმედების ძალებს. მარტივი კუბური მესრის შემთხვევაში სამი ტიპის უახლოესი მეზობლები ნაჩვენებია 2.17 ნახაზზე. კრისტალების ზრდის მექანიზმი ვალენტური და იონური კრისტალებისათვის ერთნაირია. განსხვავება მდგომარეობს მხოლოდ ახალი ფენის ზრდის დაწყების ადგილმდებარეობაში. როგორც გამოთვლები გვიჩვენებენ, ვალენტურ კრისტალებში ახალი ფენის ზრდა უფრო იოლად იწყება წახნაგის ცენტრში და არა წიბოებთან, როგორც ეს ხდება იონური კრისტალების შემთხვევაში.

კრისტალის ზრდის დინამიკური თეორია

ფოლმერის, კოსელის, შემდეგ სტრანსკისა და სხვების თეორიებმა ბევრად შეუწყო ხელი ჩვენი წარმოდგენის გაღრმავებას კრისტალების ზრდის მექანიზმის შესახებ. მიუხედავად ამისა, ამ თეორიებს არ შეეძლო აეხსნათ მრავალი მოვლენა, რომლებიც დაკავშირებული იყო რეალური კრისტალების ზრდასთან, თუნდაც იმიტომ, რომ მათ საფუძველს წარმოადგენდა იდეალურად სწორი კრისტალის ცნება. ჩვენ დავინახეთ, რომ, თეორიის თანახმად, იზოლირებული ნაწილაკისათვის საკმაოდ ძნელია დამკვიდრდეს კრისტალის დამთავრებულ წახნაგზე. ამისათვის საჭიროა ამ წახნაგზე წარმოიშვას „საფეხური“, ორგანზომილებიანი ჩანასახის სახით. საფეხურის არსებობის შემთხვევაში ახალი ნაწილაკის მიერთება გაცილებით ნაკლებ ენერგიას მოითხოვს. მეორე მხრივ, ასეთი ჩანასახის წარმოშობა შესაძლებელია მოხდეს მხოლოდ ხსნარის დიდი გადაჭრების ან მდნარის გადაცივების დროს, მაშინ, როდესაც რეალური კრისტალების ზრდისათვის ასეთი გადაჭრება ან გადაცივება სრულებით არ არის საჭირო. ყოველივე ეს მიგვითითებს იმაზე, რომ რეალური კრისტალები



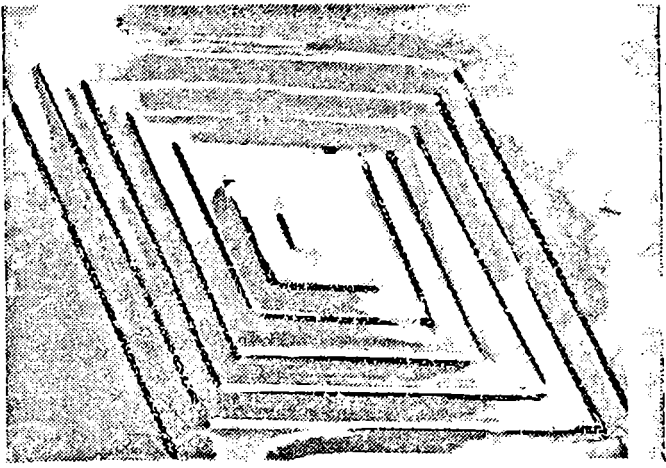
ნახ. 2.20. კუბური კრისტალი ბრახნული დისლოკაციით (რდის მიხედვით).



ნახ. 2.21. კრისტალური წახნავის ზრდა, როდესაც კრისტალს გააჩნია ბრახნული დისლოკაცია.

არ არიან სრულყოფილი. კრისტალური მესრის შექმნის პროცესში არსებობს გარკვეული გადახრები ატომების და მოლეკულების სწორი წყობისაგან. ეს გადახრები აძლევენ დასაბამს დეფექტებს, რომელნიც რეალურ კრისტალებში გვხვდება.

ამ ბოლო ხანებში გამოიკვია, რომ დეფექტები, რომელნიც რეალურ კრისტალებში არსებობენ, დიდ გავლენას ახდენენ არა მარტო კრისტალების ფიზიკურ თვისებებზე, არამედ მათი ზრდის პროცესზე. ამას პირველად მიაქციეს ყურადღება ფრანკმა, ბარტონმა და კაბრერამ, რომლებმაც წამოაყენეს კრისტალების ზრდის დისლოკაციური თეორია. დისლოკაცია კრისტალური მესრის ატომების და მოლეკულების სწორი წყობის დარღვევას წარმოადგენს. ის შეიძლება წარმოიშვას მრავალი სხვადასხვა მიზეზით. დიდ როლს ასრულებს ამ შემთხვევაში მინარევ ნივთიერებათა ატომები და ტემპერატურის ცვლილება. ტემპერატურის ცვლილებებს შეიძლება ადგილი ჰქონდეს კრისტალის ზრდის პროცესში. ზოგიერთ შემთხვევაში ხდება კრისტალის ატომური ფენების ერთი ნაწილის გადაწევა მეორე ნაწილის მიმართ (ძვრა). ამ დროს წარმოიშობა დეფექტი, რომელსაც ბრახნული დისლოკაცია ეწოდება. თუ ეს დეფექტი ჩნდება კრისტალის ზედაპირზე, წახნავი კარგავს ბრტყელ ფორმას და ხდება სპირალური. 2.20 ნახაზზე ნაჩვენებია კუბური კრისტალის სქემა. ამ კრისტალის წყობაში არის დეფექტი ბრახნული დისლოკაციის სახით. ფენების წანაცვლება ამ შემთხვევაში შეიძლება ერთი ან რამდენიმე ატომთშორისი მანძილის ტოლი იყოს. ასეთი გადაწევის შედეგად წახნავის ზედაპირზე ბუნებრივად ჩნდება საფეხური და ამიტომ არ არსებობს ორგანოზომილებიანი ჩანასახის შესაქმნელად ენერჯის დახარჯვის აუცილებლობა. საფეხური ასრულებს ორგანოზომილებიანი ჩანასახის როლს, მას



ნახ. 2.22. ნაჭერი ნახშირწყალბადის ჰეპტანის კრისტალის ელექტრონომიკროსკოპული სურათი. ფენების სპირალური ზრდა ხრახნული დისლოკაციის ირგვლივ (დაუსონის მიხედვით) $\times 15000$.

ადვილად უერთდება ახალი ნაწილაკები და კრისტალი განაგრძობს ზრდას ზევით ხრახნისებური კიბის მსგავსად. 2.21 ნახაზი გვიჩვენებს ხრახნული დისლოკაციის მქონე კრისტალის ზრდის სხვადასხვა სტადიებს. ვინაიდან ხრახნული დისლოკაციის მიერ წახნაგის ზედაპირზე შექმნილი საფეხური განუწყვეტლივ ინაცვლებს და ზრდის პროცესში არ ქრება, კრისტალის ზრდა შეიძლება მიმდინარეობდეს ნებისმიერად დიდი დროის განმავლობაში. ამასთანავე, ის არ მოითხოვს ხსნარის დიდ გადაჯერებას ან მდნარის გადაცივებას.

ელექტრონული მიკროსკოპის საშუალებით შესაძლებელი გახდა მრავალ კრისტალში წახნაგების სპირალური ზრდის დანახვა. 2.22 ნახაზზე ნაჩვენებია დაუსონის მიერ მიღებული ნაჭერი ნახშირწყალბადის — ჰეპტანის კრისტალის ელექტრონომიკროსკოპული სურათი. კარგად ჩანს ფენების სპირალური ზრდა. საფეხურის სიმალლე ერთი მოლეკულური ფენის სისქეს შეადგენს. უნდა აღინიშნოს, რომ სპირალური ზრდა არ არის დამახასიათებელი ყოველგვარი კრისტალისათვის, მაგრამ ის რეალური კრისტალების ზრდის ერთ-ერთ ძირითად მექანიზმს წარმოადგენს.

როგორც ვხედავთ, კრისტალების წარმოშობა და ზრდა, განსაკუთრებით კი ატომების ან მოლეკულების განაწილება და გარკვეული სიმეტრიით დაწყობა, როდესაც ისინი ხსნარიდან ან მდნარიდან მზარდი კრისტალის ზედაპირზე გამოდიან, საკმაოდ რთულ მოვლენას წარმო-

ადგენს. მიუხედავად იმისა, რომ ჩვენ ახლა გაცილებით მეტი ვიცით კრისტალების ზრდის მექანიზმის შესახებ, შეიძლება ითქვას, რომ დღეისათვის არ არსებობს თეორია, რომელსაც შეეძლოს მოცემული ნივთიერების მოლეკულების თვისებებისა და სიჩქარეების გათვალისწინებით გამოითვლოს კრისტალის სხვადასხვა წახანაგების ზრდის სიჩქარე გარკვეული გადაცივებისა და კონცენტრაციის პირობებში.

ლიტერატურა

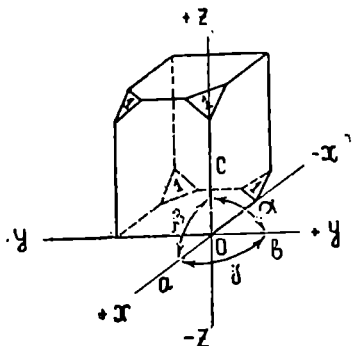
1. Кузнецов В. Д. Кристаллы и кристаллизация. Москва, 1954.
2. Бакли Г. Рост кристаллов. Изд-во «ИЛ», 1954.
3. Бани Ч. Кристаллы и их роль в природе и науке. Изд-во «Мир», 1970.
4. Хонигман Б. Рост и форма кристаллов. Изд-во «ИЛ», 1961.
5. Костов И. Кристаллография. Изд-во «Мир», 1965.
6. Варма А. Рост кристаллов и дислокации. «ИЛ», 1958.
7. Шульце Г. Металлофизика. Изд-во «Мир», 1971.

კრისტალების აგებულება

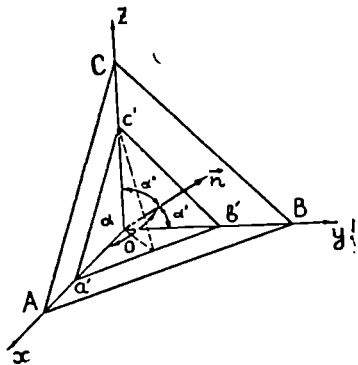
§ 8. კრისტალი, როგორც მაკროსკოპული სხეული

კრისტალების ჩასახვისა და ზრდის პროცესების განხილვისას აღვნიშნეთ, რომ ცალკეული იონები, ატომები ან მოლეკულები გარკვეული კანონზომიერებით ეწყობიან ერთმანეთის მიმართ და ქმნიან მოცემული ნივთიერებისათვის დამახასიათებელ დაჯგუფებას, რომელიც შემდეგ მკაცრი პერიოდულობით მეორდება კრისტალის შიგნით სამივე მიმართულებით.

კრისტალების აღნაგობის ეს უმნიშვნელოვანესი თვისება დადგინდა ჩვენი საუკუნის ოციან წლებში რენტგენის სხივების აღმოჩენისა და კრისტალების შესწავლის მიზნით მათი გამოყენების შედეგად. ამიტომ გასაგებია, რომ ისტორიულად, კრისტალის, როგორც მაკროსკოპული სხეულის შესწავლა, რომელიც გარკვეული ჰაბიტუსით, წახნაგების ფორთა და განლაგებით, გარეგანი სიმეტრიით და მთელი რიგი სხვა ფიზიკური თვისებებით ხასიათდება, ბევრად წინ უსწრებდა შინაგანი აღნაგობისა და მასთან დაკავშირებული თვისებების შესწავლას.



ნახ. 3.1. კრისტალში კოორდინატთა ღერძების და მათ შორის კუთხვების არჩევა.



ნახ. 3.2. კრისტალური წახნაგი ზოგად მდგომარეობაში. a' , b' , c' —ერთელოვანი სიბრტყის პარამეტრები.

კრისტალი შემოსაზღვრულია ბრტყელი წახნაგების სასრული რიცხვით და თავისი გარეგანი ფორმით ჩვეულებრივ მრავალწახნაგს წარმოადგენს. წახნაგების მდებარეობისა და ურთიერთგანლაგების დასადგენად საჭიროა კოორდინატთა სისტემის შემოღება. ჩვეულებრივ, კოორდინატთა ღერძებად ირჩევენ კრისტალის სამ წიბოს ან ამ წიბოების პარალელურ მიმართულებებს ისე, რომ ისინი იკვეთებოდნენ ერთ წერტილში (ნახ. 3.1). წიბოები კრისტალისათვის დამახასიათებელი მნიშვნელოვანი მიმართულებებია და მათ გასწვრივ არჩეულ ღერძებს კრისტალოგრაფიული ღერძები ეწოდება. ავირჩიოთ ისეთი წახნაგი, მაგალითად (1), რომელიც სამივე ღერძს კვეთს და კოორდინატთა ღერძებზე ჩამოჭრის მონაკვეთებს oa' , ob' , oc' (ნახ. 3.2). ასეთი წახნაგი ზოგად მდგომარეობაში იმყოფება კოორდინატთა ღერძების მიმართ. თუ ამ წახნაგს ერთეულოვან წახნაგად მივიჩნევთ, მაშინ oa' , ob' , oc' იქნება ერთეულოვანი მონაკვეთები ox , oy , oz ღერძების გასწვრივ. აღვნიშნოთ ისინი a' , b' , c' ასალებით და მივიღოთ, როგორც სიგრძის ერთეულების ზომა; შესაბამის ღერძებზე. კრისტალის ყველა დანარჩენი წახნაგის მიერ ჩაჭრილი მონაკვეთები გამოისახება ერთეულოვანი მონაკვეთების საშუალებით, რომლებსაც მომავალში ღერძული ერთეულები ვუწოდოთ.

კრისტალური სიბრტყის მიერ კოორდინატთა ღერძებზე ჩამოჭრილ მონაკვეთებს ამ სიბრტყის პარამეტრები ეწოდება. მაშასადამე, a' , b' , c' ერთეულოვანი სიბრტყის პარამეტრებს წარმოადგენენ. ნებისმიერი სიბრტყის მდებარეობა სივრცეში განისაზღვრება მისი პარამეტრების შეფარდებით. კრისტალის ზრდის პროცესში კრისტალური წახნაგი გადაინაცვლებს თავისი თავის პარალელურად; ამიტომ, თუმცა a' , b' , c' პარამეტრები განუწყვეტლივ იცვლებიან სიდიდით, მაგრამ მათი შეფარდება მუდმივი რჩება. ეს შეფარდება შემდეგნაირად შეიძლება განისაზღვროს:

გავატაროთ კოორდინატთა სათავიდან ერთეულოვანი წახნაგის on ნორმალი (ნახ.3.2). კუთხეები, რომლებსაც ნორმალი ox , oy , oz ღერძებთან შეადგენს, აღვნიშნოთ, შესაბამისად, α , α' , α'' მაშინ:

$$\cos \alpha = \frac{on}{a'}; \quad \cos \alpha' = \frac{on}{b'}; \quad \cos \alpha'' = \frac{on}{c'}.$$

აქედან

$$a' : b' : c' = \frac{1}{\cos \alpha} : \frac{1}{\cos \alpha'} : \frac{1}{\cos \alpha''}.$$

ერთეულოვანი სიბრტყის მიერ კოორდინატთა ღერძებზე ჩამოჭრილი მონაკვეთების შეფარდება ტოლია ამ სიბრტყის ნორმალის მიერ კოორდინატთა ღერძებთან შედგენილი კუთხეების კოსინუსების შებრუნებულ მნიშვნელობათა შეფარდებისა.

კუთხეები თვით კოორდინატთა ღერძებს შორის ფაქტიურად წარმოადგენენ კუთხეებს კრისტალის წახნაგებსა ან წიბოებს შორის. ამიტომ დიდი მნიშვნელობა ენიჭება ამ კუთხეების გაზომვას, რის შედეგადაც შესაძლებელი ხდება წახნაგების პარამეტრების შეფარდებათა გამოთვლა და, შესაბამისად, მათი მდებარეობის დადგენა არჩიულ კოორდინატთა ღერძების მიმართ.

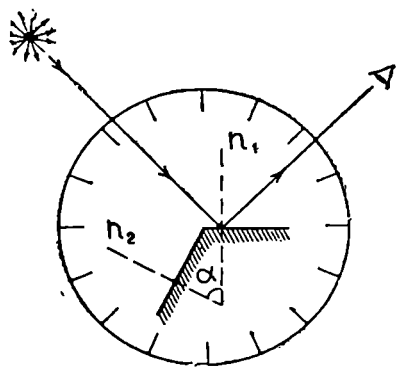
კერძოდ, როგორც დავინახეთ, ერთეულოვანი სიბრტყის მიერ კოორდინატთა ღერძებზე ჩამოჭრილი მონაკვეთების შეფარდება იქნება

$$a' \quad b' \quad c'.$$

კოორდინატთა ღერძებს შორის მდებარე კუთხეებისათვის შემოღებულია სპეციალური აღნიშვნები. ვინაიდან ერთეულოვანი მონაკვეთები a' , b' , c' , აღებულია, შესაბამისად, x , y , z ღერძების გასწვრივ ამიტომ კუთხეებს იღებენ ამ მონაკვეთებს შორის:

$$\alpha = \widehat{b'c'}; \quad \beta = \widehat{c'a'}; \quad \gamma = \widehat{a'b'}.$$

როგორც აღვნიშნეთ, ზრდის სხვადასხვა პირობებში ერთი და იგივე თივითიერების კრისტალები შეიძლება საგრძნობლად განსხვავდებოდნენ ნავისი გარეგანი ფორმით. მიუხედავად ამისა, მუდმივი ტემპერატურისა და წნევის დროს კუთხეები შესაბამის წახნაგებსა და წიბოებს შორის უცვლელნი რჩებიან და მოცემული ნივთიერების კრისტალებისათვის დამახასიათებელ სიდიდეებს წარმოადგენენ. ეს დებულება ცნობილია სტენონის კანონის სახელწოდებით და კრისტალების კლასიფიკაციის საშუალებას იძლევა.



კრისტალის წახნაგებსა და წიბოებს შორის კუთხეების გაზომვა შესაძლებელია გონიომეტრის საშუალებით. მისი პრინციპული სქემა მოცემულია 3.3 ნახაზზე. როგორც ნახაზიდან ჩანს, ლიმბის შემობრუნების კუთხე უდრის კრისტალური წახნაგების ნორმალებს შორის კუთხეს ან ამ წახნაგების გარე კუთხეს.

ნახ. 3.3. გონიომეტრის მუშაობის სქემა.

კრისტალის ნებისმიერი წახნავი კოორდინატთა ღერძებზე ჩამოჭრის ერთეულოვანი წახნავისაგან განსხვავებულ მონაკვეთებს, მაგრამ, როგორც ირკვევა, ეს მონაკვეთები გარკვეულ თანფარდობაში იმყოფებიან ერთეულოვანი წახნავის პარამეტრებთან. ავიღოთ კრისტალის ნებისმიერი წახნავი ABC (ნახ.3.2), რომელიც კოორდინატთა ღერძებზე ჩამოჭრის OA , OB და OC მონაკვეთებს. ეს მონაკვეთები შეიძლება გამოვსახოთ ერთეულოვანი ღერძული მონაკვეთების საშუალებით: $OA=ma'$, $OB=nb'$, $OC=pc'$, სადაც m , n , p მთელი ან წილადი რიცხვებია და წარმოადგენენ სიბრტყის მიერ კოორდინატთა ღერძებზე ჩამოჭრილი მონაკვეთების სიდიდეს, გამოსახულს ღერძულ ერთეულებში. ახლა შეიძლება დაიწეროს შეფარდება

$$\frac{OA}{a'} \quad \frac{OB}{b'} \quad \frac{OC}{c'} = m:n:p. \quad (3.1)$$

[ნებისმიერი სიბრტყის მიერ კოორდინატთა ღერძებზე ჩამოჭრილი მონაკვეთები, გამოსახული ღერძულ ერთეულებში, ისე შეეფარდებიან ერთმანეთს, როგორც მცირე მთელი რიცხვები ი.]

ეს კანონი ჩამოყალიბებულ იქნა ჰაიუსის მიერ კრისტალების წახნავების და მათ შორის კუთხეების გაზომვის შედეგად და მას რაციონალურ შეფარდებათა კანონი ეწოდება. როგორც შემდეგში დავინახავთ, იგი წარმოადგენს კრისტალის შინაგანი აღნაგობის მაკროსკოპული გამოვლინების შედეგს.

რაციონალურ შეფარდებათა (3.1) კანონის თანახმად, კრისტალის რომელიმე სიბრტყის მიერ კოორდინატთა ღერძებზე ჩამოჭრილი მონაკვეთების შეფარდება შეიძლება ასე დაიწეროს: $ma' : nb' : pc'$. თუ შევადარებთ ერთეულოვანი სიბრტყის მიერ ჩამოჭრილი მონაკვეთების შეფარდებას $a' : b' : c'$, დავინახავთ, რომ ერთეულოვანი წახნავის პარამეტრების შეფარდებიდან შეიძლება მივიღოთ ნებისმიერი სხვა წახნავის პარამეტრების შეფარდება; ამისათვის საკმარისია ერთეულოვანი წახნავის პარამეტრების თითოეული წევრი გავამრავლოთ მცირე მთელი რიცხვზე.

წახნავის სიზოლოვანი

თუ კრისტალური სიბრტყე კოორდინატთა ღერძებზე OA , OB და OC მონაკვეთებს ჩამოჭრის, მისი განტოლება შეიძლება დაიწეროს შემდეგი სახით

$$\frac{x}{OA} + \frac{y}{OB} + \frac{z}{OC} = 1. \quad (3.2)$$

სიბრტყეს, რომელიც კოორდინატთა ღერძებზე ჩამოჭრის ღერძული ერთეულების მთელ რიცხვს, რაციონალური სიბრტყე ეწოდება. როგორც რაციონალურ შეფარდებათა კანონიდან ჩანს, ასეთი სიბრტყის მდებარეობის დასადგენად საკმარისია განვსაზღვროთ პარამეტრები m, n, p , როგორც მთელი და ურთიერთმარტივი რიცხვები. ვინაიდან ფარდობები $\frac{OA}{a'}, \frac{OB}{b'}, \frac{OC}{c'}$ წარმოადგენენ რაციონალურ რიცხვებს, ამის გაკეთება შესაძლებელია ყოველთვის.

განიხილოთ მაგალითისათვის შემთხვევა, როდესაც სიბრტყე ჩამოჭრის კოორდინატთა ღერძებზე მონაკვეთებს:

$$OA = \frac{1}{2} a'; \quad OB = \frac{1}{3} b'; \quad OC = 1c' \quad (\text{ნახ. 3.4}).$$

რაციონალურ შეფარდებათა (3.1) კანონის თანახმად:

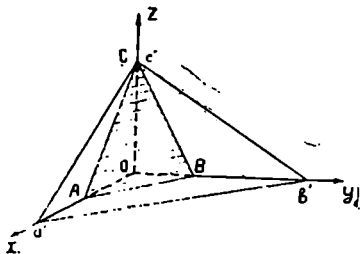
$$OA : OB : OC = \frac{1}{2} a' : \frac{1}{3} b' : 1c'.$$

ახ

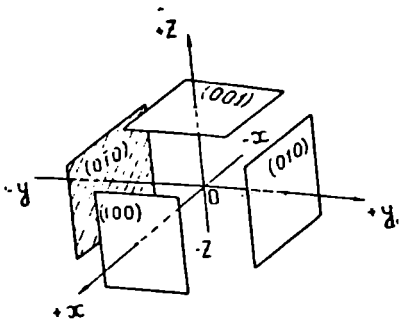
$$\frac{OA}{a'} : \frac{OB}{b'} : \frac{OC}{c'} = \frac{1}{2} : \frac{1}{3} : 1 = 3 : 2 : 6;$$

მაშასადამე, რაციონალური სიბრტყისათვის $m=3, n=2, p=6$.

1839 წელს მილერმა შემოიღო კრისტალოგრაფიული სიბრტყეების აღნიშვნის ახალი სისტემა, რომელმაც საყოველთაო აღიარება ჰპოვა. m, n, p პარამეტრების მაგივრად ის განიხილავს სამ მთელ რიცხვს —



ნახ. 3.4. წახნაგების მდებარეობა კრისტალში, რომლებსაც სხვადასხვა პარამეტრები აქვთ.



ნახ. 3.5. კოორდინატული სიბრტყეების ინდექსები.

h, k, l , რომლებიც კრისტალური სიბრტყის პარამეტრებთან დაკავშირებული არიან ტოლობით

$$h : k : l = \frac{1}{m} \quad \frac{1}{n} \quad \frac{1}{p} \quad (3.3)$$

ან, (3.1) ტოლობის თანახმად,

$$h \quad k \quad l = \frac{a'}{OA} \quad \frac{b'}{OB} \quad \frac{c'}{OC}. \quad (3.4)$$

h, k, l რიცხვებს კრისტალური სიბრტყის მიღების ინდექსები ეწოდება. ინდექსები, მოთავსებული მრგვალ ფრჩხილებში (h, k, l), წარმოადგენენ კრისტალური წახნაგის სიმბოლოს. ცხადია, ერთეულოვანი სიბრტყის სიმბოლო ყოველთვის იქნება (111).

(3.3) ტოლობით განსაზღვრული სიბრტყის ინდექსები ურთიერთმართიე მთელი რიცხვებია. მაგალითად, ზემოთ მიღებული m, n, p პარამეტრების მნიშვნელობისათვის გვექნება

$$h:k:l = \frac{1}{3} \quad \frac{1}{2} \quad \frac{1}{6} = 2:3:1,$$

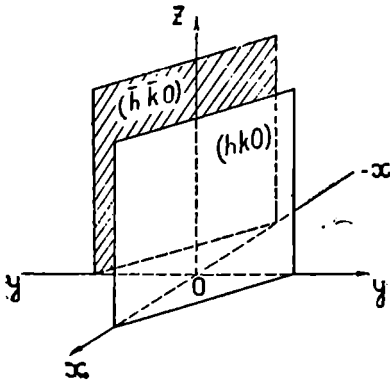
ხოლო (231) იქნება ამ სიბრტყის სიმბოლო.

განვიხილოთ რამდენიმე მაგალითი. დაუშვათ, მოცემულია კრისტალური სიბრტყე, რომლის სიმბოლოა (001) (ნახ. 3.5). ამ სიბრტყის ინდექსები იქნება $h=0, k=0, l=1$. იმისათვის, რომ მოვნახოთ სიბრტყის მიერ კოორდინატთა ღერძებზე ჩამოჭრილი მონაკვეთების სიდიდე, ე. ი. სიბრტყის პარამეტრები, (3.3) განტოლების თანახმად, უნდა ავიღოთ ინდექსების შებრუნებული მნიშვნელობები და შევეფარდოთ ერთმანეთს, მაშინ მივიღებთ

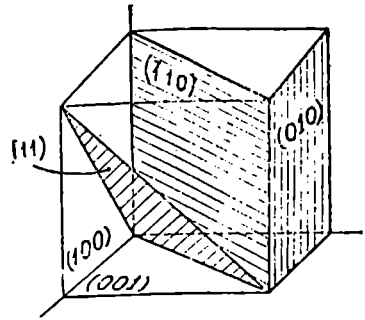
$$\frac{1}{0} \quad \frac{1}{0} \quad \frac{1}{1} = \infty : \infty : 1.$$

მოცემული სიბრტყე კოორდინატთა ღერძებზე ჩამოჭრის მონაკვეთებს, რომლებიც ტოლია ∞, ∞ და 1. ეს იმას ნიშნავს, რომ ეს სიბრტყე x და y ღერძებს ჰკვეთს უსასრულობაში, ე. ი. ამ ღერძების პარალელურია, ხოლო z ღერძზე ჩამოჭრის ღერძული ერთეულის ტოლ მონაკვეთს. იგივე ითქმის (100) და (010) სიბრტყეების მიმართ, რომელნიც გადაკვეთენ z , შესაბამისად, x და y ღერძებს, გაივლიან (yz) და (xz) კოორდინატული სიბრტყეების პარალელურად. იმ სიბრტყეებს, რომლებიც გადაკვეთენ მხოლოდ ერთ კოორდინატთა ღერძს, ბაზისური სიბრტყეები ეწოდება.

ასევე შეიძლება დავრწმუნდეთ, რომ სიბრტყეები, რომელთა ინდექსებიც მხოლოდ ერთ ნულს შეიცავენ (okl), (hol), (ako), x, y და z ღერ-



ნახ. 3.6. Z-ღერძის პარალელური სიბრტყეები.



ნახ. 3.7. კუბის სიბრტყეების ინდექსები.

ძების პარალელურად გაივლიან და გადაკვეთენ დანარჩენ ორ ღერძს (ნახ. 3.6). წოგადი მდებარეობის სიბრტყე გადაკვეთს სამივე ღერძს და მისი სიმბოლო იქნება (hkl) .

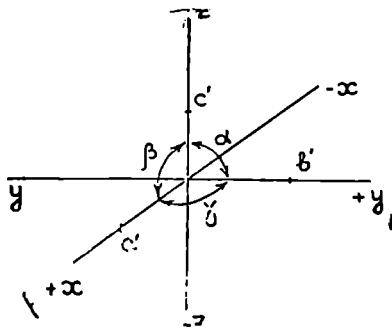
ახლა დავეუშვათ, რომ მოცემული გვაქვს კრისტალური წახნაგი პარამეტრებით: $OA=1a'$; $OB=2b'$; $OC=3c'$. საჭიროა ვიპოვოთ ამ წახნაგის ინდექსები და სიმბოლო. (3.3) ტოლობის თანახმად, შეიძლება დავწეროთ: $\frac{1}{1} \quad \frac{1}{2} \quad \frac{1}{3} = 6 \quad 3 \quad 2$ და, მაშასადამე, $h=6$; $k=3$; $l=2$,

ხოლო (632) წახნაგის სიმბოლო იქნება.

თუ მონაკვეთები კოორდინატთა ღერძებზე, შესაბამისად, ტოლია $1 a'$, $2 b'$ და $\infty c'$, კრისტალური სიბრტყის ინდექსები იქნება $\frac{1}{1} \quad \frac{1}{2} \quad \frac{1}{\infty} = 2:1:0$, ხოლო (210) მისი სიმბოლოა. როდესაც სიბრტყე

კოორდინატთა ღერძის უარყოფით მონაკვეთს კვეთს, სათანადო ინდექსს ზემოთ უკეთდება ნიშანი „-“. მაგალითად, $(hko) - (\bar{h}k\bar{o})$ (ნახ. 3.5-6). 3.7 ნახაზზე მოყვანილია კუბური ფორმის კრისტალის ძირითადი სიბრტყეების სიმბოლოები. ყველა ის წახნაგი, რომელნიც შეიძლება შეუთავსდნენ ერთმანეთს, კრისტალის სიმეტრიის ელემენტების მოქმედებით ქმნიან სიბრტყეების ერთობლიობას ან ფორმას. სიბრტყეების ეს ერთობლიობა აღინიშნება ფიგურული ფრჩხილებით. მაგალითად, კუბის შემთხვევაში (100) (010) და (001) წახნაგების შეთავსება ხდება მეოთხე რიგის ღერძის მოქმედების შედეგად, ამიტომ ისინი ეკუთვნიან $\{100\}$ სიბრტყეების ერთ ერთობლიობას.

ჩვენ დავინახეთ, რომ კრისტალურ მრავალწახნაგაში კოორდინატთა ღერძებს ირჩევენ წიბოების გასწვრივ ან მათ პარალელურად. ამიტომ კუთხეები α , β , γ კოორდინატთა ღერძებს შორის შეიძლება იცვლებოდნენ კრისტალის სიმეტრიულობის მიხედვით. გარდა ამისა, ანალიზური გეომეტრიისაგან განსხვავებით, კრისტალოგრაფიული კოორდინატთა სისტემის წითოვულ ღერძს გააჩნია სიგრძის საკუთარი მასშტაბი.



ნახ. 3.8. კოორდინატთა ღერძები და კუთხეები ღერძებს შორის.

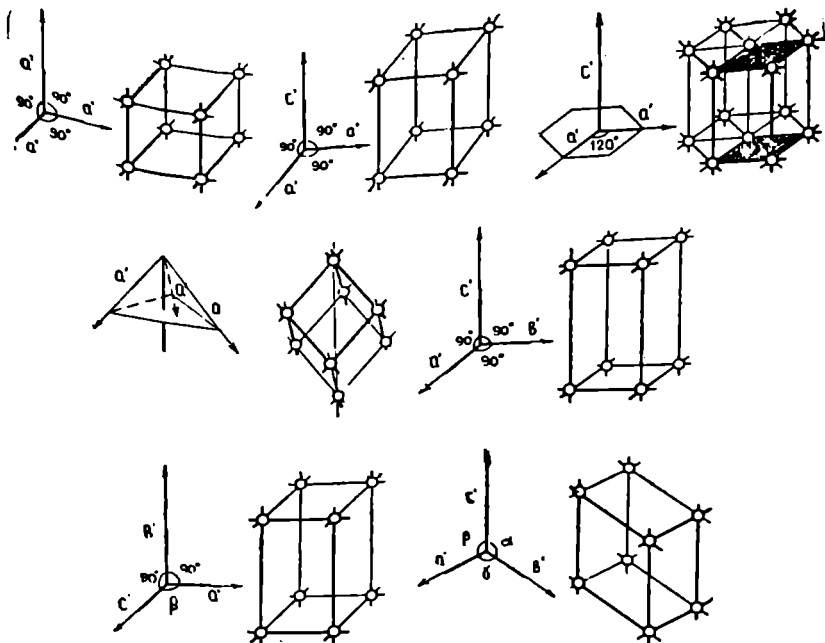
მაგ., x ღერძის გასწვრივ სიგრძის ერთეულად არჩეულია მონაკვეთი a' , რომელსაც ჩამოჭრის ამ ღერძზე ერთეულად არჩეული სიბრტყე. y ღერძის გასწვრივ — მონაკვეთი b' , ხოლო z ღერძის გასწვრივ — c' . ვინაიდან სხვადასხვა ტიპის კრისტალებში ერთეულოვანმა სიბრტყემ შეიძლება სხვადასხვა სიდიდის მონაკვეთები ჩამოჭრას, a' , b' , და c' ექნებათ განსხვავებული

მნიშვნელობები. ამგვარად, ექვსი სიდიდე α , β , γ , a' , b' , c' განსაზღვრავს კოორდინატთა სისტემის არჩევას კრისტალში და მათ კრისტალის გეომეტრიული მუდმივები ეწოდება.

კრისტალები, რომელნიც ერთი რომელიმე კოორდინატთა სისტემით შეიძლება აიწერონ, მიეკუთვნებიან ერთ კრისტალურ სისტემას ან სინგონიას. ამის მიხედვით ყველა არსებული კრისტალი ჯგუფდება შვიდ სისტემად (სინგონიად). კოორდინატთა ღერძების და ერთეულოვანი მონაკვეთების განლაგება ყველა სისტემისათვის ნაჩვენებია 3.8 ნახაზზე. თუ სამივე მონაკვეთი ტოლია, ხოლო კუთხეები — მართი, ე. ი. $a' = b' = c'$; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, სისტემას კუბური ეწოდება, ხოლო კრისტალებს — კუბური სისტემის კრისტალები. როგორც ჩანს, კუბური სისტემის კრისტალები მხოლოდ ერთი a მუდმივათი ხასიათდებიან. ასეთ მონაკვეთებზე აგებული მრავალწახნაგა ჩვეულებრივ კუბს წარმოადგენს (ნახ. 3.9—1).

მეორე სისტემა მიიღება, თუ $a' = b' \neq c'$ და $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. ამ სისტემას ტეტრაგონალური ეწოდება. ტეტრაგონალური სისტემის შესაბამისი მრავალწახნაგა კვადრატულ პრიზმას წარმოადგენს, რომლის ფორმა დამოკიდებული იქნება a' და c' მონაკვეთების შეფარდებაზე ($a' c'$) (ნახ. 3.9-2).

ჰექსაგონალურ სისტემაში ორ ჰორიზონტალურ ღერძზე იღებენ ტოლ a' და b' მონაკვეთებს, რომლებიც განსხვავდებიან ვერტიკალურ ღერძ-



ნახ. 3.9. კრისტალური სისტემისათვის დამახასიათებელი კოორდინატთა ღერძების განლაგება და შესაბამისი მრავალწახნაგა.

ზე აღებული c' მონაკვეთისაგან. ეს უკანასკნელი a' და b' ღერძებთან სწორ კუთხეს ადგენს, ხოლო კუთხე a' და b' ღერძებს შორის უდრის 120° , ე. ი. $a' = b' \neq c'$. $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$. შესაბამისი მრავალწახნაგა ექვსწახნაგა პრიზმას წარმოადგენს (ნახ. 3.9-3). ამ სისტემაში ხშირად ოთხ კრისტალოგრაფიულ ღერძს ირჩევენ. 3.10 ნახაზზე ნაჩვენებია სამი ღერძის განლაგება პორიზონტალურ სიბრტყეში. მეოთხე ღერძი მიმართულია მათ მართობულად. ერთეულოვანი მონაკვეთები ox , cy და ou ღერძების გასწვრივ ტოლია $a' = b' = d'$ და განსხვავდებიან oz ღერძის გასწვრივ არჩეული c' მონაკვეთისაგან. ოთხი ღერძის არსებობის გამო კრისტალური სიბრტყის სიმბოლოც ოთხ ინდექსს შეიცავს (hkl).

ცხადია, რომ მეოთხე ინდექსი i არ იქნება დამოუკიდებელი. ამის დასამტკიცებლად ავიღოთ სიბრტყე AC , რომელიც ox ღერძზე ჩამოჭრის OA მონაკვეთს, ou ღერძზე — OB მონაკვეთს, ხოლო oy ღერძზე — OC . გავატაროთ oy ღერძის პარალელური ხაზი BD . მაშინ ADB და AOC სამკუთხედების მსგავსებიდან მივიღებთ:

$$\frac{OA}{DA} = \frac{OC}{DB} \quad \text{ან} \quad \frac{OA}{OA-OB} = \frac{OC}{OB};$$

აქედან

$$OB = \frac{OA \cdot OC}{OA + OC}.$$

(3.4) განსაზღვრის თანხმად, ინდექსები და პარამეტრები დაკავშირებული არიან ტოლობებით:

$$h = \frac{a'}{OA}; \quad k = \frac{b'}{OC}; \quad i = -\frac{d'}{OB} = -\frac{a'}{OB},$$

რადგან $a' = b' = d'$ და u ლერძის უარყოფითი მიმართულება არჩეულია იმ მხარეს, სადაც x და y ლერძები დადებითია; ამიტომ

$$\frac{1}{-i} = \frac{1}{h+k}; \quad i = -(h+k)$$

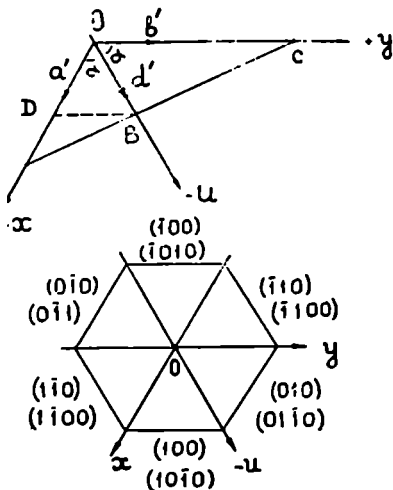
$$h+k+i=0. \quad (3.5)$$

იმავე ნახაზზე, მაგალითისათვის, მოყვანილია ექვსწახნაგა პრიზმის წახნაგების სიმბოლოები სამ- და ოთხინდექსიან აღნიშვნებში.

ტრიგონალური (რომბოედრული) სისტემის კოორდინატა ლერძების წარმოსადგენად განვიხილოთ კუბი, რომელიც გაკიმულია ერთ-ერთი სივრცული დიაგონალის გასწვრივ (ნახ. 3.9-4). ასეთ შემთხვევაში წვეროსთან მდებარე სამი წიბო ადგენს ამ დიაგონალთან ერთნაირს, მაგრამ ოთხმოცდაათგრადუსიანი კუთხისაგან განსხვავებულ კუთხეს. თუ კოორდინატა ლერძებად ამ წიბოებს ავირჩევთ, მივიღებთ სამ ტოლფას ლერძს. ერთეულოვან სიბრტყედ იღებენ სიბრტყეს, რომელიც დიაგონალის მართობია და სამივე ლერძზე ჩამოჭრის ტოლ მონაკვეთებს. ამგვარად, ამ კოორდინატა სისტემისათვის $a' = b' = c'$ და $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$. ზოგიერთ შემთხვევაში ტრიგონალურ სისტემაშიც ირჩევენ ოთხ კოორდინატა ლერძს. როგორც ნახაზიდან ჩანს, ამ სისტემის შესაბამის მრავალწახნაგს რომბოედრი წარმოადგენს.

რომბული სინგონიის კრისტალებში კრისტალოგრაფიული ლერძები ქმნიან მართკუთხა კოორდინატა სისტემას $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, ხოლო მონაკვეთებს, რომლებსაც ერთეულოვანი სიბრტყე ჩამოჭრის კოორდინატა ლერძებზე. ექნებათ სხვადასხვა სიდიდე: $a' \neq b' \neq c'$. კოორდინატა ლერძების განლაგება და სათანადო მრავალწახნაგა, რომელიც ამ შემთხვევაში სწორკუთხა პარალელებიპედს წარმოადგენს, ნაჩვენებია 3.9-5 ნახაზზე.

მონოკლინურ სისტემაშიც ერთეულოვანი მონაკვეთები სამივე ღერძის გასწვრივ სხვადასხვაა: $a' \neq b' \neq c'$, კუთხეები $\alpha = \gamma = 90^\circ$, ხოლო β კუთხეს c' და a' ღერძებს შორის შეიძლება ნებისმიერი მნიშვნელობა ჰქონდეს. ამიტომ ამ სისტემაში ვერტიკალურ ღერძად ირჩევენ $y(b')$ ღერძს, ხოლო z და x ღერძები პორიზონტალურ სიბრტყეში იმყოფებიან და b ღერძებთან სწორ კუთხეებს ადგენენ. ასეთ მონაკვეთებზე აგებული მრავალწახნაგა და ღერძების განლაგება ნაჩვენებია 3.9-6 ნახაზზე.



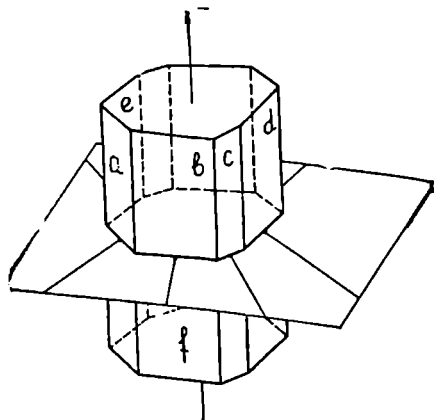
ნახ. 3.10. სამ- და ოთხინდექსიანი აღნიშვნები პექსაგონალურ სისტემაში.

ბოლოს, განვიხილოთ ყველაზე არასიმეტრიული შემთხვევა, როდესაც $a' \neq b' \neq c'$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma$. კრისტალებს, რომლებიც ასეთ სისტემას მიეკუთვნებიან, ტრიკლინური კრისტალები ეწოდება. სათანადო მრავალწახნაგა, რომელიც ამ შემთხვევაში ირიბკუთხა პარალელეპიპედს წარმოადგენს, და ღერძების განლაგება მოცემულია 3.9-7 ნახაზზე.

ყველა არსებული კრისტალი, იმის მიხედვით, თუ როგორ კოორდინატთა სისტემაშია მოსახერხებელი მისი აღწერა, ნაწილდება ზემოთ აღნიშნულ შვიდ კრისტალურ სისტემაში. ამგვარად, თუ უგულებელყოფილია კრისტალის შინაგანი აღნაგობა და ის განიხილება როგორც გეომეტრიული მრავალწახნაგა, შესაძლებელი ხდება მხოლოდ შვიდი განსხვავებული ფორმის და სიმეტრიის მქონე პარალელეპიპედის აგება. ამ საკითხს ჩვენ კიდევ დავუბრუნდებით კრისტალების სიმეტრიის განხილვის დროს.

შ ო ნ ა ვ ი

3.11 ნახაზზე ნაჩვენებია დისტენის კრისტალი, რომლის წახნაგები იკვეთებიან ურთიერთპარალელურ ვერტიკალურ წიბოებში. ასევე შეიძლება გამოიყოს წახნაგები, რომელთა გადაკვეთა ხდება პორიზონტალურად მიმართულ წიბოებში. უფრო რთული ფორმის კრისტალზე შესაძლებელია მრავალი ისეთი მიმართულების გამოყოფა, რომლის პარალელურად გაივლიან ურთიერთგადაამკვეთი წახნაგების წიბოები.



ნახ. 3.1. ზონები დისტენის კრისტალის ზედაპირზე. *a, b, c, d* წახნაგები ეკუთვნის ერთ ზონას, ხოლო *e, a, f*—მეორე ზონას.

წახნაგების ერთობლიობას, რომელნიც პარალელურ წიბოებზე იკვეთებიან, ზონა (სარტყელი) ეწოდება. მაგ., *a, b, c, d* წახნაგები ერთ ზონას ეკუთვნიან, ხოლო *e, a, f*—მეორე ზონას. ერთი ზონის წიბოების საერთო მიმართულება ზონის ღერძს წარმოადგენს. ზონის ღერძს ატარებენ კოორდინატთა სათავეზე, როგორც ეს ნაჩვენებია ნახაზზე, და მაშინ ზონაში შემავალი ყველა სიბრტყე ამ ღერძის პარალელური იქნება. როგორც დისტენის მაგალითი გვიჩვენებს, კრისტალის ერთი და იგივე წახნაგი

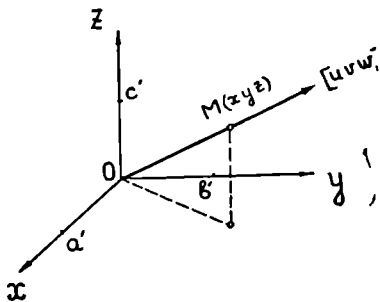
შეიძლება ერთდროულად ორ ან რამდენიმე ზონას ეკუთვნოდეს. ჩვეულებრივ, კუბს სამი ზონა აქვს და თითოეული წახნაგი ერთდროულად ორ ზონას ეკუთვნის.

ცხადია, რომ სიბრტყე, რომელიც ზონის ღერძის მართობად იქნება გატარებული, ზონაში შემავალი ყველა წახნაგის და წიბოს მართობული იქნება. ამიტომ წახნაგების მიმართ გატარებული [მართობები ამავე სიბრტყეში მოთავსდებიან (ნახ. 3.11).

თუ კრისტალის წახნაგი ორ ზონას ეკუთვნის, მაშინ ის როგორც ერთის, ისე მეორე ზონის ღერძის პარალელური იქნება. თავის მხრივ, ზონის ღერძები კრისტალის წიბოების პარალელურია და ორ წიბოზე კი ყოველთვის შესაძლებელია წახნაგის გატარება. ეს იმას ნიშნავს, რომ ორი ზონის ღერძების პარალელურად უნდა არსებობდეს კრისტალის შესაძლებელი წახნაგი, რომელიც საერთო იქნება ორივე ზონისათვის. ამგვარად, ზონების საშუალებით ძნელი არ არის კრისტალის ყველა შესაძლებელი წახნაგის გამოყვანა.

როგორც აღვნიშნეთ, ზონის ღერძები წიბოების პარალელურ მიმართულებებს წარმოადგენენ. წიბოს ან კრისტალში ზონის ღერძის მიმართულების დასადგენად საკმარისია ორი წერტილის ფიქსირება. პირველ წერტილად ყველა მიმართულებისათვის ირჩევენ კოორდინატთა სათავეს, სხვადასხვა თავის პარალელურად შეიძლება გადავიტანოთ წიბო ან ზონის ღერძი. მეორე წერტილს იღებენ იმ წრფეზე, რომლის მიმართულების დადგენაც საჭიროა (ნახ. 3.12). ამგვარად, ნე-

ბისმიერი მიმართულება კრისტალში შეიძლება განისაზღვროს ამ მიმართულებაზე მყოფი ერთი წერტილის კოორდინატებით. ამ კოორდინატებს, ჩვეულებრივ, გამოსახავენ ლერძების ერთეული a' , b' , c' მონაკვეთებით და აღნიშნავენ: $u = \frac{x}{a'}$; $v = \frac{y}{b'}$; $w = \frac{z}{c'}$.



ნახ. 3.12. მიმართულების განსაზღვრა კრისტალში.

ასეთი სახით მიღებული M წერტილის u , v , w კოორდინატებს წიბოს ან ლერძის ინდექსები ეწოდება, ხოლო თუ ეს სიდიდეები ჩასმული იქნება კვადრატულ ფრჩხილებში $[uvw]$, ისინი წიბოს ან ლერძის სიმბოლოს წარმოადგენენ. ასე, მაგალითად, ox კოორდინატა ლერძის სიმბოლო იქნება $[100]$, oy ლერძის $[010]$ და oz ლერძის $[001]$. თუ ლერძი გაივლის (001) ბაზისური სიბრტყის პარალელურად, მისი სიმბოლო იქნება $[uvs]$. (010) სიბრტყის პარალელური მიმართულების სიმბოლო — $[uov]$, ხოლო (100) წახნაგის პარალელურ ლერძს $[osw]$ სიმბოლო ექნება. თუ კრისტალში არსებობს მიმართულებები, რომელნიც დაკავშირებული არიან სიმეტრიული გარდაქმნით, მათ აღნიშნავენ კუთხური ფრჩხილებით. მაგალითად, კუბის სივრცობრივი დიაგონალების ერთობლიობა $\langle 111 \rangle$, კუბის წიბოების ერთობლიობა $\langle 100 \rangle$ და ა. შ. წახნაგი, რომელიც მოცემულ ზონას ეკუთვნის, ზონის ლერძის პარალელურია და თავისი თავის პარალელურად გადაადგილების შედეგად შეუთავსდება მას. ამგვარად, ზონის ლერძი, რომელიც კოორდინატთა სათავეზე გადის, მთლიანად მოთავსდება წახნაგის სიბრტყეში და, წერტილი M , კოორდინატებით u , v , w , რომელიც ზონის მიმართულებას განსაზღვრავს, აგრეთვე ამ სიბრტყეში იქნება მოთავსებული.

ახლა წახნაგის განტოლება შეიძლება ასე დაიწეროს

$$Au + Bv + Cw = 0.$$

მეორე მხრივ, თუ გავიხსენებთ კვადრატის სიბრტყის hkl ინდექსებსა და მის მიერ კოორდინატთა ლერძებზე ჩამოჭრილ მონაკვეთებს შორის, მცირე გამოთვლების შედეგად მივიღებთ

$$hu + kv + lw = 0. \quad (3.6)$$

(3.6) განტოლება გამოხატავს იმ აზრს, რომ სიბრტყე (hkl) ინდექსებით ეკუთვნის $[uvw]$ ზონას.

დავუშვათ, რომ მოცემულია ორი სიბრტყე, ინდექსებით (h_1, k_1, l_1) და (h_2, k_2, l_2) , რომლებიც ერთდროულად ეკუთვნიან ერთ ზონას $[uvw]$ (მათი გადაკვეთის ხაზი), მაშინ;

$$h_1u + k_1v + l_1w = 0;$$

$$h_2u + k_2v + l_2w = 0.$$

აქედან

$$u : v : w = (k_1l_2 - l_1k_2) \quad (l_1h_2 - h_1l_2) \quad (h_1k_2 - k_1h_2).$$

პრაქტიკულად, მოცემული ზონის წახნაგების (h_1, k_1, l_1) (h_2, k_2, l_2) ინდექსებიდან ზონის ინდექსების $[uvw]$ დასადგენად იყენებენ შემდეგ ხერხს:

$$\begin{array}{ccc|ccc|c} k_1 & & & & & & l_1 \\ h_1 & & & & & & \\ \hline u = k_1l_2 - l_1k_2 & & v = l_1h_2 - h_1l_2 & & & & w = h_1k_2 - k_1h_2 \end{array}$$

მაგალითად, კუბის წახნაგების (010) და (001) ზონის ინდექსებისათვის მივიღებთ

$$\begin{array}{ccc|ccc|c} 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ \hline & & & & & & [100] \end{array}$$

ვინაიდან წახნაგი განისაზღვრება ორი წიბოს საშუალებით, ყოველთვის არის შესაძლებელი წახნაგის (hkl) ინდექსების დადგენა, რომელიც ერთდროულად ორ ზონას $[u_1v_1w_1]$ და $[u_2v_2w_2]$ ეკუთვნის. მართლაც, ასეთ შემთხვევაში ადგილი აქვს განტოლებებს:

$$hu_1 + kv_1 + lw_1 = 0;$$

$$hu_2 + kv_2 + lw_2 = 0.$$

და

$$h : k : l = (v_1w_2 - v_2w_1) : (w_1u_2 - u_2w_1) : (u_1v_2 - v_1u_2).$$

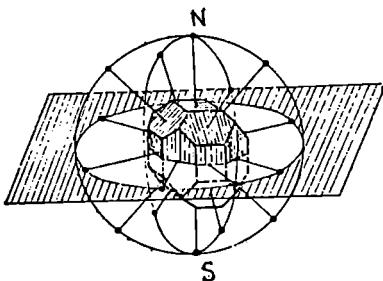
პრაქტიკულად გამოთვლა შესაძლებელია ჩატარდეს ამ შემთხვევაშიც ზემოთ აღნიშნული წესით.

ზონების კანონი საშუალებას იძლევა დადგინდეს წახნაგების არსებობა, რომლებიც ადებულ კრისტალს შეიძლება არ გააჩნია, მაგრამ მოცემული ნივთიერების კრისტალებისათვის დამახასიათებელია და ამიტომ შესაძლებელ წახნაგებს წარმოადგენენ.

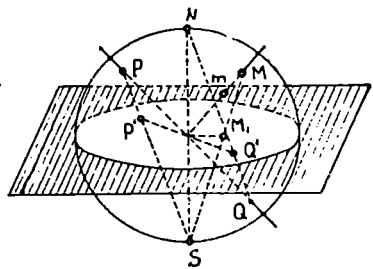
კრისტალების გრაფიკული გამოსახვისათვის ხშირად იყენებენ მათ გეგმილებს. არსებობს კრისტალების გეგმილებით წარმოდგენის მრავალი მეთოდი. ჩვენ განვიხილავთ მხოლოდ ორ მათგანს: სტერეოგრაფიულ და გნომონურ გეგმილებს.

სტერეოგრაფიული გეგმილი. კრისტალის სტერეოგრაფიული გეგმილის ასაგებად საჭიროა მის ირგვლივ, როგორც ცენტრიდან, შემოეწეროს სფერო, ხოლო თითოეული წახნაგის მიმართ აღემატოთ მართობი (ნახ. 3.13) და გაეაგრძელოთ სფეროს გადაკვეთამდე. მართობის სფეროსთან გადაკვეთის წერტილს კრისტალური წახნაგის პოლუსი ეწოდება. გეგმილის სიბრტყედ იღებენ სფეროს ეკვატორულ სიბრტყეს. ამ სიბრტყისა და სფეროს გადაკვეთის წრეხაზი გეგმილის ძირითად წრეხაზს წარმოადგენს.

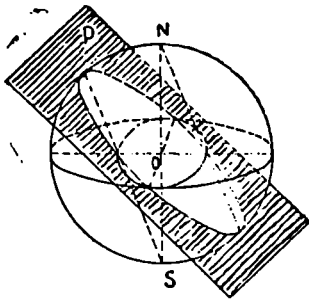
გეგმილის სიბრტყისადმი მართობი დიამეტრის სფეროსთან გადაკვეთის წერტილებს გეგმილის პოლუსები ეწოდება. ჩრდილო პოლუსი N მოთავსებულია გეგმილის სიბრტყის ზემოთ, ხოლო სამხრეთი პოლუსი S — გეგმილის სიბრტყის ქვემოთ. დაუშვათ, რომ M წერტილი (ნახ. 3.14) წარმოადგენს კრისტალის რომელიმე წახნაგის პოლუსს. ეს წერტილი ჩრდილო ნახევარსფეროში იმყოფება და თუ მას შევეაერთებთ სამხრეთ S პოლუსთან, ძირითად სიბრტყეზე მივიღებთ M_1 წერტილს, რომელიც კრისტალური წახნაგის სტერეოგრაფიულ გეგმილს წარმოადგენს. საზოგადოდ, ნებისმიერი m წერტილის სტერეოგრაფიული გეგმილის ასაგებად ჯერ უნდა მოინახოს მისი გეგმილი სფეროზე. ამისათვის ამ წერტილს ვაერთებთ სფეროს ცენტრთან და რადიუს-ვექტორს ვაგრძელებთ სფეროს გადაკვეთამდე. მიღებული M წერტილი იქნება m წერტილის სფერული გეგმილი. ახლა სტერეოგრაფიული გეგმილის მისაღებად საკმარისია M წერტილი შევეაერთოთ სამხრეთ (თუ ის ჩრდილო



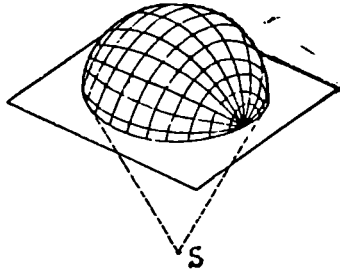
ნახ. 3.13. კრისტალის წახნაგების პოლუსების აგება სფეროზე.



ნახ. 3.14. წერტილის და წრფის სტერეოგრაფიული გეგმილები.



ნახ. 3.15. სიბრტყის სტერეოგრაფიული გეგმილი.



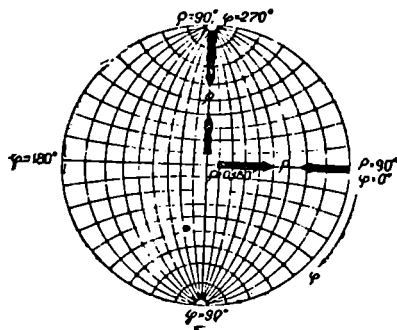
ნახ. 3.16. ნახევარსფეროს გრადუსული ბადის სტერეოგრაფიული გეგმილი წარმოადგენს ეულფის ბადეს.

ნახევარსფეროში იმყოფება) ან ჩრდილო პოლუსთან, თუ წერტილი სამხრეთ ნახევარსფეროშია. მაშინ ეკვატორულ სიბრტყესთან გადაკვეთის M_1 წერტილი წარმოადგენს m წერტილის სტერეოგრაფიულ გეგმილს. იმისათვის, რომ განვასხვაოთ წერტილები, რომლებიც მოთავსებულია გეგმილის სიბრტყის ზევით, წერტილებისაგან, რომელიც მოთავსებულია ამ სიბრტყის ქვემოთ, მათ აღნიშნავენ ჯვრებით, ხოლო ქვედა წერტილებს — პატარა რგოლებით. თუ გეგმილები ერთმანეთს ემთხვევა, მაშინ სათანადო აღნიშვნებიც დაემთხვევა ერთმანეთს. 3.11 ნახაზზე მოყვანილი დისტენის კრისტალის ძირითადი ზონის წახნაგები გეგმილის სიბრტყის მართობები არიან, ამიტომ მათი პოლუსები ამავე სიბრტყეში იქნებიან მოთავსებულნი ძირითად წრეზე და ამავე დროს ამ წახნაგების სტერეოგრაფიულ გეგმილებს წარმოადგენენ.

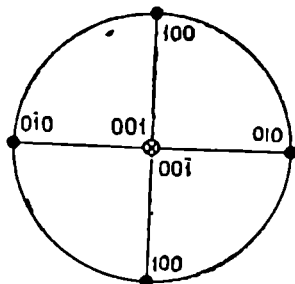
ამგვარად, კრისტალის ნებისმიერი წახნაგის სტერეოგრაფიული გეგმილი წარმოადგენს წერტილს, რომელიც მოთავსებულია გეგმილის სიბრტყეზე ძირითადი წრის ფარგლებში.

ასევე, შესაძლებელია სფეროს ცენტრში გამავალი PQ წრფის სტერეოგრაფიული გეგმილის აგება (ნახ. 3.14). ეს წრფე სფეროს P და Q წერტილებში ჰკვეთს, ამიტომ პირველ რიგში ვპოულობთ ამ წერტილების P' და Q' გეგმილებს ეკვატორულ სიბრტყეში, სამხრეთ და ჩრდილოეთ პოლუსების გამოყენებით. თუ P' და Q' წერტილებს შევადერთებთ, მივიღებთ PQ წრფის სტერეოგრაფიულ გეგმილს. ვინაიდან წრფე ორივე ნახევარსფეროს გაივლის, მისი გეგმილის ის ნაწილი, რომელიც ზედა ნახევარსფეროში მყოფ წერტილებს შეესაბამება, აღნიშნული იქნება მთლიანი ხაზით, ხოლო ქვედა ნახევარსფეროში მყოფი წერტილების შესაბამისი გეგმილი — წყვეტილი ხაზით.

სიბრტყე, რომელიც გეგმილის სფეროს ცენტრში გაივლის, ამ სფე-



ნახ. 3.17. ვულფის ბაღე.



ნახ. 3.18. კუბის წახნაგების სტერეოგრაფიული გეგმილები.

როს დიდ წრეზე გადაკვეთს. დიდი წრის დაგეგმილება ძირითად სიბრტყეზე მოხდება რკალების სახით (ნახ. 3.15). თუ სიბრტყე პოლუსებზე გაივლის, მისი გეგმილი ძირითადი წრის დიამეტრი იქნება.

სტერეოგრაფიულ გეგმილს გააჩნია! მთელი რიგი მნიშვნელოვანი თვისებები: 1) სფეროზე აღებული წრეხაზი დაგეგმილების შემდეგ ისევ წრეხაზად რჩება; 2) კუთხე სფეროზე გატარებულ ორ ხაზს შორის ტოლია კუთხისა ამ ხაზების სტერეოგრაფიულ გეგმილებს შორის; 3) ერთ ზონაში შემავალი ყველა წახნაგის პოლუსების გეგმილები (ნახ. 3.11) დიდ წრეზე თავსდება, რომელიც ზონის ლერძის გეგმილისაგან 90° ტოლი კუთხური მანძილით იქნება დაცილებული და მრავალი სხვა.

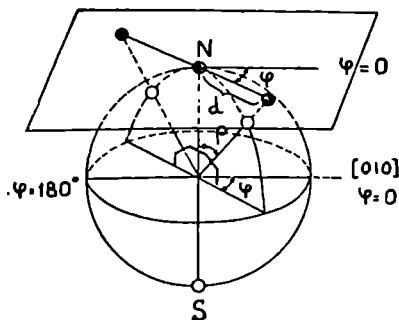
სტერეოგრაფიული გეგმილებით ხშირად სარგებლობენ კრისტალების სიმეტრიის და სიმეტრიული გარდაქმნების აღწერის დროს. ერთ ზონაში შემავალი სიბრტყეების დადგენა, ზონის ლერძის გამოსავალი წერტილის პოვნა, კრისტალების ორიენტირება და მრავალი სხვა საკითხი შეიძლება ადვილად გადაწყდეს სტერეოგრაფიული გეგმილის საშუალებით.

სტერეოგრაფიული გეგმილის გამოხაზვა მოსახერხებელია ე. წ. ვულფის ბაღის საშუალებით, რომელიც სფეროზე გავლებული მერიდიანებისა და პარალელების ბაღის სტერეოგრაფიულ გეგმილს წარმოადგენს (ნახ. 3.16-17). პარალელების შესაბამისი მცირე წრეები 2° -ით არიან ერთმანეთისაგან დაცილებულნი. ვულფის ბაღეზე ნებისმიერი წერტილის მდებარეობა განისაზღვრება ρ და φ სფერული კოორდინატებით, რომელთა ათვლა ხდება, შესაბამისად, ბაღის ცენტრიდან და პორიზონტალური დიამეტრის მარჯვენა ბოლოდან (ნახ. 3.17).

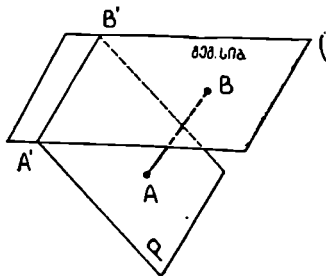
მაგალითისათვის განვიხილოთ კუბის სტერეოგრაფიული გეგმილი. ასეთი გეგმილის მისაღებად კუბის ირგვლივ უნდა შემოვწეროთ სფე-

რო და გეგმილის სიბრტყედ ავიღოთ სფეროს ეკვატორული კვეთა. თუ კოორდინატა სათავეს ავიღებთ კუბისა და, მაშასადამე, სფეროს ცენტრში, მაშინ კუბის ექვსი წახნაგის სტერეოგრაფიული გეგმილები განლაგდებიან წერტილების სახით ძირითად წრეზე და მის ცენტრში, ისე როგორც ეს ნაჩვენებია 3.18 ნახაზზე.

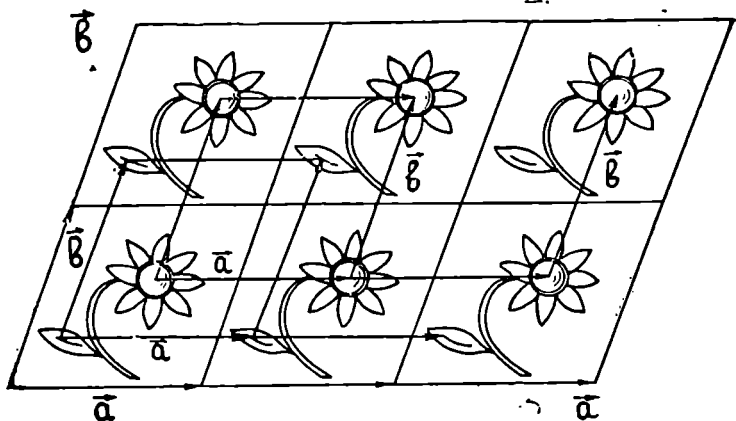
გნომონური გეგმილი. სტერეოგრაფიულ გეგმილთან ერთად ხშირად იხმარება გნომონური გეგმილი ან მათი კომბინაცია გნომოსტერეოგრაფიული გეგმილის სახით. როგორც სტერეოგრაფიული გეგმილის შემთხვევაში, აქაც, კრისტალის ირგვლივ იღებენ სფეროს, მაგრამ ახლა გეგმილის სიბრტყე ეკვატორზე კი არ გადის, არამედ წარმოადგენს ამ სფეროს მიმართ მხებ სიბრტყეს ჩრდილო პოლუსის წერტილში (ნახ. 3.19). კრისტალური წახნაგის ნორმალის გადაკვეთის წერტილი მხებ სიბრტყესთან წარმოადგენს ამ წახნაგის გნომონურ გეგმილს. გეგმილის მდებარეობა სიბრტყეზე განისაზღვრება ρ და φ კუთხეებით. ρ კუთხე, რომელსაც პოლარული მანძილი ეწოდება, იზომება ჩრდილო პოლუსის N წერტილიდან, ხოლო φ კუთხის ათვლა იწყება $[010]$ მიმართულებიდან ეკვატორულ სიბრტყეში. თუ ცნობილია სფეროს r რადიუსი (იღებენ სფეროს, რომლის $r=5$ სმ) და კუთხე ρ ფორმულით $d=rtg\rho$, შესაძლებელია სიბრტყეზე განისაზღვროს მანძილი N პოლუსიდან წახნაგის გეგმილამდე და ეს მანძილი გადაიზომოს φ კუთხით მოცემული მიმართულებით. როგორც ნახაზი გვიჩვენებს, ρ -ს ზრდასთან ერთად იზრდება d მანძილი, რომელიც მიისწრაფვის უსასრულობისაკენ, როდესაც ρ უახლოვდება 90° , ამიტომ წახნაგი, რომლის პოლარული მანძილი $\rho=90^\circ$, არ შეიძლება გამოისახოს გნომონური გეგმილით და ნახაზზე ისრით აჩვენებენ მხოლოდ ამ გეგმილის მიმართულებას. როგორც 3.19 ნახაზიდან ჩანს, ზონაში შემავალი წახნაგების გნომონური გეგმილები ერთ სწორ



ნახ. 3.19. გნომონური გეგმილი.



ნახ. 3.20. AB წრფის გნომონური გეგმილი არის $A'B'$ წრფე.



ნახ. 3.23. შპალერი ორგანოზომილებიანი მესრის მაგალითს წარმოადგენს.

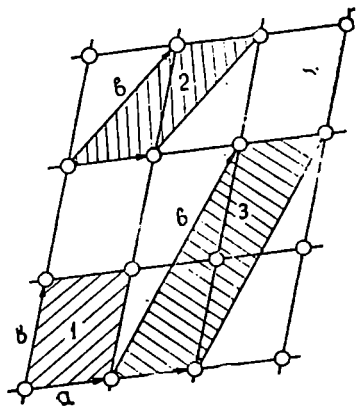
მეორე შპალერისათვის დამახასიათებელია ორი ძირითადი მომენტი: სურათი ან სურათების კომპლექსი და ამ კომპლექსის გამეორების წესი სიმაღლესა და სიგანეში.

კრისტალისათვის ძირითადი სურათის როლს ასრულებენ ატომთა ჯგუფები, რომლებიც, ზოგიერთ შემთხვევაში, შეიძლება ქიმიურ მოლეკულას შეადგენდნენ. ამ ჯგუფების პერიოდული გამეორება სამგანზომილებიან სივრცეში შეიძლება მოხდეს სხვადასხვა წესით. ჩვენ შემდეგში დავინახავთ, რომ, თუ მოცემულია ატომების გარკვეული კომპლექსი, არსებობს მისი სივრცეში გამეორების მხოლოდ 230 საშუალება, იმ დროს როდესაც სურათის გამეორება სიბრტყეზე (შპალერის შემთხვევა) შესაძლებელია 17 სხვადასხვა გზით.

ატომური დაჯგუფებებისა და მათი გამეორების სხვადასხვანაირობა წარმოადგენს იმ მრავალფეროვნების მიზეზს, რომელიც კრისტალთა სამყაროში გვხვდება.

ავიღოთ შპალერის ნაჭერი (ნახ. 3.23), რომლის ძირითად სურათს ყვავილი შეადგენს. ეს ყვავილი გარკვეული წესით მეორდება სიბრტყეზე ორი მიმართულებით, ისე რომ მისი ნებისმიერი წერტილიდან \vec{a} ან \vec{b} ვექტორების საშუალებით შეიძლება გადასვლა მეზობელი ყვავილის ასეთივე წერტილში. ამ ვექტორებს ტრანსლაციები ეწოდება. ტრანსლაციით ვადატანა გამოხატავს ისეთ მოძრაობას, როდესაც სტრუქტურული ელემენტი, როგორც მთლიანი, გადაადგილდება თავისთავის პარალელურად იმ სიდიდით და მიმართულებით, რომელიც სათანადო ტრანსლაციას გააჩნია. აქედან გასაგებია, რომ ტრანსლაციებს არ აქვთ გარკვეული მო-

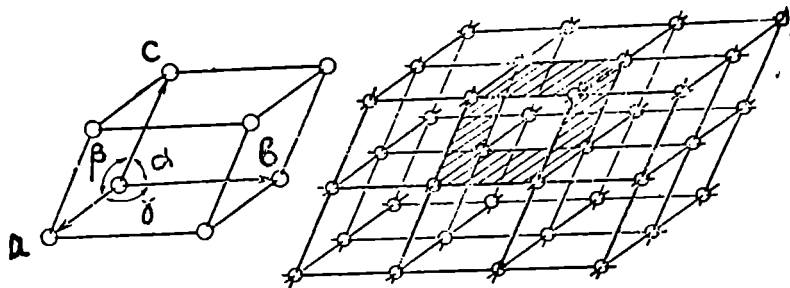
დების წერტილი, ვინაიდან ისინი მოქმედებენ მთელ სტრუქტურულ ელემენტზე და გადაადგილებენ მას, როგორც მთლიანს. ჩვენს შემთხვევაში ეს შეიძლება იყოს ყვავილის ფოთოლი, ყვავილის ცენტრი ან სხვა რომელიმე O წერტილი ყვავილის მახლობლობაში. ნახაზის ნებისმიერი წერტილი მეორდება a ტრანსლაციით და ამგვარად მიიღება \vec{a} ტრანსლაციის მიმართულებით განლაგებული და ერთი და იმავე მანძილებით დაშორებული ერთნაირი წერტილების რიგი. \vec{b} ტრანსლაცია ამ რიგს გაიმეორებს ყოველ b მანძილზე და სიბრტყეზე შეიქმნება იდენტური წერტილების სისტემა. წერტილების ასეთ სისტემას ორგანზომილებიანი წერტილოვანი მესერი ეწოდება (ნახ. 3.24).



ნახ. 3.24. ორგანზომილებიანი მესრის ელემენტარული უჯრედები.

ნახ. 3.24. ორგანზომილებიანი მესრის ელემენტარული უჯრედები.

თუ ამ წერტილებს შევავრთებთ \vec{a} და \vec{b} ტრანსლაციების პარალელური ხაზებით, მივიღებთ ბრტყელ ბადეს, რომელიც წარმოადგენს ტოლი პარალელოგრამების ერთობლიობას. ეს პარალელოგრამები მთლიანად ფარავენ სიბრტყეს და ჩვენ მიერ არჩეული წერტილები ამ პარალელოგრამების წვეროებში იქნებიან მოთავსებულნი. ამ წერტილებს ორგანზომილებიანი მესრის კვანძები ეწოდება. როგორც ნახაზიდან ჩანს, ნებისმიერი წერტილისათვის აგებულ ბადის უჯრედში მთლიანად თავსდება ერთი სურათი (ყვავილი), ხოლო წერტილოვანი მესრის შემთხვევაში \vec{a} და \vec{b} ტრანსლაციებზე აგებულ პარალელოგრამს (ნახ. 3.24) მიეკუთვნება მხოლოდ ერთი კვანძი (ვინაიდან ყოველი წვერო ერთდროულად ეკუთვნის ოთხ პარალელოგრამს). ძირითადი პარალელოგრამის არჩევა შესაძლებელია მრავალი გზით (ნახ. 3.24) იმისდა მიხედვით, თუ როგორ იქნება არჩეული ძირითადი ტრანსლაციები. თუ \vec{a} და \vec{b} ტრანსლაციები არჩეულია ისე, რომ კვანძები მოთავსებულია მხოლოდ პარალელოგრამის წვეროებში, მას პრიმიტიული პარალელოგრამი ეწოდება (მაგ., 1 ან 2). თუ კვანძი მოთავსებულია პარალელოგრამის შიგნით (3), ის უკვე პრიმიტიული აღარ იქნება. ყველა პრიმიტიულ პარალელოგრამს, როგორი ფორმაც არ უნდა ჰქონდეს მას, აქვს ერთი და იგივე ფართობი, ვინაიდან ყოველი მათგანი მხოლოდ ერთ კვანძს (სურათს) შეიცავს. თუ პარალელოგრამი არაპრიმიტიულია, მაშინ იგი შეიცავს ერთზე მეტ კვანძს. უმოკლეს



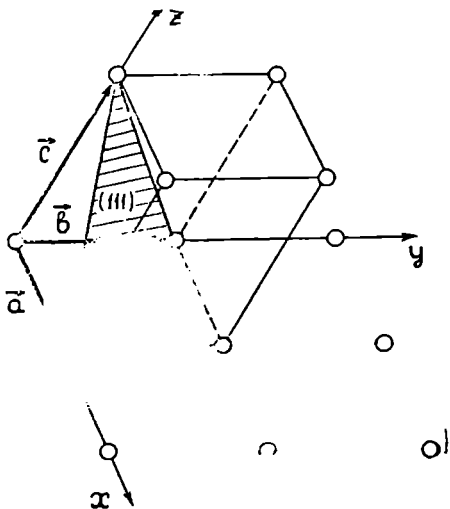
ნახ. 3.25. სივრცობრივი მესერი და მისი ელემენტარული უჯრედი.

მანძილს ორ მეზობელ კვანძს შორის იდენტურობის პერიოდი ან მესერის პარამეტრი ეწოდება. ორგანზომილებიანი მესერის შემთხვევაში \vec{a} და \vec{b} ტრანსლაციების რიცხობრივი მნიშვნელობები მესერის პარამეტრებს წარმოადგენენ, ხოლო ნებისმიერი კვანძი განისაზღვრება ტრანსლაციით $m\vec{a} + n\vec{b}$, სადაც m და n მთელი რიცხვებია.

ბრტყელი გამოსახულებიდან სივრცობრივ სურათზე გადასასვლელად საჭირო იქნება მესამე \vec{c} ტრანსლაციის შემოღება, რომელიც კვანძურ სიბრტყეებს ერთიმეორის პარალელურად და ერთი და იგივე მანძილით გადაადგილებს. კვანძური სიბრტყეების ასეთ სივრცობრივ განლაგებას სივრცობრივი მესერი ეწოდება (ნახ. 3.25). შევავერთოთ სივრცობრივი მესერის კვანძები \vec{a} , \vec{b} და \vec{c} ტრანსლაციების პარალელური ხაზებით; მაშინ დავინახავთ, რომ მთელი სივრცე შევსებული იქნება მცირე ზომის პარალელეპედებით. ტრანსლაციებზე აგებულ ასეთ პარალელეპედს ელემენტარული უჯრედი ეწოდება. თუ კვანძები მოთავსებულია მხოლოდ პარალელეპედის წვეროებში. ელემენტარული უჯრედი პრიმიტიული იქნება, როგორც ორგანზომილებიანი მესერის შემთხვევაში, აქაც ერთ პრიმიტიულ უჯრედს მხოლოდ ერთი კვანძი ეკუთვნის. მართლაც, პარალელეპედის თითოეულ წვეროსთან თავს იყრის 8 უჯრედი და ამიტომ ერთ უჯრედს ეკუთვნის კვანძის $1/8$, ხოლო 8 წვერისაგან ჩვენს პარალელეპედს ექნება $8 \times \frac{1}{8} = 1$ კვანძი. ამიტომ ყველა პრიმიტიულ

ელემენტარულ უჯრედს ერთი და იგივე მოცულობა გააჩნია. ელემენტარული უჯრედის არჩევა სივრცობრივ მესერში შეიძლება მრავალი საშუალებით, იმის მიხედვით, თუ როგორ იქნება არჩეული ძირითადი ტრანსლაციები \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} და მათ შორის კუთხეები: $\alpha = \widehat{bc}$, $\beta = \widehat{ca}$, $\gamma = \widehat{ab}$. ექვსი სიდიდე a , b , c , α , β , γ ელემენტარული უჯრედის პარამეტრებს წარმო-

ადგენენ (ნახ. 3.25). თუ არჩეულ ტრანსლაციებზე აგებულ პარალელეპიპედი შეიცავს ერთ კვანძს, მაშინ ის აუცილებლად პრიმიტიული იქნება, ხოლო შესაბამისი ტრანსლაციები — ძირითადი. ჩვეულებრივად ძირითად ტრანსლაციებს ირჩევენ ისე, რომ ისინი წარმოადგენენ უმოკლეს იდენტურობის პერიოდებს. იდენტურობის პერიოდების გაზომვა სხვადასხვა კრისტალოგრაფიული მიმართულებების გასწვრივ და ამ მიმართულებებს შორის კუთხეების დადგენა ხდება რენტგენოგრაფიის, ელექტრონოგრაფიის ან ნეიტრონოგრაფიის მეთოდების გამოყენებით.

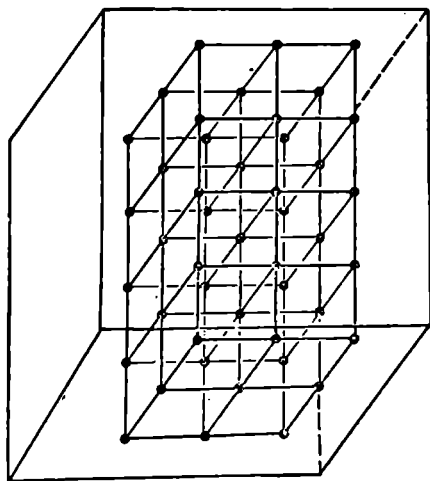


ნახ. 3.26. პრიმიტიული ელემენტარული უჯრედის წიბოები წარმოადგენენ კოორდინატა ღერძებს.

კრისტალურ მესერში კოორდინატა ღერძებად შეიძლება ავირჩიოთ ნებისმიერი სამი არაკომპლანარული კვანძური ღერძი. ჩვეულებრივად x , y , z ღერძების მიმართულებად იღებენ, შესაბამისად, \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} ძირითადი ტრანსლაციების მიმართულებებს, ხოლო კოორდინატა სისტემის სათავედ — მესრის რომელიმე კვანძს. ამგვარად, ძირითადი პრიმიტიული ელემენტარული პარალელეპიპედის წიბოები (ნახ. 3.26) ამავე დროს კოორდინატა ღერძებს წარმოადგენენ. ამ შემთხვევაში არ არის საჭირო, სპეციალური ერთეულოვანი ღერძული მონაკვეთების შემოღება, ვინაიდან თითოეული კვანძური ღერძი ხასიათდება ორ მეზობელ კვანძს შორის გარკვეული მანძილით, რომელიც ძირითადი ტრანსლაციის სიგრძის ტოლია. ამიტომ სივრცობრივი მესრის ნებისმიერი კვანძის მდებარეობა განისაზღვრება კოორდინატებით — ma , nb , pc , სადაც m , n , p — მთელი რიცხვებია. ნებისმიერი ვექტორი, რომელიც კოორდინატა სათავეს აერთებს მესრის რომელიმე კვანძთან, შეიძლება გამოისახოს ტოლობით

$$\vec{R} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}. \quad (3.7)$$

წინა პარაგრაფში განხილული იყო კრისტალური მრავალწახნაგა და მისი თვისებები. კრისტალური მრავალწახნაგა კრისტალის გარეგან ფორმას გამოხატავს, რომელიც დაკავშირებულია მის შინაგან აღნაგობასთან და, მაშასადამე, კრისტალურ მესერთან. ეს კავშირი ნათლად ჩანს 3.27 ნახაზზე. კრისტალური მრავალწახნაგა შემოსაზღვრულია წახნაგების სასრული რიცხვით იმ დროს, როდესაც კრისტალური მესრის ნებისმიერ სამ კვანძზე შესაძლებელია გატარდეს კვანძური სიბრტყე, ხოლო მის პარალელურად — ასეთივე სიბრტყეების უსასრულო რიცხვი.



ნახ. 3.27. მრავალწახნაგა და სივრცობრივი მესერი.

თითოეული ქსეთი სიბრტყე შეიძლება ჩაითვალოს კრისტალის შესაძლებელ წახნაგად და, პირიქით, თითოეულ წახნაგს კრისტალურ მესერში შეესაბამება მისდამი პარალელური კვანძური სიბრტყეების უსასრულო რიცხვი, რომლებიც ერთიმეორისაგან და კოორდინატთა სათავიდან დაცილებულნი არიან ტოლი მანძილებით.

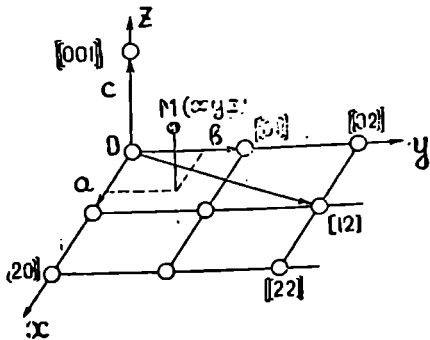
ორი კვანძური სიბრტყის გადაკვეთის ხაზი კვანძურ ღერძს წარმოადგენს, ხოლო კრისტალური წახნაგები იკვე-

თებიან წიბოებში. თითოეული კვანძური ღერძი კრისტალის შესაძლებელ წიბოდ შეიძლება ჩაითვალოს; ყოველ წიბოს კი კრისტალურ მესერში შეესაბამება მისდამი პარალელური კვანძური ღერძების უსასრულო რიცხვი, და, ბოლოს, მრავალწახნაგას წიბოები იკვეთებიან წვეროებში, ხოლო კრისტალური მესრის კვანძური ღერძები — კვანძებში.

კვანძური სიბრტყეებისა და კვანძური ღერძების
ინდექსები

როგორც კრისტალური მრავალწახნაგას შემთხვევაში, მესერშიც წერტილის კოორდინატებს (x, y, z) გამოსახვევს შესაბამისი ღერძების ინდექსების პერიოდებთან შეფარდებით და სიდიდეებს $\frac{x}{a}, \frac{y}{b}, \frac{z}{c}$ აღ-

ნიშნავენ u , v , w ასობით. u , v , w სიდიდეებს წერტილის ინდექსები ეწოდება. ეს ინდექსები, ჩასმული ორმაგ კვადრატულ ფრჩხილებში $[[uvw]]$, წერტილის სიმბოლოს წარმოადგენენ (ნახ. 3.28). ჩვეულებრივად u , v და w წილადებია, მაგრამ თუ წერტილის კოორდინატები იდენტურობის პერიოდების მთელ რიცხვს შეიცავენ, u , v და w მთელი რიცხვებით გამოი-

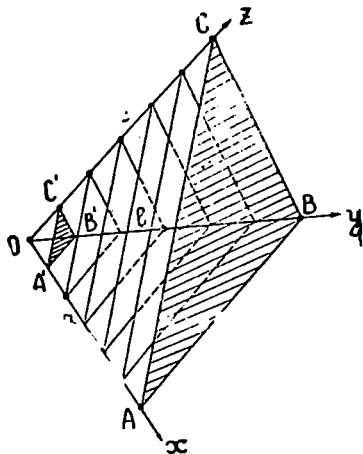


ნახ. 3. 28. წერტილის და მიმართულების ინდექსები.

სახებიან და ადრე შემოღებული m , n , p რიცხვებისაგან არაფრით განსხვავდებიან. ამიტომ m , n , p მესრის კვანძის ინდექსებს წარმოადგენენ, ხოლო $[[mnp]]$ — კვანძის სიმბოლოებს.

ნებისმიერ ორ კვანძზე შეიძლება გავატაროთ კვანძური ღერძი. კრისტალურ მესერში აღებული ღერძის პარალელურად გაივლის ასეთივე ღერძების უსასრულოდ დიდი რიცხვი. პირველ კვანძად ყოველთვის იღებენ კვანძს, რომელშიც მოთავსებულია კოორდინატთა სათავე. მაშინ მიმართულების დასადგენად საკმარისია ვიცოდეთ ნებისმიერი მეორე კვანძის ინდექსები, რომლებიც ამ შემთხვევაში ჩასმული იქნება ერთ კვადრატულ ფრჩხილში. მაგალითად, მიმართულება $[12]$ (ნახ. 3.28), საზოგადოდ კი $[mnp]$ — კვანძური ღერძის სიმბოლოს წარმოადგენს. ვინაიდან მეორე კვანძად ირჩევენ კოორდინატთა სათავესთან უახლოეს კვანძს, ამიტომ გასაგებია, რომ კვანძური ღერძის ინდექსები ყოველთვის ურთიერთ მარტივი მთელი რიცხვებით გამოისახებიან, მაგალითად, $[11]$ და არა $[22]$ ან $[33]$. თუმცა ყველა ეს კვანძი ერთ და იმავე მიმართულებას განსაზღვრავს. სამგანზომილებიანი მესრისათვის ეს იქნება მიმართულება $[111]$, ხოლო თუ აღებულია ასეთი მიმართულებების ერთობლიობა, დაკავშირებული სიმეტრიული გარდაქმნით, მაშინ — $\langle 111 \rangle$.

კრისტალური მესრის სამი კვანძის ერთობლიობა, თუ ეს კვანძები არაკომპლანარულია, განსაზღვრავენ რაციონალურ სიბრტყეს, ე. ი. სიბრტყეს, რომელიც სამივე კოორდინატის ღერძზე ჩამოჭრის იდენტურობის პერიოდის მთელ რიცხვებს. აღნიშნვით ეს რიცხვები m , n , p ასობით. ცხადია, ეს რიცხვები წარმოადგენენ კვანძების ნომრებს შესაბამის კოორდინატთა ღერძებზე. 3.29 ნახაზზე ნაჩვენებია რაციონალური სიბრტყე ABC , რომლისთვისაც $m=3$, $n=2$, $p=6$. მონაკვეთები, რომლებსაც ეს სიბრტყე ჩამოჭრის კოორდინატთა ღერძებზე, შესაბამისად, ტოლი იქნებიან: $OA=3a$, $OB=2b$, $OC=6c$. თუ ცნობილია კოორდი-



ნახ. 3.29. $A'B'C'$ —კოორდინატთა სათავესთან უახლოეს სიბრტყეს წარმოადგენს, ხოლო ABC —პირველი რაციონალური სიბრტყეა.

ნატთა ღერძებზე ჩამოჭრილი მონაკვეთების სიდიდე, შესაძლებელია კვანძური სიბრტყის წარმოდგენა (3.2) განტოლების სახით, მაგრამ თუ წინათ ეს განტოლება გამოხატავდა ცალკეულ წახნაგს, მესრის შემთხვევაში ღერძებზე მოქმედი ტრანსლაციები მას გაიმეორებენ და ამიტომ ახლა ეს განტოლება ფაქტიურად შეიცავს პარალელური კვანძური სიბრტყეების მთელ რიგს. რიგში შემავალ ყოველ ორ მეზობელ სიბრტყეს შორის მანძილი ერთმანეთის ტოლია და ისეთივეა, როგორც მანძილი კოორდინატთა სათავესა და პირველ სიბრტყეს შორის.

ამის გამო კვანძური სიბრტყეების ასეთი რიგის (ნახ. 3.29) დასახასია-

თებლად საკმარისია დადგინდეს ერთი რომელიმე სიბრტყის მდებარეობა, მაგალითად, სიბრტყისა, რომელიც უახლოესია კოორდინატთა სათავესთან და, მაშასადამე, ჩამოჭრის კოორდინატთა ღერძებზე უმცირეს მონაკვეთებს. როგორც ნახაზი გვიჩვენებს, კვანძური სიბრტყეების უსასრულო რიგი ტოლ მონაკვეთებად ჰყოფს კოორდინატთა თითოეულ ღერძს და მესრის ყველა კვანძზე გაივლის. კოორდინატთა სათავიდან პირველ რაციონალურ სიბრტყემდე თავსდება პარალელური სიბრტყეების სრულიად გარკვეული რიცხვი. ასე, მაგალითად: თუ m , n , p ურთიერთმარტივი რიცხვებია და საერთო გამყოფი არა აქვთ, მაშინ a ტრანსლაცია მოცემულ სიბრტყეს m -ჯერ გაიმეორებს: შემდეგ b ტრანსლაცია ამ m სიბრტყეს n -ჯერ გადაანაცვლებს და ამგვარად განჩდება mn სიბრტყე, ხოლო ბოლოს c ტრანსლაცია mn სიბრტყეს კიდევ p -ჯერ გაიმეორებს, რის გამოც კოორდინატთა სათავიდან პირველ რაციონალურ სიბრტყემდე ვაივლის mnp სიბრტყე. ახლა, წარმოვიდგინოთ, რომ m და n რიცხვებს საერთო უდიდესი გამყოფი აქვთ. ატენიშნოთ იგი K ასოთი, მაშინ პირველი რაციონალური სიბრტყე მოკვეთს არა m და n მონაკვეთებს, არამედ $\frac{m}{k}$ და $\frac{n}{k}$ მონაკვეთებს. თუ საერთო უდიდესი გამყოფებს n , p და m , p რიცხვებისათვის, შესაბამისად აღვნიშნავთ s და t ასოებით, მაშინ სიბრტყეთა რიცხვისათვის მივიღებთ: $N = \frac{mnp}{k \cdot s \cdot t}$. განვიხილოთ

ჩვენ მიერ აღებული მაგალითი, როდესაც $m=3$, $n=2$, $p=6$; მივიღებთ $N=$
 $= \frac{3 \cdot 2 \cdot 6}{2 \cdot 3} = 6$. როგორც 3,29 ნახაზი გვიჩვენებს, კოორდინატა სათა-

ვიდან დაწყებული პირველ რაციონალურ სიბრტყემდე მართლაც ექვსი სიბრტყე თავსდება.

პარალელური კვანძური სიბრტყეების რიგით a , b , c ტრანსლაციები იყოფა ნაწილებად, მაგრამ ვინაიდან სიბრტყეები ერთი და იგივე მანძილით არიან დაცილებული, ტრანსლაციების დაყოფა შეიცავს ამ ნაწილების მთელ რიცხვს. აღვნიშნოთ ეს მთელი რიცხვები h , k , l ასობით. ამ რიცხვებს კვანძური სიბრტყის ინდექსები ეწოდება. ასეთ შემთხვევაში კოორდინატა სათავიდან პირველი კვანძური სიბრტყის მიერ ღერძებზე ჩამოჭრილი OA' , OB' , OC' მონაკვეთები ტოლნი იქნებიან: $OA' =$
 $= \frac{a}{h}$, $OB' = \frac{b}{k}$, $OC' = \frac{c}{l}$. როგორც ზემომოყვანილი მსჯელობიდან

ჩანს ამ მონაკვეთებსა და პირველი რაციონალური სიბრტყის მიერ ჩამოჭრილ მონაკვეთებს შორის არსებობს დამოკიდებულება

$$\frac{1}{h} \quad \frac{1}{k} \quad \frac{1}{l} = m:n:p.$$

ჩვენი მაგალითის შემთხვევაში $m=3$, $n=2$, $p=6$ და $h \quad k \quad l =$
 $= \frac{1}{3} \quad \frac{1}{2} \quad \frac{1}{6} = 2 \quad 3 \quad 1$, ე. ი. $h=2$, $k=3$, $l=1$, ხოლო ამ სიბრტყის

სიმბოლო იქნება (231). ეს იმას ნიშნავს, რომ მოცემულ სიბრტყეთა რიგიდან კოორდინატა სათავიდან პირველი კვანძური სიბრტყე მოკვეთს a იდენტურობის პერიოდის $1/2$, b —პერიოდის $1/3$ ნაწილს, ხოლო z ღერძზე c მონაკვეთებზე გაიელის (ნახ. 3.29).

ასეთი სახით განსაზღვრული კვანძური სიბრტყის hkl ინდექსები არსებითად არაფრით არ განსხვავდებიან კრისტალური სიბრტყის მიღერის ინდექსებისაგან, ვინაიდან ნებისმიერ კრისტალურ წახნაგს კრისტალურ მესერში შეესაბამება პარალელური კვანძური სიბრტყეების უსასრულო რიგი. მაგრამ ვინაიდან კვანძური სიბრტყის ინდექსების განსაზღვრა ხდება ტოლობებით:

$$h = \frac{a}{OA'}; \quad k = \frac{b}{OB'}; \quad l = \frac{c}{OC'}, \quad (3.8)$$

ამიტომ ისინი შეიძლება საერთო მამრავლს შეიცავდნენ და ამ მამრავლით განსხვავდებოდნენ მათდამი პარალელური კრისტალური წახნაგის მიღერის ინდექსებისაგან, რომელნიც (3.3) განტოლების თანახმად შეფარდებით განისაზღვრებიან და ამიტომ ყოველთვის ურთიერთ მარტივ რიცხვებს წარმოადგენენ.

კრისტალური მესრის შემთხვევაში ერთეულოვან მონაკვეთებად ყოველთვის იღებენ იდენტურობის პერიოდებს შესაბამისი ლერძების გასწვრივ, ხოლო ერთეულოვან წახნაგად (111) — კვანძურ სიბრტყეს (ნახ. 3.26). თუ კრისტალის ერთეულოვან წახნაგად არჩეული იქნება სიბრტყე, რომელიც (111) კვანძური სიბრტყის პარალელურია, მაშინ კრისტალური წახნაგების მიღერის ინდექსები დაემთხვევა მათდამი პარალელური კვანძური სიბრტყეების ინდექსებს. თუ კრისტალის ერთეულოვანი წახნაგი არ არის სათანადოდ არჩეული, კრისტალური წახნაგების მიღერის ინდექსები შეიძლება არ თანხვდებოდნენ კვანძური სიბრტყეების ინდექსებს. მხოლოდ კუბური სისტემის კრისტალისათვის არის შესაძლებელი ასეთი არჩევის ცალსახად შესრულება. ვინაიდან ამ შემთხვევაში ერთეულოვან წახნაგად ირჩევენ იმ წახნაგს, რომელიც სამივე კოორდინატის ღერძზე ჩამოჭრის ტოლი სიდიდის მონაკვეთებს.

ახლა შეიძლება დაიწეროს კვანძური სიბრტყის განტოლება ისევე, როგორც ეს იყო კრისტალური წახნაგისათვის (3.2). მონაკვეთები, რომლებსაც კვანძური სიბრტყე კოორდინატთა ღერძებზე ჩამოჭრის, ტოლია:

$OA' = \frac{a}{h}, \quad OB' = \frac{b}{k}, \quad OC' = \frac{c}{l};$ ამიტომ კვანძური სიბრტყის განტოლებისათვის გვექნება

$$\frac{x}{\frac{a}{h}} + \frac{y}{\frac{b}{k}} + \frac{z}{\frac{c}{l}} = 1 \quad \text{ან} \quad h \frac{x}{a} + k \frac{y}{b} + l \frac{z}{c} = 1.$$

მიღებული აღნიშვნების თანახმად.

$$hu + kv + lw = 1. \quad (3.9)$$

(3.9) წარმოადგენს hkl ინდექსებით განსაზღვრულ პარალელურ სიბრტყეთა რიგში კოორდინატთა სათავიდან პირველი კვანძური სიბრტყის განტოლებას. ცხადია, რომ ნებისმიერი კვანძური სიბრტყისათვის, რომელიც კოორდინატთა სათავეზე გაივლის, გვექნება

$$hu + kv + lw = 0. \quad (3.10)$$

§ 10. ინდექსების გარდაქმნები

როგორც აღვნიშნეთ, ელემენტარული უჯრედის არჩევა სივრცობრივ მესერში შეიძლება მრავალი საშუალებით იმისდა მიხედვით, თუ როგორ იქნება არჩეული ძირითადი ვექტორები $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ და, მაშასადამე, კოორდინატთა ღერძებიც. ვთქვათ, მოცემული გვაქვს გარკვეული კოორდინატთა სისტემა, რომლის მიმართ ელემენტარული უჯრედი განსაზღვ-

რულია \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} ვექტორებით. ავირჩიოთ ახალი კოორდინატთა სისტემა, რომელსაც საერთო სათავე აქვს ძველ სისტემასთან. მისი ძირითადი ვექტორები აღნიშნოთ \vec{A} , \vec{B} , \vec{C} ასოებით. მოვნახოთ კავშირი ახალ და ძველ კოორდინატთა სისტემებს შორის, წერტილის კოორდინატები და სიბრტყის ინდექსები ახალ სისტემაში.

ახალი ღერძები \vec{A} , \vec{B} , \vec{C} ყოველთვის შეიძლება დაგაკავშიროთ ძველ \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} ღერძებთან შემდეგი ვექტორული ტოლობებით:

$$\begin{aligned}\vec{A} &= m_{11}\vec{a} + m_{12}\vec{b} + m_{13}\vec{c}; \\ \vec{B} &= m_{21}\vec{a} + m_{22}\vec{b} + m_{23}\vec{c}; \\ \vec{C} &= m_{31}\vec{a} + m_{32}\vec{b} + m_{33}\vec{c}.\end{aligned}\tag{3.11}$$

მაგალითისათვის განვიხილოთ ორგანზომილებიანი მესერი (ნახ. 3.30). როგორც ჩანს, ახალი X , Y ღერძების ერთეულოვანი ვექტორები \vec{A} და \vec{B} დაკავშირებული არიან x და y ღერძების ძირითად \vec{a} და \vec{b} ვექტორებთან შემდეგი ვექტორული ტოლობებით:

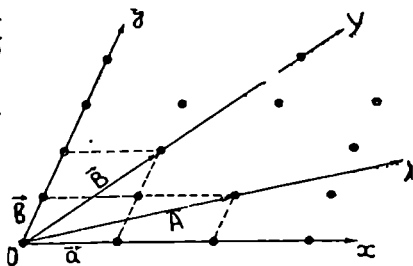
$$\begin{aligned}\vec{A} &= 2\vec{a} + 1\vec{b}; \\ \vec{B} &= 1\vec{a} + 2\vec{b}.\end{aligned}$$

(3.11) ფორმულები ასეთი დამოკიდებულების სამგანზომილებიან და ზოგად შემთხვევას გამოხატავენ. ამ გარდაქმნის მატრიცას აქვს შემდეგი სახე:

$$(m_{ij}) = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{13} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} \end{pmatrix}\tag{3.12}$$

თანახმად (1.12), განტოლებათა სისტემა (3.11) შეიძლება ამოიხსნას, a , b , c ვექტორების მიმართ:

$$\begin{aligned}\vec{a} &= n_{11}\vec{A} + n_{12}\vec{B} + n_{13}\vec{C}; \\ \vec{b} &= n_{21}\vec{A} + n_{22}\vec{B} + n_{23}\vec{C}; \\ \vec{c} &= n_{31}\vec{A} + n_{32}\vec{B} + n_{33}\vec{C},\end{aligned}\tag{3.13}$$



ნახ. 3.30. ვადასვლა ძველი a და b ღერძებიდან ახალ \vec{A} , \vec{B} ღერძებზე.

სადაც კოეფიციენტები n_{ij} , (m_{ij}) მატრიცის შებრუნებულ მატრიცას აღგენენ

$$(n_{ij}) = \begin{pmatrix} n_{11} & n_{12} & n_{13} \\ n_{21} & n_{22} & n_{23} \\ n_{31} & n_{32} & n_{33} \end{pmatrix} \quad (13.14)$$

და განისაზღვრებიან ფორმულით $n_{ij} = \frac{A_{ji}(-1)^{i+j}}{\Delta}$ გარდაქმნის

მატრიცის დეტერმინანტია. ახლა განვიხილოთ კვანძისა და კვანძური ღერძის ინდექსების გარდაქმნის ფორმულები. ცხადია, რომ კვანძური ღერძის ინდექსები გარდაიქმნებიან ისევე, როგორც კვანძის ინდექსები, რადგან ერთი კოორდინატა სისტემიდან მეორეზე გადასვლის დროს კოორდინატა სათავიდან მოცემულ კვანძამდე გავლებული რადიუს-ვექტორი ინვარიანტული რჩება. ამიტომ, (3.7) ფორმულის თანახმად, გვექნება

$$\vec{ma} + \vec{nb} + \vec{pc} = M\vec{A} + N\vec{B} + P\vec{C}, \quad (3.15)$$

სადაც m , n , p კვანძის ინდექსებია ძველ კოორდინატა სისტემაში, ხოლო MNP — იმავე კვანძის ინდექსები ახალ კოორდინატა სისტემაში. თუ აქ შევიტანთ \vec{abc} ვექტორების მნიშვნელობებს (3.13)-დან და წევრებს დავაჯგუფებთ, მივიღებთ:

$$\begin{aligned} M &= n_{11}m + n_{21}n + n_{31}p; \\ N &= n_{12}m + n_{22}n + n_{32}p; \\ P &= n_{13}m + n_{23}n + n_{33}p; \end{aligned} \quad (3.16)$$

ან თუ M_i -ით აღინიშნება M , N და P , ხოლო m_i — m , n , p , მაშინ მოკლედ შეიძლება დაიწეროს

$$M_i = (n_{ji})m_j, \quad (3.16')$$

სადაც (n_{ji}) შებრუნებული მატრიცის ტრანსპონირებულ მატრიცას წარმოადგენს. ანალოგიურად შეიძლება გადასვლა ახალი ინდექსებიდან ძველ ინდექსებზე

$$m_i = (m_{ji})M_j. \quad (3.17)$$

აქ (m_{ji}) გარდაქმნის მატრიცის ტრანსპონირებული მატრიცაა.

ცხადია, რომ თუ კვანძის ინდექსების მაგიერ აღებული იქნება მესრის ნებისმიერი წერტილი, კოორდინატებით x_1 , x_2 , x_3 ძველ სისტემაში და X_1 , X_2 , X_3 — ახალ სისტემაში, იგივე (16) და (17) ფორმულები დარჩებიან ძალაში:

$$X_i = (n_{ji})x_j \text{ და } x_i = (m_{ji})X_j. \quad (3.18)$$

როდესაც ერთ კოორდინატთა სისტემიდან გადავივართ მეორე სისტემაზე, იცვლება კვანძური სიბრტყეების მიერ ღერძებზე ჩამოჭრილი მონაკვეთების სიდიდე. ამიტომ, თუ ძველ სისტემაში სიბრტყის ინდექსები იყო hkl , ახალ სისტემაში ისინი H, K, L მნიშვნელობებს მიიღებენ. ეს იმას ნიშნავს, რომ კვანძური სიბრტყეების რიგი ახალ სისტემაში ელემენტარული უჯრითის A წიბოს ჰყოფს H ნაწილად, B წიბოს — K ნაწილად, ხოლო წიბოს — L ნაწილად. მაგრამ $A = m_{11}\vec{a} + m_{12}\vec{b} + m_{13}\vec{c}$ და $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ ვექტორები, შესაბამისად, იყოფიან h, k და l ნაწილებად. თუ a ვექტორი იყოფა h ნაწილად, მაშინ $m_{11}\vec{a}$ ვექტორი გაიყოფა $m_{11}h$ ნაწილად და ა. შ. ამიტომ, საბოლოოდ, \vec{A} ვექტორი გაიყოფა $m_{11}h + m_{12}k + m_{13}l$ ნაწილებად. იგივე ითქმის B და C ვექტორებზე, ამიტომ შეიძლება დავწეროთ:

$$\begin{aligned} H &= m_{11}h + m_{12}k + m_{13}l; \\ K &= m_{21}h + m_{22}k + m_{23}l; \\ L &= m_{31}h + m_{32}k + m_{33}l. \end{aligned} \quad (3.19)$$

როგორც ვხედავთ, სიბრტყის ინდექსებისა და კოორდინატთა ღერძების გარდაქმნა ერთი და იგივე მატრიცით ხორციელდება.

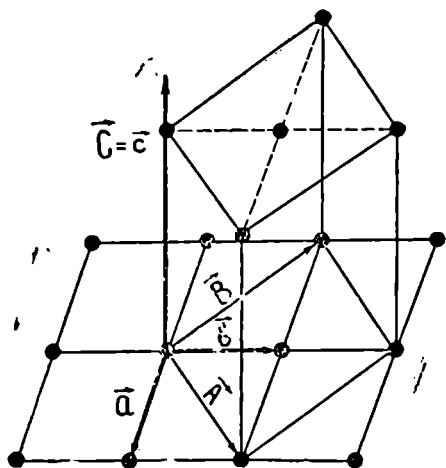
| იგივე შედეგი შეიძლება მივიღოთ, თუ ვისარგებლებთ კვანძური სიბრტყის (3.9) განტოლებით. ეს არის სიბრტყეების მოცემული რიგისათვის კოორდინატთა სათავედან პირველი კვანძური სიბრტყის განტოლება. D -ური კვანძური სიბრტყისათვის გვექნება: $hu + kv + lw = D$. ახლა საკმარისია u, v, w ინდექსების მაგივრად ჩავსვათ m_i ინდექსების მნიშვნელობები (3.17)-დან ან x_i კოორდინატების მნიშვნელობები (3.18) განტოლებიდან და დავაჭვუფოთ წევრები; მივიღებთ

$$(m_{11}h + m_{12}k + m_{13}l)M + (m_{21}h + m_{22}k + m_{23}l)N + (m_{31}h + m_{32}k + m_{33}l)P = D.$$

აქედან, H, K, L ინდექსებისათვის ვიღებთ (3.19) ტოლობებს.

ამრიგად, თუ ცნობილია ძველი კოორდინატთა ღერძების ახალ ღერძებთან გარდაქმნის მატრიცა ან შებრუნებით ძველი ღერძების ახალში გარდაქმნის მატრიცა, შეიძლება პირდაპირ დაიწეროს გარდაქმნის ფორმულები როგორც წერტილის კოორდინატებისათვის, ისე კვანძური ღერძის ინდექსებისათვის და სიბრტყის ინდექსებისათვის. 3.30 ნახაზი გვიჩვენებს, რომ m_{ij} და n_{ij} სიდიდეების მნიშვნელობები მოცემული გარდაქმნისათვის შეიძლება ყოველთვის განისაზღვროს გრაფიკულად.

განვიხილოთ გარდაქმნის რამდენიმე კერძო შემთხვევა.



ნახ. 3.31. ტეტრაგონალური ლერძების 45° შემობრუნების შედეგად უჯრედი ხდება ბაზოცენტრირებული.

როგორც აღნიშნული გეჟონდა, ყოველპრიმიტიულ ელემენტარულ უჯრედს ეკუთვნის ერთი კვანძი, ამიტომ მოცემული მესრის პრიმიტიულ უჯრედებს ერთი და იგივე მოცულობა აქვთ. ზოგიერთ შემთხვევაში ხელსაყრელია კოორდინატთა ლერძების ისეთი არჩევა, როდესაც შესაბამისი ელემენტარული უჯრედის მოცულობა მეტი ხდება პრიმიტიული უჯრედის მოცულობაზე, ე. ი. უჯრედი შეიცავს დამატებით კვანძებს. ასეთი რთული უჯრედის დასახასიათებლად საჭიროა მასში შემავალი ყველა კვანძის კოორდინატების განსაზღვრა.

ერთ ელემენტარულ უჯრედში შემავალი კვანძების კოორდინატების ერთობლიობას ამ უჯრედის ბაზისი ეწოდება.† თუ ელემენტარული უჯრედის ბაზისი შეიცავს ორ ან სამ კვანძს, მისი მოცულობა, შესაბამისად, ორჯერ ან სამჯერ მეტი იქნება პრიმიტიული უჯრედის მოცულობაზე. საზოგადოდ, ლერძების გარდაქმნის შედეგად მიღებული ელემენტარული უჯრედი იქნება პრიმიტიული, თუ გარდაქმნის მატრიცის დეტერმინანტი უდრის ± 1 . მაგალითისათვის განვიხილოთ ტეტრაგონალური უჯრედი ლერძებით \vec{a} , \vec{b} , და გადავიდეთ ახალ \vec{A} , \vec{B} ლერძებზე, რომელნიც 45° კუთხით არიან შემობრუნებული ძველი ლერძების მიმართ (ნახ. 3.31), ხოლო მესამე ლერძი $\vec{c} = \vec{c}$ საერთოა და შემობრუნება მის ირ გველივ ხდება. ნახაზიდან უშუალოდ ჩანს, რომ:

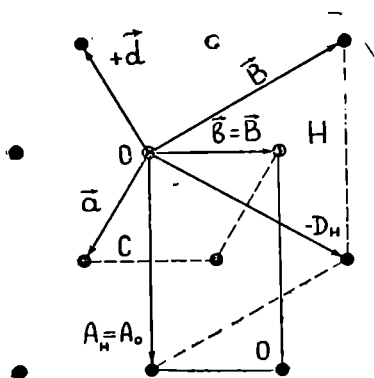
$$\vec{A} = \vec{a} + \vec{b} \quad \vec{B} = -\vec{a} + \vec{b} \quad \vec{C} = \vec{c} \quad \vec{a} = \frac{1}{2} (\vec{A} - \vec{B}) \quad \vec{b} = \frac{1}{2} (\vec{A} + \vec{B}) \quad \vec{c} = \vec{C}$$

ამ გარდაქმნებს შეესაბამება მატრიცები:

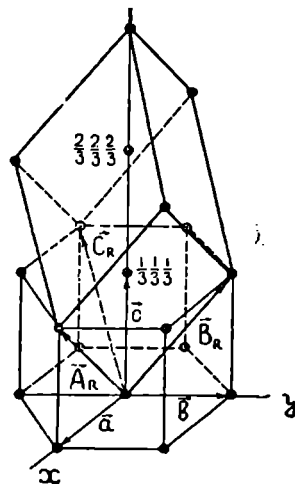
$$(m_{ij}) = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{და} \quad (n_{ij}) = \begin{vmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

(m_{ij}) მატრიცის დეტერმინანტი $\Delta=2$, რაც იმას ნიშნავს, რომ ახალ $\vec{A}\vec{B}\vec{C}$ ღერძებზე აგებული პარალელეპიპედი პრიმიტიული არ არის. ფუძისა და მისი პარალელური წახნაგის ცენტრში იმყოფება დამატებითი კვანძი. ასეთ ელემენტარულ უჯრედს ბაზოცენტრირებული უჯრედი ეწოდება. ვინაიდან ყოველი წახნაგი ერთდროულად ორ უჯრედს ეკუთვნის, ამიტომ ბაზოცენტრირებულ უჯრედში ორი კვანძი შედის და მისი ბაზისი ასე დაიწერება $\left\{ \left[\begin{array}{ccc} 0 & 0 & 0 \\ \hline \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{array} \right] \right\}$. ამის გამო $\vec{A}, \vec{B}, \vec{C}$ ვექტორებზე აგებული პარალელეპიპედის მოცულობა ორჯერ მეტი იქნება, ვიდრე ნებისმიერი პრიმიტიული უჯრედის მოცულობა. ამაზე დეტერმინანტის მნიშვნელობაც მიგვითითებს.

ჰექსაგონალურ მესერში (ნახ. 3.32) არსებობს ღერძების არჩევის ორი საშუალება. პირველ შემთხვევაში კოორდინატა ღერძებად ირჩევენ ისეთ კვანძურ ღერძებს, რომელნიც უმოკლესი იდენტურობის პერიოდით ხასიათდებიან და ერთმანეთთან ადგენენ 120° კუთხეს. აღნიშნოთ ეს ღერძები a და b ასოებით. ცხადია, რომ \vec{a} და \vec{b} ვექტორებზე აგებული უჯრედი პრიმიტიული იქნება. ამ უჯრედს C უჯრედი ეწოდება. ღერძების არჩევა აგრეთვე შეიძლება ისე, რომ ისინი არ იქნებიან მიმართული უმოკლესი ტრანსლაციების გასწვრივ. 3.32 ნახაზზე ეს ღერძები აღნიშნულია A_H და B_H ასოებით და ქმნიან ე.წ. H უჯრედს. როგორც ჩანს, უჯრედი პრიმიტიული არ არის. ის ორჯერ ბაზოცენტრირებული უჯრედი, სამჯერ დიდი მოცულობით, ვიდრე პრიმიტიული C უჯრედი.



ნახ. 3.32. ჰექსაგონალური უჯრედის ღერძების განლაგება C H და O (ორ-ოპექსაგონალურ) მდგომარეობაში.



ნახ. 3.33. ჰექსაგონალური კრისტალის აღწერა რომბოედრულ ღერძებში.

დამატებითი ორი კვანძის კოორდინატებია $\frac{1}{3} \frac{2}{3} 0, \frac{2}{3} \frac{1}{3} 0$. იღენ-

ტურობის პერიოდი ამ ღერძების გასწვრივ $A_H = a\sqrt{3}$. გადასვლა C კოორდინატა სისტემიდან კოორდინატა H სისტემაზე ხდება ღერძების შემობრუნებით 30° ან 90° . ღერძების ორგვარად არჩევის შესაძლებლობა დაკავშირებულია ჰექსაგონალური კრისტალების სიმეტრიასთან. როგორც ნახაზი გვიჩვენებს, C და H უჯრედების ერთეულოვანი ვექტორები დაკავშირებულია შემდეგი ტოლობებით:

$$\vec{A}_H = 2\vec{a} + \vec{b}; \quad \vec{a} = \frac{1}{3} (\vec{A}_H - \vec{B}_H);$$

$$\vec{B}_H = 2\vec{b} + \vec{d}; \quad \vec{b} = \frac{1}{3} (\vec{B}_H - \vec{D}_H);$$

$$-\vec{D}_H = \vec{a} + 2\vec{b}; \quad \vec{d} = \frac{1}{3} (\vec{D}_H - \vec{A}_H);$$

$$\vec{C}_H = \vec{c}; \quad c = C_H.$$

არდაქმნის მატრიცა (m_{ij})

$$(m_{ij}) = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 & 0 \\ -1 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ხოლო გარდაქმნის დეტერმინანტი $\Delta = 3$.

ზოგიერთ შემთხვევაში ხელსაყრელია ჰექსაგონალური პრიმიტიული უჯრედის მაგივრად გამოვიყენოთ ორთოჰექსაგონალური უჯრედი. ეს უჯრედი პრიმიტიული აღარ იქნება, მაგრამ გააჩნია ურთიერთმართობი ღერძები \vec{A}_0 და \vec{B}_0 . ნახაზზე ორთოჰექსაგონალური უჯრედი აღნიშნულია O ასოთი. იგი ბაზოცენტრირებულ უჯრედს წარმოადგენს და მისი ელემენტარული უჯრედი შეიცავს ორ კვანძს. პრიმიტიული და შესაბამისი ორთოჰექსაგონალური უჯრედების ღერძებს შორის ადგილი აქვს შემდეგ დამოკიდებულებას:

$$\vec{A}_0 = 2\vec{a} + \vec{b}; \quad \vec{a} = \frac{1}{2} \vec{A}_0 - \vec{B}_0;$$

$$\vec{B}_0 = \vec{b}; \quad \vec{b} = \vec{B}_0;$$

$$\vec{C}_0 = \vec{c}; \quad \vec{c} = \vec{C}_0.$$

გარდაქმნის მატრიცები:

$$(m_{ij}) = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (n_{ij}) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}, & -\frac{1}{2}, & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

პირველი მატრიცის დეტერმინანტი $\Delta = 2$, რაც შეესაბამება ორი კვანძის არსებობას ორთოპექსაგონალურ უჯრედში. მეორე მატრიცისათვის $\Delta = \frac{1}{2}$. სიბრტყის ინდექსებისათვის გვექნება:

$$H = 2h + k; \quad h = \frac{1}{2} H - \frac{1}{2} K;$$

$$K = k; \quad k = K;$$

$$L = l; \quad l = L,$$

დაბოლოს, განვიხილოთ კავშირი პექსაგონალურ და რომბოედრულ მესრებს შორის. დავუშვათ, რომ მოცემულია პექსაგონალური კრისტალი, რომელიც გვინდა აღვწეროთ რომბოედრულ ღერძებში. თუ საწყისი პექსაგონალური უჯრედი პრიმიტიულია, მისი ღერძები იქნება \vec{a} , \vec{b} და \vec{c} , ისე რომ $a = b \neq c$ და $\widehat{ab} = \gamma = 120^\circ$. ავირჩიოთ ახლა ახალი რომბოედრული ღერძები; აღვნიშნოთ ისინი \vec{A}_R , \vec{B}_R , \vec{C}_R ; მათ შორის ადგილი აქვს დამოკიდებულებას: $\vec{A}_R = \vec{B}_R = \vec{C}_R$ და $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$ (ნახ. 3.33). როგორც ნახაზი გვიჩვენებს, პრიმიტიული პექსაგონალური უჯრედი გადადის არაპრიმიტიულ რომბოედრულ უჯრედში, რომლის დიაგონალზე ორი დამატებითი კვანძია $\left[\left[\frac{1}{3} \frac{1}{3} \frac{1}{3} \right] \right]$, $\left[\left[\frac{2}{3} \frac{2}{3} \frac{2}{3} \right] \right]$, მოთავსებული, სადაც კოორდინატები აღებულია რომბოედრული ღერძების მიმართ.

ამგვარად, რომბოედრული უჯრედი შეიცავს სამ კვანძს და, მაშასადამე, სამჯერ დიდი მოცულობისაა, ვიდრე შესაბამისი პექსაგონალური პრიმიტიული უჯრედი. კავშირი ძველსა და ახალ ღერძებს შორის ხორციელდება შემდეგი ვექტორული ტოლობებით:

$$\begin{aligned} \vec{A}_R &= \vec{a} + \vec{c}; \\ \vec{B}_R &= \vec{b} + \vec{c}; \\ \vec{C}_R &= \vec{c} - \vec{a} - \vec{b}. \end{aligned} \quad \text{გარდაქმნის მატრიცა } (m_{ij}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

ხოლო დეტერმინანტი $\Delta = 3$.

შესაბამისი ლეტერმინანტების მნიშვნელობა იქნება $\Delta=3$ და $\Delta=\frac{1}{3}$.

სიბრტყის ინდექსების გარდაქმნა ხდება შემდეგი ფორმულებით:

$$H=h-k; \quad 3h=2H+K+L;$$

$$K=k-l; \quad 3k=-H+K+L;$$

$$L=h+k+l; \quad 3l=-H-2k+L.$$

აქ H, K, L სიბრტყის ინდექსებია ჰექსაგონალურ ლერძებში, ხოლო h, k, l — რომბოედრულ სისტემაში. როგორც ჩანს, რომბოედრულ ლერძებში შეიძლება მხოლოდ ისეთი ჰექსაგონალური უჯრედის გამოსახვა, რომლისთვისაც რიცხვები $2H+K+L, -H+K+L, -H-2K+L$ იყოფიან სამზე, ან, მოკლედ

$$-H+K+L=3n, \quad (3.20)$$

სადაც n მთელი რიცხვია. ამ პირობას რომბოედრულობის პირობა ეწოდება.

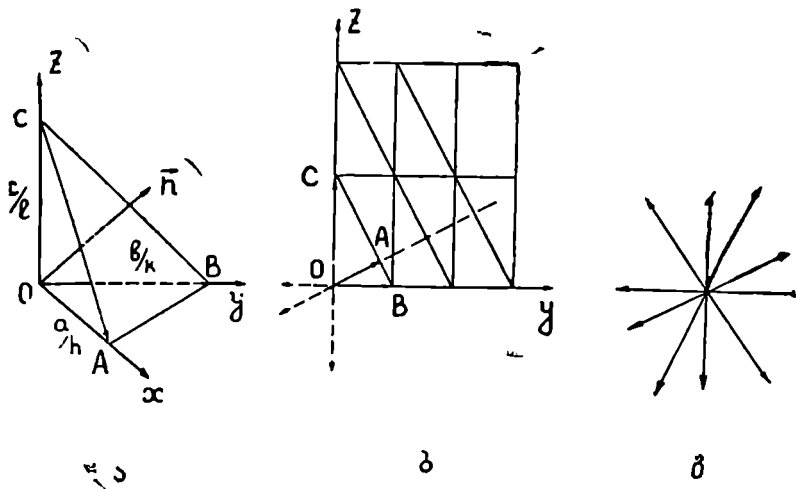
რენტგენოსტრუქტურულ ანალიზში მტკიცდება, რომ ორჯერ ცენტრირებულ ჰექსაგონალურ უჯრედში არეკვლა ხდება მხოლოდ იმ სიბრტყეებიდან, რომელნიც აკმაყოფილებენ რომბოედრულობის პირობას.

§ 11. შებრუნებული მესერი

კრისტალებზე რენტგენის სხივების დიფრაქციის განხილვის დროს ხშირად რეალური კრისტალური მესრის მაგივრად განიხილება შებრუნებული მესრის ცნება, რომელიც კრისტალების აღწერის წმინდა მათემატიკურ ხერხს წარმოადგენს.

როგორც ვნახეთ, კრისტალური მესერი ყოველთვის შეიძლება წარმოვიდგინოთ პარალელური კვანძური სიბრტყეების უსასრულო რიგით. ამ რიგში შემავალი სიბრტყეები ერთი და იგივე d მანძილით არიან დაშორებულნი ერთიმეორისაგან. ვინაიდან ნებისმიერ სამ კვანძზე გატარებული სიბრტყე შეიძლება ახალი რიგის დასაბამი გახდეს, ამიტომ კრისტალურ მესერში პარალელური კვანძური სიბრტყეების რიგების გატარების უამრავი საშუალება არსებობს. სიბრტყეების მოცემული რიგის დასახასიათებლად სავსებით საკმარისია ვიცოდეთ სიბრტყეთა შორის მანძილი d და ერთი რომელიმე სიბრტყის მდებარეობა კოორდინატთა ლერძების მიმართ.

რიგის პირველი სიბრტყე კოორდინატთა ლერძებზე ჩამოჭრის მონაკვეთებს $\frac{a}{h}, \frac{b}{k}, \frac{c}{l}$, ხოლო შემდეგი სიბრტყეების მიერ ჩამოჭრილი მონაკვეთები ამ სიდიდეების ჯერადი იქნებიან.



ნახ. 3.35. ა, ბ: ნორმალები პარალელურ სიბრტყეთა რიგების მიმართ. გ. ნორმალების კონები.

ცხადია, რამდენადაც მცირეა კვანძური სიბრტყის ინდექსები hkl , იმდენად დიდია შესაბამისი პარალელურ სიბრტყეთა რიგში სიბრტყეთა შორის მანძილი და, მაშასადამე, მეტია კვანძების განლაგების სიხშირე თითოეულ სიბრტყეში.

კვანძური სიბრტყეების იგივე რიგი შეიძლება დახასიათდეს უფრო მარტივად, თუ ავიღებთ ნორმალს ამ სიბრტყეების მიმართ და მის სიგრძეს დავაკავშირებთ სიბრტყეთა შორის მანძილთან (ნახ. 3.35-ა, ბ). მაშინ პარალელურ სიბრტყეთა რიგი გამოსახული იქნება ერთი წერტილით, რომელიც ამ ნორმალის ბოლოს წარმოადგენს. ამიტომ სიბრტყეთა რიგების ნორმალებით შეცვლა საგრძნობლად ამარტივებს გამოთვლებს განსაკუთრებით მაშინ, როდესაც საქმე გვაქვს დიდი რაოდენობის და სხვადასხვა ორიენტაციების რიგებთან. 3.35-ბ ნახაზზე ნაჩვენებია პარალელური სიბრტყეების რიგები და შესაბამისი ნორმალები OA , OB , OC . ამ ნორმალების სიგრძე და მიმართულება სრულიად ცალსახად განსაზღვრავს სიბრტყეთა რიგის განლაგებას კოორდინატთა ღერძების მიმართ და სიბრტყეთა შორის მანძილს. ნორმალები შეიძლება კოორდინატთა სათავის მეორე მხარეს გავაგრძელოთ და თუ ასეთ ნორმალებს კრისტალის ყველა შესაძლებელ სიბრტყეთა რიგის მიმართ ავაგებთ, კოორდინატთა სათავის ირგვლივ მივიღებთ ნორმალების კონას (ნახ. 3.35-გ). იმისათვის, რომ ნორმალების კონამ სრულყოფილად დაახასიათოს კვანძური სიბრტყეების განლაგება, საჭიროა შეთანხმება

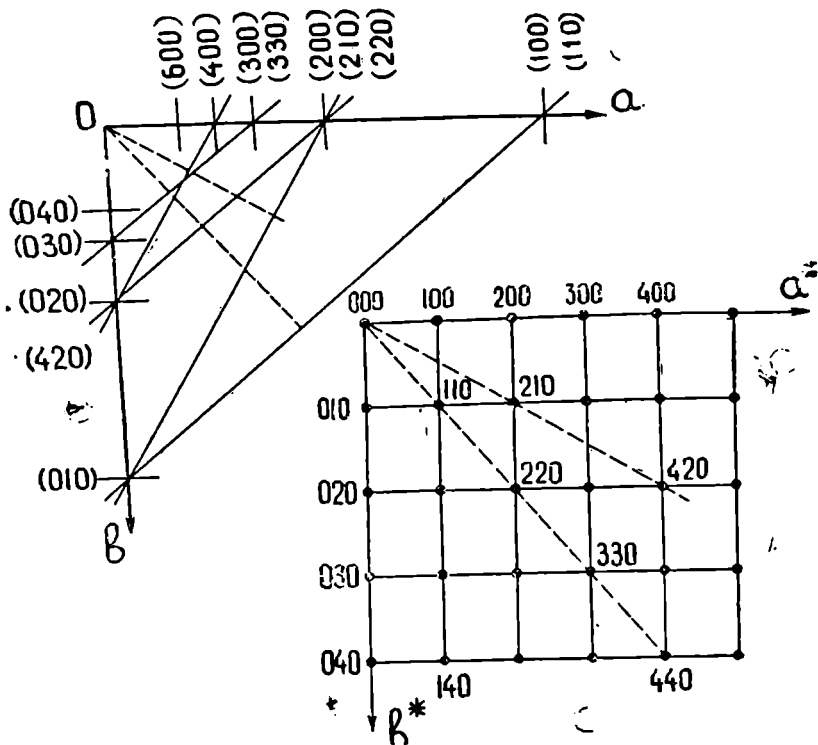
ნორმალების სიგრძეების არჩევის შესახებ. ნორმალს სიგრძე] შეიძლება ავირჩიოთ სიბრტყეთა შორის d მანძილის ტოლად ან მის პროპორციულად. მაგრამ კრისტალურ მესერში რენტგენის სხივების დიფრაქციის [შესწავლის] დროს მეტად ხელსაყრელია ნორმალების სიგრძე ავირჩიოთ სიბრტყეთა შორის მანძილის უკუპროპორციულად. თუ ამ სიდიდეს აღვნიშნავთ d^* , მაშინ (hkl) სიბრტყეთა რივისათვის $d^* = c \cdot \frac{1}{d_{hke}}$, სადაც c პროპორციულობის კოეფიციენტი და დაკავ-

შირებულია მასშტაბთან (ნახ. 3.35-გ). შვგალითად, გაყოფის შედეგად მიღებული რიცხვები შეიძლება გავადიდოთ ხუთჯერ, ათჯერ და ა. შ. ამიტომ ეს კოეფიციენტი შეიძლება მივიღოთ ერთის ტოლად.

ამგვარად, კრისტალურა მესრის ყველა სიბრტყის წარმოდგენის მიზნით საჭიროა (hkl) სიბრტყეთა რივის მიმართ ავავოთ ნორმალი და ამ ნორმალზე გადავზომოთ სიბრტყეთა რივისათვის დამახასიათებელი სიბრტყეთშორისი მანძილის შებრუნებული სიდიდე. წერტილების ერთობლიობა, რომელსაც ნორმალების ბოლოები შეადგენენ, კრისტალური მესრის კვანძების მსგავსად, სივრცეში გარკვეული წესით¹ ლაგდება და ქმნის თავისებურ მესერს. ასეთი მესრის ასაგებად განვიხილოთ, სიმარტივისათვის, ორგანზომილებიანი რომბული მესერი, ლერძებით \vec{a} და \vec{b} , \vec{c} ღერძი ნახაზის სიბრტყის მართობია (ნახ. 3.36). ჩვენ განვიხილავთ მხოლოდ იმ სიბრტყეებს, რომელნიც რომბული კრისტალის $[001]$ ზონას მიეკუთვნებიან და, მაშასადამე, ნახაზის სიბრტყის მართობი არიან. მათი კვალი ნახაზზე უწყვეტა ხაზებით არის ნაჩვენები. ასეთ შემთხვევაში \vec{a} ღერძი ყველა იმ სიბრტყის მართობი იქნება, რომელაც bc საკოორდინატო სიბრტყის პარალელურია, კერძოდ (100) სიბრტყისა. ასევე \vec{b} ღერძი (010) სიბრტყის მართობი იქნება, მაგრამ ამ სიბრტყეებისათვის სიბრტყეთა შორის მანძილი, შესაბამისად, a და b მონაკვეთების სიგრძეების ტოლია და, მაშასადამე, მათი შებრუნებული სიდიდეები იქნება:

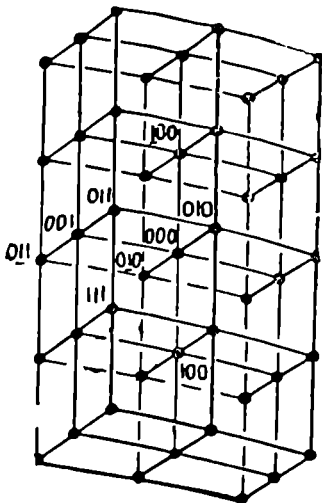
$$a^* = \frac{1}{a}, \quad b^* = \frac{1}{b}, \quad c^* = \frac{1}{c}. \quad (3.21)$$

\vec{a}^* , \vec{b}^* , \vec{c}^* ვექტორებზე აგებულ მესერს მოცემული კრისტალური მესრის შებრუნებული მესერი ეწოდება. შებრუნებული მესერი მკიდროდ არის დაკავშირებული ძირითად კრისტალურ მესერთან. ძირითადი მესრის საწყისი კვანძი, ე. ი. კვანძი, რომელშიც მოთავსებულია კოორდინატთა სათავე, ამავე დროს შებრუნებული მესრის ქნლოვან წერტილს წარმოადგენს კოორდინატებით 000 . ამ წერტილიდან იწყებენ გამოსვლას ნორმალები ყველა კვანძური სიბრტყის მიმართ. 3.36 ნახაზ-

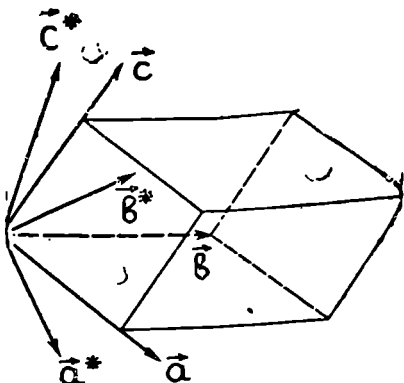


ნახ. 3.36. რომბული მესრის [001] ზონის კვანძური სიბრტყეები. ამ სიბრტყეების შესაბამისი წერტილები შებრუნებულ მესერში.

ზე ეს საწყისი წერტილი და თვით შებრუნებული მესერი, ნახაზის გამარტივების მიზნით, გამოტანილია ცალკე, ნორმალების პარალელურობის დაცვით. ნახაზიდან ნათლად ჩანს, რომ კრისტალური მესრის კვანძური სიბრტყეების 'თითოეულ' ზრის შებრუნებული მესრის ერთი წერტილი შეესაბამება. (100) კვანძური სიბრტყისათვის, მაგალითად, სიბრტყეთშორისი მანძილი $d_{100} = a$. a ღერძისადმი მართობ სიბრტყეთა შორის ეს იქნება უდიდესი სიბრტყეთშორისი მანძილი, ამიტომ შებრუნებულ მესერში მისი შესაბამისი $d^*_{100} = \frac{1}{a}$ მანძილი იქნება უმოკლესი a^* ღერძის გასწვრივ, ამ მანძილზე საწყისი კვანძიდან იქნება მოთავსებული 100 წერტილი. (200) სიბრტყისათვის მანძილი $d_{200} = \frac{a}{2}$, ხოლო შებრუნებულ მე-



ნახ. 3.37. რომბული კრისტალური მესრის შებრუნებული მესერი.



ნახ. 3.38. ირიბკუთხა სისტემაში პირდაპირი და შებრუნებული მესრის ვექტორები პარალელური არ არიან.

სერში $d_{200}^* = \frac{1}{a} = 2j \cdot \frac{1}{a}$, წერტილით 200 და ა.შ. ასევე, (110) კვანძურ $\frac{2}{2}$

სიბრტყეს შებრუნებულ მესერში შეესაბამება წერტილი 110, რომელიც ამ სიბრტყისადმი ნორმალზე არის გადაზომილი და ნულოვანი წერტილი-საგან დაშორებულია სიბრტყეთშორისი მანძილის შებრუნებული სიდიდით. ცხადია, რომ წერტილები 220, 330, 440 და ა. შ. იმავე ნორმალზე იქნებიან განლაგებულნი ორჯერ, სამჯერ, ოთხჯერ და მეტი მანძილით ნულოვანი წერტილიდან, ვიდრე 110 წერტილი.

3.37 ნახაზზე მოყვანილია რომბული კრისტალის შებრუნებული მესრის სივრცობრივი გამოსახულება. როგორც ჩანს, სწორკუთხოვან კოორდინატა სისტემის შემთხვევაში პირდაპირი \vec{a} და შებრუნებული \vec{a}^* ვექტორები პარალელური არიან. ცხადია, ირიბკუთხა კოორდინატა სისტემაში, სადაც \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} ვექტორები ურთიერთ მართობი არ არიან (ნახ. 3.38), ეს ასე არ იქნება, მაგრამ ყველა შემთხვევაში შებრუნებული მესრის ვექტორები \vec{a}^* , \vec{b}^* , \vec{c}^* შესაბამისი კოორდინატული სიბრტყეების მართობნი იქნებიან და მათი სიგრძე დამოკიდებული იქნება ამ სიბრტყეთშორის მანძილზე.

შებრუნებულ მესერსა და პირდაპირი მესრის ვექტორებს შორის დამოკიდებულება შეიძლება გამოვსახოთ ვექტორულად შემდეგი სახით:

$$\begin{aligned} \vec{a}^* \cdot \vec{a} &= 1; & \vec{a}^* \cdot \vec{b} &= 0; & \vec{a}^* \cdot \vec{c} &= 0; \\ \vec{b}^* \cdot \vec{b} &= 1; & \vec{b}^* \cdot \vec{a} &= 0; & \vec{b}^* \cdot \vec{c} &= 0; \\ \vec{c}^* \cdot \vec{c} &= 1; & \vec{c}^* \cdot \vec{a} &= 0; & \vec{c}^* \cdot \vec{b} &= 0. \end{aligned} \quad (3.22)$$

(3.22) ტოლობების თანახმად, \vec{b}^* მართობია \vec{a} და \vec{c} ვექტორებისა, \vec{a}^* ვექტორი მართობია \vec{b} და \vec{c} ვექტორებისა და ა. შ. ამიტომ შეიძლება დავწეროთ:

$$\vec{a}^* = \alpha_1(\vec{b} \times \vec{c}); \quad \vec{b}^* = \alpha_2(\vec{c} \times \vec{a}); \quad \vec{c}^* = \alpha_3(\vec{a} \times \vec{b}),$$

სადაც $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ პროპორციულობის კოეფიციენტებია. აქედან

$$\vec{a} \cdot \vec{a}^* = \alpha_1(\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})) = 1 \text{ და რადგან } \vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c}) = V.$$

სადაც V პირდაპირი მესრის ელემენტარული უჯრედის მოცულობაა, მივიღებთ:

$$\alpha_1 \cdot V = 1 \text{ და } \alpha_1 = \frac{1}{V}.$$

მაშასადამე:

$$\vec{a}^* = \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{V}; \quad \vec{b}^* = \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{V}; \quad \vec{c}^* = \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{V} \quad (3.23)$$

ან

$$\vec{a}^* = \frac{bc \sin \alpha}{V}; \quad \vec{b}^* = \frac{ca \sin \beta}{V}; \quad \vec{c}^* = \frac{ab \sin \gamma}{V}. \quad (3.24)$$

ვინაიდან (3.22) ფორმულები სიმეტრიული არიან ვარსკვლავიანი და არავარსკვლავიანი აღნიშვნების მიმართ, ამიტომ ორივე მესერი ურთიერთშებრუნებულია და შებრუნებული მესრის შებრუნებული ისევ პირდაპირი მესერი იქნება. ამის გამო შეიძლება დაიწეროს:

$$\vec{a} = \frac{\vec{b}^* \times \vec{c}^*}{V^*}; \quad \vec{b} = \frac{\vec{c}^* \times \vec{a}^*}{V^*}; \quad \vec{c} = \frac{\vec{a}^* \times \vec{b}^*}{V^*}, \quad (3.25)$$

სადაც V^* შებრუნებული მესრის ელემენტარული უჯრედის მოცულობაა; ანლა

$$\vec{a} \cdot \vec{a}^* = \frac{1}{VV^*} \cdot (\vec{b}^* \times \vec{c}^*) \cdot (\vec{b} \times \vec{c}) = 1;$$

აქედან

$$VV^* = (\vec{b}^* \times \vec{c}^*) (\vec{b} \times \vec{c}) = (\vec{b} \vec{b}^*) (\vec{c} \vec{c}^*) - (\vec{b} \vec{c}^*) (\vec{c} \vec{b}^*) = 1;$$

$$V^* = \frac{1}{V}. \quad (3.26)$$

შებრუნებული მესრის ელემენტარული უჯრედის მოცულობა პირდაპირი კრისტალური მესრის ელემენტარული უჯრედის მოცულობის შებრუნებული სიდიდის ტოლია.

ენიდან მესრის ელემენტარული უჯრედის მოცულობა \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} ვექტორების შერეული ნამრავლით გამოისახება, შეიძლება ვისარგებლოთ შერეული ნამრავლის კვადრატის ფორმულით. მაშინ უჯრედის მოცულობისათვის მივიღებთ

$$\{V = abc \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}. \quad (3.27)$$

შებრუნებული მესრის ზოგიერთი თვისება

მიღებული შედეგები საშუალებას იძლევა ჩამოვაყალიბოთ შებრუნებული მესრის რამდენიმე მნიშვნელოვანი თვისება:

1. (3.36) ნახაზიდან ჩანს, რომ შებრუნებული მესრის ნულოვანი კვანძიდან მის ნებისმიერ კვანძამდე გატარებული რადიუს-ვექტორი \vec{H} უდრის

$$\vec{H}_{hkl} = h\vec{a}^* + kb^* + lc^*, \quad (3.28)$$

სადაც hkl პირდაპირი მესრის (hkl) სიბრტყის ინდექსებია. \vec{H} ვექტორი შებრუნებული მესრის ვექტორი ეწოდება.³

2. პირდაპირი და შებრუნებული მესრები ყოველთვის ერთ და იმავე კრისტალურ სისტემას ეკუთვნიან (ნახ. 3.37).

3. შებრუნებული მესრის ვექტორი \vec{H}_{hkl} მართობია კრისტალური მესრის (hkl) სიბრტყისა. როგორც 3.36 ნახაზი გვიჩვენებს, სწორკუთხა კოორდინატთა სისტემის შემთხვევაში ეს დებულება უშუალოდ გამომდინარეობს მესრის აგების წესიდან, მაგრამ მისი დამტკიცება შესაძლებელია ნებისმიერი ტიპის მესრისათვის. ამისათვის განვიხილოთ 3.35-ა ნახაზი, სადაც მოცემულია პარალელური სიბრტყეების რიგი. ამ რიგის პირველი ABC სიბრტყის ინდექსებია hkl და ამიტომ ის კოორდინატთა

ღერძებზე ჩამოჭრის $\frac{a}{h}$, $\frac{b}{k}$, $\frac{c}{l}$ მონაკვეთებს. უნდა დავამტკიცოთ, რომ $H_{hkl} = h\vec{a}^* + kb^* + lc^*$ ვექტორი ამ სიბრტყის მართობია. ამისათვის საკმარისია დამტკიცდეს, რომ \vec{H} მართობია ABC სიბრტყეზე მდე-

ბარე ორი ვექტორის, მაგ., \vec{CA} და \vec{AB} ვექტორებისა. $\vec{CA} = \frac{\vec{a}}{h} - \frac{\vec{c}}{l}$,

$$\text{ხოლო } \vec{AB} = \frac{\vec{b}}{k} - \frac{\vec{a}}{h};$$

ავიღოთ \vec{H} ვექტორის \vec{AB} ვექტორთან სკალარული ნამრავლი

$$\left(\vec{H} \cdot \frac{\vec{b}}{k} - \frac{\vec{a}}{h} \right) = \left(h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*, \frac{\vec{b}}{k} - \frac{\vec{a}}{h} \right) = 0.$$

იგივე შეიძლება დამტკიცდეს \vec{CA} ვექტორისათვის. ამგვარად \vec{H}_{hkl} ვექტორი მართობია hkl ინდექსებით განსაზღვრული კრისტალური სიბრტყისა.

4. \vec{H}_{hkl} ვექტორის სიგრძე (hkl სიბრტყეების რიგის სიბრტყეთა შორის d მანძილის უკუპროპორციულია

$$H_{hkl} = \frac{1}{d_{hkl}}; \quad (3.29)$$

მართლაც, როგორც ვიცით, კოორდინატა სათავიდან უახლოესი კენძური სიბრტყის განტოლებას აქვს შემდეგი სახე

$$\frac{x}{\frac{a}{h}} + \frac{y}{\frac{b}{k}} + \frac{z}{\frac{c}{l}} = 1 \quad \text{ან} \quad \frac{h}{a}x + \frac{k}{b}y + \frac{l}{c}z = 1,$$

ხოლო კოორდინატა სათავიდან ამ სიბრტყემდე მანძილი

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2}} = \frac{1}{H_{hkl}}.$$

ზოგად შემთხვევაში, ტრიკლინური კრისტალის ელემენტარული უჯრედი განისაზღვრება სამი ძირითადი a , b , c მონაკვეთით და მათ შორის კუთხეებით α , β , γ . შებრუნებული მესრის შესაბამისი პარამეტრები იქნებიან a^* , b^* , c^* , α^* , β^* , γ^* . (3.23) და (3.24) ფორმულები გვაძლევენ კავშირს პირდაპირი და შებრუნებული მესრის პარამეტრებს შორის. ასეთივე კავშირი არსებობს შესაბამის კუთხეებს შორის:

$$\begin{aligned} \cos \alpha^* &= \frac{\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha}{\sin \beta \sin \gamma}; \\ \cos \beta^* &= \frac{\cos \alpha \cos \gamma - \cos \beta}{\sin \alpha \sin \gamma}; \\ \cos \gamma^* &= \frac{\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma}{\sin \alpha \sin \beta}. \end{aligned} \quad (3.30)$$

პირდაპირი მესრის კუთხეებისათვის:

$$\begin{aligned}\cos \alpha &= \frac{\cos \beta^* \cos \gamma^* - \cos \alpha^*}{\sin \beta^* \sin \gamma^*}; \\ \cos \beta &= \frac{\cos \alpha^* \cos \gamma^* - \cos \beta^*}{\sin \alpha^* \sin \gamma^*}; \\ \cos \gamma &= \frac{\cos \alpha^* \cos \beta^* - \cos \gamma^*}{\sin \alpha^* \sin \beta^*},\end{aligned}\quad (3.31)$$

ახლა შეიძლება დაიწეროს გამოსახულება სიბრტყეთშორისი d მანძილისათვის; (3.29) ფორმულის თანახმად:

$$\begin{aligned}\frac{1}{d^2_{hkl}} &= (\vec{H}_{hkl} \cdot \vec{H}_{hkl}) = h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2} + 2hka^*b^* \cos \gamma^* + \\ &+ 2hla^*c^* \cos \beta^* + 2klb^*c^* \cos \alpha^*.\end{aligned}\quad (3.32)$$

ტრიკლინური კრისტალები ყველაზე ნაკლებად სიმეტრიული კრისტალებია და ამიტომ პარამეტრებს შორის დამოკიდებულებაც საკმაოდ რთულ ხასიათს ატარებს.

სიმეტრიის ზრდასთან ერთად ზემოთ მოყვანილი ფორმულები საგრძნობლად მარტივდება. ასე, მაგალითად, უკვე მონოკლინური კრისტალებისათვის, რადგან $a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma = 90^\circ$:

$$V = abc \sin \beta; \quad a^* = \frac{1}{a \sin \beta}; \quad b^* = \frac{1}{b}; \quad c^* = \frac{1}{c \sin \beta}; \quad (3.33)$$

$$\frac{1}{d^2_{hkl}} = \frac{1}{\sin^2 \beta} \left(\frac{h^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} - \frac{2hl \cos \beta}{ac} \right) + \frac{k^2}{b^2}; \quad \beta^* = 180^\circ - \beta. \quad (3.34)$$

რომბული კრისტალებისათვის: $a \neq b \neq c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$; მივიღებთ:

$$V = abc; \quad a^* = \frac{1}{a}; \quad b^* = \frac{1}{b}; \quad c^* = \frac{1}{c}; \quad \frac{1}{d^2_{hkl}} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}. \quad (3.35)$$

ტეტრაგონალური კრისტალებისათვის $a = b \neq c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, ამიტომ:

$$V = a^2 c; \quad a^* = \frac{1}{a}; \quad c^* = \frac{1}{c}; \quad \frac{1}{d^2_{hkl}} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}. \quad (3.36)$$

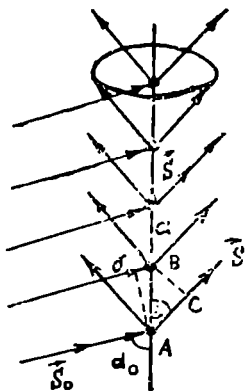
კუბური სისტემის კრისტალებისათვის:

$$V = a^3; \quad a^* = \frac{1}{a}; \quad \frac{1}{d^2_{hkl}} = \frac{1}{a^2} (h^2 + k^2 + l^2), \quad (3.37)$$

§ 12. რენტგენის სხივების დიფრაქცია და შებრუნებული მისარი

შებრუნებული მისრისა და შებრუნებული სივრცის ცნებების შემოღება გვაძლევს უადრესად მძლავრ მეთოდს რენტგენის სხივების დიფრაქციის რიგი ამოცანების გადასაწყვეტად.

ზემოთ აღნიშნული იყო, რომ ნებისმიერი კრისტალური მესერი. სამივე განზომილების მიმართ, პერიოდულობით ხასიათდება. უმარტივეს პერიოდულ სტრუქტურას კვანძური ღერძი წარმოადგენს, პერიოდით a .



ნახ. 3.39. დიფრაქცია a პარამეტრის მქონე კვანძურ ღერძზე.

განვიხილოთ მონოქრომატული ტალღის დიფრაქცია აღნიშნულ კვანძურ ღერძზე, თუ დაცემული და დამკვირვებელი ტალღების მიმართული ვეზი S_0 და S ერთეულოვანი ვექტორებით განისაზღვრებიან ან α_0 — დაცემის და α — არეკვლის კუთხეებით (ნახ. 3.39). მეორეული ტალღები, რომლებსაც ღერძის თითოეული კვანძი გააბნევს გარკვეული \vec{s} მიმართულებით (α -კუთხით), მაქსიმალურად გააძლიერებენ ერთიმეორეს, თუ ისინი იმოქმედებენ ერთ ფაზაში. იმისათვის, რომ ყველა მეორეული ტალღა მოქმედებდეს ერთ ფაზაში, საჭიროა ორი მეზობელი კვანძის მიერ გაბნეული ტალღების სვლათა სხვაობა უდრიდეს ტალღების მთელი რიცხვს. ჩვენს მაგალითში, სვლათა სხვაობა A და B კვანძებს შორის უდრის $AC-BD$:

$$a \cos \alpha - a \cos \alpha_0 \text{ ან } \vec{a}(\vec{s} - \vec{s}_0),$$

ხოლო მაქსიმალური ინტენსიურობის სხივის პირობა მიიღებს სახეს:

$$a \cos \alpha - a \cos \alpha_0 = h\lambda \text{ ან } \vec{a}(\vec{s} - \vec{s}_0) = h\lambda, \quad (3.38)$$

სადაც h — მთელი რიცხვია.

როგორც ნახაზი გვიჩვენებს, თუ დაცემის α_0 კუთხე მუდმივი სიდიდეა, მაშინ გაბნეული სხივებისათვის მართებულია ტოლობა $\cos \alpha = \cos \alpha_0 + h\lambda/a$ და გაბნეული სხივები სივრცეში განლაგდებიან კონუსურ ზედაპირებზე, რომელთა საერთო ღერძი მოცემული კვანძური ღერძი იქნება.

ასეთივე მსჯელობა შესაძლებელია ჩატარდეს ნებისმიერი კვანძური ღერძისათვის. კერძოდ, კრისტალური მისრისათვის, რომელიც პერიოდულ-

ლობ .) ხასიათდება სამივე განზომილების მიმართ, საჭირო იქნება (3.38) პირობის დაცვა სამივე საკოორდინატო კვანძური ლერძისათვის და ამიტომ შესაძლებელია დაიწეროს:

$$\begin{aligned} \vec{a}(\vec{s}-\vec{s}_0) &= h\lambda, \\ \vec{b}(\vec{s}-\vec{s}_0) &= k\lambda, \\ \vec{c}(\vec{s}-\vec{s}_0) &= l\lambda, \end{aligned} \quad (3.39)$$

სადაც h, k, l — მთელი რიცხვებია და მათ დიფრაქციული ინდექსები ეწოდება. (3.39) პირობები ლაუეს პირობებს წარმოადგენენ. ეს პირობები კრისტალში უნდა სრულდებოდეს ერთდროულად სამი მიმართულებისათვის. ეს იმას ნიშნავს, რომ რეალურ კრისტალში დიფრაგირებული სხივი გავრცელდება მხოლოდ იმ მიმართულებით, რომელიც a, b და c ლერძებზე აგებული სამი უნუსის გადაკვეთის ხაზს წარმოადგენს (ნახ. 3.40). რა თქმა უნდა, ეს გადაკვეთა ყოველთვის არ ხდება და ამიტომ რენტგენის სხივების გაბნევის დროს დიფრაგირებული სხივი ყველა მიმართულებით კი არ მიიღება, არამედ ვრცელდება მხოლოდ გარკვეული მიმართულებით, რომლებსათვის შესრულდება პირობა (3.39).

თუ შემოვიღებთ დაცემული და გაბნეული სხივების ტალღურ ვექტორებს $\vec{k}_0 = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{s}_0$ და $\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{s}$, მაშინ (3.39) ასე გამოისახება

$$\begin{aligned} \vec{a}(\vec{k}-\vec{k}_0) &= 2\pi h, \\ \vec{b}(\vec{k}-\vec{k}_0) &= 2\pi k, \\ \vec{c}(\vec{k}-\vec{k}_0) &= 2\pi l. \end{aligned} \quad (3.39')$$

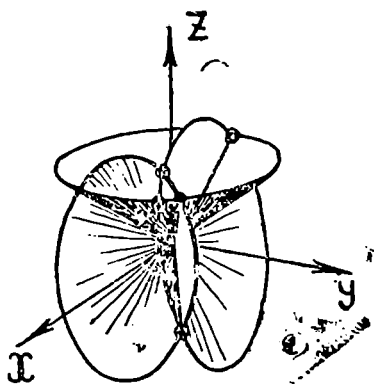
| მივიღოთ მხედველობაში (3.21) და (3.28), მაშინ (3.39) ტოლობები შემდეგადაა დაიწეროს შემდეგი სახით:

$$\vec{s}-\vec{s}_0 = \lambda(h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) = \lambda\vec{H}$$

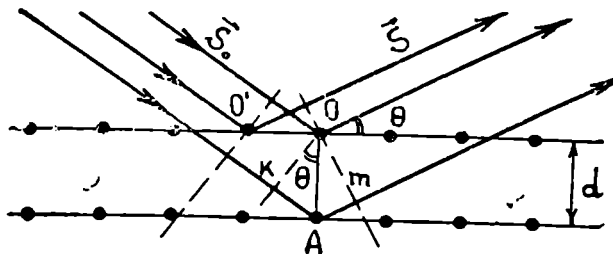
ან

$$\frac{\vec{s}-\vec{s}_0}{\lambda} = \vec{H}_{hkl}, \quad (3.40)$$

სადაც \vec{H}_{hkl} — შებრუნებული მესრის ვექტორია, ხოლო შებრუნებული სივრცის $\vec{a}^*, \vec{b}^*, \vec{c}^*$ კოორდინატთა სისტემაში ნებისმიერი hkl მთელი რიცხვები ამ ვექტორის კოორდინატები იქნება. (3.40) განტოლებას ინტერფერენციული განტოლება ეწოდება.



ნახ. 3.40. დიფრაქციის კონუსები სამ-განზომილებაში მესერზე გაბნევის დროს.



ნახ. 3.41. ბრევი-ველფის განტოლების გამოყენებისათვის.

ის შეიცავს ლაუეს სამივე პირობას და ამავე დროს საშუალებას იძლევა რენტგენის სხივების დიფრაქცია განვიხილოთ, როგორც „არეკელა“ კრისტალის ატომური სიბრტყიდან.

ამისათვის წარმოვიდგინოთ კრისტალი, როგორც პარალელური ატომური სიბრტყეების თანამიმდევრობა, რომელნიც ერთი და იგივე d მანძილით არიან დაცილებულნი ერთიმეორეს (ნახ. 3.41). ჯერ განვიხილოთ ერთ სიბრტყეზე მდებარე ყველა ატომი. როგორც ნახაზი გვიჩვენებს, როგორც არ უნდა იყოს ატომების განლაგება ამ სიბრტყეზე, ამ ატომებიდან გაბნეული ყველა ტალღა იქნება ერთ ფაზაში (ორი სხივი o და o' წერტილებს შორის ტოლ მანძილებს გადიან.), თუ დაცული არის საკმარისი არეკვლის ყველა კანონი, ე. ი. სხივების დაცემის θ კუთხე უდრის არეკვლის კუთხეს და დაცემული s_0 და არეკვლილი s სხივები ერთ სიბრტყეში არიან განლაგებულნი. სვლათა სხვაობა წარმოიშობა ორ მეზობელ პარალელურ სიბრტყეს შორის არეკვლის დროს. ამ სვლათა სხვაობის დასადგენად საკმარისია ავირჩიოთ თითო-თითო კვანძი თითოეული სიბრტყიდან, მაგალითად, კვანძები O და A . განვიხილოთ სვლათა სხვაობა ამ კვანძებს შორის. როგორც ნახაზიდან ჩანს, ეს სხვაობა არის

$$KA + Am = 2d \sin \theta.$$

იმისათვის, რომ ორი მომდევნო სიბრტყის მიერ გაბნეული ტალღები იმყოფებოდნენ ერთ ფაზაში, აუცილებელია სრულდებოდეს პირობა:

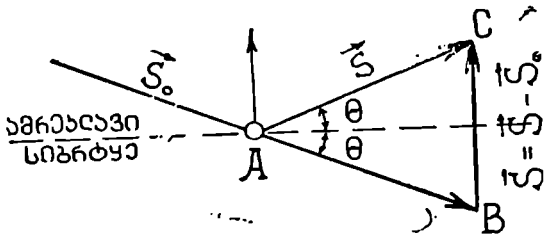
$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (n - \text{მთელი რიცხვია}).$$

თუ λ ტალღის სიგრძის სხივი θ კუთხით ეცემა კრისტალური მესრის სიბრტყეებს, რომელთა სიბრტყეთშორისი მანძილი არის d , მაშინ ეს სხივი წარმოქმნის დიფრაგირებულ სხივს, რომელიც გაივლის არეკვლილი სხივის მსგავსად იმ შემთხვევაში, თუ სრულდება პირობა

$$2d \sin \theta = n\lambda, \quad (3.41)$$

სადაც n მთელ რიცხვს დიფრაქციის რიგი ეწოდება, ხოლო განტოლება (3.41) ცნობილ ბრეგ-ვეულფის განტოლებას წარმოადგენს. ამ განტოლებიდან გამოდის, რომ კრისტალს თითქოს შეუძლია „არეკვლოს“ რენტგენის სხივები, თუმცა ეს არეკვლა ხდება დაცემის მხოლოდ გარკვეული კუთხეებისათვის, ამიტომ მას „სელექტურ არეკვლას“ უწოდებენ.

ბრეგ-ვეულფის განტოლება წარმოადგენს რენტგენოსტრუქტურული ანალიზის საფუძველს. ჩვენ ეს განტოლება მივიღეთ სრულებით დამოუკიდებლად არეკვლის კანონების გამოყენებით, მაგრამ შესაძლებელია ის უშუალოდ მიღებულ იქნას ინტერფერენციული (3.40) განტოლებიდანაც. ამისათვის განვიხილოთ რას წარმოადგენს გეომეტრიულად ვექტორი $\vec{s}-\vec{s}_0$. ავიღოთ კვანძურ ღერძზე რომელიმე კვანძი, მაგალითად, A (ნახ. 3.42), მაშინ AB და AC , შესაბამისად, წარმოადგენენ \vec{s}_0 და \vec{s} ვექტორებს, ხოლო BC იქნება $\vec{s}-\vec{s}_0$ ვექტორი. როგორც ნახაზიდან ჩანს, ეს ვექტორი მართობია სიბრტყისა, რომელიც \vec{s}_0 მიმართულებას არეკვლავს გაბნევის \vec{s} მიმართულებისაკენ. ამ სიბრტყეს არეკვლის სიბრტყე ეწოდება, თუმცა სინამდვილეში აქ არავითარ არეკვლას ადგილი არ აქვს.



ნახ. 3.42. $\vec{s}-\vec{s}_0$ ვექტორის გეომეტრიული წარმოდგენისათვის.

თუ θ კუთხე დაცემის კუთხეა, ამრეკვლავი სიბრტყის მართობი $\vec{s}-\vec{s}_0$ ვექტორის აბსოლუტური მნიშვნელობა იქნება

$$|\vec{s}-\vec{s}_0| = 2 \sin \theta. \tag{3.42}$$

ჩავსვათ ეს მნიშვნელობა ინტერფერენციულ (3.40) განტოლებაში და გავიხსენოთ, რომ, (3.29) ფორმულის თანახმად, $H = \frac{1}{d_{hkl}}$, მივიღებთ

$$\frac{2 \sin \theta}{\lambda} = \frac{1}{d_{hkl}}. \tag{3.43}$$

ეს კი ბრეგ-ვეულფის განტოლებაა, რომელიც, ამ შემთხვევაში, უშუალოდ არის მიღებული ინტერფერენციული განტოლებიდან. როგორც

ჩანს, ინტერფერენციული განტოლება, რომელიც განიხილავს რენტგენის სხივების დიფრაქციას კრისტალურ მესერზე, უკვე შეიცავს ატომური სიბრტყიდან არეკვლის იდეას.

ბრეგ-ვულფის განტოლება გვიჩვენებს, რომ კრისტალური მესრის სიბრტყეებიდან, რომლებსაც სიბრტყეთშორისი d მანძილი გააჩნიათ, λ ტალღის სხივების არეკვლისათვის საჭიროა ისეთი θ კუთხის არსებობა, რომელიც დააკმაყოფილებს ამ განტოლებას, და ვინაიდან $\sin \theta < 1$, ამიტომ აუცილებელია სრულდებოდეს პირობა $\lambda < 2d$. ჩვეულებრივად, კრისტალებით რენტგენის სხივების გაბნევის დროს ეს პირობა ყოველთვის სრულდება.

(3.41) განტოლება შესაძლებელია გადაიწეროს შემდეგი სახით

$$\sin \theta_{hkl} = \frac{n\lambda}{2d_{hkl}}. \quad (3.44)$$

აქ d_{hkl} — სიბრტყეთშორისი მანძილია პირდაპირი მესრის (hkl) სიბრტყეთა რიგში. როგორც ვიცით, ამ რიგში სათავესთან უახლესი სიბრტყე ჩამოჭრის კოორდინატა ღერძებზე მონაკვეთებს $1/h$, $1/k$, $1/l$. თუ ავიღებთ სიბრტყეს ინდექსებით (nh, nk, nl) , ეს სიბრტყე ჩამოჭრის ღერძებზე $\frac{1}{nh}$, $\frac{1}{nk}$, $\frac{1}{nl}$ მონაკვეთებს. ეს იმას ნიშნავს, რომ სიბრტყე (nh, nk, nl)

პარალელურია (hkl) სიბრტყისა და სათაეიდან $\frac{1}{n}$ - ჯერ უფრო ახლოს მდებარეობს, ვიდრე d_{hkl} მანძილია, ე. ი.

$$d_{(nh, nk, nl)} = \frac{1}{n} d_{(hkl)} \quad (3.45)$$

ცხადია, სიბრტყე (nh, nk, nl) წარმოსახვითია, ვინაიდან უახლესი სიბრტყე, რომელიც ჩვენ კოორდინატთა სათაეიდან ავიღეთ, იყო რეალური (hkl) სიბრტყე. მაგრამ თუ წარმოვიდგენთ, რომ ამ წარმოსახვითი სიბრტყიდან არსებობს პირველი რიგის არეკვლა, მაშინ, (3.44) ფორმულის თანახმად, შეიძლება დაიწეროს

$$\sin \theta_{(nh, nk, nl)} = \frac{1 \cdot \lambda}{2d_{(nh, nk, nl)}}$$

თუ ჩავსვამთ d -ს მნიშვნელობას (3.45) ფორმულიდან, მივიღებთ

$$\sin \theta_{(nh, nk, nl)} = \frac{1 \cdot \lambda}{2 \frac{1}{n} d_{(hkl)}}$$

აქედან

$$\sin \theta_{(nh, nk, nl)} = \frac{n\lambda}{2d_{(hkl)}}. \quad (3.46)$$

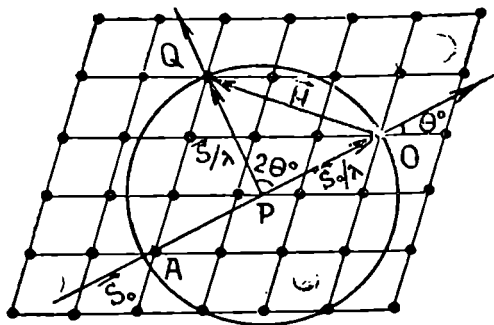
როგორც (3.44) და (3.46) ფორმულების შედარება გვიჩვენებს, წარმოსახვითი (nh, nk, nl) სიბრტყიდან პირველი რიგის არეკვლის მ კუთხე იგივეა, რაც ნამდვილი (nkl) სიბრტყიდან $n=$ ური რიგის არეკვლის კუთხე. ამიტომ არეკვლის რიგი (დიფრაქციის რიგი) შესაძლებელია პირდაპირ შევიტანოთ ინდექსებში; თუ სიბრტყის ინდექსებს გავამრავლებთ ამ რიცხვზე. ამის შემდეგ h, k, l ინდექსების ერთობლიობა h, k და l რიცხვების ყოველგვარი მნიშვნელობისათვის ცალსახად გამოხატავს ყველა შესაძლებელი რიგის არეკვლებს ყოველგვარი კრისტალოგრაფიული სიბრტყეებიდან. ინტერფერენციული ინდექსები hkl განსხვავდებიან შესაბამისი კრისტალოგრაფიული სიბრტყის ინდექსებიდან მხოლოდ საერთო მამრავლით, რომელიც დიფრაქციის რიგს წარმოადგენს.

შებრუნებული მესრის აგების დროს (იხ. ნახ. 3.36), ჩვენ ვიღებდით h, k და l ინდექსების ყველა შესაძლებელ მნიშვნელობებს და არა მარტო ურთიერთ მართივ რიცხვებს, რომელნიც ჭეშმარიტი კრისტალოგრაფიული სიბრტყის ინდექსებს წარმოადგენენ. ამიტომ შებრუნებული მესრის თითოეული კვანძი შეესაბამება რენტგენის სხივების შესაძლებელი დიფრაქციის რომელიმე რიგს შესაბამისი ინდექსებით, ხოლო მთელი შებრუნებული მესრის კვანძები მთლიანად ამოწურავენ ყოველგვარ არეკვლებს ყველა რიგით, რომლებიც კი შესაძლებელია მივიღოთ მოცემული კრისტალისაგან. ასე, მაგალითად, შებრუნებული მესრის კვანძები 222, 333, 444 და ა. შ. (ნახ. 3.36) გამოხატავენ შესაბამისად მეორე, მესამე და მეოთხე რიგის არეკვლებს ჭეშმარიტი კრისტალოგრაფიული (111) სიბრტყიდან.

შებრუნებული მესერი და არეკვლის (ვხალის) სფერო

აქლა შესაძლებელია დაისვას საკითხი იმის შესახებ, თუ როგორ განისაზღვროს არეკვლილი სხივის მიმართულება, ამრეკლავი სიბრტყის მდებარეობა და მისი ინტერფერენციული ინდექსები (არეკვლის რიგი). ყველა ამ საკითხზე პასუხს იძლევა ინტერფერენციული განტოლება (3.40), რომელიც

მელიც სამი ვექტორის \vec{s}, \vec{s}_0 და \vec{H} ერთობლიობას წარმოადგენს. ამ ვექტორებიდან \vec{H} ვექტორი წარმოადგენს შებრუნებული მესრის ვექტორს, რომელიც კოორდინატთა სათავეს აერთებს შებრუნებული მესრის რომელიმე კვანძთან და ამავე დროს (hkl) ინდექსების მქონე კრისტალოგრაფიული სიბრტყის მართობია. როგორც ინტერფერენციული განტოლებიდან ჩანს, აღნიშნული ვექტორები ქმნიან ტოლგვერდა სამკუთხედს, რომლის ფუძე



ნახ. 3.43. დიფრაქციული მაქსიმუმის პოვნა შებრუნებული მესრის და არეკვლის სფეროს საშუალებით.

\vec{H} ვექტორია და ის $\frac{\vec{s}}{\lambda}$ და $\frac{\vec{s}_0}{\lambda}$ ვექტორების წვეროებს აერთებს (ნახ. 3.42).

ვექტორების ასეთმა განლაგებამ საშუალება მისცა ევალდს შებრუნებული მესრის გამოყენებით გამოემუშაებინა მეთოდი, რომელიც საშუალებას იძლევა ნებისმიერი კრისტალოგრაფიული სიბრტყისათვის დადგინდეს დიფრაქციული სხივის მიმართულება, ინდექსები და დიფრაქციის რიგი.

ავილოთ შებრუნებული მესერი (ნახ. 3.43) და მისი ერთ-ერთი კვანძი, მაგალითად, O, ავირჩიოთ კოორდინატთა სათავედ. დაეუშვათ, რომ მოცემულ ექსპერიმენტულ ხელსაწყოში დაცემული λ ტალღის სიგრძის რენტგენის სხივების მიმართულება არის AO. თუ O წერტილიდან AO სხივის მიმართულებით გადავზომავეთ $1/\lambda$ სიგრძის მონაკვეთს, მივიღებთ P წერტილს. P წერტილიდან, როგორც ცენტრიდან, შემოვხაზოთ $1/\lambda$ რადიუსის სფერო. რა თქმა უნდა, ეს სფერო O წერტილშიც გაივლის.

ამავე დროს PO იქნება \vec{s}_0/λ ვექტორის ტოლი. ახლა, ცხადია, რომ (3.40) განტოლების პირობის შესასრულებლად საჭიროა შებრუნებული მესრის კიდევ რომელიმე კვანძი, მაგალითად, კვანძი Q მოხვდეს სფეროს ზედაპირზე. მართლაც, ამ კვანძისათვის OQ იქნება შებრუნებული მესრის \vec{H} ვექტორი, ხოლო PQ წარმოადგენს დიფრაგირებული სხივის მიმართულებას და უდრის \vec{s}/λ ვექტორს. ნებისმიერი კვანძისათვის, რომელიც სფეროს ზედაპირზე მოხვდება, სრულდება (3.40) პირობა და, მაშასადამე, ეს კვანძი შეესაბამება არეკვლის რომელიმე რიგს. ასეთ სფეროს არეკვლის ან ევალდის სფეროს უწოდებენ.

თუ Q კვანძისათვის სრულდება დიფრაქციის პირობა, მაშინ ამ კვანძის ინდექსები nh , nk და nl წარმოადგენენ ინტერფერენციულ ინდექ-

სებს, ხოლო მათი შესაბამისი კრისტალოგრაფიული სიბრტყის ინდექსები იქნება (hkl). ვინაიდან სფეროს საშუალებით \vec{H} ვექტორის მდებარეობა სრულიად განსაზღვრულია, ასევე განსაზღვრული იქნება (hkl) სიბრტყეც, რომელიც ყოველთვის \vec{H} ვექტორის მართობულია. (3.43) ნახაზზე სიბრტყის კვალი ნაჩვენებია mm ხაზის სახით. დაცემულ სხივთან ის ქმნის Θ კუთხეს, ხოლო კუთხე დაცემულსა და არეკვლილ სხივებს შორის უდრის 2Θ . ცხადია, თუ mm სიბრტყე შემობრუნდება რაიმე კუთხით, მასთან ერთად შემობრუნდება \vec{H} ვექტორიც და დიფრაქციის პირობა Q კვანძისათვის დაირღვევა. სიბრტყის ბრუნვა ნიშნავს კრისტალის და მამასადამე შებრუნებული მესრის შემობრუნებას გარკვეული კუთხით. ასეთ პირობებში სხვა რომელიმე კვანძი შესაძლებელია გადაიკვეთოს სფეროს მიერ და მაშინ მისი შესაბამისი სიბრტყე აღმოჩნდება ამრეკლავ მდგომარეობაში.

პრაქტიკულად, იღებენ შებრუნებული მესრის პროექციას რომელიმე სიბრტყეზე. კალკზე იხაზება ამრეკლავი სფეროს პროექცია $1/\lambda$ რადიუსის მქონე წრეხაზის სახით. კალკას ადებენ შებრუნებული მესრის კოორდინატთა სათავის O წერტილში და აბრუნებენ ამ წერტილის, როგორც ღერძის ირგვლივ გარკვეული კუთხით. ყველა კვანძი, რომელიც ასეთი ბრუნვის დროს გადაიკვეთება წრეხაზის მიერ, განსაზღვრავს დიფრაქციის მაქსიმუმს შესაბამისი ინდექსებით.

ამგვარად, დიფრაქციული სურათის განხილვის დროს, ამრეკლავი სფეროს საშუალებით ყოველთვის არის შესაძლებელი ითქვას, თუ (hkl) სიბრტყეთა რომელ სისტემიდან არის არეკვლილი ესა თუ ის სხივი და როგორია არეკვლის რიგი. კრისტალის ბრუნვით შესაძლებელია ამრეკლავ მდგომარეობაში მოვიყვანოთ (hkl) სიბრტყეების სხვა სისტემები, ხოლო ტალღის სიგრძის შეცვლა (სფეროს რადიუსი λ^{-1}) გამოიწვევს ერთი დიფრაქციული სხივის ჩაქრობას და სხვა სხივების გამოჩენას, იმის მიხედვით, თუ როგორ კმაყოფილდება (3.40) განტოლება. რენტგენოგრაფიაში და ნეიტრონოგრაფიაში $\lambda \approx 1 - 2A$ ტოლია, იმ დროს, როდესაც კრისტალის პარამეტრი დაახლოებით $10 A$ შეადგენს. ამიტომ არეკვლის სფეროს საგრძნობი სიმრუდე გააჩნია შებრუნებული მესრის სიბრტყეების მიმართ. სხვა მდგომარეობაა ელექტრონოგრაფიაში. აქ $\lambda \approx 0,05 A$ უდრის და არეკვლის სფეროს სიმრუდე ძალზე მცირეა. ის თითქმის სიბრტყეს წარმოადგენს და ამიტომ შესაძლებელი ხდება ერთდროულად დაფოკსირდეს ყველა იმ არეკვლების ერთობლიობა, რომლებსაც შებრუნებული მესრის ნულოვანი სიბრტყე იძლევა, ე. ი. ის სიბრტყე, რომელიც 000 კვანძზე გადის.

მეორე მხრივ, თუ აღებულია ტალღის სიგრძისათვის დიდი მნიშვნელობა, ისე რომ $\lambda > 2a$, სადაც a კრისტალური მესრის პერიოდია, მაშინ ევალდის სფეროს რადიუსი იმდენად მცირე იქნება შებრუნებული მესრის a^* პერიოდთან შედარებით, რომ სფერო, პრაქტიკულად, არ გადაკვეთს არც ერთ კვანძს და დიფრაქციული სურათი საერთოდ არ მიიღება. ამგვარად, ექსპერიმენტში გამოყენებული ტალღის სიგრძე, პრინციპში, განსაზღვრავს იმ ინფორმაციის მოცულობას, რომლის მიღება შესაძლებელია მოცემული დიფრაქციული ექსპერიმენტის დროს.

ინტერფერენციული ფუნქცია და შებრუნებული მისერი

რენტგენის სხივების საშუალებით კრისტალის სტრუქტურის შესწავლა, ფაქტიურად, ხდება კრისტალის ელემენტარულ უჯრედში მოთავსებული გამბნევი ნივთიერების განაწილების დადგენით. კრისტალზე რენტგენის სხივების დაცემის შემთხვევაში, ფიზიკურ ობიექტებს, რომელნიც ამ სხივებს გააბნევენ, ელექტრონები წარმოადგენენ. თითოეული მათგანი ხდება მეორეული ტალღის წყაროდ, რომელსაც იგივე სიხშირე და ტალღის სიგრძე გააჩნია, როგორც საწყის ტალღას ქონდა.

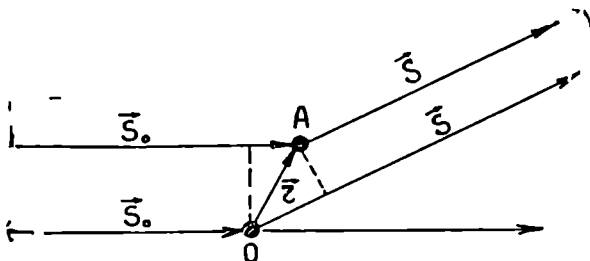
ელექტროდინამიკიდან ცნობილია, რომ დაცემული ტალღის ცვლად ელექტრომაგნიტურ ველში, ელექტრონი იწყებს რხევას ელექტრული ვექტორის სიხშირით და ცვლადი მომენტის მქონე დიპოლად გადაიქცევა. ეს დიპოლი ხდება იგივე სიხშირის მეორეული ტალღების გამბნევე წყაროდ. თუ დაცემული ტალღა არის წრფივად პოლარიზებული და მისი ინტენსიურობაა J_0 , მაშინ რხევადი ელექტრონის გამოსხივების ინტენსიურობა გამოისახება ფორმულით

$$I_e = J_0 \frac{1}{R^2} \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \sin^2 \varphi, \quad (3.47)$$

ხოლო მის მიერ გაბნეული ტალღის ამპლიტუდა იქნება

$$f_e = \frac{1}{R} \left(\frac{e^2}{mc^2} \right) \sin \varphi. \quad (3.48)$$

აქ R -მანძილია გამომსხივებელი ელექტრონიდან დამზერის წერტილამდე. იგულისხმება, რომ ეს მანძილი ბევრად დიდია, ვიდრე მანძილი გამომსხივებელ ცენტრებს შორის, რის გამოც გამომსხივებელი ტალღები ურთიერთპარალელურებად შეიძლება ჩაითვალოს (ფრაუნგოფერის დიფრაქცია). φ — კუთხეა დიპოლის ღერძსა და გაბნეული ტალღის მიმართულებას შორის. e , m — ელექტრონის მუხტი და მასა, ხოლო c — სინათლის გავრცელების სიჩქარე.



ნახ. 3.44. O და A წერტილებში გაბნეული ტალღების ფაზათა სხვაობის განსაზღვრა.

წარმოვიდგინოთ, რომ კრისტალს \vec{s}_0 ვექტორის მიმართულებით ეცემა ბრტყელი ტალღა (ნახ. 3.44), ერთეულოვანი ამპლიტუდით

$$e^{2\pi i(\vec{k}_0, \vec{r})}$$

განესაზღვროთ ფაზათა სხვაობა ორ ტალღას შორის, რომლებსაც გამოასხივებენ ელექტრონები, მოთავსებულნი $O(r=0)$ და $A(r)$ წერტილებში \vec{s} ვექტორის მიმართულებით. სვლათა სხვაობა O და A ცენტრების მიერ გაბნეულ ტალღებს შორის განსაზღვრულია (3.38) ფორმულით

$$\delta = (\vec{s}, \vec{r}) - (\vec{s}_0, \vec{r}) = (\vec{s} - \vec{s}_0), \vec{r} \quad (3.49)$$

ხოლო ფაზათა სხვაობა იქნება

$$\varphi = \frac{2\pi}{\lambda} \delta = \frac{2\pi}{\lambda} (\vec{s} - \vec{s}_0), \vec{r}$$

ან, თუ გამოვიყენებთ (3.40) გამოსახულებას, მივიღებთ

$$\varphi = 2\pi(\vec{H}, \vec{r}) \quad (3.50)$$

აქ \vec{H} -შებრუნებული მესრის ვექტორია. თუ შევბრუნებელი მესრის ნებისმიერი წერტილის კოორდინატებს აღვნიშნავთ (ξ, η, ζ), მაშინ

$$\vec{H} = \xi \vec{a}^* + \eta \vec{b}^* + \zeta \vec{c}^*$$

როდესაც ξ, η, ζ ხდებიან მთელი რიცხვები, ისინი თანხვედრიან h, k, l რიცხვებს, ხოლო \vec{H} ვექტორი თანხვედრა შევბრუნებული მესრის კვანძებს

$$\vec{H} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$$

ახლა \vec{r} წერტილში მყოფი ცენტრის მიერ გაბნეული ტალღის ამპლიტუდა იქნება

$$f_e e^{2\pi i(\vec{H}, \vec{r})}$$

სადაც f_e — აღებული ცენტრის გაბნევით უნარიანობას გამოხატავს. თუ ობიექტი, რომელსაც ტალღა ეცემა, წარმოადგენს n -გამბნევი ცენტრების ერთობლიობას f_j ამპლიტუდებით, მაშინ მარეზულტირებელი ტალღის ამპლიტუდისათვის გვექნება

$$F(\vec{H}) = \sum_{j=1}^n f_j e^{2\pi i(\vec{H}, \vec{r}_j)} \quad (3.51)$$

$F(\vec{H})$ სიდიდეს მოცემული ობიექტის გაბნევის ამპლიტუდა ეწოდება. მივიღოთ ერთი ელექტრონის მიერ გაბნეული ტალღის ამპლიტუდა ერთეულის ტოლად (ელექტრონული ერთეულები), მაშინ გამბნევი ცენტრების ერთობლიობის მიერ გაბნეული ტალღა, გამოსახული ელექტრონულ ერთეულებში, იქნება

$$F(\vec{H}) = \sum_{j=1}^n e^{2\pi i(\vec{H}, \vec{r}_j)}. \quad (3.52)$$

$F(\vec{H})$ გაბნევის ამპლიტუდას, რომელსაც (3.52) ფორმულა გამოსახავს, უნივერსალური ხასიათი გააჩნია იმ გაგებით, რომ ობიექტის ქვეშ აქ შესაძლებელია იგულისხმებოდეს ნებისმიერი ფიზიკური გამბნევი ერთეული. მაგალითად, ელექტრონი, ატომი, მოლეკულა, მოლეკულათა ჯგუფი და ა. შ. თუ ობიექტად აღებულა ერთი ელემენტარული უჯრედი, F სიდიდეს სტრუქტურული ამპლიტუდა ეწოდება.

(3.52) ფორმულა შესაძლებლობას გვაძლევს განვიხილოთ საკითხი კრისტალის მიერ რენტგენის სხივების გაბნევის ინტენსიურობის შესახებ. ამისათვის ავირჩიოთ კრისტალი მცირე პარალელებიპედის სახით, რომლის პრიმიტიული ელემენტარული უჯრედი განისაზღვრება \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} ტრანსლაციებით და თითოეულ ღერძზე, შესაბამისად, მოვათავსოთ N_1 , N_2 , N_3 ელემენტარული უჯრედი (გამბნევი ცენტრი). საჭიროა გამოვიანგარიშოთ საერთო ამპლიტუდა ტალღებისა, რომლებსაც ეს $N = N_1 \cdot N_2 \cdot N_3$ ცენტრი გააბნევს. აღვნიშნოთ ერთი ატომის გაბნევის უნარიანობა f_a სიდიდით, მაშინ ერთი ელემენტარული უჯრედის მიერ გაბნეული ტალღის ამპლიტუდისათვის (3.51) ფორმულის მიხედვით გვექნება

$$F(\vec{H}) = \sum_{j=1}^N f_a e^{2\pi i(\vec{H}, \vec{r}_j)}. \quad (3.53)$$

აქ $F(\vec{H})$ — სტრუქტურული ამპლიტუდის გამოსახულებაში \vec{r}_j — სი-
 ლიდები, ელემენტარულ უჯრედში შემავალი ატომების რადიუსვექტო-
 რებია

$$\vec{r}_j = x_j \vec{a} + y_j \vec{b} + z_j \vec{c},$$

ხოლო ყველა ელემენტარული უჯრედის მიხედვით აჯამვის შედეგად, მა-
 რეზულტირებელ ამპლიტუდას ექნება სახე

$$A = \sum_m \sum_n \sum_p f_e F(\vec{H}) e^{2\pi i (\vec{H} \cdot \vec{r}_{mnp})}, \quad (3.54)$$

სადაც r_{mnp} თითოეული ელემენტარული უჯრედის რადიუსვექტორია:
 $r_{mnp} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}$, ხოლო \vec{H} ვექტორი შედგენილი მესრის ვექტო-
 რია: $\vec{H} = \xi \vec{a}^* + \eta \vec{b}^* + \zeta \vec{c}^*$. ამ ვექტორების სკალარული ნამრავლისათვის
 (3.22) ფორმულების გამოყენებით მივიღებთ:

$$(\vec{H} \cdot \vec{r}) = m\xi + n\eta + p\zeta.$$

$$\text{ასე რომ: } A = \sum_m \sum_n \sum_p f_e F(\vec{H}) e^{2\pi i (m\xi + n\eta + p\zeta)},$$

ვინაიდან mnp კრისტალის თითოეული კვანძის (ელემენტარული უჯრე-
 დის) კოორდინატებია, ისინი იცვლებიან საზღვრებში:

$$m = 0, 1, \dots, N_1 - 1; \quad n = 0, 1, \dots, N_2 - 1; \quad p = 0, 1, \dots, N_3 - 1$$

საბოლოოდ

$$A = \sum_{m=0}^{N_1-1} \sum_{n=0}^{N_2-1} \sum_{p=0}^{N_3-1} f_e F(\vec{H}) e^{2\pi i (m\xi + n\eta + p\zeta)}, \quad (3.55)$$

ჩვენ გვინტერესებს ამ ტალღის ინტენსიურობა, ე. ი. A — ამპლიტუდის
 მოდულის კვადრატი.

$$I = |A|^2 = I_e |F|^2 \left| \sum_{m=0}^{N_1-1} \sum_{n=0}^{N_2-1} \sum_{p=0}^{N_3-1} e^{2\pi i (m\xi + n\eta + p\zeta)} \right|^2 \quad (3.56)$$

აღვნიშნოთ:

$$\Phi(\xi, \eta, \zeta) = \sum_{m=0}^{N_1-1} \sum_{n=0}^{N_2-1} \sum_{p=0}^{N_3-1} e^{2\pi i (m\xi + n\eta + p\zeta)} \quad (3.57)$$

ამ ფუნქციას ინტერფერენციული ფუნქცია ეწოდება.

$$I = I_e |F|^2 \cdot |\Phi(\xi, \eta)|^2. \quad (3.58)$$

აქ

$|F|^2$ — სტრუქტურული ფაქტორია;

$|\Phi|^2$ — ინტერფერენციული ფაქტორი.

თვით ინტერფერენციული ფუნქცია (3.57) შეიძლება ასე დაიწეროს

$$\Phi(\xi, \eta) = \sum_{m=0}^{N_1-1} e^{2\pi i m \xi} \sum_{n=0}^{N_2-1} e^{2\pi i n \eta} \sum_{p=0}^{N_3-1} e^{2\pi i p \zeta}.$$

განვიხილოთ პირველი წევრი

$$\Phi_1(\xi) = \sum_{m=0}^{N_1-1} e^{2\pi i m \xi}.$$

ეს არის გეომეტრიული პროგრესია, რომლის ჯამი იქნება

$$\Phi_1(\xi) = \frac{e^{2\pi i N_1 \xi} - 1}{e^{2\pi i \xi} - 1}.$$

ამ ფუნქციის კვადრატი თავის შეუღლებულზე ნამრავლს წარმოადგენს.

$$\begin{aligned} |\Phi_1(\xi)|^2 &= \frac{e^{2\pi i N_1 \xi} - 1}{e^{2\pi i \xi} - 1} \cdot \frac{e^{-2\pi i N_1 \xi} - 1}{e^{-2\pi i \xi} - 1} = \frac{2 - [e^{2\pi i N_1 \xi} + e^{-2\pi i N_1 \xi}]}{2 - [e^{2\pi i \xi} + e^{-2\pi i \xi}]} = \\ &= \frac{1 - \cos 2\pi N_1 \xi}{1 - \cos 2\pi \xi} = \frac{\sin^2 \pi N_1 \xi}{\sin^2 \pi \xi}. \end{aligned}$$

ასლა ინტერფერენციული ფაქტორი საბოლოოდ მიიღებს შემდეგ სახეს

$$|\Phi(\xi, \eta, \zeta)|^2 = \frac{\sin^2 \pi N_1 \xi}{\sin^2 \pi \xi} \cdot \frac{\sin^2 \pi N_2 \eta}{\sin^2 \pi \eta} \cdot \frac{\sin^2 \pi N_3 \zeta}{\sin^2 \pi \zeta}. \quad (3.59)$$

როგორც (3.57) გვიჩვენებს, ინტერფერენციული $\Phi(\xi, \eta, \zeta)$ ფუნქცია შედრუნებული მესრის ნებისმიერი წერტილის ξ, η, ζ კოორდინატებზეა დამოკიდებული, რომელნიც, ამავე დროს, შედრუნებული მესრის \vec{H} ვექტორის კომპონენტებს წარმოადგენენ. თუ ეს წერტილი შედრუნებული მესრის კვანძია, მაშინ, როგორც ვიცით, ξ, η, ζ მთელ h, k და l რიცხვებს უტოლდებიან, ე. ი. ადგილი აქვს ტოლობებს:

$$\xi = h; \quad \eta = k; \quad \zeta = l. \quad (3.60)$$

თუ (3.60) პირობა სრულდება, მაშინ ერთდროულად უტოლდება ნულს ინტერფერენციული ფუნქციის სამივე მამრავლის მნიშვნელი და ფუნქცია აღწევს თავის მთავარ მაქსიმუმს. ეს იმას ნიშნავს, რომ ინტერფერენცი-

ული ფუნქციის მთავარი მაქსიმუმები ყოველთვის თავსდება მხოლოდ შებრუნებული მესრის კვანძებში, ე. ი., როდესაც $\vec{H} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$ და hkl — მთელი რიცხვებია.

(3.60) და (3.39) პირობების შედარება გვიჩვენებს, რომ ისინი, ფაქტიურად, გამოხატავენ ერთსა და იმავე აზრს. ინტერფერენციული ფუნქცია იღებს თავის მაქსიმალურ მნიშვნელობებს გამორჩევით, კრისტალის მხოლოდ გარკვეული მიმართულებებისა და ორიენტაციის მიმართ.

მთავარი მაქსიმუმის ორდინატის დასადგენად ავიღოთ ინტერფერენციული ფუნქციის სამი მამრავლიდან ერთი რომელიმე წევრი, მაგალითად

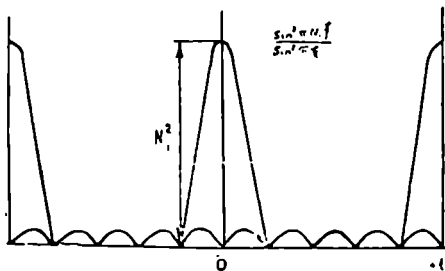
$$\phi_1(\xi) = \frac{\sin \pi N_1 \xi}{\sin \pi \xi}$$

და მივიღოთ მხედველობაში, რომ შებრუნებული მესრის კვანძისათვის, როდესაც $\xi = h$, ერთდროულად უტოლდება ნულს როგორც მნიშვნელი, ისე მრიცხველი. $\frac{0}{0}$ ტიპის განუსაზღვრელობის გახსნისას, ვეძებთ ფუნქციის ზღვრულ მნიშვნელობებს, როდესაც $h \rightarrow 0$

$$\phi_1(0) = \lim_{h \rightarrow 0} \left(\frac{\sin \pi N_1 h}{\sin \pi h} \right) \rightarrow \left(\frac{\pi N_1 h}{\pi h} \right) = N_1.$$

ამგვარად, მთავარი მაქსიმუმების ორდინატები იზრდება გამბნევი ცენტრების რიცხვის პროპორციულად.

$\phi_1(\xi)$ ფუნქციას გააჩნია მეორეული მაქსიმუმებიც იმ წერტილებში, სადაც $\xi = \frac{2n+1}{2N_1}$ და თავის მაქსიმალურ მნიშვნელობას აღწევს მხოლოდ ფუნქციის მრიცხველი, მაგრამ ამ მაქსიმუმების მნიშვნელობა მეტად მცირეა. ისინი მთავარი მაქსიმუმის მხოლოდ 5 პროცენტს შეადგენენ (ნახ. 3.45).



ნახ. 3.45. ინტერფერენციული ფუნქციის $\frac{\sin^2 \pi N_1 \xi}{\sin^2 \pi \xi}$ დამოკიდებულება ξ -გან. აღებულია $N_1 = 5$.

წერტილებში, სადაც $\xi = \frac{n}{N_1}$, მიიღება $\Phi_1(\xi)$ ფუნქციის მინიმუმები.

3.45 ნახაზზე მოცემულია $|\Phi_1(\xi)|^2$ ფუნქციის ξ -გან დამოკიდებულების გრაფიკი. როგორც ეს გრაფიკი გვიჩვენებს, ინტერფერენციული ფუნქცია ერთნაირად იცვლება შებრუნებული მესრის ყველა კვანძთან და წარმოადგენს შებრუნებულ სივრცეში განლაგებულ პერიოდულ ფუნქციას. თავის მაქსიმალურ მნიშვნელობას — N^2 , ეს ფუნქცია შებრუნებული მესრის თითოეულ კვანძში აღწევს.

მთლიანად ინტერფერენციული ფუნქცია $|\Phi(\xi\eta\zeta)|^2$ სამი წვევრის ნამრავლს წარმოადგენს, ამიტომ მისი მთავარი მაქსიმუმი იქნება $N^2 = N_1^2 N_2^2 N_3^2$, ხოლო ინტენსიურობის (3.58) ფორმულა მიიღებს სახეს

$$I = I_0 |F|^2 N^2. \quad (3.61)$$

შეგრუნიებული მესრის კვანძების ზომები და შორაბა

ზემოთ (3.59) მიღებული იყო ინტერფერენციული ფუნქციის გამოსახულება

$$|\Phi(\xi\eta\zeta)|^2 = \frac{\sin^2 \pi N_1 \xi}{\sin^2 \pi \xi} \frac{\sin^2 \pi N_2 \eta}{\sin^2 \pi \eta} \frac{\sin^2 \pi N_3 \zeta}{\sin^2 \pi \zeta},$$

შებრუნებულ სივრცეში. ამ გამოსახულებაში $\xi\eta\zeta$ — შებრუნებული მესრის ნებისმიერი წერტილის კოორდინატებია, ხოლო N_1, N_2, N_3 ელემენტარული უჯრედების რიცხვია კოორდინატთა ღერძების გასწვრივ.

ახლა საჭიროა ყურადღება მიექცეს იმ გარემოებას, რომ შებრუნებული მესრის კვანძებში მოთავსებულ ინტერფერენციული ფუნქციის მაქსიმუმებს (იხ. ნახ. 3.45) გარკვეული სიფართე, სიმაღლე და ფორმა გააჩნიათ. დიფრაქციული მაქსიმუმების ეს ფორმა, ერთი მხრივ, დამოკიდებულია თვით კრისტალის ზომისა და ფორმისაგან, ხოლო მეორე მხრივ, განაპირობებს იმ წერტილის (ლაქის) ფორმას, რომელიც ფოტოფირზე აღიბეჭდება ან დაფიქსირდება დიფრაქტომეტრის თვითჩამწერზე.

როგორც დავინახეთ, ინტერფერენციული ფუნქცია იღებს მაქსიმალურ მნიშვნელობებს, როდესაც სრულდება (3.60) პირობა, ე. ი., როდესაც ξ, η და ζ მთელი რიცხვებია, ხოლო h, k, l — შებრუნებული მესრის კვანძის ინდექსები. ამ მაქსიმუმიდან უახლოესი მინიმუმი მიიღება, როდესაც:

$$\xi = h \pm \frac{1}{N_1}; \quad \eta = k \pm \frac{1}{N_2}; \quad \zeta = l \pm \frac{1}{N_3}. \quad (3.62)$$

ამგვარად, ნულისაგან განსხვავებული ინტენსიურობა შესაძლებელია არსებობდეს არა მარტო ზუსტად შებრუნებული მესრის კვანძში, არამედ გარკვეულ არეში მის მახლობლად და თუ კრისტალის ზომები მცირდება,

დიფრაქციის არე დიდდება და, მაშასადამე, ფართოვდება შებრუნებული მესრის თითოეული კვანძის მოქმედი არე.

(3.62) პირობები განსაზღვრავენ შებრუნებული მესრის თითოეული კვანძის ფორმას და ზომას კრისტალის ფორმისა და ზომის მიხედვით. როგორც ამ გამოსახულებიდან ჩანს, შებრუნებული მესრის ყველა კვანძის ფორმა და ზომა ერთნაირია და დამოკიდებულია მხოლოდ კრისტალის ზომისა და ფორმისაგან და არა მისი ცალკეული ელემენტარული უჯრედისაგან; მაგალათად, თუ კრისტალი წარმოადგენს თხელ ფირს, მისი შებრუნებული მესრის კვანძებს ექნებათ ფირის სიბრტყის მართობად გაჭიმული ღეროების ფორმა. ასეთი შემთხვევები გვხვდება ელექტრონოგრაფიული გამოკვლევების დროს.

რაც მეტია კრისტალის ზომები, ე. ი. N_1 , N_2 და N_3 , მით უფრო ზუსტად უახლოვდება შებრუნებული მესრის კვანძი წერტილს. კრისტალის სასრულობა შებრუნებული მესრის კვანძის გაფართოების ერთ-ერთ მიზეზს შეადგენს. თუ კრისტალი უსასრულოდ დიდია, შებრუნებული მესრის \vec{H} ვექტორი ზუსტად ხვდება hkl კოორდინატებით განსაზღვრულ წერტილს. სინამდვილეში

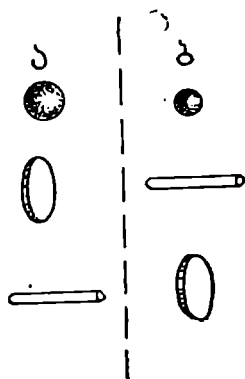
$$\vec{H} = \vec{H}_{hkl} + \Delta\vec{H}, \quad (3.63)$$

სადაც $\Delta\vec{H}$ მთავარი მაქსიმუმის ფარგლებში მდებარე ვექტორია.

თანაბარი ინტენსიურობის მრუდები, რომელნიც შეიძლება გავავლოთ შებრუნებული მესრის კვანძის ირგვლივ მთავარი მაქსიმუმის ფარგლებში, ცხადია, სფერული ფორმის კრისტალისათვის სფერული ფორმის იქნებიან (ნახ. 3.46). თუ კრისტალს თხელი ფირის ფორმა გააჩნია, მისი შესაბამისი შებრუნებული მესრის კვანძებს ექნებათ ამ ფირის მართობად გაჭიმული ღეროების ფორმა, ხოლო თუ კრისტალი ნემსისებურია, მას შეესაბამება დისკოს ფორმის დიფუზური არეები შებრუნებულ მესერში.

კრისტალის სტრუქტურა და შებრუნებული მესარი

აქამდე ჩვენ წარმოვიდგენდით კრისტალს, როგორც ცალკეული ატომებისაგან შემდგარ დისკრეტულ წყობას, რომელიც აესებს ელემენტარულ უჯრედს და შემდეგ პერიოდულად მეორდება უჯრედიდან უჯრედამდე. ახლა, დავუშვათ, რომ გამბნევი ნივთიერება უწყვეტად არის განა-



ნახ. 3.46. კრისტალის ფორმის (ა) გადასახვა შებრუნებული მესრის კვანძების ფორმაში (ბ).

წილებული კრისტალის მთელ სივრცეში და თითოეული წერტილი ხასიათდება ელექტრონული $\rho(r)$ სიმკვრივის გარკვეული მნიშვნელობებით, ე.ი. ელექტრონების რიცხვით ამ წერტილის ირგვლივ აღებულ მოცულობის ერთეულში. ასეთი წარმოდგენა მით უფრო მართებულია, რომ ის თანხვედრება ქვანტური მექანიკის თანამედროვე წარმოდგენას, რომლის მიხედვით დროში გასაშუალებული ელექტრონული სიმკვრივე განისაზღვრება ელექტრონის ტალღური ფუნქციის მოდულის კვადრატით

$$\rho(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2.$$

ცხადია, რომ $\rho(\vec{r})$ ფუნქცია კრისტალური მესრის კოორდინატების პერიოდული ფუნქციაა და მაქსიმუმს აღწევს მხოლოდ იმ არეში, სადაც უშუალოდ ატომი არის მოთავსებული. ამგვარად, (x, y, z) წერტილის მახლობლად მოთავსებული მოცულობის Δv ელემენტის მიერ გაბნეული გამოსხივების ამპლიტუდა პროპორციული უნდა იყოს $\rho(\vec{r})\Delta v$ სიდიდისა, ხოლო მის მიერ გაბნეული ელემენტარული ტალღა, (3.51)-ის მსგავსად, იქნება

$$\rho(\vec{r})e^{2\pi i(\vec{H}\vec{r})} dv.$$

ახლა შესაძლებელია დაიწეროს კრისტალის მთელი მოცულობის მიერ გაბნეული ტალღის ამპლიტუდა, რომელიც ელემენტარული ტალღების ამპლიტუდების ჯამს წარმოადგენს. მაგრამ ფუნქცია $\rho(x, y, z)$ უწყვეტი ფუნქციაა და ჯამის მაგივრად საჭიროა ავიღოთ ინტეგრალი, ასე რომ

$$\Phi(\vec{H}) = \int_{\nu} \rho(\vec{r}) e^{2\pi i(\vec{H}\vec{r})} dv. \quad (3.64)$$

აქ ინტეგრალი ვრცელდება მთელი ელემენტარული უჯრედის მოცულობაზე, ხოლო (3.64) გამოსახულება, რომელიც, ამ შემთხვევაში, სტრუქტურულ ამპლიტუდას გამოხატავს, გვაძლევს გაბნეული სხივების ამპლიტუდას, როგორც შებრუნებული მესრის \vec{H} ვექტორის ფუნქციას, ე. ი. განსაზღვრავს გაბნევას ნებისმიერი \vec{k} მიმართულებით.

თავისი მათემატიკური ფორმით (3.64) ინტეგრალი, რომელიც რენტგენის სხივების დიფრაქციას აღწერს, წარმოადგენს ფურიეს ტიპის ინტეგრალს და ამგვარად გამოდის, რომ გაბნევის თეორიის ძირითადი მონაცემი შესაძლებელია მიღებულ იქნეს ფურიეს მწკრივებისა და ინტეგრალის თეორიიდან.

თუ ცნობილია $\rho(\vec{r})$ ფუნქცია, ე. ი. გამბნევი ნივთიერების სიმკვრივის განაწილება კრისტალის შიგნით, შესაძლებელი ხდება (3.64) ფორმულის გამოყენებით გაბნევის $\Phi(\vec{H})$ ამპლიტუდის გამოთვლა. სხვაგვარად რომ ვთქვათ, თუ ჩვენთვის ცნობილია კრისტალის აღნაგობა, შესაძლებელი

ხდება მისი დიფრაქციული სურათის ან სპექტრის აგება. ამ პროცესს $\vec{\rho}(r)$ ფუნქციის ფურიე-ანალიზი ეწოდება.

ფურიეს ინტეგრალების თვისებას შეადგენს მათი შექცევადობა, რის შედეგად (3.64) ფორმულა შესაძლებელია გადაიწეროს შემდეგი სახით

$$\vec{\rho}(r) = \int_v \Phi(\vec{H}) e^{2\pi i(\vec{H} \cdot r)} dv_H. \quad (3.65)$$

ახლა, პირიქით, დიფრაქციული სპექტრის სურათის მიხედვით შესაძლებელია აღვადგინოთ გამბნევი ობიექტის აღნაგობის სურათი, ე. ი. მოვნახოთ $\vec{\rho}(r)$ ფუნქციის მნიშვნელობა (ფურიე-სინთეზი), რაც სტრუქტურული ანალიზის პირდაპირ ამოცანას შეადგენს. ამისათვის r გამოიყენება კრისტალზე რენტგენის სხივების დიფრაქცია და იზომება დიფრაქციული მაქსიმუმების ინტენსიურობა. როგორც (3.61) ფორმულა გვიჩვენებს, ინტენსიურობის გამოსახულებაში შედის სტრუქტურული ფაქტორიც, რომლის დადგენა შესაძლებელი ხდება გავზომილი ინტენსიურობის საფუძველზე.

ამგვარად, დიფრაქციული ექსპერიმენტის მსვლელობის დროს, ჩვენ დაკავშირებული ვართ სამ სხვადასხვა კოორდინატთა სისტემასთან (სივრცესთან). პირველი — ეს არის ლაბორატორიული კოორდინატთა სისტემა, დაკავშირებული იმ სივრცესთან, რომელშიც მიმდინარეობს ექსპერიმენტი. ამ სისტემაში მოთავსებულია რენტგენის სხივების წყარო, კრისტალი და დიფრაქციული სურათის მარეგისტრირებელი ხელსაწყოები. მეორე — კოორდინატთა სისტემა ეს არის თვით კრისტალის სივრცე, ე. ი. ჩვეულებრივი კრისტალოგრაფიული კოორდინატთა სისტემა, დაკავშირებული უშუალოდ კრისტალთან \vec{a} , \vec{b} და \vec{c} ღერძული ერთეულებით. ამ სივრცეშია განაწილებული ელექტრონული სიმკვრივე და, მაშასადამე, მოქმედებს ელექტრონული სიმკვრივის $\vec{\rho}(r)$ პერიოდული ფუნქცია, რომლის გამოსახვა ხდება ფურიეს ინტეგრალის საშუალებით. ამ სივრცის განზომილება არის $[L]$. დაბოლოს, მესამე სივრცე იქნება შებრუნებული მესრის სივრცე, რომელიც დაკავშირებულია \vec{H} ვექტორთან, რომლის კოორდინატებია hkl რიცხვები, ხოლო ღერძული მონაკვეთებია \vec{a}^* , \vec{b}^* და \vec{c}^* . ამ სივრცის განზომილებაა $[L^{-1}]$. მასში განლაგებულია ინტერფერენციული $\Phi(H)$ ფუნქცია, რომლის მაქსიმუმები მოთავსებულია შებრუნებული მესრის კვანძებში.

ფუნქცია $\vec{\rho}(r)$ რეალურ (კრისტალურ) სივრცეში მოქმედი ფუნქციაა, რომელიც აღწერს კრისტალის აღნაგობას, ხოლო $\Phi(\vec{H})$ ფუნქცია წარმოადგენს $\vec{\rho}(r)$ ფუნქციის სახეს შებრუნებულ სივრცეში. ამბობენ, რომ

$\Phi(\vec{H})$ ფუნქცია წარმოადგენს $\rho(\vec{r})$ ფუნქციის სპექტრს ან მის² ფურიე-ტრანსფორმანტას.

რა თქმა უნდა, სათანადო გარდაქმნებით შესაძლებელია გადასვლა ერთი კოორდინატთა სისტემიდან მეორეში. ეს მით უფრო აუცილებელია, რომ შებრუნებული მესრის კვანძებში მოთავსებული ინტერფერენციული ფუნქციის მაქსიმუმები დიფრაქციული ექსპერიმენტის შედეგად თავის გამოხატულებას პოულობენ ფოტო-ფირზე ან სხვა მარეგისტრირებელ ხელსაწყოში და აღბეჭდავენ იქ შებრუნებული მესრის კვანძების განლაგებას. მაგრამ ექსპერიმენტის გეომეტრიის ან ფორმის გამო (ცილინდრული ან ბრტყელი კასეტები), ეს აღბეჭდვა საკმაოდ დამახინჯებულად ხდება და შებრუნებული მესრის ქეშმარიტი აღნაგობის აღდგენა მხოლოდ სათანადო გარდაქმნების საფუძველზე არის შესაძლებელი.

ლიტერატურა

1. Белов Н. В. Структурная кристаллография. Изд. АН СССР 1951.
2. Жданов Г. С. Основы рентгеновского структурного анализа. Гостехиздат, 1940.
3. Лейтвейн Ф. и Зоммер-Кулачевский Ш. Кристаллография. Изд-во «Высшая школа», 1968.
4. Костов И. Кристаллография. Изд-во «мир», 1965.
5. Шубников А. В., Флинт Е. Е., Бокний Г. Б. «Основы кристаллографии». Изд. АН СССР, 1940.
6. პოპოვი გ. მ., შატრანოვსკი ი. ი. კრისტალოგრაფია. ტექნიკა და შრომა, 1951.
7. Гинье А. Рентгенография кристаллов. Изд-во физ. мат. литературы. Москва, 1961.
8. Жданов Г. С. Илютин А. С. Никитина С. В. Дифракционный и резонансный структурный анализ. Москва, «Наука», 1980.
9. Иверонова В. И. Ревкевич Г. П. Теория рассеяния рентгеновских лучей, Изд-во Московского Университета, 1978.

კრისტალების სიმეტრია

§ 13. მაკროსკოპული კრისტალების სიმეტრია

| მაკროსკოპული თვალსაზრისით კრისტალი წარმოადგენს უწყვეტ და უსასრულო გარემოს (კონტინუუმი), ანიზოტროპიულს და ერთგვაროვანს, ე. ი. გარემოს, რომლის ფიზიკური თვისებები დამოკიდებულია მიმართულებაზე (ანიზოტროპიულობა), მაგრამ ერთნაირია ერთი და იგივე მიმართულების ყველა წერტილისათვის (ერთგვაროვნება).

ფიზიკური თვისებების განაწილება კრისტალში ხასიათდება გარკვეული სიმეტრიით, რომელიც, თავის მხრივ, დამოკიდებულია იმაზე, თუ როგორი კანონზომიერებით არიან განაწილებული ატომები ან მოლეკულები სივრცეში, ე. ი. როგორია მათ მიერ შექმნილი სივრცობრივი მესრის ბუნება. თითოეული ნივთიერების კრისტალური მესერი გამოირჩევა ატომების განლაგების მხოლოდ ამ ნივთიერებისათვის დამახასიათებელი სურათით.

კრისტალის ზრდის პროცესში ნაწილაკების კანონზომიერი და სიმეტრიული განლაგება თავს იჩენს კრისტალის გარეგან სწორ ფორმებში — ბრტყელი წახნაგებისა და სწორი წიბოების სახით. მაკროსკოპიული კრისტალი მრავალწახნაგს ემსგავსება და ამიტომ, თუ ჩვენ უგულებელვყოფთ მის შინაგან ბუნებას, ყველა კრისტალი შეიძლება აიწეროს სიმეტრიის იმ კანონებით, რომელნიც დამახასიათებელია ჩვეულებრივი მრავალწახნაგებისათვის.

სიმეტრია ჩვენი სამყაროს ფუნდამენტურ თვისებას წარმოადგენს. სიმეტრიულია არა მარტო კრისტალების გარეგანი მაკროსკოპიული ფორმები, განპირობებული ატომების სიმეტრიული განლაგებით, სიმეტრიულია მრავალატომიანი მოლეკულები, ელექტრული, მაგნიტური, გრავიტაციული ველები და მრავალი სხვა.

ამბობენ, რომ სხეული სიმეტრიულია, თუ მასზე გარკვეული მოქმედებისა და მისი ნაწილების გადანაცვლების შედეგად ის ისევ უთავსდება თავის პირვანდელ მდგომარეობას და არ განიცდის არავითარ გარეგან ცვლილებას. ამ განმარტებაში საყურადღებოა ორი გარემოება. ჯერ ერთი, მოქმედება, როგორც ჩანს, ხდება ორ ტოლ სხეულს შორის, ვინაიდან საბოლოო მდგომარეობა არაფრით არ განსხვავდება საწყისი მდგომარეობისგან, ხოლო მეორე — თვით მოქმედების ხასიათი. ორი

სხეული ითვლება ტოლად, თუ მანძილი ერთი სხეულის ორ ნებისმიერ წერტილს შორის უდრის მანძილს მეორე სხეულის შესაბამის წერტილებს შორის. თუ ტოლი სხეულები შეიძლება შეუთავსდნენ ერთმანეთს უშუალოდ ერთმანეთზე დადებით, მაშინ მათ შეთავსებით ტოლი ან კონგრუენტული სხეულები ეწოდება. თუ სხეულების შეთავსება შესაძლებელია მხოლოდ ერთი მათგანის სარკეში არეკვლის შემდეგ, მაშინ ისინი სარკულად ტოლ ან ენანტიომორფულ სხეულებს წარმოადგენენ.

მოქმედებას, რომლის შედეგადაც სხეული გადაინაცვლებს და შეუთავსდება თავისთავს, სიმეტრიული გარდაქმნა ეწოდება. ამგვარად, სიმეტრიული გარდაქმნა, იწვევს რა სხეულის თავისთავთან შეთავსებას, უცვლელად ტოვებს მანძილს სხეულის ორ ნებისმიერ წერტილს შორის, ე. ი. არ ახდენს ამ სხეულის დეფორმაციას. იმისდა მიხედვით, თუ როგორია სხეულის სიმეტრია, შეიძლება არსებობდეს რამდენიმე სიმეტრიული გარდაქმნა, რომლებიც ერთ და იმავე სხეულს შეუთავსებენ თავისთავს. სიმეტრიული გარდაქმნების ერთობლიობა, რომელიც სხეულს გააჩნია, ქმნის ჯგუფს, რომელსაც მოცემული სხეულის სიმეტრიის ჯგუფი ეწოდება. ავიღოთ, მაგალითისათვის, A და B ოპერატორები, რომელნიც Q სხეულის სიმეტრიულ გარდაქმნას ახდენენ, და იგივეური (ერთეულოვანი) ოპერატორი E , რომელიც სხეულს ტოვებს უცვლელად. მაშინ, სიმეტრიული გარდაქმნის განმარტების თანახმად, თუ Q სხეულზე ჯერ ვიმოქმედებთ B გარდაქმნით, ხოლო შემდეგ A გარდაქმნით, მივიღებთ

$$A(BQ) = A(EQ) = A Q = E Q.$$

ან, თუ აღვნიშნავთ

$$A B = C,$$

შეიძლება დავწეროთ

$$C Q = E Q.$$

ე. ი. ორი ერთიმეორის შემდეგ ჩატარებული სიმეტრიული გარდაქმნების შედეგი ისევ სიმეტრიულ გარდაქმნას წარმოადგენს.

ყოველთვის არსებობს ერთეულოვანი სიმეტრიული გარდაქმნა E , რომელიც სხეულს უცვლელ მდგომარეობაში ტოვებს

$$E A = A E = A.$$

თუ ოპერატორი A აწარმოებს სხეულის სიმეტრიულ გარდაქმნას, არსებობს ოპერატორი A^{-1} , რომელიც ჩაატარებს მის შებრუნებულ სიმეტრიულ გარდაქმნას ისე, რომ

$$A A^{-1} = A^{-1} A = E.$$

და, ბოლოს, უნდა აღინიშნოს, რომ სამი A , B , C გარდაქმნის საბოლოო შედეგი აკმაყოფილებს ასოციაციურობის აქსიომას

$$(A B) C = A (B C).$$

ამგვარად, ჩვენ ვხედავთ, რომ სიმეტრიული გარდაქმნების ერთობლიობა, რომელიც მოცემულ სხეულს გააჩნია, აკმაყოფილებს ჯგუფისათვის საჭირო ყველა აქსიომას.

ყველა სახის გარდაქმნა, რომელნიც სხეულის წრფივ ზომებს ტოვებენ უცვლელად, დაიყვანებიან სამ ძირითად სახეზე:

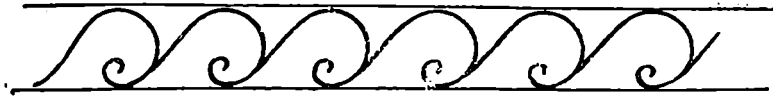
- 1) სხეულის შემობრუნება გარკვეული კუთხით მასში გამაჟალი ნებისმიერი ღერძის ირგვლივ;
- 2) სარკული არეკვლა სიბრტყეში;
- 3) პარალელური გადატანა სივრცეში (ტრანსლაცია).

თუ აღნიშნული მოქმედების შედეგად სხეული უთავსდება თავისთავს, ე. ი. გარდაქმნა სიმეტრიულია, მაშინ ღერძს, რომლის ირგვლივ სხეულის შემობრუნება ხდება, ამრეკლავ სიბრტყეს და გადამტან ვექტორს (ტრანსლაციას) ს ი მ ე ტ რ ი ი ს ე ლ ე მ ე ნ ტ ე ბ ი ეწოდება. სიმეტრიული გარდაქმნების განხორციელება ხდება სიმეტრიის ელემენტების საშუალებით ან, სხვაგვარად რომ ვთქვათ, სიმეტრიის ელემენტები იმ ოპერატორების გეომეტრიული სახეებია, რომლებიც სხეულის სიმეტრიულ გარდაქმნებს ახდენენ.

ამბობენ, რომ სიმეტრიული გარდაქმნა პირველი გვარისაა, თუ გარდაქმნის შედეგად ხდება სხეულის მხოლოდ ბრუნვა ან გადატანა. ყველა დანარჩენი სიმეტრიული გარდაქმნა მეორე გვარის გარდაქმნებს შეადგენენ.

ზემოთ (I, §-1) ნაჩვენები იყო, რომ სიმეტრიული გარდაქმნები, რომელნიც სხეულს უთავსებენ თავისთავს, წარმოადგენენ წრფივ ორთოგონალურ გარდაქმნებს. ამ გარდაქმნების დეტერმინანტი $\Delta = +1$, როდესაც ადგილი აქვს სივრცის მხოლოდ ბრუნვას. ამიტომ, პირველი გვარის სიმეტრიული გარდაქმნებისათვის $\Delta = +1$. ცხადია, მეორე გვარის სიმეტრიული გარდაქმნები წარმოადგენენ ისეთ წრფივ ორთოგონალურ გარდაქმნებს, რომლებისთვისაც $\Delta = -1$.

რაც შეეხება სასრული სხეულის პარალელურ გადატანას სივრცეში, ის არ წარმოადგენს სიმეტრიულ გარდაქმნას, რადგან ასეთი გადატანის შემდეგ სასრული სხეული არ შეიძლება იყოს საწყის მდგომარეობაში. ტრანსლაცია სიმეტრიის ელემენტად შეიძლება ჩაითვალოს. მაგალითად, კრისტალურ მესერში, სადაც პარალელური გადატანის შედეგად ხდება იდენტური ატომების შეთავსება. მესრის სხვადასხვა მიმართულებით ტრანსლაციებს. სრულიად გარკვეული მნიშვნელობები აქვთ. საზოგადოდ, ტრანსლაციის არსებობისათვის საჭიროა, რომ სიმეტრიული ფიგურა წარმოადგენდეს შეთავსებით-ტოლი ნაწილაკების უსასრულო რიგს, რომელნიც ერთიმეორის პარალელურად და ტოლი მანძილებით არიან განლაგებულნი. ასეთი ფიგურების მაგალითს წარმოადგენენ ორნამენტები (ნახ. 4.1). თუ კრისტალს განვიხილავთ როგორც



ნახ. 4.1. ორნამენტი წარმოადგენს შეთავსებით-ტოლი ნაწილების უსასრულო რიგს.

უწყვეტ და უსასრულო გარემოს, ის შეუთავსდება თავისთავს ნებისმიერი გადანაცვლების შედეგად.

ვინაიდან ჩვენ ვიხილავთ, პირველ რიგში, კრისტალების, როგორც მაკროსკოპული სხეულების სიმეტრიას, პარალელური გადატანა სივრცეში მხედველობაში არ უნდა მივიღოთ და ამით ზემოთ ჩამოთვლილი სამი სახის შესაძლებელი გარდაქმნიდან გვრჩება მხოლოდ ორი სახის გარდაქმნა. ეს იმას ნიშნავს, რომ სასრული სხეულის სიმეტრიული გარდაქმნები არ უნდა იწვევდნენ სხეულის გადატანას სივრცეში და, მაშასადამე, უძრავად უნდა ტოვებდნენ მის ერთ წერტილს მაინც.

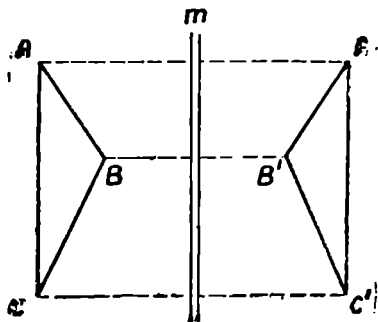
როგორც დავინახეთ, ყოველ სიმეტრიულ გარდაქმნას შეესაბამება თავისი ოპერატორი ან სიმეტრიის ელემენტი. ზემოთ ნათქვამის საფუძველზე შეიძლება დავასკვნათ, რომ სასრულ სხეულს სიმეტრიის ჯგუფში შემავალი სიმეტრიის ელემენტები (ბრუნვის ღერძები, ამრეკვლავი სიბრტყეები) აუცილებლად უნდა იკვეთებოდნენ ერთმანეთთან ერთ წერტილში, წინააღმდეგ შემთხვევაში მათი ცალ-ცალკე მოქმედება გამოიწვევს სხეულის გადაადგილებას სივრცეში. ეს გადაკვეთის წერტილი დარჩება უძრავი სიმეტრიული გარდაქმნების პროცესში. ამიტომ სასრული სხეულების სიმეტრიის ჯგუფებს, რომელნიც ტოვებენ უძრავად სხეულის ერთ წერტილს მაინც, ს ი მ ე ტ რ ი ი ს წ ე რ ტ ი ლ ო ვ ა ნ ი ჯ გ უ ფ ე ბ ი ე წ ო დ ე ბ ა.

სამგანზომილებიანი სივრცის წრფივი ორთოგონალური გარდაქმნების ერთობლიობა (I, §-5) ქმნის ჯგუფს, რომელსაც სრული ორთოგონალური ჯგუფი ეწოდება. ცხადია, რომ სიმეტრიის წერტილოვანი ჯგუფები წარმოადგენენ სრული ორთოგონალური ჯგუფის სასრულ ქვეჯგუფებს.

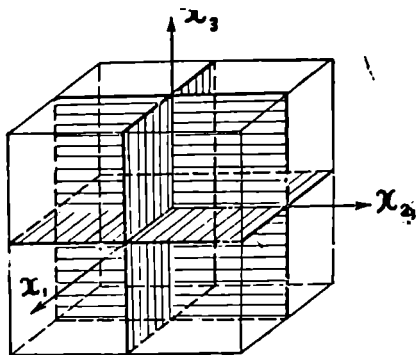
ყველა წერტილოვანი ჯგუფის დასადგენად საჭიროა განისაზღვროს სიმეტრიის ელემენტები და მათი შესაძლებელი კომბინაციები ამა თუ იმ სიმეტრიის სასრულ სხეულში.

§ 14. მაკროსიმეტრიის ელემენტები

სიმეტრიული გარდაქმნების განხორციელება ხდება გეომეტრიული ელემენტების საშუალებით, რომლებსაც სიმეტრიის ელემენტები ეწოდება. სამგანზომილებიან სივრცეში ასეთ ელემენტებს წარმოადგენენ სიბრტყე, წერტილი ან სხვა უფრო რთული ელემენტი, რომელიც აღნიშნუ-



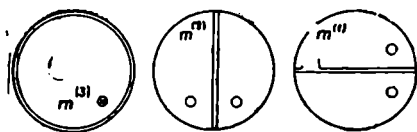
ნახ. 4.2. ABC სამკუთხედის არეკვლა m სიბრტყეში.



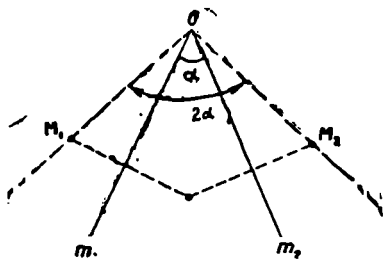
ნახ. 4.3. კუბის მთავარი სიმეტრიის სიბრტყე.

ლი ელემენტების ერთობლივი მოქმედებით იქმნება. თითოეულ სიმეტრიის ელემენტთან დაკავშირებულია ერთი გარკვეული ტიპის სიმეტრიული გარდაქმნა და ამ გარდაქმნის შემდგომი გამეორება. ასეთი გამეორების შედეგად იქმნება გარდაქმნების ერთობლიობა, რომელიც ქმნის ჯგუფს. ამიტომ სიმეტრიის ელემენტი შეიძლება კიდევ განისაზღვროს, როგორც ერთი ტიპის გარდაქმნების შემცველი ჯგუფი.

სიმეტრიის სიბრტყე, რომელსაც მომავალში m ასოთი აღვნიშნავთ, წარმოადგენს უმარტივეს სიმეტრიის ელემენტს. ყველა დანარჩენი სიმეტრიული გარდაქმნა შეიძლება წარმოვიდგინოთ, როგორც არეკვლა რამდენიმე სარკეში. სიმეტრიის (ან სარკული) სიბრტყე ეწოდება ისეთ სიბრტყეს, რომელიც სხეულს ჰყოფს ორ სარკულად-ტოლ ნაწილად, ე. ი. ნაწილებად, რომელნიც განლაგებული არიან ერთმანეთის მიმართ, როგორც საგანი და მისი გამოსახულება სარკეში (ნახ. 4.2). ამიტომ თუ ფიგურას გააჩნია სიმეტრიის სიბრტყე, მაშინ მისი კრისტალოგრაფიულად ტოლი ნაწილების შეთავსება ხდება ერთი ნაწილის ყველა წერტილის გადატანით სიმეტრიის სიბრტყის მეორე მხარეს, სიბრტყისადმი მართობული მიმართულებით იმ მანძილზე, რა მანძილითაც ეს წერტილები დაცილებულია სიბრტყიდან. კუბის მთავარი სიმეტრიის სიბრტყეები ნაჩვენებია 4.3 ნახაზზე. ეს სიბრტყეები კუბის წახნაგების პარალელურ სიბრტყეებს წარმოადგენენ. გარდა ამისა, კუბურ კრისტალში შეიძლება იყოს კიდევ დიაგონალური ექვსი სიმეტრიის სიბრტყე. კუბს სულ გააჩნია 9 სიმეტრიის სიბრტყე, რაც კრისტალებისათვის სიმეტრიის სიბრტყეების მაქსიმალურ რიცხვს წარმოადგენს. თუ სიმეტრიის სიბრტყე m შეთავსებულია x_1x_2 კოორდინატთა სიბრტყესთან (x_3 ღერძის მართობულად), მაშინ ამ



ნახ. 4.4. სიმეტრიის სიბრტყეების სტერეოგრაფიული გეგმილები.



ნახ. 4.5. M_1 წერტილის ორმაგი არეკლა წარმოადგენს ბრუნვას 2α კუთხით.

სიბრტყეში არეკლა გამოიწვევს კოორდინატების გარდაქმნას: $x_1 \rightarrow x_2$, $x_2 \rightarrow x_1$, $x_3 \rightarrow -x_3$, ხოლო გარდაქმნის მატრიცას ექნება შემდეგი სახე

$$A(m^{(3)}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

$m^{(1)}$, $m^{(2)}$, $m^{(3)}$ —სიმეტრიის ელემენტების სტერეოგრაფიული გეგმილები მოცემულია 4.4 ნახაზზე. აქ და შემდეგშიც სტერეოგრაფიული გეგმილის სიბრტყედ არჩეულია $o x_1 x_2$ სიბრტყე. თითოეული ტიპის სიბრტყისათვის შეიძლება დაიწეროს (4.1) სახის გარდაქმნის მატრიცა.

ახლა განვიხილოთ, თანამიმდევრობით არეკლა ორ m_1 და m_2 სიმეტრიის სიბრტყეში, რომელნიც ერთ ხაზზე იკვეთებიან (ნახ. 4.5). ორჯერ არეკვლის შედეგად წერტილი M_1 მიიღებს M_2 მდებარეობას, რაც შეესაბამება M_1 წერტილის ბრუნვას სიბრტყეების გადაკვეთის ხაზის ირგვლივ ორჯერ დიდი კუთხით, ვიდრე სიბრტყეებს შორის კუთხეა. ვინაიდან ორი სარკული სიბრტყის ერთობლივი მოქმედება ღერძის ირგვლივ ბრუნვის ტოლფასია, შემდეგში შეიძლება საერთოდ დავივიწყოთ ორმაგი არეკვლის არსებობა და შემოვიღოთ ახალი სიმეტრიის ელემენტი — სიმეტრიის ღერძი. სიმეტრიის ღერძი ახორციელებს სხეულის სიმეტრიულ გარდაქმნას. ეს იმას ნიშნავს, რომ გარკვეული კუთხით შემობრუნების შედეგად ეს სხეული უნდა შეუთავსდეს თავისთავს. n რიცხვს, რომელიც გვიჩვენებს რამდენჯერ ხდება სხეულის თვითშეთავსება ერთი სრული შემობრუნების განმავლობაში, ბრუნვის ღერძის რიგი ეწოდება. შემობრუნების უმცირესი კუთხე, რომლის შემდეგ სხეული უთავსდება თავისთავს, განისაზღვრება ტოლობით

$$a_n = \frac{2\pi}{n}; \quad (n=1, 2, 3, \dots) \quad (4.2)$$

$\frac{2\pi}{n}$ კუთხით სხეულის შემობრუნების ოპერაციას აღნიშნავენ C_n

ასოთი, ხოლო შესაბამისი ღერძი იქნება n -ური რიგის ბრუნვის ღერძი. ცხადია, ნებისმიერ სხეულს, რომელსაც არავითარი სიმეტრია არ გააჩნია, აქვს პირველი რიგის სიმეტრიის ღერძი C_1 , რადგან სხეულის ბრუნვა 2π კუთხით ყოველთვის იწვევს მის თვითშეთავსებას. საერთაშორისო აღნიშვნებში C_n ასოების მაგივრად ღერძებს აღნიშნავენ ჩვეულებრივი ციფრებით; მაგალითად, 1, 2, 3... ნიშნავს პირველი, მეორე, მესამე და ა. შ. რიგის ღერძებს.

საზოგადოდ, სიმეტრიის ღერძების რიგი n შეიძლება იყოს ნებისმიერი მთელი რიცხვი 1-დან ∞ -მდე, გარდა კრისტალებისა, სადაც, როგორც დავინახავთ, შეიძლება მხოლოდ გარკვეული რიგის ღერძების არსებობა. როდესაც $n = \infty$, შემობრუნების ელემენტარული კუთხე ხდება უსასრულოდ მცირე. უსასრულო რიგის სიმეტრიის ღერძი აქვს ყველა ბრუნვის სხეულს (ცილინდრი, კონუსი, ბრუნვის ელიფსოიდი და სხვა). ამ შემთხვევაში სიმეტრიის ღერძი თანხვედება ბრუნვის ღერძს. სფეროს გააჩნია უსასრულო რიგის ღერძების უსასრულო რაოდენობა, რომელნიც მის დიამეტრებს თანხვედებიან.

ავიღოთ n -ური რიგის ღერძი C_n . ამ ღერძის ირგვლივ შესაძლებელია ბრუნვები მხოლოდ შემდეგი კუთხეებით:

$$0; \quad \frac{2\pi}{n}; \quad 2 \frac{2\pi}{n}; \quad 3 \frac{2\pi}{n} \dots (n-1) \frac{2\pi}{n}. \quad (4.3)$$

სულ n ბრუნვა. ამ ბრუნვების ერთობლიობა ქმნის n -ური რიგის ჯგუფს და ამიტომ სიმბოლო C_n ერთდროულად გამოხატავს როგორც სიმეტრიის ელემენტს, ისე ბრუნვების ჯგუფს. თუ ჯგუფის ელემენტს, რომელსაც შეესაბამება $\frac{2\pi}{n}$ კუთხით ბრუნვა, აღვნიშნავთ C_n -ით, მაშინ ყველა დანარჩენი ბრუნვა შეიძლება წარმოვიდგინოთ C_n -ის ხარისხების საშუალებით; მაგ., $2 \cdot \frac{2\pi}{n} = C_n^2$; $3 \cdot \frac{2\pi}{n} = C_n^3$ და ა. შ.

ამიტომ ჯგუფის ელემენტები საბოლოოდ ასე ჩაიწერება

$$e, C_n, C_n^2 \dots C_n^{n-1}. \quad (4.4)$$

როგორც ვხედავთ, ღერძის ირგვლივ ბრუნვათა ჯგუფი ციკლურ ჯგუფს წარმოადგენს. საწინააღმდეგო ელემენტის როლს ამ ჯგუფში საწინააღმდეგო მიმართულების C_n^{-1} ბრუნვა ასრულებს. ამ ბრუნვის C_n ბრუნვისაგან გასარჩევად საჭიროა ღერძს გარკვეული დადებითი მიმართულება მივცეთ.

თუ სხეულს გააჩნია რამდენიმე სიმეტრიის ღერძი, მაშინ, როგორც აღნიშნული იყო, ისინი უნდა იკვეთებოდნენ ერთ წერტილში. ერთ წერტილში გამავალი ღერძების ირგვლივ ყველა შესაძლებელი ბრუნვის ერთობლიობა ქმნის ჯგუფს, რომელსაც ბრუნვების ჯგუფი ეწოდება. ცხადია, ერთი რომელიმე ღერძის ირგვლივ ბრუნვების ჯგუფი ამ ჯგუფის ქვეჯგუფს წარმოადგენს.

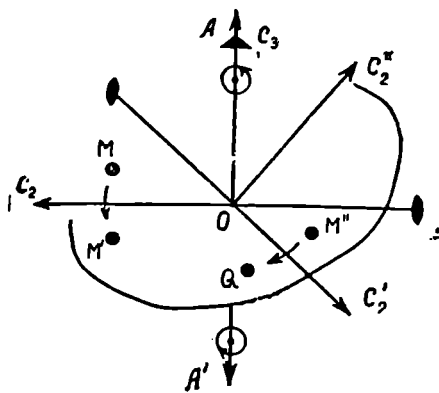
განვიხილოთ ბრუნვების ჯგუფი უფრო დეტალურად და გამოვარკვიოთ, რას წარმოადგენენ ამ შემთხვევაში შეუღლებული ელემენტები და როგორია ამ ელემენტების კლასები. ამისათვის გავიხსენოთ შეუღლებული ელემენტების განსაზღვრა (§ 5). ორი a და b ელემენტი ურთიერთშეუღლებულია, თუ ჯგუფში არსებობს ისეთი ელემენტი u , რომ ადგილი აქვს ტოლობას $uau^{-1} = b$. დავუშვათ, რომ a ელემენტის როლს ასრულებს ბრუნვა C_2 ღერძის ირგვლივ, რომლის შემობრუნების კუთხე უდრის $\alpha_2 = \frac{2\pi}{2} = \pi$. გავატაროთ ამ ღერძის მართობულად მესამე რიგის

ღერძი C_3 (ნახ. 4.6) და მის ირგვლივ ბრუნვა განვიხილოთ, როგორც ჯგუფის u ელემენტი. მოვნახოთ C_2 ღერძის ირგვლივ ბრუნვის ტრანსფორმაცია მესამე რიგის ღერძის საშუალებით, ე. ი. გამოვარკვიოთ რას წარმოადგენს ელემენტი $C_3C_2C_3^{-1}$. ამისათვის C_3 ღერძის მართობულ (ჰორიზონტალურ) სიბრტყეში ავიღოთ წერტილი M . C_2 -ის მოქმედებით ეს წერტილი გადავა M' მდგომარეობაში, ხოლო C_3 ღერძი მას M'' წერტილს შეუთავსებს. ახლა ვიმოქმედოთ M'' წერტილზე $C_3C_2C_3^{-1}$ ელემენტით. C_3^{-1} ბრუნვის მოქმედებით M'' წერტილი ისევ შეუთავსდება M' წერტილს, ხოლო C_2 ღერძი მას საწყის M წერტილში გადაიყვანს; ბოლოს, C_3 -ის მოქმედებით M წერტილი Q წერტილში აღმოჩნდება. როგორც ნახაზი გვიჩვენებს, M'' წერტილის შეთავსება Q წერტილთან შეიძლება უშუალოდ მოხდეს ახალი მეორე რიგის (C'_2) ღერძის საშუალებით, რომელიც მიიღება C_2 ღერძისაგან, მასზე C_3 ღერძის მოქმედების შედეგად. ამგვარად, $C_3C_2C_3^{-1}$ ელემენტი ან C_2 ბრუნვის შეუღლებული ელემენტი არის ისევ ბრუნვა მეორე რიგის ღერძის ირგვლივ, რომელმაც C_3 ღერძის მოქმედება განიცადა.

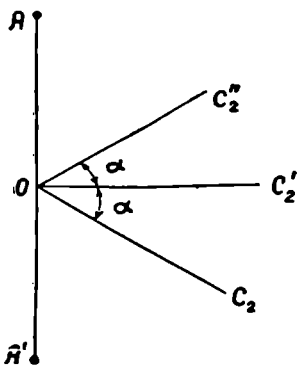
ამ მაგალითიდან შესაძლებელია რამდენიმე დასკვნის გაკეთება. თუ გვაქვს რომელიმე ფიქსირებული ბრუნვა $C_h(\alpha)$, მაშინ ამ ბრუნვის მიმართ ნებისმიერი შეუღლებული ბრუნვა $C_{h_1}(\alpha_1)$, განსაზღვრული გამოსახულებით

$$C_{h_1}(\alpha_1) = gC_h(\alpha)g^{-1},$$

სადაც g ჯგუფის ელემენტია, წარმოადგენს ბრუნვას იმავე α კუთხით, ღერძის ირგვლივ, რომელიც წარმოიშობა C_h ღერძზე g გარდაქმნის მოქმედების შედეგად, ე. ი. $\alpha_1 = \alpha$ და $C_{h_1} = gC_h$. სხვაგვარად რომ ვთქვათ,



ნახ. 4.6. C_2' ბრუნვა წარმოადგენს C_2' ბრუნვის ტრანსფორმაციას C_3 ბრუნვის საშუალებით.



ნახ. 4.7. α კუთხით მდებარე ორი მეორე ტერმის ღერძის მოქმედების შედეგად წარმოიშობა მათი მართობული, 2α კუთხით ბრუნვის მქონე ღერძი.

ბრუნვები ერთი და იმავე კუთხით ყველა შესაძლებელი ღერძის ირგვლივ, შეუღლებული ელემენტების ერთ კლასში მოხვდებიან.

ჩვენ ავიღეთ მესამე რიგისა და მისი მართობული მეორე რიგის ღერძები. C_3 ღერძის მოქმედებით, მის მართობულად წარმოიშობა ახალი მეორე რიგის ღერძები, სულ სამი C_2 ღერძი, რომელნიც ერთმეორისაგან 120° -ით იქნებიან დაცილებულნი. ბრუნვები ერთი და იგივე კუთხით, ამ სამი ღერძის ირგვლივ, ცხადია, ერთ კლასს მიეკუთვნებიან. ყველა ღერძს ან სიბრტყეს, რომლებიც შეიძლება შეთავსებული იქნან მოცემული ჯგუფის რომელიმე ოპერაციის შემწეობით, ეკვივალენტური ღერძები ან სიბრტყეები ეწოდება. მეორე რიგის ღერძები ჩვენს მაგალითში ეკვივალენტური ღერძებია, ვინაიდან მათი შეთავსება C_3 ღერძის ირგვლივ ბრუნვით არის შესაძლებელი. მაგრამ, როგორც დავინახეთ, ბრუნვები ამ ღერძების ირგვლივ ურთიერთშეუღლებულ ელემენტებს წარმოადგენენ; ამიტომ ეკვივალენტობის პირობა შეიძლება ასე გამოვსახოთ: G ჯგუფში შემავალი ორი C_n და C'_n ღერძები ეკვივალენტურია, თუ C'_n ბრუნვა C_n ან C_n^{-1} ბრუნვების შეუღლებულია.

თუ ჯგუფში არსებობს ბრუნვა, რომელიც OA ღერძს გადაიყვანს მის საწინააღმდეგო OA' მდგომარეობაში (ე. ი. შემობრუნებს 180° -ით), ამბობენ, რომ ღერძი $A'A$ ორმხრივია. როგორც ჩანს (ნახ. 4.6), ღერძი C_3 ორმხრივი ღერძია. ამავე ნახაზიდან ვხედავთ, რომ შეუღლებულ ბრუნვებს C_2 და C'_2 ღერძების ირგვლივ $M \rightarrow M'$ და $M'' \rightarrow Q$ ურთიერთსაწინააღმდეგო მიმართულება აქვთ. აქედან შეიძლება დავასკვნათ, რომ

ორმხრივი ღერძისათვის ნებისმიერი ბრუნვა და მისი საწინააღმდეგო ბრუნვა შეუღლებულ ბრუნვებს წარმოადგენენ და, მაშასადამე, ერთ კლასს ეკუთვნიან.

სიმეტრიის ღერძების ურთიერთქმედების ერთი მნიშვნელოვანი მაგალითი ნაჩვენებია 4.7 ნახაზზე. აქ აღებულია ვერტიკალური მონაკვეთი OA და მის მართობულად ჰორიზონტალურ სიბრტყეში მეორე რიგის ღერძები C_2 და C'_2 .

განვიხილოთ ჯერ C_2 , ხოლო შემდეგ C'_2 ღერძების თანამიმდევრული მოქმედება. C_2 ღერძის მოქმედებით A წერტილი გადადის A' მდგომარეობაში. თუ მოვახდენთ შემობრუნებას C'_2 ღერძის ირგვლივ π კუთხით, წერტილი A' ისევ დაუბრუნდება A მდგომარეობას, მაგრამ C_2 ღერძი, რომელიც პირველ შემთხვევაში უძრავი რჩებოდა, ახლა შემობრუნდება და დაიკავებს C''_2 მდებარეობას. ამგვარად, ამ ორი ბრუნვის „გადამრავლების“ შედეგი ან π კუთხით ბრუნვის თანამიმდევრული შესრულება ორი ღერძის ირგვლივ, რომელნიც ერთმანეთთან α კუთხეს ქმნიან, გვაძლევს შემობრუნებას ამ ღერძების მიმართ მართობი $A'A$ ღერძის ირგვლივ 2α კუთხით. კერძოდ, თუ x და y ღერძები მეორე რიგის სიმეტრიის ღერძებია, z ღერძიც მეორე რიგის ღერძს წარმოადგენს.

ზემოთ აღნიშნული იყო, რომ სიმეტრიის ღერძის რიგი n შეიძლება იღებდეს მნიშვნელობებს $1... \infty$. მაგრამ კრისტალური მრავალწახნაგების სიმეტრიის განხილვის დროს მდგომარეობა იცვლება, ვინაიდან კრისტალური მესრის არსებობა კრისტალის შიგნით გარკვეულად საზღვრავს შესაძლებელ ბრუნვებს და ბრუნვის ღერძების რიგს.

განვიხილოთ როგორი რიგის ღერძები არის შესაძლებელი კრისტალურ მრავალწახნაგში. ამისათვის გავიხსენოთ, რომ ნებისმიერი ბრუნვა g შეიძლება წარმოვიდგინოთ, როგორც წრფივი ოპერატორი, რომელსაც ვექტორი \vec{r} გადაყავს $\vec{r}' = g\vec{r}$ ვექტორად. ძირითად ბაზისში $\{i_k\}$, როდესაც $\vec{i}_1, \vec{i}_2, \vec{i}_3$ ox_1, ox_2, ox_3 ღერძების მგვზავებია, g ოპერატორს შეესაბამება მატრიცა $A(g)$, რომელსაც x_3 ღერძის ირგვლივ ბრუნვის შემთხვევაში ექნება სახე

$$A(g) = \begin{pmatrix} \cos \alpha, & -\sin \alpha, & 0 \\ \sin \alpha, & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

ამიტომ $r' = A(g)r$; აქ r' და r სვეტმატრიცებია.

მეორე მხრივ, კოორდინატთა სისტემა შეიძლება დავაკავშიროთ უშუალოდ კრისტალურ მესერთან და კოორდინატთა ღერძებად ავირჩიოთ მესრის ბაზისური ვექტორები, მაშინ ერთეულოვანი ვექტორები a, b, c მგვზავები იქნებიან. ასეთ კოორდინატთა სისტემაში მესრის ნების-

მიერი კვანძის კოორდინატები მთელი რიცხვებით წამოიხატებია. ამიტომ, თუ r და r' მესრის ვექტორებია, დაკავშირებული სიმეტრიული გარდაქმნით, მათი შესაბამისი მატრიცების კომპონენტებიც მთელი რიცხვებია. როდესაც მესერი ბრუნვის შედეგად თავისთავს უთავსდება, გარდაქმნის მატრიცის კომპონენტებიც უნდა იყოს მთელი რიცხვები. ეს იმას ნიშნავს, რომ g ელემენტის ხასიათიც $\chi(g)$ მთელ რიცხვს წარმოადგენს. ახლა, თუ გავიხსენებთ, რომ ელემენტის ხასიათი ინვარიანტული რჩება ბაზისის შეცვლის მიმართ, ნათქვამი მართებული იქნება ნებისმიერი ბაზისისათვის და (4.5) მატრიცისათვის მივიღებთ

$$\chi(g) = 1 + 2 \cos \alpha = N. \quad (4.6)$$

აქედან, $\cos \alpha = 0, \pm \frac{1}{2}, \pm 1$ და ბრუნვის უმცირესი კუთხე განისაზღვრება როგორც $\alpha = \frac{2\pi}{n}$, როდესაც $n=1, 2, 3, 4, 6$.

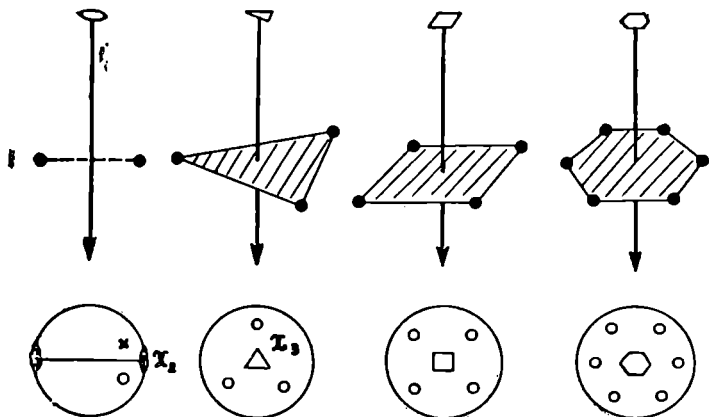
ამგვარად, კრისტალებში შესაძლებელია მხოლოდ 1, 2, 3, 4 და 6 რიგის სიმეტრიის ღერძები. ამ ღერძების აღნიშვნები და შესაბამისი სტერეოგრაფიული გეგმილები მოყვანილია 4,8 ნახაზზე.

ნებისმიერი რიგის ღერძის მოქმედება სიმეტრიული გარდაქმნაა, რომელიც შეიძლება წარმოვიდგინოთ სათანადო მატრიცით. მაგალითად, სამგანზომილებიან სივრცეში მატრიცას, რომელიც აღწერს x_3 ღერძის პარალელურად მიმართული 2 ღერძის მოქმედებას, ექნება სახე

$$A(2^{(x_3)}) = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

იმის შემდეგ, რაც დადგინდა კრისტალური მრავალწახნაგის სიმეტრიის ღერძების შესაძლებელი რიგი, ზემოთ დამტკიცებული თეორემა (ნახ. 4.7) იღებს სრულიად კონკრეტულ სახეს. უმცირესი კუთხე, რომელსაც მეორე რიგის ღერძები ერთმანეთთან შეიძლება ადგენდნენ, უდრის 30° , ვინაიდან, ასეთ შემთხვევაში, მათ მართობად გაივლის მეექვსე რიგის ღერძი. საზოგადოდ, კუთხე ორი მეორე რიგის ღერძს შორის შეიძლება იყოს $30^\circ, 45^\circ, 60^\circ, 90^\circ$. მაშინ მათ მართობად გაივლიან 6, 4, 3 და 2 რიგის ღერძები და მიიღება სიმეტრიის ღერძების შემდეგ ოთხი კომბინაცია: 222, 322, 422, 622 (ნახ. 4.9). სიმეტრიის ღერძების ასეთი განლაგება დამახასიათებელია სწორი მრავალკუთხედებისათვის, როდესაც მთავარი სიმეტრიის ღერძი მიმართულია მრავალკუთხედის სიბრტყის მართობად.

ღერძების იგივე კომბინაციები მიიღება, თუ ვერტიკალურ ღერძს ავირჩევთ მთავარ ღერძად და მის მართობად გავატარებთ 2 რიგის ღერძს.

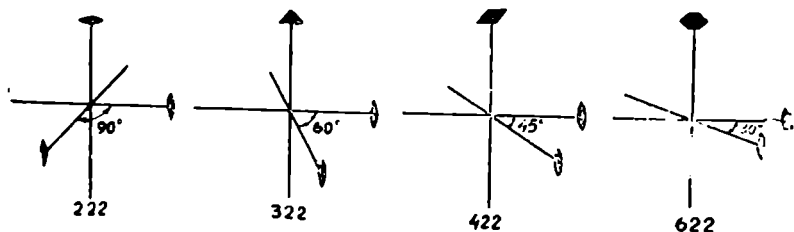


ნახ. 4.8. სიმეტრიის ღერძები და მათი სტერეოგრაფიული გეგმილები.

მაშინ მთავარი ღერძის მოქმედებით ჰორიზონტალურ სიბრტყეში წარმოიშობა ახალი მეორე რიგის ღერძები. მათი რიცხვის დასადგენად მთავარი $C_n(\alpha)$ ღერძის მოქმედება შეიძლება წარმოვიდგინოთ, როგორც ორმაგი არეკვლა სიბრტყეებში, რომელნიც ერთმანეთთან $\alpha/2$ კუთხეს ადგენენ. ასე, მაგალითად, თუ სარკულ სიბრტყეებად ავიღებთ ურთიერთმართობ კოორდინატა სიბრტყეს $m^{(1)}$ და $m^{(2)}$, მაშინ

$$A(m^{(1)})A(m^{(2)}) = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = A(C_n(\alpha)), \quad (4.8)$$

სადაც $C_n(\alpha)$ ნიშნავს ბრუნვის ოპერატორს α კუთხით, ღერძის ირგვლივ, რომელიც აღნიშნული სიბრტყეების გადაკვეთის ხაზზე გაივლის. ამ შემთხვევაში ეს მეორე რიგის ღერძია. საზოგადოდ კი, როდესაც ვერტი



ნახ. 4.9. სიმეტრიის ღერძების შესაძლებელი კომბინაციები კრისტალებში.

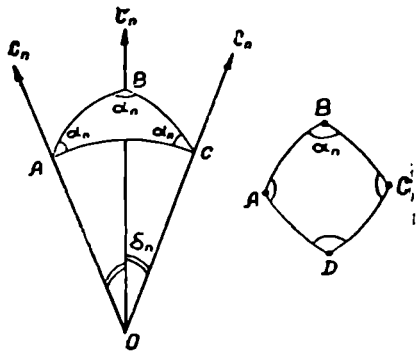
კალური ღერძი 3, 4, 6 რიგისა და მის მართობულად აღებულია 2 რიგის ღერძი, ამ ღერძის ორი სიბრტყით შეცვლის დროს პირველი სიბრტყე შეიძლება გავატაროთ მასზე და მთავარ ღერძზე, ხოლო 2* ღერძის მეორე სიბრტყე იქნება პორიზონტალური სიბრტყე. ამავე დროს, 3, 4, 6 რიგის ღერძებისათვის მეორე სიბრტყეები, პირველ ვერტიკალურ სიბრტყესთან შეადგენენ, შესაბამისად, 60°, 45°, 30° კუთხეებს. ამ ვერტიკალური სიბრტყეების პორიზონტალურ სიბრტყესთან გადაკვეთის ხაზი წარმოადგენს ახალ მეორე რიგის ღერძს. ამგვარად, n -ური რიგის ვერტიკალური ღერძის ირგვლივ წარმოიშობა n მეორე რიგის ღერძი. ღერძების ასეთ კომბინაციას წინათ აღნიშნავდნენ D_n ასოთი. ახალ საერთაშორისო აღნიშვნებში იქნება 222, 322, 422, 622.

მაღალი რიგის ღერძების კომბინაციები

ზემოაღნიშნულიდან ჩანს, რომ ნებისმიერი რიგის ორი ღერძის გადაკვეთის წერტილში ყოველთვის გაივლის მესამე ღერძი, რომელიც პირველ ორ ღერძთან გარკვეულ კუთხეს შეადგენს (ნახ. 4.10). ასე რომ

$$C(\alpha_1)C(\alpha_2) = C(\alpha_3). \quad (4.9)$$

კრისტალური მესრის არსებობა საზღვრავს არა მარტო სიმეტრიის ღერძების შესაძლებელ რიგს, არამედ მათ ურთიერთგანლაგებას კრისტალებში. აქამდე ჩვენ ვიხილავდით ღერძების მხოლოდ ისეთ კომბინაციებს, რომლებიც შეიცავდნენ ერთი მაღალი რიგის (3, 4, ან 6) და მის მართობ რამდენიმე 2 რიგის ღერძს. ახლა განვიხილოთ შემთხვევები, როდესაც გვაქვს რამდენიმე მაღალი რიგის ღერძი; მაგ., თუ ავიღებთ მესამე რიგის ღერძს და მასთან რაიმე კუთხით გავატარებთ მეორე რიგის ღერძს, მაშინ ამ უკანასკნელის მოქმედებით წარმოიშობა კიდევ ახალი 3 რიგის ღერძი და ა. შ. ყველა შესაძლებელი n -ური რიგის ღერძებიდან ავირჩიოთ ორი სიმეტრიის ღერძი C_n , რომელნიც ერთიმეორესთან ადგენენ უმცირეს შესაძლებელ კუთხეს. 4.10 ნახაზზე A და B ასოებით დანიშნულია წერტილები, სადაც ეს ღერძები კვეთენ ერთეულღერძს სფეროს ზედა-



ნახ. 4.10. უმაღლესი რიგის ღერძების შესაძლებელი განლაგება.

* მომავალში შემოკლებისათვის, ნაცვლად „მეორე რიგის ღერძის“, „მესამე რიგის ღერძის“ და ა. შ., დავწერთ 2 ღერძის, 3 ღერძის და ა. შ.

პირს, რომელიც ღერძების გადაკვეთის წერტილის ირგვლივ არის შემოწერილი. OA ღერძის ირგვლივ $\alpha_n = \frac{2\pi}{n}$ კუთხით შემობრუნების შედეგად

OB ღერძი მიიღებს $(n-1)$ ახალ მდებარეობას; ერთი მათგანი ნაჩვენებია ნახაზზე OC ღერძის სახით. OC ღერძის მოქმედებით OA ღერძი გარდაიქმნება OB ღერძად. მიღებულ სფერულ ABC სამკუთხედში ყველა კუთხე

ტოლია $\alpha = \beta = \gamma = \alpha_n = \frac{2\pi}{n}$. ასევე ტოლია გვერდები, რომელნიც დიდი

წრეების რკალებს წარმოადგენენ $AB = BC = CA = \delta_n$, ამიტომ სფერული სამკუთხედის ფორმულა მარტივდება და შეიძლება დაიწეროს

$$\cos \delta_n = \cot \frac{1}{2} \alpha_n \quad \operatorname{ctg} \alpha_n = \frac{\sin \alpha_n}{1 - \cos \alpha_n} \cdot \frac{\sin 2\alpha_n}{1 - \cos 2\alpha_n} = \frac{1}{2 \sin^2 \frac{\pi}{n}} - 1. \quad (4.10)$$

აქ $n=1, 2, 3, 4, 6$, მაგ., როდესაც $n=6$, $\cos \delta_n=1$ და $\delta_n=0$. შეექვსე რიგის ღერძებით ანხვდებიან, ე. ი. ადგენენ ნულოვან კუთხეს. მეოთხე რიგის ღერძებისათვის $\cos \delta_n=0$ და $\delta_n=90^\circ$. მეოთხე რიგის ღერძები შეიძლება მხოლოდ ურთიერთმართობები იყვნენ, რაც კუბისათვის არის დამახასიათებელი. როდესაც $n=3$, $\cos \delta_n = -\frac{1}{3}$, ხოლო $\delta_n = 109^\circ 28'$

(ან დამატებითი კუთხე $70^\circ 32'$). მესამე რიგის ღერძების ასეთ განლაგებას ვხვდებით ტეტრაედრში, ოქტაედრში და კუბში. საზოგადოდ, მაღალი რიგის ღერძების კომბინაციებს ადგილი აქვთ სწორ მრავალწახნაგებში.

მრავალწახნაგს ეწოდება სწორი, თუ მისი წახნაგები წარმოადგენენ ერთნაირი სიდიდის სწორ მრავალკუთხედებს. ასეთი მრავალწახნაგების რიცხვი კრისტალებისათვის შემოსაზღვრულია სივრცობრივი მესრის სიმეტრიით. მართლაც, როგორც 4.10 ნახაზი გვიჩვენებს, ღერძების ურთიერთმოქმედების შედეგად ერთეულოვანი სფეროს ზედაპირზე შეიკვრება სფერული მრავალკუთხედი $ABCD$. ვინაიდან თითოეული ღერძის ირგვლივ ადგილი აქვს $(n-1)$ ბრუნვას, წარმოიშობა ახალი ღერძები; რომლებიც თავის მხრივ შექმნიან ახალ სფერულ მრავალკუთხედებს, და ა. შ., მანამ მთელი ერთეულოვანი რადიუსის სფერო არ დაიფარება ერთი და იგივე სიდიდის სწორი სფერული მრავალკუთხედებით და მიიღება სწორი სფერული მრავალწახნაგი. ამ მრავალწახნაგს ექნება F წახნაგი, E წიბო და V წვერო. თითოეული წახნაგი წარმოადგენს q გვერდის მქონე სწორ სფერულ მრავალკუთხედს. ცხადია, რომ ყოველ წვეროში თავს მოიყრის n წიბო (სადაც n — ღერძის რიგია) და ვინაიდან თითოეული წიბო ორ წვეროს ეკუთვნის, ამიტომ წიბოების რიცხვი $E = n \frac{V}{2}$. ამავე დროს,

ყოველი წიბო ეკუთვნის ორ წახნაგს და რადგან გვერდების რიცხვი წახნაგში არის q , წიბოების რიცხვი $E = F \cdot \frac{q}{2}$, აქედან მივიღებთ, რომ $nV = Fq$. ცნობილია, რომ ერთეულოვანი სფეროს ზედაპირზე q გვერდის მქონე მრავალკუთხედის ფართობი უდრის ამ მრავალკუთხედის კუთხეების ჯამს, გამოკლებული $(q-2)\pi$ სიდიდე (სფერული სამკუთხედისთვის იქნება $\alpha + \beta + \gamma - \pi$). ზოგად შემთხვევაში, ეს ფართობი ტოლია $q \cdot \frac{2\pi}{n} - (q-2)\pi$. თუ ამ სიდიდეს გავამრავლებთ F წახნაგების რიცხვზე, მივიღებთ ერთეულოვანი რადიუსის სფეროს ზედაპირის ფართობს

$$F \left[q \frac{2\pi}{n} - (q-2)\pi \right] = 4\pi$$

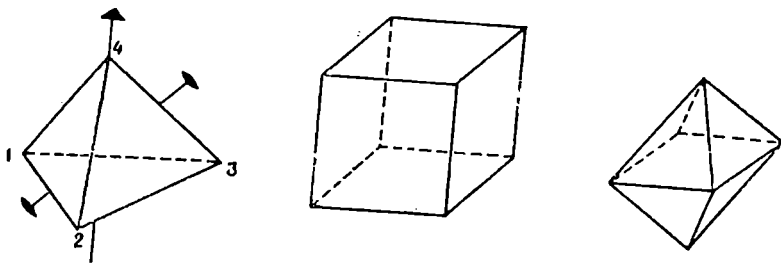
ან $\frac{Fq}{n} - \frac{Fq}{2} + F = 2$ და, საბოლოოდ, $V - E + F = 2$. (4.11)

(4.11) ტოლობა გამოხატავს ეილერის თეორემას. განვიხილოთ მიღებული ფორმულიდან გამომდინარე შედეგები. ამისათვის (4.11) გადავწეროთ შემდეგი სახით

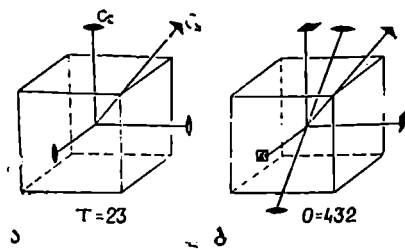
$$\frac{2q}{n} - (q-2) = \frac{4}{F}. \quad (4.12)$$

ვინაიდან $n > 2$, q -ს დასაშვები მნიშვნელობები განსაზღვრულია; მართლაც, როდესაც $n=3$, q უნდა იყოს < 6 , თუ $q=3$, $F=4$; $q=4$, $F=6$; $q=5$, $F=12$. როდესაც $n=4$, $q < 4$, თუ $q=3$, $F=8$; როდესაც $n=5$, q შეიძლება უდრიდეს მხოლოდ 3 და $F=20$. ამგვარად, სულ შესაძლებელია 5 სწორი მრავალწახნაგის არსებობა:

1. როდესაც $n=3$, $q=3$, $F=4$, გვაქვს ოთხწახნაგა, რომლის თითოეულ წახნაგს აქვს სამკუთხედის ფორმა (ნახ. 4.11-ა). ასეთ მრავალწახნაგას ტეტრაედრი ეწოდება. ტეტრაედრს აქვს ოთხი მესამე რიგის ლერძი, რომელნიც წვეროებს აერთებენ მოწინააღმდეგე წახნაგის ცენტრთან, და



ნახ. 4.11. სწორი მრავალწახნაგები.



ნახ. 4.12. უმაღლესი რიგის ღერძების განლაგება მრავალწახნაგში.

სამი მეორე რიგის ღერძი, რომელიც მოპირდაპირე წიბოების ცენტრებში გადიან. მესამე რიგის ღერძები ერთმანეთთან აღგენენ $109^{\circ}28'$ ან $70^{\circ}32'$ კუთხეს, ამიტომ ასეთ კუთხეს ტეტრაედრული ეწოდება. 3 და 2 რიგის ღერძების ასეთ კომბინაციას ტეტრაედრის ჯგუფი ეწოდება და აღინიშნება T ან 23 (ზემოთ მიღებული 322-საგან განსხვავებით).

2. როდესაც $n=3$, $q=4$ და $F=6$. ეს მრავალწახნაგა ჩვეულებრივი კუბია.

3. თუ $n=4$, $q=3$, $F=8$, ვღებულობთ ოქტაედრს (ნახ. 4.11 გ). ოქტაედრი და კუბი ერთნაირი წერტილოვანი სიმეტრიით ხასიათდებიან. ოქტაედრი წარმოადგენს რვაწახნაგას და თითოეულ წახნაგს სამკუთხედის ფორმა აქვს. აქ ვხვდებით სამი მეოთხე რიგის ღერძის, ოთხი მესამე რიგის ღერძისა და ექვსი მეორე რიგის ღერძის ერთობლიობას. სიმეტრიის ელემენტების ასეთ კომბინაციას ოქტაედრის ჯგუფი ეწოდება და აღინიშნება O ასოთი ან 432.

4. $n=3$, $q=5$ და $F=12$. ასეთ მრავალწახნაგას პენტაგონალური დოდეკაედრი ეწოდება.

5. $n=5$, $q=3$ და $F=20$ გვაძლევს მრავალწახნაგს, რომელსაც იკოსაედრი ეწოდება, პენტაგონალური დოდეკაედრი და იკოსაედრი ერთნაირი სიმეტრიით ხასიათდებიან და შეიცავენ მეხუთე რიგის ღერძებს, ამიტომ კრისტალებში ისინი არ გვხვდებიან და იკოსაედრის ჯგუფს ჩვენ მომავალში არ განვიხილავთ.

ამგვარად, უმაღლესი რიგის ღერძები გვაძლევენ ორ დამატებით კომბინაციას 23(T) და 432 (O). ღერძების განლაგება ამ შემთხვევაში მოცემულია 4.12 ნახაზზე.

სიმეტრიის ღერძებისა და სიბრტყეების ურთიერთგანლაგება

ახლა დავუბრუნდეთ ბრუნვის ღერძებისა და სიმეტრიის სიბრტყეების ერთდროულ მოქმედებას. ზემოთ უკვე აღვნიშნეთ, რომ არეკვლა ორ სიბრტყეში, რომელნიც ერთმანეთს კვეთენ, გადაკვეთის ხაზის ირგვლივ ორმაგი კუთხით ბრუნვის ტოლფასია. თუ სიბრტყეს, რომელიც ღერძზე გაივლის, აღვნიშნავთ m_s ასოთი, მივიღებთ

$$m_s \quad m_s' = C(2\phi). \quad (4.13)$$

აქ მნიშვნელობა აქვს არეკვლის მიმდევრობას, ვინაიდან $m_s \cdot m_s'$ გვაძლევს ბრუნვას m_s' სიბრტყიდან m_s სიბრტყისაკენ. მიმდევრობის შეცვლა გამოიწვევს ბრუნვის მიმართულების შეცვლას. თუ (4.13) ტოლობას მარცხნიდან გავამრავლებთ m_s -ზე, მივიღებთ

$$m_s = m_s C(2\varphi). \quad (4.14)$$

[ვინაიდან ორჯერ არეკვლა ერთ და იმავე სიბრტყეში ტოვებს წერტილს უცვლელად, $m_s^2 = E$, $m_s = m_s^{-1}$. ამგვარად, რომელიმე ღერძის ირგვლივ ბრუნვისა და ამ ღერძზე გამავალ სიბრტყეში არეკვლის ნამრაველი წარმოადგენს არეკვლას მეორე სიბრტყეში, რომელიც იმავე ღერძზე გაივლის და პირველ სიბრტყესთან შეადგენს შემობრუნების კუთხის ნახევარს. აქედან, (ცხადია, რომ თუ n -ური რიგის ღერძზე გავატარებთ სიმეტრიის სიბრტყეს, მაშინ ამ ღერძზე გადაიკვეთება კიდევ $(n-1)$ სიბრტყე, რომელნიც ერთიმეორისაგან $\frac{\pi}{n}$ კუთხით იქნებიან დაცილებულნი.

ღერძზე გამავალი სიბრტყე, ე. ი. ოპერაცია m_s არ ცვლის ღერძის მიმართულებას, მაგრამ სცვლის ბრუნვის მიმართულებას, ამიტომ

$$m_s C(\varphi) m_s^{-1} = m_s C(\varphi) m_s = C(-\varphi). \quad (4.15)$$

ასეთ შემთხვევაში, როგორც ზემოთ იყო ნათქვამი, ბრუნვის ღერძი ორმხრივ ღერძს წარმოადგენს. თუ სიმეტრიის სიბრტყე ბრუნვის ღერძთან ადგენს გარკვეულ კუთხეს, ამ უკანასკნელის მოქმედებით გამოიყვანება ახალი სიბრტყე, რომელიც პირველ სიბრტყესთან გადაკვეთის შედეგად მოგვცემს ღერძს. ამიტომ ღერძისა და სიბრტყის ნაცვლად მიიღება ღერძების გარკვეული კომბინაცია, რომელიც ზემოთ უკვე გვქონდა განხილული. რჩება ერთადერთი შესაძლებლობა, როდესაც სიმეტრიის სიბრტყე ბრუნვის ღერძის მართობია. აღენიშნოთ ღერძის მართობი სიბრტყე m_h ასოთი, მაშინ ადვილი დასანახია, რომ

$$m_h \cdot C(\varphi) \cdot m_h^{-1} = C(\varphi). \quad (4.16)$$

ეს იმას ნიშნავს, რომ ბრუნვა ღერძის ირგვლივ და მის მართობ სიბრტყეში არეკვლა კომუტატორი ოპერაციებია. ბრუნვის ღერძი, ამ შემთხვევაში, არ არის ორმხრივი. ეს ხდება იმის გამო, რომ თუმცა m_h ცვლის ღერძის მიმართულებას, ის ერთდროულად ბრუნვასაც უცვლის მიმართულებას ისე, რომ შედეგი რჩება უცვლელი.

ორი ოპერაციის—ბრუნვისა და სიბრტყეში არეკვლის ერთდროული გამოყენება გვაძლევს სიმეტრიის ახალ ელემენტს, რომელსაც სარკული ღერძი ეწოდება. ამბობენ, რომ სხეულს გააჩნია n -ური რიგის სარკული ღერძი, თუ მისი თვითშეთავსება ხდება $\frac{2\pi}{n}$ კუთხით ბრუნვისა და შემდეგ

ბრუნვის ღერძის მართობ სიბრტყეში არეკვლის შედეგად. სარკული ბრუნვის ღერძებს აღნიშნავენ S_n -ით. ცხადია, რომ

$$S_n = C_n \cdot m_h = m_h C_n. \quad (4.17)$$

C_n და m_h ოპერაციების მიმდევრობას მნიშვნელობა არა აქვს, ისინი კომუტატორები არიან. აქედან,

$$(S_n)^n = (C_n m_h)^n = (C_n)^n \cdot (m_h)^n; \quad (4.18)$$

როდესაც n ლუწი რიცხვია;

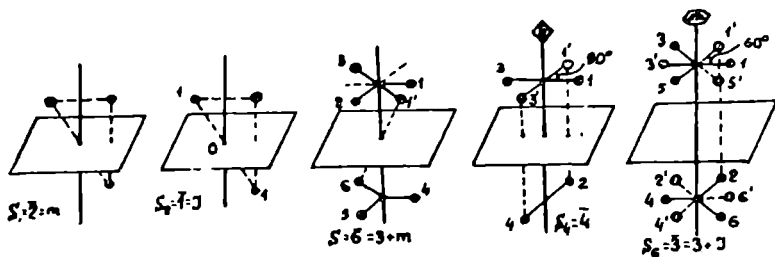
$$(S_n)^n = E \quad (4.19)$$

და, მაშასადამე, S_n წარმოადგენს სიმეტრიის ახალ სახეს მხოლოდ იმ შემთხვევაში, როდესაც n ლუწია. თუ n კენტია,

$$(S_n)^n = m_h C_n. \quad (4.20)$$

ეს იმას ნიშნავს, რომ თუ სხეულს გააჩნია კენტი რიგის სარკული ღერძი, ის დაიყვანება ორი დამოუკიდებელი ელემენტის n -ური რიგის ბრუნვის ღერძისა და მისი მართობული სიმეტრიის სიბრტყის ერთდროულ არსებობაზე. სხვადასხვა რიგის სარკული ღერძების მოქმედება ნაჩვენებია 4.13 ნახაზზე. ნახაზიდან ჩანს, რომ პირველი რიგის სარკული ღერძის მოქმედება ტოლფასია ჩვეულებრივი სიმეტრიის სიბრტყისა $S_1 = m$. განსაკუთრებულ შემთხვევას წარმოადგენს მეორე რიგის სარკული ღერძი. π კუთხით მობრუნებისა და შემდეგ ღერძის მართობულ სიბრტყეში არეკვლის შედეგად წერტილი 1 გადადის 1' მდგომარეობაში, ასეთ ოპერაციას ეწოდება ინვერსია ფიქსირებული O წერტილის მიმართ. ორივე წერტილი, ამ შემთხვევაში, მოთავსებულია $101'$ სწორ ხაზზე O წერტილისაგან სხვადასხვა მხარეს და ერთი და იგივე მანძილით მისგან. ინვერსიის შესაბამის გარდაქმნას აღნიშნავენ J ასოთი. თუ სხეული სიმეტრიულია ინვერსიის გარდაქმნის მიმართ, ამბობენ, რომ მას გააჩნია სიმეტრიის ცენტრი. ამგვარად,

$$J = S_2 = C_2 \quad m_h. \quad (4.21)$$



ნახ. 4.13. სარკული და ინვერსიული ღერძების მოქმედება არჩეულ წერტილზე.

აქედან ცხადია, რომ $C_2 = Jm_h$ და $m_h = JC_2$. მაგალითად, თუ ინვერსიის ცენტრი მოთავსებულია კოორდინატთა სათავეში, ხოლო სიმეტრიის სიბრტყე m_h თანხედება პორიზონტალურ x_1x_2 სიბრტყეს, მაშინ შესაბამისი მატრიცების ნამრავლი მოგვეცემს

$$A(J)A(m_h) = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = A(2^{(3)}) \quad (4.22)$$

$A(2^{(3)})$ მატრიცა შეესაბამება x_3 ღერძის გასწვრივ მდებარე მეორე რიგის ღერძის მიერ კოორდინატების გარდაქმნას. მაშასადამე, თუ სამი C_2 , m_h და J ელემენტებიდან ნებისმიერი ორი ეკუთვნის მოცემულ ჯგუფს, მაშინ მესამეც ამ ჯგუფს მიეკუთვნება. ეს შედეგი მართებულია ნებისმიერი ლუწი რიგის ღერძისა და მისდამი მართობული სიბრტყის მიმართ.

ხშირად სარკულ ღერძებს გარდა განმარტებულია ინვერსიული ღერძებიც, რომელნიც წარმოადგენენ ჩვეულებრივი ბრუნვის ღერძებისა და ინვერსიის ერთობლიობას. ინვერსიის ღერძებს აღნიშნავენ $\bar{1}$, $\bar{2}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$. ცხადია, რომ პირველი რიგის ინვერსიული ღერძი წმინდა ინვერსიის წარმოადგენს და ამიტომ მიღებულია აღნიშვნა $C_i = \bar{1}$. მეორე რიგის ინვერსიული ღერძი ტოლფასია სიმეტრიის სიბრტყისა $\bar{2} = m$. მესამე რიგის ინვერსიული ღერძი იმავე დროს წარმოადგენს მეექვსე რიგის სარკულ ღერძს $S_6 = \bar{3}$ და, პირიქით, მეექვსე რიგის ინვერსიული ღერძი ერთდროულად მესამე რიგის სარკული ღერძია $S_3 = \bar{6}$. ამიტომ პირველ შემთხვევაში საქმე გვაქვს მესამე რიგის ღერძისა და სიმეტრიის ცენტრის ერთდროულ მოქმედებასთან, ხოლო მეორე შემთხვევაში — მესამე რიგის ღერძისა და მის მიმართ მართობული სიბრტყის. ამ ღერძებიდან დამოუკიდებელი სიმეტრიის ელემენტად რჩება მეოთხე რიგის სარკული ღერძი, რომელიც იმავე რიგის ინვერსიულ ღერძს წარმოადგენს $S_4 = \bar{4}$.

საბოლოოდ, კრისტალებში წარმოდგენილია შემდეგი დამოუკიდებელი (დაუყვანადი) სიმეტრიის ელემენტები:

$$C_i = \bar{1}, \bar{2} = m, 2, 3, 4, \bar{4}, 6. \quad (4.23)$$

სიმეტრიის ელემენტი — მეექვსე რიგის ღერძი, შეიძლება წარმოვიდგინოთ როგორც მესამე (3) და მეორე (2) რიგის ღერძების კომბინაცია; მართლაც, თუ 3 და 2 ღერძები მიმართულია z ღერძის პარალელურად, მივიღებთ

$$\begin{aligned}
 A(3||x_3)A(2||x_3) &= \left| \begin{array}{ccc|ccc}
 -\frac{1}{2}, & \frac{\sqrt{3}}{2}, & 0 & -1 & 0 & 0 \\
 -\frac{\sqrt{3}}{2}, & -\frac{1}{2}, & 0 & 0 & -1 & 0 \\
 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1
 \end{array} \right| = \\
 &= \left| \begin{array}{ccc|ccc}
 \frac{1}{2}, & -\frac{\sqrt{3}}{2}, & 0 & & & \\
 \frac{\sqrt{3}}{2}, & \frac{1}{2}, & 0 & & & \\
 0 & 0 & 1 & & &
 \end{array} \right| = A(6) \quad (4.24)
 \end{aligned}$$

დანარჩენ შემთხვევაში ყველა აღნიშნული ელემენტი დამოუკიდებელ ელემენტებს წარმოადგენენ და მათი კომბინაციები კრისტალებში ქმნიან სიმეტრიის ელემენტების ჯგუფებს. ამ წინასწარი შენიშვნებისა და თეორემების შემდეგ ჩვენ უშუალოდ შეგვიძლია გადავიდეთ სიმეტრიის წერტილოვანი ჯგუფების განხილვაზე.

§ 15. სიმეტრიის წერტილოვანი ჯგუფები.

ბრუნვის ჯგუფები

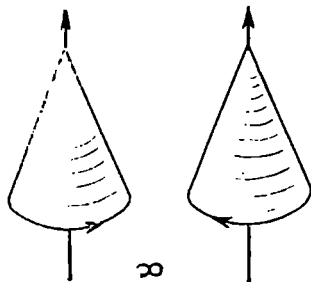
როგორც დავინახეთ, გარდაქმნების ერთობლიობა, რომელიც მოცემული სიმეტრიული ფიგურის თვითშეთავსებას იწვევს, ქმნის ჯგუფს. ამ ჯგუფს სიმეტრიის ჯგუფი ეწოდება. თუ სიმეტრიის ჯგუფი შეიცავს მხოლოდ სიბრტყეში არეკვლის, ბრუნვის, ინვერსიისა და იგივეობის (იდენტურობის) ოპერაციებს და არ შეიცავს ტრანსლაციებს, მას წერტილოვანი ჯგუფი ეწოდება. არაეკვივალენტური ოპერაციების რიცხვი ამ ჯგუფის რიგს წარმოადგენს. ყოველ სიმეტრიულ ოპერაციას შეესაბამება სიმეტრიის ელემენტი. სიმეტრიის წერტილოვან ჯგუფში შემავალი სიმეტრიის ელემენტები იკვეთებიან ერთ წერტილში, რომელიც რჩება ინვარიანტული სიმეტრიული გარდაქმნების მიმართ.

ჩვენს ამოცანას შეადგენს განვსაზღვროთ ყველა შესაძლებელი წერტილოვანი ჯგუფი, რომელნიც პირველი გვარის სიმეტრიულ გარდაქმნებს შეიცავენ; ცხადია, რომ ამ ჯგუფების შემადგენელი ელემენტები წმინდა ბრუნვები იქნება და ამიტომ ბრუნვების წერტილოვანი ჯგუფები ბრუნვების ჯგუფის ქვეჯგუფებს წარმოადგენენ. ვინაიდან ჯგუფის ელემენტები არაეკვივალენტური ოპერაციებით განისაზღვრება, წერტილოვანი ჯგუფებისა და მათი კლასების კლასიფიკაციის მიზნით საჭიროა არაეკვივალენტური სიმეტრიის ელემენტების დადგენა.

აქვე უნდა აღინიშნოს, რომ ნებისმიერი ჯგუფის ყველა ელემენტის მიღება შეიძლება ამ ჯგუფის ერთი ან რამდენიმე ელემენტისაგან. ამ ელემენტებს შემქმნელი ელემენტები ან გენერატორები ეწოდება. მაგალითად, ციკლური ჯგუფის შესაქმნელად საკმარისია ერთი ელემენტი, რომლის სხვადასხვა ხარისხი ამოწურავს მთლიანად ჯგუფს. თუ ჯგუფი არააციკლურია, მისი ყველა ელემენტის შესაქმნელად საჭირო ხდება რამდენიმე გენერატორის შერჩევა. წერტილოვანი ჯგუფების გამოყენების დროსაც საჭიროა გენერატორების სისტემის არჩევა. ეს არჩევა, რა თქმა უნდა, შეიძლება სხვადასხვაგვარად მოხდეს, მაგრამ ვინაიდან ჩვენ ვიხილავთ ბრუნვის წერტილოვან ჯგუფებს, ბუნებრივია, გენერატორად ავირჩიოთ ღერძის ირგვლივ ბრუნვის ოპერაცია და დავტოვოთ იგივე აღნიშვნები, რომელნიც სიმეტრიის ელემენტებისათვის იყო შემოღებული. ასე, მაგალითად, სიმბოლო „2“ ერთდროულად ნიშნავს მეორე რიგის ღერძს (სიმეტრიის ელემენტი), ბრუნვას 180° -ით (ოპერატორი) და მეორე რიგის ღერძის ირგვლივ ბრუნვათა ჯგუფს.

1. უმარტივესი წერტილოვანი ჯგუფები ისეთი ჯგუფებია, რომლებსაც მხოლოდ ერთი ბრუნვის ღერძი გააჩნიათ (ნახ. 4.8). ამ წერტილოვან ჯგუფებს აღნიშნავენ C_n ასოთი, სადაც n მიუთითებს ჯგუფის რიგზე. ეს ჯგუფები შეიცავენ ყველა ბრუნვას, რომელნიც საჭიროა სწორი მრავალკუთხედების თვითშეთავსებისათვის თავის სიბრტყეში. სწორი n -კუთხა პირამიდის ბრუნვების ჯგუფი მრავალკუთხედის ბრუნვის ჯგუფის იზომორფულია.

როგორც ვიცით, კრისტალებში შეიძლება არსებობდეს მხოლოდ 1, 2, 3, 4, 6 რიგის ღერძები, რომელნიც ქმნიან 5 წერტილოვან კრისტალოგრაფიულ ჯგუფს. ყველა ეს ჯგუფი ციკლურ ჯგუფებს წარმოადგენენ. მაგალითად, ჯგუფი 3 მესამე რიგის ციკლური ჯგუფია, რომლის ელემენტებიც ბრუნვებია $3=120^\circ$; $3^2=240^\circ$ და $3^3=360^\circ=E$. თითოეული ელემენტი თავისთავად ქმნის შეუღლებული ელემენტების კლასს; ამიტომ კლასების რიცხვი ჯგუფში მისი რიგის ტოლია. ამ ჯგუფებს უნდა დაემატოს კიდევ ჯგუფი, რომელიც შეიცავს ∞ რიგის ღერძს. ასეთი ღერძი ბრუნვის სხეულებს გააჩნია (ნახ. 4.14). შესაბამისი ჯგუფი აღინიშნება ∞ სიმბოლოთი და მას ზღერული ჯგუფი ეწოდება. ზღერული ჯგუფები გამოიყენებიან კრისტალების ფიზიკური თვისებების აღწერის დროს.



2. C_n ჯგუფების შემდეგ ყველაზე მარტივ ჯგუფებს წარმოადგენენ ნახ. 4.14. ∞ რიგის ღერძი. მარცხენაა „ღ“ მარჯვ. „ბრუნვის კონუსები.

D_n ჯგუფები. ამ შემთხვევაში ძირითად გენერატორებს — C_n ლერძებს ემატება ერთი ახალი გენერატორი — მეორე რიგის ლერძის სახით. ვინაიდან ჩვენს მიერ აღებულ ჯგუფებში შედის მხოლოდ ერთი უმაღლესი რიგის ლერძი, დამატებითი ლერძი 2 უნდა მოთავსდეს ამ ლერძის მართობულად. მაშინ n -ური რიგის ლერძის ირგვლივ გამოიყვანება კიდეც ($n-1$) მეორე რიგის ჰორიზონტალური ლერძი. ეს ლერძები ერთიმეორესთან

აღგენენ $\frac{\pi}{n}$ კუთხეს. D_n ჯგუფი შედგება ყველა ბრუნვისაგან, რომელნიც

სწორ n -კუთხა პრიზმას უთავსებენ თავისთავს. ეს იქნება n ბრუნვა მთავარი ლერძის ირგვლივ და კიდეც n ბრუნვა π კუთხით ჰორიზონტალური ლერძების ირგვლივ, ე. ი. სულ $2n$ ბრუნვა. ჰორიზონტალური 2 ლერძის არსებობის გამო მთავარი ლერძი იქნება ორმხრივი, ამიტომ საწინააღმდეგო ბრუნვები $C_n^k = \frac{2\pi k}{n}$ და $C_n^{-k} = \frac{2\pi}{n}(n-k)$ შეუღლებული იქნებიან

და მიეკუთვნებიან ერთ კლასს.

კრისტალებში მთავარ ლერძებად შეიძლება ავიღოთ ლერძები 2, 3, 4 და 6. ამიტომ მივიღებთ ახალ ოთხ წერტილოვან კრისტალოგრაფიულ ჯგუფს:

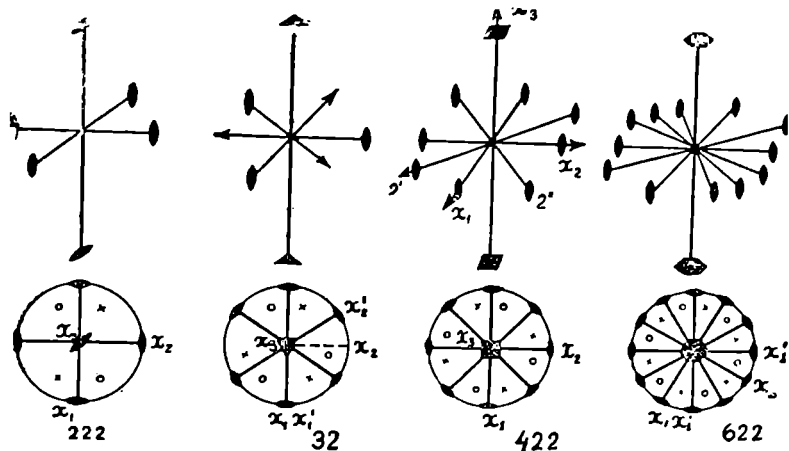
$D_2 = 222$, $D_3 = 322$, $D_4 = 422$, $D_6 = \overline{6}22$. ლერძების განლაგება და შესაბამისი სტერეოგრაფიული გეგმილები მოყვანილია 4.15 ნახაზზე.

222 ჯგუფი შეიცავს სამ ურთიერთმართობ მეორე რიგის ლერძს. ყველა ლერძი ორმხრივია. ეს ჯგუფი მეოთხე რიგისაა და კლინის მეოთხე რიგის ჯგუფის იზომორფულია. ამავე დროს, 222 ჯგუფი კომუტატურია და ამიტომ თითოეული მისი ელემენტი თვითონ ქმნის კლასს.

322 ჯგუფში მთავარი ლერძი მესამე რიგისაა და თუ ავიღებთ მის მართობულად 2 ლერძს, ის მისგან გამოიყვანს კიდეც ორ მეორე რიგის ლერძს; ამიტომ ჰორიზონტალურ სიბრტყეში გაჩნდება სამი ეკვივალენტური მეორე რიგის ლერძი. ეს არის მეექვსე რიგის ჯგუფი, რომელსაც ეკვივალენტური ელემენტების სამი კლასი გააჩნია:

$$E; 3, 3^2; 2(1), 2(2), 2(3).$$

როდესაც მთავარი ლერძის რიგი ლუწია $n=4, 6$, მის მართობ სიბრტყეში ჩნდება, შესაბამისად, ოთხი და ექვსი 2 ლერძი, მაგრამ ამ შემთხვევაში ისინი ყველა ეკვივალენტური არ არიან და იყოფიან ორ კლასად. მართლაც, განვიხილოთ 422 ჯგუფი (ნახ. 4.15). ავირჩიოთ კოორდინატთა სისტემა და 4 ლერძი მივმართოთ x_3 კოორდინატთა ლერძის გასწვრივ, ხოლო მისი მართობული 2 ლერძი x_1 კოორდინატთა ლერძის მიმართულებით. მაშინ 4 ლერძის მოქმედებით $2(x_1)$ ლერძიდან გაჩნდება მხოლოდ მისი ეკვივალენტური $2(x_2)$ ლერძი. დანარჩენი ორი ლერძის მოსაძებნად განვიხილოთ ძირითადი გენერატორების 4 და $2(x_1)$ ლერძების თანამიმდევრული მოქმე-



ნახ. 4.15. კრისტალოგრაფიული წერტილოვანი ჯგუფები და მათი სტერეოგრაფიული გეგმილები.

ღება, ე. ი. ავიღოთ ნამრავლი $42(x_1)$. x_3 ღერძის ირგვლივ 90° ბრუნვის შესაბამისი გარდაქმნა ასე ჩაიწერება: $x_1 \rightarrow x_2$; $x_2 \rightarrow -x_1$; $x_3 \rightarrow x_3$, ხოლო ამ გარდაქმნის მატრიცა

$$A(x_3, 90^\circ) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.25)$$

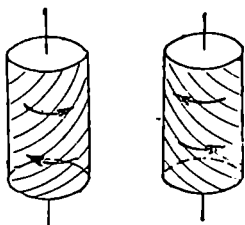
x_1 ღერძის ირგვლივ 180° ბრუნვისათვის მატრიცას ექნება შემდეგი სახე

$$A(x_1, 180^\circ) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.26)$$

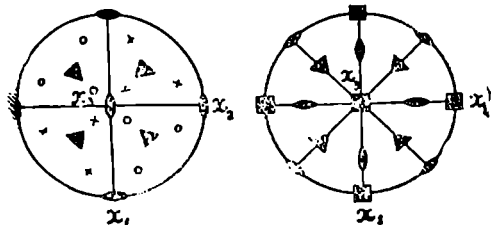
ახლა $42(x_1)$ ნამრავლის შესაბამისი მატრიცისათვის მივიღებთ

$$(a_{ij}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.27)$$

ეს უკანასკნელი მატრიცა შეესაბამება გარდაქმნას $x_1 \rightarrow -x_2$, $x_2 \rightarrow -x_1$ და $x_3 \rightarrow -x_3$. ასეთი გარდაქმნა შეიძლება შეასრულოს მეორე რივის ღერძმა, რომელიც x_1 და x_2 ღერძებთან შეადგენს 45° და x_3 ღერძის მართობია. აღვნიშნოთ ეს ღერძი $2'$, მაშინ 4 ღერძის მოქმედებით ამ ღერძიდან მიიღება $2''$ ღერძი და გაჩნდება ეკვივალენტური ღერძების მეორე წყვილი. ამგვარად, $422 = D_4$ ჯგუფი შეიცავს შემდეგ 8 ელემენტს:



ნახ. 4.16. ოთხ სიმეტრიის ენან-
ტიომორფული ცილინდრები.



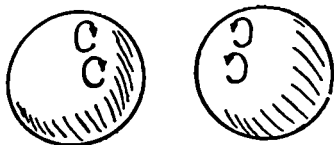
ნახ. 4.17. 23 და 432. წერტილოვანი ჯგუფების
სტერეოგრაფიული გეგმილები.

{ $E, 4, 4^2, 4^3, 2(x_1), 2(x_2), 2', 2''$ }. ასევე მიიღება კრისტალოგრაფიული ჯგუფი 622, რომელიც 12 ელემენტისაგან და 6 კლასისაგან შედგება, და, ბოლოს, ჯგუფების ამავე ტიპს მიეკუთვნება ზღვრული ჯგუფი ოთხ. შესაბამისი სიმეტრიის მქონე ფიგურები ნაჩვენებია 4.16 ნახაზზე.

3. ტეტრაედრის ჯგუფი $T=23$. ამ ჯგუფში შემავალი ღერძები — ოთხი 3 ღერძი და სამი 2 ღერძი წარმოადგენენ ტეტრაედრის სიმეტრიის ღერძებს (ნახ. 4.11 ა). მათი განლაგება სივრცეში მოცემულია 4.12 ნახაზზე. ღერძების ასეთი განლაგება მიიღება, თუ 222 ჯგუფს დაუშვებთ 3 ღერძს, ისე, რომ ყოველ კვადრანტში სამ ურთიერთმართობ 2 ღერძებთან ის ადგენდეს ერთნაირ კუთხეს. მესამე რიგის ღერძები, როგორც ზემოთ იყო ნაჩვენები, იკვეთებიან ტეტრაედრული კუთხით $70^{\circ}31'44''$. ამგვარად, ტეტრაედრის ბრუნვათა ჯგუფი შეიცავს ოთხ ბრუნვას 120° , ოთხ ბრუნვას 240° , სამ ბრუნვას 180° მეორე რიგის ღერძების ირგვლივ და ერთეულოვან ელემენტს ან ბრუნვას 360° . სულ — 12 ელემენტს, და წარმოადგენს მეთორმეტე რიგის ბრუნვების ჯგუფს. 3 ღერძები ყველა ეკვივალენტურია, რადგან $2^{(1)}, 2^{(2)}$, და $2^{(3)}$ ბრუნვებით ისინი ერთმანეთს უთავსდებიან. ასევე ეკვივალენტურია 2 ღერძები, რომელნიც უთავსდებიან ერთმანეთს 3 ღერძის ირგვლივ ბრუნვის შედეგად. შეიძლება დამტკიცდეს, რომ ტეტრაედრის ბრუნვათა ჯგუფი ოთხი ელემენტის გადანაცვლებების ნიშანცვლადი ჯგუფის იზომორფულია. ამისათვის საკმარისია დავენოშროთ ტეტრაედრის წვეროები (ნახ. 4.11 ა), მაშინ თითოეული თვითშეთავსება მოგვცემს ამ წვეროების ნომრების გადანაცვლებას, მაგ., ვერტიკალური 3 ღერძის ირგვლივ ბრუნვა გამოიხატება ოთხი რიცხვის გადანაცვლებით $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 3 & 1 & 4 \end{pmatrix}$ და ა.შ. სულ 12 გადანაცვლება. ყველა ეს გა-

დანაცვლება ლუწია. ამავე დროს, ოთხი ელემენტის ლუწ გადანაცვლებათა რიცხვიც თორმეტია და ამიტომ მათი იზომორფულობა იოლი დასადგენია.

4. ოქტაედრის ჯგუფი $O = 432$ შეიცავს კუბის თვითშეთავსების ყველა ბრუნვას. ის შედგება სამი 4 ლერძისაგან (ნახ. 4.12), ოთხი 3 ლერძისა და ექვსი 2 ლერძისაგან. 4 ლერძები აერთებენ წახნაგების ცენტრებს და ქმნიან სამი ურთიერთმართობი ლერძის სისტემას. 3 ლერძები კუბის დიაგონალებს წარმოადგენენ, ხოლო 2 ლერძები მეოთხე რიგის ლერძების მიმართ 45° არიან განლაგებულნი.



ნახ. 4.18. $oo2$ სიმეტრიის ენანტიომორფული სფეროები.

ოქტაედრის ჯგუფის ელემენტებია 4 — ლერძების ირგვლივ სამ-სამი ბრუნვა 90° , 180° და 270° , ოთხი ბრუნვა 120° , ოთხი ბრუნვა 240° და ექვსი ბრუნვა 180° მეორე რიგის ლერძების ირგვლივ. ერთეულოვან ელემენტთან ერთად ისინი ადგენენ 24 ელემენტისაგან შემდგარ ჯგუფს. ყველა ერთი და იგივე რიგის ლერძი ეკვივალენტურია და ამავე დროს 4 და 3 ლერძები ორმხრივია.

თუ კუბის დიაგონალებს დავნომრავთ, მაშინ იოლი დასადგენია, რომ ამ ოთხი დიაგონალის 24 გადანაცვლება მთლიანად ამოწურავს კუბის ყველა შესაძლებელ ბრუნვას. ეს იმას ნიშნავს, რომ კუბის ბრუნვათა ჯგუფი ოთხი ელემენტის გადანაცვლებათა ჯგუფის იზომორფულია. ტეტრაედრისა და ოქტაედრის წერტილოვან ჯგუფებში შემავალი სიმეტრიის ელემენტების სტერეოგრაფიული გეგმილები ნაჩვენებია 4.17 ნახაზზე.

ბრუნვების წერტილოვანი ჯგუფების აღწერა დავამთავროთ ზღვრული ჯგუფით, რომელიც შეიცავს უსასრულო რიგის ლერძების უსასრულო რიცხვს. ეს ლერძები შეიძლება განლაგებული იყოს ერთმანეთის მიმართ ნებისმიერი კუთხით. ასეთი სიმეტრიის სიმბოლო იქნება $oo2$, ხოლო გეომეტრიული ფიგურა — სფერო, რომლის ყველა წერტილი ერთი გარკვეული მიმართულებით ბრუნავს. იმისდა მიხედვით, თუ რა მიმართულებით ბრუნავენ სფეროს წერტილები, არსებობს სფეროების ორი ენანტიომორფული მოდიფიკაცია — მარჯვენა და მარცხენა (ნახ. 4.18).

ამგვარად, როგორც დავინახეთ, არსებობს სულ 11 წერტილოვანი კრისტალოგრაფიული ჯგუფი, რომელთა ელემენტები წმინდა ბრუნვებია. ასევე წმინდა ბრუნვებს შეიცავს 3 ზღვრული სიმეტრიის ჯგუფი.

მეორე გვარის წარტილოვანი ჯგუფები

ვიდრე შევუდგებოდეთ მეორე გვარის წერტილოვანი ჯგუფების გამოყვანას, გავიხსენოთ ჯგუფების პირდაპირი ნამრავლის ერთი თვისება. ვთქვათ, G წარმოადგენს ჯგუფს, რომელიც არ შეიცავს ინვერსიას $\bar{1}$, ხოლო G' არის ორი ელემენტისაგან შემდგარი ჯგუფი: E და $\bar{1}$, მაშინ ამ

ჯგუფების პირდაპირი ნამრავლი $G \times G'$ იქნება ჯგუფი ორჯერ მეტი ელემენტების რიცხვით, ვიდრე G ჯგუფია. ამ ელემენტების ნახევარი თანხვდება G ჯგუფის ელემენტებს, ხოლო მეორე ნახევარი მიიღება G ჯგუფის ელემენტებზე $\bar{1}$ ოპერატორის მოქმედებით. ვინაიდან ოპერატორი $\bar{1}$ კომუტირებს ნებისმიერ სხვა ელემენტთან, ცხადია, რომ $G \times G'$ ჯგუფი შეიცავს კლასების ორჯერ მეტ რიცხვს G ჯგუფთან შედარებით. ერთი ნახევარი კლასებისა იქნება G ჯგუფის კლასები, ხოლო მეორე ნახევარი—იგივე კლასები, გამრავლებული $\bar{1}$.

განვიხილოთ ყველა შესაძლებელი წერტილოვანი ჯგუფი, რომელიც მიიღებინ თერთმეტი ბრუნვის წერტილოვანი ჯგუფიდან ინვერსიის ოპერაციის დამატების შედეგად. ჩვენ გეჭონდა ჯგუფები:

1, 2, 3, 4, 6, 222, 32, 422, 622, 23, 432.

პირველი რიგის ღერძისა და ინვერსიის მოქმედება მოგვცემს წმინდა ინვერსიის ჯგუფს $\bar{1}$, რომელიც შედგება ორი კლასისაგან: E და $\bar{1}$,

2 ღერძისა და ინვერსიის ერთობლივი მოქმედება უკვე განხილული იყო ზემოთ. ამ შემთხვევაში ჯგუფში იქნება აგრეთვე სიმეტრიის სიბრტყე, რომელიც 2 ღერძის მართობულია. ჯგუფის საერთაშორისო აღნიშვნა არის $\frac{2}{m}$. ის შეიცავს ოთხ ელემენტს: $\frac{2}{m} \{E, 2, \bar{1}, m_{\perp}\}$. $\frac{2}{m}$ ჯგუფის ძირითად გენერატორებს წარმოადგენენ $\{2^{(x_2)}, \bar{1}\}$. ამ ჯგუფში 2 ღერძს ყოველთვის x_2 კოორდინატთა ღერძის გასწვრივ ირჩევენ, მაშინ m სიბრტყე $x_1 O x_3$ კოორდინატთა სიბრტყეზე გაივლის.

ეს უნდა გავითვალისწინოთ $\frac{2}{m}$ ჯგუფის მატრიცული წარმოდგენის დროს. 2 ოპერატორის შესაბამისი მატრიცა, ამ შემთხვევაში, იქნება

$$A(x_2, 180^\circ) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.28)$$

m სიბრტყეში არეკვლის ოპერაციასთან დაკავშირებულია გარდაქმნის მატრიცა

$$A(m \perp x_2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.29)$$

ინვერსიის ($\bar{1}$) ოპერაციის მატრიცული წარმოდგენა $A(\bar{1}) =$
 $= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$ და ბოლოს იგივეური გარდაქმნის მატრიცა $A(E) =$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \text{ ეს ოთხი არაეკვივალენტური მატრიცა, რომელნიც } \frac{2}{m} \text{ ჯგუფ-}$$

ში შემავალ სხვადასხვა სიმეტრიის ოპერაციებს შეესაბამებია, ქმნიან ამ ჯგუფის მატრიცულ წარმოდგენას. ამის დასამტკიცებლად საკმარისია ვაჩვენოთ, რომ $\frac{2}{m}$ ჯგუფის ელემენტებსა და მატრიცების ჯგუფებს შორის არსებობს იზომორფული გარდასახვა. ამის ჩვენება იოლია, თუ გამოვიყენებთ $\left(\frac{2}{m}\right)$ ჯგუფის ელემენტების გამრავლების ცხრილს, რომელიც მოყვანილი იყო ზემოთ (I, §-5). იქვე ნაჩვენებია, რომ $\frac{2}{m}$ ჯგუფის ელემენტების $\chi(g)$ ხასიათი ყველა ვექტორულ ორთოგონალურ წარმოდგენებში იქნება ტოლი (1.95):

$$\chi(1)=3, \quad \chi(2)=-1, \quad \chi(m)=1, \quad \chi(\bar{1})=-3,$$

ხოლო ამ ჯგუფის ელემენტების ხასიათები ყველა დაუყვანი წარმოდგენებისათვის მოყვანილი იყო (1.4) ცხრილში. ანალოგიურად შეიძლება მივიღოთ ნებისმიერი სხვა ჯგუფის მატრიცული წარმოდგენაც.

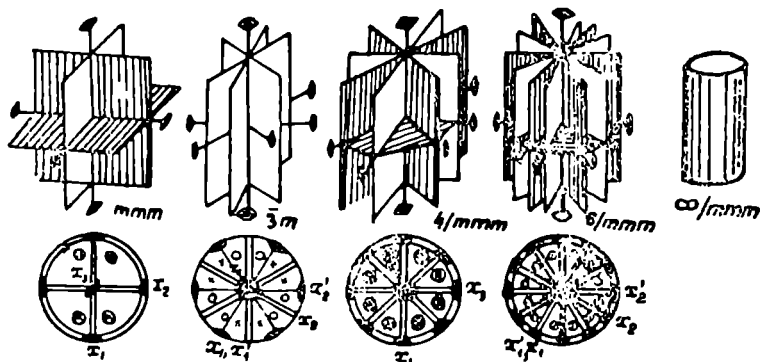
თუ 3 ლერძს დავემატებთ ინვერსიის ცენტრს, მივიღებთ მესამე რიგის ინვერსიულ ლერძს $\bar{3}$ (ან მეექვსე რიგის სარკულ ლერძს S_6).

ჯგუფი $\bar{3}$ წარმოადგენს 6 ელემენტისაგან შემდგარ აბელის ჯგუფს. ასევე, სიმეტრიის ცენტრის დამატება 4 და 6 ლერძებისადმი გვაძლევს ორ ჯგუფს — $4/m$ და $6/m$. ეს სიმბოლოები გვიჩვენებენ, რომ ამ ჯგუფში 2, 4, 6 ლერძების მართობულად მდებარეობს სიმეტრიის m სიბრტყე. ამ შემთხვევაში სიმეტრიის სიბრტყე წარმოიშობა როგორც ლუწი რიგის ლერძისა და ინვერსიის ცენტრის ერთობლივი მოქმედების შედეგი. ეს ჯგუფები, შესაბამისად, 8 და 12 ელემენტისაგან შედგებიან.

$V=222$ ჯგუფზე სიმეტრიის ცენტრის დამატება გვაძლევს ჯგუფს, რომლის აღნიშვნა არის mmm (ნახ. 4.19). ეს არის 8 ელემენტისაგან შემდგარი ჯგუფი. მის ძირითად ოთხ ელემენტს $E, 2(x_1), 2(x_2), 2(x_3)$ ემატება სიმეტრიის ცენტრი $\bar{1}$ და სამი ურთიერთმართობი სიბრტყე, რომელნიც მეორე რიგის ლერძებისა და სიმეტრიის ცენტრის მოქმედებით წარმოიშობიან

$$\{E, 2(x_1), 2(x_2), 2(x_3), \bar{1} m_h, m_v', m_v''\},$$

32 ჯგუფი მეექვსე რიგის ჯგუფია (ნახ. 4.15). სიმეტრიის ცენტრის დამატება აორკეცებს მისი ელემენტების რიცხვს და მიიღება მეთორმეტე რიგის ჯგუფი $\bar{3}m$ (ნახ. 4.19). 3 ლერძი გარდაიქმნება მესამე რიგის ინვერსიულ ლერძად, ხოლო მის მართობულად მდებარე სამი 2 ლერძისა



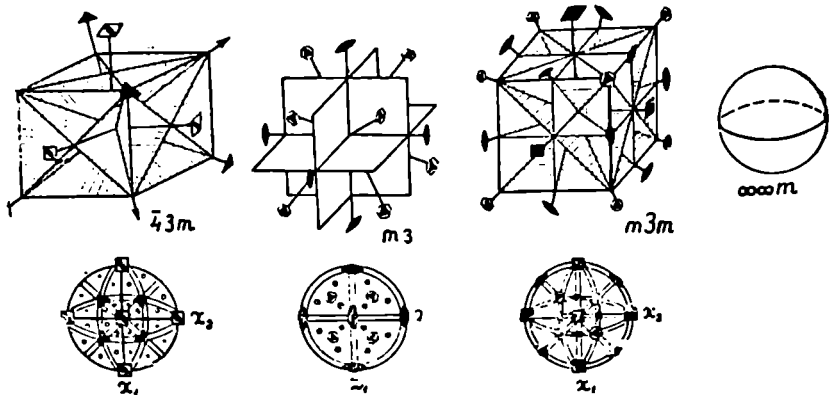
ნახ. 4.19. კრისტალოგრაფიული წერტილოვანი ჯგუფები და შესაბამისი სიმეტრიის ზღვრული ჯგუფის ფიგურა.

და ინვერსიის ცენტრის ერთობლივი მოქმედება, როგორც ვიცით, წარმოშობს ამ ღერძების მართობულ სამ სიმეტრიის სიბრტყეს. ამიტომ ამ ჯგუფის უფრო სრული ჩაწერა ხდება ასე $\bar{3} \frac{2}{m}$; ჯგუფის შემქმნელი გენერატორებია $\{3, \bar{1}, 2(x_1)\}$.

422 ჯგუფისა და სიმეტრიის ცენტრის ერთობლივი მოქმედება ქმნის $4/mmm$ ჯგუფს, რომელიც სწორი ოთხკუთხა პრიზმის სიმეტრიას ახასიათებს და შეიცავს 16 ელემენტს. ესენი იქნებიან: იგივეური გარდაქმნა E , ორი ბრუნვა 4 ღერძის ირგვლივ $\pm \frac{\pi}{2}$ კუთხით, ერთი ბრუნვა π კუთხით 4 ღერძის ირგვლივ, ოთხი ბრუნვა π კუთხით 2 და 2' წყვილი ღერძების ირგვლივ და სიმეტრიის ცენტრი. სიმეტრიის ცენტრისა და 2 ღერძის კომბინაცია წარმოშობს 4 ვერტიკალურ და ერთ ჰორიზონტალურ სიბრტყეს (ნახ. 4.19), ხოლო 4 ღერძი გარდაიქმნება მეოთხე რიგის ინვერსიულ ღერძად — $\bar{4}$ ორი ბრუნვით.

ასეთივე სურათი იქნება 622 ჯგუფის შემთხვევაშიც, რომელიც სიმეტრიის ცენტრის მოქმედებით გარდაიქმნება $6/mmm$ ჯგუფად 24 ელემენტით (ნახ. 4.19). ჯგუფის გენერატორებია $\{3, 2, \bar{1}, 2(x_1)\}$ (6 ღერძის მაგივრად აღებულია 3 და 2 ღერძების კომბინაცია).

ახლა განვიხილოთ ტეტრაედრის ჯგუფი $T=23$ და დავუმატოთ მას სიმეტრიის ცენტრი. 4.12 ნახაზზე მოცემულია ღერძების განლაგება ამ ჯგუფში. სიმეტრიის ცენტრის დამატებით ვიღებთ ახალ ჯგუფს $m\bar{3}$, რომ-



ნახ. 4.20. კუბური სიმეტრიის წერტილოვანი ჯგუფები და $ooo m$ სიმეტრიის ზღერული ჯგუფის შესაბამისი ფიგურა.

ლის გენერატორები იქნებიან ტეტრაედრის ჯგუფში შემავალი მესამე და მეორე რიგის ღერძები და სიმეტრიის ცენტრი $\{3, \bar{1}, 2\}$. ჯგუფის სიმეტრიის ელემენტების განლაგება, მათი სტერეოგრაფიული გეგმილები მოცემულია 4.20 ნახაზზე. ცხადია, სამი ურთიერთმართობი 2 ღერძის მიმართ სიმეტრიის ცენტრის დამატება წარმოშობს სამ ურთიერთმართობ სიბრტყეს, ხოლო ოთხი მესამე რიგის ღერძი გარდაიქმნება ინვერსიულ ღერძად ან მეექვსე რიგის სარკულ S_6 ღერძად. ამის შემოწმება შეიძლება უშუალოდ: თუ ინვერსიის ოპერატორს $\bar{1}$ ან მის შესაბამის მატრიცას გადავამრავლებთ მესამე რიგის ღერძის ირგვლივ ბრუნვის ოპერატორზე, მივიღებთ $\bar{1} \cdot 3^1 = S_6^5$, ე. ი. სარკულ ბრუნვას 3 ღერძის ირგვლივ 300° -ზე. ასევე, $\bar{1} \cdot 3^2 = S_6^1$, და ა. შ. ამრიგად, მიიღება რვა დამატებითი ბრუნვა და სამი სიბრტყისა და ინვერსიის ცენტრთან ერთად 12 ახალი ელემენტი. სულ ამ ჯგუფს აქვს 24 ელემენტი.

ბოლოს სიმეტრიის ცენტრი ვამოქმედოთ ოქტაედრის ბრუნვების ჯგუფზე. ასეთ შემთხვევაში მიიღება ჯგუფი $m3m$ (ნახ. 4.20), რომელიც კუბის სიმეტრიის ჯგუფს წარმოადგენს. ბრუნვათა ჯგუფის 24 ელემენტის დამატებით $m3m$ ჯგუფში იქნება სამი არეკვლა კუბის წახნაგების პარალელურ სიბრტყეებში; ექვსი სიბრტყე, რომელნიც კუბის საწინააღმდეგო წახნაგების დიაგონალებზე გაივლიან, ინვერსიის ცენტრი, რვა ბრუნვა S_6 ღერძების ირგვლივ (3 — ღერძებისა და სიმეტრიის ცენტრის მოქმედების შედეგად) და ექვსი სარკული ბრუნვა S_4 ღერძის ირგვლივ 90° და 270° ; სულ 48 ელემენტი, რომელნიც თორმეტ ეკვივალენტურ კლასში ნაწილდება. ეს არის უმაღლესი სიმეტრიის წერტილოვანი ჯგუფი.

ამგვარად, ჩვენ მივიღეთ 22 წერტილოვანი ჯგუფი. ამ ჯგუფებიდან,

ცხადია, პირველი 11 ჯგუფი უკანასკნელ ჯგუფების ქვეჯგუფებში ჩარმო-
ადგენენ:

$$1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad 6 \quad 222 \quad 32 \quad 422 \quad 622 \quad 23 \quad 432 \quad (I)$$

$$\bar{1} \quad \frac{2}{m}, \quad \bar{3}, \quad \frac{4}{m}, \quad \frac{6}{m}, \quad mmm \quad \bar{3}m, \quad \frac{4}{mmm}, \quad \frac{6}{mmm}, \quad m3, \quad m3m \quad (II)$$

წერტილოვანი ჯგუფების ამ მწკრივს უნდა დაემატოს კიდევ ზღვრულ-
ლი ჯგუფი, რომელიც შეიცავს უსასრულო რიგის ღერძს და მის მართობ
მეორე რიგის ღერძების უსასრულო რიცხვს, ვერტიკალური სიბრტყეების
უსასრულო რიცხვს, ერთ ჰორიზონტალურ სიბრტყეს და სიმეტრიის
ცენტრს. ამ ჯგუფის განსახიერებას წარმოადგენს ცილინდრი (ნახ. 4.19),
ხოლო მისი სიმბოლო იქნება ∞/mmm .

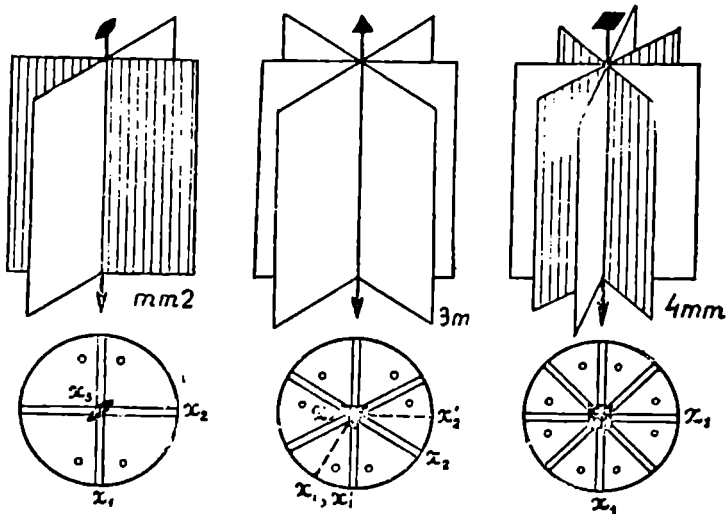
კრისტალებისათვის დასაშვები სიმეტრიის ელემენტებისაგან განხი-
ლული იყო სიმეტრიის ღერძების ყველა შესაძლებელი კომბინაცია და
მათი ინვერსიის ოპერაციასთან ურთიერთქმედება. ახლა ავიღოთ დამატე-
ბითი ოპერატორის სახით სიმეტრიის სიბრტყე m . ჯერ შემოვიხაზოთ
შემთხვევით, როდესაც აღებულია ერთი სიმეტრიის ღერძი. მაშინ სიმეტ-
რიის სიბრტყე შეიძლება იყოს მისი მართობული ან პარალელური. გან-
ვიხილოთ ღერძის პარალელური (ღერძზე გამავალი) სიმეტრიის სიბრტყის
შემთხვევა. როგორც ვიცით, თუ n -ური რიგის ღერძზე გატარებულია სი-
მეტრიის სიბრტყე, ღერძის მოქმედებით კიდევ გამოიყვანება $(n-1)$ სი-
ბრტყე. ეს სიბრტყეები ღერძზე იკვეთებიან და ერთმანეთთან ადგენენ $\frac{\pi}{n}$

კუთხეს. ასეთი ტიპის ჯგუფების საერთო სიმბოლო არის C_{nv} , ეს ჯგუფები
შედგებიან $2n$ ელემენტისაგან: n — ბრუნვა ღერძის ირგვლივ და n —
არეკვლა სიბრტყეებში. ზემოთ ნაჩვენები იყო, რომ ღერძი ამ შემთხვევა-
ში ორმხრივი იქნება. C_{nv} ჯგუფები წარმოადგენენ სწორ n -კუთხა პირამი-
დის სიმეტრიის ჯგუფებს. თუ n კენტია, თითოეული სიბრტყე გაივლის
პირამიდის ერთ-ერთ წიბოზე და შუაზე გაყოფს მოპირდაპირე წახნაგს.
თუ n ლუწია, სიბრტყეების ნახევარი გაივლის მოპირდაპირე წიბოებზე,
ხოლო მეორე ნახევარი — მოპირდაპირე წახნაგების შუაში.

ამგვარად, კრისტალებში დასაშვები 1, 2, 3, 4, 6 რიგის ღერძების
შესაბამისად მიიღება ხუთი ახალი სიმეტრიის წერტილოვანი ჯგუფი.
საერთაშორისო აღნიშვნებში ღერძისა და სიბრტყის პარალელურობას
აღნიშნავენ მათ გვერდზე დაწერით, ამიტომ:

$$m, \quad 2mm, \quad 3m, \quad 4mm, \quad 6mm. \quad (III)$$

4.21 ნახაზზე მოცემულია $2mm$, $3m$ და $4mm$ ჯგუფებისათვის დამახა-
სიათებელი სიბრტყეების განლაგება. ჯგუფების ამავე მწკრივს მიეკუთვ-
ნება ზღვრული ჯგუფი, რომელიც ∞ რიგის ღერძსა და მასზე გამავალ სი-

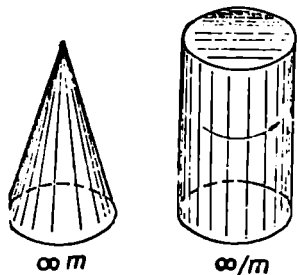


ნახ. 4.21. კრისტალოგრაფიული წერტილოვანი ჯგუფები.

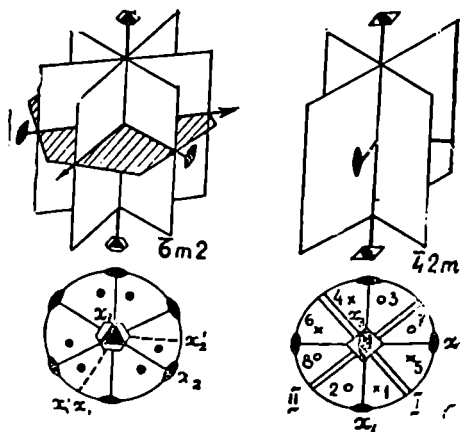
მეტრიის სიბრტყეების უსასრულო რიცხვს შეიცავს (ნახ. 4.22). მისი სიმბოლოა $\infty \cdot m$.

ახლა განვიხილოთ შემთხვევა, როდესაც სიმეტრიის სიბრტყე ღერძის მართობულია. ლუწი რიგი ღერძებისათვის ახალ ჯგუფს აქ ვერ მივიღებთ, ვინაიდან ასეთი ღერძისა და ინვერსიის ურთიერთქმედება გვაძლევდა ღერძის მართობულ სიბრტყეებს. გვრჩება მხოლოდ მესამე რიგის სიმეტრიის ღერძი და მისდამი მართობული სიბრტყე, რაც მეექვსე რიგის ინვერსიული ღერძის ეკვივალენტურია (ნახ. 4.13). ამ ჯგუფს აღნიშნავენ $\bar{6}(3, m_h)$. E ერთეულოვანი ელემენტის გარდა ის შეიცავს 2 ბრუნვას 3 ღერძის ირგვლივ, არეკვლას m_h სიბრტყეში და ორ ბრუნვას S_6 ღერძის ირგვლივ. წერტილოვანი ჯგუფების ეს რიგი მთავრდება ზღვრული ჯგუფით როდესაც სიმეტრიის სიბრტყე აღებულია უსასრულო რიგის სიმეტრიის ღერძის მართობულად ∞/m . ეს ჯგუფი გამოხატავს მბრუნავე ცილინდრის სიმეტრიას (ნახ. 4.22).

222, 32, 422 და 622 ჯგუფებში მეორე რიგის ღერძებზე გამავალი ჰორიზონტალური სიმეტრიის სიბრტყის დამატება ავტომატურად იწვევს ვერტიკალური სიბრტყეების წარმოშობას, რომელნიც ვერტიკალურ (მთავარ) ღერძზე და ერთ-ერთ მეორე რიგის ღერძზე გაივლიან. თუ მთავარი ღერძის რიგი ლუწია, მისი გადაკვეთა ჰორიზონტალურ სიბრტყესთან მოგვცემს ინვერსიის ცენტრს და წარმოიშობა ჯგუფები, რომელნიც ზემოთ უკვე გვქონდა განხილული. ახალ ჯგუფს, ამ შემთხვევაში, მივი-



ნახ. 4.22. ∞m და ∞/m სიმეტრიის ზღერული ჭგუფების შესაბამისი ფიგურები.



ნახ. 4.23. კრისტალოგრაფიული წერტილოვანი ჭგუფები.

ლებთ მხოლოდ 32 ჭგუფის მიმართ ჰორიზონტალური სიბრტყის დამატებით (ნახ. 4.23). 3 ლერძი მართობული სიბრტყის მეოხებით გარდაიქმნება მესამე რიგის სარკულ ან მეექვსე რიგის ინვერსიულ \bar{n} ლერძად და გაჩნდება სამი ვერტიკალური სიბრტყე. ამ ჭგუფს აღნიშნავენ $\bar{n} m 2$ სიმბოლოთი. ეს არის მეთორმეტე რიგის ჭგუფი. მისი გენერატორებია $\{3, 2, m(x_i)\}$. ვინაიდან არეკვლა m_h კომუტირებს ჭგუფის ყველა სხვა ელემენტთან, ჭგუფის $\bar{n} m 2$ შეიძლება წარმოვიდგინოთ როგორც პირდაპირი ნამრაველი 32 ჭგუფისა m ჭგუფზე, რომელიც ორ ელემენტს $\{E, m_h\}$ შეიცავს. აქედან, ცხადია, რომ ეკვივალენტური ელემენტების კლასები აქ იქნება ორჯერ მეტი, ვიდრე 32 ჭგუფში.

არის კიდევ ერთი საშუალება, რომლითაც შეიძლება გავატაროთ სიმეტრიის სიბრტყეები ლერძების მიმართ. მაგალითად, შეიძლება გავატაროთ ვერტიკალური სიმეტრიის სიბრტყე ისე, რომ მან შუაზე გაყოს კუთხე ჰორიზონტალურ სიბრტყეში მყოფ მეორე რიგის ლერძებს შორის (დიაგონალური სიბრტყეები). თუ მთავარი ლერძი n -ური რიგისაა, გაჩნდება კიდევ $(n-1)$ ასეთი ვერტიკალური სიბრტყე. კენტი n -ის შემთხვევაში 2 ლერძები სიმეტრიის სიბრტყეების მართობულია და ამიტომ ჩნდება სიმეტრიის ცენტრი, ხოლო მთავარი ლერძი გადადის ინვერსიულში. მესამე რიგის ლერძის შემთხვევაში ასეთ ჭგუფს ჩვენ უკვე გავეცანით, ეს იყო ჭგუფი $\bar{3}m$. ამ გჯუფში შედის მეექვსე რიგის სარკული ლერძი S_{2n} . საზოგადოდ, შეიძლება დამტკიცდეს (ეს მკაფიოდ ჩანს $\bar{3}m$ ჭგუფის სტე-

რეოგრაფიული გეგმილიდან, ნახ. 4.19), რომ ვერტიკალური სიბრტყეების შემთხვევაში n -ური რიგის ღერძი მოქმედებს როგორც $2n$ რიგის სარკული ღერძი ბრუნვებით S_{2n}^{k+1} , სადაც $k=0,1,\dots,(n-1)$. აქედან, ცხადია, რომ 4 და 6 რიგის ღერძებისათვის დიაგონალური სიბრტყეების გავლება შეუძლებელია. რჩება მხოლოდ ერთი შემთხვევა — ჯგუფი 222. ამ ჯგუფში გაივლის ორი დიაგონალური სიბრტყე და მეორე რიგის ვერტიკალური ღერძი გარდაიქმნება მეოთხე რიგის სარკულ ან ინვერსიულ ღერძად. ჯგუფის სიმბოლო იქნება $\overline{4}2m$ (ნახ. 4.23). ამის შემოწმება შეიძლება უშუალოდ, თუ ავიღებთ ელემენტების შესაბამის მატრიცებს ჩვენ მიერ არჩეულ კოორდინატთა სისტემაში მაგ., x_1 ღერძის გასწვრივ მდებარე 2 ღერძისათვის

$$A(x_1, 180^\circ) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$$

ხოლო დიაგონალური სიბრტყისათვის, რომელიც 2 ღერძთან ადგენს 45° კუთხეს

$$A(m, 45^\circ - x_1) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.30)$$

ავიღოთ მათი ნამრავლი

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} = A(\bar{4}) \quad (4.31)$$

(4.31) მატრიცა შეესაბამება მეოთხე რიგის სარკული ღერძის $\bar{4}$ მოქმედებას. ამგვარად $\overline{4}2m$ ჯგუფის სიმეტრიის ელემენტები იქნება $\{E, 2, 2', 2'', m_\sigma', m_\sigma''\}$ და ორი ბრუნვა $\bar{4}$ ღერძის ირგვლივ}.

სიმეტრიის ცენტრის დამატებით 23 ჯგუფში (ნახ. 4.12) წარმოიშვა სიბრტყეები, რომელნიც ორი მეორე რიგის ღერძზე გადიოდნენ მესამე 2 ღერძის მართობულად. მაგრამ ამ ჯგუფში, როგორც ნახაზიდან ჩანს, არის სიბრტყეების გატარების კიდევ ერთი შესაძლებლობა, როდესაც სიმეტრიის სიბრტყე გაივლის ერთი მეორე რიგისა და ორი მესამე რიგის ღერძებზე (დიაგონალურად). ასეთი სახით შეიძლება 6 ახალი სიმეტრიის m სიბრტყის გავლება (ნახ. 4.20). ეს არის ტეტრაედრის სრული სიმეტრიის ჯგუფი და აღინიშნება $\bar{4}3m$. ჯგუფი შედგება 24 ელემენტისაგან. მისი ელემენტებია $\{E, 8 \text{ ბრუნვა } 3 \text{ ღერძის ირგვლივ, } 3 \text{ ბრუნვა } 2 \text{ ღერძის ირგვლივ, } 6m \text{ და } 6 \text{ ბრუნვა } \bar{4} \text{ ღერძის ირგვლივ}\}$.

ამით ამოიწურა სიმეტრიის სიბრტყის გავლების ყველა შესაძლებლობა. დამოუკიდებელი სიმეტრიის ელემენტებიდან დაგვრჩება მხოლოდ მეოთხე რიგის ინვერსიული ღერძი (4), რომელიც სხვა ღერძებთან და სიბრტყეებთან კომბინაციაში უკვე განხილული იყო ზემოთ. ამიტომ საკმარისია დანარჩენ წერტილოვან ჯგუფებს დავუმატოთ კიდევ ერთი და კრისტალოგრაფიული წერტილოვანი ჯგუფების რიცხვი გახდება 32. ზღვრული სიმეტრიის ექვს ჯგუფსაც შესაძლებელია დავუმატოთ ერთი უმაღლესი სიმეტრიის ჯგუფი, რომელიც უსასრულო რიგის ღერძებისა და სიბრტყეების ნებისმიერ კომბინაციებს შეიცავს. ეს არის სფეროს სიმეტრია და აღინიშნება $oo\infty m$ (ნახ. 4.20).

წარბილოვანი ჯგუფების აღნიშვნები. კრისტალური კლასები. სინგონიები

ყველა კრისტალი, რომელთა სიმეტრია ერთი და იგივე წერტილოვანი ჯგუფით ხასიათდება, მიეკუთვნება ერთ კრისტალურ კლასს. აქედან. ცხადია, კრისტალური კლასების რიცხვი უდრის კრისტალოგრაფიულ წერტილოვანი ჯგუფების რიცხვს. როგორც დავინახეთ, არსებობს 32 წერტილოვანი ჯგუფი და, მაშასადამე, 32 კრისტალური კლასი.

წერტილოვანი ჯგუფებისათვის შემოღებულია სხვადასხვა სახის აღნიშვნები. ლიტერატურაში ძირითადად დამკვიდრდა ორი ტიპის აღნიშვნები. პირველი მათგანი შემოღებულია შენფლისის მიერ. ერთი ღერძის მქონე ციკლური ჯგუფები აღინიშნება C_n ასოთი, სათანადო ინდექსით, მაგ., C_n . თუ C_n ღერძის მართობულად აღებულია მეორე რიგის ღერძი, ჯგუფებს აღნიშნავენ D_n სიმბოლოთი. h და s ინდექსების დამატება ნიშნავს მართობული და პარალელური სიბრტყეების არსებობას. თუ ჯგუფში ერთი ღერძია, ივლისსხმება, რომ ის ვერტიკალურია. რამდენიმე ღერძის არსებობის შემთხვევაში ვერტიკალურად ითვლება უმაღლესი რიგის ღერძი. ასე, მაგალითად, ჯგუფი D_{3h} ნიშნავს, რომ ვერტიკალურად აღებულია 3 ღერძი, ხოლო მის მართობად — სიმეტრიის სიბრტყე და მეორე რიგის ღერძები.

მეორე ტიპის სიმბოლოები საერთაშორისო აღნიშვნებია და თანამედროვე ლიტერატურაში უმეტესად ისინი იხმარება. ამ აღნიშვნების პრინციპი მდგომარეობს შემდეგში: აღებულია ძირითადი გენერატორები, რომელნიც ქმნიან ჯგუფს და მათი სიმბოლოები დაწერილი ერთმანეთის გვერდით, აღნიშნავენ სამი სივრცობრივი მიმართულების სიმეტრიას. ამით ერთდროულად ნაჩვენებია კოორდინატთა სისტემა, რომელშიც წერტილოვანი ჯგუფის აღწერა არის უმჯობესი. ღერძები პირდაპირ ციფრებით აღინიშნება, ხოლო ღერძების მიმართ მართობი სიბრტყე გამოიყოფა მისგან წილადის ხაზით. თუ სიბრტყის სიმბოლო ღერძის ან მეორე სი-

ბრტყის გვერდით არის დაწერილი, ეს მათ პარალელურობაზე მიუთითებს. მაგ., $4mm$ ნიშნავს, რომ მეოთხე რიგის ღერძის პარალელურად აღებულია სიბრტყე m . ამ ორი გენერატორის ურთიერთქმედების შედეგად წარმოიშობა კიდევ ერთი სიბრტყე, რომელიც პირველი სიბრტყის არაეკვივალენტურია. x_1 და x_2 კოორდინატთა ღერძები შეიძლება ავიჩიოთ ამ ორი სიბრტყის მართობად. x_3 ღერძი 4 ღერძის გასწვრივ გაივლის. ასეთ კოორდინატთა სისტემაში ეს ჯგუფი აიწერება ყველაზე მარტივად.

ჯგუფი $4/mmm$. ეს არის ჯგუფის სიმბოლოს შემოკლებული ჩაწერა.

ფაქტიურად, ის ასე იწერება $\frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$, რაც იმას ნიშნავს, რომ ამ ჯგუფ-

ში არის 4 ღერძი და მისი მართობული სიბრტყე. ამ სიბრტყეში იმყოფება მეორე რიგის ღერძები, რომელნიც აგრეთვე სიბრტყეების მართობებია და მათ გასწვრივ სასურველია კოორდინატთა ღერძების არჩევა.

32 კრისტალური კლასისა და აგრეთვე ზღვრული სიმეტრიის 7 კლასის აღნიშვნები, ორივე ტიპის სიმბოლოებით, მოყვანილია ცხრილში (4.1).

ზემოთ ნაჩვენები იყო (§ 8), რომ კრისტალებში შესაძლებელია ავიჩიოთ შვიდი სხვადასხვა კოორდინატთა სისტემა თავისი ბაზისური ვექტორებით და კუთხვებით. ამის მიხედვით ახდენენ ყველა კრისტალის კლასიფიკაციას შვიდ კრისტალოგრაფიულ სისტემად ან სინგონიად. ახლა დავუბრუნდეთ ამ საკითხს და დავუკავშიროთ კრისტალების კლასიფიკაცია მათ სიმეტრიას. ჩვენ მიერ გამოყვანილი 32 კრისტალოგრაფიული წერტილოვანი ჯგუფიდან პირველი 11 ჯგუფი (I) მხოლოდ სიმეტრიის ღერძებს შეიცავს, ხოლო ჯგუფების მეორე (II) მწკრივი მიიღება (I) მწკრივის ჯგუფებზე სიმეტრიის ცენტრის დამატებით. მესამე 10 ჯგუფს ვღებულობთ (I) მწკრივის მიმართ სიმეტრიის სიბრტყეების დამატებით, მაგრამ სიმეტრიის სიბრტყეები გვხვდება აგრეთვე (II) მწკრივის ჯგუფებში, როგორც ლუწი რიგის ღერძებისა და სიმეტრიის ცენტრის ურთიერთქმედების შედეგი. ამგვარად, (II) მწკრივის ზოგიერთი ჯგუფი ღერძებისა და სიმეტრიის ცენტრს გარდა შეიცავს სიმეტრიის სიბრტყეებსაც და, მაშასადამე, უმაღლესი სიმეტრიის მატარებელ ჯგუფებს წარმოადგენენ. ასეთ ჯგუფებს ჰოლოედრული ჯგუფები ეწოდება. თუ დავაკვირდებით (II) მწკრივის ჯგუფებს, დავინახავთ, რომ იქ მყოფი 11 ჯგუფიდან მხოლოდ 7 ჯგუფი არის ჰოლოედრული: $\bar{1}$, $\frac{2}{m}$, mmm , $\frac{4}{mmm}$, $\bar{3}m$, $\frac{6}{mmm}$ $m\bar{3}m$. იოლი დასადგენია, რომ ყველა დანარჩენი 32 ჯგუფი ამ 7 ჰოლოედრული ჯგუფის ქვეჯგუფებია. მაგალითად, $2/m$ ჯგუფისათვის 2 და m ქვეჯგუფებს წარმოადგენენ და ა. შ.

ამგვარად, 32 კრისტალური კლასი იყოფა 7 კრისტალურ სისტემად. თითოეული სისტემის სათავეში დგას უმაღლესი (ჰოლოედრული) სიმეტრიის კლასი, ხოლო ამ სისტემაში შემავალი სხვა კლასები მის ქვეჯგუ-

ცხრილი 4.1

№	კლასის სიმბოლო		№	კლასის სიმბოლო		№	კლასის სიმბოლო		№	კლასის სიმბოლო		№	კლასის სიმბოლო		№	კლასის სიმბოლო		№		
	საყადღადსანი	დიჟანენენ		საყადღადსანი	დიჟანენენ		საყადღადსანი	დიჟანენენ		საყადღადსანი	დიჟანენენ		საყადღადსანი	დიჟანენენ		საყადღადსანი	დიჟანენენ		საყადღადსანი	დიჟანენენ
1	1	C ₁	6	1	C ₁	14	2000	C ₂₀	18	222	D ₂	22	0000	D _{2h}	28	23	T	30	43m	T _d
2	2	C ₂	7	m=2	C ₂	15	3m	C ₃₀	19	32	D ₃	23	6	m2	29	432	0	31	m3	T _h
3	3	C ₃	8	3	S ₆	16	4000	C ₄₀	20	422	D ₄	24	4/m000	D _{4h}	.	.	.	32	m300	O _h
4	4	C ₄	9	4	S ₄	17	6000	C ₆₀	21	622	D ₆	25	6/m000	D _{6h}
5	6	C ₆	10	6	C _{3h}	26	42m	D _{2d}
.	.	.	11	2/m	C _{2h}	27	3m	D _{3d}
.	.	.	12	4/m	C _{4h}
.	.	.	13	6/m	C _{6h}
1	∞	.	2	∞/m	.	3	∞00	.	4	∞2	.	5	∞/0000	.	6	∞∞2	.	7	∞∞∞0	

№	(აბრევიატურა) სიმეტრიული სიმეტრიული	ფენესტრი	სიმეტრიული გარდაქმნები (ჯგუფის ელემენტები)	სიმეტრიული ელემენტების და კოორდინატთა სისტემების განლაგება	სიმეტრიული ელემენტების და კოორდინატთა სისტემების განლაგება
1	ტრიკლინიკური	$1 \overline{1}$	$E, J = \overline{1}$	—	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$
მონოკლინიკური	M	m	E, m_h	$2 \parallel b$ ლერძის ან 010 მიმართული	$a \neq b \neq c$
		$2/m$	$E, 2(\text{ბრუნვა } 180^\circ)$ $E, 2, \overline{1}, m_h$	$2 \parallel b$ ლერძის ან 010 მიმართული	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
რომბული	0	$2mm$	$E, 2, m_h', m_h''$	$2 \parallel [001]$	$a \neq b \neq c$
		222 mmm	$E, 2, 2', 2''$	$m \perp [100], [010]$	$a = b = \gamma = 90^\circ$
ტეტრაგონალური		4	$E, 2, 2', 2'', \overline{1}, m_h, m_h', m_h''$	$2 \parallel [100], [010]$	$a \neq b \neq c$
		$\overline{4}$	$E, 4(90^\circ), 4^2 = 2(180^\circ), 4^3(270^\circ)$	4 სიმბოლოს პირველი აღმართული	$a = b \neq c$
		$4/m$	$E, \overline{4}(2) = (m4, m4^3), 4^2 = 2$	4 ლი, ე.ი. 4 ლერძი $\parallel [001]$	
		$4/mmm$	$E, 4, 4^2, 4^3, \overline{1}, \overline{4}(2), m_h$	8 მიმართულებს	
		$\overline{4} 2m$	$E, 2, 2', 2'', m_h', \overline{4}(2), 2m_h''$	8 მეორე $[100]$ მიმართულებს	$a = b = \gamma = 90^\circ$
		422 $4/mmm$	$E, 4, 4^2, 4^3, 2'(2), 2''(2)$ $E, 4, 4^3, 4^3, 2'(2), 2''(2), \overline{1}, \overline{4}(2), m_h, 2m_h', 2m_h''$	8 მესამე $[110]$ მიმართულებს	
					16

ფებს წარმოადგენენ და, მამასადამე, უფრო დაბალი (ჰემიედრული) სიმეტრიით ხასიათდებიან. აქედან ცხადია, რომ ერთი სისტემაში შემავალი კრისტალური კლასები დაკავშირებული არიან ან საერთო მთავარი ლერძის არსებობით ან ლერძებისა და სიბრტყეების ამ კლასებისათვის დამახასიათებელი განლაგებით. ეს კი საშუალებას იძლევა ერთი სისტემის კლასებისათვის ავირჩიოთ ერთი კოორდინატთა სისტემა, რომელიც დაკავშირებული იქნება კრისტალების სიმეტრიასთან. ახლა ზემოთ შემოღებული შვიდი კოორდინატთა სისტემის არსებობა სრულიად გარკვეულ საფუძველს იღებს. კოორდინატთა ლერძებს ვირჩევთ სიმეტრიის მთავარი ლერძების ან სიბრტყეების პარალელურად ან მართობულად. თითოეული კლასისათვის კრისტალოგრაფიული ლერძების მიღებული განლაგება ნაჩვენებია (15, 17, 19, 20, 21, 23) ნახაზებზე სიმეტრიის ელემენტების სტერეოგრაფიულ გეგმილებთან ერთად. სისტემებისათვის დამახასიათებელი ბაზისური ვექტორები, კუთხეები და შესაბამისი ელემენტარული პარალელები მოყვანილია 3.8 ნახაზზე.

კრისტალური კლასების განაწილება სისტემების მიხედვით და კოორდინატთა ლერძების განლაგება მოცემულია (4.2) ცხრილში. ამავე ცხრილში მითითებულია თითოეულ კლასში შემავალი სიმეტრიული გარდაქმნები, ე. ი. ჭკუფის ელემენტები, რომელთა რიცხვი განსაზღვრავს ჭკუფის რიგს.

იმისათვის, რომ გავადვილოთ წერტილოვანი ჭკუფების ყველა ელემენტის პოვნა და მათი მატრიცული წარმოდგენა, (4.3) ცხრილში მოცემულია ამ ჭკუფების გენერატორები მატრიცული ფორმით იმ ბაზისში, რომელიც მითითებულია შესაბამისი ჭკუფებისათვის 4.2 ცხრილში.

წარბილვანის კომპლექსები. მარტივი ფორმები

კრისტალურ კლასში შემავალ სიმეტრიის ელემენტებსა და მათ სტერეოგრაფიულ გეგმილებს გარდა ნახაზებზე (4.15—23) ნაჩვენებია კოორდინატთა სისტემები, რომელთა არჩევა რაციონალურია მოცემული კლასებისათვის მათი სიმეტრიის ელემენტების განლაგების მიხედვით. კოორდინატთა სათავეს ყოველთვის იღებენ წერტილოვანი ჭკუფის ცენტრში; სადაც ყველა სიმეტრიის ელემენტი იკვეთება. თუ ჭკუფში შედის მხოლოდ ერთი ლერძი ან სიბრტყე, სათავედ იღებენ ამ ლერძის ან სიბრტყის ნებისმიერ წერტილს. კოორდინატთა სისტემის არჩევის შემდეგ, შესაძლებელია ამ სისტემაში ავიღოთ ნებისმიერი წერტილი კოორდინატებით (x_1 x_2 x_3). თუ ეს წერტილი (ან რადიუსვექტორის ბოლო) ჭკუფის არც ერთ სიმეტრიის ელემენტზე არ არის მოთავსებული, ამბობენ, რომ ის იმყოფება ზოგად მდგომარეობაში. ჭკუფში შემავალი სიმეტრიული გარდაქმნების მოქმედებით წერტილი (x_1 x_2 x_3) მიიღებს ახალ მდებარეობას, გამრავლდება და შეიქმნება წერტილების

№	კრისტალოგი სისტემები (სინგონიები)	ფუნქციები	სიმეტრიული გარდაქმნები (ჭავჭავის ელემენტები)	სიმეტრიის ელემენტების და კოორდინატთა ღერძების განლაგება	მატიკური კონსტანტები ელემენტარული უკრები
5	რომბოედრული (ტეტრაგონალური ღერძები)	3 $\bar{3}$ $3m$ 32 $\bar{3}m$	$E, 3, 3^2, (120^\circ), 240^\circ$ $E, 3, 3^2, \bar{1}, \bar{3}(2) = (\bar{1}3, \bar{1}3^2)$ $E, 3, 3^2, 3m$ $E, 3, 3^2, 2, 2', 2''$ $E, 3, 3^2, 2, 2', 2'', \bar{1}, \bar{3}(2), 3m$	$\bar{3} \parallel c$ ან $[001]$ მიმართულებით, $x_1, x_2, 3$ ღერძის \perp სიბრტყეშია და აღდგენენ 120° ბრუნვებს	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$
5	რომბოედრული (რომბოედრული ღერძები)	rh	<p>ვერტიკალური 3 ან $\bar{3}$ ღერძებთან დაბრლილი კუთხით ატარებენ a ღერძს. 3 ან $\bar{3}$ ღერძი მისგან გამოიყვანს b და c მონაკვეთებს, რომელნიც სრლით ტოლი იქნებიან და ვერტიკალურ ღერძთან ერთნაირ კუთხებს შეადგენენ</p>	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	
6	ტეტრაგონალური	6 $\bar{6}$ $6/m$ $\bar{6} m2$ $6 mm$ 622 $6/mmm$	$E, 6, 6^2, 6^3, 6^4, 6^5$ $E, 3, 3^2, m, \bar{6}(2) = (m3, m3^2)$ $E, 6, 6^2, 6^3, 6^4, 6^5, \bar{1}, \bar{5}(2), \bar{3}(2), m$ $E, 3, 3^2, 2(3), m, 3m, \bar{6}(2)$ $E, 6, 6^2, 6^3, 6^4, 6^5, 3m, 3m^2$ $E, 6, 6^2, 6^3, 6^4, 6^5, 2(3), 2''(3)$ $E, 6, 6^2, 3^2, 6^4, 6^5, 2'(3), 2''(3), \bar{1}, \bar{5}(2), \bar{3}(2), 3m, 3m^2, m$	$6, 6, \bar{6} \parallel [001] \parallel [100]$ და $[100]$ მიმართულება აიღება. კოორდინატურ სისტემაში $\parallel 2$ ან $\perp m$, ისე რომ აღდგენენ 120° ბრუნვებს	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$
7	კუბური	c	$E, 3(4), 3^2(4), 2(3)$ $E, 3(4), 3^2(4), 2(3), \bar{1}, \bar{3}(8) = [\bar{1}3(4), \bar{1}3^2(4)] 3m$ $E, 3(4), 3^2(4), 2(3), 4(6), 6m$ $E, 3(4), 3^2(4), 2(6), 4(3), 4^2(3), 4^3(3)$ $E, 3(4), 3^2(4), 2(6), 4(3), 4^2(3), 4^3(3), \bar{1}, \bar{3}(8), \bar{4}(6), 3m, 6m, 48$	$12, 4, \bar{4} \parallel [001]$ $24, 3 \parallel [111]$ მესამე ადგილზე 24 მდგომარეობაში ელემენტი $\parallel [110]$	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

-ისა საქონლის საქონლის	კლასების აღნიშვნები		ჩართვის განმარტობის მატრიცა $\vec{x}_k(x_1, x_2, x_3)$ ბაზისში	-საქონლის აღნიშვნა	კლასების აღნიშვნა	ჩართვის განმარტობის მატრიცა $\vec{x}_k(x_1, x_2, x_3)$ ბაზისში	
	საქონლის აღნიშვნა	საქონლის აღნიშვნა					
1	2	3	4	1	2	3	4
საქონლის აღნიშვნა	1	C_1	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	საქონლის აღნიშვნა	mm2	C_{23}	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
	I	C_i	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$				$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
საქონლის აღნიშვნა	2	C_2	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	საქონლის აღნიშვნა	4	C_4	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
	m	C_s	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$				$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$
	2/m	C_{2h}	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$				$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$
საქონლის აღნიშვნა	222	$Y=D_2$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	საქონლის აღნიშვნა	4/m	C_{4h}	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$
საქონლის აღნიშვნა	4/m	C_{4v}	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$				$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$
საქონლის აღნიშვნა	6	C_6	$\begin{pmatrix} 1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$				

1	2	3	4	1	2	3	4
ცხრილი 4.3 გვერდობა	$\bar{4}2m$	D_{2d}	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	ც ვ ე ნ ი მ ე ნ ი მ ე ნ ი	$\bar{6}$	C_{3h}	$\begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
	$4/mmm$	D_{4d}	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$		$\bar{6}m2$	D_{3h}	$\begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
	3	C_3	$\begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$		622	D_6	$\begin{pmatrix} 1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
	$\bar{3}$	C_{3i}	$\begin{pmatrix} 1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$		6/m	C_{6h}	$\begin{pmatrix} 1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$
	32	D_3	$\begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$		6mm	C_{6v}	$\begin{pmatrix} 1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
	3m	C_{3v}	$\begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$		6/mmm	D_{6h}	$\begin{pmatrix} 1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$
$\bar{3}m$	D_{3d}	$\begin{pmatrix} 1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	23	T	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$		

1	2	3	4
უბუნარი	432	0	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
	$m\bar{3}$	T_h	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
	$\bar{4}3m$	T_d	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$
	$m3m$	O_h	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

ერთობლიობა, რომელსაც წერტილების სწორი სისტემა ან წერტილების კომპლექსი ეწოდება. კომპლექსში შემავალი ყოველი წერტილი დაკავშირებულია ჭკუფის ერთ რომელიმე სიმეტრიულ გარდაქმნასთან (ჭკუფის ელემენტთან); ამიტომ, ცხადია, კომპლექსის წერტილების N რიცხვი ჭკუფის ელემენტების რიცხვის ან ჭკუფის რიგის ტოლია. ასეთ შემთხვევაში წერტილოვანი ჭკუფის ელემენტები იზომორფულადაა გადასახული N წერტილების სიმრავლეზე. N რიცხვს ზოგადი მდგომარეობის ჭკუფის ეწოდება. 4.2 ცხრილიდან ჩანს, რომ ყველაზე დიდი რიგი (გარდაქმნების რიცხვი) არის 48 და ის $m3m$ ჭკუფს გააჩნია. ეს იმას ნიშნავს, რომ ზოგად მდგომარეობაში აღებული წერტილიდან ამ ჭკუფში მიიღება 48 წერტილი. იმავე ნახაზებზე ნაჩვენებია N წერტილების სიმრავლის სტერეოგრაფიული გეგმილები. თუ წერტილები გეგმილის სიბრტყის ზემოთ იმყოფებიან, ისინი აღინიშნება ჭვრით, ხოლო სიბრტყის ქვემოთ მყოფი წერტილები — რგოლით. თუ ჭკუფში არის ისეთი გარდაქმნები, რომლებსაც ზედა წერტილები ქვევით გადმოყავთ (მაგ., ჰორიზონტალური სიმეტრიის სიბრტყე), მაშინ რგოლები და ჭვრები ერთმანეთს ემთხვევიან.

მდგომარეობას, როდესაც წერტილი მდებარეობს სიმეტრიის ელემენტზე, კერძო მდგომარეობა ეწოდება. ასეთ შემთხვევაში სიმეტრიის ელემენტი არ ახდენს წერტილის გარდაქმნას და წერტილების რიცხვი (კომპლექსის ჭკუფის რიგი) მცირდება. წერტილების სიმრავლისა და სიმეტრიული გარდაქმნების ურთიერთგადასახვა უკვე ხდება ჰომომორფული. თუ ვისარგებლებთ სიმეტრიული გარდაქმნებით, რომელნიც მოცემულ ჭკუფს გააჩნია, მაშინ წერტილის კოორდინატების საშუალებით კომპლექსში

შემაჯავალი სხვა წერტილების კოორდინატების დადგენა სირთულეს არ წარმოადგენს. მაგალითისათვის განვიხილოთ ჯგუფი $\overline{42m}$. ეს არის მე-8 რიგის ჯგუფი ელემენტებით $\{E, 2, 2', 2'', m_v', m_v''\}$ და ორი გარდაქმნა, დაკავშირებული 4 ღერძთან (m_4 და m_4^3). ჯგუფის ელემენტების განლაგება სივრცეში და მათი სტერეოგრაფიული გეგმილები მოცემულია 4.23 ნახაზზე. x_1 და x_2 კოორდინატთა ღერძებად არჩეულია მეორე რიგის სიმეტრიის ღერძები, ხოლო x_3 ღერძი ვერტიკალურია და, მაშასადამე, მესამე 2 ღერძის პარალელური. ამავე სურათზე ნაჩვენებია წერტილების ზოგადი კომპლექსი, რომელიც 8 წერტილისაგან შედგება. ეს წერტილები დანომრილია. ავილოთ წერტილი პირველი ნომრით და იმის გამო, რომ ეს წერტილი იმყოფება პორიზონტალური სიბრტყის ზევით, დაენიშნოთ ის ჯვრით. წერტილი (1) აღებულია ზოგად მდგომარეობაში, კოორდინატებით, $x_1x_2x_3$. ვამოქმედოთ ამ წერტილზე თანამიმდევრობით ჯგუფის ყველა ელემენტი. ერთეულოვანი გარდაქმნა E წერტილს დატოვებს უცვლელად, ე. ი. მივიღებთ წერტილს კოორდინატებით $x_1x_2x_3$ (1) ახლა განვიხილოთ 2 ღერძის მოქმედება, რომელიც x_1 ღერძის პარალელურია; როგორც ვიცით, ამ ღერძის ირგვლივ 180 ბრუნვას შეესაბამება მატრიცა

$$A(x_1, 180^\circ) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$$

ამიტომ წერტილის კოორდინატების გარდაქმნა ასე ჩაიწერება

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ \bar{x}_2 \\ \bar{x}_3 \end{pmatrix} = A(x_1, 180^\circ) \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

და მიიღება ახალი წერტილი, კოორდინატებით $x_1\bar{x}_2\bar{x}_3$ (2). ანალოგიურად, ბრუნვები $2'' \parallel x_2$ და $2'' \parallel x_3$ წარმოშობენ წერტილებს $\bar{x}_1x_2\bar{x}_3$ (3) და $\bar{x}_1\bar{x}_2x_3$ (4). ჩვენ მიერ არჩეულ კოორდინატთა სისტემაში I სიბრტყე $[110]$ მიმართულების პარალელურია, ხოლო II სიბრტყე — $[1\bar{1}0]$ მიმართულების. I სიბრტყეში არეკვლას შეესაბამება მატრიცა

$$A(m||[110]) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ხოლო მეორე სიბრტყეს

$$A(m||[1\bar{1}0]) = \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ამ მატრიცების საშუალებით ვიღებთ ორ ახალ წერტილს $x_2x_1x_3$ (5) და $\overline{x_2x_1x_3}$ (6). $\overline{42m}$ ჯგუფში შემავალი სიმეტრიული გარდაქმნებიდან დაგვრჩა ორი ოპერაცია — ბრუნვები მეოთხე რიგის სარკული ღერძის ირგვლივ, ე. ი. გარდაქმნები m_h4 (ბრუნვა 90° და არეკვლა მართობულ სიბრტყეში) და m_h4^3 (ბრუნვა 270° და არეკვლა).

$$A(m_h) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \overline{1} \end{pmatrix}; \quad A(4) = \begin{pmatrix} 0 & \overline{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad A(4^3) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \overline{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$A(m_h 4) = \begin{pmatrix} 0 & \overline{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \overline{1} \end{pmatrix}; \quad A(m_h 4^3) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \overline{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \overline{1} \end{pmatrix}$$

და მიიღება ორი წერტილი $\overline{x_2x_1x_3}$ (7) და $x_2\overline{x_1x_3}$ (8). ამგვარად, მერვე რიგის $\overline{42m}$ ჯგუფის იზომორფული იქნება 8 ჯერადობის მქონე წერტილების ზოგადი კომპლექსი:

$$8: \quad x_1x_2x_3; \quad x_1\overline{x_2x_3}; \quad \overline{x_1x_2x_3}; \quad \overline{x_1\overline{x_2x_3}};$$

$$x_2x_1x_3; \quad \overline{x_2x_1x_3}; \quad \overline{x_2x_1\overline{x_3}}; \quad x_2\overline{x_1x_3}.$$

თუ საწყის წერტილს სიმეტრიის რომელიმე ელემენტზე მოვათავსებთ, კომპლექსის ჯერადობა შემცირდება. მაგ., ავიღოთ წერტილი x_1 კოორდინატა ღერძზე, რომელიც 2 ღერძის გასწვრივ არის მიმართული. წერტილის კოორდინატები იქნება $x_1 00$. ჯგუფის სიმეტრიის ელემენტების მოქმედებით ასეთი ტიპის წერტილები მიიღება კიდევ სამი. ამიტომ კერძო კომპლექსის ჯერადობა იქნება 4

$$4: \quad x_100; \quad \overline{x_100};$$

$$0x_10; \quad 0\overline{x_10}.$$

წერტილების ეს სიმრავლე ჰომომორფულად იქნება გადასახული ჯგუფის 8 ელემენტზე. კომპლექსის ჯერადობა შეიძლება ორამდე შემცირდეს, თუ წერტილს ავიღებთ ვერტიკალურ ღერძზე.

$$2: \quad 00x_3; \quad 00\overline{x_3}.$$

ყველა შემთხვევაში ვხედავთ, რომ კერძო კომპლექსების ჯერადობა ზოგადი კომპლექსის ჯერადობის გამყოფს წარმოადგენს.

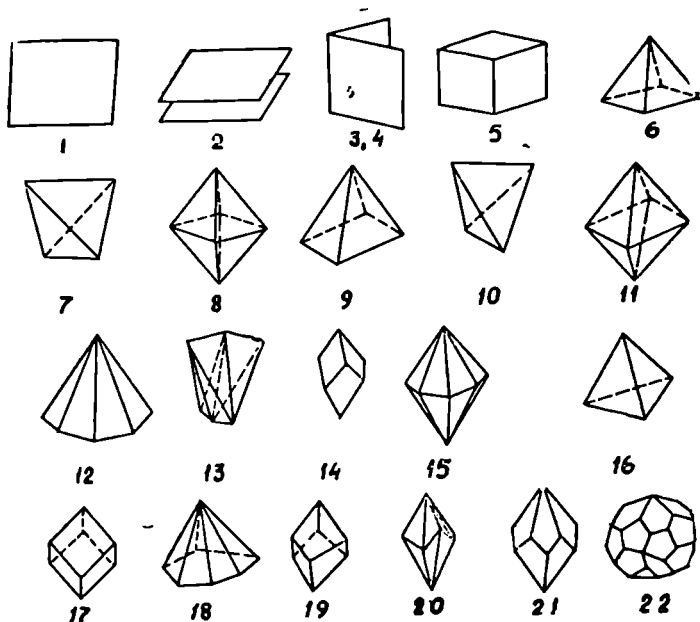
თუ წერტილის მაგივრად ზოგად მდგომარეობაში ავიღებთ სიბრტყეს, რომელიც დახრილად იქნება განლაგებული სიმეტრიის ელემენტების მიმართ, მივიღებთ ეკვივალენტური სიბრტყეების ერთობლიობას, რომ-

ლებიც დაკავშირებული იქნებიან ერთიმეორესთან კრისტალურ კლასში შემავალი სიმეტრიული გარდაქმნებით. სიბრტყეების ამ ერთობლიობის მიერ შექმნილ მრავალწახნაგს მარტივი ფორმა ეწოდება. თუ სიბრტყე აღებულია ზოგად მდგომარეობაში, მივიღებთ ზოგად მარტივ ფორმას. თუ სიბრტყე სიმეტრიის ელემენტის პარალელურია, მართობული ან სიმეტრიულად განლაგებულია ელემენტების მიმართ, სათანადო ფორმა იქნება კერძო. ცხადია, ზოგადი მარტივი ფორმის ჭერადობა (სიბრტყეების რიცხვი) ისეთივეა, როგორც ზოგადი წერტილოვანი კომპლექსის ჭერადობა და მოცემული წერტილოვანი ჯგუფის (ან კრისტალური კლასის) რიგის ტოლია. ასე რომ, მაგალითად, $m3m$ კლასის შესაბამის ზოგად მარტივ ფორმას ექნება 48 წახნაგი. მესამე რიგის ლერძისათვის ზოგადი ფორმა იქნება სამკუთხა პირამიდა, ხოლო ერთ-ერთი კერძო ფორმა — სამკუთხა პრიზმა, რომელიც მიიღება, როდესაც სიბრტყე აღებულია ლერძის პარალელურად. ერთი და იგივე მარტივი ფორმა შეიძლება იყოს ზოგადი ერთი კლასისათვის და კერძო — მეორე კლასისათვის, რომელიც სიმეტრიის ელემენტების მეტ რიცხვს შეიცავს. მარტივი ფორმის განმარტებიდან ჩანს, რომ მასში შემავალი ყველა წახნაგი კრისტალოგრაფიულად და ფიზიკურად ტოლები არიან. მაგრამ იმის გამო, რომ ზრდის პირობები სხვადასხვაა, რეალურ კრისტალში ეს წახნაგები შეიძლება გეომეტრიულად (სიდიდით, ფორმით) ერთიმეორისაგან განსხვავდებოდნენ. საზოგადოდ, რეალური კრისტალი იშვიათად არის შემოსაზღვრული ერთი მარტივი ფორმით, უფრო ხშირად ვხვდებით რამდენიმე მარტივი ფორმის კომბინაციას. თითოეულ კრისტალურ კლასს გააჩნია ერთი ზოგადი მარტივი ფორმა და რამდენიმე კერძო. სულ არსებობს 47 მარტივი ფორმა. კრისტალური კლასების სახელწოდებები დაკავშირებულია შესაბამისი ზოგადი მარტივი ფორმების მრავალწახნაგების სახელწოდებებთან (ცხრილი 4.4).

ეკვივალენტური სიბრტყეების ერთობლიობა, რომელიც (hkl) სიბრტყის საშუალებით ქმნის მარტივ ფორმას, აღინიშნება ფიგურული ფრჩხილებით $\{hk_l\}$. ფორმაში შემავალი ყველა სიბრტყის ინდექსების დადგენა ხდება იმავე მეთოდით, როგორც წერტილების კომპლექსების დასადგენად იყო გამოყენებული. მაგალითად, ჩვენ მიერ განხილული $\bar{4}2m$ კლასისათვის ზოგადი ფორმა ასე დაიწერება:

$$\{hkl\} = (hkl); \quad (h\bar{k}\bar{l}); \quad (\bar{h}k\bar{l}); \quad (\bar{h}\bar{k}l); \\ (khl); \quad (\bar{k}\bar{h}l); \quad (\bar{k}h\bar{l}); \quad (k\bar{h}\bar{l}).$$

მიღებული რვაწახნაგიანი ფიგურა ტეტრაგონალურ სკალენოედრს წარმოადგენს [ნახ. 4.24 (13)]. ამავე ნახაზზე ნაჩვენებია რამდენიმე სხვა კლასისათვის დამახასიათებელი ზოგადი მარტივი ფორმები.



ნახ. 4. 24. მარტივი ფორმები. 1. მონოედრი, 2. პინაკოიდი, 3, 4 დიედრი, 5. რომბული პრიზმა, 6. რომბული პირამიდა, 7. რომბული ტეტრაედრი, 8. რომბული ბიპირამიდა, 9. ტეტრაგონალური პირამიდა, 10. ტეტრაგონალური ტეტრაედრი, 11. ტეტრაგონალური ბიპირამიდა, 12. დიტეტრაგონალური პირამიდა, 13. ტეტრაგონალური სკალენოედრი, 14. ტეტრაგონალური ტრაპეცოედრი, 15. დიტეტრაგონალური ბიპირამიდა, 16. ტრიგონალური პირამიდა, 17. რომბოედრი, 18. ტრიგონალური ბიპირამიდა, 19. ტრიგონალური ტრაპეცოედრი, 20. დიტრიგონალური სკალენოედრი, 21. ჰექსაგონალური ტრაპეცოედრი, 22. პენტაგონ ტრი-ოქტაედრი.

როგორც მარტივი ფორმების ნახაზები გვიჩვენებენ, თითოეული მათგანისათვის დამახასიათებელია წახნაგის გარკვეული ფორმა და სიმეტრია. ცხადია, ბრტყელი (ორგანზომილებიანი) სიმეტრიის ტიპები უნდა ვეძებოთ 32 სიმეტრიის წერტილოვან ჯგუფს შორის. ამათგან მხოლოდ ისინი გამოდგებიან წახნაგის სიმეტრიის აღწერისათვის, რომლებიც მის მიმართ მართობულ ღერძებს ან სიბრტყეებს შეიცავენ. ასეთი ჯგუფები შეიძლება შეირჩეს მხოლოდ 10 და ამიტომ არსებობს სიბრტყის (წახნაგის) სიმეტრიის 10 სხვადასხვა სახე:

1, 2, 3, 4, 6, m , $2mm$, $3m$, $4mm$, $6mm$.

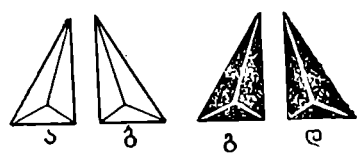
სინგონია	კლასის სახელწოდება	კლასის სიმბოლო	სიმეტრიის ფორმულა
ტრიკლინური	1. მონოკლინური 1. პინაკოიდური	1 $\bar{1}$	L_1
მონოკლინური	3. დიედრული, ღერძით 4. დიედრული, უღერძო 5. პრიზმატული	2 m $2/m$	L_2 P L_2P_i
რომბული	6. რომბო-პირამიდული 7. რომბო-ტეტრაედრული 8. რომბო-ბიპირამიდული	$2mm$ 222 mnm	L_22P $3L_2$ $3L_23P_i$
ტეტრაგონალური	9. ტეტრაგონალურ-პირამიდული 10. ტეტრაგონალურ-ტეტრაედრული 11. ტეტრაგონალურ-ბიპირამიდული 12. დიტეტრაგონალურ-პირამიდული 13. ტეტრაგონალურ-სკალენოედრული 14. ტეტრაგონალურ-ტრაპეცოედრული 15. დიტეტრაგონალურ-ბიპირამიდული	4 $\bar{4}$ $4 m$ $4mm$ $\bar{4}2m$ 422 $4/mnm$	L_4 L_{4i} L_4P_i L_44P $L_{4i}2L_22P$ L_44L_2 $L_44L_25P_i$
რომბოედრული ან ტრიგონალური	16. ტრიგონალურ-პირამიდული 17. რომბოედრული 18. დიტრიგონალურ-პირამიდული 19. ტრიგონალურ-ტრაპეცოედრული 20. დიტრიგონალურ-სკალენოედრული	3 $\bar{3}$ $3m$ 32 $\bar{3}m$	L_3 L_{3i} L_33P L_33L_2 $L_33L_23P_i$
ჰექსაგონალური	21. ჰექსაგონალურ-პირამიდული 22. ტრიგონალურ-ბიპირამიდული 23. ჰექსაგონალურ-ბიპირამიდული 24. დიტრიგონალურ-ბიპირამიდული 25. დიჰექსაგონალურ-პირამიდული 26. ჰექსაგონალურ-ტრაპეცოედრული 27. დიჰექსაგონალურ-ბიპირამიდული	6 $\bar{6}$ $6/m$ $\bar{6}m2$ $6mm$ 622 $6/mmm$	L_6 L_3P L_6P_i L_33L_24P L^0P L_66L_2 $L_66L_27P_i$
კუბური	28. პენტაგონ-ტრიტეტრაედრული 29. დილოდეკაედრული 30. ჰექსტეტრაედრული 31. პენტაგონ-ტრიოქტაედრული 32. ჰექსოქტაედრული	23 $m3$ $\bar{4}3m$ 432 $m3m$	$3L_24L_3$ $3L_24L_33P_i$ $3L_{4i}4L_36P$ $3L_44L_36L_2$ $3L_44L_36L_29P_i$

ჩვენ მიერ განხილული სიმეტრიის წერტილოვანი ჯგუფები ან კრისტალოგრაფიული კლასები აღწერენ კრისტალების გარეგან (მაკროსკოპულ) სიმეტრიას.

ჩვეულებრივი ბრუნვები ღერძების ირგვლივ ან არეკვლები სარკულ სიბრტყეში წარმოადგენენ ამ ჯგუფებში შემავალ სიმეტრიის ოპერაციებს ან გეომეტრიულ გარდაქმნებს, რომელთა ერთობლიობასაც შემდეგში A ასოთი აღვნიშნავთ. როგორც დავინახეთ, სიმეტრიული გარდაქმნის შედეგად ხდება სხვადასხვა ტოლი სხეულების ან ერთი და იგივე სხეულის ტოლი ნაწილების ურთიერთშეთავსება.

თავის მხრივ, სხეულების ტოლობა შეიძლება იყოს ორგვარი: შეთავსებით ტოლობა და სარკული ტოლობა. ცხადია, სხეულის სიმეტრიულობისა და მისი სხვა სხეულებთან ტოლობის აღნიშნული განსაზღვრები შეიცავენ ამ საკითხის მხოლოდ გეომეტრიულ მხარეს. მაგრამ შეიძლება ფიგურების ტოლობის და სიმეტრიულობის ცნებები განეზოგადოდ ისე, რომ ისინი, A ტიპის გეომეტრიულ გარდაქმნებთან ერთად, რომელნიც იწვევენ ფიგურის გადანაცვლებას, მაგრამ არ ცვლიან მის ფიზიკურ თვისებებს, შეიცავდნენ ისეთ ოპერაციას, რომელიც ფიგურის რომელიმე ფიზიკურ (მაკროსკოპულ) თვისებას ცვლის მისი საწინააღმდეგო თვისებით. მაგალითად, წახნაგის თეთრი ფერი იცვლება შავ ფერად, ღენის სიმკვრივის ვექტორის, მაგნიტური და ელექტრული მომენტების მიმართულება იცვლება საწინააღმდეგოდ და ა. შ. მაშინ ზემოთ გამოყვანილი გეომეტრიული სიმეტრიის 32 კლასს დაემატება ახალი კლასები, რომლებიც ახალი ტიპის გარდაქმნას შეიცავენ.

მაგალითისათვის განვიხილოთ ოთხი ტეტრაედრი (ნახ. 4.25), რომლებიც ერთი და იგივე მასალისაგან არიან დამზადებული. პირველი ორი (ა, ბ) წარმოადგენენ თეთრ ფერად შეღებილ სარკულად ტოლ ტეტრაედრებს, ხოლო მეორე წყვილი (გ, დ) ასეთივე ტეტრაედრები შეღებილი არიან შავ ფერად. თუ ოთხივე ტეტრაედრს ტოლ ფიგურად ჩავთვლით, მაშინ ზემოაღნიშნული ფიგურების ტოლობის ორი შემთხვევის ნაცელად უნდა განვიხილოთ ტოლობის ოთხი სახე: 1) ორი ა ტიპის ტეტრაედრი შეთავსებით ტოლ ფიგურებს წარმოადგენენ; 2) ა და ბ ტეტრაედრები სარკულად ტოლებია; 3) ა და გ ტეტრაედრები შეთავსებით ანტიტოლებია და 4) ა და დ ტეტრაედრები სარკულად ანტიტოლ ფიგურებს წარმოადგენენ. ამ შემთხვევაში ანტიტოლობის ქვეშ იგულისხმება სხვადასხვა ფერის ფიგურების ტოლობა. შეიძლება თეთრი ფერის ფიგურები ჩავთვალოთ დადებით ფი-



ნახ. 4.25. ა და ბ—სარკულად ტოლი ტეტრაედრები, ა და გ—შეთავსებით ანტიტოლი ტეტრაედრები, ა და დ—სარკულად ანტიტოლი ფიგურები.

კულად ტოლებია; 3) ა და გ ტეტრაედრები შეთავსებით ანტიტოლებია და 4) ა და დ ტეტრაედრები სარკულად ანტიტოლ ფიგურებს წარმოადგენენ. ამ შემთხვევაში ანტიტოლობის ქვეშ იგულისხმება სხვადასხვა ფერის ფიგურების ტოლობა. შეიძლება თეთრი ფერის ფიგურები ჩავთვალოთ დადებით ფი-

გურებად, ხოლო შავი ფერის — უარყოფითად. მაშინ ფიგურის ნიშნის შეცვლის ოპერაცია იქნება ისეთი გარდაქმნა, რომელიც მას შეთავსებით ანტიტოლ ფიგურად გადააქცევს — მაგ., ა -ს ბ -ში ან ბ -ს ლ -ში.

აქვე უნდა შევნიშნოთ, რომ ნიშნის შეცვლის ოპერაცია მხოლოდ მაშინ იქნება სიმეტრიული გარდაქმნა, როდესაც ის ერთდროულად სხეულს შეუთავსებს თავისთავს, ე. ი. დაკავშირებული იქნება ჩვეულებრივი A ტიპის სიმეტრიულ გარდაქმნასთან; ცხადია, რომ ნიშნის შეცვლის ოპერაცია არ არის აუცილებელი დაკავშირებული იყოს მხოლოდ ფერის შეცვლასთან. როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, ის შეიძლება გამოხატავდეს რომელიმე ფიზიკურ თვისებას, რომელიც დადებით ან უარყოფით მნიშვნელობებს იღებს (ვექტორული სიდიდის მიმართულების შეცვლა საწინააღმდეგო მიმართულებით, დროის ნიშნის შეცვლა და სხვა). აღვნიშნოთ ნიშნის შეცვლის ოპერაცია R ასოთი. ნათქვამიდან ჩანს, რომ R ოპერაცია თავისთავად არ წარმოადგენს ახალი ტიპის სიმეტრიულ გარდაქმნას, მაგრამ A ტიპის სიმეტრიულ გარდაქმნასთან ერთად ის ქმნის ახალი სახის AR სიმეტრიულ გარდაქმნას. მაგალითად, თუ A წარმოადგენს ღერძის ირგვლივ კრისტალის სიმეტრიულ (თვითშეთავსებამდე) ბრუნვას რაიმე კუთხით, მაშინ RA შემოაბრუნებს კრისტალს იმავე კუთხით და შეცვლის მისი წახნაგის ფერს საწინააღმდეგო ფერით. RA გარდაქმნებს ანტისიმეტრიული გარდაქმნები ეწოდება, ვინაიდან ამ შემთხვევაში სიმეტრიული გარდაქმნები მიმდინარეობს ანტიტოლ სხეულებს შორის.

საბჭოთა მეცნიერმა შუბნიკოვმა პირველმა მიაქცია ყურადღება იმ გარემოებას, რომ სამგანზომილებიანი ფიგურების ანტისიმეტრიულობის შესასწავლად შესაძლებელია გამოვიყენოთ ოთხგანზომილებიანი სივრცე. განვიხილოთ ჭერ გარდაქმნები 2 სივრცეში. როგორც ვიცით, ბრტყელი ფიგურების (მრავალკუთხედების) კოორდინატების ნებისმიერი გარდაქმნები 2 სივრცეში, რომლებიც კოორდინატთა სათავეს უცვლელად ტოვებენ, წარმოადგენენ ამ ფიგურების ბრუნვას გარკვეული კუთხით სათავეს ირგვლივ. გარდაქმნის მატრიცას ზოგადად შემდეგი სახე აქვს:

$$\begin{pmatrix} \cos \alpha, & -\sin \alpha \\ \sin \alpha, & \cos \alpha \end{pmatrix}$$

მაგრამ იგივე ბრუნვა 2 სივრცეში შეიძლება წარმოვიდგინოთ როგორც ბრუნვა 3 სივრცეში, თუ ვიგულისხმებთ, რომ ბრუნვა სრულდება ღერძის ირგვლივ, რომელიც x_3 კოორდინატთა ღერძის ვასწვრივ არის მიმართული ფიგურის სიბრტყის მართობულად, მაშინ გარდაქმნის მატრიცა მიიღებს სახეს

$$\begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & +1 \end{pmatrix} \tag{4.32}$$

ამგვარად, ნებისმიერი ოპერაცია, შესრულებული 2 სივრცეში, შეიძლება წარმოვიდგინოთ, როგორც 3 სივრცეში შესრულებული ოპერაცია. მხოლოდ ამ შემთხვევაში მესამე კოორდინატს x_3 ღერძის გასწვრივ ფაქტიურად აქვს ნულოვანი მნიშვნელობა. $+1$ (4.32) მატრიცაში მხოლოდ იმის მაჩვენებელია, რომ ოპერაცია 2 სივრცეში არ ცვლის მესამე (ნულოვანი) კოორდინატის ნიშანს. ეს საშუალებას გვაძლევს ვიგულისხმოთ რომ კოორდინატის ნაცვლად ამ ღერძზე აღებულია ორგანზომილებიანი ფიგურის რაიმე ფიზიკური თვისება, რომელსაც დადებითი ან უარყოფითი მნიშვნელობა შეიძლება ჰქონდეს: მაგალითად, თეთრი (დადებითი) ან შავი (უარყოფითი) ფერი, მაგნიტური მომენტის ვექტორის დადებითი ან საწინააღმდეგო მიმართულება და ა. შ. სხვაგვარად რომ ვთქვათ, x_3 ღერძზე ნაჩვენები იქნება ნიშნის შეცვლის R ოპერაცია. მაშინ, ცხადია, რომ ოპერაციას, რომელიც ორგანზომილებიან სხეულს შემოაბრუნებს და მის ნიშანს უცვლელად დატოვებს, შეესაბამება (4.32) მატრიცა, ხოლო AR ანტისიმეტრიული ოპერაცია, რომელიც ფიგურის სიმეტრიული ბრუნვის შემდეგ მის ნიშანს შეცვლის. საწინააღმდეგო ნიშნით წარმოდგენილი იქნება მატრიცით

$$\begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.33)$$

თუ ორგანზომილებიანი ფიგურებისათვის შეიძლება არსებობდეს დადებითი და უარყოფითი ოპერაციები, რომლებიც განხილული იყო სამგანზომილებიან სივრცეში, ასევე სამგანზომილებიანი ფიგურის დადებითი და უარყოფითი ოპერაციები ფორმალურად შეიძლება განვიხილოთ 4 სივრცეში შემდეგი მატრიცით

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & 0 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.34)$$

ამგვარად, ანტისიმეტრიული გარდაქმნის RE ოპერატორს, რომელიც ახდენს ფიგურის იგივე გარდაქმნას, ე. ი. ტოვებს ფიგურას უძრავად და ერთდროულად ცვლის მის ნიშანს (ფერს), შეესაბამება მატრიცა

$$A(R) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.35)$$

გარდაქმნას, რომელიც (4.35) მატრიცის საშუალებით ხდება, ეწოდება ანტიიგივური გარდაქმნა. x_3 ღერძის მართობულ სიბრტყეში არეკვლას შეესაბამება (4.1) მატრიცა, რომელიც ოთხგანზომილებიან აღნიშვნებში შეიძლება ასე ჩაიწეროს

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

ამავე სიბრტყეში ანტიარეკლის ოპერაციის მატრიცას ექნება შემდეგი სახე

$$A(m^3) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.36)$$

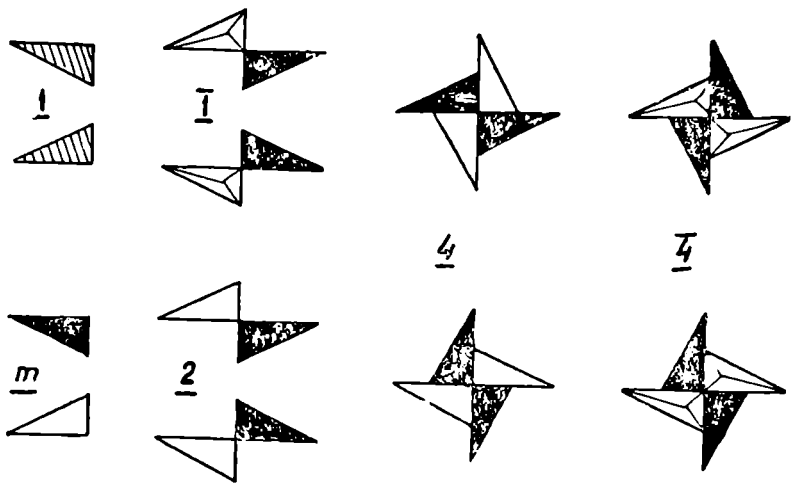
ცხადია, შესაბამისი სიმეტრიული გარდაქმნა იქნება Rm , რაც მოკლედ აღინიშნება \underline{m} . საზოგადოდ, საერთაშორისო აღნიშვნებში, სიმეტრიის ელემენტს ქვევით გავლებული ხაზი ნიშნავს, რომ აღებულია ამ ელემენტისა და ნიშნის შეცვლის R ოპერატორის ნამრავლი. თუ 2 ღერძი მიმართულია x_3 კოორდინატთა ღერძის პარალელურად. სათანადო ანტიბრუნვის მატრიცა ასე ჩაიწერება

$$A(\underline{2}) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.37)$$

ასევე ანტიინვერსიის მატრიცისათვის მივიღებთ

$$D(\underline{J}) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.38)$$

ანტისიმეტრიის ელემენტების მოქმედება ნაჩვენებია 4.26 ნახაზზე შავი და თეთრი ტეტრაედრების საშუალებით. ანტიიგივური გარდაქმნის დროს ფიგურა უნდა დარჩეს უცვლელი და მხოლოდ შეიცვალოს ფერი (ნიშანი). ამიტომ ანტიიგივური გარდაქმნის წარმომდგენი ფიგურა ერთდროულად უნდა იყოს თეთრიც და შავიც ან ფიზიკურად ნეიტრალური. ამ მიზეზით ნახაზზე შესაბამისი მარჯვენა და მარცხენა ტეტრაედრები წარმოდგენილია პირობით ნეიტრალური (დაშტრიხული) ფერით. იმავე ნა-



ნახ. 4. 26. ანტისიმეტრიის ჯგუფების: $\underline{1}$, \underline{m} , $\overline{1}$, $\underline{2}$, $\underline{4}$, $\overline{4}$ წარმოდგენა ტეტრაედრების საშუალებით (შუბნიკოვის მიხედვით)

ხაზზე ბრუნვის თითოეული ფიგურა მოცემულია ორი ენანტიომორფული ფორმით (მარჯვენა და მარცხენა ბრუნვის ფიგურები).

აქამდე ნიშნის შეცვლის R ოპერაციაში უმთავრესად ვგულისხმობდით ფერის შეცვლის პროცესს, თუმცა, ამავე დროს, აღენიშნეთ, რომ ეს ოპერაცია შეიძლება გულისხმობდეს კრისტალის რომელიმე ფიზიკური თვისების ცვლას. სხვადასხვა ფერის (შავი და თეთრი) წახანაგების მქონე მრავალწახანაგების სიმეტრიის წერტილოვანი ჯგუფები პირველად დაადგინა შუბნიკოვმა. ეს წერტილოვანი ჯგუფები ზემოთ განხილული მრავალწახანაგების (ერთი ფერის) 32 წერტილოვანი ჯგუფის შემდგომ განზოგადებას წარმოადგენენ და, რა თქმა უნდა, შეიცავენ ამ ერთი ფერის (შავი ან თეთრი) ჯგუფებს. მაგრამ, გარდა ამისა, იქმნება კიდევ 58 ახალი სახის ჯგუფი, რომლებშიც შედის RA ტიპის ერთი ელემენტი მაინც. სიმეტრიის განზოგადებულმა ჯგუფებმა გამოყენება ჰპოვა კრისტალების მაგნიტური სტრუქტურის აღწერის დროს და ამიტომ ამ ჯგუფებს აგრეთვე მაგნიტური სიმეტრიის ჯგუფები ეწოდება. ტერმინი „მაგნიტური სიმეტრია“ პირველად შემოიღეს ლანდაუმ და ლიფშიცმა იმისათვის, რომ აეწერათ კრისტალებში მაგნიტური მომენტების ორიენტაციისა და განლაგების სიმეტრია.

კრისტალების მაკროსკოპული სიმეტრიისა და ფიზიკური თვისებების შესწავლის დროს არ არის საჭირო განვიხილოთ ატომების ან იონების კრისტალურ მესერში განლაგების სიმეტრია, ვინაიდან ასეთი განლაგება დაკავშირებულია უკვე კრისტალური მესრის სიმეტრიასთან და, მაშასადამე, კრისტალის მიკროსიმეტრიასთან. ზემოთ აღწერილი სიმეტრია წარმოადგენს კრისტალის ნივთიერების დროში გასაშუალებულ განაწილების სიმეტრიას. კრისტალის წონასწორულ მდგომარეობაში ასეთივე სიმეტრიით ხასიათდება მუხტის განაწილების საშუალო სიმკვრივე $\rho(x_1, x_2, x_3)$, მაგრამ მოძრავ ელექტრონებს შეუძლიათ შექმნან არა მარტო მუხტის საშუალო სიმკვრივე, არამედ დენის საშუალო სიმკვრივეც, რომელიც დენის სიმკვრივის \vec{j} ვექტორით იქნება განსაზღვრული და თავის მხრივ, ქმნის ნულისაგან განსხვავებულ მაკროსკოპულ მაგნიტურ მომენტს.

თუ ვისაზღვრებით სხეულის მხოლოდ მაკროსკოპული თვისებებით, მაშინ მაგნიტური მომენტების განაწილების სიმეტრიის დადგენისათვის საჭირო არ არის ატომების განლაგების მხედველობაში მიღება, ვინაიდან მაკროსკოპული თვისებები კრისტალში დამოკიდებულია მხოლოდ გარკვეული მიმართულებების სიმეტრიაზე, რომელთა აღწერაც ხდება წერტილოვანი სიმეტრიის 32 კლასით. აქ მხოლოდ უნდა დამატოს ერთი ახალი სიმეტრიის ოპერაცია, რომელიც ვექტორის მიმართ არის შესაძლებელი. თუ \vec{j} ვექტორის მიმართულება შეიცვლება საწინააღმდეგო მიმართულებით, წონასწორობის მდგომარეობა არ დაირღვევა, ამიტომ შესაძლებელია შემოვიღოთ სიმეტრიის ახალი ოპერაცია, რომელიც ცვლის \vec{j} ვექტორის მიმართულებას (ნიშანს) სივრცის ყოველ წერტილში, მაგრამ არ მოქმედებს სივრცულ კოორდინატზე. ასეთი ტიპის ოპერაცია ჩვენ აღნიშნული გეჰონდა R ასოთი. ამიტომ $\vec{j} \neq 0$ მქონე კრისტალების მაგნიტური სიმეტრიის შესაძლებელი კლასები უნდა შეიცავდნენ ყველა ბრუნვისა და, არეკვლებთან ერთად (A ტიპის გარდაქმნები) კიდევ AR ტიპის გარდაქმნებს, ე. ი. გეომეტრიული გარდაქმნებისა და \vec{j} ვექტორის მიმართულების საწინააღმდეგო მიმართულებით შეცვლის კომბინაციებს. ასეთი სახით მიღებული მაგნიტური სიმეტრიის ჯგუფები და შუბნიკოვის ანტისიმეტრიის (ფერადი სიმეტრიის) ჯგუფები იზომორფულ ჯგუფებს წარმოადგენენ.

ცხადია, რომ ამ ახალი ტიპის ჯგუფებში R ელემენტი არ შეიძლება შედიოდეს, როგორც დამოუკიდებელი ელემენტი, ვინაიდან მაშინ $\vec{j} = -\vec{j}$ და $\vec{j} = 0$ ყველა წერტილისათვის, რაც იმას ნიშნავს, რომ სხეულს საერთოდ არ გააჩნია მაგნიტური სტრუქტურა.

ჩვენ უნდა განვიხილოთ იმ კრისტალების სიმეტრიის ყველა შესაძლებელი წერტილოვანი ჯგუფები, რომლებისთვისაც $\vec{j} \neq 0$. მაგნიტური თვისებების მაკროსკოპული სიმეტრიის თვალსაზრისით ეს იმას ნიშნავს, რომ \vec{j} -ის განაწილების სიმეტრიის დასადგენად, წინათ განხილულ გეომეტრიული ტიპის სიმეტრიულ გარდაქმნებს უნდა დაემატოს ოპერაცია R , რომელიც სივრცის თითოეულ წერტილში ცვლის \vec{j} ვექტორის მიმართულებას საწინააღმდეგო მიმართულებით (ცვლის ნიშანს), მაგრამ ამავე დროს არ მოქმედებს სივრცულ კოორდინატებზე და ამის გამო კომუტირებს A ტიპის ყველა გარდაქმნასთან ($AR=RA$). როგორც განსაზღვრიდან ჩანს R ელემენტი მეორე რიგის ელემენტია, ვინაიდან $R^2=E$.

R ელემენტის აღნიშნული თვისებებიდან გამომდინარეობს, რომ RA ტიპის გარდაქმნა მხოლოდ მაშინ შეიძლება მიეკუთვნოს ჯგუფის სიმეტრიულ გარდაქმნას, როდესაც A ლუწი რიგის ელემენტია. მართლაც, თუ A კენტი რიგისაა, მაშინ $R^k A^k = RA^k = R$, რაც შეუძლებელია (აქ k კენტი რიცხვია და $A^k = E$). ეს იმას ნიშნავს, რომ შეუძლებელია R, R^3, R^5 ტიპის გარდაქმნები.

აღნიშნულ RA სახის გარდაქმნები M ასოთი. მაშინ ადვილად დასაწახია, რომ ერთსა და იმავე ჯგუფში არ შეიძლება ერთდროულად შედიოდნენ გარდაქმნები A და $M=RA$, ვინაიდან ამ შემთხვევაში ჯგუფში გაჩნდება ელემენტი $MA^{-1}=R$, რაც, როგორც დავინახეთ, შეუძლებელია; ამის საფუძველზე შესაძლებელია შემოვიღოთ ინდექსები A და M გარდაქმნებისათვის; მაგ., M_k და A_i ისე, რომ $k \neq i$ და როდესაც $k=1, 2, \dots, m$ ($M_k=RA_k$), მაშინ $i=m+1, m+2, \dots, n$.

ცხადია, თუ R გარდაქმნას შევცვლით ერთეულოვანი გარდაქმნით ($R \rightarrow E$), მაშინ $M_k \rightarrow A_k$ და n ელემენტი A_k ($k=1, 2, \dots, m$) და A_i ($m+1, \dots, n$) ქმნის ერთ-ერთ კრისტალოგრაფიულ ჯგუფს იმ 32 კლასიდან, რომლებიც ზემოთ იყო მიღებული. ეს ხდება იმის გამო, რომ ამ შემთხვევაში \vec{j} ვექტორის გარდაქმნას მხედველობაში არ ვიღებთ და ვღებულობთ ჩვეულებრივ კრისტალოგრაფიული სიმეტრიის ჯგუფებს. ამის საფუძველზე შეიძლება დავასკვნათ, რომ სიმეტრიულ გარდაქმნათა G ჯგუფში, რომელიც M_k და A_i ტიპის ელემენტებს შეიცავს, A_i ელემენტები ქმნიან H ქვეჯგუფს, რომელიც ერთ-ერთ კრისტალოგრაფიულ წერტილოვან ჯგუფს თანხვედბა. აღნიშნული თვისებები საშუალებას იძლევიან გამოვიყვანოთ სიმეტრიის ყველა შესაძლებელი წერტილოვანი ჯგუფები. ამისათვის ავიღოთ სიმეტრიის წერტილოვანი ჯგუფი, რომლის ელემენტები ქმნიან G ჯგუფს. G ჯგუფის ელემენტებისაგან ვიპოვოთ H ქვეჯგუფი (A_i ელემენ-

ტებით). როგორც ვიცით, H ქვეჯგუფი, ამ შემთხვევაში, თვითონ წარმოადგენს ერთ-ერთ ჯგუფს ზემოთ მოყვანილი 32 ჯგუფიდან. G ჯგუფის ყველა ელემენტი, რომლებიც არ შევიდნენ H ქვეჯგუფში, ე. ი. $\{G-H\}$ სიმრავლის ელემენტები გავამრავლოთ R -ზე. ასეთი გზით მიიღება $M_k = RA_k$ ელემენტები. თუ A_i და M_k ელემენტები ქმნიან ჯგუფს, ეს იქნება იმ ტიპის ჯგუფი, რომელსაც ჩვენ ვეძებთ.

შეიძლება დამტკიცდეს, რომ A_i და M_k ელემენტების სიმრავლე ქმნის ჯგუფს მხოლოდ იმ შემთხვევაში, როდესაც H ქვეჯგუფის ინდექსი G ჯგუფში უდრის 2. ეს იმას ნიშნავს, რომ თუ G ჯგუფის რიგი არის n , H ქვეჯგუფის რიგი უნდა იყოს $n/2$. მაშინ G ჯგუფის ელემენტების სიმრავლისათვის მივიღებთ

$$G = H + (G-H). \quad (4.39)$$

ახლა მაგნიტური სიმეტრიის (ანტისიმეტრიის) G ჯგუფის მისაღებად საკმარისია $G-H$ სიმრავლის ელემენტები გავამრავლოთ R ოპერატორზე

$$\underline{G} = H + R(G-H). \quad (4.40)$$

ეს იქნება n რიგის ჯგუფი, ეინაიდან H და $(G-H)$ სიმრავლეები თითოეული შეიცავს $n/2$ ელემენტს. ამგვარად, მაგნიტური სიმეტრიის ყველა ჯგუფის მისაღებად საჭიროა ავიღოთ სიმეტრიის 32 წერტილოვანი ჯგუფი; თითოეული ჯგუფისათვის მოვძებნოთ ქვეჯგუფები, რომელთა ინდექსი უდრის 2. ჯგუფის ის ელემენტები, რომელნიც არ შევიდნენ ქვეჯგუფებში, გავამრავლოთ R ოპერატორზე და მივიღოთ ახალი ტიპის ელემენტები RA_k . ამ ელემენტებისა და ქვეჯგუფის A_i ელემენტების ერთობლიობა მოგვცემს ახალ ჯგუფს.

მაგალითისათვის განვიხილოთ ჯგუფი $2/m$. როგორც ვიცით, ეს არის მეთხე რიგის ჯგუფი ელემენტებით $\{E, 2, \bar{1}, m\}$. ამ ჯგუფს გააჩნია მეორე რიგის (ინდექსით—2) სამი ქვეჯგუფი:

$$\underline{H}_1\{E, 2\}, \quad \underline{H}_2\{E, m\}, \quad \underline{H}_3\{E, \bar{1}\}.$$

(4.40) წესის თანახმად, ახალი ტიპის ჯგუფის მისაღებად დანარჩენი $G-H$ ელემენტი უნდა გამრავლდეს R ოპერატორზე, ე. ი. პირველ შემთხვევაში მივიღებთ ელემენტებს $R\bar{1}, Rm$, რომლებსაც აღვნიშნავთ $\underline{\bar{1}}$ და \underline{m} . ქვეჯგუფის ელემენტებთან ერთად ისინი შექმნიან ჯგუფს $\{E, 2, \underline{\bar{1}}, \underline{m}\}$, რომელიც აღინიშნება $2/m$. ასევე მოვიქცევით დანარჩენი ორი ქვეჯგუფის მიმართ; მაშინ ძირითად $2/m$ ჯგუფთან ერთად მივიღებთ შემდეგ ჯგუფებს:

$$\begin{aligned} & 2/m\{E, 2, \bar{1}, m\}; \\ & 2/\underline{m}\{E, 2, \underline{\bar{1}}, \underline{m}\}; \\ & \underline{2}/m\{E, \underline{2}, \underline{\bar{1}}, m\}; \\ & \underline{2}/\underline{m}\{E, 2, \bar{1}, \underline{m}\}. \end{aligned} \quad (4.41)$$

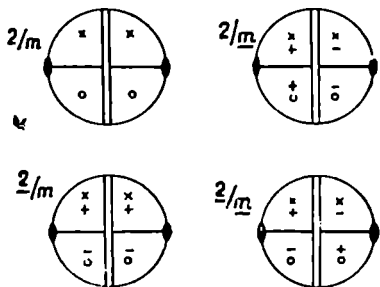
ხშირად იმ ელემენტებს, რომლებზედაც არ მოქმედებს R ოპერატორი, აღნიშნავენ $+$ ნიშნით, ხოლო ელემენტებს, რომელნიც განიცდიან ამ ოპერატორის მოქმედებას, — ნიშნით. მაშინ აღნიშნული ჯგუფები შეიძლება კიდევ ასე ჩაიწეროს:

$$\begin{aligned} & 2/m\{E, 2, \bar{1}, m\}; \\ & 2/m\{+ + - -\}; \\ & \underline{2/m}\{+ - - +\}; \\ & \underline{2/m}\{+ - + -\}. \end{aligned} \tag{4.42}$$

(4.15—23) ნახაზებზე ნაჩვენები იყო 32 კრისტალოგრაფიული კლასის ელემენტების სტერეოგრაფიული გეგმილი და წერტილების M სიმბოლო, რომელზედაც კლასში შემავალი ელემენტები იზომორფულად არიან გადასახლნი. ასეთივე გადასახვა შესაძლებელია მაგნიტური სიმეტრიის კლასების მიმართ (ნახ. 4.27). ჩვენი მაგალითის შემთხვევაში ვიღებთ სტერეოგრაფიულ გეგმილს $2/m$ კლასის ელემენტებისათვის და ამ ელემენტების იზომორფული 4 წერტილის სიმბოლეს. თითოეულ წერტილს მიეწერება ნიშანი $+$ ან $-$ (4.42)-ის მიხედვით.

ასეთი სახით მაგნიტური სიმეტრიის ჯგუფების გამოყვანა პირველად შესრულებული იყო 1956 წელს ტავეერისა და ზაიცევის მიერ. გამოიკვია, რომ არსებობს 90 მაგნიტური სიმეტრიის ჯგუფი. აქედან 32 თანხვედბა წინათ გამოყვანილ სიმეტრიის კლასებს, ხოლო 58 ჯგუფი ახალი ბუნებისაა. ყველა ეს ჯგუფი, შესაბამისი საერთაშორისო აღნიშვნებით, მოცემულია (4.5) ცხრილში.

R ოპერატორის შემოღების შემდეგ განზოგადებული სიმეტრიის ჯგუფები შეიძლება დაეყოთ სამ კატეგორიად: პირველ კატეგორიას მიეკუთვნება ჯგუფები, რომლებიც საერთოდ არ შეიცავენ R ოპერაციას. ეს ის 32 კრისტალოგრაფიული ჯგუფია, რომელნიც განსაზღვრავენ მრავალწახ-



ნახ. 4.27. G და \underline{G} ჯგუფების გადასახვა წერტილების M სიმბოლეზე.

ნაგების სიმეტრიას. ასეთი ჯგუფები შეიძლება იყოს მხოლოდ ერთი ფერის შავი ან თეთრი; ამიტომ შუბნიკოვი მათ პოლარულ ჯგუფებს უწოდებს. აღნიშნული ჯგუფების შეტანა მაგნიტური სიმეტრიის ჯგუფებთან ერთად მხოლოდ იმის მაჩვენებელია, რომ სიმეტრიის წერტილოვანი გარდაქმნების დროს არ იცვლება კრისტალის ფიზიკური თვისებების ნიშანი, ამ შემთხვევაში ატომების მაგნიტური მომენტების ორიენტაცია.

მეორე კატეგორიას მიეკუთვნება ჯგუფები, რომლებიც შეიცავენ R ოპერაციას, როგორც დამოუკიდებელ ელემენტს. ასეთი ჯგუფები წარმოადგენენ ზემოთ აღნიშნული 32 ჯგუფისა და $G(E, R)$ ჯგუფის პირდაპირ ნამრავლს. ეს იქნება $2n$ ელემენტის მქონე ჯგუფები (თუ ძირითად ჯგუფში n ელემენტია). როგორც დავინახეთ, ჯგუფები, რომლებიც R ელემენტს შეიცავენ, წმინდა სახით არ შეიძლება იყვნენ მაგნიტური სიმეტრიის ჯგუფები. ამიტომ ისინი შეიძლება გამოვიყენოთ მხოლოდ პარამაგნიტური ან დიამაგნიტური კრისტალებისათვის, სადაც $\bar{j}=0$. ფერის მიხედვით ეს ჯგუფები ერთდროულად შეიძლება იყოს შავიც და თეთრიც, ამიტომ შუბნიკოვი ასეთ ჯგუფებს პირობით უწოდებს ნაცრისფერ ჯგუფებს.

მესამე კატეგორიაში შედის ჯგუფები, რომლებიც შეიცავენ RA ტიპის ერთ ელემენტს მაინც. ეს ის 58 მაგნიტური სიმეტრიის ჯგუფია, რომელნიც მივიღეთ ზემოთ; ფერების მიხედვით ამ ჯგუფს ორი ფერის (შავ-თეთრი) ან შერეული პოლარობის ჯგუფები ეწოდება.

ცხრილი 4.5

№ ჯგ.	G	H ქვეჯგ.	\underline{G}	სიმეტრიის ელემენტები
1	1	—	—	E
2	$\bar{1}$	—	—	$E, \bar{1}$
3	—	1	$\bar{1}$	+ —
4	m	—	—	E, m
5	—	1	\underline{m}	+ —
6	2	—	—	$E, 2$
7	—	1	$\underline{2}$	+ —
8	$2/m$	—	—	$E, 2, \bar{1}, m$
9	—	m	$\underline{2/m}$	+ — — +
10	—	2	$\underline{2/m}$	+ + — —
11	—	$\bar{1}$	$\underline{2/m}$	+ — — —
12	$2mm$	—	—	$E, 2, m_v', m_v''$
13	—	m	$\underline{2mm}$	+ — + —
14	—	2	$\underline{2mm}$	+ + — —
15	222	—	—	$E, 2, 2', 2''$
16	—	2	$\underline{222}$	+ — — +
17	mmm	—	—	$E, 2, 2', 2'', \bar{1}, m_h, m'_v, m_v''$
18	—	$2mm$	\underline{mmm}	+ + — — — — + +
19	—	222	\underline{mmm}	+ + + + — — — —
20	—	$2/m$	\underline{mmm}	+ + — — + + — —
21	4	—	—	$E, 4, 4^2, 4^3$

№ წმ.	G	H ქვერ.	G	სიმეტრიის ელემენტები
22	—	2	4	+ — + —
23	$\bar{4}$	—	—	E, $\bar{4}(2)$, $4^2=2$
24	—	2	$\bar{4}$	+ — +
25	4/m	—	—	E, 4, 4^2 , 4^3 , $\bar{1}$, $\bar{4}(2)$, m_h
26	—	4	4/m	+ + + + — — —
27	—	$\bar{4}$	4/m	+ — + — — + —
28	—	2/m	4/m	+ — + — + — +
29	4mm	—	—	E, 4, 4^2 , 4^3 , $2m_v'$, $2m_v''$
30	—	4	4mm	+ + + + — —
31	—	2mm	4mm	+ — + — + —
32	$\bar{4} 2m$	—	—	E, 2, $2'$, $2''$, m_v' , $\bar{4}(2)$, m_v''
33	—	$\bar{4}$	$\bar{4} 2m$	+ + — — — + —
34	—	222	$\bar{4} 2m$	+ + + + — — —
35	—	2mm	$\bar{4} 2m$	+ + — — + — +
36	422	—	—	E, 4, 4^3 , 4^2 , $2'(2)$, $2''(2)$
37	—	4	422	+ + + + — —
38	—	222	42 2	+ — — + + —
39	4/mmm	—	—	E, $4(2)$, 2, $2'(2)$, $2''(2)$, $\bar{1}$, $\bar{4}(2)$, m_h , $2m_v'$, $2m_v''$
40	—	422	4/mmm	+ + + + + — — — —
41	—	4mm	4/mmm	+ + + — — — — + +
42	—	mmm	4/mmm	+ — + + — + — + + —
43	—	$\bar{4} 2m$	4 / mmm	+ — + — + — + — + —
44	—	4/m	4/mmm	+ + + — — + + + — —
45	3	—	—	E, 3, 3^2
46	$\bar{3}$	—	—	E, 3, 3^2 , $\bar{1}$, $\bar{3}(2)$
47	—	3	$\bar{3}$	+ + + — —
48	3m	—	—	E, 3, 3^2 , $3m_v$
49	—	3	3m	+ + + —
50	32	—	—	E, 3, 3^2 , 2, $2'$, $2''$
51	—	3	32	+ + + — — —
52	$\bar{3} m$	—	—	E, 3, 3^2 , 2, $2'$, $2''$, $\bar{1}$, $\bar{3}(2)$, $3m_v$
53	—	3	$\bar{3} m$	+ + + — — — + + —
54	—	3m	$\bar{3} m$	+ + + — — — — +
55	—	32	$\bar{3} m$	+ + + + + — — —
56	6	—	—	E, 6, 6^2 , 6^3 , 6^4 , 6^5

№ ჯ.ბ	G	H ქვეჯ.	<u>G</u>	სიმეტრიის ელემენტები
57	—	3	6	+ - + - + -
58	6	—	—	$E, 3, 3^2, m_h, \bar{6}(\)$
59	—	3	<u>6</u>	+ + + - -
60	6 m	—	—	$E, 6, 6^2, 6^3, 6^4, 6^5, \bar{1}, \bar{6}(2), \bar{3}(2), m_h$
61	—	6	<u>6/m</u>	+ + + + + + - - - -
62	—	<u>3</u>	<u>6/m</u>	+ - + - + - + - + +
63	—	<u>6</u>	<u>6/m</u>	+ - + - + - - - + - +
64	<u>6m2</u>	—	—	$E, 3, 3^2, 2(3), m_h, \bar{6}(2), 3m_v$
65	—	<u>6</u>	<u>6m2</u>	+ + + - + + -
66	—	3m	<u>6 m 2</u>	+ + + - - - +
67	—	32	<u>6 m 2</u>	+ + + + - - -
68	6mm	—	—	$E, 6, 6^2, 6^3, 6^4, 6^5, 3m_v', 3m_v''$
69	—	6	<u>6mm</u>	+ + + + + + - -
70	—	3m	<u>6 mm</u>	+ - + - + - - +
71	622	—	—	$E, 6, 6^2, 6^3, 6^4, 6^5, 2'(3), 2''(3)$
72	—	6	<u>622</u>	+ + + + + + - -
73	—	32	<u>622</u>	+ - + - + - + -
74	6/mmm	—	—	$E, 6, 6^2, 6^3, 6^4, 6^5, 2'(3), 2''(3), \bar{1}, \bar{6}(2), \bar{3}(2), m_h, 3m_v', 3m_v'',$
75	—	<u>6 m 2</u>	<u>6/mmm</u>	+ - + - + - - + - + - + + -
76	—	<u>3 m</u>	<u>6/mmm</u>	+ - + - + - + - + - + - + -
77	—	622	<u>6/mmm</u>	+ + + + + + + - - - - -
78	—	6mm	<u>6/mmm</u>	+ + + + + + - - - - + +
79	—	6/m	<u>6/mmm</u>	+ + + + + + - - + + + - -
80	23	—	—	$E, 3(4), 3^2(4), 2(3)$
81	m3	—	—	$E, 3(4), 3^2(4), 2(3), \bar{1}, \bar{3}(8), 3m$
82	—	23	<u>m3</u>	+ + + + - - -
83	<u>43m</u>	—	—	$E, 3(4), 3^2(4), 2(3), 4(6), 6m$
84	—	23	<u>4 3 m</u>	+ + + + - -
85	432	—	—	$E, 3(4), 8^3(4), 2(6), 4(3), 4^2(3), 4^3(3)$
86	—	23	<u>4 3 2</u>	+ + + - - + -
87	m3m	—	—	$E, 3(8), 2(3), 2(6), 4(6), \bar{1}, \bar{3}(8), 3m, 6m, \bar{4}(6)$
88	—	432	<u>m3 m</u>	+ + + + + - - - -
89	—	m3	<u>m3 m</u>	+ + + - - + + + - -
90	—	4 3 m	<u>m3 m</u>	+ + + - - - - - + +

აქამდე ჩვენ შევისწავლიდით მაკროსკოპული კრისტალების სიმეტრიას და ვგულისხმობდით, რომ კრისტალი წარმოადგენს ყველა წერტილში ერთნაირი თვისებების მქონე უწყვეტ გარემოს (კონტინუუმი). კრისტალების გარეგანი სიმეტრიის დადგენის დროს მათი, როგორც სასრული ფორმის, მრავალწახნაგების გადაადგილება სივრცეში ვერ ჩაითვლებოდა სიმეტრიულ გარდაქმნად და ამიტომ ტრანსლაცია არ წარმოადგენდა სიმეტრიის ელემენტს. მაგრამ მდგომარეობა იცვლება, როდესაც ვიწყებთ კრისტალების მიკროსიმეტრიის, უშუალოდ კრისტალურ მესერში ატომებისა და მოლეკულების განლაგების სიმეტრიის განხილვას. ასეთ შემთხვევაში საქმე გვაქვს კრისტალური მესრის ელემენტარულ უჯრედთან. რა თქმა უნდა, ერთი და იგივე კრისტალის ელემენტარული უჯრედები სრულიად ერთნაირია, მაგრამ თვით ელემენტარული უჯრედის შიგნით ყველა წერტილი იდენტური არ არის და ამიტომ მათი განლაგების სიმეტრიის დასახასიათებლად საჭიროა სიმეტრიის ელემენტების გარკვეული ფიქსირება ელემენტარული უჯრედის სხვადასხვა წერტილში. ახლა უკვე სრულებით არ არის საეალდებულო, რომ ყველა სიმეტრიის ელემენტი იკვეთებოდეს ერთ წერტილში, ვინაიდან მესრის ტრანსლაციების მოქმედებით ხდება ელემენტარული უჯრედის მთელი თავისი წერტილებითა და სიმეტრიის ელემენტებით გადანაცვლება სივრცის სამივე მიმართულებით. ამგვარად, თუ, მაგალითად, ელემენტარული უჯრედის რომელიმე წერტილში ვადის მეორე რიგის ლერძი, ის გამეორებული იქნება კრისტალში მესრის ტრანსლაციური სიმეტრიის მიხედვით უსასრულო რაოდენობით. ეს იმას ნიშნავს, რომ ნებისმიერ სივრცობრივ მესერში არსებობს სიმეტრიის ელემენტების უსასრულოდ დიდი რიცხვი.

აქედან ცხადია, რომ კრისტალური მესრის სიმეტრიის შესასწავლად საკმარისია განვიხილოთ ერთ ელემენტარულ უჯრედში შემავალი სიმეტრიის ელემენტები და მათი განლაგება; ამასთანავე გავითვალისწინოთ, რომ წინათ განხილულ სიმეტრიის ელემენტებს ახლა ემატება ახალი ელემენტი — მესერში არსებული ტრანსლაციები. თავის მხრივ, თვით ელემენტარული უჯრედის სიმეტრია და ფორმა დამოკიდებულია მესერში შესაძლებელ ტრანსლაციებზე; ასე რომ, კრისტალის, როგორც სამგანზომილებიანი დისკონტინუუმის განხილვის დროს მესერი წარმოადგენს სიმეტრიის ახალ და ძირითად ელემენტს, რომელიც მოქმედებს! სხვა სიმეტრიის ელემენტებზე და გარკვეულ შეზღუდვას ადებს მათ (მაგ., ლერძების რიგი, მათ შორის კუთხეები და სხვა). ამავე დროს სიმეტრიის ელემენტებიც მოქმედებენ მესერზე და მის მეტრიკულ თვისებებზე; მესრის ქვეშ ამ შემთხვევაში იგულისხმება ტრანსლაციური ჯგუფი, ე. ი. სამი არაკომპლანარული ვექტორი \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} , რომელნიც მათ გასწვრივ არჩეულ x_1 , x_2 , x_3 კოორდი-

ნატოა ლერძებზე ერთეულოვან ვექტორებს წარმოადგენენ (ბაზისი). ამ ვექტორების (ტრანსლაციების) მოქმედებით ხდება ნებისმიერი წერტილის გადანაცვლება ისე, რომ სივრცობრივი მესერი, საბოლოო ჯამში, წარმოადგენს ტრანსლაციურად ეკვივალენტური წერტილების სისტემას, რომელთა კოორდინატები, გამოსახული a, b, c მონაკვეთებში, მთელი რიცხვებია. ამიტომ ყოველგვარი პარალელური გადატანა (ტრანსლაცია), რომელიც ელემენტარულ უჯრედს უთავსებს მეორეს, ე. ი. ახდენს მესრის თვითშეთავსებას, წარმოადგენს კოორდინატთა სათავის გადანაცვლებას წერტილში (კვანძში), რომლის კოორდინატები m, n, p მთელი რიცხვებით გამოისახება; ან, სხვაგვარად, ნებისმიერი გადატანა მესერში განისაზღვრება ვექტორით (3,7)

$$\vec{t} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}.$$

მოკლედ ჩაწერისათვის აღვნიშნოთ:

$$m, n, p = m_i \quad (i=0, \pm 1, \pm 2; \dots),$$

ხოლო $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c} = \vec{a}_i \quad (i=1, 2, 3)$; მაშინ

$$\vec{t} = m_1\vec{a}_1 + m_2\vec{a}_2 + m_3\vec{a}_3 = m_i\vec{a}_i. \quad (4.43)$$

აქვე უნდა შევნიშნოთ, რომ ასეთი სახით არჩეული $x_1x_2x_3$ კოორდინატთა ლერძები შეიძლება ნებისმიერი კუთხით იყვნენ დახრილნი ურთიერთ მიმართ და გვაძლევდნენ არაორთოგონალურ კოორდინატთა სისტემას. თუ ჩვენ შევეცდებით ავირჩიოთ მართკუთხა კოორდინატთა სისტემა (ორთოგონალური მატრიცების მისაღებად), მაშინ კვანძის კოორდინატების გამომსახველი m, n და p რიცხვები შეიძლება ყოველთვის მთელი აღარ აღმოჩნდნენ.

ორი თანამიმდევრული გადატანა \vec{t}_i და \vec{t}_j ეკვივალენტურია მესრის \vec{t}_k ვექტორით გადატანის, თუ $\vec{t}_k = \vec{t}_i + \vec{t}_j$. მესრის ყველა ტრანსლაციის ერთობლიობა $T\{\vec{t}_i\}$ ქმნის ჯგუფს, რომლის ჯგუფური ოპერაცია ვექტორების შეკრებას წარმოადგენს, ასე რომ $\vec{t}_i\vec{t}_j = \vec{t}_k$ კომპოზიციის წესის ნაცვლად გვექნება

$$\vec{t}_k = \vec{t}_i + \vec{t}_j. \quad (4.44)$$

T ჯგუფს ტრანსლაციების ჯგუფი ეწოდება და ის სივრცის ყოველგვარ გადანაცვლებათა ჯგუფის ქვეჯგუფს წარმოადგენს. ამის დამტკიცება ადვილია, თუ გავითვალისწინებთ, რომ ტრანსლაციათა ჯგუფის ჯგუფური ოპერაცია (4.44) ფორმულით განსაზღვრული ვექტორული შეკრებაა, რომელიც ასოციაციურობის კანონს ემორჩილება. ერთეულოვანი ელემენტის როლს ამ შემთხვევაში ასრულებს ნულოვანი ვექტორი $\vec{t}_i + \vec{0} = \vec{0} + \vec{t}_i = \vec{t}_i$

და ყოველგვარ ტრანსლაციას შეესაბამება მისი საწინააღმდეგო გადატანა — $t_i = t_i^{-1}$, რომელიც წერტილს საწყის მდგომარეობაში დააბრუნებს.

თუ ვექტორული T ჯგუფიდან გადავალთ ოპერატორების იზომორფულ ჯგუფებზე, საჭიროა თითოეულ \vec{t}_i ვექტორს შეესაბამებოდეს პარალელური გადატანის ოპერატორი $[E/t_i]$; ვექტორების ნამრავლს $\vec{t}_i + \vec{t}_j$ — ოპერატორების ნამრავლი $[E/t_i][E/t_j] = [E/t_i + t_j]$; ნულოვან ვექტორს — იგივეური გარდაქმნის ოპერატორი $[E/0]$, ხოლო საწინააღმდეგო ვექტორს — შებრუნებული ოპერატორი $[E/t_i]^{-1} = [E/-t_i]$. მესრის ნებისმიერი \vec{r} — რადიუს-ვექტორი $[E/t_i]$ ოპერატორის მოქმედებით გადავა \vec{r}' ვექტორად და მივიღებთ

$$\vec{r}' = [E/t_i]\vec{r} = \vec{r} + \vec{t}_i. \quad (4.45)$$

აქ \vec{t}_i მესრის ტრანსლაციას წარმოადგენს და გამოისახება (4.43) ფორმულით, სადაც m_i მთელი რიცხვებია. ვექტორები $\vec{r} = x_1\vec{a}_1 + x_2\vec{a}_2 + x_3\vec{a}_3$ და $\vec{r}' = x_1'\vec{a}_1 + x_2'\vec{a}_2 + x_3'\vec{a}_3$ განსაზღვრავენ (x_1, x_2, x_3) წერტილის გადაადგილებას (x_1', x_2', x_3') წერტილში და $x_1' = x_1 + m_1$; $x_2' = x_2 + m_2$; $x_3' = x_3 + m_3$.

ახლა, შესაძლებელია, მესრის სიმეტრიული გარდაქმნებისათვის, რომელნიც წერტილოვანი G ჯგუფის სიმეტრიულ გარდაქმნებს და T ტრანსლაციებს შეიცავენ, ასევე შევქმნათ ოპერატორების იზომორფული ჯგუფი: ბრუნვებისა და სიბრტყეში არეკვლის ოპერაციებს ჩვენ აღვნიშნავდით A ასოთი, მაშინ ახალი ტიპის ოპერატორი იქნება $[A/t_i]$. ამ ოპერატორის მოქმედებით \vec{r} ვექტორი გადაყვანილი იქნება \vec{r}' ვექტორად

$$\vec{r}' = [A/t_i]\vec{r} = A\vec{r} + \vec{t}_i. \quad (4.46)$$

ეს ოპერატორული განტოლება კოორდინატებში ასე დაიწერება:

$$x'_1 = a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + t_{1i}$$

$$x'_2 = a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + t_{2i}$$

$$x'_3 = a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + t_{3i}$$

ან

$$\begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} t_{1i} \\ t_{2i} \\ t_{3i} \end{pmatrix}$$

და გამოხატავს სივრცის წრფივ და არაერთგვაროვან გარდაქმნას.

აქედან ცხადია, რომ $[A/0]$ ტიპის ოპერატორები შეესაბამებან იმ სიმეტრიულ ოპერაციებს, რომელნიც ზემოთ მიღებულ 32 წერტილოვან ჯგუფს (G ჯგუფებს) ან კრისტალურ კლასებს ქმნიდნენ.

თუ წმინდა გადატანის $[E/t_i]$ ოპერატორს ვამოქმედებთ ნულოვან ვექტორზე (კვანძზე), მივიღებთ ტრანსლაციურად ეკვივალენტური წერტილების სისტემას, რომელზედაც ზემოთ გვქონდა ლაპარაკი. ამ შემთხვევაში \vec{t}_i ვექტორები სივრცობრივი მესრის ვექტორებს წარმოადგენენ.

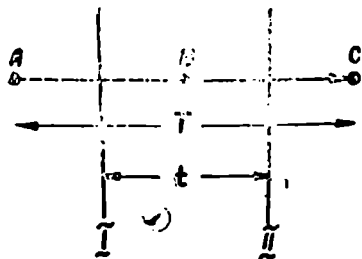
როგორც ვხედავთ, ოპერატორი $[A/t_i]$ აერთიანებს ორი სახის სიმეტრიულ გარდაქმნას. პირველი სახის სიმეტრიული გარდაქმნები შეიცავენ ბოუნეებს და სიბრტყეში არეკვლას, ე. ი. იმ გარდაქმნებს, რომელნიც G ჯგუფის სიმეტრიის ელემენტებს შეადგენენ, ხოლო მეორე სახის სიმეტრიულ გარდაქმნას მიეკუთვნება დისკონტინუუმის პარალელური გადატანა (T ტრანსლაციური ჯგუფი). გარდა ამისა, მესერში შეიძლება გვხვდებოდეს ამ ორი სახის გარდაქმნების კომბინაციები. ამგვარად, თუ მიმდევრობით ჩავატარებთ დისკონტინუუმის „ბრუნვას“ $[A/O]$, ხოლო შემდეგ პარალელურ გადატანას $[E/t_i]$, მაშინ, საბოლოო კომბინირებულ გარდაქმნას შეესაბამება ოპერატორი $[A/t_i]$, რომელიც წარმოადგენს ამ ოპერატორების ნამრავლს (თანამიმდევრულ ოპერაციებს)

$$[A/t_i] = [E/t_i] [A/O]. \quad (4.47)$$

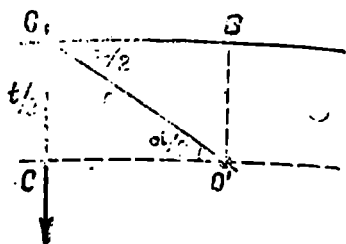
შეიძლება დამტკიცდეს, რომ $[A/t_i]$ ოპერატორები ქმნიან ჯგუფს. ამ ჯგუფს მესრის სივრცობრივი ჯგუფი ეწოდება. ამგვარად, სივრცობრივი ჯგუფები შეიძლება გამოვიყვანოთ როგორც სიმეტრიის 32 წერტილოვანი ჯგუფის (G ჯგუფების) განზოგადება ტრანსლაციების T ჯგუფის საშუალებით. ეს იქნება ჯგუფები, რომლებიც ბრუნვებისა და სარკული არეკვლების გარდა შეიცავენ ამ ელემენტების ტრანსლაციებთან კომბინირებით მიღებულ სიმეტრიის ელემენტებს.

დისკონტინუუმის სიმეტრიის ელემენტები

შვეისწავლოთ $[A/t_i]$ ოპერატორის ბუნება უფრო დეტალურად და გამოვარკვიოთ რა სახის სიმეტრიის ელემენტები წარმოიშობა ბრუნვებისა და არეკვლების ტრანსლაციებთან კომბინაციის შედეგად. (4.47) თანახმად, ოპერატორის მოქმედება შეიძლება წარმოვიდგინოთ ბრუნვის (ან სარკული ბრუნვის) და ტრანსლაციის ნამრავლის სახით. ეს იმას ნიშნავს, რომ ამ ოპერაციების თანამიმდევრული შესრულება გვაძლევს მარეზულტირებელ ოპერაციას, რომელიც $[A/t_i]$ ოპერატორის მოქმედებას შეესაბამება. დავუშვათ, რომ A წარმოადგენს n -ური რიგის $C_n(\alpha)$ ღერძის ირგვლივ ბრუნვას ან არეკვლას m სიბრტყეში, ხოლო t — ამ ღერძის ან სიბრტყეს მიმართ მართობული ტრანსლაციაა, მაშინ მარეზულტირებელი ელემენტი $[A/t_i]$ ახალს არაფერს მოგვცემს იმ ელემენტებთან შედარებით, რომელნიც წინათ გვქონდა მიღებული. მართლაც, განვიხილოთ ეს შემთხ-



ნახ. 4.28. (I) სიბრტყეში არეკვლის და მის მართობად გადატანის ოპერაციების ტოლქმედი არას სიბრტყე (II), რომელიც პირველისაგან დაშორებულია $t = \frac{T}{2}$ მანძილით.



ნახ. 4.29. ბრუნვის ღერძის და მისდამი მართობული ტრანსლაციის ურთიერთქმედება.

ვევები ცალ-ცალკე. ავიღოთ სიმეტრიის სიბრტყე m და მისდამი მართობული გადანაცვლება t , ე. ი. გარდაქმნა $[m/t]$. როგორც 4.28 ნახაზი გვიჩვენებს, ამ შემთხვევაში შესაძლებელია რამდენიმე მარტივი დებულების დამტკიცება: თანამიმდევრული არეკვლა ორ პარალელურ სიბრტყეში შეიძლება შეიცვალოს ერთი T ტრანსლაციის მოქმედებით, რომლის სიგრძე გაორკეცებულ სიბრტყეთა შორის მანძილის ტოლია. პირიქით, ნებისმიერი T ტრანსლაციის მოქმედება წარმოადგენს ორი პარალელური და $t = \frac{T}{2}$

მანძილით დაშორებულ სიბრტყეებში თანამიმდევრულ არეკვლას; და, ბოლოს, (1) სიბრტყისა და მისი მართობი \vec{BC} გადანაცვლების მოქმედების შედეგი შეიძლება განვიხილოთ როგორც ახალ (II) სიბრტყეში არეკვლა, რომელიც პირველი სიბრტყისაგან t მანძილით იქნება დაშორებული.

ახლა განვიხილოთ ოპერატორი $[C_n(\alpha)/t]$, სადაც t გადანაცვლება ბრუნვის ღერძის მართობია (ნახ. 4.29). O წერტილში ნახაზის სიბრტყის მართობულად გამავალ ბრუნვის ღერძს ვცვლით ორი სიბრტყით — OB და OO' , რომელნიც $\alpha/2$ კუთხით იკვეთებიან (თუ ღერძის ირგვლივ შემობრუნების კუთხე არის α), ხოლო t გადანაცვლებას მის მართობად გამავალი ორი OB და CO' პარალელური სიბრტყით, რომელნიც ერთმანეთისაგან $t/2$ მანძილით არიან დაშორებულნი. ამგვარად, ვიღებთ ოთხ სიბრტყეს: OB, OO', OB, CO'

OB სიბრტყეში ორჯერ არეკვლა წერტილს საწყის მდგომარეობაში დააბრუნებს და ამიტომ გვრჩება ორი სიბრტყე — OO' და CO' , რომელნიც O' წერტილში იკვეთებიან და ადგენენ $\alpha/2$ კუთხეს. ეს იმას ნიშნავს, რომ O' წერტილში ახლა გადის იმავე რიგის ღერძი, როგორც O წერტილ-

ში გადიოდა და დაცილებულია მისგან l მანძილით. კუთხე, რომელსაც ის აღგენს t ტრანსლაციის მიმართულებასთან უდრის $\frac{\pi}{2} - \frac{\alpha}{2} = \frac{\pi - \alpha}{2}$.

l მანძილი განისაზღვრება ტოლობით $t = 2l \sin(\alpha/2)$; თუ, მაგალითად, ღერძი მეორე რიგისაა, $\frac{\pi - \pi}{2} = 0$ და მისი გადანაცვლება მართობული ტრანსლაციის მოქმედებით მოხდება თვით ამ ტრანსლაციის გასწვრივ $l = \frac{t}{2}$ მანძილით; მესამე რიგის ღერძებისათვის $\alpha = \frac{2\pi}{3}$ და $\frac{\pi - \alpha}{2} = \frac{\pi}{6}$, ხოლო $t = l \sqrt{3}$ და, მაშასადამე, ტოლქმედი მესამე რიგის ღერძი მოთავსებული იქნება ტრანსლაციებზე აგებული ტოლგვერდა სამკუთხედის ცენტრში და ა. შ.

განვიხილოთ ოპერატორი $[C_n(\alpha)/t]$, როდესაც ტრანსლაცია დახრილია ბრუნვის ღერძის მიმართ. ღერძის მიმართ დახრილი გადანაცვლება შეიძლება წარმოვიდგინოთ როგორც მართობული და პარალელური ტრანსლაციების თანამიმდევრული მოქმედების შედეგი

$$t = t_{\parallel} \cdot t_{\perp} (\vec{t} = \vec{t}_{\parallel} + \vec{t}_{\perp}). \quad (4.48)$$

ღერძის მართობი ტრანსლაციის მოქმედებას ჩვენ უკვე გავეცანით; ის უბრალოდ გადანაცვლებს ღერძს ახალ მდგომარეობაში. ვინაიდან ღერძი n -ური რიგისაა, წერტილის შემობრუნება მოხდება $\frac{2\pi}{n}$ კუთხით.

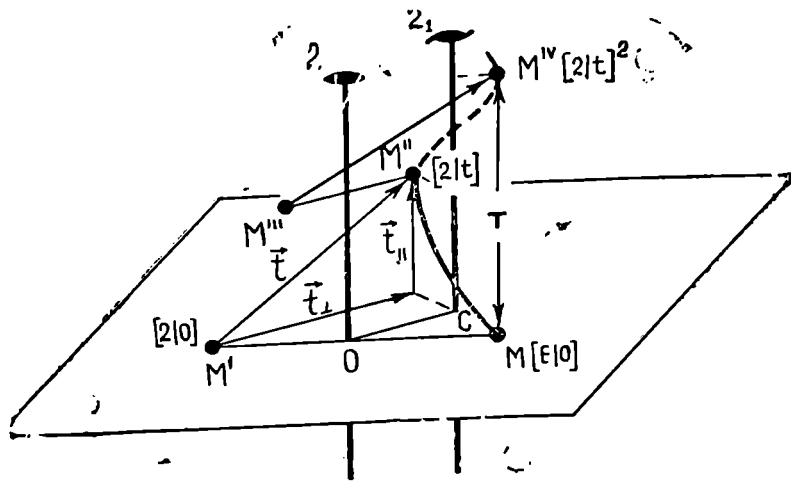
ამის შემდეგ ღერძის პარალელური t_{\parallel} ტრანსლაციის მოქმედებით ეს წერტილი გადაიტანება ღერძის პარალელურად. ცხადია, რომ ასეთი ოპერაცია, გამეორებული n -ჯერ, იქნება ღერძის გასწვრივ წერტილის ერთი სრული პერიოდით (იდენტურობის პერიოდი) გადანაცვლების ეკვივალენტური; ამგვარად

$$[C_n'(\alpha)/t_{\parallel}]^n = T. \quad (4.49)$$

$$\text{სადაც } t_{\parallel} = \frac{T}{n}.$$

4.30 ნახაზზე ნაჩვენებია $[2/t]$ ოპერატორის მოქმედება საწყის M წერტილზე.

$[2/0]$ ოპერატორი მას M' წერტილში გადანაცვლებს, ხოლო \vec{t} ტრანსლაციის საშუალებით, ე. ი. $[2/t]$ ოპერატორის მოქმედებით, ის M'' წერტილში აღმოჩნდება. t ტრანსლაცია შეიძლება წარმოვიდგინოთ როგორც t_{\perp} და t_{\parallel} ტრანსლაციების თანამიმდევრული მოქმედება. მაშინ t_{\perp} მოქმედებით 2 ღერძი გადაინაცვლებს ამ ტრანსლაციის მიმართულებით $CC = \frac{t_{\perp}}{2}$



ნახ. 4.30. მეორე რიგის ხრახნული ლერძის წარმოშობა, 2 ლერძისა და მისდამი დახრილი ტრანსლაციის ურთიერთქმედების შედეგად.

მონაკვეთის სიდიდით. ახლა M წერტილის M'' წერტილში გადასვლა შეიძლება წარმოვიდგინოთ როგორც ბრუნვა ამ ახალი ლერძის ირგვლივ შემდგომი გადანაცვლებით მის პარალელურად t_{\parallel} ტრანსლაციის მანძილზე. თუ $[2/t]$ ოპერაციას კიდევ გავიმეორებთ, ე. ი. ვიმოქმედებთ $[2/t]^2$ ოპერატორით, M^{II} წერტილი M^{IV} წერტილში აღმოჩნდება. ცხადია, რომ M და M^{IV} წერტილები ერთიმეორისაგან იდენტურობის T პერიოდით იქნებიან დაშორებულნი და $t_{\parallel} = \frac{T}{2}$.

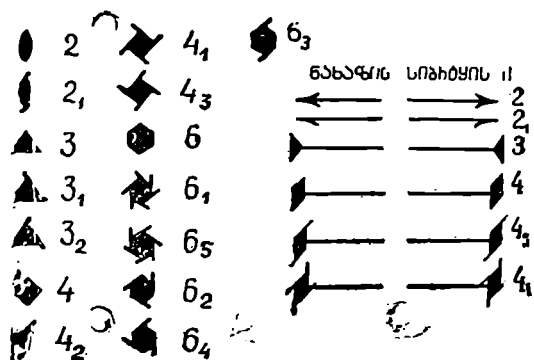
მოძრაობას, როდესაც წერტილი ბრუნავს ლერძის ირგვლივ და შემდეგ ინაცვლებს ამ ლერძის პარალელურად, ხრახნისებური მოძრაობა ეწოდება, ხოლო χ ლერძს—ხრახნული ლერძი. ხრახნული ლერძები აღინიშნება n , ასოთი, სადაც n ლერძის რიგია ($n=1, 2, 3, 4, 6$), ხოლო s ინდექსი $\frac{s}{n}$ წილადის მრიცხველია და განსაზღვრავს ლერძის გასწვრივ გადანაცვლების სიდიდეს, გამოსახულს იდენტურობის პერიოდის ნაწილებში. როდესაც $s=0$ ან $s=n$, ვღებულობთ ჩვეულებრივი ბრუნვის n -ური რიგის ლერძებს. თუ $s=1$, მაგალითად, 4_1 , ეს ნიშნავს, რომ $\frac{360^\circ}{4}$ კუთხით შემობრუნების

შემდეგ წერტილი გადაინაცვლებს ლერძის პარალელურად იდენტურობის პერიოდის $1/4$ მანძილით. ხრახნულ ლერძებში არჩევენ მარჯვენა და მარცხენა ბრუნვის ლერძებს. თუ დამკვირვებლისათვის, რომელიც ხრახნული

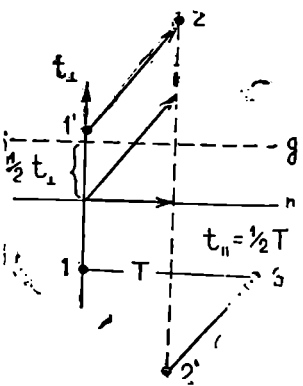
მიმართულებით. ამგვარად, ვიღებთ ენანტიომორფული ლერძების წყვილებს, 3_13_2 , 4_14_3 , 6_16_5 , 6_26_4 . გადანაცვლება 4_2 და 6_3 ლერძების გასწვრივ იდენტურობის პერიოდის ნახევარს უდრის და ამიტომ ამ ლერძებისათვის მარჯვენა და მარცხენა ბრუნვები ერთიმეორისაგან არ განსხვავდებიან. აღნიშნულ წყვილებში ლერძი, რომლის ინდექსი უფრო მცირეა, მარჯვენა ბრუნვის ლერძს წარმოადგენს. 4.32 ნახაზზე მაგალითისათვის ნაჩვენებია მეოთხე რიგის ბრუნვის ლერძისა და იმავე რიგის ხრახნული ლერძების მოქმედება, მათი სტერეოგრაფიული გეგმილები და ჯგუფების შესაბამისი წერტილების კომპლექსები. როგორც ჩანს, მარჯვენა ბრუნვის 4_1 ლერძისათვის გადანაცვლება (ხრახნის ბიჯი) უდრის სრული ტრანსლაციის $\frac{1}{4} T$.

მიღებულია, რომ ბრუნვები ყველა ლერძისათვის ჩაითვალოს მარჯვენა ბრუნვებად. მაშინ მარცხენა ბრუნვის 4_2 ლერძისათვის გადანაცვლება იქნება $\frac{3}{4} T$.

ყველა სახის ლერძების საერთაშორისო აღნიშვნები მოყვანილია (4.33) ნახაზზე. საჩუქელი ან ინვერსიული ლერძებისა და ტრანსლაციების თანამიმდევრული მოქმედება ახალს არაფერს იძლევა, იმიტომ, რომ ამ შემთხვევაში ისევე მიიღება რომელიმე ზემოთ ჩამოთვლილი ხრახნული ლერძებიდან. გამონაკლისს შეადგენს მხოლოდ ლერძი $\bar{2} = m$. სიმეტრიის სიბრტყისა და ტრანსლაციის ურთიერთქმედება, ე. ი. ოპერატორი $[m/t]$ მოითხოვს სპეციალურ შესწავლას. ეს საკითხი ნაწილობრივად ჩვენ უკვე განვიხილეთ (ნახ. 4.28), როდესაც გამოვარკვეეთ, რომ სიმეტრიის სიბრტყისა და მისი მართობი ტრანსლაციის მოქმედების (გადამრავლების)



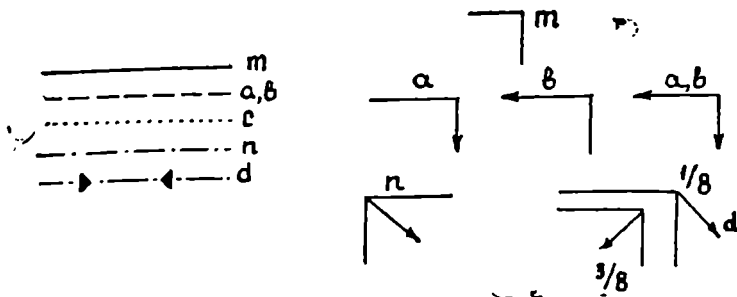
ნახ. 4.33. სიმეტრიის ლერძების პირობითი ნიშნები.



ნახ. 4.34 m სიმეტრიის სიბრტყის და დახრილი t ტრანსლაციის მოქმედება.

შედევად მიიღება ახალი სიმეტრიის სიბრტყე, პირველისაგან დაშორებული $t/2$ მანძილით. თუ t ტრანსლაცია აღებულია სიბრტყის მიმართ დახრილ მდგომარეობაში, ის უნდა დაიშალოს სიბრტყის პარალელურ t_{\parallel} და მართობულ t_{\perp} მდგენლებად. ავიღოთ წერტილი 1 (ნახ. 4.34). m სიბრტყეში არეკვლის შედეგად ის გადავა 1' მდგომარეობაში, ხოლო t ტრანსლაცია მას წერტილში 2 გადაანაცვლებს. თუ იმავე ოპერაციას კიდევ ერთხელ გავიმეორებთ, წერტილი 2 გადავა ჯერ 2' მდგომარეობაში, ხოლო შემდეგ წერტილში 3. წერტილები 1 და 3 დაკავშირებული არიან ერთიმეორესთან მესრის T ტრანსლაციით. დავშალოთ t ტრანსლაცია შემდგენებლად: t_{\perp} და t_{\parallel} სიბრტყის მართობულად და მის პარალელურად. მაშინ $\frac{1}{2} t_{\perp}$ მანძილზე გაჩნდება ახალი სიბრტყე g . ახლა 1 წერტილის 2 წერტილთან შეთავსებისათვის საკმარისია ავრეკლოთ ის g სიბრტყეში (მიიღება 1'' წერტილი) და შემდეგ გავასრიალოთ g სიბრტყის პარალელურად $t_{\parallel} = \frac{1}{2} T$ სიდიდით. ასეთივე გარდაქმნით შესაძლებელია წერტილის 2 შეთავსება წერტილთან 3. ამგვარად, წერტილები 1, 2, 3 დაკავშირებულია სიმეტრიის g სიბრტყით, რომელიც არეკვლისა და თავის პარალელურად სრიალის ოპერაციებს შეიცავს. ასეთ სიბრტყეებს სრიალის სიბრტყეები ეწოდება. მათი საერთო აღნიშვნა არის g .

სხვადასხვა სახის სიმეტრიის სიბრტყეების პირობითი აღნიშვნები ნაჩვენებია 4.35 ნახაზზე. ელემენტარული უჯრედის სიმეტრიის აღწერის დროს, როგორც ვიცით, კოორდინატა სისტემას და, მაშასადამე, \bar{a} , \bar{b} , \bar{c} ერთეულოვან ვექტორებს ირჩევენ ამ უჯრედის წიბოების გასწვრივ, ხოლო სიმეტრიის სარკული ან სრიალის სიბრტყეები გაივლიან საკოორდინატო სიბრტყეებზე ან მათ პარალელურად. ასეთ შემთხვევაში გადაანაცვლება (სრიალი) მიმართული იქნება კოორდინატა ღერძების ან სიბრტყის დიაგონალის პარალელურად. a , b , c ასოებით აღნიშნავენ



ნახ. 4.35. სიმეტრიის სიბრტყეების პირობითი ნიშნები.

სიბრტყეებს, რომლებიც მიიღებიან \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} ვექტორების პარალელურად სრიალის შედეგად. თუ გადანაცვლება ხდება სიბრტყის დიაგონალის მიმართულებით წახნაგის ცენტრამდე ($\frac{1}{2}$ დიაგონალის სიგრძით), სიბრტყე n ასოთი აღინიშნება. ზოგიერთ შემთხვევაში სრიალი დიაგონალის მიმართულებით მისი სიგრძის $\frac{1}{4}$ -ით ხდება; ასეთ სიბრტყე¹ d ასოთი აღნიშნავენ. ხშირად პორიზონტალური სიბრტყის პარალელურ სიბრტყეებს უკეთდება ინდექსები $\frac{1}{4}$, $\frac{1}{8}$, $\frac{3}{8}$ და სხვა, რაც იმას ნიშნავს, რომ აღნიშნული სიბრტყეები გადიან პორიზონტალური სიბრტყის პარალელურად პერიოდის $\frac{1}{4}$, $\frac{1}{8}$, $\frac{3}{8}$ სიმაღლეზე. n სიბრტყეები დიაგონალური სრიალის სიბრტყეებია გადანაცვლებების სიდიდით: $\frac{(a+b)}{2}$, $\frac{(b+c)}{2}$, $\frac{(c+a)}{2}$ ან $\frac{(a+b+c)}{2}$; ცხადია, რომ ჩვეულებრივი a , b , c სრიალის სიბრტყეებისათვის გადანაცვლების ვექტორის კომპონენტები, შესაბამისად, იქნება $\frac{1}{2}00$, $0\frac{1}{2}0$, $00\frac{1}{2}$, ხოლო n ან d სიბრტყეებისათვის — $\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$ და $\frac{1}{4}\frac{1}{4}0$.

ამგვარად, ჩვეულებრივი სიმეტრიის (სარკული) სიბრტყეებისა და ბრუნვის ღერძების გარდა დისკონტინუუმის სიმეტრიის განხილვის დროს ჩნდება სიმეტრიის ახალი ელემენტები ხრახნული ღერძებისა და სრიალის სიბრტყეების სახით, რომელნიც ბრუნვის ღერძებისა და სარკული სიბრტყეების ტრანსლაციებთან ურთიერთქმედების შედეგად წარმოიშობიან. ცხადია, რომ დამოუკიდებელი სიმეტრიის ელემენტების რიცხვის გაზრდა საგრძნობლად აღიღებს მათი შესაძლებელი კომბინაციების რიცხვს და ამიტომ, თუ მაკროსიმეტრიის აღწერისათვის საკმარისი იყო 32 წერტილური ვანი ჯგუფი, მიკროსიმეტრიის ელემენტების შესაძლებელი კომბინაციების რიცხვი აღწევს 230.

§ 18. ტრანსლაციური ჯგუფები

წ (4.47) ფორმულა გვიჩვენებს, რომ ნებისმიერ სივრცობრივ ჯგუფში შესაძლებელია გამოვყოთ პარალელურად გადატანის (ტრანსლაციების) ქვეჯგუფი, რომელსაც $[E/t]$ ოპერატორები ქმნიან. ეს საშუალებას იძლევა, სიმეტრიის ყველა ტრანსლაციური ქვეჯგუფების ერთობლიობა,

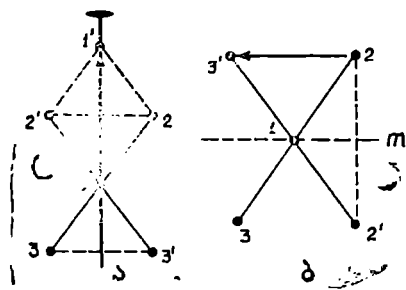
რომელიც მესერს შეიძლება გააჩნდეს, განვიხილოთ ცალკე, ბრუნვებისა და არეკვლის ოპერაციებისაგან დამოუკიდებლად. გადატანის ოპერატორი, ამ შემთხვევაში, მესერის ვექტორია, მიმართული ერთი კვანძიდან მეორე კვანძამდე და ამის გამო ტრანსლაციების ქვეჯგუფი წარმოადგენს ვექტორების ჯგუფს, რომლის ჯგუფური ოპერაციაც ჩვეულებრივი ვექტორული შეკრებაა. ასეთ ვექტორულ ჯგუფში ყოველთვის არსებობს სამი ვექტორი $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$, ისეთი, რომ ნებისმიერი სხვა ვექტორი \vec{x} , რომელიც იმავე ჯგუფს ეკუთვნის, განისაზღვრება მათი საშუალებით (4.43) ფორმულით. ამ ვექტორებს ჯგუფის ძირითადი ან ბაზისური ვექტორები ეწოდება, ხოლო მათზე აგებულ პარალელეპიპედს — ელემენტარული უჯრედი. თუ ტრანსლაციური ჯგუფის გენერატორებად აღებული იქნება ბაზისური ვექტორები, ეს ჯგუფი იზომორფულად გადაისახება მესერის ელემენტარულ უჯრედზე. თუმცა ელემენტარული უჯრედის არჩევა მრავალი სხვადასხვა გზით არის შესაძლებელი. მესერის ტრანსლაციური ჯგუფი ამ არჩევისაგან დამოკიდებული არ არის.

როგორც ვიცით, სივრცობრივი მესერი წარმოადგენს ტრანსლაციურად ეკვივალენტური წერტილების სისტემას. წერტილების ამ სისტემას გააჩნია განლაგების გარკვეული სიმეტრია, რომელიც დამახასიათებელია მოცემული მესერისათვის და განაპირობებს მის ტრანსლაციურ ჯგუფს. მესერის სიმეტრიის შესახებ შეიძლება ვიმსჯელოთ მისი ცალკეული კვანძის სიმეტრიით. მეზობელი კვანძების შემაერთებელ სამ არაკომპლანანურ ვექტორზე აგებული ელემენტარული უჯრედის (ელემენტარული პარალელეპიპედის) წერტილოვანი სიმეტრია უნდა თანხვედროდეს მესერის სიმეტრიას. მხოლოდ ასეთ შემთხვევაში ელემენტარული უჯრედი სწორად ასახავს მესერის სიმეტრიის თვისებებს. მაგრამ მაკროსკოპული კრისტალების სიმეტრიის განხილვის დროს დადგენილი იყო, რომ შეიძლება არსებობდეს სხვადასხვა სიმეტრიის მქონე მხოლოდ შეიდი ელემენტარული უჯრედი, შეიდი კრისტალური სისტემის შესაბამისად, რომელთა სიმეტრა ია თანხვედება ჰოლოედრული კრისტალური კლასების სიმეტრიას. ამიტომ კრისტალურ მესერში ბაზისური ვექტორების სათანადო არჩევით უშუალოდ მივიღებთ შეიდი ტრანსლაციურ ჯგუფს. შესაბამისი ელემენტარული უჯრედები მოცემულია 3.9 ნახაზზე. ვინაიდან $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ ვექტორებზე აგებულ პარალელეპიპედებში კვანძები მხოლოდ მათ წვეროებშია მოთავსებული, უჯრედები პრიმიტიულია. პრიმიტიულ უჯრედებს P ასოთი აღნიშნავენ. მიღებული შეიდი ტრანსლაციური ჯგუფი გადასახული იქნება შეიდი P უჯრედზე. როდესაც მაკროსკოპული კრისტალიდან გადავიღვართ კრისტალურ მესერზე, მაშინ ირკვევა, რომ მესერში შეიძლება არსებობდეს ელემენტარული უჯრედი დამატებითი კვანძების ისეთი განლაგებით, რომლის დროს მესერისა და უჯრედის სიმეტრიის თანხვედრა

დარღვეული არ იქნება. ასეთი უჯრედი უკვე პრიმიტიული აღარ იქნება და მასში ადგილი ექნება დამატებით ტრანსლაციებს. ეს ტრანსლაციები კვანძს გადაიტანენ რომელიმე წახნაგის ან უჯრედის ცენტრში.

პირველად ბრავემ დაამტკიცა, რომ არსებობს შვიდი კრისტალური სისტემის შესაბამისი სიმეტრიის მქონე თოთხმეტი ელემენტარული უჯრედი, რომლებსაც შემდეგში ბრავეს მესრები უწოდეს. ეს მესრები თოთხმეტი ტრანსლაციური ჯგუფის იზომორფულია.

ვიდრე გავარჩევდეთ ტრანსლაციური მესრების ყველა ტიპს, დამატაციოთ რამდენიმე მარტივი დებულება. თუ კრისტალში არის რაიმე განსაკუთრებული მიმართულება, მაგალითად, სიმეტრიის ღერძი ან ნორმალური სიმეტრიის სიბრტყის მიმართ, მაშინ აუცილებლად არსებობს ტრანსლაციები, რომელნიც ამ განსაკუთრებული მიმართულების პარალელური და მართობულია. კერძოდ, მართობად გაივლის კვანძური სიბრტყე და, მაშასადამე, ტრანსლაციების მთელი სისტემა. თუ მოცემულია n -ური რიგის ღერძი, სადაც $n \geq 3$, მაშინ ღერძის მართობად კვანძური სიბრტყისა და ტრანსლაციების არსებობა თავისთავად ცხადია, ვინაიდან საკმარისია ავირჩიოთ ღერძზე ერთი კვანძი და გავატაროთ ღერძის მართობი ტრანსლაცია, რომ ღერძის მოქმედებით მის მართობად გაჩნდება კიდევ n ასეთივე ტრანსლაცია. მეორე რიგის ღერძის შემთხვევაში მისდამი პარალელური და მართობი ტრანსლაციების არსებობა ნაჩვენებია 4.36-ა ნახაზზე. ნახაზიდან ჩანს, რომ თუ ღერძზე ავირჩევთ (1) კვანძს და გავატარებთ (12) ტრანსლაციას, ღერძი მას გადაიყვანს (12') მდგომარეობაში. ამ ტრანსლაციების საშუალებით მივიღებთ (1') კვანძს და, მაშასადამე, (11') ტრანსლაციას, რომელიც ღერძის პარალელურია. მესერში კვანძური ღერძები შეიძლება გავაგრძელოთ მეორე მხარეს და მივიღოთ კვანძები 3 და 3' ტრანსლაციები (22') და (33') ღერძის მართობები არიან. ცხადია, ამ ტრანსლაციების გადატანით (1) კვანძში მიიღება ახალი კვანძები, რომელნიც ღერძებისადმი მართობ სიბრტყეში იქნებიან განლაგებულნი.



ასევე მტკიცდება სიმეტრიის m სიბრტყის პარალელური და პერპენდიკულარული ტრანსლაციების არსებობა (ნახ. 4.36, ბ); თუ გვაქვს მესამე რიგის ღერძი, მაშინ ამ ღერძზე მდებარე კვანძიდან გატარებული ნებისმიერი ტრანსლაცია გასამკვეცებული იქნება ღერძის მიერ და მივიღებთ სამ ტოლი სიდიდისა და ღერძის მიმართ ერთი და იგივე კუთხით დახრილ ტრანსლაციებს. ეს

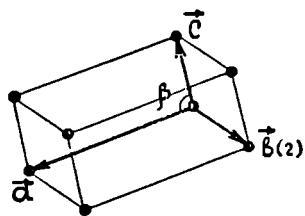
ნახ. 4.36. კვანძური ღერძისა და კვანძური სიბრტყის მიმართ მართობი და პარალელური ტრანსლაციების არსებობა კრისტალურ მესერში

სამი ტრანსლაცია განსაზღვრავს რომბოედრს, რომლის დიაგონალი ტრანსლაციების გეომეტრიულ ჯამს წარმოადგენს და გვაძლევს ახალ ტრანსლაციას, რომელიც მესამე რიგის ღერძის პარალელურია.

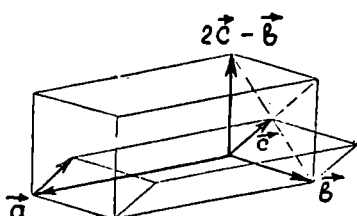
ახლა შესაძლებელია გადავიდეთ ტრანსლაციური მესრების ყველა შესაძლებელი ტიპის გარჩევაზე. როგორც ვიცით, სამი ბაზისური ვექტორი მთლიანად განსაზღვრავს ტრანსლაციური მესრის ტიპს. ტრანსლაციური მესრები, რომელნიც ერთი და იგივე წერტილოვანი სიმეტრიით ხასიათდებიან, მიეკუთვნებიან ერთ კრისტალურ სისტემას ან სინგონიას.

თუ კრისტალი ეკუთვნის ტრიკლინურ სისტემას, მას არაერთი განსაკუთრებული მიმართულება არ გააჩნია და ამიტომ არ არსებობს სიმეტრიის მხრივ ბაზისური ვექტორების არჩევის რაიმე შეზღუდვა. შესაძლებელია ბაზისურ ვექტორებად ავირჩიოთ ნებისმიერი სამი არაკომპლანარული ვექტორი, რომლებიც უახლეს მეზობელ კვანძებს აერთიანებენ. საზოგადოდ, ირჩევენ უმოკლეს ტრანსლაციებს და მათზე აგებული პარალელეპიპედი იქნება პრიმიტიული ელემენტარული უჯრედი. ვინაიდან ტრიკლინურ სისტემაში ნებისმიერი უჯრედი დეფორმაციის საშუალებით გადაიყვანება მეორეში, ამიტომ არსებობს ტრანსლაციური მესრის მხოლოდ ერთი ტიპი — პრიმიტიული უჯრედი, რომელიც Γ_1 სიმბოლოთი აღინიშნება.

მონოკლინური სისტემის კრისტალებში არსებობს ერთადერთი განსაკუთრებული მიმართულება — მეორე რიგის ღერძი ან ნორმალის საკუთრივი სიბრტყის მიმართ. ამიტომ ელემენტარული უჯრედის ერთ ღერძად უნდა ავირჩიოთ უმოკლესი ტრანსლაცია ამ განსაკუთრებული მიმართულების გასწვრივ. მონოკლინურ კრისტალებში მიღებულია 2 ღერძის ან სიბრტყისადმი მართობი მიმართულების პარალელურად გატარდეს \vec{b} ვექტორი. როგორც ვიცით, \vec{b} ვექტორის მართობულად ყოველთვის იარსებებს კვანძური სიბრტყე, სადაც შესაძლებელია \vec{a} და \vec{c} ტრანსლაციების შერჩევა. ეს შერჩევა არ არის შეზღუდული სიმეტრიის რაიმე მოთხოვნით.



ა

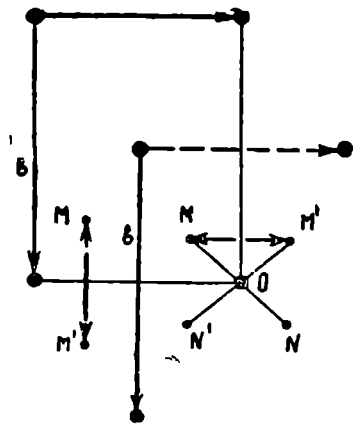


ბ

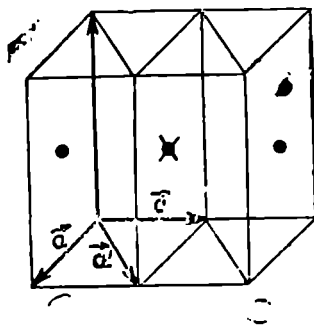
ნახ. 4.37. ა პრიმიტიული მონოკლინური უჯრედი; ბ. გვერდცენტრირებული უჯრედი აგებულია \vec{a} , \vec{b} , $2\vec{c} - \vec{b}$ ვექტორებზე.

ნით და ამიტომ ვირჩევთ უმოკლეს ტრანსლაციებს ნებისმიერი β კუთხით, ისე რომ \vec{a} და \vec{c} ვექტორებზე აგებული პარალელოგრამი იქნეს პრიმიტიული. ვექტორების ასეთი არჩევა აკმაყოფილებს პირობებს $a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ$, ხოლო β ნებისმიერია (ნახ. 4.37 ა); ეს იქნება პრიმიტიული მონოკლინური უჯრედი Γ_m . მაგრამ თუ (ac) სიბრტყეში პარალელოგრამის პრიმიტიულობა უზრუნველყოფილია ჩვენი არჩევით, ამის თქმა არ შეიძლება \vec{b} და \vec{c} ვექტორებზე აგებული გვერდითს სწორკუთხედებზე, ვინაიდან აღებული იყო განსაკუთრებული \vec{b} მიმართულების მართობული სიბრტყე და ამ სიბრტყეში მდებარე უმოკლესი ტრანსლაცია, რაც სრულებით არ გამოირიცხავს (bc) და (ba) სიბრტყეებში ან ელემენტარული უჯრედის შიგნით უფრო მოკლე ტრანსლაციების არსებობას, რომელნიც დამატებით კვანძებთან იქნებიან დაკავშირებული. იოლი დასამტკიცებელია, რომ დამატებითი კვანძების არსებობა შესაძლებელია მხოლოდ პარალელებიპედის გვერდული წახნაგების ცენტრებში ან პარალელებიპედის მოცულობით ცენტრში. მართლაც, თუ b წიბო სიმეტრიის სარკული სიბრტყის მართობულია (ნახ. 4.38), მაშინ M წერტილი, არეკლილია \vec{c} სიბრტყეში, მოგვეცემს M' წერტილს და ვერტიკალური ტრანსლაცია MM' იქნება უფრო მოკლე, ვიდრე ჩვენ მიერ \vec{b} -ს მიმართულებით არჩეული უმოკლესი ტრანსლაცია. როდესაც უჯრედის \vec{b} ღერძის გასწვრივ მიმართულია მეორე რიგის სიმეტრიის ღერძი, ტრანსლაცია OM გადაყვანილი იქნება მისი მოქმედებით OM' მდგომარეობაში, ხოლო მათ გაგრძელებებზე მივიღებთ კვანძებს N და N' . ახლა ჰორიზონტალური ტრანსლაციები MM' და NN' აღმოჩნდებიან უფრო მოკლე, ვიდრე ჰორიზონტალურ სიბრტყეში არჩეული უმოკლესი ტრანსლაციები. მხოლოდ სწორკუთხედის ცენტრში მოთავსებულ კვანძს აქვს ისეთი მდგომარეობა, რომელიც შეესაბამება მესრის აღნაგობას, რადგან ყველა სიმეტრიული გარდაქმნის მიერ ის გადაიყვანება ასეთივე ანალოგიურ კვანძებში. ამგვარად, პრიმიტიული მონოკლინური უჯრედის გარდა შეიძლება არსებობდეს მონოკლინური უჯრედი ცენტრირებული გვერდითი წყვილი (პარალელური) წახნაგებით. რა თქმა უნდა, გამოირიცხებია ორი წყვილი გვერდის ერთდროული ცენტრირება, რადგან ასეთ შემთხვევაში მეზობელი გვერდების ცენტრების შემაერთებელი ტრანსლაცია იქნება ფუძის პარალელოგრამის დიაგონალის ნახევრის ტოლი, და, მაშასადამე, ფუძეც ცენტრირებული გახდება, რაც, პირობის თანახმად, შეუძლებელია.

(100) სიბრტყის შესაბამის წახნაგებს ელემენტარული უჯრედში აღნიშნავენ A ასოთი, (010) სიბრტყეების შესაბამის წახნაგებს — B ასოთი, ხოლო (001) ტიპის წახნაგებს — C ასოთი. 4.37 - ბ ნაწილზე ნაჩვენებია A ცენტრირების ელემენტარული უჯრედი, აგებულია \vec{a} , \vec{b} , $2\vec{c}$ -ს ვექტორებზე. ამ უჯრედს შეესაბამება ორი კვანძი, კოორდინატებით



ნახ. 4.38. დამატებითი კვანძი აუცილებლად უნდა მოთავსდეს წახნაგის ცენტრში (ბელოვის მიხედვით).



ნახ. 4.39. გვერდ-ცენტრირებული და მოცულობითად ცენტრირებული უჯრედები გადადიან ერთიმეორეში \vec{a} და \vec{c} ღერძების შეცვლით.

$\left\{ 000, 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\}$. თუ ცენტრირების \vec{c} ტრანსლაციას გამოვიყენებთ

ძირითად ვექტორად, მაშინ \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} ვექტორებზე აგებული ელემენტარული უჯრედი იქნება პრიმიტიული. ნახაზიდან ჩანს, რომ მისი მოცულობა ორჯერ მცირეა, ვიდრე გვერდცენტრირებული უჯრედის მოცულობა. ასევე დასაშვებია მოცულობით ცენტრირებული J უჯრედის არსებობა, მაგრამ, როგორც 4.39 ნახაზი გვიჩვენებს, \vec{a} და \vec{c} ღერძების უბრალო შეცვლით შესაძლებელია ამ უჯრედის გვერდცენტრირებულ უჯრედად გადაყვანა.

ამგვარად, მონოკლინურ სისტემაში არსებობს მხოლოდ ორი განსხვავებული უჯრედი: პრიმიტიული მონოკლინური უჯრედი Γ_m და უჯრედი ცენტრირებული გვერდითი წახნაგით Γ'_m , ორ მდგომარეობაში — C ან A .

რომბული სისტემის სამივე კლასში არსებობს სამი განსაკუთრებული ურთიერთმართობი მიმართულება. უმოკლესი ტრანსლაციები ამ მიმართულებების პარალელურად შეიძლება ავირჩიოთ ელემენტარული უჯრედის ღერძებად და მივიღოთ უჯრედი სწორკუთხა პარალელეპიპედის სახით. თუ ასეთი სახით აგებულ პარალელეპიპედში არ არის დამატებითი კვანძები, უჯრედი იქნება პრიმიტიული (P), მაგრამ ვინაიდან სამივე კრისტალოგრაფიული მიმართულებებისა და უმოკლესი ტრანსლაციების არჩევა შეზღუდულია სიმეტრიით, ამიტომ არ არის გამორიცხული დამატებითი კვანძების არსებობა წახნაგებისა და უჯრედის ცენტრში. ამ

შემთხვევაში მდგომარეობა მონოკლინური უჯრედის ანალოგიურია. თუ ცენტრირებულია მხოლოდ ერთი წახნაგი, მაშინ უჯრედი იქნება ბაზოცენტრირებული (C) ან გვერდცენტრირებული (A, B). ორი მეზობელი (არაპარალელური) წახნაგის ცენტრირება შეუძლებელია, რადგან ეს გამოიწვევს მესამე წყვილი წახნაგის ცენტრირებას და მიიღება წახნაგცენტრირებული უჯრედი F ბაზისით: $F\left(000,0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}, \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0\right)$

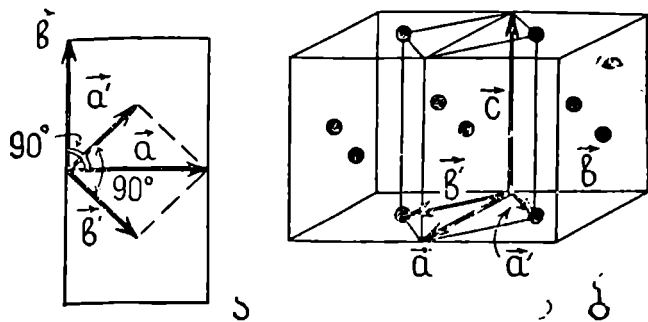
და ბოლოს რომბულ უჯრედში შესაძლებელია მოცულობითად ცენტრირება $J\left(000, \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)$. ამგვარად, რომბულ სისტემაში მიიღება ოთხი უჯრედი: $P, C(A, B) J, F$.

ტეტრაგონალური სიმეტრიის კრისტალებისათვის დამახასიათებელია ერთი მთავარი განსაკუთრებული მიმართულების არსებობა. ასეთ მიმართულებას წარმოადგენენ მეოთხე რიგის ბრუნვის ან ინვერსიული ღერძები. უმოკლესი ტრანსლაცია, არჩეული ამ ღერძების გასწვრივ, შეადგენს ტეტრაგონალური პარალელეპიპედის C წიბოს. მეოთხე რიგის ღერძის მართობულ სიბრტყეში განლაგებულია \bar{a} და \bar{b} ვექტორები. ამ ვექტორებიდან \bar{a} ღერძად ირჩევენ ვექტორს, რომელიც წარმოადგენს უმოკლეს ტრანსლაციას მეოთხე რიგის ღერძის მართობულ სიბრტყეში, ხოლო \bar{b} ვექტორი მიიღება მისგან 4 ღერძის მოქმედების შედეგად; ამიტომ იგი სილიდით \bar{a} ვექტორის ტოლია და შეადგენს მასთან 90° კუთხეს. აქედან, ცხადია, რომ ტეტრაგონალურ უჯრედში ab ფუძე არ შეიძლება იყოს ცენტრირებული (ნახ. 4.40 ა), ვინაიდან ცენტრირების შემთხვევაში ღერძების უბრალო შემობრუნებით ის დაიყვანება პრიმიტიულ კვადრატზე. ამ მიზეზით შეუძლებელია რომელიმე წყვილი გვერდის (ac ან bc) ცენტრირება, რადგან 4 ღერძის მოქმედებით ერთი წყვილის ცენტრირება გამოიწვევს მეორე წყვილი გვერდების ცენტრირებას, ხოლო ასეთ შემთხვევაში, როგორც ვიცით, დაცენტრირდება მესამე წყვილიც (ფუძე), რაც შეუძლებელია.

თუ ფუძე რაიმე მიზეზით მაინც იქნება ცენტრირებული, მაშინ მიიღება ბაზოცენტრირებული C უჯრედი და შესაძლებელი ხდება წახნაგცენტრირებული F უჯრედის მიღება. მაგრამ ასეთი უჯრედი ღერძების შეცვლით დაიყვანება მოცულობითად ცენტრირებულ I უჯრედზე (ნახ. 4.40 ბ).

ამგვარად, ტეტრაგონალურ უჯრედში შეიძლება არსებობდეს მხოლოდ ორი დამოუკიდებელი ელემენტარული უჯრედი და, მაშასადამე, ორი იზომორფული ტრანსლაციური ჯგუფი: პრიმიტიული P უჯრედი და მოცულობით ცენტრირებული I უჯრედი.

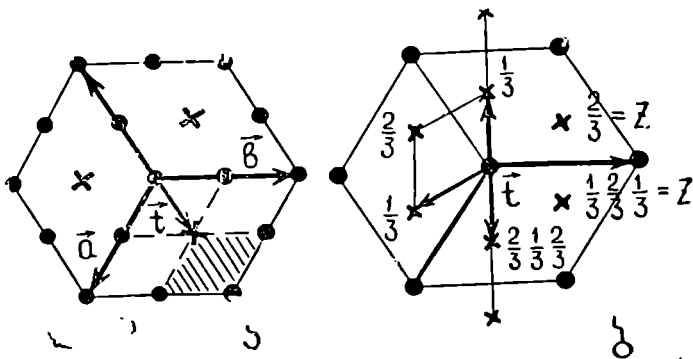
ჰექსაგონალურ და რომბოედრულ სისტემაში ყოველთვის არსებობს ერთი მთავარი მიმართულება 6 ღერძის ან 3 ღერძის სახით. უმოკლესი ტრანსლაცია, აღებული ამ მიმართულებით, გვაძლევს ელემენტარული



ნახ. 4.40. ა. ბაზოცენტრირებული ტეტრაგონალური უჯრედის გადაყვანა პრიმიტიულში. ბ. წახნაგცენტრირებული უჯრედის გადაყვანა მოცულობით ცენტრირებულში.

უჯრედის \bar{C} ღერძს, დანარჩენ ღერძებს ირჩევენ მთავარი მიმართულები-სადმი მართობ პორიზონტალურ სიბრტყეში. თუ ამ სიბრტყეში არსებობს რაიმე განსაკუთრებული მიმართულება, მაშინ ერთ-ერთი ღერძი აირჩევა მის გასწვრივ და მთავარი ღერძის მოქმედებით გამეორებული იქნება კიდევ ორჯერ. თუ ასეთი მიმართულება არ არსებობს (მაგალითად, კლასებში 3, 6, $\bar{3}$, $\bar{6}$ და ა. შ.), პორიზონტალურ სიბრტყეში იღებენ უმოკლეს ტრანსლაციას. ამგვარად არჩეული ელემენტარული უჯრედი შეიძლება არ შეიცავდეს დამატებით კვანძებს და მაშინ მივიღებთ პრიმიტიულ C უჯრედს (ნახ. 3.32). როგორც 4.41 ა ნახაზიდან ჩანს, ჰექსაგონალური ელემენტარული უჯრედის ფუძის ცენტრირების შემთხვევაში ტრანსლაცია \vec{t} , რომელიც ძირითად კვანძს აერთებს დამატებით კვანძთან, მესრის ვექტორს წარმოადგენს და ამიტომ წიბოების შუაში გაჩნდება ახალი დამატებითი კვანძები. თუ ცენტრში გადის 6 ღერძი, ეს კვანძები ავტომატურად გამოიყვანება ამ ღერძის მიერ. ამის შედეგად მიიღება პრიმიტიული უჯრედი იგივე სიმეტრიის, მაგრამ ოთხჯერ უფრო მცირე ზომის, ვიდრე საწყისი ცენტრირებული უჯრედი. ამავე მიზეზით არაფერს არ იძლევა 6 ღერძის პარალელური წახნაგების ცენტრირება, ვინაიდან ღერძი გამოიწვევს ყველა წახნაგის ცენტრირებას, რაც ისევ უფრო მცირე ზომის პრიმიტიულ უჯრედთან მიგვიყვანს (ნახ. 4.41 ა).

როგორც ვიცით (§ 10), ჰექსაგონალურ მესერში არსებობს ფუძის ცენტრირების მეორე საშუალება (H პარალელოგრამი). საკმარისია ავირჩიოთ ერთი ასეთი კვანძი, კოორდინატებით $\frac{1}{3} \frac{2}{3}$, მაშინ ყველა დანარჩენი გამოიყვანება 6 ღერძის მიერ. $\bar{6}$, 3 და $\bar{3}$ ღერძების შემთხვევაში ეს მოხდება



ნახ. 4.41. ა. ფუძის ცენტრირება წარმოშობს დამატებით კვანძებს და შემცირებული ზომის პრიმიტიულ უჯრედს. ბ. ციფრები გვიჩვენებენ ვერტიკალურ კოორდინატებს. წერტილების განლაგება არ ეწინააღმდეგება 3 და $\bar{3}$ ლერძების არსებობას.

იმიტომ, რომ \vec{t} ტრანსლაცია მესრის ვექტორს წარმოადგენს (ნახ. 4.41 ბ). თუ ეს კვანძები მოთავსებულია ერთ ჰორიზონტალურ სიბრტყეში, ახალი ლერძების არჩევით ისევე პრიმიტიულ ჰექსაგონალურ უჯრედს მივიღებთ. ნახაზიდან ჩანს, რომ 3 ლერძის არსებობას არ ეწინააღმდეგება დამატებითი კვანძების ისეთი განლაგება, როდესაც ერთი მათგანი მოთავსებულია ჰექსაგონალური უჯრედის (ფუძე რომში) სივრცობრივ დიაგონალზე, ფუძიდან ვერტიკალური ტრანსლაციის $\frac{1}{3}$ მანძილზე, ხოლო მეორე—ამავე დია-

გონალზე, ფუძიდან $\frac{2}{3}$ მანძილზე. ასეთი სახით ორჯერ ცენტრირებულ ჰექსაგონალურ უჯრედს R უჯრედი ეწოდება. ცხადია, რომ R ტიპის უჯრედების არსებობა შეუძლებელია 6 ან $\bar{6}$ ლერძების შემთხვევაში, ვინაიდან ისინი გაიმეორებენ დამატებით კვანძებს ერთ სიბრტყეში და შექმნიან უფრო მცირე ზომის პრიმიტიულ უჯრედს.

ამავე მიზეზით შეუძლებელია R უჯრედის არსებობა კრისტალში, რომლებსაც სიმეტრიის ჰორიზონტალური სიბრტყე გააჩნია.

ჰექსაგონალურ და რომბოედრულ მესრებს შორის კავშირის განხილვის დროს (§ 10) ნაჩვენებია იყო, რომ ორჯერ ცენტრირებულ ჰექსაგონალურ უჯრედს, ბაზისით $\left(000, \frac{1}{3} \frac{2}{3} \frac{1}{3}, \frac{2}{3} \frac{1}{3} \frac{2}{3}\right)$ შეესაბამება პრიმიტიული რომბოედრული უჯრედი (000). ამ მიზეზით R უჯრედს, ჩვეულებრივად, რომბოედრულ უჯრედს უწოდებენ.

ამგვარად, იქ, სადაც კვანძების განლაგება ქმნის სიმეტრიის 6 და $\bar{6}$ წერტილოვანი ჯგუფების შესაბამის ჰექსაგონალურ მესერს, შესაძლებელია მხოლოდ ერთი ტრანსლაციური ჯგუფის არსებობა, რომელიც პრიმიტიული ჰექსაგონალური უჯრედით ხასიათდება; რომბოედრული სისტემის კრისტალებში, რომელნიც 3 და $\bar{3}$ ღერძებს შეიცავენ, შეიძლება იყოს როგორც პრიმიტიული ჰექსაგონალური უჯრედის შესაბამისი ტრანსლაციური ჯგუფი, ისე ჯგუფი, რომელიც ორჯერ მოცულობით ცენტრირებული ჰექსაგონალური უჯრედით ხასიათდება. ეს უკანასკნელი რომბოედრულ ღერძებზე გადასვლის დროს გარდაიქმნება სამჯერ უფრო მცირე მოცულობის პრიმიტიულ რომბოედრულ უჯრედად.

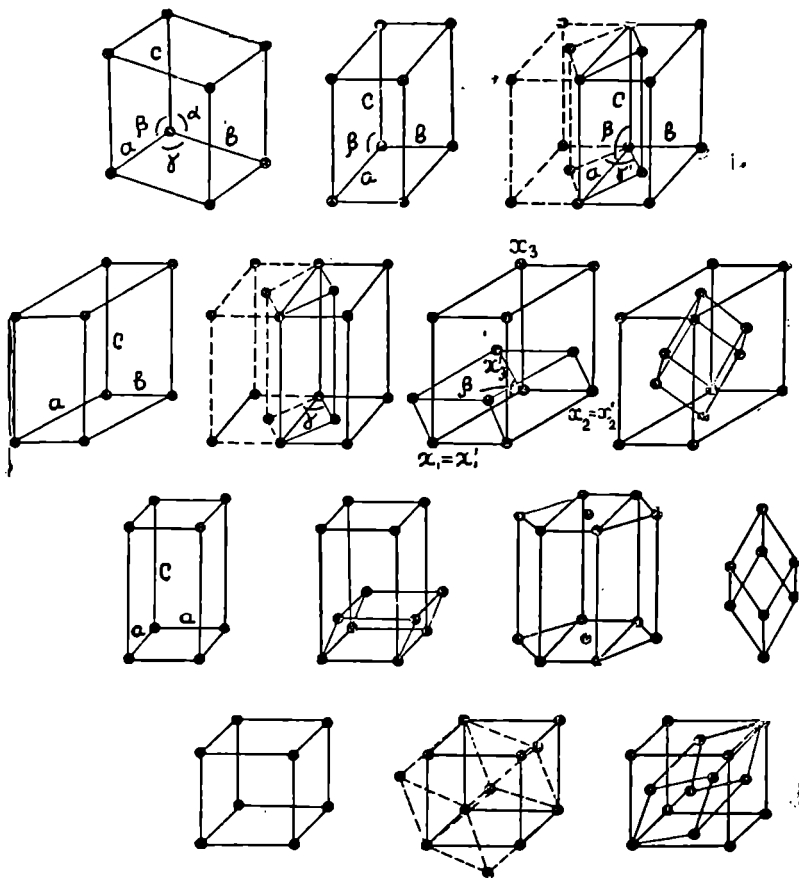
კუბური სისტემის კრისტალებში არის სამი ურთიერთმართობი მთავარი მიმართულება; ამიტომ ელემენტარული უჯრედის ღერძებად ირჩევენ სამ უმოკლეს და ტოლი სიდიდის ტრანსლაციებს ამ მთავარი მიმართულებების გასწვრივ. ასეთი არჩევის შედეგად შეიძლება მივიღოთ პრიმიტიული P უჯრედი ჩვეულებრივი კუბის სახით. კუბის სიმეტრიულობის გამო ერთი წახნაგის ცენტრირება გამოიწვევს ყველა დანარჩენი წახნაგის ცენტრირებას F . ასევე შესაძლებელია მოცულობითად ცენტრირებული კუბის არსებობა J .

სხვადასხვა კრისტალურ სისტემებში განხილული ტრანსლაციური ჯგუფების დაჯამება გვიჩვენებს, რომ არსებობს სულ 14 ტრანსლაციური ჯგუფი, წარმოდგენილი თოთხმეტი ელემენტარული უჯრედით (ბრავეს მესრები). აქედან შეიღი პრიმიტიული (P) უჯრედი, ხოლო დანარჩენი შეიღი A, B, C, F, J ცენტრირების (ნახ. 4.42). ამის მიხედვით ბრავეს ჯგუფის სიმბოლო შეიცავს ტრანსლაციური ჯგუფის აღნიშვნასთან ერთად სათანადო სისტემის პოლოედრული სიმეტრიის წერტილოვანი ჯგუფის სიმბოლოს. ასე, მაგალითად, ტრიკლინური სისტემის მაქსიმალური სიმეტრიის კლასი არის $\bar{1}$, ხოლო უჯრედი პრიმიტიულია და ამიტომ ბრავეს ჯგუფი იქნება $P\bar{1}$, ასევე, მონოკლინური სისტემისათვის $P\frac{2}{m}$ და $C\frac{2}{m}$; რომბულში $Pmmm, Cmm, Jmmm, Fmmm$; ტეტრაგონალურში $P\frac{4}{mmm}, J\frac{4}{mmm}$; კუბურში $Pm\bar{3}m, Jm\bar{3}m, Fm\bar{3}m$ და ბოლოს ჰექსა-

გონალურ და რომბოედრულ სისტემებში ორი უჯრედი $P\frac{6}{mmm}$ და $R\bar{3}m$.

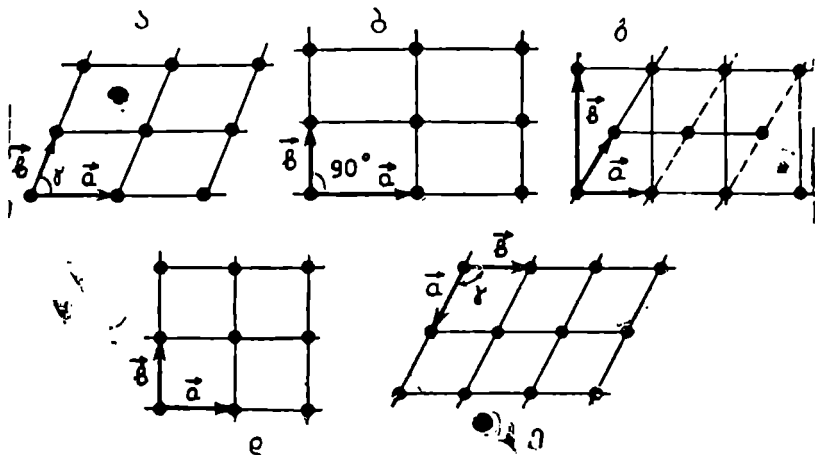
4.42 ნახაზზე მოყვანილ ბრავეს ცენტრირებულ მესერში ნაჩვენებია პრიმიტიულ უჯრედზე გადასვლის გზები, მაგრამ ყველა შემთხვევაში, როგორც ჩანს, პრიმიტიული უჯრედების სიმეტრია უფრო დაბალია, ვიდრე შესაბამისი ცენტრირებული უჯრედის სიმეტრია.

ორგანზომილებიანი მესრის შემთხვევაში ელემენტარული უჯრედი უნდა ავირჩიოთ ისე, რომ კვანძებზე აგებული ელემენტარული პარალე-



ნახ. 4.42. ბრავეს 14 სივრცობრივი შესერი.

ლოგრამის წერტილოვანი სიმეტრია თანხედებოდეს მესრის კვანძების განლაგების მაქსიმალურ სიმეტრიას. როგორც ვიცით, არსებობს სიბრტყის (წახნავის) წერტილოვანი სიმეტრიის 10 სხვადასხვა სახე: 1, $1m$, 2, $2m$, 3, $3m$, 4, $4mm$, 6, $6mm$. ელემენტარული უჯრედი, აგებული \vec{a} და \vec{b} ვექტორებზე, როდესაც $a \neq b$ და მათ შორის γ კუთხე ნებისმიერია, მხოლოდ $\neq 90^\circ$, წარმოადგენს ირიბკუთხა პარალელოგრამს (ნახ. 4.43 ა), მისი წერტილოვანი სიმეტრია 1 და 2 ჯგუფებით განისაზღვრება. კვანძების განლაგების ჰოლოედრული სიმეტრია, ამ შემთხვევაში, შეესაბამება 2 წერტილოვან ჯგუფს. ასეთი უჯრედი ირიბკუთხა სისტემას მიეკუთვნება.



ნახ. 4.43. ბრავეს 5 ორგანზომილებიანი მესერი.

თუ $a \neq b$, მაგრამ $\gamma = 90^\circ$, მივიღებთ მართკუთხედს $1m$ და $2mm$ წერტილოვანი სიმეტრიით (ნახ. 4.43 ბ). ამავე მართკუთხა სისტემას ეკუთვნის მართკუთხა ცენტრირებული მესერი (ნახ. 4.43 გ). ნახაზიდან ჩანს, რომ ასეთ მესერში ღერძების სათანადო არჩევით შესაძლებელია პრიმიტიული უჯრედის არჩევა, რომლის ფართობი ორჯერ ნაკლები იქნება, ვიდრე შესაბამისი ცენტრირებული უჯრედის, მაგრამ მისი წერტილოვანი სიმეტრია იქნება 2 , ნაცვლად $2mm$ -ისა. როდესაც $a = b$ და $\gamma = 90^\circ$, მივიღებთ კვადრატულ მესერს (ნახ. 4.43 დ), ხოლო შესაბამისი უჯრედი იქნება კვადრატი, წერტილოვანი სიმეტრიით 4 და $4mm$. თუ $a = b$, $\gamma = 120^\circ$, მესერი იქნება ჰექსაგონალური, ელემენტარული უჯრედი — რომბი და წერტილოვანი სიმეტრია — $3, 3m$, 6 და $6mm$ (ნახ. 4.43 ე).

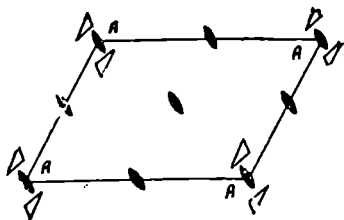
ამგვარად, ორგანზომილებიან მესერში არსებობს 5 სხვადასხვა ტიპის ბრავეს უჯრედი: 1. ირიბკუთხა პარალელოგრამი; 2. მართკუთხედი; 3. ცენტრირებული მართკუთხედი; 4. კვადრატი და 5. რომბი, რომლებიც ოთხ სისტემას — ირიბკუთხას, მართკუთხას, კვადრატულსა და ჰექსაგონალურს მიეკუთვნებიან.

2.1. სინკლინური ჯგუფები

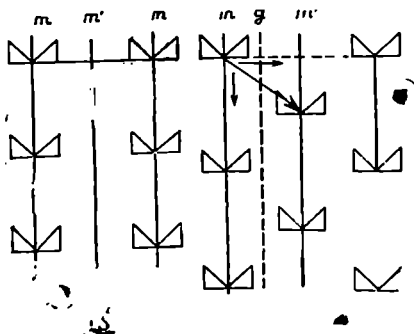
ბრავეს ტრანსლაციური მესრების დადგენის შემდეგ შესაძლებელი ხდება სივრცობრივი ჯგუფების განხილვა ყველა სისტემის კრისტალებსათვის. ტრანსლაციური ჯგუფის დანიშნულებაა გამოყოს კრისტალში ტრანსლაციურად ეკვივალენტური წერტილების სისტემა ან, სხვაგვარად

რომ ვთქვათ, გაავრცელოს კვანძის წერტილოვანი სიმეტრია კრისტალის მთელ უსასრულო სივრცეზე. მოცემული დისკონტინუის ყველა ტრანსლაცია შესაძლებელი სიმეტრიული ოპერაციების მხოლოდ ქნაწილს წარმოადგენს. მეორე ნაწილს შეადგენენ კომბინირებული სიმეტრიული გარდაქმნები, რომელნიც მიიღებიან წერტილოვანი სიმეტრიული გარდაქმნებისა და ტრანსლაციების ერთობლივი მოქმედების შედეგად. დისკონტინუის ყველა შესაძლებელი სიმეტრიული გარდაქმნების ერთობლიობა ქმნის მისი სიმეტრიის სივრცობრივ ჯგუფს. ვინაიდან ტრანსლაციურად ეკვივალენტურ კვანძებს ან კვანძებში მოთავსებულ ფიგურებს (ატომების ჯგუფებს) ერთი და იგივე წერტილოვანი სიმეტრია გააჩნია, სივრცობრივ ჯგუფში შემავალი სიმეტრიის ელემენტები ნაწილდება ტრანსლაციურად ეკვივალენტური სიმეტრიის ელემენტების სისტემად, რომლებიც ეკვივალენტურ წერტილებში იკვეთებიან და გადანაცვლების შემდეგ რჩებიან ურთიერთპარალელური; მაგალითად, თუ მესრის რომელიმე A კვანძში მოთავსებულია ფიგურა, რომლის წერტილოვანი სიმეტრია 2 ღერძით არის განსაზღვრული (ნახ. 4.44), მესრის \bar{a} და \bar{b} ტრანსლაციები გაიმეორებენ მას ისე, რომ გაჩნდება ეკვივალენტური A წერტილების მთელი სისტემა. ამ წერტილებში გაივლიან ტრანსლაციურად ეკვივალენტური და ურთიერთპარალელური მეორე რიგის ღერძები.

მაგრამ, როგორც ნახაზი გვიჩვენებს, A წერტილებში განლაგებულ ღერძებს გარდა, ფიგურის გამეორების შედეგად, ფიგურებს შორის ჩნდება ეკვივალენტური ღერძების ახალი სისტემები. ეს ღერძები თავსდებიან ტრანსლაციების შუაში, უჯრედის ცენტრში და წარმოადგენენ (ზემოთ დამტკიცებული დებულების თანახმად) ღერძისა და მისი მართობი ტრანსლა-



ნახ. 4.44. A წერტილებში გაივლიან ურთიერთპარალელური და ეკვივალენტური მეორე რიგის ღერძები.



ნახ. 4.45 ა. პრიმიტიულ ბრავეს მესერში ორ სარკულ სიბრტყეს შორის გაივლის დამატებითი სარკული სიბრტყე. ბ. ცენტრირებულ უჯრედში ორ სარკულ სიბრტყეს შორის გაივლის დამატებითი სრიალის სიბრტყე.

ციის ერთობლივი მოქმედების შედეგს. მეორე რიგის ლერძის შემთხვევაში ასეთი სისტემა ეკვივალენტურია ახალი მეორე რიგის ლერძისა, რომელიც ტრანსლაციის შუაში იქნება განლაგებული. 3 და 4 ლერძების დროს დამატებითი ლერძები ტრანსლაციის მოქმედებით გაჩნდება ამ ტრანსლაციებზე აგებული სამკუთხედის ან კვადრატის ცენტრში და ა. შ. აქვე კიდევ ერთხელ უნდა აღინიშნოს, რომ ეს ლერძები არ არიან დაკავშირებულნი ფიგურის წერტილოვან სიმეტრიასთან და წარმოიშვენ მხოლოდ ფიგურების გამეორების შედეგად. ასეთივე მოვლენას აქვს ადგილი სიმეტრიის სიბრტყეების შემთხვევაშიც. 4.45 ა ნახაზზე წარმოდგენილ ბრტყელ მოდელს საკუთარი სარკული სიმეტრიის m სიბრტყე გააჩნია. თუ ტრანსლაციური ჯგუფი პრიმიტიულია, ტრანსლაციების მიერ ამ მოდელების გადატანის შედეგად მათ შორის გაჩნდება იმავე ტიპის ახალი m' სარკული სიმეტრიის სიბრტყე. ეს სიბრტყე ტრანსლაციის შუაში გაივლის და წარმოადგენს m სიბრტყისა და ტრანსლაციის თანამიმდევრული მოქმედების შედეგს.

როდესაც მესერი ცენტრირებულია (ნახ. 4.45 ბ), ე. ი. ოთხ უახლოეს ფიგურაზე აგებული სწორკუთხედის ცენტრში დამატებით ჩასმულია ასეთივე სიმეტრიის ფიგურა, მესერში ჩნდება ირიბი ტრანსლაცია. ახლა m' სიბრტყე, რომელიც წინა ნახაზზე წარმოებულ სიბრტყეს წარმოადგენდა, თვითონ ხდება ძირითად სიბრტყედ, ხოლო ახალი სიმეტრიის ელემენტი, რომელიც m და m' მწკრივებში განლაგებულ ფიგურებს აკავშირებს, იქნება სრიალის სიბრტყე g . ნებისმიერი ფიგურა ამ სიბრტყის მარჯვნივ მიიღება მარცხნივ მდებარე ფიგურიდან, მისი g სიბრტყეშ არეკვლისა და შემდეგ მის პარალელურად $\frac{1}{2}$ ტრანსლაციის სიდიდით სრიალის შედეგად.

ამგვარად, ცენტრირებული მესრის შემთხვევაში სიმეტრიის სიბრტყეების თანამიმდევრობაში ყოველ ორ სარკულ სიბრტყეს შორის ჩნდება სიმეტრიის სრიალის სიბრტყე.

არსებობს 14 ტრანსლაციური (ბრავეს) მესერი და წერტილოვანი სიმეტრიის 32 ჯგუფი. თუ ავიღებთ წერტილოვანი ჯგუფებისა და ტრანსლაციური ჯგუფების კომბინაციას, ე. ი. თანამიმდევრობით ჩაესვამთ ბრავეს 14 ტრანსლაციური მესრის კვანძებში 32 წერტილოვანი კლასის სიმეტრიის შესაბამის ფიგურებს, მაშინ მესრის ტრანსლაციებით მათი გამეორების შედეგად მივიღებთ ევრეთ წოდებულ სიმორ უ ლ სივრცობრივ ჯგუფებს. ტრიკლინურ სისტემაში, მაგალითად, შედის ორი წერტილოვანი ჯგუფი და ერთი პრიმიტიული ბრავეს უჯრედი. ამიტომ სიმორფული სივრცობრივი ჯგუფების რიცხვი აქ იქნება $2 \times 1 = 2$. მონოკლინურ სისტემას ეკუთვნის 3 წერტილოვანი ჯგუფი და 2 ბრავეს მესერი; ამიტომ მივიღებთ $3 \times 2 = 6$ სიმორფულ ჯგუფს.

რომბულ სისტემაში 3 წერტილოვანი ჯგუფია და 4 ბრავეს მესერი, მაგრამ აქ უნდა მივიღოთ მხედველობაში განსხვავება ბაზოცენტრიკულ ჯგუფებში Cmm და Amm (ან Bmm). ამიტომ სიმორფული სივრცობრივი ჯგუფების რიცხვი იქნება $4 \times 3 + 1 = 13$. ტეტრაგონალური სისტემის 7 კლასი და 2 ბრავეს მესერი, თუ მხედველობაში მივიღებთ, რომ $\overline{42m}$ ჯგუფს შეუძლია ჰქონდეს $\overline{4m2}$ ორიენტაცია, გვაძლევს $7 \times 2 + 2 = 16$ სიმორფულ ჯგუფს.

ჰექსაგონალურ სისტემაში ერთი პრიმიტიული ბრავეს მესერია და 7—წერტილოვანი სიმეტრიის კლასი; ამასთანავე, $\overline{6m2}$ კლასს შეიძლება ჰქონდეს ორიენტაცია $\overline{62m}$; ამიტომ მივიღებთ $7 \times 1 + 1 = 8$ ჯგუფს.

ტრიგონალური სისტემის 5 კლასი რეაგირებს რომბოედრულ (R) უჯრედთან და ჰექსაგონალური მესერის პრიმიტიულ უჯრედთან. მხოლოდ სამ ჯგუფს — 32 , $3m$ და $\overline{3m}$ შეიძლება ჰქონდეს ორგვარი ორიენტაცია, ამიტომ სივრცობრივი ჯგუფების რიცხვი იქნება $5 + 5 + 3 = 13$.

ბოლოს, კუბური სისტემის 5 კლასი და 3 ბრავეს მესერი შექმნის $5 \times 3 = 15$ ჯგუფს და სიმორფული სივრცობრივი ჯგუფების რიცხვი ხდება 73.

წერტილოვანი ჯგუფები, რომელნიც შედიან სიმორფულ სივრცობრივ ჯგუფებში ქვეჯგუფების სახით, ახასიათებენ იმ სასრული ფიგურების სიმეტრიას, რომელთა ვადანაცვლება ხდება მესრის ტრანსლაციების მიერ. ეს იმას ნიშნავს, რომ სიმორფული ჯგუფი საწყისი ფიგურის ფორმას (მის წერტილოვან სიმეტრიას) ტოვებს უცვლელად და ჯგუფის სახელწოდებაც სწორედ ამ გარემოებასთან არის დაკავშირებული.

ოპერატორულ აღნიშვნებში (4.47) ფორმულაში ოპერატორი $[A/O]$ ჩვეულებრივი ბრუნვებისა და სარკული არეკვლის ოპერაციებს შეიცავს და, მაშასადამე, წარმოშობს სიმეტრიის ჯგუფს, რომელიც ერთ-ერთ 32 წერტილოვან ჯგუფს თანხვდება (G ჯგუფები). მეორე მხრივ, პარალელური გადატანის ოპერატორი $[E/t_i]$, თუ \vec{t}_i მესრის ვექტორია, ქმნის ტრანსლაციურ ჯგუფს (T). ამიტომ, ოპერატორები $[A/t_i]$ ამ შემთხვევაში აერთიანებენ T და G ჯგუფების გარდაქმნებს და წარმოადგენენ სიმორფული სივრცობრივი ჯგუფების ოპერატორებს.

თუ \vec{t}_i ვექტორი არ წარმოადგენს მესრის ვექტორს, ე. ი. გამოსახულებაში $\vec{t} = m_1 \vec{a}_1 + m_2 \vec{a}_2 + m_3 \vec{a}_3 = m_i \vec{a}_i$, m_i არ არიან აუცილებლად მთელი რიცხვები ერთი $[A/t_i]$ ოპერატორისათვის მაინც, მაშინ წარმოიშობა (ნახ. 4.30,34) ახალი ტიპის სიმეტრიის ელემენტები ხრახნული ღერძებისა (n_i) ან სრიალის სიბრტყეების (g) სახით, რომლებიც აქ უკვე გადატანის შედეგად მიღებულ მეორეულ ელემენტებს კი არ წარმოადგენენ, არამედ გენერატორების როლს ასრულებენ.

ახლა არასიმორფული სივრცობრივი ჯგუფების მისაღებად საკმარისია სიმორფულ ჯგუფში შემაჯალ წერტილოვან ჯგუფებში შევცვალოთ რიგ-რიგობით ბრუნვის (C_i) ღერძები ხრახნული (n_s) ღერძებით (ასიმორფული ჯგუფები), ხოლო სარკული (m) სიბრტყეები — სრიალის (g) სიბრტყეებით (ჰემისიმორფული ჯგუფები); მაშინ მიიღება სიმეტრიის ელემენტების ახალი კომბინაციები, რომელთა რიცხვი უდრის 157. არასიმორფულ ჯგუფში ფიგურა კარგავს სიმორფული წერტილოვანი ჯგუფის სიმეტრიას და იღებს ამ ჯგუფის რომელიმე ქვეჯგუფის სიმეტრიას. ამგვარად, სივრცობრივი ჯგუფების შესაძლებელი რიცხვი ხდება 230.

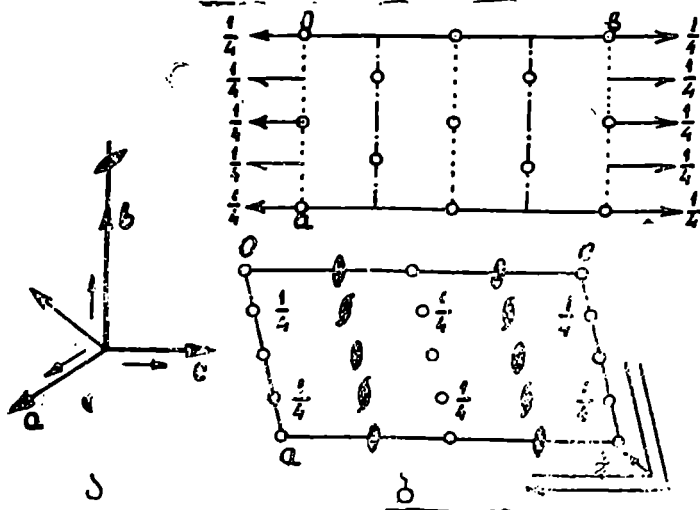
230 სივრცობრივი ჯგუფი პირველად დაადგინეს რუსმა კრისტალოგრაფმა ე. ფედოროვმა და გერმანელმა შენფლისმა. სივრცობრივი ჯგუფის გამოყვანის შედარებით მარტივი და თვალნათლივი მეთოდი დაამუშავა საბჭოთა მეცნიერმა ნ. ბელოვმა. ჯგუფების წარმოდგენის შემდგომ პროცესში ჩვენ ძირითადად ამ მეთოდს მივმართავთ.

მე-5 ცხრილში მაგალითისათვის მოყვანილია სივრცობრივი ჯგუფები, დანაწილებული სიმორფულ, ჰემისიმორფულ და ასიმორფულ ჯგუფებად ტრიკლინური, მონოკლინური და ნაწილობრივად რომბული სისტემის კრისტალებისათვის. ცხრილში მოყვანილი მაგალითები სრულ წარმოდგენას იძლევიან ასეთი დაყოფის საფუძვლისა და ჯგუფის სიმბოლოების შესახებ.

სივრცობრივი ჯგუფებისათვის შემოღებულია საერთაშორისო აღნიშვნები მათი სიმბოლოების სახით. საერთაშორისო სიმბოლოს პირველ ადგილზე დგას ბრავეს მესრის ტიპის აღმნიშვნელი ლათინური ასოები (P, A, B, C, R, I, F). ამის შემდეგ იწერება კრისტალოგრაფიული კლასის სიმბოლო, მხოლოდ ახლა კლასში შემაჯალი სიმეტრიული ოპერაციების სიმბოლოები: განლაგებულია გარკვეული წესით, რომელიც დაკავშირებულია მოცემული კლასისათვის კოორდინატთა სისტემის არჩევასთან. ასე, მაგალითად, რომბული სისტემის კრისტალებისათვის პირველ ადგილზე დგას x_1 ღერძის მართობული სიბრტყე ან ამ ღერძის პარალელური ღერძი; სიმბოლოს მეორე ადგილი უჭირავს სიმეტრიის ელემენტს. რომელიც x_2 ღერძის პარალელური ან მართობულია, ხოლო მესამე ადგილი — სიბრტყის ან ღერძის ნიშანს, რომელიც x_3 ღერძის მართობი ან პარალელურია ($222, mm2, mmm$). ტეტრაგონალური კრისტალებისათვის პირველ ადგილზე იწერება მთავარი ღერძის სიმბოლო, რომელიც x_3 ღერძის გასწვრივ არის მიმართული. მეორე ადგილი დაკავებულია სიმეტრიის ელემენტებით, რომელნიც ერთდროულად x_1 და x_2 კოორდინატთა ღერძების პარალელურები ან მართობულები არიან. მესამე ადგილზე იწერება იმ ელემენტის სიმბოლო, რომელსაც დიაგონალური მდებარეობა უჭირავს x_1 და x_2 ღერძების მიმართ ($45^\circ x_1$ და x_2 ღერძებთან). ჰექსაგონალური კრისტალებისათვის შენარჩუნებულია იგივე წესი, მხო-

ლოდ არა მართობი, არამედ ჰექსაგონალური (a_1, a_2, a_3, c) ლერძებისათვის. კუბური კრისტალებისათვის პირველ ადგილზეა იმ ლერძის (სიბრტყის) სიმბოლო, რომელიც ერთდროულად x_1, x_2 და x_3 ლერძების პარალელურია (მართობი). მეორე ადგილზე დგას 3 ლერძის სიმბოლო, ხოლო მესამე ადგილზე — იმ ელემენტის ნიშანი, რომელსაც x_1, x_2 ლერძების მიმართ დიაგონალური მდგომარეობა უჭირავს. მონოკლინური სისტემის ერთადერთი 2 ლერძი x_2 ლერძის პარალელურია, ხოლო სიმეტრიის სიბრტყე — ამ ლერძის მართობული (დასაშვებია 2 ლერძის გატარება x_3 კოორდინატის გასწვრივ). თუ შესაბამის ადგილზე არ არის მაღალი სიმეტრიის ელემენტი, მის ნაცვლად ჯგუფის სიმბოლოში იწერება 1. ასე, მაგალითად, ჯგუფი $P2$ ვრცლად დაიწერება $P 121$ ან $P 112$, ხოლო შესაბამისი ცენტრირებული ჯგუფისათვის იქნება $C 121$ ან $B 112$.

ახლა განვიხილოთ რამდენიმე მაგალითი ცალკეული სივრცობრივი ჯგუფების აგებისა და მათი გეგმილებში წარმოდგენის მიზნით. მონოკლინური სისტემის პრიზმატული კლასის ჯგუფი $C_c^2 \left(C 1 \frac{2}{c} 1 \right)$. როგორც ჯგუფის სიმბოლო გვიჩვენებს, ელემენტარული უჯრედი ცენტრირებულია C წახნაგში და, მაშასადამე, ამ წახნაგში დევს დახრილი ტრანსლაცია (ნახ. 4.46ა). 2 ლერძი მიმართულია $x_2(b)$ კოორდინატთა ლერძის პარალელურად, ხოლო ლერძის მართობული სიბრტყე წარმოადგენს სრიალის, სიბრტყეს, რომლის სრიალის მიმართულება c ლერძის პარალელურია. დახრილი ტრანსლაციის ჰორიზონტალური შიშვლიანი c ტრანსლაციასთან ერთად წარმოშობს



ნახ. 4.46. C_c^2 სივრცობრივი ჯგუფის გეგმილი.

სისტემა	კრისტალური კლასი	სივრცობრივი ჯგუფები						როგ. №
		სიმორფული ჯგუფები		კემბისმორფული ჯგუფები		ასიმორფული ჯგუფები		
		სრული აღნიშვნა	მოკლე	სრული აღნიშვნა	მოკლე	სრული აღნიშვნა	მოკლე	
ტრიკლინური	1	P_1	P_1					1
	$\bar{1}$	$P\bar{1}$	$P\bar{1}$					2
მონოკლინური	2	P_{121} C_{121}	P_2 C_2			P_{121}	P_{21}	3,4 5
	m	P_1m_1 C_1m_1	P_m C_m	P_1c_1 C_1c_1	P_c C_c			6,7 8,9
	$\frac{2}{m}$	$P_1\frac{2}{m}$ $C_1\frac{2}{m}$	$P\frac{2}{m}$ $C\frac{2}{m}$	$P_1\frac{2}{c}$ $C_1\frac{2}{c}$	$P\frac{2}{c}$ $C\frac{2}{c}$	$P_1\frac{2}{m}$ $P_1\frac{2}{c}$	$P\frac{2}{m}$ $P\frac{2}{c}$	10, 11, 12 13, 14, 15
	222	P_{222} C_{222} F_{222} J_{222}	P_{222}			P_{222} $P_{2,2,2}$ $P_{2,2,2}$ C_{222} $J_{2,2,2}$	P_{222} P_{222} P_{222} P_{222} P_{222}	16,17 18 19 20,21 22 23,24

სიბრტყეს, ტრანსლაციით $\frac{a}{2} + \frac{c}{2}$, ან n სიბრტყეს, რომელიც ვერტიკალური შემდგენის მოქმედებით გადანაცვლებული იქნება $\frac{b}{4}$ მანძილზე, ზევით.

ამგვარად, C ჯგუფში საწყის c სიბრტყეს შეენაცვლება n ტიპის სიბრტყე (ნახ. 4.46 ბ). 2 ლერძი (b) ფორმირდება (ab) და (cb) სიბრტყეების გადაკვეთით, მაგრამ (ab) სიბრტყეში ამ ლერძის პარალელურად მოქმედებს ტრანსლაცია (დახრილი ტრანსლაციის შემდგენი), რომელიც მას გადაქცევს ხრახნულ ლერძად, ხოლო ამავე სიბრტყეში მდებარე a ტრანსლაცია გადანაცვლებს ამ ლერძს $a/4$ მანძილზე. ამიტომ c ლერძის მიმართულეობით თანამიმდევრულად მივიღებთ 2 და 2_1 ლერძებს (ნახ. 4.46 ბ). ლუწი რიგის ლერძისა და მისი მართობი სიმეტრიის სიბრტყის ნამრავლი (ოპერატორული) წარმოადგენს სიმეტრიის ცენტრს. სივრცობრივი ჯგუფის გეგმილის გამოხაზვის დროს კოორდინატთა სათავეს, საზოგადოდ, ირჩევენ სიმეტრიის ცენტრში (თუ ის ჯგუფს გააჩნია). 4.46 ბ ნახაზზე მოყვანილია $C \frac{2}{c}$ ჯგუფის გეგმილები (ab) და (ac) სიბრტყეებზე. ორივე შემთხვევაში კოორდინატთა სათავე აღებულია ინვერსიის ცენტრში ($\bar{1}$), მაგრამ (ac) გეგმილისათვის ის მოთავსებულია b სრიალის სიბრტყეში, ხოლო (ab) გეგმილისათვის c სრიალის საბრტყესთან არის დაკავშირებული. ინვერსიის ცენტრის მდებარეობის დასადგენად (ლერძისა და სიბრტყის გადაკვეთის წერტილთან შედარებით), საჭიროა დავითვალოთ სამივე სიბრტყის სიმბოლოში შემავალი ნახევარტრანსლაციების რიცხვი, მიმართული თითოეულ კოორდინატთა ლერძის პარალელურად. თუ რომელიმე ლერძის გასწვრივ ეს რიცხვი ლუწი იქნება, სიმეტრიის ცენტრი ამ მიმართულებით არ იქნება წანაცვლებული. თუ ნახევარტრანსლაციების რიცხვი კენტია, მაშინ შესაბამისი ლერძის მიმართულებით ის წანაცვლებული იქნება ლერძის სიგრძის $\frac{1}{4}$ სიდიდით. ჩვენი მაგალითის შემთხვევაში, ამის გამო, სიმეტრიის ცენტრები (ab) გეგმილზე გაჩნდებიან $\left(\frac{1}{4} \quad \frac{1}{4}\right)$ კოორდინატების მქონე წერტილებში.

განვიხილოთ $Fmmm$ ჯგუფი. ეს ჯგუფი ეკუთვნის რომბული სისტემის ჰოლოედრული სიმეტრიის ბიპირამიდალურ კლასს. უჯრედი ცენტრირებულია ყველა წახნაგში. ეს ჯგუფი სიმორფულია, რადგან ბრავეს მესრის კვანძში მოთავსებულია სიმეტრიის წერტილოვანი ჯგუფი mmm . 4.47 ნახაზზე მოცემულია $Fmmm$ (ვრცლად $F \frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$) ჯგუფის გეგმილი ab სიბრტყეზე. კოორდინატთა სათავე აღებულია სამი სიმეტრიის სიბრტყის გადაკვეთის წერტილში; ამავე წერტილში მოთავსებულია სიმეტრიის ცენტრი.

მეტრიის ცენტრები (ab) გეგმილზე გაჩნდებიან $\left(\frac{1}{4} \quad \frac{1}{4}\right)$ კოორდინატების მქონე წერტილებში.

განვიხილოთ $Fmmm$ ჯგუფი. ეს ჯგუფი ეკუთვნის რომბული სისტემის ჰოლოედრული სიმეტრიის ბიპირამიდალურ კლასს. უჯრედი ცენტრირებულია ყველა წახნაგში. ეს ჯგუფი სიმორფულია, რადგან ბრავეს მესრის კვანძში მოთავსებულია სიმეტრიის წერტილოვანი ჯგუფი mmm . 4.47 ნახაზზე მოცემულია $Fmmm$ (ვრცლად $F \frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$) ჯგუფის გეგმილი ab

სიბრტყეზე. კოორდინატთა სათავე აღებულია სამი სიმეტრიის სიბრტყის გადაკვეთის წერტილში; ამავე წერტილში მოთავსებულია სიმეტრიის ცენტრი.

ამიტომ საწყისი სიბრტყეები, რომლებიც \bar{a} და \bar{b} ღერძებზე გაივლიან, წარმოადგენენ სიმეტრიის m სიბრტყეებს, რომელთა გადაკვეთაში მოთავესებული იქნება 2 ღერძები და სიმეტრიის ცენტრები. ამასთანავე, სიბრტყისა და ტრანსლაციის გამრავლების თეორემის მიხედვით ყოველ წყვილ და ტრანსლაციით დაკავშირებულ სიბრტყეს შორის წარმოიშობა ასეთივე ტიპის მათი პარალელური სიბრტყე.

ყველა წახნაგის ცენტრიების შედეგად მესერაში არსებობს დახრილი ტრანსლაციები; ამიტომ, მაგალითად, A სიბრტყის ირიბი ტრანსლაციის გავლენით B სიბრტყე, რომელიც სიმეტრიის m სიბრტყეს წარმოადგენდა, გადაიქცევა ვერტიკალური სრიალის (C) სიბრტყედ, რომელიც ჰორიზონტალური შემდგენით გამეორებული იქნება $\frac{1}{4} b$ მანძილზე. ასეთივე სიბრ-

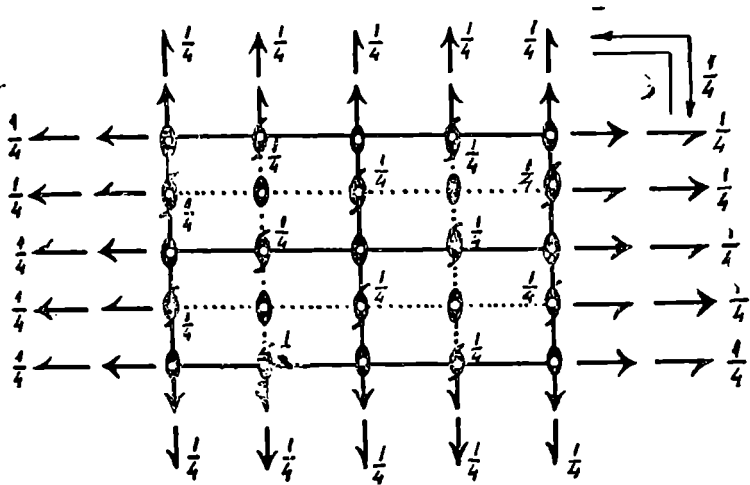
ტყე გაივლის $\frac{1}{4} a$ მანძილზე B სიბრტყის დახრილი ტრანსლაციის მოქმე-

დებით. ეს სიბრტყეები ნაჩვენებია გეგმილზე წერტილოვანი ხაზებით. თვით ჰორიზონტალური (გეგმილის) სიბრტყე, რომელიც სარკულ m სიბრტყეს წარმოადგენს, $\frac{1}{4} c$ მანძილზე გამეორდება ორმხრივი სრიალის

მქონე სიბრტყის სახით. იგივე ირიბი ტრანსლაციების მოქმედებით მეორე რიგის ღერძები გადაინაცვლებენ საკოორდინატო ღერძის გასწვრივ $\frac{1}{4}$ მან-

ძილთ და ხრახნულ ღერძებად გარდაიქმნებიან. ჩვეულებრივი ბრუნვისა და ხრახნული ღერძების რიგრიგობით ცვლას ადგილი ექნება ყველა სიბრტყეში და, კერძოდ, გეგმილის სიბრტყის პარალელურ სიბრტყეებში, რაც ნახაზზე ნაჩვენებია ისრების სახით. ამასთანავე, ვინაიდან 2 ღერძისა და მისდამი მართობი სიბრტყის გადაკვეთაში ვიღებთ სიმეტრიის ცენტრებს, მათი განლაგების სიმაღლე საწყისი სიბრტყიდან აღნიშნულია სათანადო რიცხვით (ნახ. 4.47).

სივრცობრივი ჯგუფი $P \bar{4}2 m$ წარმოადგენს სიმორფულ ჯგუფს, რომელიც წარმოიშობა პრიმიტიული ტეტრაგონალური მესრის კვანძებში ტეტრაგონალური სისტემის სკალენოედრული კლასის $\bar{4}2m$ წერტილოვანი ჯგუფის მოთავესებით. როგორც ვიცით, ტეტრაგონალური ჯგუფების შემთხვევაში 4 ღერძი (ან ინვერსიული $\bar{4}$) მიმართულია z კოორდინატის გასწვრივ და გამოტანილია სიმბოლოს პირველ ადგილზე. მეორე ადგილზე მდგომი ნიშანი ერთდროულად აღნიშნავს x და y კოორდინატების მიმართულებას, ვინაიდან ერთი გამოიყვანება მეორედან მეოთხე რიგის ღერძის მოქმედებით. მესამე ადგილზე მდგომი ნიშანი აღნიშნავს დიაგონალურ სიბრტყეს, რომელიც x და y ღერძებთან 45° ადგენს. სივრცობრივი ჯგუფის გეგმილი ნაჩვენებია 4.48 ნახაზზე. $a = b$ მესრის ტრანსლაციის მოქმე-

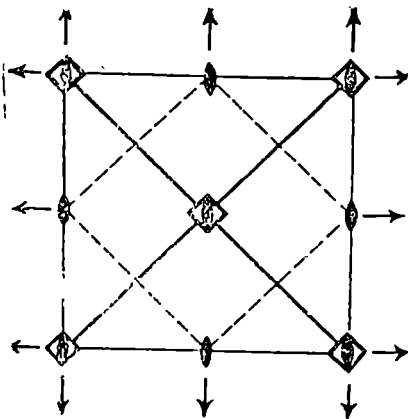


ნახ. 4. 47. $Fm\bar{3}m$ სივრცობრივი ჯგუფის გეგმილი.

ლებით კვადრატის ოთხივე წვეროში მოთავსებული იქნება მეოთხე რიგის ინვერსიული ღერძი და ასეთივე ღერძი გაჩნდება ამ ტრანსლაციაზე აგებული კვადრატის ცენტრში. როგორც ჯგუფის სიმბოლო გვიჩვენებს, დიაგონალური სიბრტყეები სიმეტრიის სარკულ სიბრტყეებს წარმოადგენენ და ვინაიდან მესრის ტრანსლაცია დიაგონალური სიბრტყის მიმართ ყოველთვის ირიბ ტრანსლაციას წარმოადგენს, მისი დაშლის შედეგად ამ სიბრტყის პარალელურად და ვერტიკალური შემდგენის ნახევარზე გაივლიან სრიალის სიბრტყეები, რომელნიც ნახაზზე ნაჩვენებია წყვეტილი ხაზებით. 4 ღერძი იმავე დროს მეორე რიგის ღერძიცაა და ამიტომ მესრის ტრანსლაციების ნახევარ მანძილზე წარმოიშობა მეორე რიგის ღერძები.

ორგანზომილებიანი სივრცის
სივრცობრივი ჯგუფები

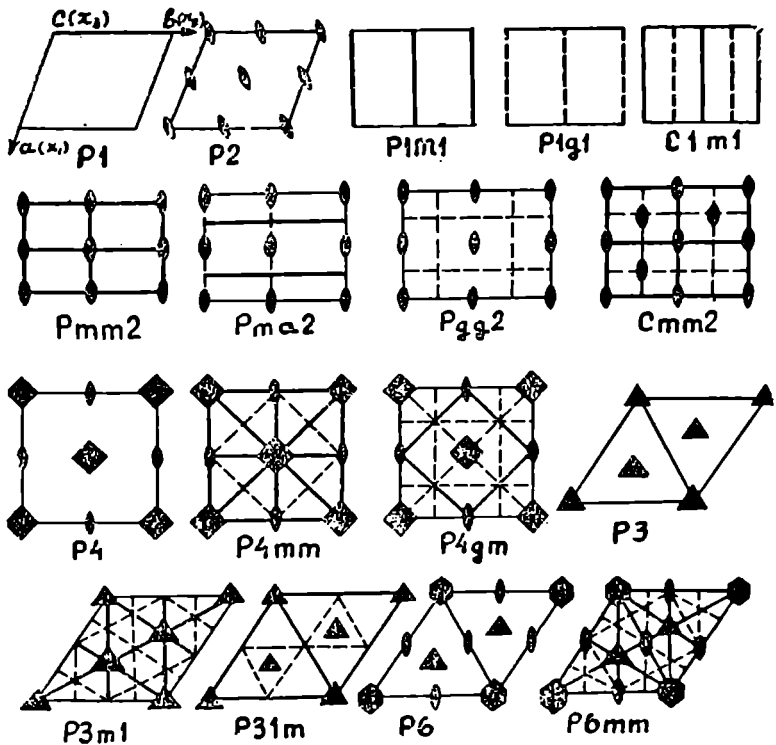
შედარებით მარტივ ჯგუფებს წარმოადგენენ 2 სივრცის სივრცობრივი ჯგუფები. ორგანზომილებიანი ჯგუფები განსაზღვრავენ ორნამენტების, შპალერის, პარკეტების და ა.შ. სიმეტრიას. ორგანზომილებიანი სივრცობრივი ჯგუფები, ცხადია, შეიცავენ $\bar{2}$ და $\bar{5}$ ტრანსლაციებისაგან შედგენილ ქვეჯგუფებს, გამეორე-



ნახ. 4.48. $P4\bar{2}m$ ჯგუფის გეგმილი.

ბადი სასრული ფიგურის სიმეტრიის წერტილოვან ჯგუფს და აგრეთვე კომბინირებულ გარდაქმნებს ხრახნული ბრუნვებისა და სრიალის სიბრტყეების სახით. ვინაიდან არსებობს ბრტყელი ფიგურის წერტილოვანი სიმეტრიის 10 სახე: 1, $1m$, 2, $2mm$, 3, $3m$, 4, $4mm$, 6, $6mm$, მათი მოთავსებით 5 ორგანოზომილებიანი ბრავეს მესრის კვანძებში (ნახ. 4.43) უშუალოდ მიიღება 2 სივრცის სიმორფული სივრცობრივი ჯგუფები. ამ ჯგუფების რიცხვის დასადგენად ვიქცევით ისევე, როგორც 3 სივრცის შემთხვევაში. 2 სივრცეში არსებობს ოთხი კრისტალოგრაფიული სისტემა. ირიბკუთხა სისტემაში შედის ორი წერტილოვანი ჯგუფი (1,2) და ერთი პრიმიტიული ირიბკუთხა პარალელოგრამი, ამიტომ სიმორფული სივრცობრივი ჯგუფების რიცხვი იქნება $2 \times 1 = 2$.

მართკუთხა სისტემას ეკუთვნის 2 წერტილოვანი ჯგუფი (m , $2mm$) და 2 ბრავეს მესერი (პრიმიტიული და ცენტრირებული მართკუთხელი), ამიტომ მივიღებთ $2 \times 2 = 4$ სიმორფულ ჯგუფს.



ნახ. 4.49. ორგანოზომილებიანი სივრცის 17 სივრცობრივი (ბრტყელი) ჯგუფი.

კვადრატულ სისტემაში 2 წერტილოვანი ჯგუფია (4, 4 mm) და ერთი პრიმიტიული უჯრედი, რაც $2 \times 1 = 2$ სიმორფულ ჯგუფს გვაძლევს.

ჰექსაგონალურ სისტემაში შედის 4 წერტილოვანი ჯგუფი (3, 3, 3, 3 mm) და ერთი პრიმიტიული ბრავეს უჯრედი, მაგრამ 3π კლასს, რომელსაც უფრო ვრცლად წერენ $3 m 1$ სახით, ჰექსაგონალური ღერძების მიმართ შეიძლება ჰქონდეს სარკული სიბრტყის სხვაგვარი ორიენტაცია $31 m$, და ამიტომ სიმორფული ჯგუფების რიცხვი იქნება $4 \times 1 + 1 = 5$. ამგვარად, 2 სივრცის სიმორფული სივრცობრივი ჯგუფების რიცხვი ხდება 13, ხოლო მათი აღნიშვნები იქნება:

$P 1$, $P 112$, $P 1 m 1$, $C 1 m 1$, $P m m 2$, $C m m 2$, $P 4$, $P 4 m m$, $P 3$, $P 3 m 1$, $P 31 m$, $P 6$, $P 6 m m$. ამავე სივრცეში შესაძლებელია კიდევ 4 არასიმორფული სივრცობრივი ჯგუფი, რომლებიც მიიღებებიან, თუ წერტილოვანი ჯგუფის კომპლექსში სარკული სიმეტრიის სიბრტყეები შეცვლილი იქნება სრიალის სიბრტყეებით.

საბოლოოდ ვიღებთ სულ 17 სივრცობრივ ჯგუფს, რომლებიც შესაბამის წერტილოვან ჯგუფებთან ერთად მოცემულია მე-7 ცხრილში, ხოლო 4.49 ნახაზზე ნაჩვენებია სიმეტრიის ელემენტების განლაგება აღნიშნულ ჯგუფებში.

კოორდინატთა ღერძები ნახაზზე თანხვდება უჯრედების გვერდებს. მარცხენა გვერდს ზემოდან ქვევით მიყვება $x_1(a)$ ღერძი, ხოლო ზედა გვერდს მარცხნიდან მარჯვნივ — $x_2(b)$ ღერძი. x_3 ღერძი ნახაზის სიბრტყის ნორმალურია.

2 სივრცის სივრცობრივი ჯგუფების საერთაშორისო აღნიშვნებში. პირველ ადგილზე დგას ტრანსლაციური ქვეჯგუფის ნიშანი P და C დაბალი სიმეტრიის ჯგუფებში, სადაც უმაღლესი რიგის ღერძი არის 2, შემდგომი სამი პოზიცია მიმდევრობით უჭირავს სიმეტრიის ღერძების აღმნიშვნელ სიმბოლოებს, რომლებიც x_1 , x_2 , x_3 კოორდინატთა ღერძების გასწვრივ არიან მიმართულნი ან სიმეტრიის სიბრტყეებს x_1 , x_2 , x_3 ღერძების მართობად. თუ სათანადო სიმეტრიის ელემენტი არ არსებობს, შესაბამის ადგილზე იწერება ერთი. ამასთანავე, უნდა გავითვალისწინოთ, რომ სრიალის g სიბრტყეში იგულისხმება ან a სიბრტყე (სრიალი a ღერძის პარალელურად), ან b სიბრტყე. მაღალი სიმეტრიის ჯგუფებისათვის P ასოს შემდეგ იწერება 3, 4, 6 ღერძების ნიშნები, რომელნიც მიმართული არიან x_3 ღერძის გასწვრივ, ხოლო ამის შემდეგ — x_1 ღერძის მართობი სიბრტყე; ბოლო პოზიციაზე აღნიშნულია სიბრტყის სიმბოლო, რომელიც ორ მეზობელ და ეკვივალენტურ x ღერძს შორის კუთხის ბისექტრისის მართობია. მაგალითისათვის განვიხილოთ $P 4gm$ ჯგუფი. ეს ჯგუფი $4 m m$ კლასს ეკუთვნის, მაგრამ ვინაიდან ერთ-ერთი სიმეტრიის ჰორიზონტალური სიბრტყე შეცვლილია სრიალის g სიბრტყით, ჯგუფი არასიმორფულია. ტეტრაგონალურ სისტემაში $a=b$ და 4 ღერძის მოქმედებით სიბრტყე,

სისტემა და n რეს უჯრედი	წერტილოვანი ჩვეულება	სივრცობრივი ჯგუფები		რიგი №	სივრცობრივი ჯგუფების გენერატორები
		სრული აღნიშვნა	შემოკლებული აღნიშვნა		
ირიბკუთხა (პრიმიტიული)	1	P_1	P_1	1	$P, 1$
	2	P_{112}	P_2	2	$P, 2$
მართკუთხა (პრიმიტიული) P	m	P_{1m1}	P_m	3	P, m
		P_{1g1}	P_g	4	P, g
		C_{1m1}	C_m	5	C, m
ცენტრირებული C	$mm2$	P_{mm2}	P_{mm}	6	$P, 2, m$
		P_{mg2}	P_{mg}	7	$P, 2, g$
		P_{gg2}	P_{gg}	8	P, g, g
		C_{mm2}	C_{mm}	9	$C, 2, m$
კვადრატული P	4	P_4	p_4	10	$P, 4$
	$4mm$	P_{4mm} P_{4gm}	P_{4m} P_{4g}	11 12	$P, 4, m$ $P, 4, g$
პექსაგონალური P	3	P_3	P_3	13	$P, 3$
	$3m$	P_{3m1}	P_{3m1}	14	$P, 3, m$
		P_{31m}	P_{31m}	15	$P, 3, m$
	6 $6mm$	P_6	P_6	16	$P, 3, 2$
		P_{6mm}	P_{6m}	17	$P, 3, 2, m$

გამავალი x_2 ღერძის პარალელურად, ასეთივე იქნება x_1 ღერძისათვის. ამიტომ ორივე ღერძის გასწვრივ სრიალის სიბრტყეები გაივლიან და თუ კოორდინატთა სათავეს ავირჩიევთ 4 ღერძზე, მაშინ x_1 ღერძის პარალელურად გამავალი სრიალის სიბრტყე წანაცვლებული იქნება x_2 ღერძის მიმართულებით მოქმედი ტრანსლაციით მის $1/4$ მანძილზე, ასევე წაინაცვლებს x_2 ღერძის პარალელურად გამავალი სრიალის სიბრტყე. 4 ღერძისა და მის მართობად მოქმედი ტრანსლაციის შედეგად ამ ტრანსლაციაზე აგებული კვადრატის ცენტრში, როგორც ვიცით, გაჩნდება ისევე მეოთხე რიგის ღერძი, ხოლო ვინაიდან 4 ღერძი იმავე დროს 2 ღერძიც არის, $a = b$ ტრანსლაციების შუაში გაივლიან 2 ღერძები. ამ ღერძების შემაერთებელი სიბრტყეები, როგორც ჯგუფის სიმბოლოს ბოლო ნიშანი გვიჩვენებს, სიმეტრიის სარკულ სიბრტყეს წარმოადგენს. გარდა ამისა, x_1 და x_2 ღერ-

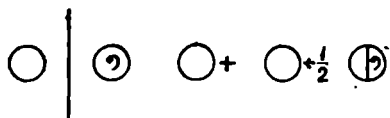
ძების პარალელური ტრანსლაციები დიაგონალური სიბრტყეების მიმართ, ამ შემთხვევაში, ირიბი იქნებიან და მათ სრიალის სიბრტყეებად გახდიან.

როგორც დავინახეთ, კრისტალების მაკროსკოპული სიმეტრიის აღწერა იმ შემთხვევაში, როდესაც არ არის გათვალისწინებული მათი მაგნიტური სტრუქტურა, შესაძლებელია სიმეტრიის 32 წერტილოვანი ჯგუფის ან კრისტალური კლასის საშუალებით. ფერომაგნიტური და ანტიფერომაგნიტური კრისტალების მაგნიტური თვისებების მაკროსკოპული სიმეტრია ხასიათდება უკვე 90 ანტისიმეტრიის ან მაგნიტური სიმეტრიის კლასით, რომლებიც 32 წერტილოვანი ჯგუფების ოპერატორებისა და R ოპერატორის ერთობლივი მოქმედებით მიიღებიან. ატომებისა და ატომთა ჯგუფების განლაგების სიმეტრია ან კრისტალების მიკროსიმეტრია ხასიათდება 230 სივრცობრივი ჯგუფით. თუ 230 სივრცობრივი ჯგუფის შემქმნელ ოპერატორებს დავუმატებთ ანტიტრანსლაციას (ანტისიმეტრიის სივრცობრივი ჯგუფები) ან R ოპერატორს, მივიღებთ მაგნიტური სიმეტრიის სივრცობრივ ჯგუფებს, რომლებსაც შუბნიკოვის ჯგუფები ეწოდება. ისევე, როგორც მაგნიტური კლასების შემთხვევაში, მაგნიტური სივრცობრივი ჯგუფები უნდა გავანაწილოთ სამ კატეგორიად: ჯგუფები, რომლებიც არ შეიცავენ R ოპერატორს და, მაშასადამე, თანხედებიან ზემოთ მიღებულ 230 სივრცობრივ ჯგუფს. ფერის მიხედვით ეს იქნება ერთი ფერის ან უფერო ჯგუფები. შემდეგ კატეგორიას მიეკუთვნება ჯგუფები, რომლებიც მიიღებიან როგორც (E, R) ჯგუფის და დანარჩენი სივრცობრივი ჯგუფების პირდაპირი ნამრავლი. მათი რიცხვიც აგრეთვე 230 იქნება და ფერის მხრივ წარმოადგენენ ნაცრისფერ ჯგუფებს. ბოლოს, მესამე კატეგორიის ჯგუფებს შეადგენენ ჯგუფები, რომლებიც შეიცავენ მიკროსიმეტრიის ელემენტებისა და R ოპერატორის კომბინაციებს. ფერის მხრივ ეს იქნება ორი ფერის ან შავ-თეთრი ჯგუფები, რომელთა რიცხვი უდრის 1191. ამგვარად, სულ ანტისიმეტრიის ან მაგნიტური მიკროსიმეტრიის ჯგუფების რიცხვი აღწევს 1651. პირველად შუბნიკოვის ჯგუფების სრული გამოყვანა შეძლეს საბჭოთა მეცნიერებმა — ნ. ბელოვმა, ა. ზამორზაევმა და სხვებმა.

წარტილვის სისტემაში და კოორდინატები

წერტილების სწორი სისტემა ეწოდება წერტილების სიმრავლეს, რომელიც მიიღება ერთი ნებისმიერი წერტილის გამეორებით სივრცობრივ ჯგუფში შემაჯალი სიმეტრიის ყველა ელემენტის მიერ. ცხადია, თუ ატომი მოთავსებული იქნება სისტემის ერთ რომელიმე წერტილში, ასეთივე ტიპის ატომები გამეორდება სისტემის ყველა სხვა წერტილში. თუ საწყისი წერტილი ზოგად მდგომარეობაშია, მისი გამრავლებით მიღებული წერტილების სისტემა იქნება ზოგადი. კერძო მდგომარეობაში (სიმეტრიის

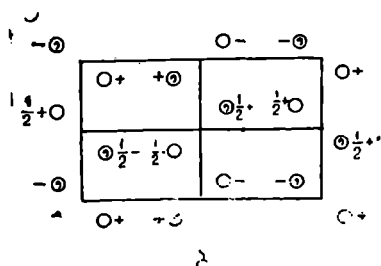
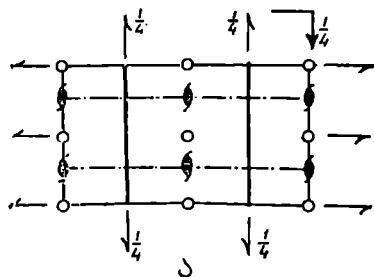
ელემენტზე) მყოფი წერტილის გამრავლებით მიიღება წერტილების კერძო სისტემა. წერტილების რიცხვს, რომელიც ერთ



ნახ. 4.50. წერტილოვანი კომპლექსის წერტილების პირობითი აღნიშვნები.

ელემენტარულ უჯრედზე მოდის, ეწოდება წერტილების სისტემის ჭერადობა. ჩვეულებრივად, საერთაშორისო ცნობარებში მოცემული სივრცობრივი ჯგუფისათვის შესაძლებელი წერტილების სისტემებიდან ნაჩვენებია მხოლოდ ერთი ზოგადი სისტემის წერტილების განლაგება. წერტილები აღინიშნება პატარა რგოლების სახით (ნახ. 4.50). თუ ერთი წერტილი მეორის სარკულ გამოსახულებას წარმოადგენს, ერთ რგოლში ისმება მძიმე. თუ რგოლის გვერდზე დასმულია ნიშანი „+“ ან „—“, ეს იმის მაჩვენებელია, რომ წერტილი არ მდებარეობს ნახაზის სიბრტყეში. ციფრები $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{4}$...

დან, აღნიშნავენ წერტილის სიმაღლეს ღერძის მიმართულებით, აღებულს ერთეულოვანი ტრანსლაციის ნაწილებში. თუ ერთი წერტილი მეორეზე ზემოთ არის მოთავსებული, რგოლს შუაში ყოფენ ხაზით და ერთ ნახევარში ათავსებენ მძიმეს. 4.51-ა ნახაზზე ნაჩვენებია $Pnma$ სივრცობრივი ჯგუფის გეგმილი და ამ ჯგუფის წერტილების ზოგადი სისტემა (ნახ. 4.51-ბ). როგორც ნახაზიდან ჩანს, ელემენტარულ უჯრედში მოთავსებულია რვა წერტილი და, მაშასადამე, წერტილოვანი სისტემის ჭერადობა უდრის 8. ახლა საჭიროა დავადგინოთ კომპლექსში შემავალი წერტილების კოორდინატები. ამისათვის შესაძლებელია მოვიქცეთ ისევე, როგორც წერტილოვანი ჯგუფის შესაბამისი წერტილოვანი კომპლექსის კოორდინატების დადგენის დროს. ჯგუფში შემავალი თითოეული სიმეტრიის ელემენტისათვის უნდა აიგოს შესაბამისი გარდაქმნის მატრიცა, რომელიც განსაზღვრავს წერტილის ახალ კოორდინატებს.



ნახ. 4.51. ა. $Pnma$ სივრცობრივი ჯგუფის გეგმილი
ბ. ჯგუფის წერტილების ზოგადი კომპლექსი.

ჩვენი მაგალითის შემთხვევაში მხედველობაში უნდა მივიღოთ, რომ x_1 ღერძის მართობი სიბრტყე n სრიალის სიბრტყეა ტრანსლაციით $t = \left(0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)$, ხოლო x_3 ღერძის მართობი სიბრტყე სრიალის სიბრტყეა ტრანსლაციით $t = \left(\frac{1}{2} 0 0\right)$. ამიტომ x_1 x_2 x_3 წერტილის კოორდინატები

n სიბრტყეში არეკვლის შემდეგ იქნება: $\frac{1}{2} - x_1, \frac{1}{2} + x_2, \frac{1}{2} + x_3$ (აქ $\frac{1}{2} - x_1$ ჩნდება იმიტომ, რომ n სიბრტყე გადაადგილებულია კოორდინატთა სათავიდან $\frac{1}{4}$ a მანძილით). $x_2 = m$ სიბრტყეში არეკვლის შედეგად

მიიღება წერტილი $x_1, \frac{1}{2} - x_2, x_3$. ნახევარი x_2 კოორდინატთან, ისევე როგორც პირველ შემთხვევაში, წარმოიშობა m სიბრტყის კოორდინატთა სათავიდან $\frac{1}{4}$ b მანძილით გადაადგილების შედეგად; ბოლოს, $x_3 = a$

სიბრტყეში არეკვლის შემდეგ მიიღება წერტილი $\frac{1}{2} + x_1, x_2, \frac{1}{2} - x_3$. ნახევარი x_3 კოორდინატთან ჩნდება ისევე ამრეკლავი x_3 სიბრტყის გადაადგილებით კოორდინატთა სათავიდან $\frac{1}{4}$ c მანძილით. ამგვარად, x_1 x_2

x_3 საწყის წერტილთან ერთად სულ მიიღება ოთხი წერტილი, ხოლო სიმეტრიის ცენტრის მოქმედების შედეგად გაჩნდება რვა წერტილისაგან შემდგარი წერტილების სისტემა, რომლებზედაც გადასახული იქნება $Pnma$ ჯგუფი.

$$8. x_1, x_2, x_3; \frac{1}{2} - x_1, \frac{1}{2} + x_2, \frac{1}{2} + x_3; x_1, \frac{1}{2} - x_2, x_3; \frac{1}{2} + x_1, x_2, \frac{1}{2} - x_3;$$

$$\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_3; \frac{1}{2} + x_1, \frac{1}{2} - x_2, \frac{1}{2} - x_3; \bar{x}_1, \frac{1}{2} + x_2, \bar{x}_3; \frac{1}{2} - x_1, \bar{x}_2, \frac{1}{2} + x_3.$$

ამ მაგალითის საფუძველზე შეიძლება ჩამოვაყალიბოთ სრიალის სიბრტყეების მოქმედების ზოგადი წესი. კოორდინატს ნახევარი მინუსით ემატება იმ შემთხვევაში, თუ შესაბამისი სიბრტყე (მოცემული კოორდი-

ნატის მართობული) გადაადგილებულია კოორდინატთა სათავიდან ღერძის $\frac{1}{4}$ მანძილით, ხოლო ნახევარი პლუსით—იმ შემთხვევაში, თუ სათანადო სიბრტყის სიმბოლოში არსებობს ნახევარტრანსლაციები ამ კოორდინატის გასწვრივ.

კოორდინატთა სათავეს უმრავლეს შემთხვევაში ირჩევენ სიმეტრიის ცენტრში. სიმეტრიის ცენტრის მდებარეობის განსაზღვრა ხდება ჯგუფის სიმბოლოს საშუალებით. ამისათვის საჭიროა დავითვალთო თითოეული კოორდინატთა ღერძის გასწვრივ ნახევარტრანსლაციების რიცხვი, რომლებსაც შეიცავს სიბრტყეების სიმბოლოები. თუ რომელიმე ღერძის მიმართულებით ეს რიცხვი ლუწია, სიმეტრიის ცენტრი ამ ღერძის პარალელურად წანაცვლებული არ იქნება. თუ ეს რიცხვი კენტია, ამ ღერძის გასწვრივ სიმეტრიის ცენტრი წანაცვლებული იქნება ღერძის $\frac{1}{4}$ მანძილით.

ლიტერატურა

- Жданов. Г. С. Основы Рентгеновского структурного анализа. Гостехиздат, 1940.
- Ландау Л., Лифшиц Е. Статистическая физика. Изд-во технического-теорет. литер., 1951. (гл. XIII).
- Meweeny R. Symmetry. Pergamon Press. 1963.
- Любарский Г. Я. Теория групп и ее применение в физике. Изд-во физ. мат. литературы. 1958.
- Хамермеш М. Теория групп. Изд-во «Мир», 1966.
- Багавантам С., Венкатарайуду Т. Теория групп и ее применение к физическим проблемам. Изд-во «ИЛ», 1959.
- Белов Н. В. Классный метод вывода пространственных групп. Труды ин-та кристаллографии I, 1951.
- Шубников А. В. Симметрия и антисимметрия конечных фигур. Изд-во Акад. Наук СССР, 1951.
- Шубников А. В., Копчик В. А. Симметрия в науке и искусстве. Изд-во «Наука», 1972.
- Ландау Л., Лифшиц Е. Электродинамика сплошных сред. Изд-во технико-теоретич. литер., 1957, (§28).
- Белов Н. В., Неронова Н. Н., Смирнова Т. С. 1651 шубниковская группа. Тр. ин-та кристаллографии II, 33, 1955.
- Тавгер Б. А., Зайцев В. М. О магнитной симметрии кристаллов. ЖЭТФ, 30, 564, 1956.
- International Tables for X-ray Crystallography Birmingham, 1952.

სიმეტრიის გავლენა კრისტალების ფიზიკურ თვისებებზე

§ 20. ფიზიკური თვისება, როგორც ორი ფიზიკური სიდიდის თანაფარდობა

ხშირ შემთხვევაში, კრისტალის ფიზიკური თვისება შეიძლება წარმოვიდგინოთ როგორც ორი ფიზიკური სიდიდის თანაფარდობა. ეს ფიზიკური სიდიდეები უშუალოდ იზომებიან კრისტალში. მაგალითად, თუ ნივთიერების მოცემული მდგომარეობისათვის მის მასას და მოცულობას ავირჩევთ როგორც ორ ფიზიკურ სიდიდეს, მაშინ გარკვეული თანაფარდობა, რომელიც ამ ორ სიდიდეს შორის არსებობს, განსაზღვრავს ახალ ფიზიკურ სიდიდეს, რომელსაც სიმკვრივე ეწოდება. სიმკვრივე გამოხატავს ნივთიერების ფიზიკურ თვისებას, როდესაც მის მოცულობის ერთეულში თავსდება მასის გარკვეული რაოდენობა. როგორც მასა, ისე მოცულობა სკალარულ სიდიდეებს წარმოადგენენ (ნულოვანი რანგის ტენზორები) და მათი მნიშვნელობა კრისტალში სრულებით არ არის დაკავშირებული გაზომვის მიმართულებასთან. ამ სიდიდეების შეფარდება განსაზღვრავს ფიზიკურ სიდიდეს — სიმკვრივეს, რომლის მნიშვნელობა გაზომვის მიმართულებისაგან ასევე არ არის დამოკიდებული. ასეთივე სკალარული ფიზიკური თვისების მაგალითს წარმოადგენს სითბოტევადობა, რომელიც ორი სკალარული ფიზიკური სიდიდის — ტემპერატურისა და სითბოს რაოდენობის თანაფარდობით გამოიხატება.

მოყვანილ მაგალითებში, როგორც აღებული ფიზიკური სიდიდეები, ისე მათი თანაფარდობით მიღებული ფიზიკური თვისებები, სკალარული სიდიდეებია.

კრისტალები, მათი სიმეტრიის მიუხედავად, იზოტროპიულები არიან სკალარული სიდიდეების მიმართ; ამიტომ სკალარული ფიზიკური თვისების განლაგება ყველა მიმართულებით ქმნის სფერულ ზედაპირს.

სიმეტრიასთან დაკავშირებით, კრისტალების ფიზიკური თვისებების განხილვისას ხელსაყრელია ამ თვისებების დაჯგუფება ისე, რომ ერთ ჯგუფში გაერთიანდნენ ყველა ფიზიკური თვისება, რომელნიც ერთი გარკვეული რანგის ტენზორით აღიწერებიან ეს მით უფრო მნიშვნელოვანია, რომ ტენზორით გამოხატული ფიზიკური თვისებები ინვარიანტული არიან კოორდინატთა ღერძების გარდაქმნის მიმართ.

| სკალარული თვისებების გარდა არსებობს ვექტორული (პირველი რანგის ტენზორი) ფიზიკური თვისებების მქონე ჯგუფი. ვექტორული ფი-

ზიკური თვისების მაგალითს წარმოადგენს პიროველექტრობა. ეს თვისება დაკავშირებულია ზოგიერთი კრისტალის პოლარიზაციასთან ტემპერატურის ცვლილების გავლენით. პიროველექტრული ვექტორი, რომელიც პიროველექტრობის ფიზიკურ თვისებას გამოხატავს, გამოისახება ორი ფიზიკური სიდიდის — პოლარიზაციის ვექტორისა და ტემპერატურის (სკალარი) თანაფარდობით. ასეთივე ვექტორულ თვისებას მიეკუთვნება ელექტროკალორიული ეფექტი, როდესაც გარე ელექტრული ველის (ვექტორული სიდიდე) მოქმედებით ხდება სითბოს გარკვეული რაოდენობის (სკალარული სიდიდე) გამოყოფა და მრავალი სხვა. განხილულ მაგალითებში ვექტორული ფიზიკური თვისებები წარმოადგენენ ვექტორული და სკალარული ფიზიკური სიდიდეების თანაფარდობას.

ვექტორული თვისების არსებობა კრისტალში მოითხოვს ერთი განსაკუთრებული მიმართულების არსებობას, ამიტომ ვექტორული ფიზიკური თვისების გამომხატველი ვექტორები პოლარული ვექტორებია. ცხადია, ასეთი თვისებები არ შეიძლება ჰქონდეთ კრისტალებს, რომლებსაც სიმეტრიის ცენტრი გააჩნიათ.

შემდეგ ჩგუფს შეადგენენ ისეთი ფიზიკური თვისებები, რომელნიც დაკავშირებული არიან ორი ვექტორული ფიზიკური სიდიდის თანაფარდობასთან. ასე, მაგალითად, გამოსახულებით $\vec{E}_i = \rho_{ik} \vec{i}_k$, რომელიც აკავშირებს დენის სიმკვრივის და ელექტრული ველის დაძაბულობის ვექტორებს, განსაზღვრულია კუთრი წინააღმდეგობის თვისება, ხოლო კოეფიციენტები ρ_{ik} ადგენენ კუთრი წინააღმდეგობის მეორე რანგის სიმეტრიულ ტენზორს. ასევე, გარეშე ელექტრული ველის დაძაბულობის \vec{E} ვექტორისა და მის მიერ მოცულობის ერთეულში ინდუცირებული ელექტრული მომენტის (პოლარიზაციის ვექტორის) თანაფარდობა $\vec{P}_i = \chi_{ij} \vec{E}_j$ განსაზღვრავს დიელექტრიკულ პოლარიზებადობას, რომელსაც მეორე რანგის $[\chi_{ij}]$ ტენზორი აღწერს. ფიზიკური თვისებების ამავე ჩგუფს მიეკუთვნება დიელექტრიკული და მაგნიტური შეღწევადობა და ამთვისებლობა, კუთრი ელექტროგამტარობა, სითბური გაფართოება, სითბოგამტარობა, თერმოელექტრობა და მრავალი სხვა. ყველა განხილულ შემთხვევაში, ფიზიკური თვისება, რომელსაც ჩვენ ორი ვექტორული სიდიდის (პირველი რანგის ტენზორების) თანაფარდობასთან ვაკავშირებთ, გამოიხატება მეორე რანგის ტენზორის საშუალებით.

აქვე უნდა შევნიშნოთ, რომ მეორე რანგის ტენზორი აგრეთვე გამოხატავს ისეთ ფიზიკურ თვისებებს, რომლებიც მეორე რანგის ტენზორისა და სკალარული სიდიდეების თანაფარდობით არიან განსაზღვრულნი. მაგალითად, დეფორმაციის (მეორე რანგის ტენზორი) დროს გამოყოფილი სითბო (სკალარი) და სხვა.

მეორე რანგის სიმეტრიული ტენზორის შესაბამის ზედაპირს, როგორც ვიცით, ელიფსოიდი წარმოადგენს: ამიტომ ასეთი ტენზორის მიერ წარმოდგენილი ფიზიკური თვისებები ნაწილდებიან კრისტალში ელიფსოიდურ ზედაპირზე (მაგალითად, კრისტალური ნივთიერებიდან ამოკრილი სფერო გახურების შემდეგ გადაიქცევა ელიფსოიდად), რომლის ტიპი და განლაგება დამოკიდებულია მოცემული კრისტალის სიმეტრიაზე. ამ საკითხს ჩვენ შემდეგში კიდევ დაუბრუნდებით. ახლა კი შესაძლებელია ავირჩიოთ უფრო რთული ფიზიკური სიდიდეები, მაგალითად, მეორე რანგის ტენზორი და ვექტორი (პირველი რანგის ტენზორი). ასეთი სიდიდეების ურთიერთკავშირი გვხვდება პირდაპირი და შებრუნებული პიეზოელექტრული ეფექტების განხილვის დროს, სადაც დეფორმაცია (მეორე რანგის ტენზორი) დაკავშირებულია კრისტალის პოლარიზაციასთან (ვექტორი). პიეზოელექტრობის ფიზიკურ თვისებას, ამ შემთხვევაში, გამოხატავენ პიეზოელექტრული მოდულები, რომელნიც მესამე რანგის ტენზორს შეადგენენ.

ვინაიდან კოორდინატთა ღერძების გარდაქმნის შედეგად ტენზორის კომპონენტები გარდაიქმნებიან როგორც კოორდინატების ნამრავლი (1.19,20), მესამე რანგის ტენზორის კომპონენტები, როდესაც კოორდინატთა ღერძების მიმართულება შეიცვლება საწინააღმდეგო მიმართულებით (ღერძების ინვერსია), იცვლიან ნიშანს. ეს იმას ნიშნავს, რომ ფიზიკური თვისებები, რომელთა აღწერაც მესამე რანგის (კენტი რანგის) ტენზორებით ხდება, არ შეიძლება არსებობდნენ სიმეტრიის ცენტრის მქონე კრისტალებში.

ზოგიერთი ფიზიკური თვისების აღწერა ხდება აქსიალური ვექტორის (მეორე რანგის აქსიალური ტენზორის) საშუალებით. ასეთ თვისებებს მიეკუთვნებიან ოპტიკური აქტივობა (პოლარიზაციის სიბრტყის ბრუნვა) და მაგნიტური თვისებების გამომხატველი ტენზორები, მაგალითად, მაგნიტური დაძაბულობა, მაგნიტური ინდუქცია, მაგნიტური მომენტი. კერძოდ, მაგნიტური ველის დაძაბულობის \vec{H} ვექტორის სიმეტრიული გარდაქმნის ფორმულა შეიძლება დაიწეროს ისევე, როგორც აქსიალური ვექტორის გარდაქმნა (1.29)

$$H_i = \pm a_{ij} H_j, \quad (5.1)$$

სადაც ნიშანი „+“ აიღება იმ შემთხვევაში, როდესაც გარდაქმნა ხდება ერთი და იგივე ტიპის კოორდინატთა სისტემაში (წმინდა ბრუნვა), ხოლო ნიშანი „—“, როდესაც მარჯვენა სისტემა გადადის მარცხენაში ან, პირიქით (ბრუნვა და არეკვლა). თუ კოორდინატთა გარდაქმნას თან ახლავს ვექტორის მიმართულების შეცვლა საწინააღმდეგო მიმართულებით, ე. ი. R ტიპის ოპერაცია, საბოლოო შედეგის წარმოსადგენად საჭიროა განვიხილოთ ფიზიკური სისტემა და მასზე R გარდაქმნის მოქმედება. ფიზიკურ

სისტემას ჩვენს მაგალითში წარმოადგენს ელექტროდენის მიერ შექმნილი მაგნიტური ველი. მაგნიტური ველის H ვექტორის მიმართულების შეცვლა დაკავშირებულია დენის მიმართულების შეცვლასთან. ამიტომ R ოპერაცია წარმოადგენს დენის მიმართულების შეცვლის ოპერაციას და ვექტორის გარდაქმნა ახლა შეიძლება ასე ჩაიწეროს (4.35).

$$H_i' = -(\pm a_{ij})H_j. \quad (5.2)$$

და, ბოლოს, დავაკავშიროთ სიდიდეები, რომელნიც მეორე რანგის ტენზორებით გამოიხატებიან, მაგალითად: ძაბვები და დეფორმაციები. ორივე ეს სიდიდე გამოიხატება მეორე რანგის ტენზორით, ხოლო თანაფარდობა, რომელიც ამ ორ სიდიდეს შორის არსებობს, განსაზღვრავს ფიზიკურ თვისებას, რომელსაც დრეკადობა ეწოდება. დრეკადი თვისებების აღწერა ხდება მეოთხე რანგის ტენზორის საშუალებით.

როგორც ვხედავთ, ფიზიკური თვისებების დიდი ნაწილი შეიძლება დაუკავშიროთ სათანადო რანგის ტენზორით გამოხატული ორი ფიზიკური სიდიდის ურთიერთქმედებას. კავშირი ამ ორ სიდიდეს შორის ზოგადი სახით ასე იწერება

$$P_{ijkl} \dots = a_{ijk} \dots emn Q_{emmn} \dots, \quad (5.3)$$

სადაც $P_{ijkl} \dots$ და $Q_{emmn} \dots$ წარმოადგენენ ფიზიკურ სიდიდეებს, ხოლო $a_{ijk} \dots emn$ — ამ სიდიდეებით განსაზღვრულ ფიზიკურ თვისებას. (5.3) ფორმულიდან გამომდინარეობს, რომ თუ p გამოიხატება m რანგის ტენზორით, ხოლო Q — n რანგის ტენზორია, მაშინ $a_{ijk} \dots emn$ კოეფიციენტები ქმნიან $(m+n)$ რანგის ტენზორს, რომელიც სათანადო მატრიცით იქნება წარმოდგენილი. ეს შედეგი საფუძველია იმ კლასიფიკაციისა, რომელიც გვაძლევს საშუალებას თითოეული ფიზიკური სიდიდე და ფიზიკური თვისება დავაჯგუფოთ გარკვეული გვარობისა და რანგის ტენზორის მიხედვით. ასეთი დავაჯგუფება განსაკუთრებით სასარგებლოა, როდესაც განიხილება კრისტალების სიმეტრიის გავლენა მათ ფიზიკურ თვისებებზე, ვინაიდან, როგორც შემდგომი იქნება ნაჩვენები, ერთი და იგივე სიმეტრია ერთნაირად მოქმედებს ერთი გვარობისა და რანგის ტენზორებზე იმის მიუხედავად, თუ როგორ ფიზიკურ თვისებებს აღწერენ ისინი. აქედან, ცხადია, რომ, რადგანაც ტენზორი განისაზღვრება თავისი კოეფიციენტების ცხრილის (მატრიცის) სახით, კრისტალებში, რომელთა სიმეტრიაც მოცემულია წერტილოვანი ჯგუფით: ხასიათდება, ყველა ფიზიკური თვისებისათვის, რომლებიც ერთნაირი გვარისა და რანგის ტენზორით იქნებიან წარმოდგენილი, იარსებებს სრულიად გარკვეული კოეფიციენტების მქონე მატრიცა, დამოუკიდებლად იმისა, თუ რომელ ფიზიკურ თვისებას აღწერს ეს

ტენზორი. ასე, მაგალითად, სითბოგამტარობა, ელექტროგამტარობა, ელექტრული ამთვისებლობა და მრავალი სხვა ფიზიკური თვისებები გამოისახებიან ერთნაირი სახისა და რანგის ტენზორებით. ამიტომ ერთი და იგივე სიმეტრიის კრისტალებისათვის ეს თვისებები წარმოდგენილი იქნებიან ნულისაგან განსხვავებული კოეფიციენტების სრულიად გარკვეული ცხრილით.

ფიზიკური თვისებების საკუთარი სიმეტრია

ჩვენ უკვე ვიცით, რომ კრისტალები თავისი სიმეტრიის მიხედვით ნაწილდებიან 32 კრისტალოგრაფიულ კლასში ან წერტილოვან ჯგუფში. ამავე დროს კრისტალს გააჩნია მრავალი სხვადასხვა ფიზიკური თვისება, რომელთა განაწილება კრისტალში, როგორც ანიზოტროპულ სხეულში, დამოკიდებულია მიმართულებაზე. ზოგიერთი თვისების მიმართ კრისტალი შეიძლება იქცეოდეს ისე, როგორც იზოტროპული სხეული და მაშინ ამ თვისებას, გაზომილს კრისტალის ერთი რომელიმე წერტილიდან, ყველა მიმართულებით ექნება ერთნაირი მნიშვნელობა. ამიტომ მისი განაწილება კრისტალში გამოისახება სფეროს საშუალებით. თუ რომელიმე ფიზიკური თვისების აღწერა ხდება მეორე რანგის სიმეტრიული ტენზორის საშუალებით, მაშინ ამ თვისების განაწილების ზედაპირი იქნება სამღერძა ან ბრუნვის ელიფსოიდი. ამ შემთხვევაშიც ფიზიკური თვისებები განაწილდებიან ისეთი საკუთარი სიმეტრიით, რომელიც დამახასიათებელია ელიფსოიდისათვის. ასე, მაგალითად, კუბური სიმეტრიის მქონე კრისტალები იზოტროპულ თვისებებს ავლენენ სინათლის გავრცელების მიმართ, მაგრამ ყველა სხვა სიმეტრიის კრისტალებისათვის სინათლის გავრცელების სიჩქარე (გარდატეხის მაჩვენებელი) დამოკიდებულია მიმართულებაზე და გარდატეხის მაჩვენებლის განლაგების ზედაპირს, რომელსაც ოპტიკური ინდიკატორისა ეწოდება, სხვადასხვა ტიპის ელიფსოიდები წარმოადგენენ.

ამგვარად, ნებისმიერი ფიზიკური თვისების განლაგებას კრისტალში შეიძლება ჰქონდეს თავისი საკუთარი სიმეტრია, რომელიც განსხვავებულია კრისტალის სიმეტრიისაგან, მქლავნდება მისგან დამოუკიდებლად, მაგრამ ამავე დროს განიცდის ამ უკანასკნელის გავლენას. კრისტალის სიმეტრიის გავლენით, მაგალითად, შეიძლება მოხდეს ფიზიკური თვისების გამომხატველი ტენზორის დამოუკიდებელი კომპონენტების რიცხვის შემცირება.

კავშირი კრისტალის სიმეტრიასა და მისი რომელიმე ფიზიკური თვისების სიმეტრიას შორის მყარდება ფუნდამენტური პრინციპით, რომელსაც ნეიმანის პრინციპი ეწოდება. ეს პრინციპი შემდეგში მდგომარეობს: კრისტალის ნებისმიერი ფიზიკური თვისების სიმეტრია აუცილებლად შეი-

ცავს წერტილოვანი ჯგუფის სიმეტრიას; ან, სხვაგვარად, ნებისმიერი ფიზიკური თვისების სიმეტრიის ელემენტები შეიცავენ კრისტალის წერტილოვანი ჯგუფის სიმეტრიის ელემენტებს.

ეს იმას ნიშნავს, რომ ფიზიკური თვისების სიმეტრია არ არის აუცილებელი ემთხვეოდეს კრისტალის სიმეტრიას, მაგრამ ის უნდა შეიცავდეს წერტილოვანი ჯგუფის ყველა ელემენტს და ამიტომ არ შეიძლება იყოს მასზე დაბალი. რიგ შემთხვევაში ფიზიკური თვისების გამომხატველი ტენზორის სიმეტრია უფრო მაღალია, ვიდრე კრისტალის წერტილოვანი ჯგუფის სიმეტრია. მაგალითად: ყველა ფიზიკური თვისება, რომლებსაც მეორე რანგის ტენზორი აღწერს, ცენტროსიმეტრიულია იმ დროს, როდესაც თვითონ კრისტალს შეიძლება სიმეტრიის ცენტრი არ გააჩნდეს. ის ფაქტი, რომ ფიზიკური თვისების გამომხატველი ტენზორი უნდა შეიცავდეს კრისტალის წერტილოვანი ჯგუფის სიმეტრიის ელემენტებს, ადებს გარკვეულ შეზღუდვას ტენზორის კომპონენტებს და ამით ამცირებს დამოუკიდებელი კომპონენტების რიცხვს. ამის შედეგად მცირდება დამოუკიდებელი გაზომვების რიცხვი, რომელიც საჭიროა კრისტალში მოცემული ფიზიკური [თვისების განსაზღვრისათვის. როგორც ჩანს, ეს შემცირება დამოკიდებულია კრისტალის წერტილოვან ჯგუფზე.

§ 21. კრისტალუბის სიმეტრიის გავლენა ტენზორებით გამოსახულ ფიზიკურ თვისებაზე

ახლა უფრო დაწვრილებით გამოვარკვიოთ, როგორი იქნება კრისტალების სიმეტრიასთან დაკავშირებით სხვადასხვა რანგის ტენზორებისათვის დამოუკიდებელი კომპონენტების რიცხვი. ამისათვის საჭიროა დადგინდეს ყველა შესაძლებელი სიმეტრიული გარდაქმნების მოქმედება ფიზიკური თვისებების გამომსახველ ტენზორებზე. ნებისმიერი სიმეტრიული გარდაქმნა, ამავე დროს, შეიძლება წარმოვიდგინოთ, როგორც კოორდინატთა ღერძების გარდაქმნა, რომელიც გარკვეული გარდაქმნის მატრიცის საშუალებით ხორციელდება. წერტილოვან ჯგუფში შემავალი თითოეული ელემენტი დაკავშირებულია გარდაქმნის მატრიცასთან, რომელიც მის მატრიცულ წარმოდგენას ქმნის, მაგრამ ვინაიდან წერტილოვანი ჯგუფის ყველა ელემენტი მიიღება რამდენიმე ძირითადი ელემენტისაგან, რომლებსაც ჯგუფის გენერატორები ეწოდება, ამიტომ ტენზორზე წერტილოვანი ჯგუფის გავლენის განსაზღვრისათვის საკმარისია შევისწავლოთ მხოლოდ ჯგუფის შემქმნელი ელემენტების ანუ გენერატორების მოქმედება. წერტილოვანი ჯგუფების განხილვის დროს ნაჩვენები იყო, რომ სხვადასხვა წერტილოვან ჯგუფებში გენერატორების როლს ასრულებენ: 1, 2, 3, 4, $\bar{4}$, $\bar{2} = m$, $\bar{1} = c$, სიმეტრიის ელემენტები, რომელთა შესაბამისი მატრიცები მოყვანილია 4.3 ცხრილში. მეთოდის ძირითადი შინაარსი მდგომარ-

როგორც იმაში, რომ წერტილოვან ჯგუფში შემავალი ყველა სიმეტრიული გარდაქმნა (გენერატორები) თანამიმდევრობით გამოიყენება ფიზიკური თვისებების გამომხატველი ტენზორის მიმართ იმის გათვალისწინებით, რომ კოორდინატთა სისტემის სიმეტრიული გარდაქმნის შედეგად ფიზიკურ სიდიდეებს შორის არსებული თანაფარდობები (განტოლებები) დარჩებიან უცვლელნი. ეს მეთოდი მოითხოვს საკმაოდ ხანგრძლივ ალგებრულ გამოთვლებს; ამიტომ შემდეგში შემუშავდა ე. წ. პირდაპირი შემოწმების მეთოდი, რომელიც ეყრდნობა იმ ფაქტს, რომ კოორდინატთა ლერძების გარდაქმნის დროს სხვადასხვა რანგის ტენზორების კომპონენტები გადაიქმნებიან კოორდინატების შესაბამისი ნამრავლის ანალოგიურად (იხ. ცხრილი 1.3): მაგალითად, ვექტორის (პირველი რანგის ტენზორის) კომპონენტები გარდაიქმნებიან როგორც წერტილის კოორდინატები:

$$p_i' = a_{ij} p_j; \quad x_i' = a_{ij} x_j. \quad (5.4)$$

მეორე რანგის ტენზორებისათვის:

$$p_{ij} = a_{ik} a_{jm} p_{km}; \quad x_i' x_j' = a_{ik} a_{jm} x_k x_m. \quad (5.5)$$

მესამე რანგის ტენზორებისათვის:

$$p_{ijk} = a_{ie} a_{jm} a_{kn} p_{emn}; \\ x_i' x_j' x_k' = a_{ie} a_{jm} a_{kn} x_e x_m x_n \quad (5.6)$$

და ა. შ.

განვიხილოთ სიმეტრიული გარდაქმნების მოქმედება იმ ფიზიკურ თვისებებზე, რომლებიც პირველი რანგის ტენზორით არიან წარმოდგენილნი. ადვილი დასადგენია, რომ თუ კრისტალს გააჩნია ვექტორული თვისებები, მას არ შეიძლება ქონდეს სიმეტრიის ცენტრი. მართლაც, სიმეტრიის ცენტრის მოქმედებით წერტილის კოორდინატები ასე გარდაიქმნებიან

$$x_1 \rightarrow -x_1 \quad | \quad x_2 \rightarrow -x_2 \quad | \quad x_3 \rightarrow -x_3 \quad (5.7)$$

და წერტილი (x_1, x_2, x_3) გადადის $(-x_1, -x_2, -x_3)$ წერტილში. ვექტორის კომპონენტები გარდაიქმნებიან, როგორც წერტილის კოორდინატები და ამიტომ გვექნება ტოლობები:

$$p_1 = -p_1, \quad p_2 = -p_2, \quad p_3 = -p_3. \quad (5.8)$$

რადგანაც კრისტალს სიმეტრიის ცენტრი გააჩნია, სიმეტრიულმა გარდაქმნამ არ უნდა შეცვალოს ვექტორის კომპონენტები და (5.8) ტოლობები შესრულდება მხოლოდ იმ შემთხვევაში, როდესაც $p_1 = p_2 = p_3 = 0$. იგივე შედეგი მიიღება უშუალოდ ნეიმანის პრინციპის გამოყენებით. ამ პრინციპის თანახმად, ფიზიკური თვისება აუცილებლად უნდა შეიცავდეს წერტილოვანი ჯგუფის სიმეტრიის ელემენტებს, მაგრამ ვექტორულ თვისე-

ბას არ შეიძლება ქონდეს სიმეტრიის ცენტრი და, მაშასადამე, ასეთი ელემენტი არ ექნება თვით კრისტალსაც.

განვიხილოთ ახლა ფიზიკური თვისებები, რომლებიც გამოიხატებიან მეორე რანგის სიმეტრიული ტენზორით. ასეთი სახის ტენზორი ნებისმიერ კოორდინატთა სისტემაში ხასიათდება 6 დამოუკიდებელი კომპონენტით. ამ კომპონენტების გარდაქმნის ფორმულები (5.5) მსგავსია ორი კოორდინატის ნამრავლის გარდაქმნის ფორმულსა; ამიტომ უშუალოდ შეიძლება ითქვას, რომ შესაბამისი ფიზიკური თვისებები არ არიან მგრძობიარე სიმეტრიის ცენტრის არსებობის მიმართ. დანარჩენ შემთხვევებში, გარკვეული სიმეტრიის შესაბამისად, დამოუკიდებელი კომპონენტების რიცხვი მცირდება.

ავიღოთ მაგალითისათვის ელექტრული პოლარიზაციის მოვლენა. ფიზიკური თვისება, რომელიც განისაზღვრება ელექტრული მომენტის (პოლარიზაციის ვექტორის) $\vec{P}(p_1, p_2, p_3)$ კომპონენტებსა და გარეშე ველის დაძაბულობის $\vec{E}(E_1, E_2, E_3)$ ვექტორის კომპონენტების თანაფარდობით, წარმოადგენს დიელექტრიკულ პოლარიზებადობას (χ), ხოლო მათ დამაკავშირებელ განტოლებებს აქვთ შემდეგი სახე:

$$\begin{aligned} p_1 &= \chi_{11}E_1 + \chi_{12}E_2 + \chi_{13}E_3; \\ p_2 &= \chi_{21}E_1 + \chi_{22}E_2 + \chi_{23}E_3; \\ p_3 &= \chi_{31}E_1 + \chi_{32}E_2 + \chi_{33}E_3; \end{aligned} \quad (5.9)$$

აქ $[\chi_{ij}]$ მეორე რანგის სიმეტრიული ტენზორია ($\chi_{ij} = \chi_{ji}$); ამიტომ კომპონენტების რიცხვი მცირდება ექვსამდე. განვსაზღვროთ ამ ტენზორის დამოუკიდებელი კომპონენტების რიცხვი მონოკლინური სიმეტრიის კრისტალებისათვის.

მონოკლინური სისტემის უმაღლესი სიმეტრიის კლასი შეიცავს ელემენტებს $\{E, 2, \bar{1} = c_i, \bar{2} = m\}$; აქედან, გენერატორებს წარმოადგენენ ელემენტები. $\{2, \bar{1}\}$. როგორც აღვნიშნეთ, ინვერსია არ მოქმედებს მეორე რანგის სიმეტრიულ ტენზორებზე, ამიტომ საკმარისია განვიხილოთ მეორე რიგის სიმეტრიის ღერძის მოქმედება. დავუშვათ, რომ 2 ღერძი აღებულია x_3 კოორდინატთა ღერძის პარალელურად, მაშინ შესაბამის გარდაქმნას ექნება სახე

$$\begin{pmatrix} x_1' \\ x_2' \\ x_3' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \quad (5.10)$$

კოორდინატთა ღერძების ასეთი გარდაქმნის შედეგად ტენზორის კომპონენტებიც გარდაიქმნებიან და მათი ახალი მნიშვნელობის დადგენა შესაძლებელია (5.5) ფორმულების საშუალებით. გამოვიანგარიშოთ, მაგალითად, კომპონენტი χ'_{31} .

$$\chi_{31}' = a_{31}a_{11}\chi_{11} + a_{31}a_{12}\chi_{12} + a_{31}a_{13}\chi_{13} + a_{32}a_{11}\chi_{21} + \dots + \\ + a_{33}a_{11}\chi_{31} + \dots + a_{33}a_{13}\chi_{33}.$$

ვინაიდან

$$a_{11} = -1, \quad a_{22} = -1 \quad \text{და} \quad a_{33} = 1, \quad \text{ამიტომ}$$

$$\chi'_{31} = a_{33}a_{11}\chi_{31} = -\chi_{31}; \quad (5.11)$$

მაგრამ 2 ღერძის მიერ კოორდინატების გარდაქმნა სიმეტრიული გარდაქმნაა და ტენზორის კომპონენტი უნდა დარჩეს უცვლელი. ამიტომ $\chi'_{31} = -\chi_{31} = 0$. ასევე შეიძლება დამტკიცდეს, რომ $\chi_{32} = \chi_{23} = \chi_{13} = \chi_{31} = 0$. ნულის ტოლია ის კომპონენტები, რომელთა ინდექსებში ერთი ნიშანი იმ ღერძის ნომერია, რომლის პარალელური არის 2 ღერძი...

საბოლოოდ ვიღებთ, რომ 2 წერტილოვანი ჯგუფის მოქმედების შედეგად მეორე რანგის სიმეტრიულ ტენზორს, იმისდა მიუხედავად, თუ რომელ ფიზიკურ თვისებას აღწერს იგი, ექნება ოთხი დამოუკიდებელი კომპონენტი:

$$\begin{array}{ccc} p_{11} & p_{12} & 0 \\ p_{21} & p_{22} & 0 \\ | 0 & 0 & p_{33} \end{array} \quad (5.12)$$

იგივე შედეგი შეიძლება უფრო მოკლედ მივიღოთ კოორდინატების ნამრავლის გარდაქმნის ფორმულის გამოყენებით ($x_i'x_j' = a_{ik}a_{jm}x_kx_m$), რომელიც ტენზორის კომპონენტების გარდაქმნის ანალოგიურია. (5.10) თანახმად, $x_1 \rightarrow -x_1'$; $x_2 \rightarrow -x_2'$; $x_3 \rightarrow x_3'$ კოორდინატების ყველა შესაძლებელი ნამრავლის გარდაქმნისათვის მივიღებთ:

$$\begin{array}{l} x_1x_1 \rightarrow x_1'x_1'; \\ x_1x_2 \rightarrow x_1'x_2'; \\ x_1x_3 \rightarrow -x_1'x_3'; \\ x_2x_2 \rightarrow x_2'x_2'; \\ x_2x_3 \rightarrow -x_2'x_3'; \\ x_3x_3 \rightarrow x_3'x_3'. \end{array} \quad (5.13)$$

აქედან ჩანს, რომ კომპონენტები $p_{13} = -p'_{13} = 0$ და $p_{23} = -p'_{23} = 0$. კრისტალის წერტილოვანი სიმეტრიისა და ტენზორის მიერ წარმოდგენილ ფიზიკურ სიდიდეებს შორის კავშირი შეიძლება, აგრეთვე, დავახასიათოთ ტენზორული ზედაპირის საშუალებით, რომელიც, ნეიმანის პრინციპის თანახმად, უნდა შეიცავდეს კრისტალის წერტილოვანი ჯგუფის სიმეტრიის ყველა ელემენტს. მეორე რანგის სიმეტრიული ტენზორის ძახასიათებელი ზედაპირი ზოგად შემთხვევაში წარმოადგენს სამღერძა ელიფ-

სოილს, რომლის განტოლება განსაზღვრულია (1.46) ფორმულით: თუ ელიფსოიდის ერთ-ერთი ღერძი მიმართულია x_3 კოორდინატის გასწვრივ, რომელიც ამავე ღრის 2 ღერძს წარმოადგენს, განტოლება მიიღებს შემდეგ სახეს

$$p_{11}x_1^2 + p_{22}x_2^2 + p_{33}x_3^2 + 2p_{12}x_1x_2 = 1. \quad (5.14)$$

ასეთი ელიფსოიდი შეიცავს მონოკლინური სისტემისათვის დამახასიათებელი სიმეტრიის ყველა ელემენტს. მისი მდებარეობა კრისტალში ფიქსირებულია მხოლოდ ერთი ღერძით, რომელიც მეორე რიგის სიმეტრიის ღერძის პარალელურად არის მიმართული. დანარჩენი ორი ღერძის მდებარეობა ნებისმიერია. ამიტომ მონოკლინურ კრისტალში ტენზორული ელიფსოიდის ფორმისა და მდებარეობის დასადგენად საჭიროა ოთხი პარამეტრი — სამი ელიფსოიდის ღერძების განსაზღვრისათვის, ხოლო მეოთხე — ელიფსოიდის ორიენტაციის ფიქსირებისათვის (მაგ., ღერძის ირგვლივ შემობრუნების კუთხე).

ტრიკლინური სისტემის უმაღლესი სიმეტრია შეიცავს მხოლოდ ინვერსიის ცენტრს $\bar{1}$, რომელიც, როგორც დავინახეთ, არ ახდენს გავლენას მეორე რანგის სიმეტრიულ ტენზორებზე. ტენზორული ზედაპირი ამ შემთხვევაშიც სამღერძა ელიფსოიდს წარმოადგენს, რომლის ფორმა და მდებარეობა არ არის შეზღუდული სიმეტრიით და ამიტომ თავისი განსაზღვრისათვის მოითხოვს სიმეტრიული ტენზორის ყველა 6 კომპონენტს:

$$\begin{array}{ccc} p_{11} & p_{12} & p_{13} \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} \\ p_{31} & p_{32} & p_{33} \end{array} \quad (5.15)$$

განვიხილოთ რომელ სისტემაში შემავალი სიმეტრიული გარდაქმნების გავლენა ტენზორის კომპონენტებზე. რომელი სისტემის უმაღლესი სიმეტრიის წერტილოვანი ჯგუფის ელემენტებია $\{E, 2, 2', 2'', \bar{1}, m_v, m_h, m_h\}$; სიმეტრიის ღერძები 2, 2', 2'' არჩეულია შესაბამისად, x_1, x_2 და x_3 კოორდინატთა ღერძების მიმართულებით. ჯგუფის გენერატორებს წარმოადგენენ ელემენტები $\{2, 2', \bar{1}\}$; აქედან საჭიროა განისაზღვროს მხოლოდ 2 და 2' გარდაქმნების მოქმედება ტენზორის კომპონენტებზე. ზემოთ ნაჩვენები იყო, რომ თუ 2 ღერძი მიმართულია x_1 კოორდინატთა ღერძის გასწვრივ და ხდება გარდაქმნა $x_1 \rightarrow -x_1; x_2 \rightarrow -x_2; x_3 \rightarrow -x_3$, მაშინ ნულს გაუტოლდება ტენზორის ის კომპონენტები, რომელთა ინდექსებში „ერთიანი“ შედის მხოლოდ ერთხელ, ე. ი.

$$p_{12} = p_{21} = p_{13} = p_{31} = 0.$$

ასევე, 2' გარდაქმნისათვის ($2' \parallel x_2$) $x_1 \rightarrow -x_1; x_2 \rightarrow x_2$ და $x_3 \rightarrow -x_3$ დამატებით ნულს გაუტოლდება $p_{23} = p_{32} = 0$ კომპონენტები. ამიტომ საბოლოოდ ნულისაგან განსხვავებული იქნება მხოლოდ სამი კომპონენტი $p_{11}, p_{22},$

p_{33} . შესაბამისად, მეორე რანგის ტენზორი და კერძოდ დიელექტრიკული პოლარიზებადობის ტენზორი (5.9) მიიღებს სახეს:

$$\begin{pmatrix} \chi_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \chi_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \chi_{33} \end{pmatrix} \quad (5.16)$$

ხოლო პოლარიზებადობის ელიფსოიდისათვის გვექნება

$$\chi_{11}x_1^2 + \chi_{22}x_2^2 + \chi_{33}x_3^2 = 1. \quad (5.17)$$

ეს ისეთი სამღერძა ელიფსოიდია, რომლის სამივე ღერძი ვიქსირებულა კრისტალში და მიმართულია მეორე რიგის სიმეტრიის ღერძების გასწვრივ. ასეთი ელიფსოიდის ზომების დასადგენად საკმარისია სამი ღერძის სიდიდის განსაზღვრა.

ტეტრაგონალური სისტემის ჰოლოედრული კლასის გენერატორებს 4, $\bar{1}$, $2'$ ელემენტები წარმოადგენენ. აქ 4 ღერძი მიმართულია x_3 კოორდინატა ღერძის გასწვრივ, ხოლო $2'$ შეიძლება მივმართოთ x_1 ღერძის პარალელურად. ასეთ შემთხვევაში გაქრება ტენზორის ის კომპონენტები, რომლებიც თავის ინდექსში შეიცავენ ერთ ერთიანს ($p_{12}=p_{21}=p_{13}=p_{31}=0$); ამავე დროს, x_3 კოორდინატა ღერძის პარალელურად იმოქმედებს მეორე რიგის ღერძი, რადგან $4^2=2$ და ამიტომ კიდევ დამატებით გაუტოლდება ნულს კომპონენტები, რომელთა ინდექსები ერთ სამიანს შეიცავენ ($p_{23}=p_{32}=0$). ახლა განვიხილოთ 4 ღერძის მოქმედება. ამ ღერძის მიერ კოორდინატა ღერძების გარდაქმნას, (4.25) თანახმად, ექნება შემდეგი სახე: $x_1 \rightarrow x_2$; $x_2 \rightarrow -x_1$; $x_3 \rightarrow x_3$. ორმაგი ნამრავლების განხილვა გვიჩვენებს, რომ $p_{11}=p_{22}$ და დარჩენილი სამი კომპონენტიდან დამოუკიდებელი რჩება მხოლოდ ორი $p_{11}=p_{22}$ და p_{33} . საბოლოოდ ტეტრაგონალური სიმეტრიის კრისტალებისათვის მეორე რანგის სიმეტრიული ტენზორი მიიღებს შემდეგ სახეს:

$$\begin{pmatrix} p_{11} & 0 & 0 \\ 0 & p_{11} & 0 \\ 0 & 0 & p_{33} \end{pmatrix} \quad (5.18)$$

ჰექსაგონალური და რომბოედრული სიმეტრიის კრისტალებში დამატებითი გენერატორებია 6 და 3 ღერძები, რომლებიც, ჩვეულებრივ, მიმართულნი არიან x_3 კოორდინატა ღერძის პარალელურად. ამიტომ სიმეტრიული გარდაქმნები, რომლებსაც ისინი აწარმოებენ, წარმოადგენენ ბრუნვას x_3 ღერძის ირგვლივ α კუთხით $\alpha \neq 90^\circ$). ზოგადად, გარდაქმნის მატრიცას აქვს შემდეგი სახე:

$$\begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

... თუ სიმარტივისათვის შემოვიღებთ აღნიშვნებს $\cos \alpha = c$ და $\sin \alpha = s$, მაშინ:

$$\begin{pmatrix} c & -s & 0 \\ s & c & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (5.19)$$

ამ მატრიცის შესაბამისად შესაძლებელია გამოვიანგარიშოთ ტენზორის ყველა p_{ij} კომპონენტი ისე, როგორც ეს იყო ზემოთ. ასეთი განხილვის შედეგად მტკიცდება, რომ ჰექსაგონალური და რომბოედრული სიმეტრიის შერევაში ტენზორის ისეთივე სახე აქვს, როგორც ტეტრაგონალური სისტემის კრისტალებში (5.18).

ტენზორული ზედაპირი აღნიშნული სისტემის კრისტალებისათვის უკვე არ შეიძლება იყოს სამღერძა ელიფსოიდი, რადგან, ნეიმანის პრინციპის თანახმად, ის უნდა შეიცავდეს წერტილოვანი ჯგუფის სიმეტრიას, ხოლო მეორე რიგის ზედაპირს შეიძლება ქონდეს 4, 6, 3 სიმეტრიის ღერძები მხოლოდ იმ შემთხვევაში, თუ ეს ღერძები მთავარი ღერძებია, რომელთა მიმართ იგი ბრუნავს. ბრუნვის ელიფსოიდი, რომლის ბრუნვის ღერძი 4, 6 ან 3 სიმეტრიის ღერძს წარმოადგენს, ავტომატურად შეიცავს აღნიშნული სისტემისათვის საჭირო სიმეტრიის ყველა ელემენტს: მეორე რიგის ღერძებს, სიმეტრიის სიბრტყეებს, რომლებიც მთავარი ღერძის პარალელური ან მართობული არიან. ბრუნვის ელიფსოიდის განსაზღვრისათვის საკმარისია ვიცოდეთ ორი სიდიდე — დიდი და მცირე ნახევარღერძების სიგრძეები.

კუბური სისტემის სხვადასხვა კლასის გენერატორებს 4, 3, $\bar{1}$, 2 სიმეტრიის ელემენტები წარმოადგენენ. ტეტრაგონალური სისტემისაგან განსხვავებით, სადაც 4, 2, $\bar{1}$ გენერატორები მოქმედებდნენ და ტენზორის კომპონენტებიდან ნულისაგან განსხვავებული იყო მხოლოდ ორი კომპონენტი $p_{11} = p_{22}$ და p_{33} , აქ მოქმედებს ოპერატორი 3, რომლის მატრიცა

$$A(3 \parallel x_3) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.20)$$

გვაძლევს კოორდინატების გარდაქმნის წესს: $x_1 \rightarrow x_2$; $x_2 \rightarrow x_3$; $x_3 \rightarrow x_1$. კოორდინატთა ღერძების ასეთი ციკლური გადანაცვლების შედეგად ტენზორის კომპონენტებისათვის ვიღებთ $p_{11} = p_{22} = p_{33} = p$ ან მატრიცის სახით:

$$\begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & p & 0 \\ 0 & 0 & p \end{pmatrix} \quad (5.21)$$

კუბური სისტემის კრისტალებისათვის დამახასიათებელია ოთხი 3 ღერძის არსებობა; მეორე რიგის ზედაპირს, რომელსაც შეიძლება გააჩნდეს

სიმეტრიის ელემენტების ასეთი კომპლექსი, მხოლოდ სფერო წარმოადგენს. შესაბამისი ფიზიკური თვისების განაწილება მთლიანად იქნება განსაზღვრული, თუ მოცემულია სფეროს რადიუსი.

ამგვარად, სხვადასხვა სიმეტრიის კრისტალებისათვის არსებობს მეორე რანგის ტენზორების მხოლოდ 5 სახე, რომელთა კომპონენტები განსაზღვრულია (12, 15, 16, 18, 21) ფორმულებით, ხოლო ფიზიკური თვისებების გეომეტრიული განაწილება თავის გამოსახულებას პოულობს 5 სხვადასხვა სახის ელიფსოიდში.

ახლა განვიხილოთ სიმეტრიის გავლენა მესამე რანგის ტენზორზე. მესამე რანგის ტენზორით გამოსახული ფიზიკური თვისებების მაგალითს წარმოადგენს პიეზოელექტრობა. ეს ფიზიკური თვისება აკავშირებს ორ ფიზიკურ სიდიდეს: ელექტრული პოლარიზაციის ვექტორს და მექანიკურ ძაბვებს (მეორე რანგის ტენზორი), რომელთა მოქმედებით ეს პოლარიზაცია წარმოიშობა

$$p_i = d_{ijk} \sigma_{jk} \quad (5.22)$$

d_{ijk} სიდიდეებს პიეზოელექტრული მოდულები ეწოდება და ისინი მესამე რანგის ტენზორს შეადგენენ. ასეთი ტენზორის კომპონენტების რიცხვი, ზოგად შემთხვევაში, უდრის $3^3 = 27$, მაგრამ ვინაიდან ძაბვების ტენზორი, როგორც შემდეგში დავინახავთ, წარმოადგენს სიმეტრიულ ტენზორს, ე. ი. $\sigma_{jk} = \sigma_{kj}$, ამიტომ პიეზოელექტრული მოდულების ტენზორის კომპონენტების რიცხვი მცირდება და არ აღემატება 18.

$$\begin{array}{ccccccc} d_{111} & d_{112} & d_{122} & d_{221} & d_{212} & d_{213} & d_{311} & d_{312} & d_{313} \\ d_{121} & d_{122} & d_{123} & d_{221} & d_{222} & d_{223} & d_{321} & d_{322} & d_{323} \\ d_{131} & d_{132} & d_{133} & d_{231} & d_{232} & d_{233} & d_{331} & d_{332} & d_{333} \end{array} \quad (5.23)$$

კოორდინატთა ღერძების გარდაქმნის დროს მესამე რანგის ტენზორის კომპონენტები გარდაიქმნებიან სამი კოორდინატის ნამრავლის ანალოგიურად (5.6)

$$d_{ijk} = a_{ic} a_{jm} a_{kn} d_{emni}; \quad x_i' x_j' x_k' = a_{ic} a_{jm} a_{kn} x_c x_m x_n \cdot$$

ასე მაგალითად, კომპონენტი d_{122} გარდაიქმნება $x_1 \cdot x_2^2$ ნამრავლის მსგავსად, მხოლოდ უნდა გვახსოვდეს, რომ კოორდინატების ინდექსებში უნდა იყოს დაცული იგივე თანამიმდევრობა, როგორც ტენზორის კომპონენტის ინდექსში. ამიტომ კომპონენტს d_{213} შეესაბამება ნამრავლი $x_2 x_1 x_3$ და ა. შ. აქედან, ცხადია, რომ იმ კრისტალებში, სადაც სიმეტრიის ცენტრი არსებობს და, მაშასადამე, ადგილი აქვს გარდაქმნებს: $x_1 \rightarrow -x_1$; $x_2 \rightarrow -x_2$; $x_3 \rightarrow -x_3$, ყველა პიეზოელექტრული მოდული ნულის ტოლია. მაგალითად, d_{213} კომპონენტი გარდაიქმნება როგორც ნამრავლი $x_2 x_1 x_3 \rightarrow$

$\rightarrow x_2 x_1 x_3$, ამიტომ $d_{213} \rightarrow -d_{213}'$, მაგრამ ვინაიდან კრისტალს სიმეტრიის ცენტრი აქვს, ეს გარდაქმნები არ უნდა ცვლიდეს ტენზორის კომპონენტებს და $d_{213} = -d_{213}$; ამიტომ $d_{213} = 0$. იგივე შედეგი მიიღება ნებისმიერი სხვა კომპონენტისათვის. საზოგადოდ კი, ნეიმანის პრინციპას თანახმად; სიმეტრიის ცენტრის მქონე კრისტალებს არ შეიძლება ჰქონდეს ფიზიკური თვისება, რომლის აღწერა ხდება მე-3 რანგის ტენზორით.

ზოგიერთ შემთხვევაში გამარტივების მიზნით სამი ინდექსის მაგივრად გადადიან ორინდექსიან აღნიშვნაზე. პირველი ინდექსი ორივე შემთხვევაში უცვლელია, ხოლო ტენზორის კომპონენტის მეორე და მესამე ინდექსები იცვლებიან შემდეგი წესით:

$$\begin{array}{cccccc} 11 & 22 & 33 & 23,32 & 31,13 & 12,21 \\ \downarrow & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \end{array} \quad (5.24)$$

შემოკლებულ აღნიშვნებში ტენზორის კომპონენტები შეიძლება წარმოვიდგინოთ შემდეგი ცხრილის სახით

$$\begin{array}{cccccc} d_{11} & d_{12} & d_{13} & d_{14} & d_{15} & d_{16} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} & d_{24} & d_{25} & d_{26} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} & d_{34} & d_{35} & d_{36} \end{array} \quad (5.25)$$

(5.25) წარმოადგენს მატრიცას, ამიტომ ასეთ აღნიშვნებს უწოდებენ მატრიცულს.

სიმეტრიის ელემენტების არსებობა კრისტალში იწვევს მე-3 რანგის ტენზორის კომპონენტების რიცხვის შემდგომ შემცირებას. თუ, მაგალითად, 2 ღერძი მიმართულია x_3 კოორდინატთა ღერძის პარალელურად და ადგილი აქვს გარდაქმნას $x_1 \rightarrow -x_1$; $x_2 \rightarrow -x_2$ და $x_3 \rightarrow x_3$, ნულისაგან განსხვავებული იქნება მხოლოდ მოდულები, რომელთა ნიშანი ასეთი გარდაქმნის შედეგად არ იცვლება. ასეთები იქნებიან:

$$d_{113}, d_{123}, d_{213}, d_{223}, d_{311}, d_{312}, d_{322}, d_{333},$$

ე. ი. მოდულები, რომელთა ინდექსი შეიცავს ერთ ან სამ სამიანს, ხოლო (5.25) მატრიცა მიიღებს სახეს:

$$\begin{array}{cccccc} 0 & 0 & 0 & d_{14} & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{24} & d_{25} & 0 \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} & 0 & 0 & d_{36} \end{array} \quad (5.26)$$

პირიქით, თუ x_3 ღერძის მართობად მოთავსებულია სიმეტრიის m სიბრტყე, გარდაქმნას ექნება შემდეგი სახე: $x_1 \rightarrow x_1$; $x_2 \rightarrow x_2$; $x_3 \rightarrow -x_3$ და ნულს გაუტოლდებიან ტენზორის ის კომპონენტები, რომლებიც ინდექსში ერთ ან სამ სამიანს შეიცავენ. თუ სიმეტრიის 2 ღერძი მიმართულია x_1 კოორდინატთა ღერძის პარალელურად, შესაბამისად ნულს გაუტოლდებიან ის მოდულები, რომლებიც თავის ინდექსებში შეიცავენ ორ ერთიანს ან საერთოდ არ შეიცავენ ერთიანებს.

როდესაც კრისტალს გააჩნია 4 ლერძი, ამ ლერძს ავტომატურად ემთხვევა 2 ლერძიც და ამიტომ ჯერ უნდა გამოირიცხოს ყველა ის მოდული, რომელთა გაქრობა ნაკარნახევია 2 ლერძის არსებობით. დანარჩენი მოდულების მიმართ საჭიროა განვიხილოთ მათზე $\sqrt{4}$ ლერძის მიერ კოორდინატთა ლერძების გარდაქმნის გავლენა. მაგალითად, $\sqrt{4}$ ლერძის მიერ კოორდინატთა ლერძების გარდაქმნა, როდესაც ის x_3 ლერძის პარალელურია, ხდება (4.31) თანახმად: $x_1 \rightarrow x_2$; $x_2 \rightarrow -x_1$; $x_3 \rightarrow -x_3$ ან $1 \rightarrow 2$, $2 \rightarrow -1$, $3 \rightarrow -3$ და მოდულები; $d_{223} \rightarrow -d_{113}$; $d_{312} \rightarrow d_{321}$ და ა. შ. ვინაიდან 4 სიმეტრიის ელემენტია, აქ შეიძლება დაისვას ტოლობის ნიშანი, ე. ი. $d_{223} = -d_{113}$...

შედარებით რთულია 6 და 3 ლერძების მოქმედების განსაზღვრა მესამე რანგის ტენზორის კომპონენტებზე. ზოგად შემთხვევაში, როდესაც ეს ლერძები x_3 კოორდინატთა ლერძის პარალელურებია, გარდაქმნის მატრიცა ასე იწერება:

$$\begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

6 ლერძისათვის ეს მატრიცა მიიღებს შემდეგ სახეს (იხ. ცხრილი 4.3):

$$\begin{vmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \quad (5.27)$$

შედარებით ამარტივებს გამოთვლებს ამ მატრიცის დაყვანა დიაგონალურ სახეზე, მაგრამ შეიძლება უშუალოდ (5.27) მატრიცის საშუალებით დადგინდეს ის შეზღუდვა, რომელსაც 6 ლერძი უქმნის ტენზორის კომპონენტებს. როგორც ვიცით, მესამე რანგის ტენზორის კომპონენტების გარდაქმნა ხდება (5.6) ფორმულით, ხოლო კოეფიციენტები (5.27) მატრიცის მიხედვით იღებენ მნიშვნელობებს:

$$a_{11} = \frac{1}{2}; \quad a_{12} = -\frac{\sqrt{3}}{2}; \quad a_{13} = 0.$$

$$a_{21} = \frac{\sqrt{3}}{2}; \quad a_{22} = \frac{1}{2}; \quad a_{23} = 0; \quad a_{31} = 0; \quad a_{32} = 0; \quad a_{33} = 1.$$

კოეფიციენტების ამ მნიშვნელობების გათვალისწინებით შეიძლება განისაზღვროს ტენზორის კომპონენტები. მაგალითად, განსაზღვროთ კომპონენტი d'_{233} .

აქ ყველა წვერი უტოლდება ნულს, გარდა ორისა:

$$d'_{233} = a_{21}a_{33}a_{33}d_{133} + a_{22}a_{33}a_{33}d_{233}, \quad (5.28)$$

ან, თუ გავითვალისწინებთ, რომ სიმეტრიული გარდაქმნის შედეგად $d'_{233} = d_{233}$, მივიღებთ:

$$d_{233} - \sqrt{3} d_{133} = 0. \quad (5.29)$$

ახლა შეიძლება გამოვთვალოთ d'_{133} და მივიღოთ განტოლება

$$\sqrt{3} d_{233} - d_{133} = 0. \quad (5.29)'$$

(29) და (29)' განტოლებებიდან ვღებულობთ

$$d_{133} = d_{233}.$$

ასეთი გამოთვლების შედეგად 6 ლერძისათვის მტკიცდება

$$d_{133} = d_{233} = d_{312} = d_{313} = d_{323} = 0.$$

ასევე შეიძლება გამოირკვეს ყველა დანარჩენი კომპონენტის მნიშვნელობები როგორც 6, ისე 3 ლერძების მოქმედებისათვის.

მეოთხე რანგის ტენზორი განხილული იქნება მხოლოდ კრისტალების დრეკად თვისებებთან დაკავშირებით. ორ ფიზიკურ სიდიდეს, რომელთა თანაფარდობით გამოისახება დრეკადობის ფიზიკური თვისება, წარმოადგენენ ძაბვები σ_{ij} (მეორე რანგის ტენზორი) და მათი მოქმედებით გამოწვეული დრეკადი დეფორმაციები ϵ_{ij} (მეორე რანგის ტენზორი). დამაკავშირებელ განტოლებას აქვს შემდეგი სახე

$$\sigma_{ij} = c_{ijk\epsilon} \epsilon_{k\epsilon}. \quad (5.30)$$

აქ $c_{ijk\epsilon}$ დრეკადი მოდულებია. ისინი მეოთხე რანგის ტენზორს ქმნიან. ზოგად შემთხვევაში მეოთხე რანგის ტენზორს აქვს $3^4 = 81$ კომპონენტი. მაგრამ, ვინაიდან ძაბვების $\{\sigma_{ij}\}$ და დეფორმაციების $\{\epsilon_{k\epsilon}\}$ ტენზორები მეორე რანგის სიმეტრიულ ტენზორებს წარმოადგენენ და, მაშასადამე, ადგილი აქვს ტოლობებს:

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji}; \quad \epsilon_{k\epsilon} = \epsilon_{\epsilon k}$$

დრეკადი მოდულების $[c_{ijk\epsilon}]$ ტენზორი სიმეტრიულია პირველ და მეორე წყვილ ინდექსებში გადანაცვლების მიმართ, ე. ი.

$$ijek = jike = ijek = jiek. \quad (5.31)$$

ამიტომ კომპონენტების რიცხვი მცირდება და ხდება $6^2 = 36$ (მეორე რანგის სიმეტრიულ ტენზორს აქვს 6 მდგენელი). ამავე მიზეზით შესაძლებელი ხდება მატრიცული აღნიშვნების შემოღება (5.24) წესით. ასეთ შემთხვევაში (5.30) განტოლება იღებს შემდეგ სახეს

$$\sigma_i = c_{ij\epsilon_j} \quad (i, j = 1, 2, \dots, 6) \quad (5.32)$$

და $[c_{ij}]$ ტენზორისათვის მივიღებთ:

$$[c_{ij}] = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{16} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} & c_{26} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_{36} \\ c_{41} & c_{42} & c_{43} & c_{41} & c_{45} & c_{46} \\ c_{51} & c_{52} & b_{53} & c_{54} & c_{55} & c_{56} \\ c_{61} & c_{62} & c_{63} & c_{64} & c_{65} & c_{66} \end{pmatrix} \quad (5.33)$$

ჩვენ შემდეგში დავინახავთ, რომ c_{ij} კომპონენტებს შორის არსებობს დამოკიდებულება:

$$c_{ij} = c_{ji}, \quad (5.34)$$

რის შედეგად დრეკადი მოდულების ტენზორის კომპონენტების რიცხვი 36-დან მცირდება 21-მდე, ხოლო (5.31) ტოლობა შეიცვლება შემდეგნაირად

$$ijke = jike = jiek = keij = eki_j = keji = ekji = ijek. \quad (5.35)$$

ახლა განვიხილოთ სიმეტრიის გავლენა $[c_{ijkl}]$ ტენზორის კომპონენტებზე. მეოთხე რანგის ტენზორის კომპონენტების გარდაქმნას კოორდინატთა ღერძების გარდაქმნის დროს, (I, 1) ცხრილის მიხედვით, აქვს შემდეგი სახე

$$c'_{ijkl} = a_{im} a_{jn} a_{kp} a_{eq} c_{mnpq} \quad (5.36)$$

და ხდება ოთხი კოორდინატის ნამრავლის გარდაქმნის ანალოგიურად

$$x'_i x'_j x'_k x'_e = a_{im} a_{jn} a_{kp} a_{eq} x_m x_n x_p x_q. \quad (5.37)$$

კოორდინატების ყველა შესაძლებელი ნამრავლი, რომელიც $[c_{ijkl}]$ ტენზორის კომპონენტებს შეესაბამება, (5.33) ცხრილის მიხედვით შეიძლება დაიწეროს:

$$\begin{aligned} & x_1 x_1 x_1 x_1, x_1 x_1 x_2 x_2, x_1 x_1 x_3 x_3, x_1 x_1 x_2 x_3, x_1 x_1 x_1 x_3, x_1 x_1 x_1 x_2 \\ & x_2 x_2 x_2 x_2, x_2 x_2 x_3 x_3, x_2 x_2 x_2 x_3, x_2 x_2 x_1 x_3, x_2 x_2 x_1 x_2 \\ & x_3 x_3 x_3 x_3, x_3 x_3 x_2 x_3, x_3 x_3 x_1 x_3, x_3 x_3 x_1 x_2 \\ & x_2 x_3 x_2 x_3, x_2 x_3 x_1 x_3, x_2 x_3 x_1 x_2 \\ & x_1 x_3 x_1 x_3, x_1 x_3 x_1 x_2 \\ & x_1 x_2 x_1 x_2 \end{aligned} \quad (5.38)$$

ვინაიდან ამ შემთხვევაში გარდაქმნის (5.36) ფორმულაში შედის ოთხი კოსინუსის ნამრავლი, ამიტომ გარდაქმნა, დაკავშირებული ინვერსიის ცენტრთან, ისევე როგორც მეორე რანგის ტენზორის შემთხვევაში, არ იმოქმედებს ტენზორის კომპონენტებზე და მათი რიცხვი ტრიკლინური სისტემის კრისტალებისათვის იქნება 21.

მონოკლინურ სისტემაში ძირითად როლს ასრულებს 2 ლერძი, რომელიც, თუ x_3 კოორდინატთა ლერძის პარალელურია, ახდენს გარდაქმნას: $x_1 \rightarrow -x_1$, $x_2 \rightarrow -x_2$, $x_3 \rightarrow x_3$ და $a_{11} = -1$, $a_{22} = -1$, $a_{33} = +1$, ხოლო დანარჩენი $a_{ij} = 0$. ამიტომ, მაგალითად, ნამრავლები $x_1 x_1 x_1 x_3$ ან $x_2 x_2 x_2 x_3$ გადადიან $-x_1 x_1 x_1 x_3$ ან $-x_2 x_2 x_2 x_3$ და ა. შ., ხოლო სათანადო დრეკადი მოდულები c_{1113} , $c_{2223} = 0$.

ამგვარად, ნულს გაუტოლდება ყველა ის კომპონენტი, რომლებიც თავის ინდექსში შეიცავენ ერთ ან სამ 3. მათი რიცხვია 8, და, მაშასადამე, ნულისაგან განსხვავებული დარჩება 13 კომპონენტი.

თუ 2 ლერძი მიმართული იქნება x_1 ან x_2 კოორდინატთა ლერძების გასწვრივ, ნულს გაუტოლდება ყველა ის კომპონენტი, რომლებიც თავის ინდექსში შეიცავენ შესაბამისად ერთ ან სამ 1 ან 2. საბოლოოდ რომბული სისტემის კრისტალში, სადაც სამი ურთიერთმართობი 2 ლერძია, ნულის ტოლი გახდება ის კომპონენტები, რომელთა ინდექსი შეიცავს ერთ ან სამ ერთნაირ ციფრს. ამიტომ ნულისაგან განსხვავებული დარჩება შემდეგი 9 კომპონენტი:

$$\begin{aligned} & c_{1111} \ c_{1122} \ c_{1133} \\ & c_{2222} \ c_{2233} \ c_{3333} \\ & c_{2323} \ c_{1313} \ c_{1212} \end{aligned} \quad (5.39)$$

ტეტრაგონალური სისტემის ძირითადი ლერძია 4 ლერძი, მიმართული x_3 კოორდინატის პარალელურად. გარდაქმნას აქვს შემდეგი სახე: $x_1 \rightarrow x_2$; $x_2 \rightarrow -x_1$; $x_3 \rightarrow x_3$. ვინაიდან 4 ლერძთან ერთად ყოველთვის არის 2 ლერძი ძალაშია ყოველივე ის, რაც ნათქვამი იყო 2|| x_3 შემთხვევისათვის. დარჩენილი 13 კომპონენტიდან 4 ლერძის მოქმედებით კიდევ ოთხი ნამრავლი $x_1 x_1 x_1 x_2$, $x_2 x_2 x_1 x_2$, $x_3 x_3 x_1 x_2$ და $x_2 x_3 x_1 x_3$ უტოლდება ნულს. დარჩენილ 9 კომპონენტს შორის არსებობს გარკვეული ტოლობები იმის გამო, რომ 4 ლერძის მოქმედებით $x_1 \rightarrow x_2$, ხოლო $x_2 \rightarrow -x_1$; ამიტომ:

$$x_1 x_1 x_1 x_1 = x_2 x_2 x_2 x_2; \quad x_2 x_3 x_2 x_3 = x_1 x_3 x_1 x_3; \quad x_1 x_1 x_3 x_3 = x_2 x_2 x_3 x_3 \quad (5.40)$$

და რჩება $[c_{ijkl}]$ ტენზორის 6 დამოუკიდებელი შემდგენი. ახლა (5.33) მიიღებს შემდეგ სახეს:

$$|c_{ijkl}| = \begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66} \end{vmatrix} \quad (5.41)$$

შეიძლება ვაჩვენოთ, რომ კუბური სისტემის კრისტალებისათვის ნულისაგან განსხვავებული რჩება მხოლოდ სამი კომპონენტი c_{11} , c_{12} და

с.14. რაც შეეხება ტრიგონალური და ჰექსაგონალური სიმეტრიის კრისტალებს, პირდაპირი შემოწმების მეთოდის გამოყენება, ამ შემთხვევაში, შეუძლებელია. აქ საჭიროა მივმართოთ ალგებრული გამოთვლების ანალიტიკურ მეთოდს, ისე როგორც ეს ნაჩვენებია იყო პიეზოელექტრული მოდულების მიმართ. გამოთვლები გვიჩვენებენ, რომ რომბოედრულ სისტემაში 3 და 3 კლასებისათვის არსებობს 7, ხოლო 32, $3m$ და $3m$ კლასებისათვის — 6 დამოუკიდებელი დრეკადი მოდული. ჰექსაგონალური სისტემისათვის მათი რიცხვი აღწევს 5.

ყველა შემთხვევაში ტენზორის დამოუკიდებელი კომპონენტების რიცხვის დადგენა შესაძლებელია შედარებით მარტივად, ჯგუფთა თეორიის საფუძველზე დაუყვანადი წარმოდგენების გამოყენებით.

ლიტერატურა

1. Шубников А. В., Флинт Е. Е., Бокний Г. Б. Основы кристаллографии. Изд.-во АН СССР, 1940.
2. Най Дж. Физические свойства кристаллов. Изд.-во «Мир», 1967.
3. Bhagavantam S. Cristal Symmetry and physical Properties. Academic press 1966.
4. Васильев Д. М. Физическая кристаллография. Изд.-во «Металлургия», 1972.
5. Копчик В. А. Шубниковские группы. Изд.-во МГУ, 1966.

ბმის ძალები კრისტალურ მესერში და კრისტალების სტრუქტურა

ზემოთ განხილული კრისტალური მესრის სიმეტრიას საფუძვლად უდევს წარმოდგენა იდეალური მესრის შესახებ, ე. ი. მესრის, რომლის კვანძები მკაცრი გეომეტრიული სიზუსტით არიან განლაგებულნი სივრცეში. ასეთი მესრისაგან მათემატიკური გზით გამოიყვანება სიმეტრიის ყველა შესაძლებელი კრისტალური კლასი და სივრცობრივი ჯგუფი. აღსანიშნავია, რომ დღემდე ბუნებაში არ არის აღმოჩენილი არც ერთი კრისტალი, რომელიც თავისი სიმეტრიით არ შეიძლება მიეკუთვნოს წინასწარ თეორიულად გამოყვანილ რომელიმე წერტილოვან კლასს ან სივრცობრივ ჯგუფს.

მიუხედავად ამისა, არსებობს მნიშვნელოვანი განსხვავება რეალურ და იდეალურ კრისტალებს შორის. რეალური კრისტალის მესერი სრულყოფილი არ არის და მის წყობას ახასიათებს სხვადასხვა სახის გადახრები იდეალური მესრის წყობისაგან. ამ გადახრებს კრისტალური მესრის დეფექტები ეწოდება.

ცნობილია მესრის დეფექტების მრავალი სახე. რეალურ კრისტალში ყველა ატომი თუ იონი განიცდის სითბურ რხევას თავისი წონასწორობის მდგომარეობის მახლობლობაში. ეს რხევები კრისტალებისათვის სითბური მოძრაობის ფორმას წარმოადგენენ და არღვევენ იდეალური მესრისათვის დამახასიათებელი განლაგების სიზუსტეს. გარდა სითბური მოძრაობისა, რეალურ მესერს შეიძლება გააჩნდეს ფიზიკური დეფექტების მთელი რიგი; მაგალითად, მესრის რომელიმე კვანძი შესაძლებელია აღმოჩნდეს შეზღუდვად ან შეცვლებული მინარევი ნივთიერების ატომით. ასეთ შემთხვევაში კრისტალი არ შეიძლება ჩათვალოს ქიმიურად აბსოლუტურად წმინდად. საერთოდ; მოთხოვნები კრისტალის სიწმინდის მიმართ საგრძნობლად იცვლება. თუ რამდენიმე ხნის წინათ 1% მინარევიანი ატომების მქონე კრისტალი ითვლებოდა წმინდად, თანამედროვე ნახევარგამტარულ ხელსაწყოებში საჭიროა კრისტალები, რომელნიც არ უნდა შეიცავდნენ მინარევი ატომების 10^{-8} ნაწილის მეტს. კრისტალის ასეთი დიდი სიწმინდის დროსაც კი ნებისმიერი მიმართულებით საშუალოდ ყოველ 1000 კვანძის შემდეგ გვხვდება მინარევი ატომი, მაგრამ ეს არ ახდენს შესაძენე გავლენას კრისტალის თვისებებზე.

მრავალი ქიმიური ნაერთის კრისტალებში, რომელთა კრისტალურ მესერში ერთ-ერთი კომპონენტის ატომების დანაწილია, შესაბამისი

ადგილები შეუესებელი ან ვაკანტური რჩება. მაგალითად, რკინის სულფიდი (FeS) თითქმის შეუძლებელია მიღებულ იქნას ზუსტი სტექიომეტრული შემადგენლობით. მასში ყოველთვის ადგილი აქვს რკინის ატომების მცირე დანაკლისს. ასეთ შემთხვევაში საქმე გვაქვს დეფექტებთან, რომლებსაც ვაკანსიები ეწოდება. ასევე შეიძლება არსებობდეს ზრდის დეფექტები, წყობის დეფექტები, დისლოკაციები და მრავალი სხვა.

დეფექტები უაღრესად მნიშვნელოვან გავლენას ახდენენ კრისტალების ფიზიკურ-ქიმიურ თვისებებზე. ამიტომ დეფექტების ბუნებისა და მათი მოქმედების შესწავლას ღიდი ადგილი აქვს დათმობილი მყარი სხეულების თანამედროვე კვლევებში.

ამ წიგნში ჩვენ არ შევუდგებით „დეფექტური“ კრისტალური მესრის მქონე კრისტალების განხილვას და საქმე გვექნება მხოლოდ იდეალური კრისტალების სტრუქტურებთან.

კრისტალები წარმოადგენენ ატომების, იონებისა და ატომთა ჯგუფების მიერ შექმნილ მდგრად წყობებს, რომელნიც პოტენციური ენერჯის მინიმუმით ხასიათდებიან. ნაწილაკების ასეთი წყობა იქმნება მათი გარკვეული ურთიერთმოქმედებისა და შეკავშირების შედეგად. სხვადასხვა ნივთიერების კრისტალებში ძალები, რომლებიც ატომებს აკავშირებენ, შეიძლება მნიშვნელოვნად განსხვავდებოდნენ ერთიმეორისაგან, რაც განაპირობებს ამ ნივთიერებების სხვადასხვა ფიზიკურ და ქიმიურ თვისებებს.

ატომებისა და იონების დამაკავშირებელი ძალების ხასიათის მიხედვით არჩევენ ბმის ოთხ ძირითად ტიპს:

1. კოვალენტური ბმა;
2. იონური ბმა;
3. მეტალური ბმა;
4. მოლეკულური ბმა.

რა თქმა უნდა, კავშირის ძალების ერთი რომელიმე სახე იშვიათად შეიძლება იყოს მოცემული კრისტალში. უფრო ხშირად გხვდებით ერთდროულად რამდენიმე სხვადასხვა სახის ბმის ძალების მოქმედების შემთხვევებს. მაგრამ ყოველთვის უპირატესი როლი ენიჭება ერთი რომელიმე სახის ურთიერთქმედებას, რომლის მიხედვით კრისტალს აკუთვნებენ ერთ გარკვეულ ტიპს. მაგალითად, გრაფიტის კრისტალი ხასიათდება ფენური სტრუქტურით, რომლის თითოეულ ფენაში ხორციელდება კოვალენტური ბმა, ხოლო ფენებს შორის მოქმედებენ მოლეკულური ძალები. მოლეკულურ კრისტალებში მოლეკულების შიგნით მოქმედებენ იონური ან კოვალენტური ძალები, ხდლდ მოლეკულებს შორის ბმის ძალებს წარმოადგენენ ვან-დერ-ვალსის ძალები და ა. შ.

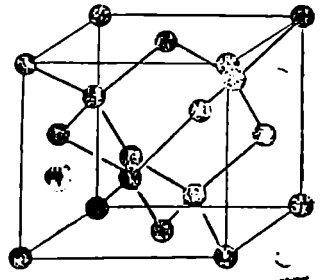
განვიხილოთ აღნიშნული ტიპების კრისტალები და მათთვის დამახასიათებელი ბმის ძალების ბუნება.

კოვალენტური ბმა ჩვეულებრივად იქმნება ატომებს შორის ორი ვალენტური ელექტრონის შეწყვილებით ანუ მათი გადასვლით ე. წ. ბმის ორბიტალზე, რომელიც ორივე ბირთვს მოიცავს. ელექტრონების ასეთი შეწყვილების შედეგად წარმოიშობა მდგრადი ელექტრონული კონფიგურაციები. ამიტომ წმინდა კოვალენტური ბმის შემცველი კრისტალები უნდა შედგებოდნენ ერთი ტიპის ატომებისაგან, რომელნიც დაკავშირებული არიან ერთიმეორესთან წყვილი ელექტრონებით. ასეთი სტრუქტურის კლასიკურ მაგალითს წარმოადგენს ალმასი (ნახ. 6.1), სადაც ნახშირბადის ატომის ოთხი ვალენტობის შესაბამისად თითოეული ატომი გარშემორტყმულია ოთხი უახლოესი მეზობლით, რომლებთანაც იგი შებმულია თითო ვალენტური ელექტრონით. ყველა ვალენტური ელექტრონის დაკავების შედეგად წმინდა კოვალენტური ბმების მქონე კრისტალები იზოლატორები არიან. ამავე მიზეზით კოვალენტური ბმა ხასიათდება ნაჭერობით და გარკვეული მიმართულებით. ალმასის და მეთანის მოლეკულა (ნახ. 7.9) ტეტრაედრული განლაგების ტიპურ მაგალითებს წარმოადგენენ. ალმასის ტიპის სტრუქტურით ხასიათდებიან აგრეთვე სილიციუმის, გერმანიუმისა და რუხი კალის კრისტალები.

წმინდა სახით კოვალენტური ბმა კრისტალებში შედარებით იშვიათია. უფრო ხშირად ის გვხვდება სხვა სახის ურთიერთქმედებასთან ერთად. მაგალითად, სამვალენტიანი ატომები As , Sb , Bi ქმნიან ფენურ სტრუქტურებს, ისე რომ თითოეულ ფენაში ატომს, მისი ვალენტობის შესაბამისად, აქვს სამი უახლოესი მეზობელი, რომლებიც შებმული არიან მასთან კოვალენტური ბმით. ფენებს შორის მოქმედებს სუსტი მოლეკულური ძალები. ფენური ტიპის სტრუქტურას ქმნის აგრეთვე ნახშირბადის მოდიფიკაცია — გრაფიტი.

ერთვალენტიანი ატომები (ქლორი, ბრომი, იოდი) ქმნიან ორატომიან მოლეკულებს კოვალენტური ბმებით. კრისტალურ მესერში ეს მოლეკულები შებმული არიან ერთმანეთთან მოლეკულური ძალებით.

მოყვანილი მაგალითებიდან ჩანს, რომ კოვალენტური ბმის ფიზიკური ბუნება კრისტალურ მესერში მოთავსებულ ატომებს შორის, და ატომებს შორის, რომლებიც შეერთებული არიან მოლეკულის სახით, სრულიად ერთნაირია. ასეთი მოლეკულების მაგალითს წარმოადგენენ H_2 , O_2 , N_2 , CO , CH_4 და მრავალი სხვა. ამიტომ კოვალენტური ბმის ბუნების განხილვა



ნახ. 6.1. ალმასის სტრუქტურა.

კრისტალებში შესაძლებელია დავიწყეთ მოლეკულებში ბმის ძალების ბუნების შესწავლით.

განვიხილოთ ასეთი ბმის ბუნება წყალბადის H_2 მოლეკულის მგალითზე. ჯერ წარმოვიდგინოთ, რომ მოლეკულის შემქმნელი ატომები შედარებით დიდ მანძილზე იმყოფებიან ერთიმეორისაგან [და ამიტომ ფაქტიურად არ ურთიერთმოქმედებენ. წყალბადის ცალკეული ატომი შედგება ერთი ელექტრონისა და პროტონისაგან, რომლებიც მიიზიდებიან კულონის კანონით განსაზღვრული ძალით და თუ ამ ნაწილაკებს შორის მანძილს r ასოთი აღვნიშნავთ, მათი პოტენციური ენერგია იქნება $u = -\frac{e^2}{r}$. ატომში

ელექტრონის მოძრაობის აღწერა ხდება ტალღური ψ ფუნქციის საშუალებით, რომელიც აკმაყოფილებს შრედინგერის განტოლებას

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - u) \psi = 0; \quad (6.1)$$

აქ ψ სტაციონარული მდგომარეობის ტალღური ფუნქციაა; E — სისტემის სრული ენერგია; m — ელექტრონის მასა; $\hbar = 1.05 \cdot 10^{-27}$ ერგი. წმ. ქმედების კვანტია, ხოლო ∇^2 ლაპლასის ოპერატორია ელექტრონის x, y, z კოორდინატთა მიმართ. განტოლება (6.1) შეიძლება მოკლედ დაიწეროს ოპერატორული ფორმით

$$H \psi = E \psi, \quad (6.2)$$

სადაც

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + u \quad (6.3)$$

ჰამილტონის ოპერატორია.

წყალბადის ატომისათვის

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \psi = 0. \quad (6.4)$$

ტალღურ ψ ფუნქციებს, რომელნიც (6.2) განტოლების ამოხსნას წარმოადგენენ, (6.3) ოპერატორის საკუთარი ტალღური ფუნქციები ეწოდება, ხოლო E ენერგიების შესაბამის მნიშვნელობებს (6.3) — ოპერატორის საკუთარი მნიშვნელობები.

ვინაიდან, ამ შემთხვევაში, პოტენციური ველი სფერულად სიმეტრიულია, ხელსაყრელი ხდება სფერულ r, θ, φ კოორდინატებზე გადასვლა რაც კოორდინატების განცალკეების საშუალებას იძლევა და (6.2) განტოლების ამოხსნა შეიძლება დაიწეროს, როგორც ორი ფუნქციის ნამრავლი

$$\psi = R(r) Y(\theta, \varphi). \quad (6.5)$$

$R(r)$ წარმოადგენს რადიალურ ფუნქციას და აკმაყოფილებს (6.2) განტოლების იმ ნაწილს, რომელიც მხოლოდ რადიუსისაგან არის დამოკიდებული.

$Y(\Theta, \varphi)$ ფუნქციებს სფერული ფუნქციები ეწოდება. ისინი აკმაყოფილებენ (6.2) განტოლების იმ ნაწილს, რომელიც Θ, φ ცვლადებს შეიცავს და წარმოადგენენ შემდეგი განტოლების

$$\frac{1}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\sin \Theta \frac{\partial Y}{\partial \Theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \Theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} + \lambda Y = 0 \quad (6.6)$$

ამოხსნას მხოლოდ იმ შემთხვევაში, თუ λ პარამეტრი აკმაყოფილებს პირობას $\lambda = l(l+1)$, სადაც $l=0, 1, 2, \dots$ ამგვარად, l -ის მოცემული მნიშვნელობისათვის მიიღება $2l+1$ ამოხსნა

$$Y_{l,m}(\Theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_{l,|m|}(\cos \Theta) e^{im\varphi}, \quad (6.7)$$

სადაც $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$. (6.8)

აქ $Y_{l,m}(\Theta, \varphi)$ ნორმირებული სფერული ფუნქციაა, ხოლო $P_{l,|m|}(\cos \Theta)$ — ლეჟანდრის ასოცირებული პოლინომები:

$$P_{l,|m|}(z) = \frac{(1-z^2)^{\frac{|m|}{2}}}{2^l l!} \frac{d^{l+|m|}}{dz^{l+|m|}} (z^2-1)^l. \quad (6.9)$$

სფერული ფუნქციები $Y_{l,m}$, რომელიც (6.2) განტოლების კუთხური ნაწილის ამოხსნას წარმოადგენენ, დამოკიდებულნი არიან ორ მთელ რიცხვზე;

$$l=0, 1, 2, \dots \text{ და } m=0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l.$$

l განსაზღვრავს ელექტრონის მოძრაობის რაოდენობის მომენტს $M = \hbar \sqrt{l(l+1)}$, ხოლო m — ამ მომენტის პროექციას ველის მიმართულეობაზე $M_z = m\hbar$.

მოვიყვანოთ სფერული ფუნქციების რამდენიმე მნიშვნელობა:

$$\begin{aligned} l=0 \quad m=0 \quad Y_{00} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ l=1 \quad m=0 \quad Y_{10} &= \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cos \Theta \\ l=1 \quad m=+1 \quad Y_{11} &= \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \Theta e^{i\varphi} \\ l=1 \quad m=-1 \quad Y_{1,-1} &= \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \Theta e^{-i\varphi} \\ l=2 \quad m=0 \quad Y_{2,0} &= \left(\frac{5}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{3}{2} \cos^2 \Theta - \frac{1}{2}\right) \end{aligned} \quad (6.10)$$

ახლა განვიხილოთ საკუთარი ტალღური ფუნქციის რადიალური ნაწილი $R(r)$, რომელიც განისაზღვრება შემდეგი განტოლებით:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[\frac{2m'}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0. \quad (6.11)$$

განვიხილოთ ამ განტოლების ამოხსნა იმ შემთხვევისათვის, როდესაც ენერგია უარყოფითია ($E < 0$), ხოლო $V_{r \rightarrow \infty}(r) \rightarrow 0$; ეს შეესაბამება ელექტრონის ბმულ მდგომარეობას ატომში. შემოვიღოთ ატომური ერთეულები. ამ ერთეულებში მუხტის ერთეულად მიღებულია ელექტრონის მუხტი e , მასის ერთეულად — ელექტრონის მასა m , სიგრძის ერთეულად $a = \frac{\hbar^2}{me^2}$, ხოლო ენერგიის ერთეულად $E_0 = \frac{me^4}{\hbar^2} = \frac{e^2}{a}$, მაშინ სიგრძე,

გამოსახული ახალ ერთეულებში, იქნება $\rho = \frac{r}{a}$, ხოლო ენერგია $\epsilon = \frac{[E]}{E_0}$.

ახლა განტოლება (6.1) ასე დაიწერება

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left[2\epsilon + \frac{2z}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R = 0, \quad (6.12)$$

სასაზღვრო პირობებით $R(\rho) \rightarrow 0$, როდესაც $\rho \rightarrow \infty$, (6.2) განტოლების ამოხსნას აქვს შემდეგი სახე

$$R_{nl}(\xi) = N_{nl} \xi^l e^{-\xi/2} \cdot L_{n+l}^{2l+1}(\xi), \quad (6.13)$$

სადაც N_{nl} — ნორმირების ნამრავლია: $\xi = \frac{2z}{n} \rho = \frac{2z}{na} r$, ხოლო L_{n+l}^{2l+1} — ლაგერის ასოცირებული პოლინომებია. ეს პოლინომები მიიღება ლაგერის პოლინომის

$$L_\lambda(\xi) = \int_0^\xi \frac{d^\lambda}{d\xi^\lambda} (\lambda - \xi)^\lambda d\xi.$$

დიფერენცირების შედეგად

$$L_{\lambda+k}(\xi) = \frac{d^k}{d\xi^k} L_\lambda(\xi). \quad (6.14)$$

აქ აღნიშნულია: $\lambda = n + l$; $k = 2l + 1$.

მამრავლი N_{nl} განისაზღვრება R ფუნქციის ნორმირების პირობიდან

$$\int_0^\infty R^2_{nl} r^2 dr = 1$$

და უღრის

$$N_{nl} = \sqrt{\left(\frac{2z}{na} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}}.$$

n ლებულობს მნიშვნელობებს— $n=1, 2, 3, \dots$, ხოლო

$$l=0, 1, 2, \dots, (n-1).$$

| აქ n — მთავარი კვანტური რიცხვია; ის ატომის ენერჯიას განსაზღვრავს $\left(E_n = -\frac{z^2}{2n^2} \right)$. ამგვარად, ტალღური ფუნქციის რადიალური ნაწილიც ორ მთელ n და l რიცხვზე არის დამოკიდებული. მოვიყვანოთ რადიალური ფუნქციის რამდენიმე მნიშვნელობა:

$$R_{10} = 2 \left(\frac{z}{a} \right)^{3/2} e^{-\rho}; \quad R_{20} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{z}{a} \right)^{3/2} (2 - \rho) e^{-\frac{1}{2}\rho} \quad (6.15)$$

$$R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{z}{a} \right)^{3/2} \cdot \rho \cdot e^{-\frac{1}{2}\rho}; \quad R_{30} = \frac{2}{3\sqrt{3}} \left(\frac{z}{a} \right)^{3/2} \left(1 - \frac{2}{3}\rho + \frac{2}{27}\rho^2 \right) e^{-\frac{1}{3}\rho}$$

და ა. შ.

ახლა სრული ტალღური ფუნქცია (6.5) წყალბადის ატომისთვის მიიღებს შემდეგ სახეს:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi);$$

$$[n=1, 2, 3, \dots; l=0, 1, 2, \dots, (n-1); m=0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l]. \quad (6.16)$$

წყალბადის ატომის საკუთარ ψ_{nlm} ფუნქციებს ატომური ორბიტალები ეწოდება. როდესაც ამბობენ, რომ ელექტრონი რომელიმე ატომურ ორბიტალზეა მოთავსებული, იგულისხმება, რომ მისი მდგომარეობა განსაზღვრულია ტალღური ფუნქციით, რომელიც შრედინგერის განტოლების ამოხსნას წარმოადგენს.

l -ის მნიშვნელობები მიხედვით ატომურ ორბიტალებს აღნიშნავენ მცირე ლათინური ანბანით: როდესაც $l=0$, ორბიტალი აღინიშნება s -ით; როდესაც $l=1, 2, 3, \dots$, შესაბამისად, — p, d, f -თი და ა. შ. შესაბამის ელექტრონებსაც s, p, d, f ელექტრონებს უწოდებენ. გარდა ამისა, ორბიტალის აღნიშვნაში შედის მთავარი კვანტური რიცხვი n , რომელიც სათანადო აღნიშვნის წინ იწერება: $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d$ და ა. შ. ორბიტალს, რომლისთვისაც $n=1, K$ გარსი ეწოდება; თუ $n=2, -L$ გარსი $n=3, -M$ გარსი და ა. შ.

როგორც (6.10) ფორმულები გვიჩვენებენ, ტალღური ფუნქციის კუთხურ ნაწილში m რიცხვები შედიან ექსპონენციალური ფუნქციების კომპლექსურ მაჩვენებლებში. კომპლექსურობიდან თავის დასაწლეველ ამ ფუნქციების ნაცვლად l -ის ერთი და იმავე მნიშვნელობისათვის ლებულობენ ორი სფერული ფუნქციის წრფივ კომბინაციას, რომელიც აგრეთვე (6.2) განტოლების ამოხსნას წარმოადგენს. ასე, მაგალითად:

$$\sqrt{\frac{1}{2}}(Y_{11} + Y_{1, -1}) = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \sin \theta \sin \varphi. \quad (6.17)$$

$$-\frac{i}{\sqrt{2}}(Y_{11} - Y_{1, -1}) = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}} \sin \theta \sin \varphi.$$

დეკარტის კოორდინატებსა და სფერულ კოორდინატებს შორის კავშირის ფორმულებიდან $z = r \cos \theta$; $x = r \sin \theta \cos \varphi$; $y = r \sin \theta \sin \varphi$, ჩანს, რომ $\sin \theta \cos \varphi$ წარმოადგენს რადიუს-ვექტორის x კომპონენტის კუთხურ დამოკიდებულებას. ამიტომ (6.17) გამოსახულებები, სადაც $l=1$, p ატომური ორბიტალების p_x და p_y კუთხურ ნაწილებს გამოხატავენ.

ახლა (6.10) და (6.15) ფორმულების საფუძველზე შეიძლება დაიწეროს ერთელექტრონიანი ატომების სრული ტალღური ფუნქციები (ორბიტალები):

n	l	$ m $	
1	0	0	$\psi(1S) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \cdot 2 \left(\frac{z}{a}\right)^{3/2} \cdot e^{-z} = \text{const} e^{-\rho} \quad \left(\rho = \frac{r}{a}\right)$
2	0	0	$\psi(2S) = \text{const}(2-\rho)e^{-\frac{1}{2}\rho}$
2	1	0	$\psi(2P_z) = \text{const} \cdot \rho \cdot e^{-\frac{1}{2}\rho} \cos \theta$
2	1	1	$\left\{ \begin{array}{l} \psi(2P_x) = \text{const} \cdot \rho \cdot e^{-\frac{1}{2}\rho} \sin \theta \cos \varphi \\ \psi(2P_y) = \text{const} \cdot \rho \cdot e^{-\frac{1}{2}\rho} \sin \theta \sin \varphi \end{array} \right. \quad (6.18)$

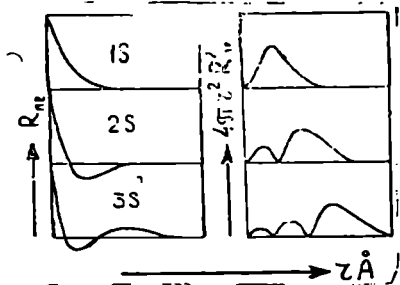
აღბათობა იმისა, რომ ელექტრონი, რომლის მდგომარეობაც განსაზღვრულია n , l , m ქვანტური რიცხვებით, მოთავსებულია სივრცის რომელიმე წერტილის მახლობლად მოცულობის dv ელემენტში, იქნება

$$|\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)|^2 dv = R_{nl}^2(r) Y_{lm}^2(\theta) dv. \quad (6.19)$$

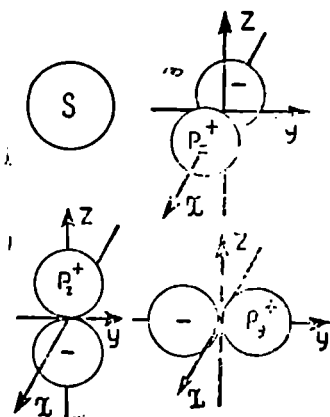
ამგვარად, თითოეულ მდგომარეობას შეესაბამება ელექტრონული მუხტის სიმკვრივის გარკვეული განაწილება. ამას მეტად დიდი მნიშვნელობა ექნება შემდეგში, რადგან, როგორც დაინახავთ, ბმები ატომებს შორის უპირატესად იქმნება იმ მიმართულებით, სადაც ელექტრონული სიმკვრივე მაქსიმალურია.

განვიხილოთ წყალბადის ატომის $1s$, $2s$, $3s$, ორბიტალები. როგორც (6.18) გვიჩვენებს, ტალღური ფუნქციები, ამ შემთხვევაში, მხოლოდ ელექტრონიდან ბირთვამდე r მანძილს შეიცავენ და სრულებით არ არიან

დაკავშირებული Θ და Φ კუთხეების მნიშვნელობებთან. ამიტომ ამ ორბიტალზე ელექტრონის აღმოჩენის ალბათობის სიმკვრივე განისაზღვრება



ნახ. 6.2. რადიალური ტალღური ფუნქციები და შესაბამისი ალბათობის განაწილების გრაფიკები წყალბადის ატომისათვის



ნახ. 6.3. ელექტრონული სიმკვრივის განაწილების სასაზღვრო ზედაპირების კვეთები წყალბადის ატომის $1S, 2P_x, 2P_y, 2P_z$ ორბიტალებისათვის.

$|R_{nl}(r)|^2$ სიდიდით, ხოლო თუ მას r რადიუსის მქონე სფეროს $4\pi r^2$ ფართობზე გავამრავლებთ, მივიღებთ ელექტრონის მუხტის ბირთვიდან r მანძილზე აღმოჩენის ალბათობას. ვინაიდან, ეს ალბათობა არ არის დამოკიდებული კუთხისაგან, s ელექტრონების მუხტის განაწილება სივრცეში ხასიათდება სფერული სიმეტრიით, ე. ი. ელექტრონის მოთავსება სხვადასხვა მიმართულებით ბირთვიდან ერთ და იმავე მანძილზე ერთნაირად ალბათია. 6.2 ნახაზზე მოყვანილია $R_{nl}(r)$ ფუნქციების და შესაბამისი ალბათობების r მანძილისაგან დამოკიდებულების გრაფიკები. როგორც ნახაზიდან ჩანს, ელექტრონის მოთავსების ალბათობა $1s$ მდგომარეობისათვის ერთი მაქსიმუმის მქონე მრუდს წარმოადგენს, $2s$ მდგომარეობისათვის — ორ მაქსიმუმთან მრუდს და ა. შ. ეს იმას ნიშნავს, რომ არსებობს არეები, სადაც ყველაზე ალბათია ელექტრონის მოთავსება. ასეთ არეებში ელექტრონული მუხტის სიმკვრივეც მაქსიმალურია. მანძილის ზრდასთან ერთად ალბათობა მცირდება და ბოლოს ეცემა ნულამდე. თუ ამ მანძილით, როგორც რადიუსით, შემოვხაზავთ სფეროს, მივიღებთ სასაზღვრო ფართეულს, რომლის შიგნით მთლიანად იქნება მოთავსებული ელექტრონული მუხტი (ნახ. 6.3). ზმირად სასაზღვრო ფართეულებსაც ორბიტალებს უწოდებენ. ამ ფართეულის კვეთა სიბრტყესთან s ელექტრონებისათვის იქნება წრეხაზი.

როდესაც $l=1$, $\psi(2p)$ ტალღური ფუნქციები არა მარტო ელექტრონისა და ბირთვს შორის მანძილზე არიან დამოკიდებულნი, არამედ Θ და Φ კუთხეებზედაც (6.18). ამის გამო s ელექტრონების სფერული სიმეტრიით

განაწილების მაგივრად იქმნება ელექტრონული მუხტის ისეთი განაწილება, რომელიც გარკვეული მიმართულებით მაქსიმალური სიმკვრივით ხასიათდება. გრაფიკულად მუხტის განაწილება, ამ შემთხვევაში, წარმოდგენილია ორი სფეროს გავრთიანების საშუალებით, რომლებიც ეხებიან ერთიმეორეს კოორდინატთა სათავეში. მათი კვეთა სიბრტყესთან რვიანის მაგვარ ფიგურას იძლევა. სამივე p ფუნქციას ერთნაირი ფორმა აქვთ, მაგრამ ისინი ორიენტირებული არიან ურთიერთმართობულად კოორდინატთა ღერძების პარალელურად (ნახ. 6.3). ცოტათი უფრო რთული სახე აქვს d და f ელექტრონების მუხტების განაწილებას. ყოველ შემთხვევაში, s ორბიტალებს გარდა ყველა სხვა ორბიტალი ხასიათდება მუხტის სიმკვრივის განაწილების უპირატესი მიმართულებებით.

ელექტრონის მდგომარეობის სრული აღწერისათვის n , l , m კვანტური რიცხვებს გარდა საჭიროა კიდევ ელექტრონის სპინის შემოღება. ელექტრონის სპინი ხასიათდება s კვანტური რიცხვით, რომელიც მხოლოდ ორ მნიშვნელობას იღებს $+\frac{1}{2}$ და $-\frac{1}{2}$. ორბიტალებზე ელექტრონების

განაწილება ხდება პაულის პრინციპის თანახმად, რომლის მიხედვით ოთხი კვანტური რიცხვით (n , l , m , s) განსაზღვრულ მდგომარეობაში შეიძლება იმყოფებოდეს მხოლოდ ერთი ელექტრონი. წყალბადის ატომს გააჩნია მხოლოდ ერთი ელექტრონი, რომელიც $1s$ ორბიტალზე იმყოფება. ამავე ორბიტალზე შეიძლება მოთავსდეს კიდევ ერთი ელექტრონი მხოლოდ იმ შემთხვევაში, თუ მის სპინს საწინააღმდეგო მიმართულება ექნება.

ახლა დავუბრუნდეთ წყალბადის მოლეკულის (H_2) მაგალითს: ვიდრე ორი წყალბადის ატომი A და B იმდენად შორს იმყოფებიან ერთიმეორისაგან, რომ მათი ელექტრონული გარსები ერთმანეთს არ გადაფარავენ, ისინი, ფაქტიურად, ნეიტრალურ ატომებს წარმოადგენენ და მათ შორის ურთიერთქმედების ძალაც ნულის ტოლია. თუ ნეიტრალური ატომის ენერგიას აღვნიშნავთ E_0 , მაშინ ასეთი სისტემის ენერგია იქნება $2E_0$. გამოთვლები გვიჩვენებენ, რომ $50A$ უკვე ისეთი მანძილია, როდესაც A ატომის ელექტრონი შეიძლება მოხვდეს B ატომის მახლობლად, მხოლოდ 10^{12} წელიწადში ერთხელ. ეს გამოწვეულია ელექტრონული სიმკვრივის სწრაფი შემცირებით ბირთვიდან მანძილის ზრდასთან ერთად (ნახ. 6.2). a ბირთვის მახლობლად ელექტრონის მდგომარეობას აღწერს ψ_a ტალღური ფუნქცია, ხოლო b ბირთვის მახლობლად — ψ_b . a ბირთვთან მყოფი ელექტრონი აღვნიშნოთ 1, ხოლო b ბირთვთან — 2. მაშინ $\psi_a(1)$ ან $1S_a$ იქნება წყალბადის A ატომის ატომური ორბიტალი, რომელიც ცენტრირებულია a ბირთვში, ხოლო $\psi_b(2)$ ან $1S_b$ — B ატომის ატომური ორბიტალი. როდესაც ატომები შორს იმყოფებიან ერთიმეორისაგან, სისტემის ტალღური ფუნქციაა

$$\psi_1 = 1S_a(1) \cdot 1S_b(2) = \text{const} \cdot e^{-Pa - Pb} \quad (6.20)$$

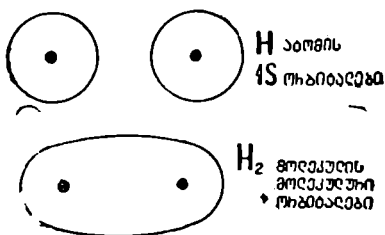
აქ $1 S_a(1)$ ნიშნავს, რომ 1 ელექტრონი იმყოფება a ბირთვთან s ორბიტალზე, ხოლო $1 S_b(2)$ ნიშნავს 2 ელექტრონის არსებობას ასეთივე ორბიტალზე, b ბირთვის მახლობლად.

ატომების დაახლოებასთან ერთად მდგომარეობა იცვლება. თანდათან იზრდება ალბათობა იმისა, რომ A ატომის ელექტრონი (1) მოხვდება B ატომის ბირთვის მახლობლად და პირიქით. იწყება ელექტრონული გარსების გადაფარვა, კერძოდ, როდესაც მანძილი ბირთვებს შორის აღწევს $2\bar{A}$, ელექტრონის გადასვლა ერთი ბირთვიდან მეორესთან ხდება წამის 10^{-14} დროში. მანძილის შემდეგი შემცირებისას ბირთვებს შორის ელექტრონის გაცვლის სიხშირე იმდენად იზრდება, რომ ელექტრონის მიკუთვნება a ან b ბირთვზე კარგავს აზრს. ამის შემდეგ ამ ორ ატომს შორის იქმნება ახალი მდგომარეობა, როდესაც არც ერთი ელექტრონი უკვე აღარ ეკუთვნის რომელიმე კონკრეტულ ბირთვს. ისინი ერთდროულად ორივე ბირთვს ეკუთვნიან, ან, როგორც ამბობენ, განზოგადებულები არიან.

ელექტრონების განზოგადება იწვევს ელექტრონული სიმკვრივის გადანაწილებას და სისტემის ენერჯის შეცვლას. ატომური ორბიტალების გადაფარვის შედეგად ხდება ელექტრონების დელოკალიზაცია, რომლის საფუძველზე წარმოიშობა ძლიერი კავშირი. ამიტომ ტალღური ფუნქცია, რომელიც ასეთი წყვილი ელექტრონების მდგომარეობას აღწერს, უნდა ასახავდეს არა მარტო ცალკეული ატომური ორბიტალების არსებობას, არამედ ელექტრონების დელოკალიზაციის შესაძლებლობასაც, რომელიც თავის მხრივ, განპირობებს ატომების ბმის მოლეკულურ სისტემად.

მოლეკულის აღწერის ამ მეთოდს ვალენტური ბმის მეთოდი ეწოდება და ის პირველად დამუშავდა წყალბადის მოლეკულისათვის ჰაიტლერის და ლონდონის მიერ. არსებობს კოვალენტური ბმის წარმოდგენის მეორე გზა. კერძოდ, მოლეკულის შექმნის პროცესში ცალკეული ელექტრონების მოძრაობა უკვე ისეთი აღარ იქნება, როგორც თავისუფალ ატომში. ვალენტური ელექტრონები იწყებენ მოძრაობას ორი ბირთვის ველში და ახლა სისტემის მდგომარეობას აღწერს ახალი ტალღური ფუნქცია ψ , რომელსაც მოლეკულური ტალღური ფუნქცია ეწოდება. წყალბადის მოლეკულის მოლეკულური ორბიტალის შექმნის პროცესი ორი წყალბადის ატომის $1s$ ორბიტალიდან სქემატურად ნაჩვენებია 6.4 ნახაზზე.

ამ მეთოდს მოლეკულური ორბიტალების მეთოდი ეწოდება. მოლეკულური ორბიტალების შექმნისათვის იღებენ ატომურ



ნახ. 6.4. H_2 მოლეკულის მოლეკულური ორბიტალის შექმნა $1S$ ატომური ორბიტალებიდან (მარჯლის, კეტის და ტედერის მიხედვით).

ორბიტალებს, ადგენენ მათ წრფივ კომბინაციას და შემდეგ აწარმოებენ კოეფიციენტების შერჩევას ისეთნაირად, რომ სისტემის სრული ენერგია გახდეს მინიმალური.

თუ შორსმყოფი ორი წყალბადის ატომისათვის მართებულია (6.20) ფუნქცია, მათი დაახლოების პირობებში, როდესაც ელექტრონები იცვლიან ბირთვებს, ასევე მართებული იქნება ფუნქცია

$$\psi_{\pm} = 1 S_a(2) \quad 1 S_b(1). \quad (6.21)$$

წყალბადის H_2 მოლეკულის ტალღური ფუნქცია უნდა იძლეოდეს ერთნაირ ალბათობას იმისა, რომ თითოეული ელექტრონი იმყოფება როგორც ერთი, ისე მეორე ბირთვის მახლობლობაში. ასეთ პირობას აკმაყოფილებს ფუნქცია

$$\psi_{\pm} = N_{\pm} [1 S_a(1) \quad 1 S_b(2) \pm 1 S_a(2) \cdot 1 S_b(1)]. \quad (6.22)$$

აქ N მანორმირებელი მამრაველია და განისაზღვრება ψ ფუნქციის ნორმირების პირობიდან

$$\int |\psi|^2 d\tau = 1;$$

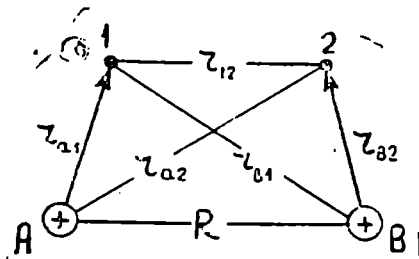
აქედან

$$N_{\pm} = (2 + 2S^2)^{-1/2},$$

სადაც

$$S = \int 1 S_a \cdot 1 S_b d\tau$$

გადაფარვის ინტეგრალია; ნამრავლს $1 S_a \quad 1 S_b$ გადაფარვის სიმკვრივე ეწოდება. ამიტომ



$$\psi_{\pm} = (2 + 2S^2)^{-1/2} [1 S_a(1) 1 S_b(2) \pm S_a(2) 1 S_b(1)]. \quad (6.23)$$

ენერგიის გამოსათვლელად ვისარგებლოთ (6.2) ფორმულით, რომლის ორივე მხარის ტალღურ ψ ფუნქციაზე გადამრავლებით მივიღებთ

$$E = \int \psi H \psi d\tau. \quad (6.24)$$

ნახ. 6.5. წყალბადის A და B ატომბირთვების და 1,2 ელექტრონების კოორდინატები.

წყალბადის მოლეკულისათვის ჰამილტონის ოპერატორის ატომურ

ერთეულებში აქვს შემდეგი სახე

$$H = -\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{1}{r_{a1}} - \frac{1}{r_{a2}} - \frac{1}{r_{b1}} - \frac{1}{r_{b2}} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{R}. \quad (6.25)$$

რადიუსების შესაბამისი აღნიშვნები ნაჩვენებია 6.5 ნახაზზე. მოკლედ (6.25) შეიძლება ასე ჩაიწეროს

$$H = H_a + H_b + H',$$

სადაც H_a და H_b A და B ატომების ჰამილტონიანებია, ხოლო H' შედგება ჰამილტონიანის იმ წევრებისაგან, რომლებიც ატომებს შორის ურთიერთქმედებას გამოხატავენ:

$$H_a = -\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{1}{r_{a1}}; \quad (6.26)$$

$$H_b = -\frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{1}{r_{b2}}; \quad (6.27)$$

$$H' = -\frac{1}{r_{a2}} - \frac{1}{r_{b1}} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{R}. \quad (6.28)$$

წვისარგებლოთ იმით, რომ $1S_a$ და $1S_b$ ფუნქციები H_a და H_b ჰამილტონიანების საკუთარი ფუნქციებია და ამიტომ:

$$\left(-\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{1}{r_a}\right) 1S_a = E_0 1S_a, \quad (6.29)$$

$$\left(-\frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{1}{r_b}\right) 1S_b = E_0 1S_b.$$

აქ E_0 წყალბადის $1s$ ატომური ორბიტალის ენერგიაა და ამ შემთხვევაში

$$E_0 = -\frac{1}{2}, \quad \text{ვინაიდან } E_n = -\frac{1}{2} \frac{z^2}{|n|^2};$$

მაშინ

$$E_+ = \int \psi_+ H \psi_+ dv = N_+^2 \int \{ [1S_a(1)1S_b(2) + 1S_a(2)1S_b(1)] [H_a + H_b + H'] [1S_a(1)1S_b(2) + 1S_a(2)1S_b(1)] \} dv_1 dv_2. \quad (6.30)$$

თუ აქ შევიტანთ ჰამილტონიანების მნიშვნელობებს და გამოვიყენებთ (6.29) ფორმულებს; სათანადო გარდაქმნების შემდეგ მივიღებთ:

$$E_+ = 2E_0 + \frac{Q+A}{1+S^2}; \quad (6.31)$$

$$E_- = 2E_0 + \frac{Q-A}{1-S^2}.$$

სადაც

$$Q = \int \left(-\frac{1}{r_{a2}} - \frac{1}{r_{b1}} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{R} \right) [1S_a(1)1S_b(2)]^2 dv_1 dv_2. \quad (6.32)$$

ანტეგრალი $\int \frac{(1S_a)^2}{r_{b1}} dv_1$ წარმოადგენს a ატომის ელექტრონის b ატომის ბირთვთან მიზიდვის ენერგიას, ხოლო $\int \frac{(1S_b)^2}{r_{a2}} dv_2$ — b ატომის ელექტრონის მიზიდვას a ატომის ბირთვის მიერ. $1S_a^2$ და $1S_b^2$ სიმკვრივეების მქონე ელექტრონული ქმუხტების ურთიერთგანზიდვის ენერგია გამოისახება ინტეგრალით $\int \frac{1S_a^2 1S_b^2}{r_{12}} dv_1 dv_2$, ხოლო ბირთვების განზიდვის ენერგია — წევრით $\left(\frac{1}{R}\right)$.

ამგვარად, მთლიანად Q ინტეგრალი გამოსახავს წყალბადის ორი ატომის ურთიერთქმედების ელექტროსტატიკურ ენერგიას და ამიტომ მას კულონური ინტეგრალი ეწოდება.

მეორე ინტეგრალი

$$A = \int \left(-\frac{1}{r_{a2}} - \frac{1}{r_{b1}} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{R} \right) 1S_a(1) 1S_b(2) 1S_a(2) 1S_b(1) dv_1 dv_2. \quad (6.33)$$

ამ ინტეგრალს გაცვლითი ინტეგრალი ეწოდება და ის განსაზღვრავს იმ ენერგიას, რომელიც წარმოიშობა $1S_a$ და $1S_b$ ატომური ორბიტალების გადაფარვის შედეგად, როდესაც იქმნება $1S_a(1) 1S_b(2) 1S_a(2) 1S_b(1)$ ელექტრონული სიმკვრივის არე ორ ერთმანეთთან დაახლოებულ ატომს შორის.

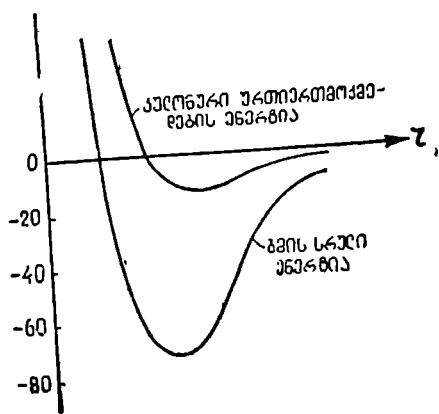
გამოთვლები გვიჩვენებენ, რომ Q და A სიდიდეები ორივე უარყოფითია, მაგრამ გაცვლითი A ინტეგრალი აბსოლუტური სიდიდით გაცილებით მეტია კულონურ Q ინტეგრალზე. ამიტომ (6.31) გამოსახულებებში $E_+ < 2E_0$, ხოლო $E_- > 2E_0$. პირველ შემთხვევას, ე. ი. (E_+) შეესაბამება ატომების ურთიერთმიზიდვა და მოლეკულის შექმნა. ვინაიდან $A \gg Q$, ენერგიის შემცირება ძირითადად ხდება ელექტრონების გაცვლის ან ორბიტალების გადაფარვის შედეგად; ამიტომ მიზიდვის ძალებს, რომლებიც ამ შემთხვევაში წარმოიშობიან, გაცვლითი ძალები ეწოდება, ხოლო ბმას — გაცვლითი ბმა. როგორც (6.33) ფორმულა გვიჩვენებს, გაცვლითი A ინტეგრალი დამოკიდებულია გადაფარვის S ინტეგრალის სიდიდეზე (6.23). ეს იმას ნიშნავს, რომ თუ ატომური ორბიტალების გადაფარვა უმნიშვნელოა, გაცვლითი ინტეგრალის სიდიდე იქნება მცირე და სათანადო ორბიტალების ბმის ენერგიაც მცირე იქნება. ორბიტალების დიდი გადაფარვის შემთხვევაში წყალბადის მოლეკულის შექმნის პროცესში ენერგიის შემცირებაც დიდი იქნება და, მაშასადამე, — მოლეკულური ბმაც უფრო მტკიცე.

მეორე შემთხვევაში ელექტრონების გაცვლის შედეგად სისტემის ენერ-

გია (E_-) იზრდება, ამიტომ ატომები განიზიდებიან და მათ შორის ბმული მდგომარეობა არ წარმოიშობა.

Q და A ინტეგრალების გამოთვლით შესაძლებელია განისაზღვროს წყალბადის მოლეკულის ენერგია, როგორც ატომების ბირთვებს შორის მანძილის ფუნქცია.

6.6. ნახაზზე მოყვანილია კულონური ურთიერთქმედების და ბმის სრული ენერგიის ბირთვებს შორის მანძილისა-



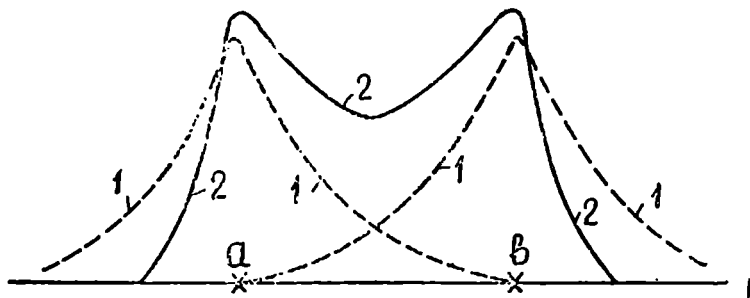
ნახ. 6.6. H_2 მოლეკულის ენერგია, როგორც ბირთვებს შორის მანძილის ფუნქცია.

გან დამოკიდებულების მრუდები; როგორც ჩანს, წყალბადის მოლეკულის ბმის ენერ-

გიის უმთავრესი ნაწილი განისაზღვრება გაცვლითი ურთიერთქმედებით, ვინაიდან კულონური ენერგია ბმის ენერგიის მხოლოდ 15% შეადგენს. ბმის სრული ენერგია, პოტენციური მრუდის მინიმუმის სიღრმე, ამ შემთხვევაში, უდრის $E=4,7eV$, ხოლო წონასწორული მანძილი ბირთვებს შორის $R=0,074\text{Å}$.

ψ_+ ფუნქციას შეესაბამება ენერგიის უფრო დაბალი მნიშვნელობა და ატომების ურთიერთმიზიდვა, ამიტომ ის წარმოადგენს წყალბადის მოლეკულის (H_2) ტალღურ ფუნქციას. ψ_+ ფუნქცია სიმეტრიულია ელექტრონების გადანაცვლების მიმართ, ე. ი. თუ 1 ელექტრონს გადავიყვანთ b ბირთვთან, ხოლო 2 ელექტრონს — a ბირთვთან, ფუნქცია არ შეიცვლება. ასეთ ფუნქციას სიმეტრიული ფუნქცია ეწოდება. ანტისიმეტრიული ფუნქცია ψ_- ელექტრონების გადაადგილების შედეგად იცვლის ნიშანს.

როგორც დავინახეთ, სიმეტრიული ψ_+ ფუნქცია აღწერს ისეთ მდგომარეობას, როდესაც ატომებს შორის ადგილი აქვს მიზიდვას და ამის საფუძველზე იქმნება მოლეკულა. ვინაიდან $\psi_+ = \psi_1 + \psi_2$ და $\psi_- = \psi_1 - \psi_2$, ამიტომ პირველ შემთხვევაში ელექტრული სიმკვრივე ატომებს შორის $\psi_+^2 = \psi_1^2 + \psi_2^2 + 2\psi_1\psi_2$ იქნება გაზრდილი, ხოლო მეორე შემთხვევაში $\psi_-^2 = \psi_1^2 + \psi_2^2 - 2\psi_1\psi_2$ შემცირებული. ψ_+ ორბიტალს ბმის ორბიტალი ეწოდება, ხოლო ψ_- — რღვევის ორბიტალი. აქედან, ცხადია, რომ $|\psi_+|^2$ განსაზღვრავს ელექტრული მუხტის სიმკვრივის განაწილებას წყალბადის მოლეკულაში. ეს განაწილება ნაჩვენებია 6.7 ნახაზზე, სადაც წყვეტილი ხაზები შეესაბამება ელექტრონული მუხტის განაწილებას იზოლირებულ

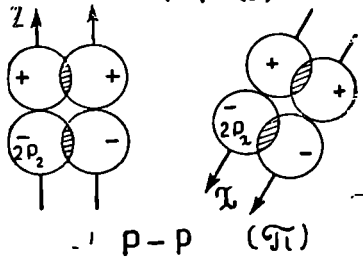
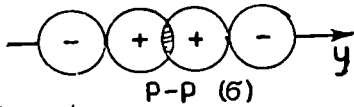
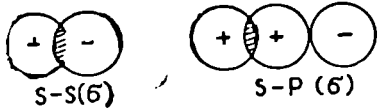


ნახ. 6.7. ელექტრონული სიმკვრივის განაწილება ორი წყალბადის ატომისაგან შემდგარი სისტემაში 1. ψ_a^2 , ψ_b^2 , 2. ψ^2 (σ_{1S}).

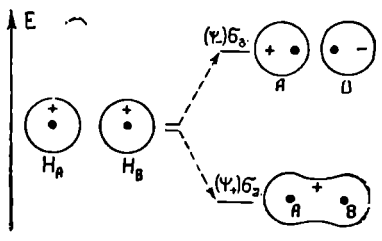
A და B წყალბადის ატომებში, ხოლო მთლიანი ხაზი აღნიშნავს ელექტრონული მუხტის სიმკვრივის განაწილებას წყალბადის მოლეკულაში. როგორც ნახაზიდან ჩანს, ელექტრონების განზოგადების შედეგად წყალბადის მოლეკულის ატომთშორის სივრცეში ელექტრონული სიმკვრივე საგრძნობლად იზრდება, რაც განაპირობებს ბირთვების დაახლოებას და მტკიცე ბმის შექმნას.

წყალბადის მოლეკულაში ორი ელექტრონი მოძრაობს. ვინაიდან, პაულის პრინციპის თანახმად, ატომების დამაკავშირებელ ორბიტალზე შესაძლებელია ორი ელექტრონის მოთავსება მხოლოდ იმ შემთხვევაში, თუ მათ სპინებს ექნება საწინააღმდეგო მიმართულება, საჭიროა მხედველობაში მივიღოთ სპინების ურთიერთგანლაგება. ტალღურ ფუნქციაში ეს ხერხდება სპეციალური სპინური (S) საკუთარი ფუნქციების შემოღებით, რომელთა საკუთარი მნიშვნელობები $+\frac{1}{2}$ და $-\frac{1}{2}$ ტოლია. მაშინ სრულ

ლი ტალღური ფუნქცია წარმოდგენილი იქნება როგორც $\psi \cdot S$ და უნდა შეიცავდეს ისეთ მდგომარეობებს, რომელნიც პაულის პრინციპის მიხედვით დასაშვებია. კერძოდ, ორი ელექტრონისაგან შემდგარი სისტემის სრული სპინი შეიძლება იყოს $S=0,1$. თუ ელექტრონები ერთ ორ ბიტალზეა, პაულის პრინციპი კრძალავს მდგომარეობას, სადაც $S=1$. რადგან ელექტრონებს მხოლოდ საწინააღმდეგო სპინები შეიძლება ჰქონდეთ, ამიტომ ქიმიური ბმაც წარმოიშობა მხოლოდ იმ შემთხვევაში, როდესაც $S=0$ და ბმის ψ_+ ორბიტალზე იმოდრავებს ორი ელექტრონი ანტიპარალელური სპინით. ასეთი მდგომარეობა შეიძლება განხორციელდეს მხოლოდ ერთი გარკვეული წესით, როდესაც $S=0$ და ამიტომ მას სინგლეტური მდგომარეობა ეწოდება. ამავე დროს ψ_- — ორბიტალზე, რომელიც ატომების ურთიერთგანხილვის და, მაშასადამე, ბმის დასუსტების მდგომარე-



ობას აღწერს, შეიძლება იმყოფებოდნენ ელექტრონები, რომელთა სპინებიც პარალელურია და სისტემის საერთო სპინი $S=1$ ასეთ შემთხვევაში სპინ-მომენტების პროექციების ჯამი შეიძლება იყოს $+1$, -1 და 0 . განზიდვის მდგომარეობა სამი შესაძლებლობით ხორციელ-



ნახ. 6. 8. ატომური ორბიტალების გადაფარვა σ და π ბმებისათვის.

ნახ. 6. 9. H_2 მოლეკულის დამაკავშირებელი და გამზიდავი σ ორბიტალები და მათი ენერგეტიკული დონეები.

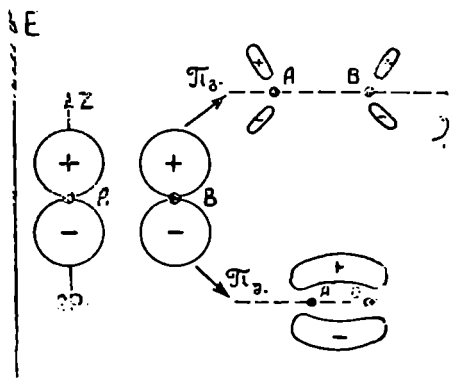
დება და მის ტრიპლეტური მდგომარეობა ეწოდება. ამგვარად, წყალბადის ატომების ურთიერთქმედების დროს, მხოლოდ ერთ შემთხვევაში ოთხიდან შეიქმნება მოლეკულა, ხოლო დანარჩენ სამ შემთხვევაში ადგილი ექნება განზიდვას.

როგორც აღენიშნეთ, კოვალენტური ბმის შექმნისას ატომური ორბიტალების გადაფარვას აქვს პირველხარისხოვანი მნიშვნელობა. ატომებს შორის კავშირი იქმნება იმ მიმართულებით, სადაც ელექტრონული სიმკვრივე გადაფარვის შედეგად მაქსიმალური ხდება. თუ ეს გადაფარვა მაქსიმალურია ატომების შემაერთებელი წრფის (მოლეკულის ღერძის) გასწვრივ, ბმას σ ბმა ეწოდება. თუ ელექტრონული ღრუბლების კონცენტრირება ხდება მოლეკულის ღერძის მართობულად, ადგილი აქვს π ბმას (ნახ. 6, 8). ტალღური ფუნქციების გადაფარვა σ ბმის დროს მეტია, ვიდრე π ბმის დროს; ამიტომ σ ბმის ენერგია ჰარბობს π ბმის ენერგიას.

საზოგადოდ, ორი ატომი, რომლებსაც თითო ელექტრონი გააჩნია. ქმნიან σ ბმას (H_2 , Li_2). ასეთივე ბმა შეიძლება წარმოიშვას ერთი ატომის s ელექტრონისა და მეორე ატომის p ელექტრონის შორის. მაგალითად, HCl -ის მოლეკულის შემთხვევაში ან ორ p ელექტრონის შორის Cl_2 , Br_2 და I_2 მოლეკულებში (ნახ. 6,8). H_2O მოლეკულაში (ნახ. 9,10) ორი σ ბმა, ხოლო მეთანის (CH_4) მოლეკულაში — ოთხი. σ ბმა ყოველთვის ერთმაგია. თუ ორ ატომს რამდენიმე ვალენტური ელექტრონი გააჩნია,

ისინი შექმნიან ორმაგ ან სამმაგ ბმებს. ამათგან ერთი იქნება σ ბმა, ხოლო დანარჩენები — π ბმები. მაგალითად, აზოტის ატომი სამვალენტურიანია და ორი აზოტის ატომის შეერთების შემთხვევაში მიიღება აზოტის მოლეკულა (N_2) სამმაგი ბმით. აქედან, ერთი იქნება σ ბმა, რომელიც წარმოიშობა ერთი წყვილი ელექტრონების მაქსიმალური გადაფარვით ატომბირთვების შემაერთებელი ხაზის გასწვრივ, ხოლო ელექტრონების დანარჩენი ორი წყვილი შექმნიან π ბმას.

6.9 ნახაზზე ნაჩვენებია S ატომური ორბიტალების გადაფარვა და σ ბმის შექმნა წყალბადის მოლეკულისათვის. ორი წყალბადის ატომის ურთიერთქმედების პროცესში დაწყვილებული ელექტრონები (ანტიპარალელური სპინებით) თავსდებიან ერთ დამაკავშირებელ σ ორბიტალზე და იქმნება წყალბადის მოლეკულა H_2 . ასეთ შემთხვევაში ამბობენ, რომ ადგილი აქვს მთლიან σ ბმას, რომელიც, რა თქმა უნდა, უფრო ძლიერია, ვიდრე ნახევარი σ ბმა, რომლის დროსაც ბმის σ ორბიტალზე იმყოფება მხოლოდ ერთი ელექტრონი (წყალბადის მოლეკულური იონი H_2^+).



ნახ. 6.10. π -ორბიტალების შექმნა $2P_z$ ორბიტალების ურთიერთქმედების შედეგად.

მთხვევაში (მოლეკულა, რომელიც ორი ერთნაირი ატომისაგან შედგება), გარდა S ელექტრონებისა, ბმაში მონაწილეობენ p ელექტრონებიც, რომელნიც ასევე თავსდებიან ბმისა და რღვევის σ და π ორბიტალზე (ნახ. 6.10).

ყველა დანარჩენი ჰომონუკლეარული მოლეკულის შემთხვევაში (მოლეკულა, რომელიც ორი ერთნაირი ატომისაგან შედგება), გარდა S ელექტრონებისა, ბმაში მონაწილეობენ p ელექტრონებიც, რომელნიც ასევე თავსდებიან ბმისა და რღვევის σ და π ორბიტალზე (ნახ. 6.10).

ჰიბრიდული ორბიტალები

თუ ატომს ერთი ტიპის ვალენტური ელექტრონები გააჩნია, მაგალითად, s ელექტრონები ან p ელექტრონები, მაშინ ბმები, რომლებსაც ის შექმნის, ასეთივე ატომთან ერთმანეთის ტოლფასი ან ეკვივალენტური ბმები იქნება. მაგრამ შეიძლება მოხდეს ისე, რომ ატომს s ელექტრონთან ერთად გააჩნდეს ერთი ვალენტური p ელექტრონი (sp ტიპის ვალენტო-

ბა) ან ორი და სამი p ელექტრონი (sp^2 , sp^3). მაგალითად, ნახშირბადის ატომს ძირითად მდგომარეობაში $(1s)^2 (2s)^2 (2p)^2$ ელექტრონული კონფიგურაცია გააჩნია, მაგრამ ყველა ქიმიურ რეაქციაში ნახშირბადი ოთხვალენტია და როგორც ჩანს, აქვს $(1s)^2(2s)(2p)^3$ ელექტრონების განაწილება. ასეთ შემთხვევაში ბმის შექმნაში მონაწილეობენ ერთი $2s$ ელექტრონი და სამი $2p$ ელექტრონი (sp^3), ამიტომ ნახშირბადის ატომის მიერ შექმნილი ბმები თითქოს ტოლფასი არ უნდა იყოს, ვინაიდან p ელექტრონების შესაბამისი ელექტრონული ღრუბლები ურთიერთმართობად არიან განლაგებული, ხოლო s ელექტრონი ხასიათდება განაწილების სფერული სიმეტრიით, მაგრამ, როგორც ცდები გვიჩვენებენ, ოთხივე ბმა, რომლებსაც ნახშირბადის ატომი ქმნის თავის მეზობელ ატომებთან, სრულიად ეკვივალენტურია და გარკვეული წესით განლაგებულია სივრცეში. ასე, მაგალითად, მეთანის (CH_4) მოლეკულაში ოთხივე წყალბადი მოთავსებულია ტეტრაედრის წვეროებში (ნახ. 9. 9 ა), რომლის ცენტრში ნახშირბადის ატომია განლაგებული, ხოლო შემაერთებული წრფეები (ბმები) ერთმანეთთან ქმნიან ტეტრაედრულ ($109^{\circ}28'$) კუთხეს. ბმების ასეთივე განლაგებით ხასიათდება ალმასის სტრუქტურა (ნახ. 6.1), სადაც თითოეული ნახშირბადის ატომი ტეტრაედრის წესით გარშემორტყმულია ისევ ნახშირბადის ატომებით.

ეს აიხსნება იმით, რომ მოლეკულებსა და ქიმიურ ნაერთებში ატომური sp , sp^2 და sp^3 მდგომარეობების ნაცვლად წარმოიშობიან ახალი ორბიტალები, რომლებიც ერთმანეთის ეკვივალენტური და სივრცეში სათანადოდ განლაგებული არიან. შესაბამისი ტალღური ფუნქციები მიიღება s , p , d , . ელექტრონულ მდგომარეობათა ფუნქციების წრფივი კომბინაციების შერჩევით. ამ ახალ ტალღურ ფუნქციებს, რომლებიც სხვადასხვა ტიპის ატომური ტალღური ფუნქციების წრფივი კომბინაციით მიიღებიან და აკმაყოფილებენ ეკვივალენტობის პირობას, ჰიბრიდული ელექტრონული ფუნქციები ან ჰიბრიდული ორბიტალები ეწოდება.

ნახშირბადის ატომის შემთხვევაში, როგორც დავინახეთ, $2s$, $2p_x$, $2p_y$, $2p_z$ ფუნქციების წრფივი კომბინაციით საჭიროა ოთხი ახალი (sp^3)_{ახალ} ორბიტალის მიღება, რომელნიც ერთმანეთის მიმართ ტოლფასი და ტეტრაედრული კუთხით განლაგებული იქნებიან. ამისათვის ვადგენთ აღნიშნული ფუნქციების წრფივი კომბინაციებს

$$(sp^3)_{\text{ახალ}} = a_i s + b_i p_x + c_i p_y + d_i p_z, \quad (6.34)$$

სადაც

$$i = 1, 2, 3, 4.$$

ვინაიდან ეკვივალენტობის შედეგად თითოეული ჰიბრიდული ორბიტალი s და p ფუნქციების ერთსა და იმავე წილს უნდა შეიცავდეს, ხოლო სათანადო ატომური ორბიტალის წილი ჰიბრიდულ ორბიტალში განისა-

ზღვრება შესაბამისი კოეფიციენტის კვადრატით ($a^2 \psi_s^2$), ამიტომ $a_1^2 = a_2^2 = a_3^2 = a_4^2 = \frac{1}{4}$. ასევე p ორბიტალის წვლილი განსაზღვრული იქნება წევრით $\frac{3}{4} \psi_p^2$ და (6.34) ფორმულაში კოეფიციენტები s, p_x, p_y, p_z ფუნქციების წინ იქნება $\pm \frac{1}{2}$. ნიშანი აქ დამოკიდებული იქნება კოორდინატთა სისტემის არჩევაზე. ჰიბრიდული ორბიტალები (sp^3) ერთმანეთთან ადგენენ ტეტრაედრულ კუთხეს. ასეთივე კუთხეს ქმნიან კუბის დიაგონალები, ამიტომ, თუ კოორდინატთა ღერძებად ავირჩევთ კუბის წახნაგების ცენტრებში გამავალ ღერძებს, ჰიბრიდული ორბიტალების შესაბამისი ელექტრონული ღრუბლები განლაგდება ოთხი კვადრანტის დიაგონალების გასწვრივ (ნახ. 6.11) და მიიღებენ სახეს:

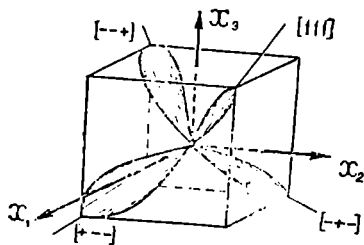
$$\psi_1 = \frac{1}{2}(s + p_x + p_y + p_z);$$

$$\psi_2 = \frac{1}{2}(s - p_x - p_y + p_z); \quad (6.35)$$

$$\psi_3 = \frac{1}{2}(s - p_x + p_y - p_z);$$

$$\psi_4 = \frac{1}{2}(s + p_x - p_y - p_z).$$

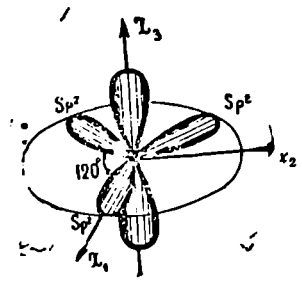
ამგვარად მიმართულ ოთხ ჰიბრიდულ sp^3 ორბიტალს ტეტრაედრული განლაგება ექნება და ისინი ერთმანეთთან შეადგენენ $109^{\circ}28'$ კუთხეს. ჰიბრიდული ორბიტალების შექმნა ენერგეტიკულად უფრო ხელსაყრელია, იმიტომ, რომ ენერგიის ხარჯვა, რომელიც დაკავშირებულია $2s$ ელექტრონის $2p$ ორბიტალზე გადაყვანასთან, იფარება ენერგიის მოგებით ოთხი ტოლფასი კოვალენტური ბმის შექმნის შედეგად.



ნახ. 6.11. ჰიბრიდული sp^3 ორბიტალები, რომელიც ერთმანეთთან ქმნიან ტეტრაედრულ კუთხეს.

გრაფიტსა და ზოგიერთ არომატულ ნახშირწყლებში ნახშირბადი უერთდება სამ უახლოეს მეზობელ ატომს, რომელნიც მასთან ერთად ერთ სიბრტყეში მდებარეობენ. ეს ატომები უკავშირდებიან ერთმანეთს 120° დაშორებული კოვალენტური σ ბმებით. ამ ბმებში მონაწი-

ლეობენ ნახშირბადის $2s$, $2p_x$ და $2p_y$ ატომური ორბიტალები, რომლებიც ქმნიან სამ ტოლფას ჰიბრიდულ ორბიტალს. $2p$ ორბიტალი ჰიბრიდიზაციაში არ მონაწილეობს. ამ ორბიტალებს ეწოდება sp^2 ჰიბრიდული ორბიტალები და ასეთ შემთხვევაში ამბობენ, რომ ადგილი აქვს ტრიგონალური sp^2 ტიპის ჰიბრიდიზაციას. ვინაიდან სამივე ბმაში ერთი s ელექტრონი და ორი p ელექტრონი თანაბრად მონაწილეობენ, მათი წილი თითოეულ ჰიბრიდულ ფუნქციაში იქნება



ნახ. 6.12. sp^2 ტიპის ჰიბრიდიზაცია ნახშირბადში.

$\frac{1}{3}s$ და $\frac{2}{3}p$. თუ კოორდინატა ღერძებს ავირჩევთ ისე, როგორც ნაჩვენებია 6.12 ნახაზზე და $(sp^2)_1$ ორბიტალს მივმართავთ x_1 კოორდინატა ღერძის პარალელურად, შეიძლება დაიწეროს

$$(sp^2)_1 = \sqrt{\frac{1}{3}}s + \sqrt{\frac{2}{3}}p_x. \quad (6.36)$$

როგორც ნახაზი გვიჩვენებს, დანარჩენ ორბიტალებში შევა როგორც p_x , ისე p_y ფუნქციების ნაწილები, რომელნიც განისაზღვრებიან (6.35)-ში შემავალი ფუნქციების შემობრუნებით 120° . რაც შეეხება p_z ელექტრონს, ის მეზობელი ატომების ასეთივე ელექტრონებთან შექმნის π ტიპის ბმას.

ერთი s და ერთი p ელექტრონის ურთიერთქმედებით იქმნება წრფივი (sp) ტიპის ბმა. ბმებს შორის კუთხე (ვალენტური) უდრის 180° , ხოლო სათანადო ჰიბრიდული ფუნქციები მიიღებენ შემდეგ სახეს

$$\psi_1 = \sqrt{\frac{1}{2}}(s+p); \quad \psi_2 = \sqrt{\frac{1}{2}}(s-p). \quad (6.37)$$

ასეთი სახის ბმები გვხვდება მოლეკულებში: BeF_2 , $ZnBr_2$, $ZnCl_2$ და ა. შ.

როგორც ვხედავთ, ჰიბრიდიზაციის ესა თუ ის ფორმა ხასიათდება ბმებს შორის გარკვეული კუთხის არსებობით. ასე, მაგალითად. sp^3 ჰიბრიდიზაციისათვის დამახასიათებელია ბმებს შორის კუთხე $109^\circ 28'$ sp^2 ჰიბრიდიზაციის დროს ბმები ერთ სიბრტყეში თავსდება 120° კუთხით, ხოლო ბმებს შორის 180° კუთხე და ატომების წრფივი განლაგება მოლეკულაში გვხვდება sp ჰიბრიდიზაციის დროს. ასევე, ბმების სახეები განსაზღვრავენ უახლოესი მეზობელი ატომების რიცხვს (კოორდინაციული რიცხვი). sp^3 ბმის დროს კოორდინაციული რიცხვი უდრის 4, sp^2 ბმის დროს — 3, ხოლო sp ბმაში — 2.

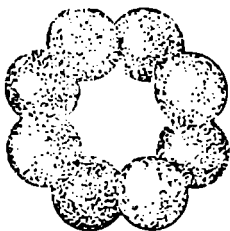
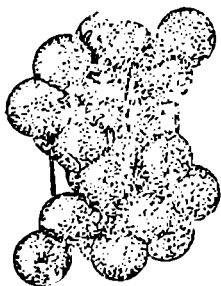
როგორც დავინახეთ, კოვალენტური ბმის დროს ატომი ცდილობს შეაგოს თავისი ელექტრონული გარსი რვა ელექტრონამდე, მეზობელი ატომების ელექტრონების გამოყენებით. ასეთ შემთხვევაში იქმნება ვალენტური ელექტრონების წყვილები, რომელნიც ერთდროულად ორივე ატომს ემსახურებიან. ცხადია, ასეთი წყვილების ან ბმების რიცხვი დამოკიდებული იქნება ვალენტური ელექტრონების რაოდენობაზე და თავის მხრივ განსაზღვრავს კოორდინაციულ რიცხვს, ე. ი. უახლოესი მეზობელი ატომების რაოდენობას თითოეული ატომის ირგვლივ. კოორდინაციული რიცხვი K , ამ შემთხვევაში, განისაზღვრება წესით: $K=8-N$, სადაც N ელემენტების პერიოდული სისტემის ჯგუფის ნომერია ან ელექტრონების რიცხვი ატომის გარე გარსში. გარდა ამისა, ვალენტური ბმისათვის დამახასიათებელია გარკვეული მიმართულება და სივრცობრივი განლაგება. ამიტომ კოვალენტური კრისტალის კრისტალური მესრის გეომეტრია ძირითადად განისაზღვრება კოორდინაციული რიცხვით და კოვალენტური ბმების სივრცობრივი განლაგებით.

ვალენტური ბმის შემთხვევაში კრისტალურ მესერს ატომური მესერი ეწოდება. უმარტივესი ატომური მესრები გვხვდება ქიმიურ ელემენტებს შორის, რომელნიც პერიოდული სისტემის $VIIB$, VIB , VB ქვეჯგუფებს ეკუთვნიან, და აგრეთვე ნახშირბადის, სილიციუმის, გერმანიუმისა და კალის სტრუქტურებში. ყველა აღნიშნული ელემენტი კრისტალიზდება $8-N$ წესის მიხედვით.

$VIIB$ ჯგუფში მოთავსებული არიან ჰალოგენები F , Cl , B , I . მათი კოორდინაციული რიცხვი უდრის ერთს. ამიტომ ამ ელემენტების კრისტალურ მესერში თითოეულ ატომს აქვს ერთი უახლოესი მეზობელი ატომი, რომელთანაც ის ცვლის ელექტრონს და ქმნის ორატომიან მოლეკულას. მაგალითად, იოდის მოლეკულაში (I_2), ორი p ელექტრონი σ ბმით უკავშირდებიან ერთმანეთს, ხოლო მოლეკულებს შორის მოქმედებს ვან-დერ-ვალსის ძალები.

6.13 ნახაზზე მოცემულაა იოდის ატომური მესერი. ნახაზზე ნათლად ჩანს I_2 მოლეკულები და მათი განლაგება. ვალენტური ბმის შედეგად, ჰალოგენების მოლეკულები საკმაოდ მდგრადია და ინარჩუნებენ თავს როგორც თხევად, ისე გაზურ ფაზებში, მაგრამ კრისტალური მესერი ვან-დერ-ვალსის ძალების მოქმედების შედეგად სუსტია და ხასიათდება დნობის დაბალი ტემპერატურით.

VIB ჯგუფის ელემენტების S , Se , Te კოორდინაციული რიცხვი $8-N$ წესის შესაბამისად ორია. ტელურისა და სელენის ჰექსაგონალურ მესრებში ატომები სპირალური ძეწყვების სახით განლაგებული არიან c ღერძის პარალელურად, ისე რომ თითოეულ ატომს აქვს ორი უახლოესი მეზო-

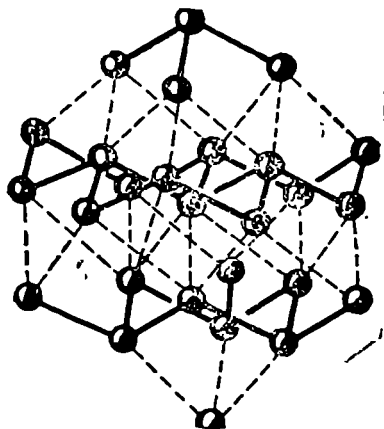


ნახ. 6.13. იოდის მესერი. რომბული ბაზოცენტრირებული უჯრედის კვანძებში მოთავსებულია I_2 მოლეკულები.

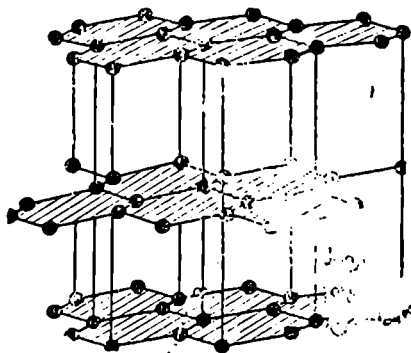
ნახ. 6.14. ა. რომბული გოგირდის S_8 მოლეკულის რგოლები, ბ. სელენის ატომების სპირალური განლაგება კრისტალურ მესერში.

ბელი, რომლებთანაც ის ორი ბმით არის დაკავშირებული (ნახ. 6.14 ბ). სპირალები ერთმანეთთან დაკავშირებულია ვან-დერ-ვაალსის ძალებით. რომბულ გოგირდში იქმნება ციკლური მოლეკულები S_8 რგოლების სახით (ნახ. 6.14 ა). ატომები თითოეულ რგოლში ორ ფენადაა განლაგებული, ისე რომ ერთ ფენაში მყოფ ატომს აქვს ორი უახლოესი მეზობელი მეორე ფენაში, მისგან დაცილებული 2.10 \AA . რგოლებს შორის მანძილი უდრის $3,3 \text{ \AA}$.

კრისტალურ დარიშხანს, ანთიმონს და ბისმუტს (VB ჯგუფი), $8 - N$ წესის თანახმად, აქვთ სამი უახლოესი მეზობელი ატომი. სამივე ელემენტი ქმნის ერთ და იმავე მესერს. ეს მესერი დიაგონალის გასწვრივ ოდნავ შეკუმშულ კუბს წარმოადგენს და ამიტომ ელემენტარული უჯრედი რომბოედრულია. თითოეული ატომი შეერთებულია თავის უახლოეს სამ მეზობელთან ბმებით, რომელნიც დაახლოებით სწორკუთხა პირამიდის ქმნიან მის ირგვლივ p ელექტრონების განაწილების შესაბამისად. ჯდარიშხანის კრისტალის მესერში ატომები განლაგებულია ფენებად, მაგრამ ფენა ჰორიზონტალური კი არ არის, არამედ ტალღურია და ორი შრისაგან შედგება (ნახ. 6.15). შრეებს შორისაც ბმები კოვალენტურია. ასე რომ, სამ უახლოეს მეზობელს გარდა ატომს აქვს კიდევ სამი მეზობელი ატომი, განლაგებულია ცოტათი უფრო შორს, მეორე შრეში.



ნახ. 6.15. ღარიშხანის (As) სტრუქტურა.



ნახ. 6.16. გრაფიტის ჰექსაგონალური მესერი.

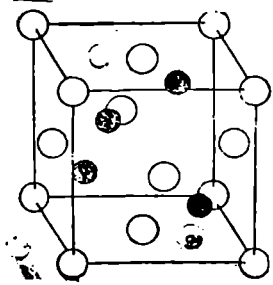
ნახშირბადი, სილიციუმი, გერმანიუმი და რუხი კალა IVB ჯგუფის ელემენტებია და მათი კრისტალური მესრის კოორდინაციული რიცხვი იქნება $8-4=4$. მართლაც, ყველა აღნიშნული ელემენტის მესერს აქვს ტეტრაედრული წყობა, ე. ი. თითოეული ატომის ირგვლივ განლაგებულია ოთხი უახლოესი მეზობელი. ალმასის სტრუქტურა განხილული იყო ზემოთ (ნახ. 6.1). ნახშირბადის ატომის ოთხი ვალენტური ელექტრონი ქმნის ოთხ σ ბმას და ადგილი აქვს sp^3 ტიპის ჰიბრიდიზაციას. იგივე ნახშირბადის მეორე მოდიფიკაცია — გრაფიტი წარმოადგენს sp^2 ჰიბრიდიზაციის მაგალითს. გრაფიტის სტრუქტურა ფენურია (ნახ. 6.16). ფენაში ატომი დაკავშირებულია მეზობლებთან სამი σ ბმით, რომლებიც ერთმანეთთან 120° კუთხით არიან განლაგებული. მეოთხე ელექტრონი $2p_z$ ორბიტალზეა და მისი ელექტრონული სიმკვრივის განაწილების რვიანი ფენის სიბრტყის მართობია. ეს ელექტრონები ქმნიან π ბმებს. ამგვარად, იქმნება მდგომარეობა, როდესაც ერთი ატომის ელექტრონი π ბმით არის დაკავშირებული სამი მეზობელი ატომის შესაბამის ელექტრონებთან. ასეთ შემთხვევაში, π ელექტრონები ლოკალიზებული აღარ იქნებიან და თანაბრად ნაწილდებიან მთელ ფენაში. ეს ელექტრონები განაპირობებენ გრაფიტის მაღალ ელექტროგამტარობას.

არჩევენ ორი სახის გრაფიტს: ჰექსაგონალურს (ნახ. 6.16), როდესაც მესამე ფენა იმეორებს პირველ ფენას, და რომბოედრულს, სადაც პირველი ფენა მეორდება მეოთხე ფენის მიერ. ორივე შემთხვევაში სტრუქტურა ფენოვანია და ფენებს შორის მოქმედებს ვან-დერ-ვალსის ძალები, ამი-

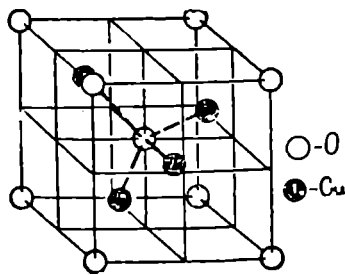
ტომ თუ ფენაში ატომებს შორის მანძილი $1,42\text{\AA}$ ტოლია, ფენებს შორის ის $3,40\text{\AA}$ აღწევს.

კოორდინაციულ მესრებს ქმნიან არა მარტო წმინდა ნივთიერებები, არამედ მათი ნაერთებიც. ასე, მაგალითად, ტეტრაედრული კოორდინაციის ტიპს წარმოადგენს სფალერიტის (ZnS) კრისტალური მესერი (ნახ. 6.17). ეს მესერი ალმასის ტიპისაა, მხოლოდ აქ წახნაგდაცენტრებული უჯრედი შედგება გოგირდის ატომებისაგან, ხოლო შიგა პატარა კუბების ცენტრებში, თითო კუბის გამოტოვებით, მოთავსებულია თუთიის ატომები. ისე, რომ თითოეული გოგირდის ატომი ტეტრაედრულად გარშემორტყმულია თუთიის ოთხი ატომით, ხოლო თუთიის ატომი იმავე წესით — ოთხი გოგირდის ატომით. აქედან ჩანს, რომ ამ შემთხვევაში, როგორც თუთიის, გირდის ატომები ჰიბრიდიზებულია sp^3 ტიპის მიხედვით. ასეთი სახის კომპლექსური მესერი კრისტალიზდება მრავალი ქიმიური ნაერთი და მათ შორის ჰალოგენიდები, სულფიდები, სელენიდები, ტელურიდები და მრავალი სხვა.

ზოგიერთ შემთხვევაში კრისტალში შეიძლება ადგილი ექნეს ბმებს, რომლებიც სხვადასხვა ტიპის ჰიბრიდიზაციასთან არიან დაკავშირებული. მაგალითად, კუპრიტის (Cu_2O) კრისტალურ მესერში ჟანგბადის ატომები ქმნიან მოკულობითად ცენტრირებულ უჯრედს, ხოლო სპილენძის ოთხი ატომის განლაგებისათვის ეს კუბი უნდა გაიყოს 8 მცირე კუბად და სპილენძის ატომები მოთავსდეს მცირე კუბების ცენტრებში თითოს გამოკლებით. მიღებულ სტრუქტურაში (ნახ. 6.18) ჟანგბადის თითოეული ატომის ირგვლივ ტეტრაედრულად თავსდება სპილენძის ოთხი ატომი და, მაშასადამე, ხდება sp^3 ტიპის ჰიბრიდიზაცია, ხოლო კოორდინაციული რიცხვი უდრის 4. სპილენძის ატომი თავსდება ორ ჟანგბადის ატომს შორის sp ტიპის ჰიბრიდიზაციის შესაბამისად. კოორდინაციული რიცხვი ამ შემთხვევაში უდრის 2. როგორც ჩანს, ეს სტრუქტურა მთლიანად განისაზღვრება ჰიბრიდული ატომური ორბიტალების ხასიათით და განლაგებით.



ნახ. 6.17. ZnS —სფალერიტის მესერი.



ნახ. 6.18. Cu_2O —კუპრიტის მესერი.

შეკიდულობის ძალები, რომლებიც მოქმედებენ ნაწილაკებს შორის ნებისმიერ მყარ სხეულში, შეიძლება განვიხილოთ როგორც მიზიდვისა და განზიდვის ძალების ერთობლივი მოქმედების შედეგი. წონასწორობის მდგომარეობაში ორივე სახის ძალები კომპენსირდება. როდესაც ნაწილაკებს შორის მანძილი იზრდება, ამ ძალების მოქმედება საერთოდ სუსტდება, მაგრამ, როგორც ცდები გვიჩვენებენ, განზიდვის ძალების შემცირება ხდება უფრო სწრაფად, ვიდრე მიზიდვის. ძალიან მცირე მანძილებისათვის განზიდვის ძალები საგრძნობლად იზრდება.

მიზიდვისა და განზიდვის ძალები კოვალენტური ბმის დროს წარმოიშობიან ატომური ორბიტალების გადაფარვის შედეგად, როდესაც ხდება წყვილი ელექტრონების განზოგადება. ასეთ შემთხვევაში, ბირთვებს შორის სივრცეში ელექტრონული მუხტის სიმკვრივე იზრდება და იწვევს ბირთვების მჭიდრო დაკავშირებას.

არის კიდევ ქიმიური ბმის მეორე სახე, როდესაც ელექტრონების განზოგადება კი არ ხდება, არამედ ერთი ელემენტის ატომი ცდილობს უშუალოდ მიითვისოს მეორე ნივთიერების ატომის ელექტრონი და ამით შეაფსოს თავისი ელექტრონული გარსი. ასეთ შემთხვევაში ატომი, რომელმაც დაკარგა ელექტრონი, იმუხტება დადებითად და იქცევა დადებით იონად, ხოლო ატომი, რომელმაც ეს ელექტრონი მიითვისა, — უარყოფით იონად. თუ კრისტალური მესერი აგებულია ასეთი სახის იონებისაგან, მას იონური მესერი ეწოდება. ნებისმიერი ორი i და j იონი $z_i e$ და $z_j e$ მუხტით მიიზიდებიან ან განზიდებიან თავისი მუხტების კულონური ურთიერთქმედების შედეგად. ამ ურთიერთქმედების პოტენციური ენერგია ტოლი იქნება $\frac{z_i z_j e^2}{r_{ij}}$ სიდიდის.

გარდა ამისა, იონებს შორის არსებობს კიდევ დამატებითი მიზიდვა, გამოწვეული იმით, რომ იონი მოთავსებული სხვა იონების ელექტრულ E ველში, პოლარიზდება და ემსგავსება პატარა დიპოლს მომენტით $p = aE$. აქ a იონის პოლარიზებადობაა. მაგრამ ეს დამატებითი ურთიერთქმედება იმდენად მცირეა კულონურ მიზიდვასა და განზიდვასთან შედარებით, რომ შესაძლებელია მისი უგულებელყოფა.

იონებს შეუძლიათ შექმნან მდგრადი კრისტალური მესერი, თუ ისინი განლაგდებიან ისე, რომ ელექტროსტატიკური მიზიდვა საწინააღმდეგო ნიშნის იონებს შორის იქნება მეტი, ვიდრე ერთი და ი გივე ნიშნის იონების განზიდვა. ასე, რომ იონური კავშირი ძირითადად გაპირობებულია საწინააღმდეგო ნიშნის იონებს შორის ელექტროსტატიკური მიზიდვის ძალებით. როდესაც მანძილი იონებს შორის ძალიან მცირდება და იწყება ელექტრონული გარსების გადაფარვა, თავს იჩენს განზიდვის ძალების მოქმედება,

რომლებიც მანძილის შემცირებასთან ერთად სწრაფად იზრდებიან. ამიტომ კრისტალურ მესერში იონები ერთიმეორისაგან გარკვეულ მანძილებზე თავსდებიან. ეს მანძილი შეესაბამება წონასწორობას მიზიდვისა და განზიდვის ძალებს შორის.

თუ კოვალენტური ბმისათვის ტალღური ფუნქცია ψ_1 (6.22) ერთნირი ალბათობით აღწერდა მდგომარეობებს, როდესაც ელექტრონი (1) იმყოფება a ბირთვთან, ხოლო ელექტრონი (2) b ბირთვთან, ან, პირიქით, ელექტრონი (1) b ბირთვთან, ხოლო ელექტრონი (2) a ბირთვთან, იონური ბმის ამსახავი ψ_2 ფუნქცია არის სუპერპოზიცია ორი მდგომარეობისა, რომელთაგან ერთი აღწერს შემთხვევას, როდესაც ორივე ელექტრონი a ბირთვთან არის, ხოლო მეორე — შემთხვევას, როდესაც ორივე ელექტრონი არის b ბირთვთან.

ამიტომ

$$\psi_2 = c_1 \psi_a(1) \psi_a(2) + c_2 \psi_b(1) \psi_b(2). \quad (6.38)$$

აქ c_1 და c_2 კოეფიციენტები შესაბამისი იონური მდგომარეობის წონებს წარმოადგენენ. მათი განსაზღვრა შესაძლებელია ψ_2 ფუნქციის ნორმირების პირობიდან

$$\int |c_1 \psi_a(1) \psi_a(2) + c_2 \psi_b(1) \psi_b(2)|^2 d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 = 1. \quad (6.39)$$

ან, ვინაიდან, ψ_a და ψ_b ფუნქციები ნორმირებულია, მივიღებთ

$$c_1^2 + c_2^2 + 2c_1 c_2 S = 1. \quad (6.40)$$

სადაც

$$S = \int \psi_a(1) \psi_b(1) d\mathbf{v}_1 = \int \psi_a(2) \psi_b(2) d\mathbf{v}_2. \quad (6.41)$$

(6.40) განტოლება საშუალებას იძლევა განისაზღვროს c_2 კოეფიციენტი, როგორც c_1 და S კოეფიციენტების ფუნქცია $c_2 = f(c_1, S)$. ახლა (6.38) განტოლებაში შევა მხოლოდ კოეფიციენტი c_1 , რომელიც შეიძლება ჩავწეროთ ინდექსის გარეშე.

$$\psi_2 = c \psi_a(1) \psi_a(2) + f(c_1 S) \psi_b(1) \psi_b(2) \quad (6.42)$$

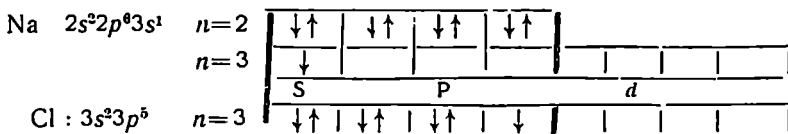
ან

$$\psi_2 = c (\psi_a + \delta \psi_b). \quad (6.43)$$

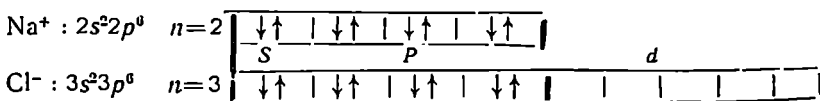
თუ, მაგალითად, $|\delta| > 1$, მაშინ მოლეკულურ $\psi_a + \delta \psi_b$ ორბიტალში b ატომის ψ_b ატომურ ორბიტალს ექნება მეტი წონა, ვიდრე ψ_a ორბიტალს. ეს იმას ნიშნავს, რომ ვალენტური ელექტრონი მეტ დროს იქნება b ატომის მახლობლობაში და ამიტომ ელექტრონული სიმკვრივე ამ ატომის მახლობლად გაიზრდება. მუხტების ასეთი პოლარიზაციის შედეგად წარმოიშობა ელექტრული დიპოლური მომენტი, რომლის სიდიდე δ -ზე იქნება დამოკიდებული. დიპოლური მომენტის არსებობა ძირითადად განასხვავებს კოვალენტური (პომეოპოლარული) ტიპის მოლეკულას იონური (ჰეტერო-

პოლარული) ტიპის მოლეკულისაგან. როდესაც $|\delta| < 1$, ელექტრონული მუხტის ასეთივე სიჭარბეს ადგილი ექნება a ბირთვის მახლობლად და ა. შ. ვინაიდან (6.43)-ში ψ_a და ψ_b ფუნქციები აღწერენ წმინდა იონურ მდგომარეობებს, თუ $\delta = 0$, განხორციელდება მხოლოდ ერთი მათგანი, ე. ი. ორივე ვალენტური ელექტრონი იმობილავებს a ბირთვის ირგვლივ და ის გადაიქცევა უარყოფითად დამუხტულ იონად (ანიონი), ხოლო b ბირთვი დაკარგავს ელექტრონს და დაიმუხტება დადებითად (კათიონი). საწინააღმდეგო ნიშნით დამუხტულ იონებს შორის ძირითადად იმოქმედებს ელექტროსტატიკური ძალები, რომელთა ზეგავლენითაც შეიქმნება A^-B^+ ტიპის ჰეტეროპოლარული მოლეკულა (მაგალითად, Na^+Cl^-).!

როგორც დაკვირვება გვიჩვენებს, ცალკეული ატომების იონიზაციის ხარისხი იონურ მესერაში ისეთია, რამ იონიზაციის შედეგად ატომის ელექტრონული გარსი მაქსიმალურად ემსგავსება ინერტული გაზების ატომების ელექტრონულ გარსს. ასე, მაგალითად, Na და Cl ატომების ელექტრონული გარსი ნეიტრალურ მდგომარეობაში არის:

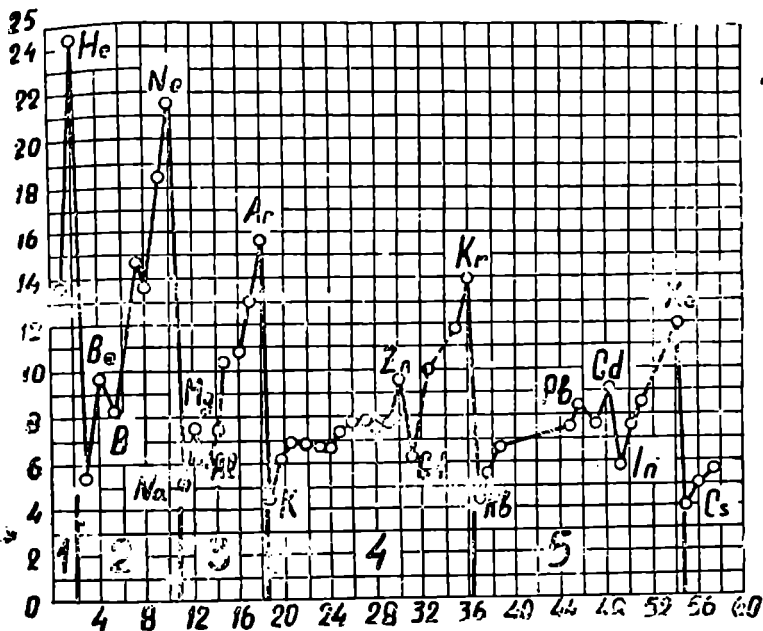


NaCl-ის კრისტალში იონიზაციის შედეგად მათი ელექტრონული გარსი ხდება



რაც დამახასიათებელია ნეონისა და არგონის ატომებისათვის.

ატომის მიერ ელექტრონის მთვისების ან დაკარგვის თვისება დამოკიდებულია ორ სიდიდეზე: 1. იონიზაციის პოტენციალზე და 2. ელექტრონისადმი ნათესაობაზე. იონიზაციის პოტენციალი განისაზღვრება იმ ენერგიით, რომელიც უნდა დაიხარჯოს, რომ ნეიტრალურ ატომს მოცილდეს ერთი პერიფერიული ელექტრონი და შეიქმნას დადებითი იონი. ცხადია, რაც უფრო ნაკლებია იონიზაციის პოტენციალი, მით უფრო დაკარგავს ატომი ელექტრონს და გახდება დადებითი იონი. იონიზაციის პოტენციალის მინიმალური მნიშვნელობა აქვს ტუტე ლითონებს, რომელთა ელექტრონულ გარსშიც მხოლოდ ერთი ვალენტური ელექტრონია (ნახ. 6.19). იონიზაციის პოტენციალის მაქსიმალური მნიშვნელობა აქვთ ინერტულ გაზებს, ვინაიდან მათი ატომების ვალენტური გარსები შევსებული (ns^2p^6) და მდგრადია. ყოველ პერიოდში, დაწყებული ტუტე ლითონიდან დამ-



ნახ. 6.19. იონიზაციის პოტენციალის დამოკიდებულება ელემენტის ატომური რიგობრივი ნომრიდან.

თავრებული ინერტული გაზით, იონიზაციის პოტენციალი იზრდება, რაც გამოწვეულია ბირთვის მუხტის გადიდებით და ვალენტური ელექტრონის და ბირთვის ურთიერთქმედების ზრდით. მცირე მაქსიმუმები პერიოდის შიგნით დაკავშირებულია p ან d გარსების შევსებასთან.

მეორე სიდიდე, რომელიც მნიშვნელოვან როლს ასრულებს ატომის იონიზაციის პროცესში, არის ელექტრონისადმი ნათესაობა. ეს სიდიდე განისაზღვრება იმ ენერგიით, რომელიც გამოიყოფა ნეიტრალური ატომის მიერ, როდესაც ის შეიერთებს ელექტრონს და გახდება უარყოფითი იონი. ყველაზე დიდ ნათესაობას ელექტრონისადმი იჩენენ ჰალოგენები (4—3 ev). როდესაც ჰალოგენის ატომი შეიერთებს დამატებით ელექტრონს, იესება ერთი ვაკანტური ადგილი p გარსში და ჩნდება 8 ელექტრონიანი მდგრადი კონფიგურაცია (ინერტული გაზების ატომების ელექტრონული გარსების მსგავსად).

ატომების ურთიერთქმედების დროს, უაღრესად დიდი მნიშვნელობა ენიჭება ატომის უნარს გასცეს ან მიიერთოს ვალენტური ელექტრონი. ცხადია, რომ ეს უნარი მოცემული ატომისათვის დამოკიდებულია იონი-

ზაციის პოტენციალზე და ელექტრონისადმი ნათესაობაზე. ეს ორი სიდიდე შეიძლება გაერთიანდეს ერთ მახასიათებელში, რომელსაც ელექტროუარყოფითობა ეწოდება. ელექტროუარყოფითობა ფარდობითი სიდიდეა იმის გამო, რომ ერთმა და იმავე ატომმა შეიძლება წაართვას ელექტრონი ერთ ატომს და, პირიქით, მეორე ატომთან ურთიერთქმედების დროს მისცეს მას ეს ელექტრონი. ელექტროუარყოფითობის მიახლოებით ზომად იღებენ იონიზაციის პოტენციალისა და ელექტრონისადმი ნათესაობის ენერჯის ნახევარჯამს:
$$\text{ეუ} = \frac{\text{იპ} + \text{ენ}}{2}$$

თუ ელემენტებს დავალაგებთ მათი ელექტროუარყოფითობის ზრდის მიხედვით, მივიღებთ ელემენტების ელექტროუარყოფითობათა რიგს. ამ რიგის დასაწყისში მოთავსებული იქნება ელემენტები, რომლებსაც მცირე იონიზაციის და ნათესაობის ენერჯიები აქვთ და ამიტომ იოლად ქმნიან დადებით იონებს. ასეთ ელემენტებს პირველ რიგში ტუტე ლითონები წარმოადგენენ. რიგის ბოლოს (მარჯვნივ) მოთავსდება ჰალოგენები, რომელთა ელექტრონისადმი ნათესაობის ენერჯია დაჟ იონიზაციის პოტენციალი მაღალია. ისინი ქმნიან უარყოფით იონებს. ამგვარად, ქიმიურ ნაერთში ატომები, რომელნიც რიგის მარცხენა ნაწილში იქნებიან, აძლევენ თავის ელექტრონებს ატომებს, რომელნიც რიგის მარჯვენა ნაწილში დგანან. მაგალითისათვის მოგვყავს ამ რიგის რამდენიმე ელემენტი:

K, Na, Mg, Be, Al, Zn, Cd, Se, I, Br, Cl, F.

სინამდვილეში წმინდა იონური ან კოვალენტური ხასიათის ბმები კრისტალებში არ გვხვდება. ისეთ მოლეკულაშიც კი, როგორც NaCl მოლეკულაა, იონურ ურთიერთქმედებასთან ერთად, მცირე რაოდენობით, ადგილი აქვს ვალენტურ ურთიერთქმედებას. თუ, მაგალითად, ურთიერთქმედებს ორი ატომი, რომლებსაც თითო ვალენტური ელექტრონი გააჩნია, მაშინ პრინციპულად შესაძლებელია როგორც ელექტრონის განზოგადება და ჰომეოპოლარული (კოვალენტური) ბმის შექმნა, ისე ელექტრონის გადასვლა ერთი ატომიდან მეორესთან და იონური ბმის წარმოშობა. ამრიგად, აქ საქმე გვაქვს ორ ზღვრულ მდგომარეობასთან, რომელთა შორის შესაძლებელია არსებობდნენ ნებისმიერი საშუალებლო მდგომარეობები, რომლებიც მეტნაკლებად გადახრილი იქნებიან ერთ ან მეორე მხარეს. სხვაგვარად რომ ვთქვათ, რეალური ბმები ყოველთვის წარმოადგენენ ზღვრულ მდგომარეობათა სუპერპოზიციას, ე. ი. თუ იონურ მდგომარეობას აღწერს $\psi_{\text{იონ}}$ ფუნქცია, ხოლო კოვალენტურს — $\psi_{\text{კოვ}}$, მაშინ სისტემის მარეზულტირებელ მდგომარეობას აღწერს ψ ფუნქცია, რომელიც აღნიშნულ ფუნქციათა წრფივ კომბინაციას წარმოადგენს: $\psi = c_1 \psi_{\text{კოვ}} + c_2 \psi_{\text{იონ}}$, ან,

თუ სათანადო მდგომარეობათა c_1 და c_2 წონების შეფარდებას აღვნიშნავთ λ ასოთი, მივიღებთ

$$\psi = \psi_{\text{კოვ}} + \lambda \psi_{\text{იონ}} \quad (6.44)$$

აქ პარამეტრი λ იცვლება საზღვრებში: $0 \leq \lambda \leq 1$ და წმინდა კოვალენტურ ბმას შეესაბამება მნიშვნელობა $\lambda = 0$.

§ 25. იონური კრისტალები და მათი სტრუქტურა

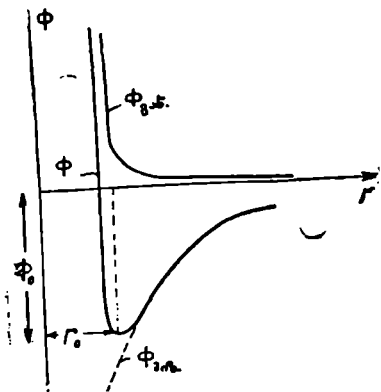
როდესაც ვლაპარაკობთ იონურ კრისტალებზე, იგულისხმება კრისტალური მესერი, რომლის კვანძებში განლაგებულია სხვადასხვა ნიშნის იონები. ასეთი ტიპის კრისტალებიდან ყველაზე მარტივ და ამავე დროს გავრცელებულ ნივთიერებას წარმოადგენს NaCl; მისი კრისტალური მესერი ნაჩვენებია 2.17 ნახაზზე. მესრის კვანძებში რიგრიგობით თავსდება ნატრიუმის დადებითი (Na^+) და ქლორის უარყოფითი (Cl^-) იონები. თითოეული ნიშნის იონი ქმნის წახნაგდაცენტრებულ კუბურ მესერს. ეს კუბები ერთმანეთის მიმართ წანაცვლებული არიან ნახევარი პერიოდით.

იონური ტიპის მესრებს ვხვდებით აგრეთვე NaBr, KCl, KBr, CsCl, KI, CsBr, LiF და მრავალ სხვა ნივთიერებათა კრისტალებში. უმთავრესად ეს შენაერთები სტექიომეტრიული შემადგენლობის არიან: A_x , $A_x B_y$, $A_2 X_3$, $A X_2$ და ა. შ. მაგალითად: NaCl, CaF_2 , Fe_2O_3 და ა. შ.

გამოვთვალოთ $A^+ B^-$ ტიპის მოლეკულის შექმნაზე დახარჯული ენერგია NaCl-ის მაგალითზე. დავეუშვათ, რომ გვაქვს ერთიმეორისაგან დაცილებული Na და Cl ნეიტრალური ატომები. იმისათვის, რომ Na ატომიდან მივიღოთ Na^+ იონი, საჭიროა მოვაცილოთ მას ერთი ელექტრონი, ე. ი. დავხარჯოთ ენერგია, რომელიც ნატრიუმის იონიზაციის პოტენციალის ტოლია და უდრის 5.1 eV. ქლორის იონის Cl^- შექმნის დროს, პირიქით, გამოიყოფა ენერგია, რომელიც ქლორის ელექტრონისადმი ნათესაობის ენერგიის ტოლია (3.7 eV). ამიტომ სულ ამ იონების შექმნაზე დაიხარჯება ენერგია

$$5,1 - 3,7 = 1,4 \text{ eV.}$$

თუ იონები დაუახლოვდებიან ერთმანეთს, მათ შორის აღიძვრება მიზიდვის ელექტროსტატიკური ძალები. ენერგია, რომელიც გამოიყოფა Na^+ და Cl^- იონებისაგან, $\text{Na}^+ \text{Cl}^-$ მოლეკულის შექმნის დროს განისაზღვრება — $\frac{e^2}{r}$ სიდიდით და უდრის 5,7 eV ($r = 2,5 \text{ \AA}$). ამგვარად, ნეიტრალური ატომებისაგან იონური $\text{Na}^+ \text{Cl}^-$ მოლეკულის შექმნის ენერგია $5,7 - 1,4 = 4,3 \text{ eV}$ იქნება.



ნახ. 6.20. ორ იონს შორის ურთიერთქმედების $\Phi(r)$ ენერჯიის დამოკიდებულება მათ შორის r მანძილისაგან.

მიზიდვის ძალების ზეგავლენით იონები ცდილობენ მაქსიმალურად დაახლოვდნენ, მაგრამ ახლო მანძილებზე იწყება განზიდვის ძალების მოქმედება და საბოლოო მანძილი, რომელიც იონებს შორის მოლეკულაში მყარდება, გაპირობებულია ამ ძალების გაწონასწორებით და სისტემის ენერჯიის მინიმუმით. იონური მესრის ენერჯია, (2.14 — 17) თანახმად, შეიძლება დაიწეროს შემდეგი სახით

$$\Phi = N \left(-\frac{e^2}{r} \alpha + \frac{B}{r^n} \right), \quad (6.45)$$

როგორც (6.45) ფორმულა გვიჩვენებს, იონების ურთიერთქმედების ენერჯია შეიძლება წარმოვიდგინოთ როგორც მიზიდვისა და გა-

ზიდვის პოტენციური ენერჯიების ჯამი. 6.20 ნახაზზე მოყვანილია ამ ენერჯიების იონებს შორის მანძილისაგან დამოკიდებულების მრუდები. მრუდი (Φ) ორი იონის ურთიერთქმედების სრულ პოტენციურ ენერჯიას გამოხატავს და მინიმუმის მქონე მრუდს წარმოადგენს. ამ მინიმუმის მდებარეობა განსაზღვრავს ნაწილაკებს შორის წონასწორულ (r_0) მანძილს, ხოლო სიღრმე — ორი იონის ბმის ენერჯიას. წონასწორობის მდგომარეობაში, როდესაც

$$r=r_0, \quad \frac{d\Phi}{dr} = 0 \text{ და, მაშასადამე, } \frac{e^2 \alpha}{r_0^2} - \frac{Bn}{r_0^{n+1}} = 0; \text{ აქედან}$$

$$B = -\frac{e^2 \cdot r_0^{n-1}}{n} \alpha. \quad (6.46)$$

შევიტანოთ B -ს მნიშვნელობა (6.45) ფორმულაში, მაშინ

$$\Phi_0 = -\frac{Ne^2}{r_0} \alpha \left(1 - \frac{1}{n} \right). \quad (6.47)$$

თუ მოცემულია მადელუნგის მუდმივა α , ენერჯიის გამოთვლისათვის საჭიროა ვიცოდეთ n სიდიდე, რომელიც განსაზღვრავს განზიდვის ძალების პოტენციალს. ცნობილი B და n სიდიდეებისათვის შესაძლებელია წონასწორული r_0 მანძილის განსაზღვრა, თუმცა სინამდვილეში ხდება პირიქით. ექსპერიმენტულად უშუალოდ იზომება r_0 და მისი საშუა-

ლებით, თუ მოცემულია n , ლებულობენ განზიდვის B კოეფიციენტს. n -ის შეფასება შესაძლებელია კრისტალის კუმშვადობის ექსპერიმენტული გაზომვების გზით. კუმშვის კოეფიციენტი გამოისახება შემდეგი სახით

$$k = -\frac{1}{v} \frac{dv}{dp}; \quad (6.48)$$

აქ $v = Nr^3$, ხოლო r მანძილია ორ უახლოეს იონს შორის, p წნევაა, რომელიც განისაზღვრება ტოლობით:

$$d\Phi = -p dv \quad \text{ან} \quad \frac{dp}{dv} = -\frac{d^2\Phi}{dv^2}$$

ღა

$$\frac{1}{k} = v \frac{d^2\Phi}{dv^2}. \quad (6.49)$$

მაგრამ

$$\frac{d\Phi}{dv} = \frac{d\Phi}{dr} \frac{dr}{dv}; \quad \frac{d^2\Phi}{dv^2} = \frac{d\Phi}{dr} \frac{d^2r}{dv^2} + \frac{d^2\Phi}{dr^2} \left(\frac{dr}{dv}\right)^2$$

წონასწორობის დროს $r=r_0$ და $\frac{d\Phi}{dr} = 0$, ხოლო $\left(\frac{dr}{dv}\right)^2 = \frac{1}{9N^2r^4}$, ე.ი.

$$\frac{1}{k} = \frac{1}{9Nr_0} \left(\frac{d^2\Phi}{dr^2}\right)_{r_0} \quad (6.50)$$

ახლა ვისარგებლოთ (6.45) ფორმულით და გამოვთვალოთ $\frac{d^2\Phi}{dr^2}$; მაშინ, (6.46)-ის გამოყენებით, საბოლოოდ მივიღებთ

$$k = \frac{9r_0^4}{e^2(n-1)\alpha} \quad (6.51)$$

ამ ფორმულით შესაძლებელია n -ის გამოთვლა, ვინაიდან k , e , r_0 იზომებიან ექსპერიმენტულად, ხოლო მადელუნგის მუდმივას გამოთვლის მეთოდი განხილული იყო ზემოთ. (6.1) ცხრილში მოცემულია მადელუნგის მუდმივას მნიშვნელობები რამდენიმე ტიპური სტრუქტურისათვის.

თუ ვისარგებლებთ ექსპერიმენტულად დადგენილი კუმშვის კოეფიციენტებით, შესაძლებელია განვსაზღვროთ n . ასე, მაგალითად, LiF კრისტალისათვის $n=5,9$; NaCl-ისათვის — 9,4, ხოლო NaBr-ის კრისტალისათვის — 9,5 და ა. შ.

მსუბუქი იონებისათვის n ნაკლებია,

ტ ხ რ ი ლ ი 6.1

კრისტალი	α
NaCl	1,748
CsCl	1,763
ვიურცატი	1,641
სფალერიტი	1,638
ფლუორიტი	1,680

ვიდრე მძიმე იონებისათვის. სადაც მისი მნიშვნელობები იცვლება 8—10 ფარგლებში.

6.2 ცხრილში მოცემულია თეორიულად გამოთვლილი და ექსპერიმენტულად გაზომილი კრისტალური მესრის ენერგიები ზოგიერთი ტუტე-ჰალოგენური ნივთიერების კრისტალებისათვის (მეიერის მიხედვით).

თანამედროვე გამოკვლევები, ძირითადად, ადასტურებენ იმ წარმოდგენას იონებს შორის მოქმედი ძალების შესახებ, რომელნიც საფუძვლად უდევს იონური მესრის ენერგიის განსაზღვრისათვის ბორნის მიერ შემოღებულ (6.45) ფორმულას. შემდეგში ბორნმა და მაიერმა განზიდვის ძალების მანძილისაგან დამოკიდებულების დასახასიათებლად შემოიღეს

ექსპერიმენტული გამოსახულება $Be^{-\frac{r}{\rho}}$, სადაც B და ρ მუდმივების განსაზღვრა, ისევე როგორც წინათ, ხდებოდა ექსპერიმენტულად კუმშვა-ღობის კოეფიციენტების საფუძველზე. ახალი დამოკიდებულების უპირატესობა მდგომარეობდა იმაში, რომ ის თეორიულად უფრო დაფუძნებული იყო და, რაც მთავარია, ρ მნიშვნელობის ცვალებადობა ხდებოდა გაცილებით ნაკლებ საზღვრებში, ვიდრე იცვლებოდა n სიდიდე წინა ფორმულაში. ამ წარმოდგენების საფუძველზე შესაძლებელი ხდება კრისტალური მესრის მდგრადობის, სტრუქტურის ტიპის, მესერში იონების ზომებისა და მთელი რიგი სხვა საკითხების განხილვა.

ც ხ რ ი ლ ი 6.2

კრისტალი	მესრის პარამეტრი A	მესრის ენერგია კკალ/მოლ	
		თეორიული მნიშვნელობა	ექსპერიმენტული მნიშვნელობა
NaCl	5,63	183,1	182,8
NaBr	5,96	174,6	173,3
NaI	6,28	165,4	164,4
KBr	5,59	159,3	156,2
KJ	7,05	150,8	151,5
CsCl	4,11	152,2	155,1
CsBr	4,29	146,3	148,6

იონების ზომები. იონური რადიუსები

ტუტე ლითონებისა და ჰალოგენების იონებს აქვთ ისეთივე ელექტრონული კონფიგურაციები, როგორც ინერტული გაზების ატომებს, რომლებიც შეესებოდა ელექტრონული გარსებით და მუხტის განაწილების სფერული სიმეტრიით ხასიათდებიან. ამიტომ მოსალოდნელია, რომ თითოეული იონის მუხტის განაწილება იონურ კრისტალში დაახლოებით სფერულად სიმეტრიული იქნება. თუ ინერტული გაზების ატომე-

ბისაგან განსხვავებით იონებს შორის მაინც აქვს ადგილი ჭიმოურ ურთიერთქმედებას, ეს აიხსნება იმით, რომ ისინი დამუხტულები არიან და ელექტრული მუხტები განაპირობებენ მიზიდვის ან განზიდვის ძალების არსებობას მათ შორის.

ცხადია, რომ სფერულად სიმეტრიულ იონებს არ გააჩნიათ ურთიერთქმედების განსაკუთრებული მიმართულება. თითოეული იონი ცდილობს მიიახლოოს საწინააღმდეგო ნიშნის რაც შეიძლება მეტი იონი და, მაშასადამე, შექმნას სტრუქტურა, რომლის კოორდინაციული რიცხვი (საწინააღმდეგო ნიშნის უახლოესი მეზობელი იონების რაოდენობა) იქნება მაქსიმალურად დიდი. ამავე მიზეზით იონურ ბმას, კოვალენტური ბმისაგან განსხვავებით, არ ახასიათებს ნაჯერობა. საწინააღმდეგო ნიშნის იონების რაოდენობა, რომელსაც მოკემული იონი შემოიკრებს თავის ირგვლივ, დამოკიდებულია მხოლოდ მათ ფარდობით ზომებზე. წინასწარ შეიძლება ითქვას, რომ ანიონი, რომელმაც მიიერთა დამატებითი ელექტრონები, თავისი ზომით უფრო დიდი იქნება, ვიდრე კათიონი, რომელმაც ეს ელექტრონები დაკარგა. ამიტომ იონური კრისტალის შენების პროცესში ანიონები წარმოადგენენ იმ საშენ მასალას, რომლითაც სტრუქტურის ძირითადი მონახაზი იქმნება.

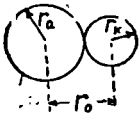
მეორე მხრივ, რო გორც დავინახეთ, იონების ურთიერთქმედების პროცესში მიზიდვისა და განზიდვის ძალების მოქმედების შედეგად, იონებს შორის მყარდება გარკვეული წონასწორული მანძილი (r_0), რომელიც (6.46) თანახმად, განისაზღვრება შემდეგი ფორმულით

$$r_0 = \left(\frac{nB}{\alpha e^2} \right)^{\frac{1}{n-1}} \quad (6.52)$$

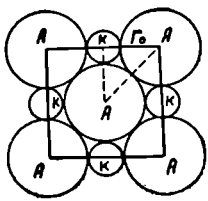
სფერულად სიმეტრიულ იონებს შორის წონასწორული მანძილის არსებობა საშუალებას იძლევა თითოეული იონი წარმოვიდგინოთ გარკვეული რადიუსის მქონე მოქმედების სფეროს სახით. ამ სფეროს რადიუსს იონური რადიუსი ეწოდება. ცხადია, რომ კრისტალური სტრუქტურის შექმნის დროს, იონები ერთმანეთს ეხებიან მოქმედების სფეროებით და ამიტომ იონური რადიუსების ჯამი წონასწორული მანძილის ტოლი უნდა იყოს (ნახ. 6.21-ა). თუ ანიონის რადიუსს აღვნიშნავთ r_a , ხოლო კათიონის — r_k , მაშინ

$$r_a + r_k = r_0. \quad (6.53)$$

ამგვარად, იონური კრისტალების სტრუქტურის განხილვის დროს იონებს წარმოვიდგენთ როგორც სხვადასხვა რადიუსის უკუმშვად სფეროებს. ასეთი წარმოდგენა, რა თქმა უნდა, მიახლოებითია, მაგრამ რიგი თვისებითი ხასიათის დასკვნებისათვის უაღრესად სასარგებლოა. აქვე უნდა შევნიშნოთ, რომ არ შეიძლება იონური რადიუსისა და იონის ბირთ-



ა.



ბ.

ნახ. 6.21. ა. წონასწორული მანძილი $r_0 = r_a + r_k$.
 ბ. ელემენტარული უჯრედის ზომები განისაზღვრება ანიონების ზომებით, რომელნიც ეხებიან ერთმანეთს [NaCl].

ბში ორი სხვადასხვა ნიშნის იონს შორის წონასწორული r_0 მანძილის გაზომვის საფუძველზე რენტგენოდიფრაქციული მეთოდების გამოყენებით. მაგრამ, მხოლოდ ეს მონაცემები იონების რადიუსების დასადგენად საკმარისი არ არის. საჭიროა კიდევ ვიციოდეთ რომელიმე ერთი იონის რადიუსი მაინც. მართლაც, რენტგენოსტრუქტურული ანალიზის საშუალებით შესაძლებელია განისაზღვროს მხოლოდ ანიონისა (r_a) და კათიონის (r_k) რადიუსების ჯამი (წონასწორული მანძილი), მაგრამ რა რადიუსი აქვს თითოეულ იონს, ცალ-ცალკე ამის თქმა შეუძლებელია.

აღმოჩნდა, რომ შესაძლებელია იონური რადიუსების დადგენა ყველა ელემენტისათვის, თუ ცნობილია მანძილი ანიონსა და კათიონს შორის რამდენიმე ნივთიერებისათვის. ასეთი სახის სამუშაო პირველად ჩაატარა ლანდემ, რომელმაც ანიონების რადიუსების გამოსათვლელად აიღო NaCl-ის ტიპის სტრუქტურის მქონე კრისტალები დიდი ანიონებით და პატარა კათიონებით. ასეთ ნივთიერებებს მიეკუთვნებიან: MgO, სადაც მანძილი ანიონსა და კათიონს შორის უდრის 2,10Å; MgS — 2,60Å; MgSe — 2,73Å; MnO — 2,24Å; MnS — 2,59Å; MnSe — 2,73Å. ეს მანძილები (იონებს შორის) დადგენილია რენტგენოგრაფიულად. NaCl-ის ელემენტარული უჯრედის წვეროებსა და წახნაგების ცენტრებში მოთავსებულია Cl⁻ დიდი ანიონები, ხოლო Na⁺ პატარა კათიონები თავსდებიან ანიონებს შორის (ნახ. 6.21ბ). ასეთ შემთხვევაში ანიონები ეხებიან ერთმეორეს და განაპირობებენ მესრის ზომებს, ალებულ ნივთიერებებისათვის ეს იქნება O²⁻, Se²⁻, S²⁻.

თუ შევადარებთ ატომთა შორის მანძილებს MgO=2,10Å და MnO=2,24Å, შეიძლება დავასკვნათ, რომ მანგანუმის იონი მეტია, ვიდრე მაგნიუმის იონი. მაგრამ მანძილებიდან MgSe=2,73Å და MnSe=2,73Å

ვიდან მის გარე ელექტრონულ გარსამდე მანძილების გაიგივება. იონური რადიუსი ეფექტური რადიუსია, რომელიც იონის მოქმედების სფეროს შეიძლება მიეწეროს და რომლის შემოღება ეყრდნობა იონებს შორის წონასწორული მანძილის არსებობას.

ეს მანძილი უშუალოდ ექსპერიმენტულად იზომება. იონური რადიუსების დადგენა შესაძლებელია კრისტალებში

ჩანს, რომ ამ სტრუქტურებში ატომთა შორის მანძილს განსაზღვრავს სელენის დიდი ანიონები (ნახ. 6.21 ბ). აქედან შეიძლება განისაზღვროს ორვალენტიანი სელენის რადიუსი, რომელიც ტოლია $Se^{2-} = \frac{2,73 \sqrt{2}}{2} =$

$= 1,92 \text{ \AA}$. იგივე ითქმის MgS და MnS შენაერთების მიმართ, რომლებიც გვაძლევს საშუალებას გოგირდის ანიონის რადიუსის გამოთვლისათვის $S^{2-} = 1,83 \text{ \AA}$.

ახლა, როდესაც ცნობილია ორი ანიონის რადიუსი, შესაძლებელია მონახოს კათიონების რადიუსები ისეთ შენაერთებში, სადაც ეს ცნობილი ანიონები შედიან და სრულდება პირობა (6.53). ასე, მაგალითად: $MgS = 2,60 \text{ \AA}$; $S^{2-} = 1,83 \text{ \AA}$; აქედან $Mg^{2+} = 0,77 \text{ \AA}$; $MgO = 2,10 \text{ \AA}$; $O^{2-} = 1,33 \text{ \AA}$ და ა. შ. ასეთი წესით მოიძებნა ყველა იმ ელემენტის იონური რადიუსები, რომლებიც ქმნიან $NaCl$ -ის ტიპის სტრუქტურას. ასეთი სტრუქტურის კოორდინაციული რიცხვი არის 6. შემდეგში ასეთივე სახის გამოთვლები ყველა ელემენტისათვის ჩაატარა გოლდშმიტმა. მის გამოთვლებს საფუძვლად დაედო ფტორის (1.33) და ქანგბადის (1.32) იონური რადიუსების მნიშვნელობები, რომლებიც მიღებულია ვაზაშერნას მიერ რენტგენოკრისტალური მონაცემებიდან. შემდეგში პოლინგმა შეადგინა სხვადასხვა მუხტის მქონე იონების რადიუსების ცხრილი. 6.22 ნახაზზე ნაჩვენებია ამ რადიუსების სიდიდეები გრაფიკულად.

როგორც ნახაზი გვიჩვენებს, პერიოდული სისტემის პერიზონტალურ მწკრივებში იონების რადიუსები მცირდება მათი მუხტის (ვალენტობის) ზრდასთან ერთად. ასე, მაგალითად: $K^+ - 1,33 \text{ \AA}$, $Ca^{2+} - 1,04 \text{ \AA}$, $Sc^{3+} - 0,83 \text{ \AA}$; $Ti^{4+} - 0,64 \text{ \AA}$, $V^{5+} - 0,4 \text{ \AA}$ და ა. შ.

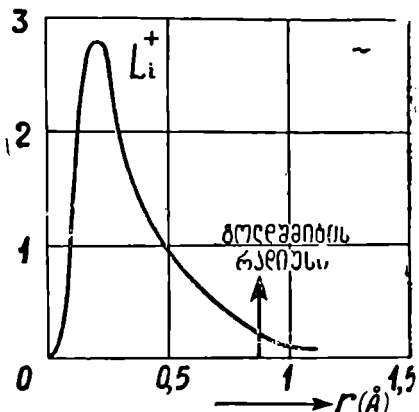
ვერტიკალურ სვეტებში იონური რადიუსები იზრდება რიგითი ნომრის ზრდასთან ერთად: $Li^+ - 0,68 \text{ \AA}$, $Na^+ - 0,98 \text{ \AA}$, $K^+ - 1,33 \text{ \AA}$, $Rb^+ - 1,49 \text{ \AA}$, $Cs^+ - 1,65 \text{ \AA}$. ეს ზრდა დაკავშირებულია ელექტრონული გარსებისა და მაშასადამე მთლიანად ატომის ზომების გადიდებასთან.

გამონაკლისს წარმოადგენენ ლანთანიდები. აქ რიგითი ნომრის ზრდის დროს ლანთანიდან (57) ლუტეციამდე (71) შეიმჩნევა იონური რადიუსების შემცირება: $La^{3+} - 1,04 \text{ \AA}$, ხოლო $Lu^{3+} - 0,80 \text{ \AA}$. ამ მოვლენას „ლანთანიდური შეკუმშვა“ ეწოდება. ანალოგიური ეფექტი აღმოჩენილია პერიოდული სისტემის ბოლო ელემენტებისათვის დაწყებული აქტინიმიდან (89) და, წინა მოვლენის მსგავსად მას „აქტინიდური შეკუმშვა“ ეწოდება.

იონური რადიუსების მნიშვნელობები, გამოთვლილი სხვადასხვა ავტორის მიერ (გოლდშმიდტი, პოლინგი, ბელოვი და ბოკი, არენსი) თან-

-2	-1	+1	+2	+3	+4	+5	+6
		Li	Be	B	C	N	O
		Na	Mg	Al	Si	P	S
		K	Ca	Sc	Ti	V	Cr
		Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se
		Rb	Sr	Y	Zr	Cd	Hg
		Au	Bd	In	Sn	Sb	Te
		Cs	Ba	La	Ce		
		Pu	Hg	Tl	Ph	Bi	

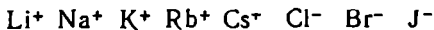
ნახ. 6.22. იონების ზომები პოლინგის მისედევით.



ნახ. 6.23. მუხტის განაწილება Li^+ იონში გილერასის და ბეტეს მისედევით და იონური რადიუსის მდებარეობა.

ხელებიან ერთმანეთს 2—3% სიზუსტით, მაგრამ ყველა შემთხვევაში ისინი წარმოადგენენ მოქმედების სფეროების შეხების ადგილებს და ეყრდნობიან კრისტალებში იონებს შორის წონასწორული მანძილების გაზომვით მიღებულ ექსპერიმენტულ მონაცემებს. შესაძლებელია შევადაროთ ასეთი სახით მიღებული რადიუსების მნიშვნელობები იონების ელექტრონული მუხტის სიმკვრივის განაწილებას, რომელიც გამოთვლილია თანამედროვე კვანტური მექანიკის მეთოდებით. 6.23 ნახაზზე მოყვანილია ელექტრონული სიმკვრივის ბირთვიდან მანძილზე დამოკიდებულების მრუდი ლითიუმის იონისათვის (Li^+) მიღებული გილერასისა და ბეტეს მიერ. ამავე ნახაზზე ნაჩვენებია გოლდშმიდტის რადიუსის მნიშვნელობა Li^+ იონისათვის, რომელიც უდრის $0,78 \text{ \AA}$.] რა თქმა უნდა, ელექტრონული სიმკვრივის მისედევით აქ არ შეიძლება რაიმე კონკრეტულ რადიუსზე ლაპარაკი, მაგრამ უნდა აღანიშნოს, რომ იონური რადიუსის შესაბამისი ხაზი მოთავსებულია იმ ადგილზე, სადაც ელექტრონული სიმკვრივე პრაქტიკულად ნულს უახლოვდება. ეს იმას ნიშნავს, რომ იონური რადიუსების თავის თავად არ აქვთ ზუსტი ფიზიკური მნიშვნელობა და ისინი მხოლოდ დაკავშირებული არიან კრისტალებში იონებს შორის წონასწორული მანძილის არსებობასთან.

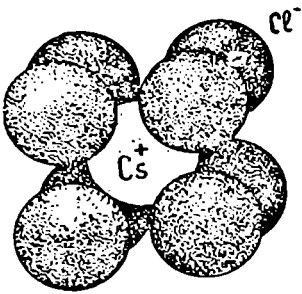
აქამდე იონი წარმოდგენილი იყო როგორც უკუმშვადი სფერო, რომლის შიგნითაც უარყოფითი მუხტების ცენტრი თანხვედრა დადებითად დამუხტული ბირთვის ცენტრს. მაგრამ, როგორც ზემონათქვამიდან ჩანს, ასეთი დაშვება მხოლოდ მიახლოებითია. სინამდვილეში კრისტალურ მესერში მოთავსებული იონზე მოქმედებენ მეზობელი იონების, მუხტები. მეზობელი მუხტების მიერ შექმნილი ველის გავლენით ხდება დადებითად დამუხტული ბირთვის წანაცვლება უარყოფითად დამუხტული ელექტრონული გარსის ცენტრის მიმართ, იონი კარგავს სფერულ ფორმას და იქცევა ელექტრულ დიპოლად. ამ მოვლენას იონების პოლარიზაცია ეწოდება. იონის პოლარიზაციის დახასიათება შესაძლებელია დიპოლური მომენტით, რომელიც Z ვალენტობის მქონე იონისათვის Zel სიდიდის ტოლია და ველის დაძაბულობის პროპორციულია: $Zel = \alpha E$; α კოეფიციენტი იონის პოლარიზებადობა ეწოდება. პოლარიზებადობა იონის ბუნებისაგან არის დამოკიდებული. რამდენადაც მეტია იონის რადიუსი და ნაკლებია მისი მუხტი, მით უფრო ადვილად მოხდება ასეთი იონის პოლარიზაცია. ამის გამო, დიდი რადიუსის ანიონები ადვილად პოლარიზდებიან, ხოლო მცირე რადიუსის კათიონები — ნაკლებად. სამაგიეროდ, მცირე ზომისა და დიდი მუხტის კათიონები ძლიერ მოქმედებენ თავის მეზობელ ანიონებზე და ახდენენ მათ პოლარიზაციას. ამგვარად, შეიძლება ითქვას, რომ იონის პოლარიზებადობა მისი რადიუსის პირდაპირპროპორციულია, ხოლო მეზობელი იონების პოლარიზაციის უნარი რადიუსის უკუპროპორციულ სიდიდეს წარმოადგენს. მაგალითად, მწკრივში:



$$r = 0,68 \ 0,95 \ 1,33 \ 1,49 \ 1,65 \ 1,81 \ 1,96 \ 2,20$$

რადიუსის ზრდასთან ერთად იზრდება პოლარიზებადობა და ძვირდება სხვა იონების პოლარიზაციის უნარი,

იონების პოლარიზაცია იწვევს დადებითი და უარყოფითი მუხტების ცენტრების წანაცვლებას, რის შედეგად იონების ცენტრები უახლოვდებიან ერთმანეთს და მანძილი იონებს შორის მცირდება მათი ეფექტური რადიუსების ჯამთან ($r_a + r_k$) შედარებით. ასე, მაგალითად, თუ ავიღებთ ერთნაირი სტრუქტურის მქონე ნივთიერებას $AgCl$ და $AgBr$, დავინახავთ, რომ ვერცხლის ქლორიდისათვის ($AgCl$) იონებს შორის გაზომილი მანძილი უდრის $2,77\text{Å}$, ხოლო რადიუსების ჯამი $r_{Ag} + r_{Cl} = 2,94\text{Å}$;

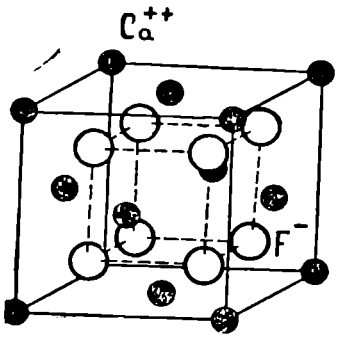


ნახ. 6.24. CsCl ის მესერი, როგორც სფერული იონების წყობა.

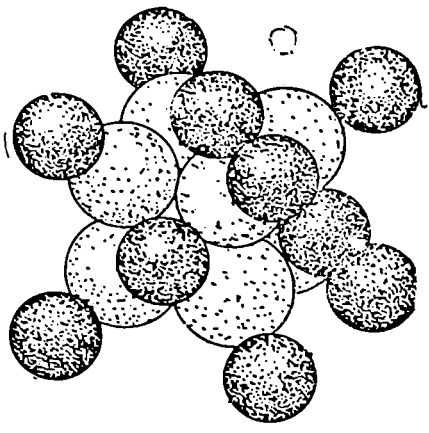
AgBr-ში გაზომილი მანძილი $2,88\text{\AA}$ ხოლო რადიუსების ჯამი $3,09\text{\AA}$ და ა. შ. ქიმიურ ნაერთში, რადიუსების ჯამთან შედარებით, იონებს შორის მანძილების შემცირების მიხედვით შეიძლება ვიმსჯელოთ იმაზე, თუ რამდენად პოლარიზებულ მდგომარეობაში იმყოფება იონები ამ ნივთიერებაში.

როგორც აღვნიშნეთ, პოლარიზაცია იწვევს იონის დეფორმაციას და ამის შედეგად — მისი სფერული ფორმის შეცვლას. ცხადია, რომ ეს

დეფორმაცია დამოკიდებული იქნება უახლოესი იონების რიცხვსა და მათ განლაგებაზე. საწინააღმდეგო ნიშნის იონების რიცხვს, რომლებიც მოცემული იონის ირგვლივ არიან განლაგებული და უშუალოდ ეხებიან მას, ამ იონის კოორდინაციული რიცხვი ეწოდება. რაც უფრო დიდია კოორდინაციული რიცხვი, მით ნაკლებად იქნება შესამჩნევი იონის დეფორმაცია, და, პირიქით, დაბალი კოორდინაციის სტრუქტურებში დეფორმაციას მკაფიოდ მიმართული ხასიათი ექნება. იზოლირებულ ორატომიან მოლეკულაში პოლარიზაცია მაქსიმალურია და კოორდინაციული რიცხვი, ამ შემთხვევაში, უდრის 1.



ნახ. 6.25. ფლუორიტის (CaF_2) მესერი; ა. ელემენტარული უჯრედი, ბ. სფეროების წყობა.



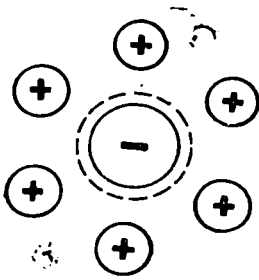
სა მაგალითად, AB ტიპის ქიმიური ფორმულის მქონე ნივთიერებებში ორივე იონის კოორდინაციული რიცხვები ყოველთვის ერთნაირია. ასე, მაგალითად, ნატრიუმის ქლორიდის კრისტალურ მესერში, როგორც Na^+ ისე Cl^- კოორდინაციული რიცხვი უდრის 6. ცეზიუმის ქლორიდის (CsCl) სტრუქტურაში (ნახ. 6.24) ორივე იონის კოორდინაციული რიცხვი უდრის 8, ხოლო ZnS -ის მესერში თუთიის თითოეული ატომი მოთავსებულია ტეტრაედრის ცენტრში, რომლის წვეროებში გოგირდის 4 ატომი იმყოფება და პირიქით. ამიტომ კოორდინაციული რიცხვი ორივესათვის უდრის 4. AB_2 ტიპის ქიმიურ ნივთიერებებში ერთი იონის კოორდინაციული რიცხვი ყოველთვის ორჯერ მეტია მეორე იონის კოორდინაციულ რიცხვზე. მაგალითად, ფლუორიტის (CaF_2) სტრუქტურულ ტიპში Ca^{++} კათიონის კოორდინაციული რიცხვი უდრის 8 და ორჯერ მეტია F ანიონის კოორდინაციულ რიცხვზე, რომელიც ოთხს უდრის (ნახ. 6.25).

იონურ კრისტალებში თითოეული იონი ცდილობს მიიზიდოს საწინააღმდეგო ნიშნის იონების მაქსიმალური რიცხვი და შემქნას მაღალი კოორდინაციის სტრუქტურა. ასეთ სტრუქტურებში იონების დეფორმაციებიც მინიმალურია და მათი ფორმაც სფერულს უახლოვდება. კოორდინაციული რიცხვის ზრდასთან ერთად იონებს შორის A—B მანძილის ცალმხრივად შემცირების შესაძლებლობა მცირდება და, პირიქით. როგორც 6.26 ნახაზი გვიჩვენებს, ასეთ შემთხვევაში, მოსალოდნელია ამ მანძილის ზრდა. გოლდშმიტმა დეტალურად შეისწავლა იონური რადიუსების კოორდინაციული რიცხვისაგან დამოკიდებულების საკითხი. ამ გამოკვლევის შედეგი მოყვანილია 6.3 ცხრილში.

ცინაიდან იონურ კრისტალებში კოორდინაცია 6 ყველაზე მეტად არის გავრცელებული, ამიტომ ამ კოორდინაციისათვის A—B მანძილი აღებულია 100%. კოორდინაცია 8 უკვე იწვევს მანძილის 3% ზრდას. ამავე მიზეზით ყველა ცხრილში მოყვანილი იონური რადიუსები აღებულია კოორდინაციული რიცხვის 6-ის ტოლი მნიშვნელობისათვის. თუ გვინდა ვიპოვოთ იონებს შორის მანძილი სხვა კოორდინაციული რიცხვისათვის, საჭიროა სათანადო შესწორების შეტანა (6.3) ცხრილის მიხედვით.

თუ კოორდინაციული რიცხვი გავლენას ახდენს იონურ რადიუსზე, თავის მხრივ, იონური რადიუსებიც მოქმედებენ კოორდინაციული რიცხვის მნიშვნელობაზე. კერძოდ, იონურ კრისტალებში კოორდინაციული რიცხვის შესაძლებელი მნიშვნელობები განისაზღვრება ანიონებისა და კათიონების რადიუსების თანაფარდობით. ამავე თანაფარდობასთან დაკავშირებულია სხვადასხვა კოორდინაციის მქონე სტრუქტურების გეომეტრიული მდგრადობის საკითხი.

დავუშვათ, რომ კრისტალურ სტრუქტურას ქმნიან ანიონები, რომლებიც წარმოდგენილი არიან მოზრდილი (r_a) რადიუსის სფეროებით,

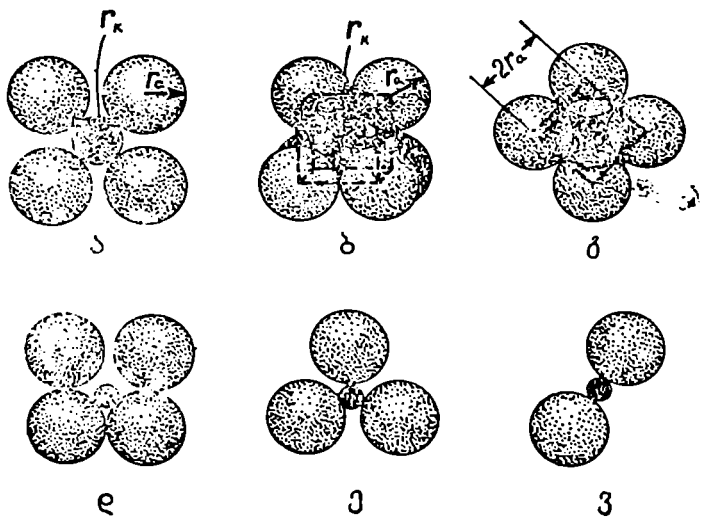


კოორდინაციული რიცხვი	მანძილი A—B, %
12	112
8	103
6	100
4	94

ნახ. 6. 26. იონის პოლარიზაცია კრისტალში.

და მცირე რადიუსის (r_k) კათიონი, რომელიც მოთავსებულია ცენტრში (ნახ. 6.27). ცხადია, რომ ანიონების შესაძლებელი რიცხვი, რომელიც შეიძლება განლაგდეს კათიონის ირგვლივ (კოორდინაციული რიცხვი),

დამოკიდებულია ანიონებისა და კათიონის შეფარდებით ზომებზე. ასეთი წყობა იქნება მდგრადი მხოლოდ იმ შემთხვევაში, როდესაც თითოეული იონი ეხება მხოლოდ საწინააღმდეგო ნიშნის იონს (6.27-ა). მაგალითად, ანიონები მოთავსებულია კუბის წვეროებში, ხოლო კათიონი — კუბის ცენტრში. მაშინ ისინი ეხებიან ერთმანეთს მხოლოდ კუბის დიაგონალებზე და კოორდინაციული რიცხვი უდრის 8 (CsCl ტიპის სტრუქტურა). მანძილი ანიონსა და კათიონს შორის კუბის დიაგონალის გას-



ნახ. 6.27. ა, ბ, გ — სტრუქტურის მდგრადობის დადგენა 8 და 6 კოორდინაციის დროს. დ, ე, ვ — კათიონის ზომების შემცირება იწვევს კოორდინაციის შეცვლას.

წვრივ უდრის $r_a + r_k$. თუ ანიონების ზომებს გავადიდებთ, ბოლოს და ბოლოს, ისინი კათიონის გარდა კიდევ ერთმანეთსაც შეეხებიან და სტრუქტურა უკვე ნაკლებად მდგრადი გახდება (6.27ბ). კუბის წიბო ახლა $2r_a$ სიდიდის ტოლია და მოცემული კოორდინაციისათვის წარმოადგენს იონების დაახლოების ქვედა საზღვარს. ნახაზი გვიჩვენებს, რომ ანიონების შეხების დროს გვაქვს ტოლობა

$$\frac{r_a + r_k}{2r_a} = \frac{\sqrt{3}}{2}.$$

აქედან

$$\frac{r_k}{r_a} = \sqrt{3} - 1 = 0,73.$$

ამგვარად, ფარლობა $\frac{r_k}{r_a} = 0,73$, განსაზღვრავს CsCl-ის ტიპის სტრუქტურის წარმოშობის ქვედა საზღვარს. ასეთი ტიპის სტრუქტურა შეიძლება არსებობდეს მხოლოდ, როდესაც $\frac{r_k}{r_a} \geq 0,73$. თუ $\frac{r_k}{r_a} < 0,73$, კათიონს

უკვე არ შეუძლია ერთდროულად შეეხოს რვა ანიონს და კოორდინაციული რიცხვი მცირდება ექვსამდე. ეს ექვსი ანიონი თავსდება ოქტაედრის წვეროებში, ხოლო კათიონი — მის ცენტრში (6,27 გ). კვადრატის დიაგონალის სიგრძე $2(r_a + r_k) = 2\sqrt{2} r_a$; აქედან, $\frac{r_k}{r_a} = \sqrt{2} - 1 = 0,41$. ეს იმას ნიშნავს, რომ NaCl-ის ტიპის მესრის არსებობისათვის საჭიროა სრულდებოდეს პირობა $\frac{r_k}{r_a} \geq 0,41$.

ასეთივე გზით შეიძლება გამოვიყვანოთ კრისტალური სტრუქტურების მდგრადობის გეომეტრიული საზღვრები ყველა სხვა კოორდინაციული რიცხვისათვის. ეს მონაცემები შეჯამებულია 6.4 ცხრილში.

ც ხ რ ი ლ ი 6. 4.

კოორდინაციული რიცხვი	იონების განლაგების სახე	$\frac{r_k}{r_a}$
2	განტელი	0—0,15
3	სამკუთხედი	0,15—0,22
4	ტეტრაედრი	0,22—0,41
6	ოქტაედრი	0,41—0,73
8	კუბი	0,73—1,37

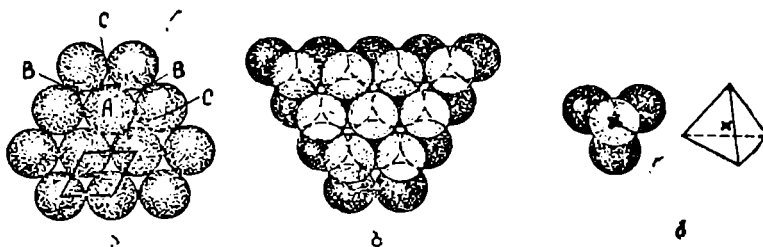
თუ კათიონის ზომები შემცირდება ანიონებს შორის არსებულ სივრცესთან შედარებით (ნახ. 6.27 დ), სტრუქტურა გახდება არამდგრადი იმის გამო, რომ კათიონს ექნება თავისუფლად მოძრაობის საშუა-

ლება და გარკვეულ მომენტში შეუძლია მიუახლოვდეს ერთ ჯგუფ ანიონებს და დასცილდეს სხვებს. ეს გამოიწვევს ანიონების გადაჯგუფებას და კოორდინაციის შეცვლას (ნახ. 6.27 ე). ასეთივე პროცესის შედეგად წარმოიშობა ანიონების განტელისმაგვარი განლაგება (ნახ. 6.27 ვ), კოორდინაციული რიცხვით 2.

სფეროების უმჭიდროესი წყობა

ზემოთ ნაჩვენები იყო, რომ ატომები და იონები, რომლებიც შეადგენენ კრისტალების ძირითად საშენ მასალას, მრავალ შემთხვევაში მოქმედებენ ისე, როგორც გარკვეული რადიუსის მქონე უკუმშვადი სფეროები. ამის გამო, ზოგიერთი ნივთიერების კრისტალური სტრუქტურა შეიძლება გავიგოთ, თუ წარმოვიდგენთ, რომ ის მიღებულია ასეთი სფეროების მჭიდროდ დაწყობის შედეგად. ეს სფეროები მიიზიდებიან კულონური, ვან-დერ-ვაალსური ან სხვა რომელიმე ძალებით და ამის გამო ცდილობენ მოთავსდნენ ერთმანეთის მიმართ რაც შეიძლება მჭიდროდ, ისე, რომ მათ შორის მანძილს ჰქონდეს მინიმალური მნიშვნელობა, ხოლო თითოეული სფერო გარშემორტყმული იყოს მეზობელი სფეროების მაქსიმალურად შესაძლებელი რიცხვით. სფეროების ასეთ წყობას, რომელიც პოტენციური ენერჯის მინიმუმით ხასიათდება, სფეროების უმჭიდროესი წყობა ეწოდება (ნახ. 6.28).

ცხადია, რომ სფეროების უმჭიდროესი წყობას გააჩნია კომპაქტურობის კოეფიციენტის ყველაზე დიდი მნიშვნელობა. კომპაქტურობის კოეფიციენტი წარმოადგენს ერთ ელემენტარულ უჯრედში შემავალ სფეროების მოცულობის შეფარდებას უჯრედის სრულ მოცულობასთან, რომელიც სფეროების მოცულობასთან ერთად შეიცავს მათ შორის არსე-



ნახ. 6.28. ა. ერთნაირი რადიუსის სფეროების ფენა უმჭიდროესი წყობის დროს. ბ. მეორე ფენის სფეროები თავსდება პირველი ფენის C ტიპის ჩაღრმავებებში. გ. პირველი და მეორე ფენის სფეროების ცენტრები ქმნიან სწორ ტეტრაედრს, რომლის შიგნით მოთავსებულია ტეტრაედრული სი-ცარიელი.

ბული სიცარიელების $BCBC\dots$ მოცულობასაც. თუ v ელემენტარული უჯრედის მოცულობაა და მასში მოთავსებულია r რადიუსის n სფერო, მაშინ. კომპაქტურობის კოეფიციენტის განსაზღვრის თანახმად

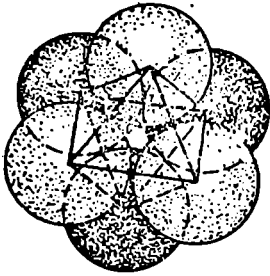
$$q = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3 \cdot n}{v}. \quad (6.58)$$

ნებისმიერი სტრუქტურისათვის, რომელიც სფეროების უმჭიდროესი წყობის პრინციპით არის აგებული, კომპაქტურობის კოეფიციენტი $q=0,74$, ე. ი. სივრცე შევსებულია $74,05\%$ -ით.

ერთ ფენად (სიბრტყეზე) ერთნაირი რადიუსის მქონე სფეროების კომპაქტურად დალაგება შესაძლებელია მხოლოდ ერთი საშუალებით (ნახ. 6.28 ა). ასეთ შემთხვევაში თითოეული სფერო ეხება ექვს მეზობელ სფეროს (კოორდინაციული რიცხვი უდრის 6) და მის ირგვლივ იქმნება ექვსი სამკუთხა სიცარიელე. სამკუთხა სიცარიელე ერთდროულად ეკუთვნის სამ სფეროს და ამიტომ თითოეულ სფეროზე მოდის ამ სიცარიელის მხოლოდ $\frac{1}{3}$. სამკუთხა სიცარიელების რიცხვი, რომელიც მოცემულ სფეროს ეკუთვნის, იქნება $6 \times \frac{1}{3} = 2$, და, მაშასადამე, ორჯერ მეტია, ვიდრე

ფენაში მყოფი სფეროების რიცხვი. სფეროთა ფენის სიმეტრია სფეროს ცენტრში ხასიათდება nmn წერტილოვანი ჯგუფით, ხოლო სიცარიელის ცენტრში — $3m$. ეს იმას ნიშნავს, რომ სფეროთა შორის A, B ტიპის ცარიელი სივრცის ცენტრში ყოველთვის გაივლის მესამე რიგის ღერძი, რომელიც შემდეგი ფენების მოქმედებით გარდაიქმნება სარკულ ან ხრახნულ ღერძად. $3m$ სიმეტრიის ჯგუფი nmn ჯგუფის ქვეჯგუფს წარმოადგენს და თუ ერთფენოვანი წყობიდან გადავალთ ნებისმიერ სივრცობრივ წყობაზე, მაშინ $C3m$ სივრცული ჯგუფი იქნება მინიმალური სიმეტრიის ჯგუფი, რომელიც სფეროების უმჭიდროეს წყობას შეიძლება გააჩნდეს. ბრტყელი ფენის ელემენტარული უჯრედი სწორ რომბს წარმოადგენს.

სფეროების უმჭიდროესი წყობა სივრცეში მიიღება აღნიშნული ფენების ერთმანეთზე დადების შედეგად, ისე რომ ყოველი შემდეგი ფენის სფერო ხვდება ქვედა ფენის სფეროთა შორის სივრცეში. იმის გამო, რომ სიცარიელების რიცხვი ორჯერ მეტია, ვიდრე სფეროების რიცხვი, ასეთი დაწყობა შეიძლება განხორციელდეს ორი საშუალებით: მეორე ფენის სფეროები მოთავსდებიან BBB ტიპის ადგილებში ან დაიკავენ CCC ტიპის ადგილებს. მეორე ფენისათვის ამას არავითარი პრინციპული მნიშვნელობა არ ექნება. ამ ფენის თითოეული სფერო ეხება ქვედა ფენის სამ სფეროს (ნახ. 6.28-ბ) და ზემოდან ხურავს სამკუთხა სიცარიელეს, რო-



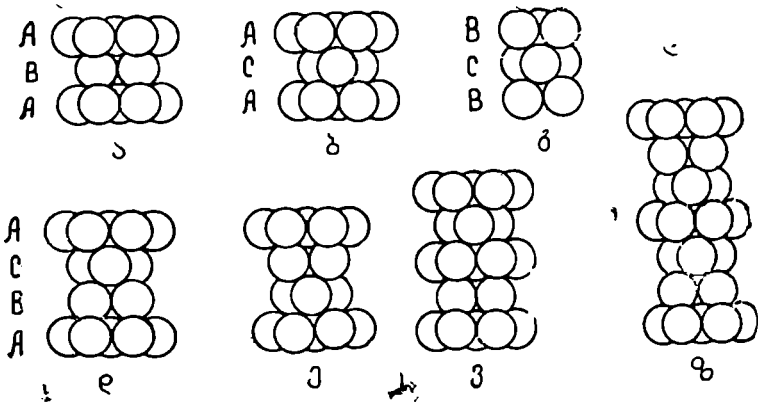
ნახ. 6.29. ოქტაედრული სიციარიელის შექმნა ექვსი სფეროს მიერ.

როს შუა სიციარიელე (ნახ. 6.29). ამგვარად, წარმოშობილი სიციარიელე გარშემორტყმულია 6 სფეროთი, რომელთა ცენტრების შეერთებით მიიღება ოქტაედრი. ამიტომ ასეთი სახის ფორებს ოქტაედრული ფორები (სიციარიელეები) ეწოდება. გასაგებია, რომ ოქტაედრული ფორები გაცილებით დიდი მოცულობისაა, ვიდრე ტეტრაედრული.

იმის დასადგენად, თუ როგორი სიდიდის სფერო შეიძლება მოთავსდეს ოქტაედრული ან ტეტრაედრულ სიციარიელეში, საკმარისია ვისარგებლოთ 6.4 ცხრილით. სფეროების უმჭიდროესი წყობის დროს საჭიროა ავილოთ რადიუსების შეფარდების ქვედა საზღვრები. ასეთ შემთხვევაში, როგორც ცხრილი გვიჩვენებს, ტეტრაედრული სიციარიელის შიგნით მოთავსებული სფეროს რადიუსი უნდა შეადგენდეს ძირითადი სფეროს რადიუსის 0,22, ხოლო ოქტაედრულ ხერხელში მოთავსდება სფერო, რომლის რადიუსი ძირითადი სფეროს რადიუსის 0,41 შეადგენს.

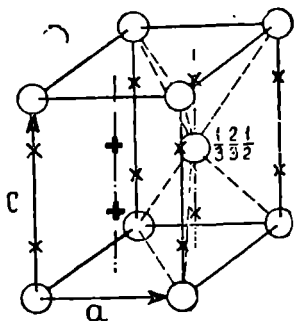
მესამე ფენიდან დაწყებული უკვე მნიშვნელობა ენიჭება შემდეგი ფენის სფეროები დაიკავენ B ტიპის, თუ C ტიპის [სამკუთხა სიციარიელეებს. ამისდა მიხედვით მიიღება უმჭიდროესი სივრცობრივი წყობის სხვადასხვა ტიპი. მაგალითად. მესამე ფენა შეიძლება დაეწყოს ისე, რომ მისი სფეროები ზუსტად მოთავსდნენ პირველი ფენის სფეროების ზემოთ და, მაშასადამე, გაიმეორონ პირველი ფენა (ნახ. 6.30 ა, ბ, გ). თუ პირველი ფენის სფეროებს აღვნიშნავთ A ასოთი, მეორეს — B , ხოლო მესამეს — C -თი, მაშინ მიღებული ორფენიანი წყობა შეიძლება მოკლედ ასე ჩაიწეროს: $ABABAB$, $ACAC$ ან $BCBC$ (ნახ. 6.30 ა, ბ, გ). როგორც ჩანს, სფეროების წყობა ამ შემთხვევაში ხასიათდება ჰექსაგონალური პრიმიტიული უჯრედის სიმეტრიით, რომელიც ორ სფეროს

მელიც ქვედა ფენის სამი სფეროს მიერ იყო შექმნილი. ოთხი სფეროს ცენტრების შეერთებით მიიღება სწორი ტეტრაედრი (ნახ.6.28 გ). ამიტომ სიციარიელეს, რომელიც ასეთი ოთხი სფეროს დაწყობის შედეგად წარმოიშობა, ტეტრაედრული სიციარიელე ეწოდება. მაგრამ, როგორც 6.28 ბ ნახაზიდან ჩანს, მეორე ფენაში კიდევ არსებობს მეორე გვარის სიციარიელეები, რომლებიც წარმოიშობიან, როდესაც ქვედა სამი სფეროს ჩაღრმავებას ზევიდან თანხვდება არა სფერო, არამედ მეორე ფენის სამი სფერო



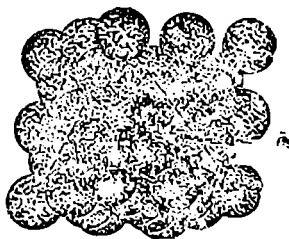
ნახ. 6. 30. ა, ბ, გ — ორფენიანი წყობები: ABAB, ACAC, BCBC (ჰექსაგონალური) და დ, ე — სამფენიანი წყობა ABCABC და ACBACB (კუბური); ვ, ზ — ოთხ და ექვსფენიანი წყობები ABAC... ABAC და ABCACB... ABCACB.

შეიცავს კოორდინატებით (000) და $\left(\frac{1}{3} \frac{2}{3} \frac{1}{2}\right)$ (ნახ. 6.31); ამიტომ ასეთ წყობას ჰექსაგონალური უმჭიდროესი წყობა ეწოდება. ნახაზზე წინაგვანებია ორფენიანი უმჭიდროესი წყობის შედეგად მიღებული ჰექსაგონალური პრიმიტიული უჯრედი, ატომების განლაგება მასში და ოქტაედრული და ტეტრაედრული სიციარიელების ადგილები.



ნახ. 6. 31. ჰექსაგონალური უმჭიდროესი წყობის ელემენტარული უჯრედი: x — ტეტრაედრული სიციარიელები, + — ოქტაედრული სიციარიელები.

გამოვთვალოთ რამდენი ოქტაედრული და ტეტრაედრული სიციარიელე წარმოიშობა სფეროების უმჭიდროესი წყო-



ნახ. 6.32. სფეროების უმჭიდროესი წყობა კუბში.

ბის დროს. ერთ ფენაში (ნახ. 6.28 ა) A სფერო შემოსაზღვრულია B და C ტიპის ექვსი სამკუთხა სიციარიელით. ზედა ფენის დადების შემდეგ ისინი გადაიქცევიან სამ ტეტრაედრულ და სამ ოქტაედრულ სიციარიელედ. ასეთივე რაოდენობით ეს სიციარიელები წარმოიშობა ქვედა ფენასთან დაკავშირებით. ამავე დროს, ჩვენ მიერ არჩეული A სფერო ქვედა და ზედა ფენაში დახურავს თითო-თითო ტეტრაედრულ სიციარიელეს; ამიტომ, საბოლოოდ, მოცემული სფეროს ირგვლივ იქნება: $2 \times 3 = 6$ ოქტაედრული და $2 \times 3 + 1 + 1 = 8$ ტეტრაედრული სიციარიელე. თითოეული ოქტაედრული სიციარიელე გარშემორტყმულია 6 სფეროთი და ამიტომ ერთ სფეროზე მოდის ამ სიციარიელის მხოლოდ $1/6$. ვინაიდან ერთი სფეროს ირგვლივ 6

ოქტაედრული სიციარიელეა, ამ სფეროს ეკუთვნის $\left(\frac{1}{6}\right) \times 6 = 1$ ოქტაედრული სიციარიელე. ასევე, ტეტრაედრულ სიციარიელეში ერთ სფეროს ეკუთვნის სიციარიელის მხოლოდ $1/4$. სფეროს ირგვლივ 8 ტეტრაედრული სიციარიელეა და ამიტომ ერთ სფეროზე მოდის $8 \times \frac{1}{4} = 2$ ტეტრა-

ედრული სიციარიელე. როგორც ვხედავთ, უმჭიდროესი წყობის დროს ოქტაედრულ სიციარიელეთა რიცხვი სფეროთა რიცხვის ტოლია, ხოლო ტეტრაედრული სიციარიელები ორჯერ მეტია, ვიდრე სფეროების რიცხვი.

ჰექსაგონალური უმჭიდროესი წყობის პრიმიტიულ უჯრედში ორი სფეროა; მამასადამე, ასეთ უჯრედში ორი ოქტაედრული სიციარიელეა და ოთხი — ტეტრაედრული. ოქტაედრული ფორების კოორდინატებია $\left(\frac{2}{3} \frac{1}{3} \frac{1}{4}, \frac{2}{3} \frac{1}{3} \frac{3}{4}\right)$, ხოლო ტეტრაედრული ფორები მოთავსებულია

$\left(00 \frac{3}{8}, 00 \frac{5}{8}, \frac{1}{3} \frac{2}{3} \frac{1}{8}, \frac{1}{3} \frac{2}{3} \frac{3}{8}\right)$ წერტილებში. სფერო, რომელიც უჯრედის შიგნით არის მოთავსებული, თავის ქვევით და ზევით ხურავს ორ ტეტრაედრულ სიციარიელეს კოორდინატებით $\left(\frac{1}{3} \frac{2}{3} \frac{1}{8}, \frac{1}{3} \frac{2}{3} \frac{3}{8}\right)$. 6.31 ნახაზზე ნაჩვენებია, რომ ელემენტარული

ტეტრაედრის სიმაღლე უდრის $\frac{c}{2}$, ხოლო გვერდი არის a . მათ შორის

არსებობს დამოკიდებულება $\frac{c}{2} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} a$ ან $\frac{c}{a} = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}} = 1,63$. ეს

არის ჰექსაგონალური უჯრედის წიბოების შეფარდება სფეროების უმჭიდროესი წყობის დროს. მრავალი ნივთიერების კრისტალებისათვის

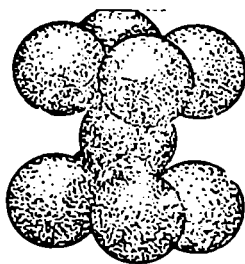
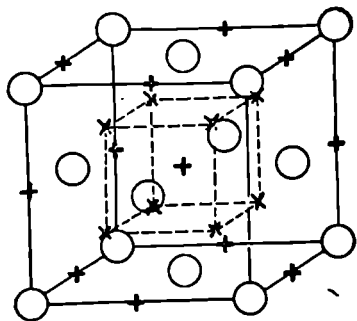
ლერძების შეფარდება უახლოვდება მიღებულ სიდიდეს. ეს განსაკუთრებით შეეხება ლითონების სტრუქტურებს, რომლებსაც ჩვენ განვიხილავთ შემდეგში.

მესამე ფენა შეიძლება დაეწყოს ისე, რომ მისი სფეროები მოთავსდნენ იმ ჩაღრმავებების ზემოთ, რომლებიც შეუვსებელი რჩებიან მეორე ფენის სფეროების მიერ (ნახ. 6.30 ბ, ე) და მხოლოდ მეოთხე ფენამ გაიმეოროს პირველი ფენის განლაგება. მიღებული სამფენიანი წყობა ასე აღინიშნება $ABCABC$ ან $ACBACB$. სფეროების განლაგება პირველ ოთხ ფენაში მოცემულია 6. 32 ნახაზზე. როგორც ჩანს, ასეთ წყობას წახნაგდაცენტრებული კუბის სტრუქტურა აქვს. წყვეტილი ხაზით ნაჩვენებია სიბრტყეები, რომელნიც სფეროების უმჭიდროეს წყობას შეიცავენ. ესენი არიან ოქტაედრის (111) წახნაგების პარალელური სიბრტყეები. მაშასადამე, სამფენიან სტრუქტურას გააჩნია ოთხი მიმართულება (კუბის დიაგონალები), რომლებიც უმჭიდროესი წყობის მქონე სიბრტყეების მართობები არიან. კუბური უმჭიდროესი წყობის კომპაქტურობის კოეფიციენტიც 74,05%-ს შეადგენს.

ვინაიდან სამფენიანი სტრუქტურის ელემენტარული უჯრედი წახნაგდაცენტრებული კუბია, ის ოთხ სფეროს შეიცავს კოორდინატებით $\left(000; \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0; \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}; 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)$, ოთხ ოქტაედრულ სიციარიელს $\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}; 00 \frac{1}{2}; 0 \frac{1}{2} 0; \frac{1}{2} 00\right)$ და რვა ტეტრაედრულ სიციარიელს $\left(\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}; \frac{3}{4} \frac{3}{4} \frac{1}{4} \frac{3}{4} \frac{1}{4} \frac{3}{4}; \frac{1}{4} \frac{3}{4} \frac{3}{4}; \frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{3}{4}; \frac{1}{4} \frac{3}{4} \frac{1}{4}; \frac{3}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}; \frac{3}{4} \frac{3}{4} \frac{3}{4}\right)$. ფორების განლაგება წახნაგდაცენტრებულ კუბის სტრუქტურაში ნაჩვენებია 6.33 ნახაზზე.

ოთხფენიანი წყობა მიიღება ფენების დაწყობით $ABAC... ABAC$ ან $ABCB... ABCB$ წესით (ნახ. 6.30ვ). ამავე ნახაზზე ნაჩვენებია ექვსფენიანი წყობა $ABCACB ABCACB$ ან $ABCBAC ABCBAC$

ერთი და იგივე რადიუსის სფეროებისაგან შესაძლებელია აგრეთვე აიგოს მოცულობითად დაცენტრებული კუბური მესერი, რომლის ელემენტარული უჯრედი ნაჩვენებია 6.43 ნახაზზე. ასეთი სტრუქტურა უკვე არ წარმოადგენს სფეროების უმჭიდროეს წყობას და მისი კომპაქტურობის კოეფიციენტი ნაკლებია, ვიდრე უმჭიდროესი წყობის დროს. სახელდობრ, სფეროების მიერ დაკავებული მოცულობა უჯრედის საერთო მოცულობის 68%-ს შეადგენს. უჯრედში ორი ატომია, კოორდინატებით $\left(000, \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)$. ექვსი ოქტაედრული სიციარიელის ტიპის ფო-



ნახ. 6. 33. + — ოქტაედრული და x — ტეტრაედრული ფორების განლაგება წახნაგ-დაცენტრებული კუბის ელემენტარულ უჯრედში.

ნახ. 6. 34. მოცულობით დაცენტრებული კუბის ელემენტარული უჯრედი.

რი წიბოებისა და წახნაგების ცენტრებში არის განლაგებული კოორდინატებით $\left(\frac{1}{2} 00, 00 \frac{1}{2}, 0 \frac{1}{2} 0, 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}, \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0 \right)$.

პატარა სფეროს რადიუსი, რომელიც ასეთ სიცარიელეში ჩაეტევა, უდრის ძირითადი სფეროს რადიუსის 0,15. თორმეტი ტეტრაედრული ფორი მოთავსებულია ელემენტარული კუბის წახნაგების შემდეგ წერტილებში

$\left(0 \frac{1}{4} \frac{1}{4}; 0 \frac{3}{4} \frac{1}{4}; 0 \frac{3}{4} \frac{3}{4}; 0 \frac{1}{4} \frac{3}{4}; \frac{1}{4} 0 \frac{1}{4}; \frac{1}{4} 0 \frac{3}{4}; \frac{3}{4} 0 \frac{3}{4}; \frac{3}{4} 0 \frac{1}{4}; \frac{1}{4} \frac{1}{4} 0; \frac{3}{4} \frac{1}{4} 0; \frac{3}{4} \frac{3}{4} 0; \frac{1}{4} \frac{3}{4} 0 \right)$.

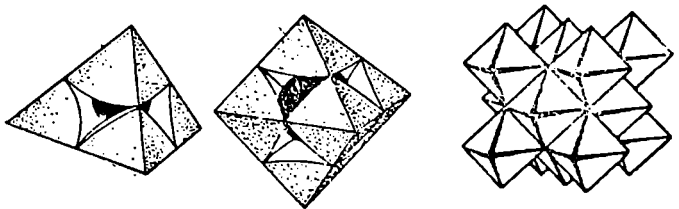
ამ ფორებში მოთავსებული სფეროს რადიუსი ძირითადი სფეროს რადიუსის 0,29 უდრის. გარდა ამისა, უჯრედში 24 სიცარიელეა კოორდინაციული რიცხვით 3 (ტრიედრული სიცარიელე) და სხვა.

კოორდინაციული რიცხვის შემცირებასთან ერთად მცირდება სტრუქტურის კომპაქტურობის კოეფიციენტი. ასე, მაგალითად, ჰექსაგონალური და კუბური უმჭიდროესი წყობის დროს, კოორდინაციული რიცხვი უდრის 12-ს, ხოლო კომპაქტურობის კოეფიციენტი — 74-%. მოცულობითად ცენტრირებულ კუბში კოორდინაციული რიცხვი არის 8 და კომპაქტურობის კოეფიციენტი 68%; ჩვეულებრივ, კუბში კოორდინაციული რიცხვი ექვსია, ხოლო კომპაქტურობის კოეფიციენტი — 52,3%, ე. ი. ამ შემთხვევაში სფეროებს უჯრედის სივრცის მხოლოდ ნახევარი უჭირავთ და ა. შ.

ახლა შესაძლებელია იონური კრისტალების სტრუქტურული თავისებურებანი განვიხილოთ სფეროების უმჭიდროესი წყობის კანონების თვალსაზრისით.

კრისტალური სტრუქტურის ძირითად შენობას ქმნიან დიდი რადიუსის ანიონები, ხოლო მცირე რადიუსის კათიონები თავსდებათ სხვადასხვა ტიპის სიცარიელებში. მაგრამ, როგორც დავინახეთ, სფეროების უმჭიდროესი წყობის ტიპები არც თუ ისე მრავალრიცხოვანია. ძირითადად კრისტალებში ადგილი აქვს ჰექსაგონალური და წახნაგდაცენტრებული კუბის უმჭიდროეს წყობებს, ამიტომ კრისტალების მრავალსახეობა, რომელსაც ბუნებაში ვხვდებით, ძირითადად განპირობებულია კათიონების მიერ ამა თუ იმ სიცარიელების შევსების სხვადასხვაობით. იმისათვის, რომ ვაჩვენოთ განსხვავება სტრუქტურულ ტიპებს შორის, საჭიროა განსაკუთრებით გავესაზრდოვოთ კათიონების განაწილებას სივრცეში და მათ კოორდინაციას. პოლინგი ამას აღწევს იმით, რომ კათიონის ირგვლივ მდებარე ანიონების ცენტრებს აერთებს სიბრტყეებით, რომელნიც კვეთავენ ანიონებს და ქმნიან მრავალწახნაგს. ამ მრავალწახნაგის წვეროების რიცხვი უდრის კათიონების კოორდინაციულ რიცხვს, ხოლო მრავალწახნაგების განაწილება აჩვენებს კათიონების განლაგებას კრისტალში. 6.35 ნახაზზე ნაჩვენებია ტეტრაედრული და ოქტაედრული ფორმების ირგვლივ მდებარე ანიონების კვეთით მიღებული მრავალწახნაგები. ამ მრავალწახნაგების შიგნით მოთავსებულია სათანადო რადიუსის კათიონები კოორდინაციული რიცხვებით 4 და 6.

როგორც დავინახეთ, უმჭიდროესი წყობის დროს ოქტაედრული სიცარიელების რიცხვი უდრის ელემენტარულ უჯრედში შემავალ ატომების რიცხვს. ამიტომ, თუ კათიონის ზომები ისეთია, რომ ის ჩაეტევა ოქტაედრულ ხვრელში, მაშინ AX ტიპის შენაერთების სტრუქტურა შეიძლება წარმოვიდგინოთ, როგორც ანიონების უმჭიდროესი წყობა, რომლის ფორები მთლიანად შევსებულია კათიონების მიერ. ასე, მაგალითად,



ნახ. 6. 35. კათიონური მრავალწახნაგების ტიპები .ტეტრაედრი და ოქტაედრი.

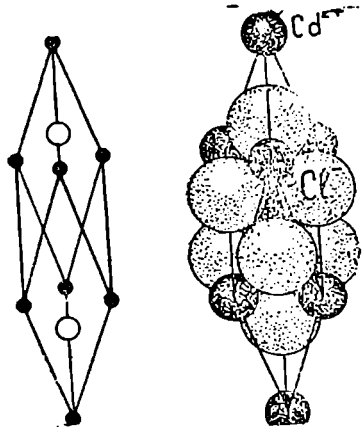
ნახ. 6. 36. NaCl-ის სტრუქტურა პოლიედრებში.

NaCl-ის სტრუქტურაში ქლორის ანიონები ქმნიან კუბურ უმჭიდროეს წყობას, ხოლო ყველა ოქტაედრული ფორი დაკავებულია ნატრიუმის კათიონებით. ტეტრაედრული სიციარიელები, ამ შემთხვევაში, რჩება შეუვსებელი. თუ კათიონების ირგვლივ ავაგებთ მრავალწახნაგებს, NaCl-ის სტრუქტურა მიიღებს 6.36 ნახაზზე ნაჩვენებ სახეს.

ასეთივე ტიპის სტრუქტურით ხასიათდება ტუტე ლითონების ჰალოგენების უმრავლესობა, ორვალენტიანი ლითონების ქანგების დიდი ნაწილი: MgO, CaO, FeO, BaO, SrO, ზოგიერთი სულფიდი და მრავალი სხვა.

თუ შევცვლით კუბურ უმჭიდროეს წყობას ჰექსაგონალური უმჭიდროესი წყობით, მაშინ სტრუქტურის იმავე ტიპით ხასიათდება NiAs, სადაც დარიშხანის (As) იონები ქმნიან უმჭიდროეს ჰექსაგონალურ წყობას, ხოლო ნიკელის ატომები ავსებენ ყველა ოქტაედრულ ფორს. ასეთივე სტრუქტურას ქმნის FeS და მრავალი სხვა ნაერთი.

AX ტიპის სტრუქტურა შეიძლება აგრეთვე შეიქმნას მაშინ, როდესაც ანიონების უმჭიდროეს წყობაში კათიონებს უჭირავთ ტეტრაედრული სიციარიელების ნახევარი. ამისათვის კათიონები თავისი ზომით გაცილებით უფრო პატარები უნდა იყვნენ. ასე, მაგალითად, ZnS-ის ორ მოდიფიკაციაში სფალერიტი (ნახ. 6.17) წარმოადგენს გოგირდის იონების კუბურ უმჭიდროეს წყობას, რომლის ტეტრაედრული ფორების ნახევარი დაკავებულია თუთიის იონების მიერ. ვიურციტში გოგირდის იონები ქმნიან ჰექსაგონალურ უმჭიდროეს წყობას, სადაც ტეტრაედრული ფორების ნახევარი ასევე დაკავებულია თუთიის იონების მიერ.



ნახ. 6. 37. Cd Cl₂ — მესერი. ელემენტარული უჯრედი. ანიონების (Cl⁻) და კათიონების (Cd²⁺) წყობა.

AX₂ ტიპის სტრუქტურა შეიძლება მივიღოთ, თუ ანიონების უმჭიდროეს წყობაში კათიონები დაიკავენ ოქტაედრული სიციარიელების ნახევარს. შესაძლებელია აგრეთვე ტეტრაედრების ნაწილობრივი შევსების ვარიანტიც (SiS₂). ოქტაედრების შევსება ხდება სხვადასხვა წესით. მაგალითად, სიციარიელები შეიძლება შეივსოს ფენებად: ერთი ფენის ტეტრაედრები შევსებულია, მეორე ფენის კი — ცარიელი და ა. შ. მიიღება ფენური სტრუქტურები. თუ უმჭიდროესი წყობა ჰექსაგონალურია, ასეთი სტრუქტურების წარმომადგენლები იქნებიან SnS₂, PtS₂,

CdI_2 და სხვა. როდესაც სტრუქტურის საფუძველი კუბური უმჭიდროესი წყობაა, ასეთივე ტიპის ფენური სტრუქტურები იქმნება $CdCl_2$, $ZnCl_2$, $NiCl_2$, $MnCl_2$; $HgBr_2$ და სხვა შენაერთების მიერ. 6.37 ნახაზზე მოცემულია $CdCl_2$ -ის სტრუქტურა. აქ ელემენტარული უჯრედი რომბოედრულია, მაგრამ ანიონები Cl^- ლაგდებიან სამფენიანი (კუბური) წყობის მიხედვით, ხოლო კათიონები Cd^{++} თავსდებიან ერთი ფენის ოქტაედრებში, მეორე ფენის ოქტაედრებს კი ტოვებენ ცარიელს და ა. შ.

თუ კათიონები დაიკავენ ტეტრაედრულ სიცარიელეს, ხოლო ანიონები შექმნიან უმჭიდროეს წყობას, მივიღებთ A_2X ტიპის სტრუქტურულ ტიპს (Li_2O და სხვა).

როგორც მოყვანილი მაგალითებიდან ჩანს, ყველა აღნიშნული სტრუქტურა შენდება ერთი პრინციპით: დიდი რადიუსის სფეროები ქმნიან მესრის ძირითად წყობას, ხოლო მცირე რადიუსის სფეროები თავსდება დიდ სფეროებს შორის წარმოშობილ სიცარიელებში. თუ როგორი გარემოცვა ექნება ანიონს ან კათიონს, დამოკიდებულია მათი რადიუსების შეფარდებით ზომებზე.

§ 26. ლითონური გზა. ლითონების სტრუქტურა

ლითონებს გააჩნია ისეთი დამახასიათებელი თვისებები, როგორცაა მაღალი ელექტრო-და სითბოგამტარობა, ქედადობა, მეტალური ბზინვარება და მრავალი სხვა. ყველა ეს თვისება დაკავშირებულია მათ ელექტროდადებითობასთან. დაკვირვება გვიჩვენებს, რომ რამდენადაც მეტია ელემენტის ელექტროდადებითობა ან, პირიქით, მცირეა მისი ელექტროუარყოფითობა, იმდენად მკვეთრად არის გამოსახული მისი ლითონური თვისებები. ამიტომ ლითონები ელექტროუარყოფითობათა რიგის მარცხენა ნაწილში თავსდებიან.

ზემოთ ლაპარაკი იყო კოვალენტური და იონური ბმების მექანიზმის ფიზიკური საფუძვლების შესახებ. კერძოდ, გამოირკვა, რომ კოვალენტური ან ჰომეოპოლარული ბმის დროს მეზობელ ატომებს შორის ადგილი აქვს ელექტრონების გაცვლას, რაც ატომების ურთიერთდაკავშირების საფუძველს წარმოადგენს. მაგრამ გაცვლის პროცესი სიმეტრიულია ორივე ატომისათვის და ამიტომ არ იწვევს ელექტრონის მიკროძვებას რომელიმე ერთ ატომთან. ამ გავებით იონური ან ჰეტეროპოლარული ბმა წარმოადგენს ურთიერთქმედების ზღვრულ მდგომარეობას, როდესაც ვალენტური ელექტრონი უკვე ლოკალიზებულია ერთ გარკვეულ ატომთან და მესერში მოქმედი ბმის ძალები წარმოადგენენ საწინააღმდეგო ნიშნის იონებს შორის კულონური მიზიდვის ძალებს.

ბმების ამ ერთიან კვანტურ მექანიზმში ლითონურ ბმას გარკვეული ადგილი უჭირავს. თანამედროვე წარმოდგენის მიხედვით ლითონის კრი-

სტალური მესრის საფუძველს წარმოადგენენ დადებითი იონები (ლითონების კათიონები), რომლებიც გარკვეული რადიუსიანი სფეროების სახით ლაგდებიან კრისტალური მესრის კვანძებში. ამ კათიონებს შორის და მათ ირგვლივ მოძრაობენ ვალენტური ელექტრონები, რომლებიც ლითონებში შედარებით სუსტად არიან დაკავშირებული თავის ბირთვებთან და ამიტომ იოლად შეუძლიათ დატოვონ ატომი და იმოძრაონ მესერში. ამის საფუძველზე მესრის შიგნით იქმნება უარყოფითი მუხტის განაწილება ელექტრონული გაზის მსგავსად და ლითონური ბმა წარმოადგენს ამ ელექტრონული გაზისა და დადებითად დამუხტული იონების ურთიერთმოქმედების შედეგს. ელექტრონები, რომლებიც იონებს შორის მოძრაობენ, ცდილობენ მიიზიდონ ისინი და გააწონასწორონ განზიდვის ძალები, რომელნიც მოქმედებენ დადებითად დამუხტულ იონებს შორის. ატომების დაახლოების დროს იზრდება განზიდვის ძალები, მაგრამ ამავე დროს მატულობს ელექტრონული სიმკვრივე და, მაშასადამე, მიზიდვის ძალებიც. ამიტომ, სტაბილური კრისტალური მესერი ამ ძალების წონასწორულ მდგომარეობას შეესაბამება.

ელექტრონების განზოგადების მხრივ ლითონურ ბმას აქვს გარკვეული მსგავსება კოვალენტურ ბმასთან. მაგრამ თუ ვალენტური ბმის დროს ხდება წყვილი ელექტრონების განზოგადება, რომელნიც ყოველთვის შესაბამის ატომებს შორის იმყოფებიან, ლითონური ბმა ხასიათდება ყველა ვალენტური ელექტრონის განზოგადებით; ეს ელექტრონები მხოლოდ თავის ატომებთან არ არიან ლოკალიზებული და შედარებით დავისუფლად მოძრაობენ მთელ კრისტალურ მესერში. ამის გამო ლითონური ბმა არ ხასიათდება ნაჭერობით. ლითონების ატომებისათვის დამახასიათებელია ისეთი სტრუქტურების შექმნა, სადაც ბმების რიცხვი, რომელიც უახლოესი მეზობელი ატომების რიცხვით განისაზღვრება, აღემატება ვალენტური ელექტრონების რიცხვს. ასე, მაგალითად, ტუტე ლითონები, რომლებსაც თითო ვალენტური ელექტრონი გააჩნიათ, ქმნიან მოცულობითად დაცენტრებულ კუბურ მესრებს, სადაც თითოეული ატომი გარშემორტყმულია 8 უახლოესი და 6 ცოტათი დაცილებული მეზობლით. ცხადია, პირველი 8 ბმა უფრო მტკიცეა, ვიდრე მეორე 6. ამიტომ, საშუალოდ, ბმების რიცხვად შეიძლება მივიღოთ თორმეტი, რაც შეესაბამება სფეროების უმჭიდროესი წყობის კოორდინაციულ რიცხვს.

ყოველ ბმაში მონაწილეობას იღებს ტუტე ლითონის ვალენტური ელექტრონის მხოლოდ $1/12$ ხოლო ორ ატომს შორის — მათი ელექტრონის $1/6$ იმ დროს, როდესაც კოვალენტური ბმის დროს ორ ატომს შორის ბმაში მონაწილეობდა ორი სრული ელექტრონი. ცალკეული ბმის შესუსტება ამ შემთხვევაში იფარება იმით, რომ ატომი ცდილობს მონაწილეობა მიიღოს რაც შეიძლება მეტ ბმებში და, მაშასადამე, გაზარდოს კოორდინაციული რიცხვი. ამით აიხსნება ის გარემოება, რომ ლითონები

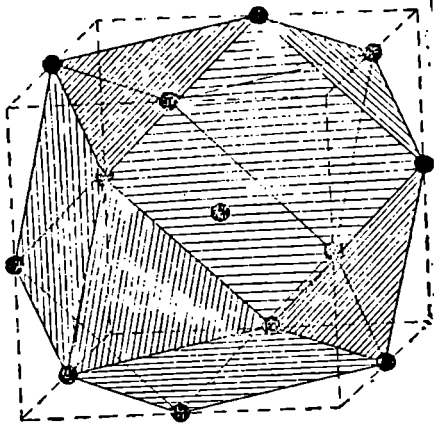
ძირითადად კრისტალიზდებიან კუბური და ჰექსაგონალური უმჭიდროესი წყობის შესაბამის სტრუქტურებში (სტრუქტურული ტიპი A1 და A3), რომელთა კოორდინაციული რიცხვი არის 12, და მოცულობით დაცენტრებული კუბის სტრუქტურაში (სტრუქტურული ტიპი A2) — კოორდინაციული რიცხვით 8.

ყველა ლითონური ელემენტისათვის, რომლებიც ჰექსაგონალური უმჭიდროესი წყობის შესაბამის სტრუქტურას ქმნიან, პარამეტრების შეფარდების c/a მნიშვნელობა უახლოვდება ამ პარამეტრების შეფარდებას უმჭიდროესი წყობის იდეალური შემთხვევისათვის $c/a = 1.63$; განსხვავება აქ არ აღემატება 4%. გამონაკლისს შეადგენენ მხოლოდ ორი ნივთიერება: თუთია და კადმიუმი, რომელთა სტრუქტურები მიიღებიან უმჭიდროესი წყობის დეფორმაციის შედეგად. ლერძების შეფარდებას (c/a) ამ ელემენტებისათვის, შესაბამისად, აქვს მნიშვნელობები: 1,85 და 1,88. ეს სიდიდეები დაახლოებით 15% აღემატებიან სფეროების უმჭიდროესი წყობის მნიშვნელობას, ამიტომ მანძილები ატომებს შორის ერთ (ჰექსაგონალურ) ფენაში ნაკლებია, ვიდრე ფენებს შორის.

ლითონური ბმის განხილული მექანიზმიდან გამომდინარეობს, რომ ლითონური ატომის ბმის ენერგია ნებისმიერ მეზობელ ატომთან დაახლოებით ერთნაირია (ბმების იზოტროპულობა). ამიტომ ბმების მაქსიმალური რიცხვი განისაზღვრება მხოლოდ გეომეტრიული შესაძლებლობით, როგორც ამას ადგილი აქვს სფეროების უმჭიდროესი წყობის დროს. ამის საფუძველზე შეიძლება ითქვას, რომ ლითონურ კრისტალებში კოორდინაციული რიცხვი წარმოადგენს ატომური ურთიერთქმედების ენერგიის ვარკვეულ ზომას. რა თქმა უნდა, უპირატესი მნიშვნელობა ამ ურთიერთქმედებაში ენიჭება უახლოეს მეზობლებს, მაგრამ ზოგიერთ შემთხვევაში საჭირო ხდება მეორე, მესამე და ა. შ. მეზობლების მოქმედების მხედველობაში მიღება. თუ რომელიმე ატომს ავირჩევთ ცენტრალურად, მაშინ უახლოესი მეზობლის მანძილით გატარებულ სფეროზე მოთავსდება დანარჩენი უახლოესი მეზობლები; ასეთ სფეროს პირველი კოორდინაციული სფერო ეწოდება. ასე, მაგალითად, კუბური უმჭიდროესი წყობის დროს თითოეული ატომი გარშემორტყმულია 12 უახ-

ლოესი მეზობლით, რომელნიც მისგან და ერთიმეორისაგან $\frac{a}{\sqrt{2}}$ მანძილით

არიან დაშორებული. თუ ამ ატომებს შევეერთებთ ზახებით, ცენტრალური ატომის ირგვლივ შეიკვრება მრავალწახნაგა კუბოოქტაედრის სახით (ნახ. 6.38), რომელიც წახნაგდაცენტრებული კუბისათვის პირველ კოორდინაციულ სფეროს წარმოადგენს. თუ ავიღებთ უახლოესი მეზობლების შემდგომ ატომებს, მაშინ შეიძლება აიგოს მეორე კოორდინაციული სფერო, შემდეგ მესამე და ა. შ. სფეროების უმჭიდროესი წყობის დროს შესაძ-

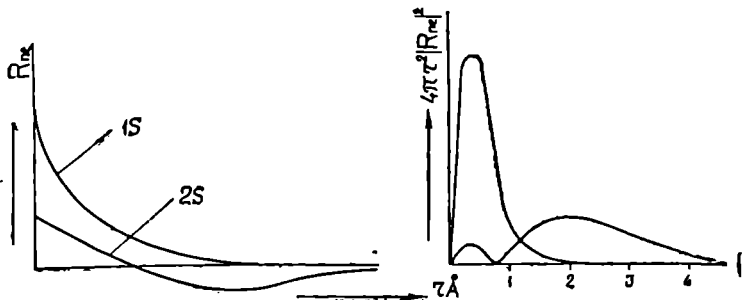


ნახ. 6. 38. წახანგადაცენტრებული კუბური მესრის პირველი კოორდინაციული სფერო. ელემენტარული უჯრედის წიბო წანაცვლებულია $a/2$ მანძილით.

მხოლოდ ელექტრონების ენერგეტიკული დონეები განიცდიან გარკვეულ შეშფოთებას, თუმცა ეს შეშფოთება სავსებით საკმარისია იმისათვის, რომ თავისუფალი ატომისაგან განსხვავებით კრისტალს რიგი ახალი სპეციფიკური თვისებები გაუჩნდეს. მაგალითისათვის განვიხილოთ ლითიუმის კრისტალი, რომლის თავისუფალი ატომი შედგება ორი $1s^2$ და ერთი $2s$ ელექტრონისაგან. ეს ატომები ლაგდებიან მოცულობითად დაცენტრებული კუბის მესერში. კუბის ცენტრში მყოფი ატომის ირგვლივ იმყოფება 8 უახლოესი მეზობელი, მოთავსებული კუბის წვეროებში $3,04 \text{ \AA}$ მანძილზე და 6 შემდეგი მეზობელი კუბის $[100]$ მიმართულების გასწვრივ $3,509 \text{ \AA}$ დაშორებით (მესრის პერიოდი a). ვალენტური ორბიტალი, ამ შემთხვევაში, არის სფერულად სიმეტრიული $2s$ ორბიტალი, რომელიც ერთ ელექტრონს შეიცავს. ელექტრონის მოძრაობა ასეთ ორბიტალზე განისაზღვრება რადიალური ტალღური ფუნქციით $R_{n1}(r)$, ხოლო ალბათობა იმისა, რომ ელექტრონი აღმოჩენილი იქნება ბირთვიდან r მანძილზე, $4\pi r^2 R_{n1}^2$ სიდიდის ტოლია. 6.39 ნახაზზე მოყვანილია ლითიუმის ატომის რადიალური ტალღური ფუნქციისა და ელექტრონული მუხტის განაწილების ალბათობის მანძილისაგან დამოკიდებულების გრაფიკები, ისე როგორც ეს ნაჩვენებია იყო ზემოთ წყალბადის ატომისათვის. როგორც გრაფიკიდან ჩანს, $1s^2$ ელექტრონების განაწილების სიმკვრივე სწრაფად ეცემა და არ აღემატება 2 \AA იმ დროს, როდესაც უახლოეს ატომ-

ლებელია სივრცის მთლიანი ამოვსება (სიცარიელების გარეშე) სწორი ტეტრაედრების და ოქტაედრების საშუალებით.

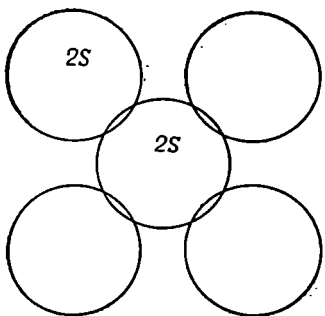
როგორც აღნიშნული იყო, ლითონური ბმის მექანიზმში ძირითად როლს ასრულებენ ვალენტური ელექტრონები, რომლებიც ამ შემთხვევაში მთელი მესრის კუთვნილებას წარმოადგენენ. ამასთან, უნდა ითქვას, რომ ატომების დაახლოება და კრისტალური მესრის შექმნა არ არღვევს ცალკეული ატომის ელექტრონულ სტრუქტურას. ატომის შინაგანი ქვესებული შრეები ხელუხლებელი რჩება და



ნახ. 6. 39. ლითონის ატომის რადიალური ტალღური ფუნქციის და ელექტრონული მუხტის განაწილების ალბათობის მანძილისაგან დამოკიდებულება.

მებს შორის მანძილი არის $3,04 \text{ \AA}$. ამიტომ $1s$ ორბიტალების გადაფარვას ადგილი არ აქვს და $1s$ ელექტრონები, რომლებიც შევსებულ გარსს ქმნიან, ატომის კავშირების საქმეში არ მონაწილეობენ. რაც შეეხება $2s$ ელექტრონებს, მათი მუხტის განაწილება ვრცელდება საკმაოდ შორს და 4 \AA აღემატება, ამიტომ ადგილი აქვს $2s$ ორბიტალების საგრძნობ გადაფარვას; კერძოდ, ელემენტარული უჯრედის ცენტრში მოთავსებული ატომის $2s$ ორბიტალი გადაიფარება მეზობელი 8 ატომის $2s$ ორბიტალებით (ნახ. 6.40) და ნაწილობრივად მეორე საკოორდინაციო სფეროს ატომების ორბიტალებითაც. როგორც ვიცით, ატომური ორბიტალების გადაფარვის შედეგად წარმოიშობა მიზიდვის ძალები და ვალენტური ელექტრონების პოტენციური ენერგია მცირდება. კოვალენტური ბმის დროს ასეთი გადაფარვა იწვევდა ბმების გაჯერებას და მდგრადი მოლეკულის შექმნას. ლითონური ბმის შემთხვევაში რვა ან მეტი ელექტრონის გადაფარვისას ბმების გაჯერებაზე ან მოლეკულის შექმნაზე ლაპარაკი შეუძლებელია, მაგრამ სამაგიეროდ შესაძლებელია წარმოვიდგინოთ ლითონის შიგნით გასაშუალებული ველის მოქმედების ქვეშ შედარებით თავისუფლად მოძრავი ელექტრონი.

გამოვარკვეით ამ მოძრაობის თავისებურებანი. ამისათვის განვიხილოთ ჯერ ელექტრონის მოძრაობა დადებითი იონის ველში (იზოლირებული ატომი). როგორც ნაჩვენებია იყო 6.20 ნახაზზე, ორი იონის მიზიდვის შემთხვევაში ენერგიის მრუდი წარმოადგენს ჰიპერბოლას, რომელიც სივრცეში ქმნის სფერულად სიმეტრიულ პოტენციალურ ორმოს (ნახ. 6.41ა.) გამოთვლების გამარტივების მიზნით ასეთ ორმოს განვიხილავენ სწორკუთხედის სახით (ნახ. 6.41 ბ), რომლის შიგნით პოტენციალს მუდმივი მნიშვნელობა აქვს, ხოლო ორმოს საზღვრებზე ნახტომით იცვლის თავის მნიშვნელობას. ასეთი ორმოს სიგანე



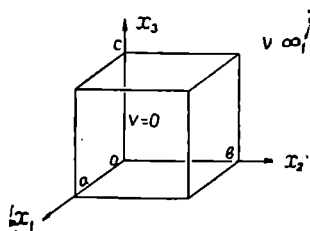
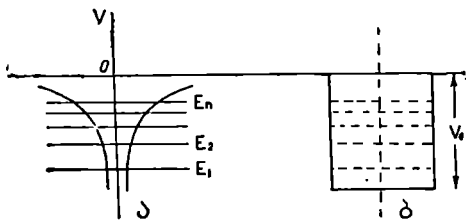
ნახ. 6. 40. კუბური მესრის ცენტრში მოთავსებული ლითიუმის ატომის 2s ორბიტალის გადაფარვა 8 უახლოესი ატომის 2s ორბიტალებით.

სათვის, რომ პოტენციალური ორმოდან ამოვარდეს. წარმოვიდგინოთ, რომ გვაქვს პოტენციალური ორმო სწორკუთხა პარალელპიპედის სახით, რომლის წიბოებია a, b, c (ნახ. 6.42), და შემოვსაზღვროთ ელექტრონის მოძრაობა ასეთი ორმოს შიგნით. სიმარტივისათვის დაუშვათ, რომ ორმოს შიგნით ნაწილაკის პოტენციური ენერგია უდრის ნულს, ხოლო მის გარეთ იღებს უსასრულოდ დიდ მნიშვნელობებს. ასეთ შემთხვევაში ელექტრონი საიმედოდ იქნება ჩაკეტილი პოტენციალურ ორმოში და ტალღური ფუნქცია ორმოს საზღვარზე გაუტოლდება ნულს. სასაზღვრო პირობებს ექნება შემდეგი სახე

$$\begin{aligned} 0 \leq x_1 \leq a \\ V=0 \quad 0 \leq x_2 \leq b \\ 0 \leq x_3 \leq c \end{aligned} \quad (6.59)$$

$V=0$ დანარჩენ სივრცეში

$\psi=0$, როდესაც $x_1=0, a; x_2=0, b; x_3=0, c$.



ნახ. 6. 41. ა. სფერიულად სიმეტრიული პოტენციალური ორმო მზიდვის შემთხვევაში და ენერჯიის დონეები. ბ. სწორკუთხა პოტენციალური ორმო.

ნახ. 6. 42: პოტენციალურა ყუთი.

ყუთის შიგნით მოძრავი ელექტრონისათვის შრედინგერის განტოლება (6.1) ასე ჩაიწერება

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_3^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0. \quad (6.60)$$

ვინაიდან თავისუფალი ნაწილაკების მოძრაობის კომპონენტები ღერძების გასწვრივ ერთმანეთისაგან დამოუკიდებელი არიან, (6.60) განტოლების ამოხსნა $\psi(x_1, x_2, x_3)$ შეიძლება წარმოვიდგინოთ სამი ფუნქციის ნამრავლის სახით

$$\psi(x_1, x_2, x_3) = \psi_1(x_1) \psi_2(x_2) \psi_3(x_3). \quad (6.61)$$

ჩავსვათ $\psi(x_1, x_2, x_3)$ (6.60) განტოლებაში, გავყოთ ორივე მხარე $\psi_1 \psi_2 \psi_3$ ნამრავლზე და დაეჯგუფოთ წევრები. მაშინ, ცვლადების განცალკევების შედეგად, მიიღება სამი განტოლება:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\psi_1} \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x_1^2} &= -\frac{2m}{\hbar^2} E_{x_1}; \\ \frac{1}{\psi_2} \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x_2^2} &= -\frac{2m}{\hbar^2} E_{x_2}; \\ \frac{1}{\psi_3} \frac{\partial^2 \psi_3}{\partial x_3^2} &= -\frac{2m}{\hbar^2} E_{x_3}. \end{aligned} \quad (6.62)$$

აღვნიშნოთ:

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE_{x_1}}}{\hbar}; \quad k_2 = \frac{\sqrt{2mE_{x_2}}}{\hbar}; \quad k_3 = \frac{\sqrt{2mE_{x_3}}}{\hbar}. \quad (6.63)$$

მაშინ (6. 62) განტოლებები მიიღებენ სახეს:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x_1^2} + k_1^2 \psi_1 &= 0; \\ \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x_2^2} + k_2^2 \psi_2 &= 0; \\ \frac{\partial^2 \psi_3}{\partial x_3^2} + k_3^2 \psi_3 &= 0. \end{aligned} \quad (6.64)$$

ამ განტოლებებს აქვთ შემდეგი ამოხსნა:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= A_1 e^{\pm i k_1 x_1}; \\ \psi_2 &= A_2 e^{\pm i k_2 x_2}; \\ \psi_3 &= A_3 e^{\pm i k_3 x_3}. \end{aligned} \quad (6.65)$$

ეს ფუნქციები შეიძლება დაიწეროს როგორც კოსინუსების, ისე სინუსების სახით, მაგრამ (6.59) სასაზღვრო პირობებს აკმაყოფილებენ მხოლოდ სინუსები, ამიტომ:

$$\psi_1 = A_1 \sin k_1 x_1; \quad \psi_2 = A_2 \sin k_2 x_2; \quad \psi_3 = A_3 \sin k_3 x_3. \quad (6.66)$$

იგივე სასაზღვრო პირობების დასაკმაყოფილებლად:

$$k_1 a = n_1 \pi; \quad k_2 b = n_2 \pi; \quad k_3 c = n_3 \pi \quad (6.67)$$

(სადაც $n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \dots$);

აქედან

$$k_1 = \frac{n_1 \pi}{a}; \quad k_2 = \frac{n_2 \pi}{b}; \quad k_3 = \frac{n_3 \pi}{c}$$

და (6.61) ფუნქციებისათვის საბოლოოდ გვექნება

$$\psi(x_1 x_2 x_3) = A \sin k_1 x_1 \sin k_2 x_2 \sin k_3 x_3. \quad (6.68)$$

(6.68) განტოლება წარმოადგენს მდგარი ტალღის განტოლებას. ახლა (6.63 და 6.67) გამოსახულებების გამოყენებით ენერჯიის მნიშვნელობისათვის მივიღებთ

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\hbar^2}{8m} \left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right) \epsilon. \quad (6.69)$$

როგორც ჩანს, პოტენციალურ ორმოში მოძრავი ელექტრონის ენერჯია დამოკიდებულია n_1, n_2, n_3 კვანტურ რიცხვებზე და იღებს დისკრეტულ მნიშვნელობებს. ენერჯიის დონეები პოტენციალურ ორმოში მოძრაობის დროს ნაჩვენებია 6.41 ნახაზზე. ყველაზე დაბალი ენერგეტიკული დონე შეესაბამება მნიშვნელობებს: $n_1 = 1; n_2 = 1; n_3 = 1$; საზოგადოდ კი, ამ სამი რიცხვის ნებისმიერი კომბინაცია განსაზღვრავს ნაწილაკის შესაძლებელ ენერგეტიკულ მდგომარეობას.

თუ პოტენციალური ყუთის a, b, c , წიბოების ნაცვლად ავიღებთ მათ შებრუნებულ მნიშვნელობებს:

$$a^* = \frac{1}{a}; \quad b^* = \frac{1}{b}; \quad c^* = \frac{1}{c}, \quad (6.70)$$

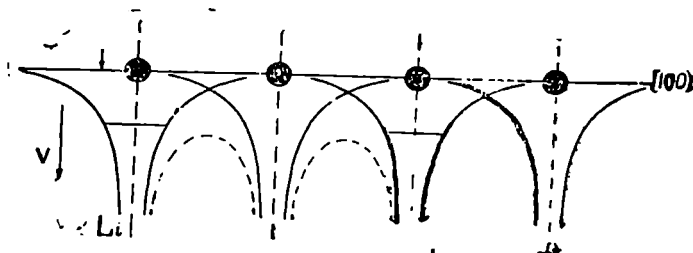
მაშინ, (6.69)-ის თანახმად, a^*, b^*, c^* პარამეტრებზე აგებული სივრცობრივი მესრის თითოეულ კვანძს შეესაბამება n_1, n_2, n_3 რიცხვების გარკვეული მნიშვნელობა და, მაშასადამე, ნაწილაკის ერთ-ერთი შესაძლებელი ენერგეტიკული მდგომარეობა

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\hbar^2}{8m} (a^{*2} n_1^2 + b^{*2} n_2^2 + c^{*2} n_3^2). \quad (6.71)$$

ამგვარად, პოტენციალურ ორმოში მოძრაობის დროს ელექტრონს არ შეიძლება ჰქონდეს ენერჯიის ნებისმიერი მნიშვნელობა. ელექტრონი მოძრაობს გარკვეულ ენერგეტიკულ დონეებზე (ნახ. 6. 41) და რაც უფრო მაღალია ეს დონე, მით მეტია ალბათობა იმისა, რომ ელექტრონი დატოვებს ატომს.

თუ სიმარტივისათვის წარმოვიდგენთ, რომ პოტენციალურ ყუთს კუბის ფორმა აქვს, რომლის წიბო არის a , მაშინ, (6.69)-ის მიხედვით, ყველაზე დაბალი ენერგეტიკული დონის შესაბამისი ენერგია იქნება $E_{111} = \frac{3h^2}{8ma^2}$. პაულის პრინციპის თანახმად, ასეთ დონეზე შეიძლება მოძრაობდეს მხოლოდ ორი ელექტრონი. ლითიუმის შემთხვევაში ეს იქნება ორი $1s^2$ ელექტრონი, ხოლო $2s$ ელექტრონი მოთავსდება უფრო მაღალ ენერგეტიკულ დონეზე.

ახლა, როდესაც ჩვენ უკვე დავადგინეთ, როგორ მოძრაობს ვალენტური ელექტრონი დადებითი იონის ველში, შესაძლებელია დავუბრუნდეთ ლითიუმის კრისტალურ მესერს. პირველი, რასაც უნდა მივიქცეს ყურადღება ამ შემთხვევაში, მდგომარეობს იმაში, რომ მოცულობითად დაცენტრებული კუბური მესრის თითოეულ კვანძში მოთავსებული ატომები ერთმანეთის მსგავსნი არიან როგორც ელექტრონების რიცხვით, ისე ამ ელექტრონების განლაგებით. ეს იმას ნიშნავს, რომ ელექტრონული მუხტის განაწილების ალბათობა კრისტალის შიგნით პერიოდულად მეორდება ერთი ატომიდან მეორემდე კრისტალური მესრის პარამეტრის პერიოდულობით. ცხადია, რომ ასეთივე პერიოდულობით, მეორდება პოტენციალის $V(x_1, x_2, x_3)$ მნიშვნელობა. 6.43 ნახაზზე აღებულია კრისტალის ერთი რომელიმე მიმართულება კვანძური ღერძის სახით: მაგალითად მიმართულება $[100]$. ვინაიდან $1s$ ელექტრონების განაწილება არ იცვლება, როდესაც თავისუფალი ატომიდან გადავდივართ კრისტალურ მესერში, ამ ელექტრონებს მხედველობაში არ იღებენ და გულისხმობენ, რომ $[100]$ მიმართულების თითოეულ კვანძში მოთავსებულია დადებითი იონი, რომ-



ნახ. 6. 43. ლითიუმის ატომის ვალენტური ელექტრონის ენერჯიის დონე თავისუფალ ატომში უფრო მაღლა დევს, ვიდრე საერთო პოტენციალის მნიშვნელობა ატომებს შორის.

ლის მიზიდვის ველში მოძრაობს ვალენტური 2s ელექტრონი. ასეთ შემთხვევაში ეს ელექტრონი იმყოფება 6.41 ნახაზზე ნაჩვენებ სფერულად სიმეტრიულ პოტენციალურ ორმოში, სადაც მას შეესაბამება ენერჯის სათანადო დონე. კერძოდ, ლითიუმის ატომის 2s ელექტრონის იონიზაციის პოტენციალი შედარებით დაბალია და უდრის 5.36 eV.

კრისტალურ მესერში ასეთი პოტენციალური მრუდები, როგორც ეს ნაჩვენებია 6.43 ნახაზზე, პერიოდულად მეორდება თითოეული კვანძის ირგვლივ. ჭიმის გამო, რომ ატომების დაახლოების შედეგად ხდება 2s ელექტრონების ტალღური ფუნქციებისა და, მაშასადამე, პოტენციალური მრუდების გადაფარვა, ატომთა შორის სივრცეში პოტენციალური ენერჯის მნიშვნელობა მცირდება (წყვეტილი ხაზი). ეს მნიშვნელობა დაახლოებით ერთნაირი რჩება კრისტალის შიგნით ალებული ნებისმიერი წერტილისათვის და ირღვევა მხოლოდ ლითონის ზედაპირზე, პერიოდულობის დარღვევასთან ერთად.

6.43 ნახაზზე მოცემულია აგრეთვე 2s ელექტრონების ენერგეტიკული დონეები ლითიუმის ატომში. როგორც ჩანს, ეს დონე უფრო მაღლაა, ვიდრე საერთო პოტენციალის მნიშვნელობა ატომებს შორის. ამიტომ 2s ვალენტური ელექტრონებისათვის ფაქტიურად პოტენციალური ორმო არ იარსებებს. ეს ელექტრონები თავისუფლად იმოძრაებენ კრისტალური მესრის შიგნით და განახორციელებენ კვანძებში მოთავსებული დადებითი იონების ჯრთიერთდაკავშირებას.

ასეთია ლითონური ბმის ფიზიკური ბუნება. ჩვენ აქ არ ვეხებით კრისტალური მესრის პერიოდულ პოტენციალთან დაკავშირებულ შრედინგერის განტოლების ამოხსნის რიგ საკითხებს, რომლებიც დასაბამს ამლევენ ენერგეტიკული ზონების თეორიას, ვინაიდან ეს საკითხები უშუალოდ არ განსაზღვრავენ ამა თუ იმ ბმის ბუნებას და ამიტომ სცილდებიან მოცემული წიგნის ფარგლებს.

ლითონების სტრუქტურა და ატომური რადიუსები

ზემოთ აღნიშნული იყო, რომ ლითონური ბმის შედეგად ატომები ცდილობენ შექმნან ისეთი სტრუქტურები, რომლებიც ხასიათდებიან კოორდინაციული რიცხვის მაქსიმალური მნიშვნელობით. ამიტომ ლითონებს შორის უმეტესად ვხვდებით ჰექსაგონალური და კუბური ტიპის სფეროების უმჭიდროეს წყობებს და მოცულობითად დაცენტრებული კუბის სტრუქტურებს (ნახ. 6.31, 32, 34). პირველ ორ სტრუქტურას გაჩნია სფეროების უმჭიდროესი წყობისათვის დამახასიათებელი კოორდინაციული რიცხვი — 12, ხოლო მოცულობითად დაცენტრებული კუბის კოორდინაციული რიცხვი არის 8. ასეთ სტრუქტურებს კომპაქტურობის კოეფიციენტიც ყველაზე დიდი აქვთ (0,74 და 0,68).

ზშირად გარე პირობების გავლენით (წნევა, ტემპერატურა) ერთი და იგივე ლითონური ელემენტი კრისტალოზღდება სხვადასხვა კრისტალურ მესერში. ამ მოვლენას პოლიმორფიზმი ეწოდება. ცნობილია, მაგალითად, რომ ოთახის ტემპერატურაზე რკინას მოცულობითად დაცენტრებული კუბის კრისტალური მესერი აქვს (α -რკინა), ხოლო 909° ზევით ის გადადის წახნაგდაცენტრებული კუბური მესრის სტრუქტურაში (γ -რკინა). ტუტე ლითონების კრისტალური მესერი მოცულობითად დაცენტრებული კუბია. დაბალი ტემპერატურების არეში ლითიუმი და ნატრიუმი ჰექსაგონალური უმჭიდროესი წყობის მესრებს ქმნიან, მაგრამ ლითიუმის პლასტიკური დეფორმაცია დაბალი ტემპერატურის დროს იწვევს მისი სტრუქტურის შემდგომ შეცვლას და წახნაგდაცენტრებულ კუბურ მესერზე გადასვლას. ჩვეულებრივ პირობებში მოდიფიკაციების ყველაზე დიდი რიცხვი (ექვსი) გააჩნია, პლუტონიუმს. γ -პლუტონიუმის რომბული უჯრედი $8\frac{1}{2}$ ატომს შეიცავს, ხოლო δ პლუტონიუმის მესერი წარმოადგენს წახნაგდაცენტრებულ კუბს. საინტერესოა ელემენტს პოლიმორფული გარდაქმნების თვალსაზრისით წარმოადგენს მანგანუმი, რომელსაც რთული სტრუქტურის მქონე სამი მოდიფიკაცია გააჩნია. α -მანგანუმის კუბურ ელემენტარულ უჯრედში 58 ატომია, რომელიც ოთხ სტრუქტურულად არაეკვივალენტურ ნაწილებად იყოფიან. რამდენიმე მოდიფიკაცია გააჩნიათ ქრომს, ვოლფრამს, ურანს და მრავალ სხვა ლითონს. შესამჩნევ გავლენას პოლიმორფულ გარდაქმნებზე ახდენს აგრეთვე წნევის შეცვლა. ასე, მაგალითად, ცნობილია, რომ ჩვეულებრივ პირობებში გერმანიუმი და სილიციუმი ნახევარგამტარებს წარმოადგენენ. დიდი წნევის ქვეშ ისინი გადადიან ლითონურ მოდიფიკაციაში თეთრ კალის ტეტრაგონალური მესრის სტრუქტურით.

ლანთანიდების სტრუქტურაც სფეროების უმჭიდროეს წყობას წარმოადგენს. მაგრამ, აქ ჩვეულებრივ ორფენოვან (ჰექსაგონალური) და სამფენოვან (კუბური) სტრუქტურებს გარდა ვხვდებით ოთხფენოვანი, (პროზეოდირი, ნეოდირი) და ცხრაფენოვანი (სამარიუმი) სფეროების უმჭიდროესი წყობის სტრუქტურებს.

საზოგადოდ, ლითონური ელემენტების სტრუქტურის წარმოდგენა, როგორც ერთმანეთის მიმართ შეხებაში მყოფი სფეროების უმჭიდროესი წყობისა, საშუალებას იძლევა განისაზღვროს ლითონური (ატომური) რადიუსი, რომელიც ატომთშორისი უმოკლესი მანძილის ნახევრის ტოლია და კრისტალურ მესერში ბმების სიმტკიცის ერთ-ერთ ძირითად დამახასიათებელ სიდიდეს წარმოადგენს.

ატომებს შორის უმოკლესი მანძილის განსაზღვრა ხდება რენტგენოსტრუქტურული მონაცემების საფუძველზე.

დაკვირვება გვიჩვენებს, რომ ბმის ძალების ზრდა კრისტალურ მესერში იწვევს ატომთშორისი მანძილის შემცირებას. ამიტომ მოსალოდ-

ნელია, რომ იმ ლითონის ატომური რადიუსი, რომლის კოორდინაციული რიცხვიც თორმეტია, ცოტათი მეტი იქნება, ვიდრე ლითონია, რომლის კოორდინაციული რიცხვიც უდრის რვას. განსხვავება ამ შემთხვევაში დაახლოებით 0,04—0,06 Å ფარგლებშია. ცხრილებში ჩვეულებრივ მოცემულია ატომური რადიუსების მნიშვნელობები თორმეტი კოორდინაციული რიცხვისათვის. 6.5 ცხრილში მოყვანილია ატომური რადიუსები პერიოდული სისტემის მეოთხე და მეხუთე პერიოდების ლითონებისათვის.

ცხრილი 6.5

K	Ca	Se	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga
2,36	1,97	1,65	1,46	1,34	1,27	1,30	1,26	1,25	1,25	1,28	1,39	1,39
Rb	Sr	J	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	Jn
2,48	2,15	1,82	1,60	1,45	1,39	1,35	1,34	1,36	1,37	1,44	1,55	1,66

როგორც ცხრილიდან ჩანს, თითოეული პერიოდის დასაწყისში, ელემენტის რიგითი ნომრისა და ვალენტური ელექტრონების რიცხვის ზრდასთან ერთად, რადიუსის მნიშვნელობა მცირდება. შემდეგ ეს მნიშვნელობა გაივლის მინიმუმს და ბოლოს ისევ იწყებს ზრდას. რადიუსის შემცირება მიმდინარეობს მანამ, სანამ ვალენტური შრის შევსება ხდება ელექტრონებით, რომლებსაც უნარი აქვთ შექმნან ახალი ბმები. ასე, მაგალითად, მეოთხე პერიოდის ელემენტებისათვის ბმებს ქმნიან 3d, 4s და 4p ელექტრონები, რომელთა ორბიტალების საერთო რიცხვი უდრის ცხრას. ამიტომ, როდესაც ატომზე მოდის 9 ელექტრონი, შესაძლებელია შეიქმნას ბმების მაქსიმალური რიცხვი. ელექტრონების რაოდენობის შემდგომი ზრდის დროს ორბიტალების ნაწილი დაკავებული იქნება შეწყვილებული ელექტრონებით, რომლებიც ბმებში მონაწილეობას არ მიიღებენ: ამიტომ რადიუსის მნიშვნელობა ნელ-ნელა გაიზრდება.

მეხუთე ხსნარების სტრუქტურა

თუ წმინდა ლითონს დავემატებთ სხვა ნივთიერების ატომებს, წარმოიშობა შენადნობი. შენადნობის შექმნის პროცესში ატომების ქიმიური ბუნებისა და მათი ფარდობითი ზომების მიხედვით შეიძლება ადგილი ჰქონდეს შემდეგ შემთხვევებს:

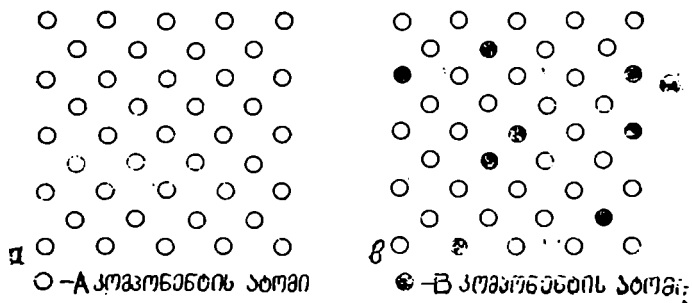
1. დამატებითი ელემენტის ატომი ან, როგორც მას უწოდებენ, მალეგირებელი ნივთიერების ატომი უშუალოდ იჭრება ძირითადი ნივთიერების (მატრიცის) კრისტალური მესრის კვანძებში ან კვანძებს შორის არსებულ სიცარიელეებში. ასეთ შემთხვევაში მიიღება ამ ნივთიერებათა მყარი ხსნარები.

2. კომპონენტების ატომების ურთიერთქმედების შედეგად წარმოიშობა ახალი ნივთიერება ან ფაზა, რომლის კრისტალური მესერიც სრულებით განსხვავებულია შემადგენელი კომპონენტების მესრებისაგან. ასეთ ნაერთებს ინტერმეტალური შენაერთები ან შუალედური ფაზები ეწოდება.

განვიხილოთ მყარი ხსნარის შექმნის პირობები. თუ მეორე კომპონენტის ატომები უწყსრიგოდ, ყოველგვარი კანონზომიერების გარეშე, იკავებენ მატრიცის კრისტალურ მესერში მისი ძირითადი ატომების ადგილებს, წარმოიშობა ჩანაცვლების მყარი ხსნარი (ნახ. 6.44).

როდესაც მეორე კომპონენტის ატომები თავსდებიან პირველი კომპონენტის კრისტალური მესრის ატომთა შორის შექმნილ სიცარიელებებში, მყარ ხსნარს ჩანერგვითი ეწოდება (ნახ. 6.45).

როგორც ჩანაცვლების, ისე ჩანერგვის მყარი ხსნარების მიღება დამოკიდებულია შემადგენელი კომპონენტების ქიმიურ ბუნებაზე. ყველა ლითონი არ იხსნება ერთიმეორეში, ხოლო ბევრი მათგანი იხსნება მხოლოდ ნაწილობრივად კონცენტრაციების გარკვეულ არეში. ჩანაცვლების მყარი ხსნარების უწყვეტი რიგის მიღება შესაძლებელია მხოლოდ იმ შემთხვევაში, როდესაც კომპონენტებს ერთნაირი კრისტალური მესერი გააჩნიათ. მართლაც, კონცენტრაციის 'შეცვლით' ერთი კომპონენტის მესერი არ შეიძლება თანდათან გადავიდეს მეორე კომპონენტის მესერში, თუ ისინი სხვადასხვა სიმეტრიის არიან და ამიტომ ხსნადობა შეზღუდული იქნება. მაგრამ მხოლოდ ერთნაირი ტიპის მესრების არსებობა ჯერ კიდევ არ განსაზღვრავს ელემენტების სრულ ხსნადობას. მაგალითად, სპილენძს და ვერცხლს ერთნაირი ტიპის კრისტალური მესრები გააჩნიათ, მაგრამ ოთახის ტემპერატურაზე მათი ურთიერთხსნადობა 1%-ს არ აღემატება. საჭიროა, რომ მყარი ხსნარის შექმნის პროცესში სისტემის თავისუფალი ენერგია მცირდებოდეს. კრისტალური

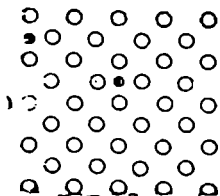


ნახ. 6. 44. ა. სუფთა ლითონის მესერი. ბ. ჩანაცვლების მყარი ხსნარი.

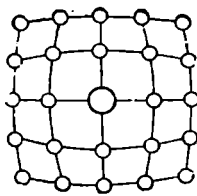
მესრის ენერჯის შეცვლა ხსნადობის დროს დაკავშირებულია გამხსნელისა და გახსნილი ნივთიერების ატომების ზომებთან, ვინაიდან განსხვავება ატომურ რადიუსებში იწვევს ჩანაცვლებული ატომის ირგვლივ მყოფი მეზობელი ატომების გადაადგილებას და მესრის ლოკალურ დეფორმაციას. მესრის ლოკალური დეფორმაცია იმ შემთხვევისათვის, როდესაც გახსნილი ნივთიერების ატომები მეტი ან ნაკლებია გამხსნელის ატომებზე, სქემატურად ნაჩვენებია 6.46 ნახაზზე. ასეთი დამახინჯების არსებობა განსაზღვრავს ძაბვების ზრდას კრისტალურ მესერში და მისი პოტენციური ენერჯის გადიდებას. ამიტომ, თუ გამხსნელის და გახსნილი ნივთიერების ატომების რადიუსებს შორის არსებობს დიდი განსხვავება, ხსნარის პოტენციური ენერჯია იზრდება ლოკალური დრეკადი დეფორმაციების ხარჯზე და, მაშასადამე, იზრდება მისი თავისუფალი ენერჯიაც ($F=U-TS$).

დაკვირვება გვიჩვენებს, რომ სრული ხსნადობა შეიმჩნევა იმ ნივთიერებებს შორის, რომელთა ატომური რადიუსების სხვაობა არ აღემატება 10—15%-ს. დამახასიათებელ სიდიდედ ამ შემთხვევაში იღებენ განზომილებით ან მოცულობით ფაქტორს— რომელიც მატრიცის ატომის რადიუსისა და მინარევის ატომის რადიუსების სხვაობის შეფარდებას წარმოადგენს მატრიცის ატომის რადიუსთან ($\frac{\Delta r}{r}$); ხელსაყრელი ფაქტორი სრული ხსნადობისათვის იქნება მაშინ, როდესაც სრულდება პირობა $\frac{\Delta r}{r} \leq 0.14$.

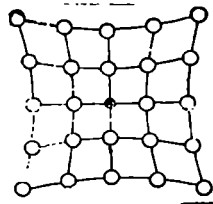
მესამე ძირითად ფაქტორს ელემენტების სრული ხსნადობის დროს წარმოადგენს კომპონენტების ქიმიური სიახლოვე ან, როგორც ამბობენ, ელექტროქიმიური ფაქტორი. იმისათვის, რომ ერთი ნივთიერების ატომი შეენაცვლოს კრისტალურ მესერში მეორე ნივთიერების ატომს, საჭიროა მათი ქიმიური თვისებების მსგავსება. მაგალითად, ორივე ატომი უნდა იყოს 'ელექტროდადებითი. დიდი განსხვავება ატომების ელექტროდად-



ნახ. 6. 45. ატომების განლაგება ჩანერგვითი მყარი ხსნარის კრისტალურ მესერში.



ნახ. 6. 46. კრისტალური მესრის ლოკალური დამახინჯება.

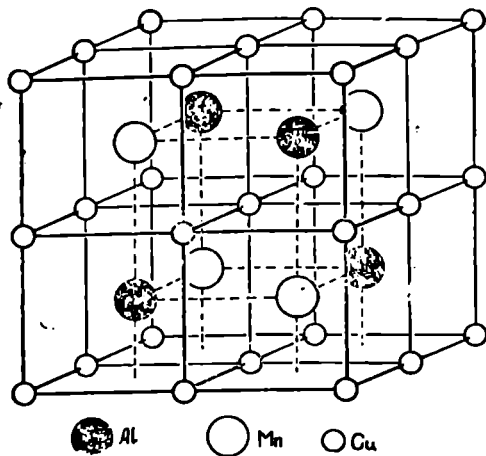


ბითობებს ან ელექტროუარყოფითობებს შორის მათი ურთიერთქმედების შედეგად წარმოშობს ინტერმეტალურ ქიმიურ ნაერთს. ამიტომ სრულ ხსნადობას ძირითადად იძლევიან ელემენტები, რომლებიც პერიოდული სისტემის ერთ ჯგუფს ეკუთვნიან, მაგალითად, Cu და Au, Ag და Au, Bi და Sb, Co და Fe ან მეზობელ ჯგუფებში იმყოფებიან: Cu და Ni, Ti და Ta და მრავალი სხვა. ფაქტიურად ქიმიური მსგავსების საკითხი ისევ ხსნარის თავისუფალი ენერჯის შემცირებასთან არის დაკავშირებული იმიტომ, რომ „მონათესავე“ ატომების ურთიერთქმედება ბევრად არ განსხვავდება ერთი და იგივე ტიპის ატომების ურთიერთქმედებისაგან და შერევის ენერჯია, ამ შემთხვევაში, მცირეა.

ზემოთ ნათქვამი იყო, რომ ჩანაცვლების მყარ ხსნარში გახსნილი ნივთიერების ატომები სრულიად ქაოსურად არიან განწილებული მატრიცის კრისტალურ მესერში. მყარი ხსნარის ასეთი მდგომარეობა წონასწორულად შეიძლება ჩაითვალოს მხოლოდ მაღალი ტემპერატურის დროს. ჩვეულებრივ ტემპერატურებზე ადგილი აქვს ამ სურათიდან შესამჩნევ გადახრას. როგორც ბოლო დროს რენტგენის სხივების დიფრაქციური გაბნევის მეთოდით ჩატარებულმა გამოკვლევებმა ცხადყო, გახსნილი ნივთიერების ატომები არც თუ ისე ქაოსურად ლაგდებიან გამხსნელის კრისტალურ მესერში. ისინი ირჩევენ გარკვეულ მდგომარეობებს და გარკვეულ წესრიგს. თუ გახსნილი ნივთიერების ატომები გარკვეული წესრიგით იკავებენ ადგილებს გამხსნელის მესერში, ამბობენ, რომ ადგილი აქვს მყარი ხსნარის მოწესრიგების მოვლენას.

მყარ ხსნარებში ჩარჩევენ ატომების მოწესრიგებული განლაგების ორ სახეს: ახლო წესრიგი და შორეული წესრიგი. ახლო წესრიგის დროს იგულისხმება მოცემული ატომის უახლოესი მეზობლები. მაგალითად, თუ ხსნარის შემადგენლობაა 1:1, სრული ახლო წესრიგი შეიქმნება იმ შემთხვევაში, თუ A ტიპის ატომის უახლოესი მეზობლები იქნება მხოლოდ B ტიპის ატომები. საერთოდ, მოწესრიგების პროცესი ხსნარის სხვადასხვა წერტილში იწყება. პირველ რიგში იქმნება მოწესრიგების მცირე არეები, რომლებიც თანდათან ფართოვდებიან და იკავებენ მთელ კრისტალს. ამ მცირე არეებს ხშირად მოწესრიგების დომენებს უწოდებენ. თითოეულ დომენში სრული მოწესრიგებაა, მაგრამ დომენების საზღვარზე ეს წესრიგი ირღვევა, ამიტომ კრისტალი მთლიანად მოუწესრიგებელია.

შორეული წესრიგის დროს, როგორც A ისე B ტიპის ატომები იქვრენ სრულიად გარკვეულ ადგილებს კრისტალურ მესერში მთლიანად. მაგალითისათვის 6.47 ნახაზზე მოცემულია Cu, Mn და Al მოწესრიგებული სამმაგი შენადნობის (გეისლერის შენადნობი) ელემენტარული უჯ-



ნახ. 6. 47. Cu_2MnAl -ის მოწესრიგებული სტრუქტურა.

რედი. ატომების ასეთი განლაგება მეორდება თითოეულ ელემენტარულ უჯრედში და მთელ კრისტალში.

მყარი ხსნარების მეორე სახეს ჩანერგვითი მყარი ხსნარები წარმოადგენენ. როგორც აღნიშნული იყო, ამ შემთხვევაში მინარევი ატომები თავსდებიან მატრიცის კრისტალური მესრის სიციარიელებში. მაგრამ ლაიონები როგორც წესი, ქმნიან სფეროების უმჭიდროესი წყობის მსგავს სტრუქტურებს ისეთივე ფორებით, როგორც ამ უკანასკნელთ გაჩნიათ. სფეროების უმჭიდროესი წყობის განხილვის დროს ჩვენ დავინახეთ, რომ არსებობს ორი ძირითადი სახის სიციარიელები: ოქტაედრული, რომელთა რადიუსი მატრიცის სფეროების რადიუსის 0.41-ს შეადგენს, და ტეტრაედრული, რომლის რადიუსი მატრიცის სფეროების 0.22-ია. ასევე, მოკულობა და ცენტრებული კუბის შემთხვევაში ოქტაედრული სიციარიელის რადიუსი არის ძირითადი სფეროს 0,15, ხოლო ტეტრაედრულის — 0,29.

ჩანერგვითი ხასიათის მყარი ხსნარის შექმნა შეუძლია მცირე ატომური რადიუსის ელემენტს, რომელაც თავისი ზომებით მოთავსდება ტეტრაედრულ ან ოქტაედრულ სიციარიელებში. ასეთი მცირე რადიუსის ელემენტებს წარმოადგენენ ნახშირბადი, აზოტი, წყალბადი, ბორი, სილიციუმი და ზოგიერთ შემთხვევაში ჟანგბადიც. თუმცა ჟანგბადის ატომის ჩანერგვა ხდება იშვიათად; რადგანაც მიაღი დადი ელექტროუარყოფითობის გამო ის ადვილად ქმნის საკმაოდ დიდი რადიუსის მქონე

ნე იონს O^{2-} . ჩანერგვითი ხასიათის სტრუქტურებს ქმნიან გარდამავალი ლითონები აღნიშნულ ატომებთან. ასე იქმნება ჰიდრიდები, კარბიდები, ბორიდები, ნიტრიდები და სხვა სახის ნაერთები. ამ ნივთიერებების ძირითად წყობას ლითონის (Me) ატომები წარმოადგენენ. ხოლო სტრუქტურის ფორმებში გარკვეული წესით თავსდება ალანიშნული არალითონური ელემენტები (X). იმის გამო, რომ გახსნის შემდეგ ლითონის ძირითადი მესერი ინარჩუნებს თავის სახეს, ეს ლითონები არ კარგავენ თავის ლითონურ თვისებებს.

როგორც ვიცით, უმჭიდროესი წყობის სტრუქტურებში იმდენი ოქტაედრული სიციარიელა, რამდენიც ატომია ელემენტარულ უჯრედში, ამიტომ ყველა ოქტაედრული სიციარიელის შევსების დროს წარმოიშობა $MeX(TaC, ZrH, TiN)$ შემადგენლობის ფაზები. ნახევარი ოქტაედრული სიციარიელის შევსებისას ადგილი ექნება $Me_2X (Fe_2N, Ti_2H, W_2C)$ შემადგენლობის ფაზებს, ხოლო თუ შევსებულია ყველა ტეტრაედრული სიციარიელე, მივიღებთ $MeX_2 (TiH_2, UC_2)$ ფაზებს, ვინაიდან ტეტრაედრული ფორები ატომების რიცხვზე ორჯერ მეტია.

დაკვირვება გვიჩვენებს, რომ თუ არალითონური ატომისა და ლითონის ატომის რადიუსების ფარდობა $\frac{r_x}{r_{Me}} < 0,59$, წარმოიშობა უმჭიდროესი წყობის მარტივი სტრუქტურები, სადაც არალითონური ატომი ჩანერგულია ლითონური ატომების მიერ შექმნილი სტრუქტურის ფორმებში. თუ სრულდება პირობა, რომ $\frac{r_x}{r_{Me}} > 0,59$, მიიღება შენაერთები, რომლებსაც რთული, სპეციფიკური ხასიათის სტრუქტურა აქვთ.

შუალედური ფაზები

ზემოთ აღნიშნული იყო, რომ ლითონური ატომების ურთიერთქმედების შედეგად შესაძლებელია წარმოიშვას ახალი ფაზა, რომლის კრისტალური მესერი სრულებით განსხვავებული იქნება საწყისი კომპონენტების ატომური მესრებისაგან. ეს იქნება ახალი ტიპის ქიმიური შენაერთი მეტალურ ატომებს შორის, რომელსაც ინტერმეტალური შენაერთი ან შუალედური ფაზა ეწოდება. მოწესრიგებული მყარი ხსნარები, ზოგიერთ შემთხვევაში, შესაძლებელია განვიხილოთ, როგორც შუალედური ფაზები. იმის გამო, რომ ლითონურ ნაერთებში ძირითად როლს ლითონური კავშირი ასრულებს, რომელიც თავისუფალი ელექტრონების არსებობას ემყარება, მოთხოვნა მკაცრი კოორდინაციისადმი აქ შესუსტებულია იონურ და კოვალენტურ ნაერთებთან შედარებით. იმავე მიზეზით, ასეთი ტიპის ნაერთებში ხშირად ვხვდებით სტექიომეტრიული

შემადგენლობიდან საკმაოდ დიდ ვადახრებს. ზოგიერთ შემთხვევაში შუალედური ფაზები კონცენტრაციის გარკვეულ მონაკვეთს მოიცავენ.

ლითონური შენაერთების საკმაოდ დიდ ჯგუფს შეადგენენ ე. წ. ელექტრონული ნაერთები (იუმ-როზერის ფაზები), ნაერთები, რომლებშიც საკმაოდ მკაცრად არის დაცული ატომთა შორის სტეკიომეტრიული თანაფარდობანი (ლავესის ფაზები) და ზოგიერთი სხვა.

ლითონურ ელემენტებს შორის ქიმიური შენაერთის შექმნას ძირითადად განაპირობებს სამი ფაქტორი, ამთავან პირველი და უმნიშვნელოვანესი არის ელემენტების ელექტროუარყოფითობა. ელექტროუარყოფითობა განისაზღვრება მისი ატომების უნარით მიიერთონ ვალენტური ელექტრონები, ამიტომ ელემენტების შეფარდებითი ელექტროუარყოფითობები, თვისობრივად მაინც, განსაზღვრავენ შუალედური ფაზების შექმნის ალბათობას და ამ ფაზებში მოქმედი ბმების ბუნებას.

მეორე მნიშვნელოვან ფაქტორს, ინტერმეტალური შენაერთის შექმნის პროცესში, წარმოადგენს ე. წ. შეფარდებითი ვალენტობის ფაქტორი, რომელიც განპირობებულია ელექტრონული კონცენტრაციით. ელექტრონული კონცენტრაცია განისაზღვრება შენადნის ელემენტარულ უჯრედში ვალენტური ელექტრონების (n_e) რიცხვის შეფარდებით უჯრედში მყოფი ატომების (n_a) რიცხვთან.

და, ბოლოს, ატომების შეფარდებითი ზომების ფაქტორი. აღმოჩნდა, რომ შუალედური ფაზების დიდი ჯგუფი (მაგალითად, AB_2 შემადგენლობის მქონე ლავესის ფაზები) იქმნება იმის გამო, რომ ატომები, მათი რადიუსების გარკვეული თანაფარდობის შედეგად იოლად ავსებენ სივრცეს (მისი მაქსიმალური დაკავების თვალსაზრისით) კრისტალური მესრის შექმნის პროცესში.

ელექტრონული ნაერთები. 1b ჯგუფის ლითონები (Cu, Ag, Au) პერიოდული სისტემის II—V ჯგუფის ელემენტებთან შეერთებისას, ქმნიან შენადნების ჯგუფს, რომლებსაც ელექტრონული ნაერთები ან იუმ-როზერის ფაზები ეწოდება. ამ ფაზების სტრუქტურა ხასიათდება ელექტრონული კონცენტრაციის გარკვეული მნიშვნელობებით, ე. ი. ვალენტური ელექტრონებისა და ელემენტარულ უჯრედში შემავალი ატომების თანაფარდობით. ვალენტურად მიღებულია ელექტრონები, რომლებიც ბოლო შეუვსებელ გარსში იმყოფებიან, ისე, როგორც ეს ნაჩვენებია შემდეგ ცხრილში.

ელექტრონულ ნაერთებში, ერთი და იგივე სტრუქტურის მქონე ფაზებს, გააჩნიათ ელექტრონების რიცხვის ატომების რიცხვთან ერთნაირი თანაფარდობა. ასე, მაგალითად, $AgCd$ -ის ნაერთში ვერცხლისა და კადმიუმის ორ ატომზე მოდის სამი ვალენტური ელექტრონი (ერთი ვერცხლისაგან, ხოლო ორი კადმიუმისაგან). ელექტრონული კონცენტრა-

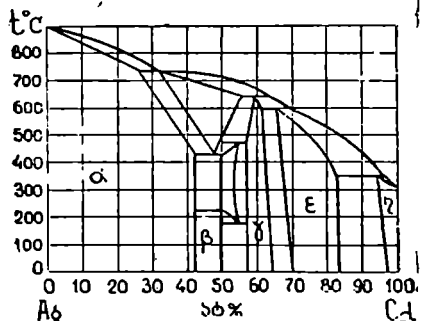
ვალენტობა	ელემენტი	პერიოდული სისტემის ჯგ.
1	Cu, Ag, Au	I
2	Be, Mg, Zn, Cd, Hg	II
3	Ga, Al, In	III
4	Si, Ge, Sn, Pb	IV
5	P, As, Sb, Bi	V
0	Fe, Co, Ni, Ru, Rh, Pd, Pt, Ir, Os	VIII

ცია უდრის $3/2$. ასეთივე ელექტრონული კონცენტრაცია გააჩნია მსგავსი სტრუქტურის ნაერთს — Cu_3Al , სადაც 4 ატომზე 6 ვალენტური ელექტრონია, ან Cu_3Sn , Au_3Al და მრავალ სხვას.

აღმოჩენილია ელექტრონული ნაერთების ან იუ მ-როზერის ფაზების ოთხი ტიპი. პირველ ტიპს მიეკუთვნება ფაზები, რომელთა ელექტრონული კონცენტრაცია უდრის $3/2$. თუ განვიხილავთ $Ag - Cd$ სისტემის მდგომარეობის დიაგრამას (ნახ. 6.48) (ასეთივე დიაგრამებით ხასიათდებიან $Cu - Zn$, $Ag - Zn$ და მრავალი სხვა შენადნობი), დავინახავთ, რომ ძირითად ფაზებს აქ წარმოადგენენ α , β , γ , ϵ და η ფაზები. ამ ტიპის ყველა შენადნობში α -ფაზა წახანგდაცენტრებული კუბური მესრის სტრუქტურით ხასიათდება და წარმოადგენს ჩვეულებრივ მყარ ხსნარს, მისი ზღვრული ელექტრონული კონცენტრაციაა $7/5 = 1,4$. β -ფაზა ელექტრონული ნაერთია $3/2$ -ის ტოლი ელექტრონული კონცენტრაციით და მოცულობითად დაცენტრებული კუბის სტრუქტურით. უჯრედის ცენტრში მოთავსებულია Cd -ის ატომი, ხოლო კუბის წვეროებში ვერცხლის ატომებია განლაგებული (ცეზიუმის ქლორიდის სტრუქტურა).

ზოგიერთ შენადნობში, რომლებიც აგრეთვე $3/2$ -ის ტოლი ელექტრონული კონცენტრაციით ხასიათდებიან, ჩნდება ფაზები β -მანგანუმის რთული სტრუქტურით (β' -ფაზები). ასეთ შემთხვევაშიც სტრუქტურა კუბურია, რომლის ელემენტარულ უჯრედში 20 ატომია მოთავსებული.

γ — ფაზაც ელექტრონული ნაერთია რთული სტრუქტურით. მის ვეებერთელა ელემენტარულ უჯრედში 52 ატომია, ხოლო ელექტრონული კონცენტრაცია $n_e/n_a = 21/13$. ანალოგიური სტრუქტურებით ხასიათდებიან ფაზები: Cu_5Zn_{18} ,



ნახ. 6.48. $Ag - Cd$ — სისტემის მდგომარეობის დიაგრამა.

Ag_5Zn_8 , Cu_9Al_4 და მრავალი სხვა. γ — ფაზის ელემენტარული უჯრედი შესაძლებელია წარმოვიდგინოთ შემდეგნაირად: თითოეული კოორდინატთა ღერძის [გასწვრივ უნდა ავიღოთ სამი—მოცულობითად დაცენტრებული კუბური უჯრედი. სულ მიიღება 27 ელემენტარული უჯრედი და ამგვარად მიღებულ აქვს მოვაცილოთ წვეროებში და ცენტრში მოთავსებული ატომები. ასე მიიღება γ —ფაზის სტრუქტურა.

ϵ და η ფაზებიც, აგრეთვე, ელექტრონული ნაერთებია, ელექტრონული კონცენტრაციით $n_e/n_a=7/4$, ჰექსაგონალური უმჭიდროესი წყობის სტრუქტურით. ასეთი ტიპის ფაზებს მიეკუთვნება $CuZn_3$, Cu_3Ge , Cu_3Sn , $AgCd_3$ და მრავალი სხვა.

ელექტრონული ნაერთის ამა თუ იმ ტიპის წარმოშობა დაკავშირებულია ელექტრონების ენერჯის წილთან მესრის სრულ ენერჯიაში. ბრიულენის ზონა, რომელიც მოცემულ სტრუქტურას შეესაბამება და ელექტრონების გარკვეულ ენერჯიებს შეიცავს, სტაბილურია მხოლოდ ელექტრონების გარკვეული რიცხვის მიმართ, რომელიც, თავის მხრივ, ბრიულენის პოლიედრის მოცულობის პროპორციულია. ზონის შევსება ელექტრონებით იწვევს სტრუქტურის მდგრადობის დაზღვევას. ეს ხდება მაშინ, როდესაც ფერმის ზედაპირი უახლოვდება ზონის საზღვრებს. ასეთ შემთხვევაში წარმოიშობა ახალი სტრუქტურა, უფრო სტაბილური, რომლის ბრიულენის პოლიედრი შესაბამისი იქნება გაზრდილი ელექტრონული კონცენტრაციის მიმართ. ასე, მაგალითად, α — ფაზის წახნაგდაცენტრებული მესრისათვის ზღვრული ელექტრონული კონცენტრაცია, როგორც ზემოთ იყო აღნიშნული, უდრის 1.4. γ — ფაზის პირველი პოლიედრისათვის ის 21/13-ს უდრის და ა. შ. ასე განისაზღვრება მეორე ლითონის პირველში ხსნადობის საზღვრები. ცხადია, ეს ზღვარი დამოკიდებული იქნება მეორე ლითონის ვალენტობისაგან.

ინტერმეტალური შენაერთები. საზოგადოდ, მარტივი სტექიომეტრიული თანაფარდობანი დამახასიათებელია მოწესრიგებული მყარი ხსნარებისათვის. მაგრამ, ზოგიერთ შემთხვევაში, ინტერმეტალურ შენაერთებშიც გვხვდება ფაზები, რომლებიც ხასიათდებიან მარტივი ატომური თანაფარდობით. მხოლოდ, იონური და კოვალენტური შენაერთებისაგან განსხვავებით, სადაც დაცულია ვალენტობის წესი, ამ შემთხვევაში, ატომური თანაფარდობანი შესაძლებელია არ შეესაბამებოდნენ ვალენტოვნების მოთხოვნებს. მაგრამ კრისტალურ სტრუქტურაში მათთვის აუცილებელია ატომების გარკვეული პოზიციების დაკავება, როდესაც ეს ატომები მოწესრიგებულ მდგომარეობაში იმყოფებიან.

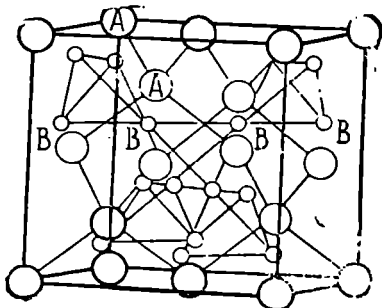
ინტერმეტალურ შენაერთებს შორის ჩვენ გამოვყოფთ ე. წ. ლაკეის ფაზებს, რომლებიც ხასიათდებიან სტრუქტურული ფორმულით და ყველაზე მრავალრიცხოვან ჯგუფს შეადგენენ.

იმ ფაქტორებს შორის, რომელნიც განაპირობებენ ასეთი ტიპის ინტერმეტალური ნაერთების სტრუქტურას, უმთავრესია ატომური რადიუსების თანაფარდობა. გარკვეულ როლს თამაშობს აგრეთვე ელექტრონული კონცენტრაცია და კოვალენტური [და იონური კავშირების მცირე წილი ლითონურ ბმავში. როდესაც ატომური რადიუსების შეფარდება დაახლოებით ერთია, ე. ი. როდესაც სფეროები თითქმის ერთნაირი რადიუსის არიან, როგორც ვიცი, იქმნება კომპაქტური უმჭიდროესი წყობა საკოორდინატო რიცხვით — 12 ან 8. მაგრამ, როდესაც ატომების რადიუსები დიდად განსხვავდებიან ერთმანეთისაგან და მათი შეფარდება აღწევს $r_A/r_B=1,225$, იქმნება ლავესის ფაზები საკოორდინაციო რიცხვებით 12 და 16. ამგვარად, ლავესის ფაზები წარმოადგენენ სფეროების უმჭიდროესი წყობის ფაზებს, რომელთა საერთო ფორმულა დაახლოებით AB_2 -ით გამოიხატება და კრისტალიზდებიან ძირითადად სამ სტრუქტურულ ტიპად.

1. $MgCu_2$ -ის სტრუქტურული ტიპი. ეს ფაზა კრისტალიზდება კუბის უმჭიდროეს წყობაში ფენების თანამიმდევრობით $ABCA BC$ (ნახ. 6.49). მაგნიუმის დიდი ატომები (A) ქმნიან ალმაზის ტიპის სტრუქტურას, ხოლო მცირე ზომის სპილენძის (B) ატომები თავსდებიან ტეტრაედრულ ფორებში ჯგუფებად — ოთხი სპილენძის ატომი პატარა ტეტრაედრის სახით. ამგვარად, $MgCu_2$ -ის ელემენტარული უჯრედი შეიცავს მაგნიუმის 8 ატომს, ხოლო სპილენძის — 16 ატომს, ნახაზიდან ჩანს, რომ:

$$d_{AA}=a\sqrt{3}/4, \quad d_{BB}=a\sqrt{2}/4; \quad \text{აქედან, } d_{AA}/d_{BB}=r_A/r_B=\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}}=1,225.$$

2. $MgZn_2$ -ის სტრუქტურული ტიპი. ჰექსაგონალური უმჭიდროესი წყობის სტრუქტურა ფენების თანამიმდევრობით $ABABAB\dots$ სივრცობრივი ჯგუფი $P6_3/mmc$. ელემენტარული უჯრედი შეიცავს $MgZn_2$ -ის 4 ერ-



ნახ. 6. 49. $MgCu_2$ — ფაზის ელემენტარული უჯრედი.
A — მაგნიუმის ატომები. B — სპილენძის ატომები.

თელს. მისი სტრუქტურა შესაძლებელია განვიხილოთ, როგორც $MgCu_2$ -ის ჰექსაგონალური ანალოგი.

3. $MgNi_2$ -ის სტრუქტურული ტიპი ჰექსაგონალური მესრის სტრუქტურით. ოთხფენოვანი უმკიდროესი წყობით $ABACABAC\dots$

ყველა აღნიშნული სტრუქტურული ტიპები ხასიათდება დიდი საკოორდინაციო რიცხვებით. შენაერთები, რომლებსაც მაღალი კოორდინაცია და დიდი კომპაქტურობა ახასიათებთ, შესაძლებელია წარმოიშვან იმ შემთხვევაში, როდესაც ატომურ რადიუსებს შორის არსებობს დიდი სხვაობა და მსხვილი ატომების მიერ შექმნილ წყობაში არსებული ფორების შევსება ხდება მცირე ზომის ატომებით; როგორც ეს ნაჩვენებია იყო $MgCu_2$ შენაერთის სტრუქტურის განხილვის დროს.

არსებობს კიდევ სხვა ტიპის ლავისის ფაზები, მაგალითად, AB_3 , A_3B , მაგრამ ისინი შედარებით მცირერიცხოვან ჩგუფს შეადგენენ და ამიტომ მათ განვილვას აქ არ შევუდგებით.

§ 27. მოლეკულური ზმა. მოლეკულური კრისტალების სტრუქტურა

ჩვენ დავინახეთ, რომ არსებობენ საკმაოდ ძლიერი ძალები, რომელიც განაპირობებენ ატომების მიერ ურთიერთმიზიდვას და მდგრადი ქიმიური ინდივიდუუმის შექმნას მოლეკულის სახით. ისინი აკავშირებენ ატომებსა და იონებს კრისტალურ მესერში. ეს ურთიერთქმედების ძალები ქმნიან ქიმიური ბმის სხვადასხვა სახეობებს. მაგრამ ატომებსა და იონებს შორის არსებობენ სხვა სახის ძალებიც. მაგალითად, ინერტული გაზების ატომები, როგორცაა, ნეონი, ჰელიუმი; არგონი არ ქმნიან ერთმანეთთან ქიმიურ კავშირებს, მაგრამ ყველა ამ გაზის გადაყვანა შესაძლებელია თხევად ან კრისტალურ მდგომარეობაში, რომლის შედეგად გამოიყოფა სითბოს გარკვეული რაოდენობა. ეს იმას ნიშნავს, რომ ატომების დაახლოების პროცესში ხდება ენერჯის გამოთავისუფლება მიზიდვის ძალების მოქმედების შედეგად. ასეთი სახის მიზიდვის ძალებს, რომლებიც მოქმედებენ ატომებსა და მოლეკულებს შორის, როდესაც ქიმიური ბმის შექმნა შეუძლებელია, ეწოდება ვან-დერ-ვაალსის ძალები. ეს სახელწოდება დაკავშირებულია იმასთან, რომ სწორედ ამ ძალებით არის გამოწვეული შესწორება მიზიდვაზე, რომელიც შეაქვთ იდეალური გაზების მდგომარეობის განტოლებაში როდესაც გადადიან რეალური გაზების მდგომარეობის ვან-დერ-ვაალსის განტოლებაზე.

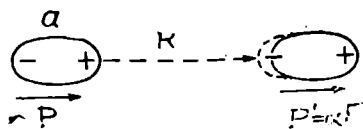
ვან-დერ-ვაალსის ძალებში იგულისხმება რამდენიმე სხვადასხვა სახის მოქმედება, რომლებსაც შემდეგში ცალ-ცალკე განვიხილავთ. ყოველ შემთხვევაში ყველა ეს მოქმედება, გაერთიანებულნი ვან-დერ-

ვაალსის ძალების სახით, წარმოადგენენ მიზიდვის ძალებს, რომელნიც მოქმედებენ არამარტო ისეთ ატომებს შორის, რომლებსაც შეესებულებული ელექტრონული გარსები გააჩნიათ, არამედ ნებისმიერ ატომებს, იონებსა და მოლეკულებს შორის. ამ თვალსაზრისით ვანდერ-ვაალსის ძალები წარმოადგენენ უნივერსალურ ძალებს, რომელთა მოქმედება ხშირად იფარება უფრო ძლიერი ქიმიური ძალების მოქმედებით. ისეთ შემთხვევაში, როგორცაა ინერტული გაზების ატომების ურთიერთქმედება, ეს ძალები წარმოადგენენ მიზიდვის ძალების ერთადერთ ტიპს, რომელიც განაპირობებს ამ ნივთიერებების თხევად და მყარ მდგომარეობას.

ის ფაქტი, რომ ყველა ინერტული გაზი და მრავალი მოლეკულური ნაერთი, რომლებსაც სფერული სიმეტრიის მოლეკულები გააჩნიათ, დაკრისტალდებიან სფეროების უმჭიდროესი წყობის კრისტალურ შესერში, მიუთითებს იმაზე, რომ ვან-დერ-ვაალსის ტიპის ბმები არ ხასიათდებიან ნაჭვრობით ან გარკვეული მიმართულებით, როგორც ამას ადგილი ჰქონდა კოვალენტური ბმის შემთხვევაში. ცნობილია, რომ ინერტული გაზებისა და მოლეკულური ნაერთების კრისტალებს აქვთ დნობის დაბალი ტემპერატურები და ამავე დროს თერმული გაფართოების და მექანიკური კუმშვის კოეფიციენტების დიდი მნიშვნელობები. ყოველივე ეს იმის მაჩვენებელია, რომ ვან-დერ-ვაალსის ძალები სუსტი ძალებია ქიმიური ბმის ძალებთან შედარებით. ამ ძალების სიდიდეზე შეიძლება ვიმსჯელოთ სუბლიმაციის სითბოს მიხედვით. მაგალითად, წყალბადისათვის ის 0,5 კკალ/მოლ სიდიდეს შეადგენს იმ დროს, როდესაც წყალბადის მოლეკულის ორ ატომად დისოციაციის სითბო დაახლოებით 100 კკალ/მოლ სიდიდის ტოლია. Cl_2 მოლეკულის ორი ქლორის ატომებად განცალკევებისათვის საჭიროა 57,2 კკალ/მოლ ენერგია, ხოლო იმისათვის, რომ კრისტალური არგონის მესრის ზედაპირიდან მოვაცილოთ ერთი ატომი, საჭიროა მხოლოდ 1,9 კკალ/მოლ ენერგიის დახარჯვა.

ყველა სახის მოქმედებები, რომლებსაც აერთიანებენ ვან-დერ-ვაალსის მიზიდვის ძალებში საბოლოო ჯამში ელექტროსტატიკური ბუნებისაა. ისინი ძირითადად განისაზღვრებიან ატომების პოლარიზაციით მეზობელი ატომების, იონების ან მოლეკულების გავლენით და ამ პოლარიზაციის ნიადაგზე წარმოშობილი ელექტრული დიპოლების ურთიერთქმედებით. ამიტომ ვან-დერ-ვაალსის მიზიდვის ძალების ბუნების გამოსარკვევად საჭიროა ცალ-ცალკე განვიხილოთ შემთხვევები, როდესაც ურთიერთქმედებენ ატომები, რომლებსაც შეესებულებული ელექტრონული გარსები აქვთ და საკუთარი ელექტრული მომენტი არ გააჩნიათ, და პოლარული მოლეკულები, რომლებიც ნულისაგან განსხვავებული საკუთარი დიპოლური მომენტით ხასიათდებიან.

ჯერ განვიხილოთ ისეთი ნივთიერება, რომელიც შედგება პოლარულ-



ნახ. 6. 50. ინდუქციური ურთიერთქმედების წარმოშობა \vec{p} მომენტის მქონე პოლარულ მოლეკულებში.

ლი მოლეკულებისაგან. ასეთი ნივთიერების მაგალითს წარმოადგენს წყალი, HCl-ის მოლეკულები და მრავალი სხვა. პოლარულ მოლეკულებს, როგორც ზემოთ იყო ნაჩვენები, გააჩნიათ ნულისაგან განსხვავებული მუდმივი დიპოლური \vec{p} მომენტი. 1920 წელს დებაიმ გამოთქვა მოსაზრებანი იმის შესახებ,

რომ პოლარული მოლეკულების ურთიერთქმედების ენერჯის გამოთვლის დროს საჭიროა მხედველობაში მივიღოთ არა მარტო ის დიპოლური მომენტი, რომელიც იზოლირებულ მოლეკულას გააჩნია, არამედ ის დამატებითი დიპოლური მომენტიც, რომელიც წარმოიშობა მოლეკულის პოლარიზებადობის შედეგად, მასზე მეზობელი მოლეკულების ელექტრული ველების მოქმედების გამო. ამის გასათვალისწინებლად ავიღოთ ორი \vec{p} მომენტის მქონე მოლეკულა, რომლებიც R მანძილით არიან დაშორებულნი და სიმარტივისათვის დავუშვათ, რომ მოლეკულების ღერძები და მათი შემაერთებელი \vec{R} რადიუს-ვექტორი განლაგებულია ერთ სწორ ხაზზე (ნახ. 6.50) ასეთი განლაგების შედეგად, (9.36) ფორმულის მიხედვით, a დიპოლის მიერ b დიპოლის მდებარეობის წერტილში შექმნილი ველის დაძაბულობა ტოლი იქნება $E = \frac{2p}{R^3}$ ვინაიდან \vec{R} რადიუს-ვექტორისა და დიპოლის ღერძს შორის

კუთხის კოსინუსი ერთია. \vec{E} ველის გავლენით b მოლეკულა პოლარიზდება და თუ პოლარიზებადობის კოეფიციენტი არის α , მაშინ მისი ახალი დიპოლური მომენტი იქნება $p' = \alpha E = \frac{2\alpha p}{R^3}$. ასეთი ინდუქციურული დიპოლი თავის მხრივ შექმნის ელექტრულ ველს, რომლის სიდიდე a დიპოლის განლაგების წერტილში იქნება $E' = \frac{2p'}{R^3} = \frac{4\alpha p}{R^6}$. ამ ველსა და a დიპოლს შორის წარმოიშობა ურთიერთქმედების ენერჯია, რომელიც (9.53) გამოსახულების მიხედვით a დიპოლის დიპოლური მომენტის, ველის დაძაბულობისა და მათ შორის მდებარე კუთხის კოსინუსის ნამრავლის ტოლია. ჩვენს შემთხვევაში ეს იქნება მიზიდვის ენერჯია $U = -pE' = \frac{4\alpha p^2}{R^6}$. პოტენციური ენერჯის გასაშუალება მოლეკულის

ყველა შესაძლებელი ორიენტაციისათვის ცვლის მხოლოდ რიცხობრივ კოეფიციენტს. ამიტომ საბოლოოდ შეიძლება დაეწეროს

$$U_{\text{ინდ}} = -\frac{4\alpha p^2}{R^0}. \quad (6.72)$$

ასეთი სახის ურთიერთქმედებას, რომელიც მოლეკულების ურთიერთპოლარიზაციით იქმნება, ინდუქციური ურთიერთქმედება ეწოდება. როგორც (6.72) გვიჩვენებს ინდუქციური ურთიერთქმედება არ არის დამოკიდებული ტემპერატურისაგან.

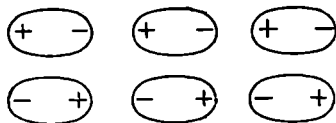
ინდუქციური ურთიერთქმედება არსებობს არა მარტო დიპოლურ მოლეკულებს შორის. ასეთ ურთიერთქმედებას ადგილი აქვს ცალკეულ მოლეკულაში, რომელიც დადებითი და უარყოფითი იონებისაგან შედგება, და იონებს შორის — იონურ კრისტალურ მესრებში. თითოეული იონი ახდენს მეორე იონის პოლარიზაციას, დიპოლად ქცეული ეს იონი მოქმედებს პირველ იონზე და ა. შ. ამიტომ იონებს შორის არსებულ ჩვე-

ულებრივ კულონურ ურთიერთქმედებას, რომელიც $\frac{1}{R}$ სიდიდის პროპორციულია, ყოველთვის ემატება შედარებით მცირე, $\frac{1}{R^6}$ სიდიდის პრო-

პორციული ინდუქციური ურთიერთქმედება, გამოწვეული იონების პოლარიზაციით.

მიზიდვის ინდუქციური ძალები არ წარმოადგენენ ვან-დერ-ვაალსური ბმის ერთადერთ ძალებს. თუ ისევ პოლარულ მოლეკულებს დავებრუნდებით,

დავინახავთ, რომ ეს მოლეკულები სითბური მოძრაობის გავლენით ქაოსურად არიან განლაგებული სივრცეში. ელექტრული ძალები, რომლებიც პოლარულ მოლეკულებს შორის მოქმედებენ, ცდილობენ მათ ორიენტაციას ერთმანეთის მიმართ ისეთნაირად,



ნახ. 6.51. მუდმივი დიპოლების ორიენტაციული ურთიერთქმედება. დიპოლების მოწესრიგებულ განლაგებას შეესაბამება სისტემის ენერჯიის მინიმუმი.

რომ დიპოლების ურთიერთქმედების ენერჯია იყოს მინიმალური. მოლეკულების მოწესრიგებული განლაგება, რომელიც მათი ელექტროსტატიკური ურთიერთქმედების შედეგად არის მიღწეული, შეესაბამება სისტემის ენერჯიის მინიმალურ მნიშვნელობას (ნახ. 6.51). სითბური მოძრაობა ცდილობს დაანგროს ეს მოწესრიგებული განლაგება და ამიტომ სისტემის ენერჯია, რომელიც დაკავშირებულია მოლეკულების ორიენტაციასთან, ძლიერ არის ტემპერატურისაგან დამოკიდებული. კეეზომ-

მა პირველად აჩვენა, რომ თუ სითბური მოძრაობაში მონაწილეობს ორი მოლეკულა, რომლებსაც მუდმივი ელექტრული დიპოლური \vec{p}_1 და \vec{p}_2 მომენტები გააჩნიათ, მაშინ ისინი საშუალოდ იღებენ ისეთ ორიენტაციებს, რომლებიც მათ ურთიერთმიზიდვას გამოიწვევს. თუ ეს მოლეკულები R მანძილით არიან დაშორებული მაშინ ორი დიპოლის ურთიერთქმედების პოტენციური ენერჯისათვის გვექნება

$$U_{\text{და}} = \frac{1}{R^3} \left[\vec{p}_1 \vec{F}_2 - 3 \frac{(\vec{p}_1 \vec{R})(\vec{p}_2 \vec{R})}{R^2} \right]. \quad (6.73)$$

მაგრამ სითბური მოძრაობა ექვემდებარება ბოლცმანის განაწილების კანონს და ამიტომ U ენერჯის მქონე დიპოლების სივრცეში

გარკვეული განლაგება განისაზღვრება $e^{-\frac{U}{kT}}$ ალბათობით. როგორც ჩანს, უპირატესობა მიეცემა ისეთ ორიენტაციებს, რომელთა ენერჯიები ნაკლები იქნება. თუ დავუშვებთ, რომ ვიმყოფებით მაღალი ტემპერატურების არეში, ე. ი. $kT \gg U$ და გავასაშუალებთ $Ue^{-\frac{U}{kT}}$ სიდიდეს დიპოლების ყველა შესაძლებელი ორიენტაციისათვის მივიღებთ, რომ R მანძილზე მყოფი ორი დიპოლის საშუალო პოტენციური ენერჯია იქნება

$$U_{\text{და}} = - \frac{2p_1^2 p_2^2}{3kTR^3} \quad (6.74)$$

ან თუ ორივე დიპოლს ერთნაირი p მომენტი გააჩნიათ, მაშინ (6.74) მარტივდება

$$U_{\text{და}} = - \frac{2p^4}{3kTR^3}. \quad (6.75)$$

დაბალი ტემპერატურის დროს, როდესაც $U \gg kT$ და მიღწეულია მოლეკულების სრული ორიენტაცია, ურთიერთქმედების ენერჯია იღებს შემდეგ სახეს

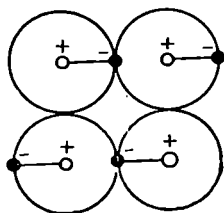
$$U_{\text{და}} = - \frac{2p^2}{R^3}.$$

ამგვარად, პოლარული მოლეკულების ურთიერთქმედების განხილული სახე დამოკიდებულია მათ ორიენტაციაზე და მას ორიენტაციული ურთიერთქმედება ეწოდება, ხოლო შესაბამის ძალებს — ორიენტაციული ძალები. როგორც ჩანს, ორიენტაციული ურთიერთქმედება, ისევე როგორც ინდუქციური ურთიერთქმედება, დაკავშირებულია მოლეკულებს შორის მანძილთან $\frac{1}{R^3}$ სიდიდით.

ახლა განვიხილოთ ისეთი ატომების ურთიერთქმედება, რომლებსაც შევსებული ელექტრონული გარსები გააჩნიათ და ამიტომ არ აქვთ საკუთარი მუდმივი დიპოლური მომენტები. ასეთივე მდგომარეობაში იმყოფება ყველა არაპოლარული მოლეკულაც; მაგალითად, H_2 , Cl_2 და სხვა. ცდები გვიჩვენებენ, რომ ინერტული გაზების ატომებსა და არაპოლარულ მოლეკულებს შორის მოქმედებენ არანაკლები სიძლიერის მიზიდვის ძალები, ვიდრე ეს იყო პოლარული მოლეკულების შემთხვევაში, სადაც ეს ძალები განპირობებული იყვნენ მოლეკულების ურთიერთპოლარიზაციით. ამ ახალი ძალების ბუნების გამოსარკვევად განვიხილოთ წყალბადის ორი ატომი, რომლებიც იმდენად შორს არიან ერთიმეორისაგან, რომ ელექტრონული გარსების გადაფარვას ადგილი არა აქვს და, მაშასადამე, გაცვლითი ძალების მოქმედება გამორიცხულია. ეს იმას ნიშნავს, რომ თითოეული ატომი იმყოფება თავის ძირითად სფერულად სიმეტრიულ $1s$ მდგომარეობაში და ამიტომ ატომის ელექტრული მომენტი ნულის ტოლია. მაგრამ ამ შემთხვევაში ნულის ტოლია ატომის საშუალო ელექტრული მომენტი. დროის ყოველ მცირე მომენტში ატომის ბირთვი და ელექტრონი, რომლებიც ერთმანეთისაგან R მანძილზე იმყოფებიან, ქმნიან მყისიერ დიპოლს, მომენტით $\vec{p} = e\vec{R}$. ელექტრონის მოძრაობის შედეგად ეს მომენტი განუწყვეტლივ იცვლება როგორც სიდიდით, ისე მიმართულებით. მყისიერი დიპოლური მომენტი შესაძლებელია იღებდეს საკმაოდ დიდ მნიშვნელობებს. მაგალითად, წყალბადისათვის ის უდრის $p = eR = 4,8 \cdot 10^{-10} \cdot 0,53 \cdot 10^{-8} = 2,5 \cdot 10^{-18} \text{ GGSÉ}$.

თითოეული ატომის მყისიერი დიპოლის ელექტრული ველი აინდუცირებს დიპოლურ მომენტს ნებისმიერ მეზობელ ატომში, რომელიც, თავის მხრივ, იმოქმედებს საწყის დიპოლზე და ა. შ. იმისათვის, რომ ამ დიპოლებს შორის მოქმედებდნენ მიზიდვის მუდმივი ძალები, საჭიროა ერთი მყისიერი დიპოლის უარყოფითი მხარე (ელექტრონი) ყოველთვის ხვდებოდეს მეორე დიპოლის დადებითი მუხტის მახლობლად (ნახ. 6.52). ასეთ შემთხვევაში იქმნება დიპოლების ისეთივე მოწესრიგებული განლაგება, როგორიც ნაჩვენები იყო 6.51 ნახაზზე. როგორც დავინახეთ, დიპოლების ასეთი მოწესრიგებული განლაგება შეესაბამება სისტემის ენერჯიის მინიმუმს. მაგრამ მყისიერი დიპოლების მდგრადი მოწესრიგებული განლაგების მისაღწევად მეზობელი ატომების ელექტრონების მოძრაობა უნდა იყოს შეთანხმებული (სინქრონული), როგორც ეს ნაჩვენებია 6. 52 ნახაზზე. მიზიდვის ძალებს, რომლებიც წარმოიშობიან მეზობელ ატომებში ელექტრონების შეთანხმებული მოძრაობის შედეგად, ეწოდება დისპერსიული ძალები. პირველად დისპერსიული ძალების კვანტურ- მექანიკური გამოთვლა ჩაატარა ლონდონმა 1930 წელს.

სიმარტივისათვის წყალბადის ატომი ცვლადი დიპოლური მომენ-



ნახ. 6. 52. მყისიერი დიპოლები
მოწესრიგებული განლაგება ელექტრონების შეთანხმებული მოძრაობის შედეგად.

e მუხტის გადახრის სილიდეს წონასწორობის მდგომარეობიდან. კვაზიდრეკადი \vec{F} ძალის მოქმედებით, რომელიც წონასწორობის მდგომარეობისაკენ არის მიმართული და უდრის $F = -kx$, $-e$ მუხტები ასრულებენ პარმონიულ რხევებს, სიხშირით

$$v_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}. \quad (6.76)$$

აქ k კვაზიდრეკადი ძალის კოეფიციენტია, ხოლო m — ელექტრონის მასა. ელექტრული დიპოლისათვის $eE = kx$, ხოლო მომენტი $p = \alpha E$, სადაც α დიპოლის პოლარიზებადობაა, ამიტომ $k = \frac{eE}{x} = \frac{e \cdot ex}{\alpha x} = \frac{e^2}{\alpha}$ და ოსცილატორის რხევის სიხშირე

$$v_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{e^2}{\alpha m}}. \quad (6.77)$$

ოსცილატორის პოტენციური ენერგია არის $U = \frac{1}{2} kx^2$. ამიტომ შრე-ლინგერის (6.1) განტოლება ოსცილატორისათვის მიიღებს შემდეგ სახეს

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2\psi = E\psi. \quad (6.78)$$

ან, თუ აღვნიშნავთ $\frac{k}{m} = \omega^2$ და $k = m\omega^2$, მაშინ

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \psi = E\psi. \quad (6.78')$$

გადავიღეთ ახალ ცვლადებზე შემდეგი აღნიშვნების საშუალებით

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x; \quad \epsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}. \quad (6.79)$$

ვინაიდან

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{d\psi}{d\xi} \frac{d\xi}{dx} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{d\psi}{d\xi}; \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{m\omega}{\hbar} \frac{d^2\psi}{d\xi^2},$$

ამიტომ (6.78)' მიიღებს ასეთ სახეს

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + (\epsilon - \xi^2)\psi = 0. \quad (6.80)$$

(6.80) წარმოადგენს ოსცილატორის მოძრაობის განტოლებას. ამ განტოლების ამოხსნა შეიძლება დაიწეროს შემდეგი სახით

$$\psi_n(\xi) = H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}} \quad (6.81)$$

სადაც $H_n(\xi)$ ჰერმიტეს პოლინომებია, რომელნიც აკმაყოფილებენ ჰერმიტეს განტოლებას

$$H''_n(\xi) - 2\xi H'_n(\xi) + 2n H_n(\xi) = 0.$$

თუ ამ განტოლებაში შევიტანთ (6.81) მნიშვნელობას, მივიღებთ განტოლებას $\psi_n(\xi)$ ფუნქციისათვის, შემდეგი სახით

$$\psi_n''(\xi) + (2n+1 - \xi^2)\psi_n(\xi) = 0. \quad (6.82)$$

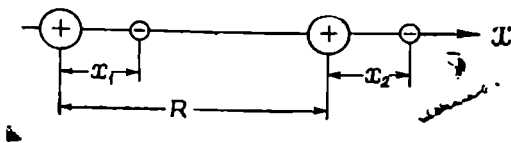
ეს განტოლება თანხვდება ოსცილატორის მოძრაობის (6.80) განტოლებას იმ შემთხვევაში, თუ შესრულებული იქნება პირობა

$$\epsilon = 2n+1,$$

$$(n = 0, 1, 2, \dots) \quad (6.83)$$

ამგვარად, თუ შესრულებულია (6.83) პირობა, მაშინ (6.81). წარმოადგენს შრედინგერის განტოლების ამოხსნას. მეორე მხრივ (6.79)-ის მიხედვით $\epsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$ და ამიტომ $2n+1 = \frac{2E}{\hbar\omega}$. თუ გავიხსენებთ, რომ $\omega = 2\pi\nu_0$ და $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ საბოლოოდ ოსცილატორის ენერგიისათვის მივიღებთ

$$E = h\nu_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) (n = 0, 1, 2, 3, \dots). \quad (6.84)$$



ნახ. 6. 53. ორი წრფივი ელექტრული ოსცილატორის ურთიერთქმედება.

(6.84) გვიჩვენებს, რომ ოსცილატორის ენერგია იკვანტება, ე. ი. მას გააჩნია დისკრეტული ენერგეტიკული სპექტრი. მინიმალური ენერგია, რომელიც ოსცილატორს შეიძლება ექნეს, არის

$$E_0 = \frac{1}{2} h\nu_0. \quad (6.85)$$

E_0 ენერგიას ნულოვანი ენერგია ეწოდება, ვინაიდან ეს ენერგია ოსცილატორს ტემპერატურის აბსოლუტური ნულის დროსაც აქვს. ნულოვანი ენერგიის არსებობა ოსცილატორის კვანტური მოძრაობის დამახასიათებელი თვისებაა.

დავუბრუნდეთ ორ ოსცილატორს, რომლებიც x ღერძის გასწვრივ არიან განლაგებულნი ერთმანეთისაგან R მანძილზე (ნახ. 6.53). ურთიერთქმედების შედეგად მათი პოტენციური ენერგია შეიცვლება და ნახაზზე მოცემული დიპოლების განლაგებისათვის ორი დიპოლის ურთიერთქმედების პოტენციური ენერგია, (6.73) გამოსახულების საფუძველზე, მიიღებს შემდეგ სახეს

$$U_{\text{გა}} = -\frac{2e^2 x_1 x_2}{R^3}. \quad (6.86)$$

ორი ურთიერთმოქმედი ოსცილატორისაგან შემდგარი სისტემის პოტენციური ენერგიისათვის მივიღებთ

$$U = \frac{1}{2} k(x_1^2 + x_2^2) - \frac{2e^2 x_1 x_2}{R^3} \quad (6.87)$$

ახლა საჭიროა შრედინგერის განტოლების ამოხსნა (6.87) პოტენციალის გათვალისწინებით. ამისათვის შემოვიტანოთ ახალი კოორდინატები:

$$X_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + x_2); \quad X_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 - x_2). \quad (6.88)$$

ამ კოორდინატებში პოტენციური ენერგიის (6.87) გამოსახულება მიიღებს სახეს

$$U = \frac{1}{2} \left(k - \frac{2e^2}{R^3} \right) X_1^2 + \frac{1}{2} \left(k + \frac{2e^2}{R^3} \right) X_2^2 \quad (6.89)$$

და შრედინგერის განტოლება ორი ოსცილატორისაგან შემდგარი სისტემისათვის იყოფა ორ განტოლებად:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dX_1^2} + \frac{1}{2} \left(k - \frac{2e^2}{R^3} \right) X_1^2 \psi_1 &= E_1 \cdot \psi_1; \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dX_2^2} + \frac{1}{2} \left(k + \frac{2e^2}{R^3} \right) X_2^2 \psi_2 &= E_2 \psi_2. \end{aligned} \quad (6.90)$$

ეს განტოლებები წარმოადგენენ ორი დამოუკიდებელი ოსცილატორის მოძრაობის განტოლებებს. ამგვარად, ახალი კოორდინატების შემოღება საშუალებას იძლევა ორი ურთიერთმოქმედი ოსცილატორისაგან შემდგარი სისტემა განვიხილოთ როგორც ორი დამოუკიდებელი ოსცილატორისაგან შემდგარი სისტემა, მაგრამ ამ ოსცილატორების საკუთარი რხევების სიხშირეები ν_1 და ν_2 უკვე არ იქნებიან (6.77) გამოსახულების ტოლი, არამედ ერთი იქნება ν_0 სიხშირეზე ცოტათი მეტი, ხოლო მეორე ν_0 სიხშირეზე ცოტათი ნაკლები; მართლაც

$$\nu_1 = \frac{\hbar^{-1}}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{1}{m} \left(k - \frac{2e^2}{R^3} \right)} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{e^2}{\alpha m} \left(1 - \frac{2\alpha}{R^3} \right)};$$

ასევე

$$\nu_2 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{e^2}{\alpha m} \left(1 + \frac{2\alpha}{R^3} \right)}.$$

ოსცილატორების ნულოვანი ენერგიები, როგორც ვიცით, ტოლია:

$E_{01} = \frac{1}{2} \hbar \nu_1$ და $E_{02} = \frac{1}{2} \hbar \nu_2$, ხოლო ამ ორი ოსცილატორისაგან შემდგარი სისტემის ნულოვანი ენერგია წარმოადგენს მათ ჯამს

$$E_0' = E_{01} + E_{02} = \frac{1}{2} \hbar \nu_0 \left(\sqrt{1 - \frac{2\alpha}{R^3}} + \sqrt{1 + \frac{2\alpha}{R^3}} \right). \quad (6.91)$$

დავშალოთ ფრჩხილებში მყოფი წევრები მწკრივებად და დაკმაყოფილდეთ პირველი სამი წევრით, მივიღებთ

$$E_0' = \hbar \nu_0 \left(1 - \frac{\alpha^2}{2R^6} + \dots \right). \quad (6.92)$$

ამავე დროს, თუ ავიღებთ ამ ორი ოსცილატორის ნულოვან ენერგიებს, როდესაც ისინი ერთმანეთთან არ ურთიერთქმედებენ, მაშინ

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \nu_0 + \frac{1}{2} \hbar \nu_0 = \hbar \nu_0. \quad (6.93)$$

როგორც (6.92) და (6.93) შედარება გვიჩვენებს, ოსცილატორების ურთიერთქმედება იწვევს მათი ნულოვანი ენერჯიის შემცირებას სიდიდით, რომელიც ოსცილატორებს შორის მანძილის მეექვსე ხარისხის უკუპროპორციულია

$$U_{\text{ღისა}} = -\frac{h\nu_0\alpha^2}{2} \frac{1}{R^6}. \quad (6.94)$$

ენერჯიის ასეთი შემცირება შეესაბამება მიზიდვის ძალების მოქმედებას ამ ოსცილატორს შორის. მიზიდვის ძალები, (6.94)-ის თანახმად, დამოკიდებულია ატომების (ოსცილატორების) პოლარიზებადობაზე და ვინაიდან ამ სიდიდეზე დამოკიდებულია ატომების ზოგიერთი ოპტიკური თვისებაც, კერძოდ სინათლის დისპერსია, ამიტომ ამ ძალებს დისპერსიული ძალები ეწოდება.

ამგვარად, დისპერსიული ძალები მოქმედებენ ნებისმიერ ატომსა თუ მოლეკულას შორის. ისინი დაკავშირებული არიან ნულოვანი ენერჯიის არსებობასთან, რომელიც მცირდება მყისიერი დიპოლების ურთიერთქმედების შედეგად. დიპოლების ურთიერთქმედება, თავის მხრივ, გაპირობებულია ელექტრონების შეთანხმებული მოძრაობით და, ამის გამო, — დიპოლების განლაგების მოწესრიგებით.

ზოგად შემთხვევაში, ორი მოლეკულის დაახლოების პროცესში შესაძლებელია ადგილი ქონდეს ურთიერთქმედების სამივე სახეს: ინდუქციურს, ორიენტაციულს და დისპერსიულს. ამიტომ მათი ურთიერთქმედების ენერჯია წარმოდგენილი იქნება სამივე კომპონენტის ჯამით

$$U = U_{\text{ინდ}} + U_{\text{ორ}} + U_{\text{ღისა}}. \quad (6.95)$$

ვან-დერ-ვაალსური ბმის ენერჯიის სხვადასხვა შემადგენელი ნაწილების პროცენტული შედარება რამდენიმე ნივთიერებისათვის მოყვანილია (6.6) ცხრილში.

ც ხ რ ი ლ ი 6.6

ნივთიერება	$U_{\text{ორ}}$	$U_{\text{ინდ}}$	$U_{\text{ღისა}}$
CO	—	—	100
წყალი	77	4	19
HBr	3,3	2,2	94,5

ცხრილიდან ჩანს, რომ ენერჯიის ყველაზე დიდ ნაწილს შეადგენს დისპერსიული ურთიერთქმედების ენერჯია; გამონაკლისია მხოლოდ წყლის მოლეკულები, რომლებიც დიდი პოლარობით გამოირჩევიან. ინდუქციური ურთიერთ-

ქმედების წილი შედარებით მცირეა.

მოლეკულური კრისტალის სტრუქტურა

მოლეკულურ კრისტალებში სტრუქტურულ ერთეულებს მოლეკულები წარმოადგენენ. მოლეკულების შიგნით, ატომებს შორის, ბმები შეიძლება იყოს კოვალენტური, იონური ან შერეული ხასიათის, ხოლო მოლეკულებს შორის მოქმედებენ გაცილებით უფრო სუსტი,

ვან-დერ-ვაალსური ძალები. ამით აიხსნება ის გარემოება, რომ მოლეკულური კრისტალების დნობის ტემპერატურა, ჩვეულებრივ, საკმაოდ დაბალია, დიდია მათი კუმშვადობა და სითბური გაფართოება. მოლეკულური კრისტალები უმთავრესად იზოლატორებია.

6.13 ნახაზზე მოყვანილი იოდის მესერი ტიპურ მოლეკულურ სტრუქტურას წარმოადგენს, ვინაიდან რომელი უჯრედის კვანძებსა და წახნაგების ცენტრებში მოთავსებულია ორატომიანი იოდის I_2 მოლეკულები. ასეთივე სტრუქტურებს ქმნიან ქლორი და ბრომი. ყველაზე მარტივი მოლეკულური მესრები აქვთ ინერტულ გაზებს, რომლებსაც ერთატომიანი მოლეკულები გააჩნიათ. Ne, Ar, Kr და Xe კრისტალიზდებიან კუბური უმჭიდროესი წყობის მესრებში. ეს ხდება იმიტომ, რომ, როგორც დავინახეთ, ვან-დერ-ვაალსის ძალები, რომლებიც მოქმედებენ მოლეკულებს შორის, არ ხასიათდებიან გარკვეული მიმართულებით და ნაჯერობით. ამიტომ, თუ სტრუქტურულ ერთეულებს სფერული ფორმა გააჩნიათ, ისინი შექმნიან სფეროების უმჭიდროესი წყობის მსგავს სტრუქტურებს.

არაორგანულ ნივთიერებათა შორის იონური ტიპის მესრები მეტია, ვიდრე მოლეკულური, მაგრამ ყველა გაზი (CO_2 , NH_3 და სხვა) და მრავალი სხვა არაორგანული ნივთიერება, როგორცაა SnI_4 , $HgCl_2$, ქმნიან მოლეკულური ტიპის მესრებს. თითქმის ყველა ნახშირბადის ნაერთები აგრეთვე მოლეკულური ხასიათისაა.

წყალბადური ბმა

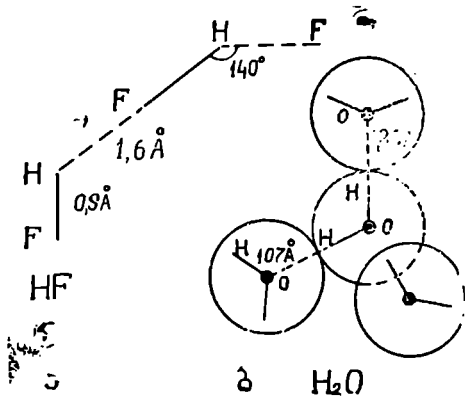
განვიხილოთ ბმის კიდევ ერთი სპეციფიკური სახე, რომელსაც ადგილი აქვს, როდესაც ორ ატომს შორის მოთავსებულია წყალბადის ატომი. წყალბადის ატომი, ასეთ შემთხვევაში, მიიზიდება ორივე მეზობელი ატომის მიერ. ამიტომ ამბობენ, რომ ეს წყალბადის ატომი მეზობელ ატომებთან ქმნის გარკვეულ ბმებს, რომლებსაც წყალბადური ბმები ეწოდება. წყალბადური ბმა სუსტ ბმას წარმოადგენს (დაახლოებით 5 კკალ/მოლ); მიუხედავად ამისა, ის საკმაოდ დიდ გავლენას ახდენს მრავალი ნივთიერების თვისებებზე. სახელდობრ, წყალბადური ბმის მცირე ენერჯის გამო მისი გავლენა დიდია ბიოლოგიურ პროცესებზე, რომელნიც ჩვეულებრივ ტემპერატურებზე მიმდინარეობენ ორგანულ კრისტალებში და პოლიმერულ სტრუქტურებში.

წყალბადური ბმა იქმნება წყალბადის ატომის მიერ ორ ელექტროუარყოფით ატომთან; მაგალითად, F, O, N, Cl და სხვა ატომებთან. რაც უფრო ელექტროუარყოფითია ატომი, მით მეტია მისი უნარი შექმნას წყალბადური ბმა. მოლეკულები, რომლებიც ამ შემთხვევაში იქმნებიან:

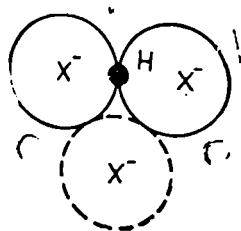
HF, H₂O, NH₃, HCl და მრავალი სხვა პოლარული მოლეკულებია და გააჩნიათ მუდმივი დიპოლური მომენტები. წყალბადის ატომები ამ მოლეკულების შიგნით დაკავშირებული არიან ძირითად ელემენტთან კოვალენტური ან იონური ბმებით, მაგრამ თვითონ მოლეკულები დიპოლური ურთიერთქმედების შედეგად ერთმანეთის მიმართ იღებენ ისეთ ორიენტაციას, როდესაც მოლეკულის ელექტროუარყოფით ნაწილთან (F, O, N, Cl) ახლოს მოთავსდება მეორე მოლეკულის ელექტროდადებითი ნაწილი (წყალბადის ატომი); ამის შედეგად წყალბადის ატომი აღმოჩნდება გარშემორტყმული ელექტროუარყოფითი ატომებით. მაგალითად, HF მოლეკულებს შორის იქმნება წყალბადური ბმა იმ დროს, როდესაც მოლეკულის შიგნით H და F დაკავშირებული არიან იონური ძალებით. კუთხე, რომელსაც HF მოლეკულები ადგენენ წყალბადური ბმის შედეგად F—H... F—H... F—H, დაახლოებით შეადგენს 140° (ნახ. 6.54). იმის გამო, რომ იონური ბმა უფრო ძლიერი ხასიათისაა, ვიდრე წყალბადური, ბმების სიგრძე F—H=0,9Å გაცილებით მოკლეა, ვიდრე ბმები H...F=1,6Å. იმავე ნახაზზე მოყვანილია წყლის მოლეკულების (დიპოლების) განლაგება სითხეში. როგორც ჩანს, თითოეული წყალბადის ატომი თავსდება ორ უანგბადის ატომს შორის. ერთ მათგანთან ის მოლეკულაში იმყოფება და ბმის სიგრძე H—O = 1,07Å, ხოლო მეორე მოლეკულის უანგბადთან დაკავშირებულია წყალბადური ბმით H...O=1,80Å.

განვიხილოთ ახლა წყალბადური ბმის ბუნება. პირველ რიგში უნდა აღინიშნოს, რომ რადგანაც წყალბადის ატომს გააჩნია მხოლოდ ერთი ელექტრონი, 1S მდგომარეობაში მას არ შეიძლება ქონდეს ერთზე მეტი წმინდა კოვალენტური ხასიათის ბმა, ვინაიდან ერთი ატომის მიერთების წყალბადის ყველა ბმა ხდება გაჭერებული. ამიტომ წყალბადის ატომის მიერ ორი ატომის მიზიდვა წყალბადური ბმის შემთხვევაში გამორიცხავს ამ ბმის კოვალენტურ ხასიათს. თუმცა, როგორც 6.54 ნახაზიდან ჩანს, კოვალენტური ბმის მცირე დამახასიათებელი თვისება — გარკვეული მიმართულებით მოქმედება, შენარჩუნებულია წყალბადური ბმის დროსაც.

მეორე მხრივ, ყველა თვისება, რომელნიც დამახასიათებელია იონური ბმისათვის, წყალბადურ ბმასაც აქვს. მართლაც, როდესაც წყალბადის ატომი კარგავს თავის ერთადერთ ელექტრონს, ის იქცევა დადებით იონად და ეს უმცირესი კათიონი, სხვა იონების მსგავსად, ეცდება შემოიკრიბოს თავის ირგვლივ რაც შეიძლება მეტი ანიონები. მაგრამ, როგორც 6.55 ნახაზიდან ჩანს, პროტონის სიმცირის გამო მას შეუძლია შემოიკრიბოს თავის ირგვლივ მხოლოდ ორი ანიონი. მესამე ანიონი უკვე ვერ მიუახლოვდება კათიონს სხვა ანიონებთან შეხების გამო. ამგვარად, უდიდესი საკოორდინაციო რიცხვი, რომელიც შეიძლება გააჩ-



ნახ. 6.54. წყალბადური ბმების წარმოშობა.
 ა. HF მოლეკულებს შორის. ბ. წყლის მოლეკულებს შორის.



ნახ. 6.55. წყალბადის ატომის კოორდინაციული რიცხვი მხოლოდ ორია.

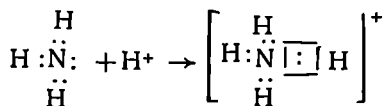
ნდეს წყალბადის ატომს, არის 2. წყალბადურ ბმაშიც წყალბადის ატომის ირგვლივ სწორედ ორი ატომი მონაწილეობს. ამასთანავე, ეს ორი ატომი ელექტროუარყოფითი ატომებია.

ამგვარად, წყალბადური ბმა, ძირითადად, როგორც ჩანს, იონურ ხასიათს ატარებს და ამიტომ არ წარმოადგენს ახალი ტიპის ბმას. მაგრამ ჩვეულებრივ კულონურ (ელექტროსტატიკურ) ურთიერთქმედებასთან ერთად, რომელიც ძირითადი ურთიერთქმედების როლს ასრულებს, წყალბადურ ბმაში წილი შეეკეთ როგორც გაცვლითს, ისე ვან-დერ-ვაალსური ხასიათის ურთიერთ ქმედებას.

დონორულ-აქცეპტორული ურთიერთქმედება

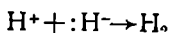
როგორც ზემოთ გვქონდა აღნიშნული, კოვალენტური ბმა იქმნება ატომებს შორის ვალენტური ელექტრონების შეწყვილების ან შესაბამისი ორბიტალების გადაფარვის შედეგად, მაგრამ არსებობს კოვალენტური ბმის შექმნის სხვა მექანიზმიც, რომელსაც დონორულ — აქცეპტორული ურთიერთქმედება წარმოადგენს. ასეთი მექანიზმით ქიმიური ბმა იქმნება იმ შემთხვევაში, როდესაც ერთი ატომი ფლობს ერთ ან რამდენიმე ელექტრონთა წყვილებს, ხოლო მეორე ატომს თავისუფალი ორბიტალები გააჩნია. ატომებს ან მოლეკულებს, რომელთაც შეუძლიათ ელექტრონული წყვილების გადაცემა, დონორები ეწოდება, ხოლო ის ატომები, რომელნიც თავისუფალ ორბიტალებზე ამ წყვილებს მიიღებენ, აქცეპტორებს წარმოადგენენ, მაგალითად, NH_3 , HF , $[\text{OH}]^-$. H^- დონორებია, იმ დროს, როდესაც Fe^{++} , Zn^{++} , H^+ და მრავალი სხვა აქცეპტორებს წარმოადგენენ.

მაგალითისათვის განვიხილოთ ამონიუმის (NH₄)⁺ იონის მეც ას მექანიზმი. NH₃ — ამიაკის მოლეკულაში ელექტრონთა სამი წყვილი იქმნება N—H ბმის შედეგად. მაგრამ, გარდა ამისა, აზოტს გააჩნია ელექტრონთა წყვილი 2S², რომელიც მას შეუძლია განაზოგადოს მაგალითად, წყალბადის H⁺ იონთან, რომელსაც ამ წყვილის მისაღებად თავისუფალი ორბიტალი აქვს. ასე რომ:



შექმნილ ამონიუმის იონში ოთხი კოვალენტური ბმაა. სამი წყალბადის ატომი უერთდება აზოტს ჩვეულებრივი კოვალენტური ბმით, ხოლო მეოთხე წყალბადის ატომი უერთდება აზოტის ატომს ასევე კოვალენტური ბმით, მაგრამ დონორულ-აქცეპტორული მექანიზმით, ე. ი. ელექტრონთა წყვილისა და თავისუფალი ორბიტალის გამოყენებით. საინტერესო ის არის, რომ, როგორც ირკვევა, ოთხივე ეს ბმა სრულიად ტოლფასია და არაფრით ერთიმეორისაგან არ განსხვავდება.

თუ ურთიერთქმედებენ საწინააღმდეგო ნიშნით დამუხტული იონები, მიღებულ მოლეკულაში კოვალენტური ბმა აგრეთვე წარმოიქმნება დონორულ-აქცეპტორული გზით, მაგალითად, წყალბადის დადებითი იონის და წყალბადის უარყოფითი იონის ურთიერთქმედებისას წარმოიშობა წყალბადის მოლეკულა



აქ წყალბადის უარყოფითი იონი დონორია, ხოლო დადებითი იონი აქცეპტორი. როგორც ვხედავთ, დონორულ-აქცეპტორული ურთიერთქმედება არ წარმოადგენს ურთიერთქმედების ახალ ტიპს. ის მხოლოდ კოვალენტური ბმის სახეცვლილებაა.

ლიტერატურა

1. К и т т е л ь Ч. Введение в физику твердого тела. Изд. физико-математической литературы, 1963.
2. Жданов Г. С. Физика твердого тела. Изд.-во МГУ, 1961.
3. Белов Н. В. Структура ионных кристаллов и металлических фаз. Изд.-во АН СССР, 1947.
4. Маррель Дж., С. Теддер Дж. Теория валентности. Изд.-во «Мир», 1968.
5. Уэрт С. Томсон Р. Физика твердого тела. Изд.-во «Мир», 1966.
6. Козман У. Введение в квантовую химию. Изд.-во «ИЛ», 1960.
7. Полинг Л. Природа химической связи. Госхимиздат, 1947.
8. Грей Г. Электроны и химическая связь. Изд.-во «Мир», 1967.
9. Шульце Г. Металлофизика. Изд.-во «Мир», 1971.
10. Бокний Г. Б. Введение в кристаллохимию. Изд.-во МГУ, 1954.
11. Нараи-Сабო И. Неорганическая кристаллохимия. Изд.-во АН Венгрии, Будапешт, 1969.
12. Макаров Е. С. Строение твердых фаз с переменным числом атомов в элементарной ячейке. Изд.-во АН СССР, 1947.
13. Слэтер Дж. Диэлектрики, полупроводники, металлы. Изд.-во «Мир», 1969.

კრისტალების მექანიკური თვისებები

ჩვენ ვიხილავთ კრისტალების ისეთ ფიზიკურ თვისებებს, რომელთა წარმოდგენაც შესაძლებელია სხვადასხვა რანგის ტენზორების საშუალებით. როგორც აღვნიშნეთ, ასეთ აღწერას გააჩნია გარკვეული უპირატესობა, ვინაიდან ამ შემთხვევაში ფიზიკური თვისება ინარჩუნებს ინვარიანტობას კოორდინატთა ლერძების გარდაქმნის მიმართ. მაგრამ ფიზიკური თვისებების ამსახველ ტენზორებს შორის არსებობს გარკვეული განსხვავება. მაგალითად, დიელექტრიკული შეღწევალობის, მაგნიტური, შეღწევალობის, დიამაგნიტური და პარამაგნიტური ამთვისებლობის ტენზორები და მრავალი სხვა გამოხატავენ უშუალოდ ნივთიერების თვისებებს და ამ თვისებების განაწილებას სივრცეში. ამიტომ მათ შესაბამის ტენზორულ ფართეულებს აქვთ სრულიად გარკვეული ორიენტაცია, რომელიც კრისტალის სიმეტრიასთან არის დაკავშირებული. ასეთ ტენზორებს მატერიალური ტენზორები ეწოდება. ამ ტენზორებისაგან განსხვავებით არსებობს ტენზორები, რომლებიც ნივთიერების თვისებებისაგან არ არიან დამოკიდებულნი და განისაზღვრებიან ნივთიერებაზე გარე ძალების მოქმედების ხასიათით. ასეთი ტენზორების მაგალითებს წარმოადგენენ დეფორმაციისა და ძაბვების ტენზორები. მათ, მატერიალური ტენზორებისაგან განსხვავებით, ველის შემქმნელ ტენზორებს უწოდებენ. ამ ტენზორების კომპონენტები კოორდინატების ფუნქციებია და მათი განაწილება სხეულში ქმნის ტენზორულ ველს. ამიტომ შესაბამისი ტენზორული ფართეულის განლაგება კრისტალში არ არის აუცილებელი დაკავშირებული იყოს კრისტალის სიმეტრიასთან.

§ 28. ძაბვების ტენზორი

არადეფორმირებულ სხეულში მისი ყველა ნაწილი იძვრება როგორც სითბურ, ისე მექანიკურ წონასწორობაში. ეს იმას ნიშნავს, რომ თუ ასეთი სხეულის შიგნით გამოვყოფთ გარკვეული მოცულობის ელემენტს, მაშინ მასზე სხეულის სხვა ნაწილების მიერ მოქმედი ყველა ძალის ტოლქმედი იქნება ნულის ტოლი.

დეფორმაციის შედეგად სხეულის ნაწილების ურთიერთგანლაგება იცვლება და ამ ნაწილებს შორის წონასწორობა ირღვევა. ამის შედეგად წარმოიშობა ძალები, რომლებიც ცდილობენ დააბრუნონ სხეული პირვანდელ მდგომარეობაში და აღადგინონ წონასწორობა. ახლა უკვე სხე-

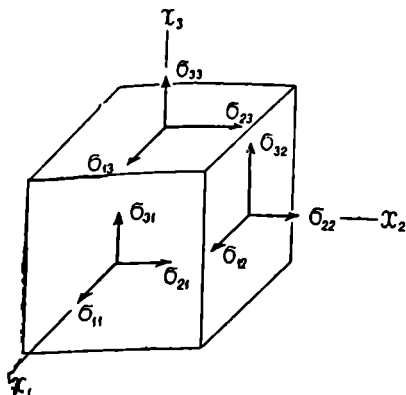
ულის თითოეული ნაწილი მოქმედებს მის მეზობელ ნაწილებზე გარკვეული ძალით და ამიტომ ამბობენ, რომ სხეული მთლიანად იმყოფება დამატულ მდგომარეობაში.

გამოვყოთ დამატულ მდგომარეობაში მყოფ სხეულში მოცულობის ელემენტი პატარა კუბის სახით (ნახ. 7.1) და განვიხილოთ ამ ელემენტზე მოქმედი ძალები. ქმედებისა და უკუქმედების ტოლობის შედეგად, მოცულობის ელემენტის შიგნით, ცალკეული ნაწილების ურთიერთქმედების ძალების ტოლქმედი ნულის ტოლია; ამიტომ მხედველობაში უნდა მივიღოთ მხოლოდ ის ძალები, რომლითაც მოქმედებენ ელემენტზე მის ირგვლივ მყოფი სხეულის სხვა ნაწილები. გარეშე ნაწილები მოქმედებენ მოცულობის ელემენტზე მისი ზედაპირის საშუალებით და მათი მოქმედების ძალა ამ ზედაპირის ფართობის პროპორციულია. თუ ასეთ ძალას ავიღებთ ზედაპირის ფართობის ერთეულისათვის, მას ძაბვა ეწოდება. ასე, რომ

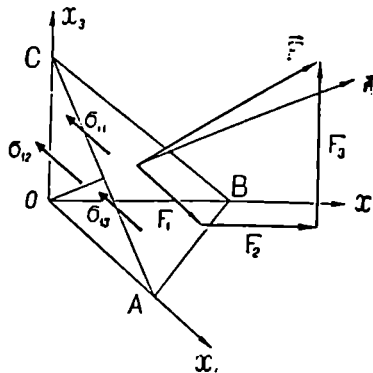
$$\vec{\sigma} = \frac{d\vec{F}}{dS}. \quad (7.1)$$

ძაბვა ჩაითვლება დადებითად ($\sigma > 0$), თუ ის მოქმედებს ნორმალის გასწვრივ, რომელიც აღებული მოცულობის ელემენტიდან მიმართულია გარე სივრცეში. წონასწორობის დროს კუბის მოწინააღმდეგე წახნაგებზე მოქმედი ძალები ტოლია, ამიტომ საკმარისია განვიხილოთ ძალები, რომლებიც სამ ურთიერთმართობ წახნაგზე მოქმედებენ. ავირჩიოთ კოორდინატთა ღერძები ამ წახნაგების მართობულად (ნახ. 7.1). ელემენტარული კუბის თითოეულ წახნაგზე მოქმედი ძალა შეიძლება დავშალოთ სამ შემდგენად, რომლებიც მიმართული იქნებიან კოორდინატთა ღერძების პარალელურად და აღვნიშნოთ σ_{ij} ასოთი ძაბვის კომპონენტი, რომელიც მოქმედებს x_i ღერძის მიმართულებით x_j ღერძისადმი მართობ ერთეულოვან ზედაპირზე. მაშინ სამი სიბრტყიდან ასეთი კომპონენტების რიცხვი იქნება ცხრა. მაგალითად, კომპონენტი σ_{11} წარმოადგენს ძაბვას, რომელიც მოქმედებს $0x_1$ ღერძის მიმართულებით ამავე ღერძისადმი მართობ წახნაგზე. ამიტომ კომპონენტებს σ_{11} , σ_{22} , σ_{33} ძაბვის ნორმალური კომპონენტები ეწოდება, ხოლო σ_{ij} კომპონენტებს, როდესაც $i \neq j$, — მხები კომპონენტები. ნორმალური კომპონენტები კუბის წახნაგების მართობად მოქმედებენ და წარმოადგენენ კუმშვის ან გაჭიმვის ძაბვებს. მხები კომპონენტები ქმნიან ძალების წყვილებს, რომლებიც ცდილობენ შემოაბარუნონ კუბი კოორდინატთა ღერძების ირგვლივ.

დავამტკიცოთ, რომ ძაბვის ცხრა σ_{ij} კომპონენტი შეადგენს მეორე რანგის ტენზორს. ამის დასამტკიცებლად გამოვყოთ დამატულ სხეულში მოცულობის ელემენტი ტეტრაედრის სახით, რომელიც შექმნილია კოორდინატული სიბრტყეებისა და ABC წახნაგის მიერ (ნახ. 7.2).



ნახ. 7. 1. ერთეულოვან კუბზე მოქმედი ძალები დაძაბული სხეულის შიგნით.



ნახ. 7. 2. ელემენტარული ტეტრაედრის წახნაგებზე მოქმედი ძალები წონასწორობის პირობებში.

მოვნახოთ ამ ტეტრაედრის წონასწორობის პირობები, როდესაც მოცულობით ძალებს მხედველობაში არ მივიღებთ და ძაბვები ერთგვაროვანია. ABC წახნაგის მიმართ ავავაოთ ნორმალი, რომლის ერთეულოვანი ვექტორი აღვნიშნოთ \vec{n} ასოთი, ხოლო მგეზავი კოსინუსები — n_1, n_2, n_3 . \vec{n} ნორმალის მიმართულებით ABC წახნაგზე მოქმედებს \vec{F} ძალა, რომლითაც დაძაბული სხეულის გარე ნაწილები მოქმედებენ ამ წახნაგზე. აღვნიშნოთ \vec{F} ძალის კომპონენტები კოორდინატთა ღერძების მიმართ F_1, F_2, F_3 . თუ სიმარტივისათვის დავუშვებთ, რომ ABC წახნაგის ფართობი ერთის ტოლია, მაშინ ეს ფართობი გამოხატული იქნება \vec{n} ერთეულოვანი ვექტორით, ხოლო სათანადო ღერძებისადმი მართობი წახნაგების ფართობები, შესაბამისად, n_1, n_2, n_3 კომპონენტებით. წონასწორობის პირობებში ტეტრაედრის ყველა წახნაგზე მოქმედი ძალების გვემილები კოორდინატთა ღერძების მიმართ აკმაყოფილებენ პირობებს:

$$\begin{aligned} F_1 &= \sigma_{11}n_1 + \sigma_{12}n_2 + \sigma_{13}n_3, \\ F_2 &= \sigma_{21}n_1 + \sigma_{22}n_2 + \sigma_{23}n_3 \\ F_3 &= \sigma_{31}n_1 + \sigma_{32}n_2 + \sigma_{33}n_3 \end{aligned} \quad (7.2)$$

ან მოკლედ

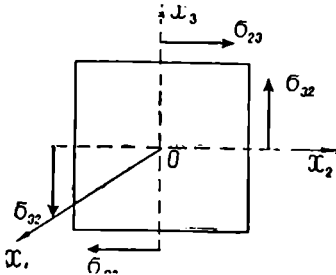
$$F_i = \sigma_{ij}n_j. \quad (7.3)$$

(1.43) თანახმად, თუ ორი ვექტორი \vec{F} და \vec{n} დაკავშირებული არიან σ_{ij} კოეფიციენტების საშუალებით (7.3) წრფივი დამოკიდებულებე-

ბით, მაშინ ეს კოეფიციენტები ქმნიან მეორე რანგის ტენზორს. ამ ტენზორს დაბევების ტენზორი ეწოდება და გაშლილი სახით ის ასე ჩაიწერება

$$[\sigma_{ij}] = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \quad (7.4)$$

ახლა გამოვარკვეოთ სიმეტრიულია თუ არა დაბევების $[\sigma_{ij}]$ ტენზორი. ამისათვის დავუბრუნდეთ 7.1 ნახაზზე მოცემულ ელემენტარულ კუბს, რომელიც, ჩვენი დაშვების თანახმად, სტატიკურ წონასწორობაშია. ეს წონასწორობა გარკვეულ პირობებს უყენებს σ_{ij} დაბევებს, კერძოდ, საჭიროა, რომ თითოეულ წახნაგზე მოქმედი ძალების მომენტი იყოს ნული.



ნახ. 7. 3. Ox_1 ღერძის მართობ წახნაგზე მოქმედი ძალების მომენტი უდრის ნულს.

განვიხილოთ მაგალითისათვის წახნაგი, რომელიც Ox_1 ღერძის მართობია (ნახ. 7.3). ვინაიდან ჩვენ ვიხილავთ ერთგვაროვან დაბევებს ნებისმიერ წახნაგზე, მოქმედი დაბევების სამივე კომპონენტი შეიძლება 'ავილოთ წახნაგების ცენტრში. მაშინ აღებულ წახნაგი წონასწორობაში იქნება, თუ მასზე მოქმედი σ_{23} და

σ_{32} ძალები ერთმანეთის ტოლნი იქნებიან ე. ი.

$$\sigma_{23} = \sigma_{32}.$$

ასევე შეიძლება დამტკიცდეს დანარჩენი წახნაგებისათვის, რომ $\sigma_{21} = \sigma_{12}$, $\sigma_{31} = \sigma_{13}$ ან, ზოგადად

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji}. \quad (7.5)$$

ამგვარად, დაბევების $[\sigma_{ij}]$ ტენზორი მეორე რანგის სიმეტრიული ტენზორია, რომელიც ექვსი დამოუკიდებელი კომპონენტით ხასიათდება. შესაბამისი ტენზორული ზედაპირი ზოგად შემთხვევაში წარმოადგენს სამღერძა ელიფსოიდს. როგორც ნებისმიერი მეორე რანგის სიმეტრიული ტენზორი, დაბევების $[\sigma_{ij}]$ ტენზორიც შეიძლება მივმართოთ მთავარი ღერძების გასწვრივ, მაშინ ტენზორი (7.4) მიიღებს სახეს

$$[\sigma_{ij}] = \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 \end{bmatrix} \quad (7.6)$$

სადაც σ_1 σ_2 σ_3 მთავარი დაბევებია. თუ კოორდინატა ღერძები არჩეულია მთავარი დაბევების მიმართულებით, მაშინ მხები დაბევები ქრება და რჩება მხოლოდ ნორმალური დაბევები: $\sigma_{11} = \sigma_1$, $\sigma_{22} = \sigma_2$, $\sigma_{33} = \sigma_3$.

ტენზორული ზედაპირი $\sigma_{ij}x_j = 1$ მთავარ ღერძებზე გადასვლის შემდეგ მიიღებს სახეს

$$\sigma_1 x_1^2 + \sigma_2 x_2^2 + \sigma_3 x_3^2 = 1.$$

ამ ელიფსოიდის ნახევარღერძები იქნება $\frac{1}{\sqrt{\sigma_1}}$, $\frac{1}{\sqrt{\sigma_2}}$, $\frac{1}{\sqrt{\sigma_3}}$. თუ აგებულია ძაბვების ტენზორული ზედაპირი, მაშინ, როგორც ვიცით, მისი ნებისმიერი რადიუს-ვექტორის სიგრძე რიცხობრივად ტოლია ერთი გაყოფილი კვადრატული ფუნქციისა σ_{nn} სიდიდიდან, რომელიც რადიუს-ვექტორის მიმართულეებით ახასიათებს გარკვეულ ფიზიკურ თვისებას, ჩვენს შემთხვევაში ნორმალურ ძაბვას. ამიტომ, (1.49) თანახმად, შეიძლება დავწეროთ

$$\sigma_{nn} = \frac{1}{r_n^2}. \quad (7.7)$$

ზოგად განტოლებას, რომელიც ნებისმიერი მიმართულებისათვის განსაზღვრავს ძაბვის მნიშვნელობას, (1.50) მიხედვით ექნება შემდეგი სახე

$$\sigma_n = \sigma_{ij} n_i n_j. \quad (7.8)$$

ძაბვების მთავარ ღერძებზე გადასვლის შემდეგ ეს განტოლება მარტივდება

$$\sigma_n = \sigma_1 n_1^2 + \sigma_2 n_2^2 + \sigma_3 n_3^2. \quad (7.9)$$

(7.8.) განტოლება შეიძლება წარმოვიდგინოთ მატრიცული ფორმით, თუ გამოვიყენებთ (1.79) ფორმულას, მაშინ

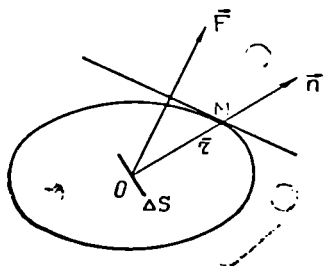
$$\sigma_n = n_i \sigma n_i, \quad (7.10)$$

სადაც n_i წარმოადგენს n -ის ტრანსპონირებულ მატრიცას.

ძაბვების ზედაპირის საშუალებით აგრეთვე შესაძლებელია \vec{F} ძალის მიმართულების განსაზღვრა, რომლითაც დაძაბული სხეულის გარე ნაწილები მოქმედებენ მოცემულ o წერტილში აღებულ ზედაპირის ელემენტზე. ამისათვის საკმარისია ზედაპირის ელემენტის ნორმალის მიმართულება ავირჩიოთ ტენზორული ელიფსოიდის რადიუსვექტორად (ნახ. 7.4.). ამ რადიუს-ვექტორის ელიფსოიდთან გადაკვეთის M წერტილში გავატაროთ მხები სიბრტყე, მაშინ, (7.3) ფორმულის თანახმად, \vec{F} ვექტორს ექნება მხები სიბრტყისადმი ნორმალის, მიმართულება. მხოლოდ მთავარი ღერძების გასწვრივ \vec{F} და \vec{r} ვექტორები ერთმანეთის პარალელური ხდებიან.

განვიხილოთ ძაბვების ტენზორის რამდენიმე კერძო ფორმა:

როგორც დავინახეთ, დაძაბული სხეულის მდგომარეობა შეიძლება



ნახ. 7. 4. F ძალის მიმართულების განსაზღვრა ძაბვების ტენზორული ზედაპირის საშუალებით.

განისაზღვროს სამი მთავარი $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ ძაბვის საშუალებით.

1. თუ ნულისაგან, განსხვავებულია [მხოლოდ ერთი კოეფიციენტი, ე. ი. გვაქვს წრფივად დაძაბული მდგომარეობა, მაშინ

$$[\sigma_{ij}] = \begin{bmatrix} \pm \sigma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (7.11)$$

გაჭიმვის დროს, ხოლო უარყოფითი — შეკუმშვის შემთხვევაში. ასეთი ძაბვები აღიძვრება გრძელ, წვრილ ლეროში, რომელიც ვერტიკალურად არის დაკიდებული და ბოლოში მოდებული აქვს გარკვეული ტვირთი.

2. ორღერძა გაჭიმვა ან კუმშვა, როდესაც იქმნება სიბრტყეში დაძაბული მდგომარეობა

$$[\sigma_{ij}] = \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (7.12)$$

ასეთი დაძაბული მდგომარეობის მაგალითს წარმოადგენს თხელი ფირფიტა, როდესაც ძალები მოდებულია მის პერიმეტრზე.

3. ყოველმხრივი გაჭიმვა

$$[\sigma_{ij}] = \begin{bmatrix} \sigma & 0 & 0 \\ 0 & \sigma & 0 \\ 0 & 0 & \sigma \end{bmatrix} = \sigma \delta_{ij}. \quad (7.13)$$

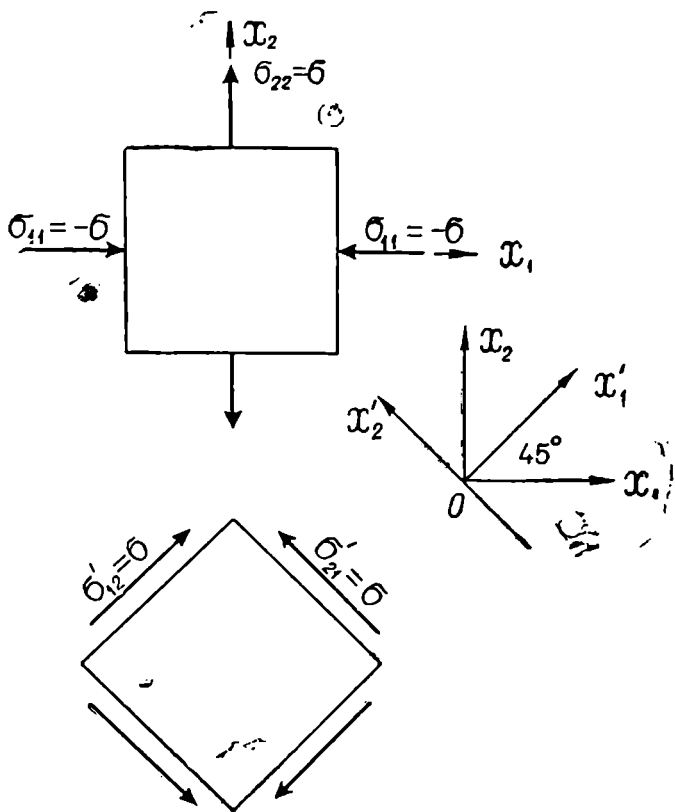
4. ყოველმხრივი კუმშვა (პიდროსტატიკური წნევა)

$$\sigma_{ij} = -\delta_{ij}. \quad (7.14)$$

5. წმინდა ძვრა

$$[\sigma_{ij}] = \begin{bmatrix} -\sigma & 0 & 0 \\ 0 & \sigma & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (7.15)$$

წარმოადგენს ორღერძა ძაბვის კერძო შემთხვევას. როდესაც კოორდინატთა ღერძები მთავარ ღერძებს წარმოადგენენ, ტენზორს (7. 15) სახე აქვს და ძაბვები, რომლებიც მოქმედებენ კოორდინატთა ღერძების მიმართ მართობული ფირფიტის გვერდებზე, $\pm\sigma$ -ს ტოლი არიან (ნახ. 7.5). თუ ღერძებს შემოვადარუნებთ 45° -ით, ტენზორის ნორმა-



ნახ. 7. 5. წმინდა ძვრის ძაბვები. ტენზორის კომპონენტები მთავარი ღერძების მიმართ და ღერძების 45° -ით შემობრუნების შემდეგ.

ლური კომპონენტები გაქრება და იმოქმედებენ მხოლოდ მხები ძაბვები $\sigma_{12}' = \sigma_{21}' = \sigma$. ეს იოლი დასამტკიცებელია, თუ გავიხსენებთ, რომ ღერძების შემობრუნების შედეგად ტენზორის კომპონენტები, (1;80) ფორმულის თანახმად, გარდაიქმნებიან $P' = A P A$, ფორმულით, სადა A გარდაქმნის მატრიცაა, ხოლო A , მისი ტრანსპონირებული მატრიცა. ღერძების 45° -ით შემობრუნების დროს გარდაქმნის მატრიცას ექნება შემდეგი სახე.

$$A = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ამიტომ ტენზორის კომპონენტებისათვის ახალ სისტემაში გვექნება

$$\sigma'_{ij} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\sigma & 0 & 0 \\ 0 & \sigma & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$[\sigma'_{ij}] = \begin{bmatrix} 0 & \sigma & 0 \\ \sigma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (7.16)$$

(7.16) ტენზორი იგივე (7.15) ტენზორია, მხოლოდ ახალი ღერძებისათვის, რომელიც მიღებულია ox_3 ღერძის ირგვლივ 45° ბრუნვის შედეგად. ox_3 ღერძს ძვრის ღერძი ეწოდება.

§ 20. დეფორმაციების ტენზორი

გარე ძალების მოქმედების შედეგად ნებისმიერი მყარი სხეული იცვლის თავის ფორმას და მოცულობას. ამ პროცესს სხეულის დეფორმაცია ეწოდება. რა თქმა უნდა, სხეულის, როგორც ერთიანი მთელის, გადანაცვლება (ტრანსლაცია) ან მთლიანი სხეულის ბრუნვა რომელიმე ღერძის ირგვლივ არ ახდენს მის დეფორმაციას. დეფორმაციის დროს სხეულის წერტილების წანაცვლება ხდება სხვადასხვა სიდიდით და ამიტომ იცვლება მანძილი მათ შორის. დეფორმაციის აღწერისათვის საჭიროა ვიცოდეთ ცალკეული წერტილების მდებარეობა და მათი გადანაცვლების სიდიდე. ავიჩინოთ გარკვეული $ox_1x_2x_3$ კოორდინატთა სისტემა. თითოეული წერტილის მდებარეობა ამ სისტემაში განსაზღვრულია \vec{r} რადიუს-ვექტორით, რომლის კომპონენტებია x_1, x_2, x_3 . დეფორმაციის შემდეგ ეს წერტილი გადაინაცვლებს და მისი ახალი მდებარეობის რადიუს-ვექტორი იქნება \vec{r}' . ამგვარად, წერტილის წანაცვლების სიდიდე დეფორმაციის შედეგად ტოლი იქნება სხვაობის: $\vec{r}' - \vec{r} = \vec{u}$, ან კომპონენტებში

$$u_i = x'_i - x_i. \quad (7.17)$$

\vec{u} ვექტორს დეფორმაციის ვექტორი ეწოდება.

გადანაცვლებული წერტილის x_i' კოორდინატები, ცხადია, დამოკიდებული არიან x_i კოორდინატებზე, რომლებიც იმავე წერტილს დეფორმაციამდე გააჩნდა. ამიტომ \vec{u}_i ვექტორიც x_i კოორდინატების ფუნქცია იქნება და იცვლება წერტილიდან წერტილში

$$u_i = u_i(x_1, x_2, x_3). \quad (7.18)$$

თუ მოცემულია \vec{u} ვექტორი, როგორც კოორდინატების ფუნქცია, მაშინ სხეულის დეფორმაცია სრულიად განსაზღვრულია.

ავირჩიოთ სხეულში ორი უსასრულოდ ახლოს მდებარე M და N წერტილები (ნახ. 7.6.) M წერტილს შეესაბამება რადიუს-ვექტორი $\vec{r}_1(x_1, x_2, x_3)$, ხოლო N წერტილი განსაზღვრულია $\vec{r}_2(x_1+dx_1, x_2+dx_2, x_3+dx_3)$ რადიუს-ვექტორით. მათ შორის მანძილი იქნება

$$\vec{r}_2 - \vec{r}_1 = d\vec{r} \quad (dx_1, dx_2, dx_3). \quad (7.19)$$

დეფორმაციის შემდეგ M წერტილი გადაინაცვლებს M' მდგომარეობაში და მისი კოორდინატები გახდება $\vec{r}_1'(x_1+u_1, x_2+u_2, x_3+u_3)$, ხოლო N წერტილი გადავა N' წერტილში, რომლის რადიუს-ვექტორია \vec{r}_2' ; კოორდინატები იქნება $\vec{r}_2'(x_1+dx_1+u_1+du_1, x_2+dx_2+u_2+du_2, x_3+dx_3+u_3+du_3)$. ამიტომ დეფორმაციის შემდეგ $M'N'$ მანძილი აღებულ ორ წერტილს შორის გახდება ტოლი

$$\vec{r}_2' - \vec{r}_1' = d\vec{r} + d\vec{u}. \quad (7.20)$$

(7.18)-ის თანახმად, du ვექტორის კომპონენტები განისაზღვრება ტოლობებით:

$$\begin{aligned} du_1 &= \frac{\partial u_1}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial u_1}{\partial x_2} dx_2 + \frac{\partial u_1}{\partial x_3} dx_3; \\ du_2 &= \frac{\partial u_2}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} dx_2 + \frac{\partial u_2}{\partial x_3} dx_3; \\ du_3 &= \frac{\partial u_3}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} dx_2 + \frac{\partial u_3}{\partial x_3} dx_3. \end{aligned} \quad (7.21)$$

ამგვარად, du ვექტორი გამოხატავს იმ ცვლილებას, რომელიც მოხდა დეფორმაციის შედეგად M და N წერტილებს შორის მანძილში.

შემოვიღოთ აღნიშვნები:

$$e_{11} = \frac{\partial u_1}{\partial x_1}; \quad e_{12} = \frac{\partial u_1}{\partial x_2}; \quad e_{13} = \frac{\partial u_1}{\partial x_3} \text{ და ა. შ.}$$

$$e_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j}; \quad (i, j=1, 2, 3) \quad (7.22)$$

მაშინ (7.21) განტოლებები მიიღებს სახეს

$$du_i = e_{ij} dx_j. \quad (7.23)$$

აქ du_i წარმოადგენენ \vec{du} ვექტორის კომპონენტებს, ხოლო dx_j — \vec{dr} ვექტორის, ამიტომ, (1.43)-ის თანახმად, კოეფიციენტები e_{ij} ქმნიან მეორე რანგის $[e_{ij}]$ ტენზორს.

გამოვარკვეით $[e_{ij}]$ ტენზორის კომპონენტების ფიზიკური შინაარსი. სიმარტივისათვის წარმოვიდგინოთ, რომ დეფორმაცია ხდება ox_1x_2 სიბრტყეში (ფირფიტა) და \vec{MN} (\vec{dr}) ვექტორი გადატანილია კოორდინატთა სათავეში (ნახ. 7.7). მისი შემდგენებია dx_1 და dx_2 . დეფორმაციის შედეგად თითოეული ეს მონაკვეთი შეიცვლება. dx_1 მონაკვეთისათვის, რომელიც Ox კოორდინატთა ლერძზეა მოთავსებული, $dx_2=0$ და ამიტომ (7.21) ფორმულებიდან მივიღებთ:

$$du_1 = \frac{\partial u_1}{\partial x_1} dx_1 = e_{11} dx_1;$$

$$du_2 = \frac{\partial u_2}{\partial x_1} dx_1 = e_{21} dx_1.$$

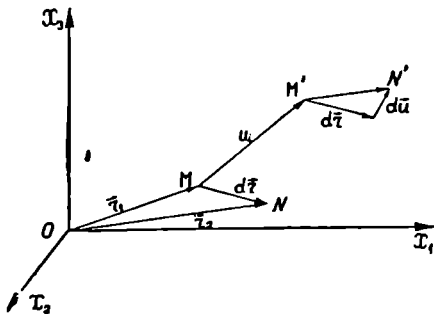
აქედან $e_{11} = \frac{du_1}{dx_1}$ და, მაშასადამე, e_{11} გამოხატავს იმ წაგრძელებას,

რომელსაც მიიღებს x_1 ლერძის გასწვრივ მდებარე ერთეულოვანი სიგრძის მონაკვეთი. ასეთივე მნიშვნელობა ექნებათ e_{22} და e_{33} კოეფიციენტებს შესაბამისი ლერძების პარალელურად. მაგრამ გარდა წაგრძელებისა dx_1 მონაკვეთი განიცდის კიდევ du_2 წანაცვლებას ox_2 ლერძისაკენ, რის შედეგად მოხდება მისი შემობრუნება საათის ისრის საწინააღმდეგო მიმართულებით. როგორც 7.7 ნახაზიდან ჩანს, შემობრუნების კუთხის ტანგენსი

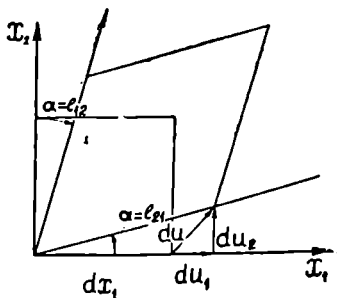
$$\operatorname{tg} \alpha = \frac{du_2}{dx_1 + du_1}.$$

მცირე წანაცვლების დროს du_1 და du_2 მცირე სიდიდეებია dx_1 მონაკვეთთან შედარებით, ამიტომ შეიძლება დაიწეროს

$$\alpha = \frac{du_2}{dx_1} = e_{21}. \quad (7.24)$$



ნახ. 7. 6. MN მონაკვეთის დეფორმაცია.



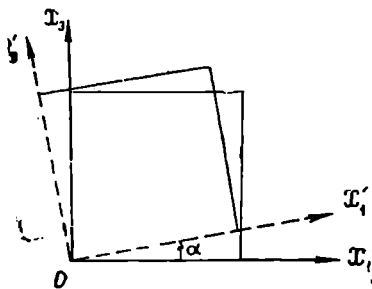
ნახ. 7. 7. $[e_{ij}]$ ტენზორის კომპონენტების განსაზღვრა.

კოეფიციენტი e_{21} განისაზღვრება კუთხით, რომლითაც შემობრუნდება Ox_1 ღერძზე მდებარე მონაკვეთი Ox_2 ღერძის მიმართულებით. ასევე, კოეფიციენტი e_{12} გამოხატავს Ox_2 ღერძის მიმართულებით მდებარე მონაკვეთის შემობრუნებას იმავე კუთხით Ox_1 ღერძისაკენ, ე. ი. საათის ისრის მიმართულებით (ნახ. 7.7). ამგვარად, თუ საწყის მდგომარეობაში dx_1 და dx_2 მონაკვეთები ადგენენ მართ კუთხეს, დეფორმაციის შემდეგ ეს კუთხე შემცირდება $e_{12} + e_{21} = 2\alpha$ სიდიდით. ასეთი სახის დეფორმაციებს ძვრის დეფორმაციები ეწოდება, ხოლო e_{ij} კოეფიციენტები, როდესაც $i \neq j$ წარმოადგენენ ძვრებს შესაბამისი კოორდინატული სიბრტყეების მიმართ.

თუ $[e_{ij}]$ ტენზორი აღწერს სხეულის დეფორმაციას, მაშინ სხეულის გადანაცვლების ან ბრუნვის შემთხვევაში, როდესაც არ იცვლება მანძილი მის წერტილებს შორის და დეფორმაციას ადგილი არა აქვს, $[e_{ij}]$ ტენზორის კომპონენტები უნდა უტოლდებოდნენ ნულს. სინამდვილეში ეს ასე არ ხდება. ავიღოთ მაგალითისათვის Ox_1 x_3 სიბრტყეში მდებარე სწორკუთხა ფირფიტა და შემოვებრუნოთ α კუთხით Ox_2 ღერძის ირგვლივ საათის ისრის საწინააღმდეგო მიმართულებით (ნახ. 7.8). ასეთ შემთხვევაში, როგორც ზემოთ იყო ნაჩვენები, ნულისაგან განსხვავებული იქნება კომპონენტები: $e_{12} = -\alpha$; $e_{21} = \alpha$ და ტენზორი მიიღებს შემდეგ სახეს

$$[e_{ij}] = \begin{bmatrix} 0 & -\alpha & 0 \\ \alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (7.25)$$

მიუხედავად იმისა, რომ სხეულის დეფორმაცია არ მოხდა, ტენზორის კომპონენტები ნულისაგან განსხვავდებიან. გარდა ამისა, (7.25)



ნახ. 7. 8. ფირფიტის, როგორც ერთი მთლიანი სხეულის ბრუნვა თავისივე სიბრტყეში α კუთხით საათის ისრის საწინააღმდეგოდ.

გვიჩვენებს, რომ ბრუნვის დროს $[e_{ij}]$ ტენზორი ხდება ანტისიმეტრიული. აქედან შეიძლება დაეასკვნათ, რომ სხეულის დეფორმაციას აღწერს $[e_{ij}]$ ტენზორის მხოლოდ სიმეტრიული ნაწილი.

მეორე რანგის ნებისმიერი ტენზორი შეიძლება წარმოვიდგინოთ სიმეტრიული და ანტისიმეტრიული ტენზორების ჯამის სახით:

$$e_{ij} = \frac{1}{2}(e_{ij} + e_{ji}); \quad (7.26)$$

$$\omega_{ij} = \frac{1}{2}(e_{ij} - e_{ji}).$$

აქ $[e_{ij}]$ ტენზორი სიმეტრიული ტენზორია და $e_{ij} = e_{ji}$, ხოლო $[\omega_{ij}]$ ტენზორი ანტისიმეტრიულია, ვინაიდან $\omega_{ij} = -\frac{1}{2}(e_{ji} - e_{ij}) = -\omega_{ji}$; ამიტომ

$$[e_{ij}] = [e_{ij}] + [\omega_{ij}]. \quad (7.27)$$

ზემოთ თქმულის თანახმად, $[e_{ij}]$ სიმეტრიული ტენზორი აღწერს სხეულის დეფორმაციას და ამიტომ მას დეფორმაციის ტენზორი ეწოდება. გაშლილი სახით ის ასე ჩაიწერება:

$$\begin{pmatrix} e_{11} & e_{12} & e_{13} \\ e_{21} & e_{22} & e_{23} \\ e_{31} & e_{32} & e_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_{11} & \frac{1}{2}(e_{12} + e_{21}) & \frac{1}{2}(e_{13} + e_{31}) \\ \frac{1}{2}(e_{12} + e_{21}) & e_{22} & \frac{1}{2}(e_{23} + e_{32}) \\ \frac{1}{2}(e_{13} + e_{31}) & \frac{1}{2}(e_{23} + e_{32}) & e_{33} \end{pmatrix}. \quad (7.28)$$

ანტისიმეტრიული $[\omega_{ij}]$ ტენზორი არ არის დაკავშირებული სხეულის დეფორმაციასთან და, როგორც აქსიალური ვექტორი, აღწერს მხოლოდ მის ბრუნვას.

დეფორმაციის $[e_{ij}]$ ტენზორის დიაგონალური e_{ij} კომპონენტები წარმოადგენენ ჰიშვის დეფორმაციებს, ხოლო დანარჩენი e_{ij} კოეფიციენტები გამოსახვენ ძვრის დეფორმაციებს; ვინაიდან დეფორმაციის ტენზორი სიმეტრიული ტენზორია, ის შეიძლება დავიყვანოთ მთავარ ღერძებზე.

ასეთ შემთხვევაში ძვრის კომპონენტები გაქრებიან და ტენზორი მიიღებს სახეს

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{33} \end{bmatrix} \quad (7.29)$$

აღენიშნოთ: $\varepsilon_1 = \varepsilon_{11}$; $\varepsilon_2 = \varepsilon_{22}$; $\varepsilon_3 = \varepsilon_{33}$. $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$ წარმოადგენენ მთავარ დეფორმაციებს.

(7.23)-ის თანახმად, შეიძლება დავწეროთ

$$du_i = (\varepsilon_{ij} + \omega_{ij}) dx_j.$$

ან, თუ დეფორმაცია ერთგვაროვანია და ε_{ij} კომპონენტები მუდმივები, მაშინ

$$u_i = u_0 + \omega_{ij} x_j + \varepsilon_{ij} x_j. \quad (7.30)$$

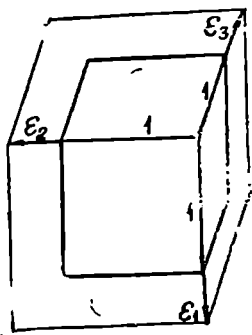
აქ u_0 მთელი სხეულის გადანაცვლებაა, ხოლო ω_{ij} დაკავშირებულია მთლიანი სხეულის ბრუნვასთან. თუ განვიხილავთ წანაცვლების იმ ნაწილს, რომელიც დაკავშირებულია მხოლოდ დეფორმაციასთან, მაშინ შეიძლება დავწეროთ

$$u_i = \varepsilon_{ij} x_j. \quad (7.31)$$

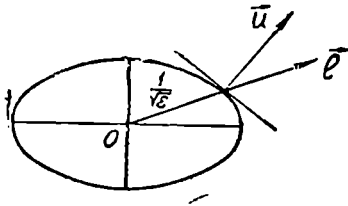
(7.31) გამოხატავს იმ ფაქტს, რომ ε_{ij} კომპონენტები აკავშირებენ დეფორმაციით გამოწვეულ წერტილის წანაცვლებას ამ წერტილის რადიუს-ვექტორთან. მთავარი ღერძების მიმართულებით $u_1 = \varepsilon_1 x_1$; $u_2 = \varepsilon_2 x_2$; $u_3 = \varepsilon_3 x_3$. მთავარი დეფორმაციები განსაზღვრავენ იმ წაგრძელებას, რომელსაც მიიღებს ერთეულოვანი სიგრძის მონაკვეთი მთავარი მიმართულების გასწვრივ. ვინაიდან მთავარი მიმართულებები წარმოადგენენ სამ ურთიერთმართობ მიმართულებას, ისინი ისეთივე ურთიერთმართობ მიმართულებებად დარჩებიან დეფორმაციის შემდეგაც. ამიტომ, თუ ავირჩევთ ერთეულოვან კუბს, რომლის წიბოები მთავარი მიმართულებების პარალელურად არიან მიმართული (ნახ. 7.9), მაშინ დეფორმაციის შემდეგ თითოეული წიბოს სიგრძე გახდება $1 + \varepsilon_1, 1 + \varepsilon_2, 1 + \varepsilon_3$, ხოლო კუბის მოცულობა შეიცვლება სიდიდით

$$\begin{aligned} V' - V &= (1 + \varepsilon_1)(1 + \varepsilon_2)(1 + \varepsilon_3) - 1 = \\ &= \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 \end{aligned} \quad (7.32)$$

აქ უგულებელყოფილია ნამრავლები $\varepsilon_i \varepsilon_j$, ვინაიდან $\varepsilon_i \ll 1$.



ნახ. 7.9. ერთეულოვანი კუბის დეფორმაცია. კუბის წიბოები დეფორმაციების მთავარი ღერძების პარალელურები არიან.



ნახ. 7. 10. დეფორმაციის მიმართულება \vec{l} აღებულია დეფორმაციის ელიფსოიდის რადიუს-ვექტორად. მაშინ დეფორმაციის \vec{u} ვექტორს იქნება ნორმალის მიმართულება.

როგორც დაეინახეთ, $\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3$ ჯამი წარმოადგენს ერთეულოვანი კუბის მოცულობით გაფართოებას და ამავე დროს დეფორმაციის ტენზორის ინვარიანტს. ამიტომ შეიძლება ითქვას, რომ მოცულობითი გაფართოება ნებისმიერ კოორდინატთა სისტემაში გამოისახება ε_{ii} ჯამით და ინვარიანტულ სიდიდეს წარმოადგენს.

როგორც ნებისმიერი მეორე რანგის სიმეტრიულ ტენზორს, დეფორმაციის ტენზორსაც აქვს თავისი დამახასიათებელი მეორე რიგის ზედაპირი

$$\varepsilon_{ij}x_i x_j = 1. \quad (7.33)$$

თუ ამ ზედაპირის ღერძები აღებულია კოორდინატთა ღერძებად, მაშინ დეფორმაციის ზედაპირის განტოლება მარტივდება და იღებს სახეს

$$\varepsilon_1 x_1^2 + \varepsilon_2 x_2^2 + \varepsilon_3 x_3^2 = 1. \quad (7.34)$$

ენიდან მთავარი დეფორმაციები $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$ შესაძლებელია იყოს როგორც დადებითი, ისე უარყოფითი სიდიდეები, ამიტომ დეფორმაციის ზედაპირი შეიძლება წარმოადგენდეს ნამდვილ ელიფსოიდს, წარმოსახვით ელიფსოიდს ან ჰიპერბოლოიდს.

დეფორმაცია ნებისმიერი $\vec{l} (l_1, l_2, l_3)$ მიმართულებით განისაზღვრება იმ ერთეულოვანი სიგრძის მონაკვეთის წაგრძელებით, რომელსაც დეფორმაციამდე გააჩნდა ეს მიმართულება. (1. 50) თანახმად, ეს დეფორმაცია შეიძლება შემდეგნაირად გამოისახოს

$$\varepsilon = \varepsilon_{ij} l_i l_j \quad (7.35)$$

ან მთავარი დეფორმაციების საშუალებით

$$\varepsilon = \varepsilon_1 l_1^2 + \varepsilon_2 l_2^2 + \varepsilon_3 l_3^2.$$

დეფორმაციის ზედაპირის რადიუს-ვექტორის სიგრძე \vec{l} ვექტორის მიმართულებით იქნება $\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}$. თუ \vec{l} მიმართულება არჩეულია დეფორ-

მაციის ზედაპირის რადიუს-ვექტორად, მაშინ \vec{u} დეფორმაციის ვექტორი, რომელიც გვიჩვენებს \vec{l} ვექტორის წვერის წანაცვლებას, დეფორმაციის შედეგად მიმართული იქნება ნორმალის გასწვრივ (ნახ. 7.10).

§ 30. დრეკადობის ტენზორი

გარე ძალების მოქმედების შედეგად ნებისმიერი მყარი სხეული დეფორმირდება. თუ კრისტალი ისეთია, რომ გარე ძალების მოქმედების მოხსნის შემდეგ ის მთლიანად აღიდგენს თავის პირვანდელ ფორმას და მისი დეფორმირებული მდგომარეობა გაქრება, ამბობენ, რომ ის დრეკადია, ხოლო შესაბამის დეფორმაციას დრეკადი დეფორმაცია ეწოდება. სხეულები გარკვეულ ფარგლებში იჩენენ დრეკად თვისებებს. ამისათვის საჭიროა, რომ ძაბვები, რომლებიც კრისტალებში აღიძვრებიან გარე ძალების მოქმედებით, არ აცდენ გარკვეულ ზღვრულ მნიშვნელობას, რომელსაც დრეკადობის ზღვარი ეწოდება და რომლის შემდეგ დეფორმირებული კრისტალი აღარ დაუბრუნდება თავის პირვანდელ ფორმას.

ცნობილია, რომ მცირე დრეკადი დეფორმაციების დროს ეს დეფორმაციები მოდებული ძაბვების პროპორციული არიან. ეს დებულება წარმოადგენს ჰუკის კანონის შინაარსს, რომელიც იზოტროპული სხეულებისათვის შეიძლება ასე ჩაიწეროს

$$\sigma = c\varepsilon. \quad (7.36)$$

c კოეფიციენტს დრეკადობის მოდული ეწოდება. შეიძლება დაიწეროს შემზღუნებული დამოკიდებულება

$$e = s\sigma. \quad (7.37)$$

აქ $s = \frac{1}{c}$ კოეფიციენტი დრეკადობის მუდმივას წარმოადგენს.

კრისტალებისათვის როგორც ძაბვები, ისე დეფორმაციები მეორე რანგის ტენზორებს წარმოადგენენ; ამიტომ ჰუკის კანონი შეიძლება განვაზოგადოთ ისე, რომ ძაბვის ტენზორის თითოეული კომპონენტი წარმოადგენდეს დეფორმაციის ტენზორების კომპონენტების წრფივ ფუნქციას ან, პირიქით, დეფორმაციის კომპონენტები წარმოადგენდენ ძაბვების წრფივ ფუნქციებს. ასეთ შემთხვევაში ჰუკის განზოგადებული კანონი მიიღებს შემდეგ სახეს

$$\sigma_{ij} = c_{ijk\ell} \varepsilon_{k\ell}. \quad (7.38)$$

$c_{ijk\ell}$ სიდიდეებს დრეკადობის განზოგადებული მოდულები ეწოდება. როგორც ვიცით (იხ. § 19), კოეფიციენტები, რომელნიც აკავშირებენ ორ მეორე რანგის ტენზორს, ამ შემთხვევაში $[\sigma_{ij}]$ ძაბვების და $[\varepsilon_{ij}]$ დეფორმაციების ტენზორები განსაზღვრავენ ახალ ფიზიკურ თვისებას — დრეკადობას და ადგენენ მეოთხე რანგის ტენზორს, რომელსაც $3^4 = 81$ კომპონენტი გააჩნია. ამის დამტკიცება შეიძლება უშუალოდ,

თუ გამოვიყენებთ ტენზორის კომპონენტების გარდაქმნის ფორმულებს; მივიღებთ:

$$\sigma'_{ij} = a_{im} a_{jn} \sigma_{mn},$$

$$\sigma_{mn} = c_{mnpq} \varepsilon_{pq},$$

$$\varepsilon_{pq} = a_{kp} a_{eq} \varepsilon'_{ke}.$$

მაშინ

$$\sigma'_{ij} = a_{im} a_{jn} c_{mnpq} a_{kp} a_{eq} \varepsilon'_{ke}.$$

მაგრამ ახალ კოორდინატთა სისტემაში

$$\sigma'_{ij} = c'_{ijk\ell} \varepsilon'_{k\ell}.$$

თუ შევადარებთ კოეფიციენტებს, დავინახავთ, რომ

$$c'_{ijk\ell} = a_{im} a_{jn} a_{kp} a_{eq} c_{mnpq}. \quad (7.39)$$

(7.39) წარმოადგენს მეოთხე რანგის ტენზორის კომპონენტების გარდაქმნის ფორმულას. იგივე ითქმის დრეკადობის მულტიპლიკაციის მიმართ. (7.37) განტოლება განზოგადებული სახით ასე ჩაიწერება

$$\varepsilon_{ij} = s_{ijk\ell} \sigma_{k\ell}. \quad (7.40)$$

$s_{ijk\ell}$ კოეფიციენტები ქმნიან დრეკადობის მულტიპლიკაციის მეოთხე რანგის ტენზორს.

ცხადია, რომ როგორც დრეკადი მოდულების $[c_{ijk\ell}]$ ტენზორის, ისე დრეკადი მულტიპლიკაციის $[s_{ijk\ell}]$ ტენზორის კომპონენტები დამოუკიდებელი არ იქნებიან, ვინაიდან ძაბვების $[\sigma_{ij}]$ და დეფორმაციების $[\varepsilon_{ij}]$ ტენზორები სიმეტრიული ტენზორებია და თითოეულ მათგანს შეესაბამება მხოლოდ ექვსი დამოუკიდებელი სიდიდე. ამის გამო კომპონენტების ინდექსებს შორის ადგილი ექნება (5.31) ტოლობას

$$ijke = jike = ijek = jiek. \quad (7.41)$$

(7.41) ტოლობის გათვალისწინების შემდეგ დრეკადობის მოდულების (და მულტიპლიკაციის) ტენზორების კომპონენტებს შორის დამოუკიდებელი რჩება მხოლოდ 36. კომპონენტების რიცხვის ასეთი მკვეთრი შემცირება საშუალებას იძლევა გადავიდეთ ორინდექსიან მატრიცულ აღნიშვნებზე, (5.24) წესის მიხედვით:

11	22	33	23,32	31,13	12,21
1	2	3	4	5	6

მაშინ ძაბვების ტენზორის კომპონენტებისათვის მივიღებთ:

$$\sigma_1 = \sigma_{11}, \quad \sigma_2 = \sigma_{22}, \quad \sigma_3 = \sigma_{33}, \quad \sigma_4 = \sigma_{23} = \sigma_{32}, \quad \sigma_5 = \sigma_{13} = \sigma_{31},$$

$$\sigma_6 = \sigma_{12} = \sigma_{21} \quad (7.42)$$

და შესაბამისი ცხრილები:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \sigma_1 & \sigma_6 & \sigma_5 \\ \sigma_8 & \sigma_2 & \sigma_4 \\ \sigma_5 & \sigma_4 & \sigma_3 \end{bmatrix} \quad (7.43)$$

ამის შემდეგ $[c_{ijk}]$ ტენზორის კომპონენტებისათვის დაიწერება

$$c_{ijk} = c_{mnp} (ijke = 1, 2, 3; \quad m, n = 1, 2 \dots 6).$$

ამიტომ (7.38) განტოლება, რომელიც ჰუკის კანონს გამოხატავს, მიიღებს შემდეგ სახეს

$$\sigma_i = c_{ij} \varepsilon_j \quad (i, j = 1, 2 \dots 6). \quad (7.44)$$

(c_{ij}) კოეფიციენტები, ჩაწერილი კვადრატული ცხრილის სახით, წარმოადგენენ (c_{ij}) მატრიცას:

$$(c_{ij}) = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{16} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} & c_{26} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_{36} \\ c_{41} & c_{42} & c_{43} & c_{44} & c_{45} & c_{46} \\ c_{51} & c_{52} & c_{53} & c_{54} & c_{55} & c_{56} \\ c_{61} & c_{62} & c_{63} & c_{64} & c_{65} & c_{66} \end{pmatrix} \quad (7.45)$$

ახლა (7.44) განტოლება შეიძლება ჩაიწეროს მატრიცული ფორმით

$$\Sigma = CE, \quad (7.46)$$

E , Σ — (6×1) სახის მატრიცებია, ხოლო C — (6×6) კვადრატული (7.45) მატრიცაა.

თუ გვინდა (7.41) ინდექსების ტოლობის დაცვით (7.40) განტოლებას შევეუნარჩუნოთ თავისი სახე, საჭირო ხდება დეფორმაციის ტენზორის კომპონენტებისათვის შემოვიღოთ აღნიშვნები:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= \varepsilon_{11} & \varepsilon_2 &= \varepsilon_{22} & \varepsilon_3 &= \varepsilon_{33} & \varepsilon_4 &= 2\varepsilon_{23} = 2\varepsilon_{32}; \\ \varepsilon_5 &= 2\varepsilon_{13} = 2\varepsilon_{31}, & \varepsilon_6 &= 2\varepsilon_{21} = 2\varepsilon_{12}, \end{aligned} \quad (7.47)$$

ხოლო დრეკადი მუდმივების $[s_{ijk}]$ ტენზორის კომპონენტებისათვის მივიღებთ:

$$\begin{aligned} s_{ijk} &= s_{mnp}, & \text{როდესაც } m \text{ და } n \text{ ტოლი არიან } 1, 2, 3; \\ 2s_{ijk} &= s_{mnp}, & \text{როდესაც } m \text{ ან } n \text{ ტოლია } 4, 5, 6; \\ 4s_{ijk} &= s_{mnp}, & \text{როდესაც } m \text{ და } n \text{ ტოლია } 4, 5, 6. \end{aligned} \quad (7.48)$$

მაგალითისათვის (7.40) განტოლებიდან განვსაზღვროთ ε_{13} -ის რომელიმე კომპონენტი

$$\begin{aligned} \varepsilon_{13} &= s_{1311}\sigma_{11} + s_{1312}\sigma_{12} + s_{1313}\sigma_{13} + s_{1321}\sigma_{21} + s_{1322}\sigma_{22} + \\ &+ s_{1323}\sigma_{23} + s_{1331}\sigma_{31} + s_{1332}\sigma_{32} + s_{1333}\sigma_{33}. \end{aligned}$$

(7.42) და (7.48) ტოლობების გამოყენების შემდეგ

$$\frac{1}{2} \varepsilon_6 = \frac{1}{2} s_{51} \sigma_1 + \frac{1}{4} s_{50} \sigma_0 + \frac{1}{4} s_{55} \sigma_5 + \frac{1}{4} s_{60} \sigma_0 + \frac{1}{2} s_{52} \sigma_2 + \\ + \frac{1}{4} s_{51} \sigma_4 + \frac{1}{4} s_{65} \sigma_5 + \frac{1}{4} s_{64} \sigma_4 + \frac{1}{2} s_{53} \sigma_3;$$

აქედან

$$\varepsilon_i = s_{ij} \sigma_j (i_j = 1, 2, \dots, 6), \quad (7.49)$$

სადაც (s_{ij}) წარმოადგენს კვადრატულ მატრიცას:

$$(s_{ij}) = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} & s_{14} & s_{15} & s_{10} \\ s_{21} & s_{22} & s_{23} & s_{24} & s_{25} & s_{20} \\ s_{31} & s_{32} & s_{33} & s_{34} & s_{35} & s_{30} \\ s_{41} & s_{42} & s_{43} & s_{44} & s_{45} & s_{40} \\ s_{51} & s_{52} & s_{53} & s_{54} & s_{55} & s_{50} \\ s_{61} & s_{62} & s_{63} & s_{64} & s_{65} & s_{60} \end{pmatrix} \quad (7.50)$$

თუმცა c_{ij} და s_{ij} ორი ინდექსი აქვთ, ისინი არ წარმოადგენენ მეორე რანგის ტენზორის კომპონენტებს და ამიტომ არ გარდაიქმნებიან ტენზორის კომპონენტების გარდაქმნის წესით. კოორდინატთა გარდაქმნის შემთხვევაში საჭიროა დაუბრუნდეთ ოთხინდექსიან აღნიშვნებს.

დეფორმაციის ენერჯია

როდესაც გარე ძალების მოქმედებით კრისტალი დეფორმირდება, ეს ძალები ასრულებენ გარკვეულ მუშაობას კრისტალის ნაწილაკებს შორის არსებული შეჭიდულობის ან დრეკადი ძალების წინააღმდეგ. ამ მუშაობის ხარჯზე იზრდება სხეულის პოტენციური ენერჯია, რომელსაც დეფორმაციის ენერჯია ეწოდება.

დეფორმაციის ენერჯიის გამოანგარიშებისათვის ავიღოთ კრისტალი ელემენტარული მართკუთხა dx_1, dx_2, dx_3 პარალელეპიპედის სახით, რომელიც σ_{ij} ძაბვების მოქმედებით მცირე ε_{ij} დეფორმირებული მდგომარეობიდან გადადის $\varepsilon_{ij} + d\varepsilon_{ij}$ დეფორმირებულ მდგომარეობაში. კოორდინატთა სათავე აღებულია პარალელეპიპედის რომელიმე წვეროში, ხოლო კოორდინატთა ღერძები პარალელეპიპედის წიბოების გასწვრივ არიან მიმართული. განვიხილოთ წახნაგები, რომლებიც dx_1 ღერძის მართობნი არიან. ამ წახნაგებზე მოქმედებს ნორმალური ძალა $\sigma_{11} dx_2 dx_3$, რომლის გავლენით dx_1 ღერძის მართობი ორი წახნაგი გადაინაცვლებს და წიბო dx_1 წაგრძელდება $d\varepsilon_{11} dx_1$ სიდიდით. დანარჩენი ოთხი წახნაგი ამ ძალების მოქმედებით მხოლოდ გაიზრდიან თავის ფართობს, მაგრამ მათი გადაინაცვლება არ მოხდება და ამიტომ ამ წახნაგების

მიმართ შესრულებული მუშაობა იქნება ნული. მუშაობა, რომელიც შესრულდება dx_1 ღერძის მიმართ, მართობი წახნაგების გადანაცვლებაზე. ტოლი იქნება: $\sigma_{11} d\varepsilon_{11} dx_1 dx_2 dx_3$. ანალოგიურად, მუშაობა, შესრულებული ნორმალური ძალების მიერ დანარჩენი ორი წყვილი წახნაგების მიმართ, იქნება: $\sigma_{22} d\varepsilon_{22} dx_1 dx_2 dx_3$ და $\sigma_{33} d\varepsilon_{33} dx_1 dx_2 dx_3$. ასეთივე სახე ექნება მუშაობას, რომელსაც შეასრულებენ მხები ძაბვები ძერის დეფორმაციის დროს. მაგალითად, თუ ხდება dx_1 ღერძის მიმართ მართობული წახნაგების ძერა dx_3 ღერძის პარალელურად, ამ დეფორმაციას ახდენს $\sigma_{13} dx_1 dx_2$ ძალა, ხოლო გადანაცვლება იქნება $d\varepsilon_{13} dx_3$ სიდიდის ტოლი. მუშაობა ამ შემთხვევაში განისაზღვრება სიდიდით: $\sigma_{13} d\varepsilon_{13} dx_1 dx_2 dx_3$. თუ შევკრებთ ყველა აღნიშნულ მუშაობას, მივიღებთ მუშაობას, რომელსაც პარალელეპიპედის წახნაგებზე მოქმედი σ_{ij} . ძაბვები ასრულებენ მისი დამატებითი $d\varepsilon_{ij}$ სიდიდით დეფორმირების დროს. ეს მუშაობა იქნება

$$dA = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij} dx_1 dx_2 dx_3. \quad (7.51)$$

(7.51) წარმოადგენს დეფორმაციის ენერჯიას, რომელიც წარმოიშობა კრისტალის $dx_1 dx_2 dx_3$ მოცულობის ელემენტში. მოცულობის ერთეულისათვის დეფორმაციის ენერჯიის სიმკვრივე იქნება

$$da = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}. \quad (7.52)$$

დეფორმაციის სრული ენერჯია, რომელსაც შეიძენს სხეული გარე ძალების მოქმედების შედეგად, ასე გამოისახება $\int \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij} dv$, სადაც ინტეგრალი აღებულია კრისტალის მთელი მოცულობის მიმართ.

თუ დეფორმაცია ჩატარებულია როგორც იზოთერმული და შექცევადი პროცესი, მაშინ, როგორც ეს თერმოდინამიკიდან არის ცნობილი, დახარჯული მუშაობა იქნება თავისუფალი ენერჯიის ნაზრდის ტოლი და მოცულობის ერთეულისათვის შეიძლება დაიწეროს

$$dF = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}. \quad (7.53)$$

ამგვარად, დეფორმაციის ენერჯიის სიმკვრივე $\sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}$ წარმოადგენს მდგომარეობის ფუნქციას და ცალსახად განისაზღვრება ε_{ij} დეფორმაციებით, ხოლო da სიდიდე სრული დიფერენციალია, ამიტომ

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial a}{\partial \varepsilon_{ij}}. \quad (7.54)$$

ამასთან დაკავშირებით, a -ს უწოდებენ ღრეკადი σ_{ij} ძაბვების პოტენციალს.

თუ გამოვიყენებთ ჰუკის კანონს (7.38) ფორმულის სახით, მაშინ

$$dF = c_{ijkl} \varepsilon_{kl} d\varepsilon_{ij}; \quad (7.55)$$

აქედან, ვინაიდან მდგომარეობის ფუნქცია არ არის დამოკიდებული დიფერენცირების მიმდევრობისაგან

$$c_{ijkh} = \frac{\partial^2 F}{\partial \varepsilon_{ij} \partial \varepsilon_{kh}} = \frac{\partial^2 F}{\partial \varepsilon_{kh} \partial \varepsilon_{ij}} = c_{kheij}. \quad (7.56)$$

ამის საფუძველზე (7.41) ტოლობას შეიძლება დაემატოს ახალი წევრები და მიიღებს (5.35) სახეს

$$ijke = jike = ijek = jiek = keij = ekij = keji = ekji.$$

(5.35) ტოლობები საშუალებას იძლევიან დრეკადი მოდულების და დრეკადი მუდმივების $[c_{ijkh}]$, $[s_{ijkh}]$ მეოთხე რანგის ტენზორების დამოუკიდებელი კომპონენტების რიცხვი 81-დან შევამციროთ 21 კომპონენტამდე. მართლაც, ამ შემთხვევაში (7.45) მატრიცის კომპონენტებისათვის ადგილი ექნება ტოლობას

$$c_{ij} = c_{ji}$$

და ამიტომ (ვინაიდან მატრიცა სიმეტრიულია, ნაჩვენებია მისი ნახევარი):

$$\begin{array}{cccccc} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{16} \\ & c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} & c_{26} \\ & & c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_{36} \\ & & & c_{44} & c_{45} & c_{46} \\ & & & & c_{55} & c_{56} \\ & & & & & c_{66} \end{array} \quad (7.57)$$

ანალოგიურად შეიძლება დაიწეროს მატრიცა დრეკადი მუდმივების ტენზორისათვის.

ახლა შეიძლება დავუბრუნდეთ კრისტალის დეფორმაციის ენერჯიას, რომლის გამოსაანგარიშებლად საჭიროა (7.55) განტოლების ინტეგრირება, მაშინ

$$F = \frac{1}{2} c_{ijkh} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kh},$$

$$F = \frac{1}{2} s_{ijkh} \sigma_{ij} \sigma_{kh}. \quad (7.58)$$

(7.58) გამოხატავს მუშაობას, რომელიც უნდა შესრულდეს იმისათვის, რომ ერთეულოვანი მოცულობის კრისტალს მიენიჭოს ε_{ij} სიდიდის დეფორმაცია.

როგორც დაინახეთ, ტენზორების სიმეტრიულობის შედეგად დრეკადი მოდულებებისა და მუდმივების ტენზორების 81 კომპონენტიდან დამოუკიდებელი რჩება მხოლოდ 21. კრისტალების სიმეტრიის გავლენით ხდება ამ კომპონენტების რიცხვის შემდგომი შემცირება. ეს საკითხი ნაწილობრივად განხილული იყო V თავში, სადაც ნაჩვენებია რომ, ინვერსიის ცენტრთან დაკავშირებული გარდაქმნა არ ახდენს გავლენას ლუწი რანგის ტენზორების კომპონენტებზე. ამიტომ ტრიკლინური სიმეტრიის მქონე კრისტალებისათვის დრეკადი ტენზორების დამოუკიდებელი კომპონენტების რიცხვი რჩება 21 და შესაბამის მატრიცას ექნება (7.57) მატრიცის სახე. ამ მატრიცის ელემენტები შეიძლება დაიწეროს ოთხნიშნა (ტენზორულ) აღნიშვნებში და ვინაიდან მეოთხე რანგის ტენზორის კომპონენტები გარდაიქმნებიან როგორც ოთხი კოორდინატის ნამრავლი, ამიტომ თითოეულ კომპონენტს მიეწეროს შესაბამისი ოთხი კოორდინატის ნამრავლი ისე, როგორც ეს ნაჩვენებია (5.38) ცხრილში.

მონოკლინურ სისტემაში სამი წერტილოვანი კლასია: 2, m , $2/m$. 2 ღერძის მოქმედება განხილული იყო V თავში, სადაც ნაჩვენებია, რომ თუ მეორე რიგის ღერძი მიმართულია კოორდინატთა ღერძის პარალელურად, მაშინ ნულს უტოლდება ყველა ის კომპონენტი, რომლებიც თავის ინდექსში შეიცავენ შესაბამისი ღერძის ნომრის ერთ ან სამ ციფრს. მონოკლინურ სისტემაში 2 ღერძი მიმართულია x_2 ღერძის პარალელურად, ამიტომ გაქრება ის კომპონენტები, რომლებიც თავის ინდექსში შეიცავენ ერთ ან სამ ორიანს. როგორც (5.38) ცხრილი გვიჩვენებს, ასეთი კომპონენტების რიცხვი იქნება 8 და ნულისაგან განსხვავებული დარჩება 13 კომპონენტი.

თუ მოცემულია m სიბრტყე, მაშინ კოორდინატთა ღერძებს ვირჩევთ ისე, რომ ამ სიბრტყეში მოთავსდეს x_1 და x_2 ღერძები და კოორდინატთა გარდაქმნას ექნება შემდეგი სახე: $x_1 \rightarrow x_1$ $x_2 \rightarrow x_2$ $x_3 \rightarrow -x_3$. აქედან, ცხადია, რომ ნულს გაუტოლდება ყველა ის კომპონენტი, რომლებიც შეიცავენ თავის ინდექსში სამიანების კენტ რიცხვს. როგორც (5.38) ცხრილიდან ჩანს, ნულისაგან განსხვავებული იქნებიან იგივე კომპონენტები, რომელნიც 2 ღერძის მოქმედების შემდეგ დარჩნენ.

კლასი $2/m$ ვერ მოახდენს რაიმე ცვლილებას, ვინაიდან 2 და m კლასებისაგან ის განსხვავდება ინერსიის ცენტრის არსებობით, რომელიც, როგორც ვიცით, არ ახდენს გავლენას მეოთხე რანგის ტენზორის კომპონენტებზე. ამგვარად, მონოკლინური სისტემის კრისტალებისათვის საბოლოოდ რჩება 13 წევრისაგან შემდგარი მატრიცა:

$$\begin{array}{cccccc}
c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & c_{15} & 0 \\
& c_{22} & c_{23} & 0 & c_{25} & 0 \\
& & c_{33} & 0 & c_{35} & 0 \\
& & & c_{44} & 0 & c_{46} \\
& & & & c_{55} & 0 \\
& & & & & c_{66}
\end{array} \quad (7.59)$$

აქვე უნდა შევნიშნოთ, რომ როგორც ტრიკლინურ, ისე მონოკლინურ სისტემაში შესაძლებელია დრეკადი მოდულების რიცხვის კიდევ შემცირება კოორდინატთა სისტემის ფიქსირებასთან დაკავშირებით. მაგალითად, ტრიკლინურ სისტემაში კოორდინატთა სისტემის ორიენტაციას ესაჭიროება სამი სიდიდე, ხოლო მონოკლინურში — ერთი. ასეთივე რიცხვით შემცირდება კომპონენტების რიცხვი, მაგრამ ეს შემცირება უკვე არ იქნება დაკავშირებული უშუალოდ სიმეტრიის ელემენტების მოქმედებასთან.

რომბულ სისტემაში 222, 2mm, mmm კლასებია. აქ ყოველთვის არის სამი ურთიერთმართობი მიმართულება მეორე რიგის ღერძების ან სიმეტრიის სიბრტყეებისაღმი მართობების სახით. ამ მიმართულებების პარალელურად კოორდინატთა ღერძების გატარების შედეგად ნულს გაუტოლდება ყველა ის კომპონენტი, რომელთა ინდექსი შეიცავს ერთ ან სამ ერთნაირ ციფრს (იხ. V). ამის გამო ნულისაგან განსხვავებული დარჩება მხოლოდ 9 კომპონენტი და (7.57) მატრიცა მიიღებს შემდეგ სახეს:

$$\begin{array}{cccccc}
c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\
& c_{22} & c_{23} & 0 & 0 & 0 \\
& & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\
& & & c_{44} & 0 & 0 \\
& & & & c_{55} & 0 \\
& & & & & c_{66}
\end{array} \quad (7.60)$$

ტეტრაგონალურ სისტემაში უნდა განვიხილოთ ორი შემთხვევა: ავილოთ კლასები $4, \bar{4}, 4/m$. თუ 4 ღერძი მიმართულია x_3 კოორდინატის გასწვრივ, იმავე მიმართულებით იმოქმედებს მეორე რიგის ღერძი, რომლის გავლენით, როგორც დავინახეთ, ნულისაგან განსხვავებული დარჩება 13 კომპონენტი. ამ კომპონენტებზე დამატებით იმოქმედებს მეოთხე რიგის ღერძი, რომელსაც შეესაბამება გარდაქმნა:

$x_1 \rightarrow x_2, x_2 \rightarrow -x_1, x_3 \rightarrow x_3$, რის შედეგად ადგილი ექნება შემდეგ ტოლობებს:

$$\begin{array}{ll}
x_1 x_1 x_1 x_1 = x_2 x_2 x_2 x_2 & x_2 x_3 x_2 x_3 = x_1 x_3 x_1 x_3 \\
x_1 x_1 x_3 x_3 = x_2 x_2 x_3 x_3 & x_1 x_1 x_1 x_2 = -x_2 x_2 x_1 x_2 \\
x_3 x_3 x_1 x_2 = 0 & x_2 x_3 x_1 x_3 = 0
\end{array}$$

საბოლოოდ ნულისაგან განსხვავებული დარჩება მხოლოდ 7 კომპონენტი და მატრიცა მიიღებს სახეს:

$$\begin{array}{cccccc}
 c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & c_{16} \\
 & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & -c_{16} \\
 & & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\
 & & & c_{41} & 0 & 0 \\
 & & & & c_{44} & 0 \\
 & & & & & c_{66}
 \end{array} \quad (7.61)$$

ტეტრაგონალური სისტემის კლასებისათვის: $4mm$, $42m$, 422 და $4/mmm$ დამოუკიდებელი კომპონენტების რიცხვი ხდება 6, როგორც ეს ნაჩვენები იყო V თავში (იხ. 5.41).

კუბურ სისტემაში განვიხილოთ სიმეტრიის ჯგუფი 23, რომელიც ამ სისტემის დანარჩენი ჯგუფების ქვეჯგუფს წარმოადგენს. აქ ვხვდებით სამ ურთიერთმართობ მეორე რიგის ღერძს, რომლებიც, როგორც ეს რომბული სისტემის განხილვის დროს იყო ნაჩვენები, ნულისაგან განსხვავებულს ტოვებენ 9 კომპონენტს (7.60). მაგრამ ამ კლასში მოქმედებს კიდევ მესამე რიგის ღერძი, მიმართული კუბის დიაგონალის გასწვრივ. მისი მოქმედებით $x_1 \rightarrow x_2$, $x_2 \rightarrow x_3$, $x_3 \rightarrow x_1$; ამიტომ გვექნება შემდეგი ტოლობები:

$$\begin{aligned}
 c_{11} &= c_{22} = c_{33} \\
 c_{44} &= c_{55} = c_{66} \\
 c_{12} &= c_{13} = c_{23}
 \end{aligned} \quad (7.62)$$

(7.62) ტოლობების შედეგად (7.60) მატრიცაში დამოუკიდებელი დარჩება მხოლოდ სამი კომპონენტი: c_{11} , c_{44} , c_{12} ; ამიტომ საბოლოოდ კუბური კრისტალებისათვის მატრიცა იქნება:

$$\begin{array}{cccccc}
 c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\
 & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\
 & & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\
 & & & c_{44} & 0 & 0 \\
 & & & & c_{44} & 0 \\
 & & & & & c_{44}
 \end{array} \quad (7.63)$$

ახლა, როდესაც ცნობილია $[c_{ij}]$ ტენზორის დამოუკიდებელი კომპონენტების რიცხვი, შესაძლებელია გამოვიანგარიშოთ ერთეულოვანი მოცულობის მქონე კუბური კრისტალის დეფორმაციის ენერგია (7.58) ფორმულების საფუძველზე. მივიღებთ

$$F = \frac{c_{11}}{2} (\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 + \varepsilon_3^2) + c_{12} (\varepsilon_2 \varepsilon_3 + \varepsilon_3 \varepsilon_1 + \varepsilon_1 \varepsilon_2) + \frac{c_{44}}{2} (\varepsilon_4^2 + \varepsilon_5^2 + \varepsilon_6^2). \quad (7.64)$$

გამოთვლები გვიჩვენებენ, რომ რომბოედრული სისტემის 3 და $\bar{3}$ კლასებისათვის არსებობს 7 დამოუკიდებელი დრეკადი მოდული, ხოლო 3*m*, 32, $\bar{3}m$ კლასებისათვის მათი რიცხვი უდრის 6 და მატრიცა იღებს სახეს:

$$\begin{array}{ccccccc}
 c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & 0 & 0 & \\
 & c_{11} & c_{13} & -c_{14} & 0 & 0 & \\
 & & c_{33} & 0 & 0 & 0 & \\
 & & & c_{14} & 0 & 0 & \\
 & & & & c_{44} & c_{14} & \\
 & & & & & & \frac{1}{2}(c_{11}-c_{12})
 \end{array} \quad (7.65)$$

ჰექსაგონალური სისტემის კრისტალებისათვის დრეკადობის მოდულების რიცხვი აღწევს 5.

თუ სხეული იზოტროპიულია დრეკადი თვისებების მიმართ, მაშინ ამ თვისების სიმეტრიის დასახასიათებლად შეიძლება გამოვიყენოთ ჯგუფი, რომელიც სფეროს სიმეტრიას აღწერს და წარმოადგენს უმაღლესი სიმეტრიის ჯგუფს $\infty\infty m$. როგორც ვიცით (იხ. ცხრილი 4.1), $\infty\infty m$ ჯგუფი მიიღება, როგორც ზღვრული ჯგუფი კუბური სიმეტრიის ჯგუფების მიმართ; ამიტომ დრეკადი მოდულების ტენზორზე ამ ჯგუფის სიმეტრიის გავლენის განსაზღვრისათვის საკმარისია კუბური სისტემის სიმეტრიის ჰოლოედრული ჯგუფის ოპერატორებს დაემატოს ოპერატორი ∞ (უსასრულო რიგის ღერძი). შეიძლება ჩვენება, რომ უსასრულო რიგის ღერძის მოქმედებით კუბური კრისტალების c_{11} , c_{12} , c_{44} დრეკად მოდულებს შორის იქმნება დამატებითი პირობა:

$$c_{44} = \frac{c_{11} - c_{12}}{2} \text{ და ამგვარად იზოტროპიული სხეულის დრეკადი თვისების}$$

დასახასიათებლად საკმარისია მხოლოდ ორი კომპონენტი: c_{11} და c_{12} ან s_{11} და s_{12} . შესაბამის მატრიცას ექნება შემდეგი სახე:

$$\begin{array}{ccccccc}
 c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 & \\
 & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 & \\
 & & c_{11} & 0 & 0 & 0 & \\
 & & & \frac{1}{2}(c_{11}-c_{12}) & 0 & 0 & \\
 & & & & \frac{1}{2}(c_{11}-c_{12}) & 0 & \\
 & & & & & & \frac{1}{2}(c_{11}-c_{12})
 \end{array} \quad (7.66)$$

ახლა შეიძლება გამოვიყენოთ (7.66) მატრიცა და იზოტროპიული სხეულები ისათვის დავწეროთ (7.49) განტოლებები გაშლილი სახით, მაშინ (7.48) პირობების მხედველობაში მიღების შემდეგ გვექნება:

$$\varepsilon_1 = s_{11}\sigma_1 + s_{12}\sigma_2 + s_{12}\sigma_3$$

$$\varepsilon_2 = s_{12}\sigma_1 + s_{11}\sigma_2 + s_{12}\sigma_3$$

$$\varepsilon_3 = s_{12}\sigma_1 + s_{12}\sigma_2 + s_{11}\sigma_3$$

$$\varepsilon_4 = 2(s_{11} - s_{12}) \cdot \sigma_4$$

$$\varepsilon_5 = 2(s_{11} - s_{12}) \cdot \sigma_5$$

$$\varepsilon_6 = 2(s_{11} - s_{12}) \cdot \sigma_6$$

დრეკადობის თეორიაში იზოტროპიული სხეულებისათვის მიღებულია შემდეგი აღნიშვნები:

$$s_{11} = \frac{1}{E}; \quad s_{12} = -\frac{\nu}{E}; \quad 2(s_{11} - s_{12}) = \frac{1}{G}, \quad (7.67)$$

სადაც E იუნგის მოდულია, G — ძვრის მოდული, ხოლო ν — პუასონის კოეფიციენტი, აქედან

$$G = \frac{E}{2(1+\nu)}.$$

თუ ε წარმოადგენს წვრილი ღეროს გაჭიმვის დეფორმაციას $\varepsilon = \frac{\Delta l}{l}$,

მაშინ $\varepsilon_1 = s_{11}\sigma_1$ და ვიღებთ ცნობილ ფორმულას: $\frac{\Delta l}{l} = \frac{1}{E} \sigma$.

საბოლოოდ შეიძლება შევავამოთ დრეკადი მოდულების ან დრეკადი მუდმივების რიცხვი სხვადასხვა სისტემის კრისტალებისათვის:

ტრიკლინური	21
მონოკლინური	13
რომბული	9
რომბოედრული $\bar{3}, 3$	7
რომბოედრული $3m, 32, \bar{3}m$	6
ტეტრაგონალური $4, \bar{4}, 4/m$	7
ტეტრაგონალური $4/mmm$	6
ჰექსაგონალური	5
კუბური	3
იზოტროპიული	2

ამ ცხრილიდან ჩანს, რომ დრეკადობის ტენზორის სიმეტრიის ჯგუფების რიცხვი იზოტროპიული ჯგუფის ჩათვლით უდრის 10. ამიტომ (7.58) ფორმულის გამოყენებით შეიძლება შევდგეს დეფორმირებული

კრისტალის თავისუფალი ენერჯიის 10 სხვადასხვა გამოსახულება, იმის მსგავსად, როგორც ეს გაკეთებული იყო კუბური სისტემის კრისტალებისათვის (7. 64).

საინტერესოა აღინიშნოს, რომ თუ მეორე რანგის ტენზორის მიერ აღწერილ თვისებებში კუბური სიმეტრიის კრისტალები იზოტროპიულობას იჩენენ, დრეკადი თვისებების მიმართ ისინი ანიზოტროპიული არიან. ანიზოტროპიულობის ზომად, როგორც დავინახეთ, შეიძლება მივიღოთ შეფარდება $\frac{2c_{44}}{c_{11}-c_{12}}$. თუ $\frac{2c_{44}}{c_{11}-c_{12}} = 1$, მაშინ კრისტალი

იზოტროპიულია დრეკადი თვისებების მიმართ და ამიტომ დრეკადი რხევები, რომელიც ასეთ კრისტალში წარმოიშობიან, გავრცელდებიან ყველა მიმართულებით ერთნაირი სიჩქარით. ცხრილში მაგალითისათვის მოყვანილია დრეკადი ანიზოტროპიულობის ფაქტორის მნიშვნელობები რიგი კუბური სიმეტრიის მქონე ლითონებისათვის.

Al	1,2	Pb	3,9
Ni	2,5	K	6,3
Cu	3,3	Na	8

ცხრილი გვიჩვენებს, რომ ალუმინისათვის (წახნაგდაცენტრებული კუბის სტრუქტურა) შეფარდება უახლოვდება 1-ს და, მაშასადამე, ეს ლითონი მიახლოებით იზოტროპიულია დრეკადი თვისებების მიმართ;

ამავე დროს ნატრიუმისათვის (მოცულობადაცენტრებული კუბი) ანიზოტროპიულობის ფაქტორი უდრის 8-ს და ნატრიუმი იჩენს დიდ დრეკად ანიზოტროპიულობას.

თუ დრეკადი თვისებების განხილვის დროს კრისტალებს განვიხილავთ არა როგორც უწყვეტ გარემოს, არამედ მხედველობაში მივიღებთ კრისტალური მესრის აღნაგობას, მაშინ შესაძლებელი ხდება დამყარდეს კავშირი დრეკად მუდმივებსა და იმ ბმის ძალებს შორის, რომელნიც მოქმედებენ ატომებს შორის კრისტალურ მესერში. ამიტომ, სიმარტივისათვის იხილავენ კუბური მესრის დეფორმაციის ენერჯიას, როგორც ნაწილაკების წანაცვლების ფუნქციას, და მხედველობაში იღებენ მხოლოდ უახლოესი მეზობლების მოქმედებას. ამის შემდეგ მიღებულ გამოსახულებას ადარებენ (7.58) ფორმულით განსაზღვრული კრისტალის დეფორმაციის ენერჯიას. ასეთი საშუალებით შესაძლებელი ხდება დრეკად კოეფიციენტებს შორის ახალი დამატებითი დამოკიდებულებების დამყარება. იმ დაშვებით, რომ ნაწილაკებს შორის მოქმედებენ ცენტრალური ძალები, ე. ი. ძალები, რომელნიც მიმართულნი არიან ატომების ცენტრების შემაერთებელი წრფეების გასწვრივ, კოშიმ დრეკად კოეფიციენტებს შორის დაადგინა 6 ახალი დამოკიდებულება:

$$c_{23} = c_{44}; \quad c_{12} = c_{66}; \quad c_{13} = c_{55}; \quad c_{14} = c_{66}; \quad c_{25} = c_{46}; \quad c_{26} = c_{45}; \quad (7.68)$$

კუბური სისტემის კრისტალებისათვის ადგილი აქვს კიდევ ერთ დამატებით დამოკიდებულებას

$$c_{11} = c_{44} \quad (7.69)$$

ეს ტოლობა ამცირებს კუბური სიმეტრიის კრისტალების დრეკადი კოეფიციენტების რიცხვს 3-დან 2-მდე.

კოშის დამოკიდებულებებს ადგილი აქვს იმ შემთხვევაში, როდესაც ნაწილაკებს შორის ურთიერთქმედების ძალებს სფერული სიმეტრია გააჩნიათ. ეს იმას ნიშნავს, რომ კოშის ტოლობები არ შესრულდება ისეთ კრისტალებში, სადაც ბმის ძალებს მკვეთრად გამოხატული მიმართული ხასიათი აქვთ (კოვალენტური ბმა). ისინი არ სრულდება აგრეთვე კუბური სიმეტრიის ლითონურ კრისტალებში, რაც იმის მაჩვენებელია, რომ ლითონური ბმის აღწერა შეუძლებელია ცენტრალური ძალების საშუალებით. კოშის ტოლობები საკმაოდ კარგად სრულდება NaCl-ის ტიპის იონური კრისტალებისათვის, ვინაიდან ელექტროსტატიკური ძალები, რომელნიც იონებს შორის მოქმედებენ, თავისი ბუნებით ცენტრალურ ძალებს წარმოადგენენ.

კ უ მ უ ვ ა დ ო ბ ა

მაგალითისათვის განვიხილოთ კრისტალის დეფორმაცია ყოველმხრივი ჰიდროსტატიკური წნევის გავლენით; ამისათვის ავირჩიოთ რომელიმე კრისტალის ერთეულოვანი მოცულობის კუბი, რომლის წიბოები კოორდინატთა ღერძების პარალელურები არიან. ყოველმხრივი ჰიდროსტატიკური წნევა ერთნაირად იმოქმედებს კუბის ყველა წახნაგზე და მიმართული იქნება ამ წახნაგების მართობად. ამიტომ მხები ძაბვები იქნება ნულის ტოლი, ხოლო ნორმალური ძაბვებისათვის, (7.15)-ის თანახმად, შეიძლება დაიწეროს $\sigma_{ij} = -p\delta_{ij}$ ან $\sigma_{ij} = -p$; მაშინ (7.44) ფორმულიდან (7.63) მატრიცის გამოყენებით მივიღებთ:

$$\sigma_1 = c_{11}\epsilon_1 + c_{12}\epsilon_2 + c_{12}\epsilon_3 = -p$$

$$\sigma_2 = c_{12}\epsilon_1 + c_{11}\epsilon_2 + c_{12}\epsilon_3 = -p$$

$$\sigma_3 = c_{12}\epsilon_1 + c_{12}\epsilon_2 + c_{11}\epsilon_3 = -p$$

შევკრიბოთ ეს სამი განტოლება, მაშინ

$$(c_{11} + 2c_{12}) (\epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3) = -3p \quad (7.70)$$

ყოველმხრივი წნევის შედეგად ერთეულოვანი კუბის მოცულობა შემცირდება და მოცულობის ფარდობითი შემცირება $\frac{\Delta V}{V}$, როგორც

(7.32)-დან არის ცნობილი, უდრის $\frac{\Delta V}{V} = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3$. ჩაესვათ-ეს (7.70)

ფორმულაში

$$(c_{11} + 2c_{12}) \frac{\Delta V}{V} = -3p. \quad (7.71)$$

ცნობილია, რომ მოცულობითი კუმშვადობა განისაზღვრება ფორმულათ

$$k = -\frac{1}{p} \frac{\Delta V}{V}. \quad (7.72)$$

თუ-შევიდარებით (7.71) და (7.72), მივიღებთ

$$k = \frac{3}{c_{11} + 2c_{12}}. \quad (7.73)$$

(7.73) წარმოადგენს კუბური კრისტალების მოცულობით კუმშვადობას.

კრისტალის ხაზოვანი კუმშვადობა წარმოადგენს კრისტალში ვარკვეული მიმართულებით აღებული ნებისმიერი მონაკვეთის სიგრძის შეფარდებით შემცირებას, როდესაც კრისტალზე მოქმედებს ერთეულოვანი ჰიდროსტატიკური წნევა. კუბური კრისტალებისათვის (7.8) ფორმულის გამოყენებით მიიღება

$$k_{\text{ხაზ}} = \frac{1}{c_{11} + 2c_{12}}. \quad (7.74)$$

ხაზოვანი კუმშვადობა კუბურ კრისტალებში არ არის დამოკიდებული მიმართულებისაგან და, მაშასადამე, წარმოადგენს იზოტროპიულ სიდიდეს. სხვა სიმეტრიის კრისტალებისათვის ეს ასე არ არის.

ლიტერატურა

1. Ландау Л. Д. и Лифшиц Е. М. Механика сплошных сред. Часть II, гл. I. Гостехиздат, Москва, 1953 г.
2. Зоммерфельд Л. Механика деформируемых сред, гл. VIII. Издательство ИЛ, Москва, 1954.
3. Шубников А. В., Флинт Е. Е., Боккий Г. В. Основы кристаллографии, Изд-во АН СССР, 1940.
4. Най Дж. Физические свойства кристаллов. Изд-во «Мир». 1967.
5. Bhagavantam S. Crystal Symmetry and physical properties. Academic Press, 1966.
6. Васильев Д. М. Физическая кристаллография. Изд-во «Металлургия», 1972.
7. Костов И. Кристаллография. Изд-во «Мир», 1965.

კრისტალულის სითბური თვისებები

კრისტალების სითბური თვისებებიდან ამ თავში განიხილება მხოლოდ ის საკითხები, რომლებიც დაკავშირებული არიან კრისტალების სიმეტრიასთან და ატარებენ მკაფიოდ გამოსახულ ტენზორულ თვისებებს. ასეთ თვისებებს, უწინარეს ყოვლისა, მიეკუთვნებიან კრისტალების სითბური გაფართოება, რომელიც ერთგვაროვანი დეფორმაციის კერძო შემთხვევას წარმოადგენს, სითბოგამტარობა და თერმოელექტრული ეფექტები, რომლებსაც კრისტალებში აგრეთვე ტენზორული ბუნება აქვთ (მაგ., პელტიეს ტენზორი და სხვა), თუმცა თერმოელექტრული მოვლენები კრისტალებში არ არიან დაკავშირებული მხოლოდ სითბურ თვისებებთან და წარმოადგენენ ამ თვისებებისა და ერთდროულად დენის გავლის პროცესის ურთიერთქმედების შედეგს.

§ 31. სითბური გაფართოება

განივილით კრისტალი, რომელიც მოცემულ T_0 ტემპერატურაზე დეფორმირებული არ არის. თუ მას გავახურობთ რაიმე T ტემპერატურამდე, მისი ზომები შეიცვლება და კრისტალი დეფორმირდება. სითბური გაფართოება წარმოადგენს ერთგვაროვანი დეფორმაციების ერთ-ერთ ფორმას, რომელიც გამოწვეულია ტემპერატურის ΔT ცვლილებით და ამიტომ დეფორმაციის $[e_{ij}]$ ტენზორის კომპონენტები, როდესაც ΔT მცირეა, ტემპერატურის ამ ცვლილების პროპორციული არიან

$$e_{ij} = \alpha_{ij} \Delta T. \quad (8.1)$$

(8.1) განტოლებაში α_{ij} სიდიდეებს სითბური გაფართოების კოეფიციენტები ეწოდება. ისინი აკავშირებენ ორ ფიზიკურ სიდიდეს: დეფორმაციის ტენზორს და ტემპერატურას. დეფორმაციები მკორე რანგის სიმეტრიული ტენზორით გამოიხატებიან, ხოლო ტემპერატურა სკალარული სიდიდეა: ამიტომ (იხ. §-19) α_{ij} კოეფიციენტებიც ქმნიან მეორე რანგის სიმეტრიულ $[\alpha_{ij}]$ ტენზორს, რომელსაც სითბური გაფართოების ტენზორი ეწოდება. როგორც ნებისმიერი მეორე რანგის ტენზორი, სითბური გაფართოების ტენზორიც შეიძლება დავიყვანოთ მთავარღერძებზე, მაშინ (8.1) განტოლებიდან მივიღებთ:

$$e_{11} = \alpha_{11} \Delta T, \quad e_{22} = \alpha_{22} \Delta T, \quad e_{33} = \alpha_{33} \Delta T$$

ან, მოკლედ:

$$e_1 = \alpha_1 \Delta T, \quad e_2 = \alpha_2 \Delta T, \quad e_3 = \alpha_3 \Delta T,$$

სადაც $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ წარმოადგენენ ხაზოვანი გაფართოების მთავარ კოეფიციენტებს სამი ურთიერთმართობი მიმართულებისათვის. რიცხობრივად ეს კოეფიციენტები გამოხატავენ კრისტალის სიგრძის ერთეულის ცვალებადობას, მოცემული მთავარი მიმართულების გასწვრივ, მისი 1° -ით გათბობის შედეგად. ეს იმას ნიშნავს, რომ თუ გახურებამდე კრისტალი წარმოადგენდა ერთეულოვანი რადიუსის სფეროს, 1° გახურების შემდეგ ის მიიღებს ელიფსოიდის ფორმას, რომლის განტოლება იქნება:

$$\frac{x_1^2}{(1+\alpha_1)^2} + \frac{x_2^2}{(1+\alpha_2)^2} + \frac{x_3^2}{(1+\alpha_3)^2} = 1. \quad (8.2)$$

ზოგადად, სითბური გაფართოების ტენზორის მახასიათებელი ზედაპირის განტოლებას აქვს შემდეგი სახე

$$\alpha_{ij}x_i x_j = 1. \quad (8.3)$$

თუ კოორდინატთა ღერძები არჩეულია მთავარი მიმართულებების პარალელურად, მაშინ (8.3) განტოლება მარტივდება და შეიძლება დაიწეროს

$$\alpha_1 x_1^2 + \alpha_2 x_2^2 + \alpha_3 x_3^2 = 1. \quad (8.4)$$

სითბური გაფართოების ელიფსოიდის ფორმა და განლაგება კრისტალში დამოკიდებული იქნება კრისტალის სიმეტრიაზე. ნეიმანის პრინციპის თანახმად, კრისტალის სითბური გაფართოება უნდა შეიცავდეს მისი წერტილოვანი ჯგუფის სიმეტრიას, ამიტომ როგორი ტემპერატურაც არ უნდა მივანიჭოთ კრისტალს, ის მაინც მიეკუთვნება სიმეტრიის გარკვეულ კლასს, თუ, რა თქმა უნდა, მხედველობაში არ მივიღებთ შესაძლებელ ფაზურ გარდაქმნებს, რომლებსაც შეუძლიათ შეცვალონ კრისტალის სიმეტრია.

სითბური გაფართოების (და საერთოდ ნებისმიერი ერთგვაროვანი დეფორმაციის) ტენზორის სიმეტრიის მიხედვით კრისტალები იყოფიან ხუთ ჯგუფად. (8.1) ცხრილში მოცემულია ტენზორის სიმეტრია, დამოუკიდებელი კოეფიციენტების რიცხვი და ტენზორის კომპონენტები თითოეული კრისტალური სისტემისათვის. როგორც ცხრილი გვიჩვენებს, პირველ ჯგუფს მიეკუთვნება ყველა ტრიკლინური კრისტალი. თუ ტრიკლინური კრისტალიდან დამზადებულ სფეროს გავახურებთ, ის სამღერძა ელიფსოიდად გადაიქცევა. ყოველ ტემპერატურას (დეფორმაციის ხარისხს) შეესაბამება თავისი ელიფსოიდი, რომელიც არ არის აუცილებელი თავისი ღერძების მიმართულებით ემთხვეოდეს წინა ელიფსოიდის ღერძების განლაგებას. საბოლოო ჯამში კრისტალში მიიღება ელიფსოიდების ერთობლიობა, რომელსაც ერთი საერთო წერტილი გააჩნია. ეს წერტილი ყველა ელიფსოიდის საერთო ცენტრს წარმოადგენს და ამავე დროს ფიგურის სიმეტრიის ცენტრია. ამი-

ტომ, შეიძლება ითქვას, რომ ტრიკლინური კრისტალის განურების შედეგად მიღებული ერთგვაროვანი დეფორმაცია ხასიათდება $\bar{1}$ სიმეტრიით.

მონოკლინურ კრისტალებში სამღერძა ელიფსოიდის ერთ-ერთი ღერძის მიმართულება ფიქსირებულია და ემთხვევა მეორე რიგის ღერძის ან სიმეტრიის სიბრტყისადმი მართობის მიმართულებას. სითბური გაფართოების პროცესში ელიფსოიდის ეს ღერძი და მისადმი მართობული სიბრტყე რჩებიან უცვლელნი, ამიტომ ტენზორის სიმეტრია იქნება $2/m$. რომბული სისტემის კრისტალებში სამღერძა ელიფსოიდის სამივე ღერძის მიმართულება ფიქსირებულია და თანხვედება მთავარ კოორდინატთა ღერძებს. ტენზორული ელიფსოიდის სიმეტრია იქნება mmm . ტრიგონალური, ტეტრაგონალური და ჰექსაგონალური სიმეტრიის კრისტალებში ტენზორული ზედაპირი წარმოადგენს ბრუნვის ელიფსოიდს. ბრუნვის ღერძი თანხვედება x_3 ღერძს, ხოლო სითბური გაფართოების დეფორმაციას აქვს ∞/mmm სიმეტრია; კუბურ კრისტალებში ელიფსოიდი გარდაიქმნება სფეროდ, რომლის სიმეტრია არის $\infty\infty m$.

ცხრილი 8. 1.

სითბური გაფართოების ტენზორის სიმეტრია	სისტემა	დამოუკიდ. კოეფიციენტ. რიცხვი	ტენზორის კომპონენტები
$\bar{1}$	ტრიკლინური	6	$\alpha_{11} \alpha_{12} \alpha_{13}$ $\alpha_{12} \alpha_{22} \alpha_{23}$ $\alpha_{13} \alpha_{23} \alpha_{33}$
$2/m$	მონოკლინური	4	$\alpha_{11} \alpha_{12} 0$ $\alpha_{12} \alpha_{22} 0$ $0 0 \alpha_{33}$
mmm	რომბული	3	$\alpha_{11} 0 0$ $0 \alpha_{22} 0$ $0 0 \alpha_{33}$
∞/mmm	ტეტრაგონალური ტრიგონალური ჰექსაგონალური	2	$\alpha_{11} 0 0$ $0 \alpha_{11} 0$ $0 0 \alpha_{33}$
$\infty \infty m$	კუბური	1	$\alpha_{11} 0 0$ $0 \alpha_{11} 0$ $0 0 \alpha_{11}$

სითბური გაფართოების α კოეფიციენტის მნიშვნელობა, ნებისმიერი მიმართულებისათვის, რომლის მგეზავი კოსინუსებია l_1, l_2, l_3 , განისაზღვრება (1.50) თანხმად, შემდეგი გამოსახულებით

$$\alpha = \alpha_{ij} l_i l_j \quad (8.5)$$

სითბური გაფართოების მთავარი ღერძების შემოღების შემდეგ

$$\alpha = \alpha_1 l_1^2 + \alpha_2 l_2^2 + \alpha_3 l_3^2. \quad (8.6)$$

თუ კრისტალი აღებულია ერთეულოვანი რადიუსის მქონე სფეროს სახით, მაშინ გახურების შემდეგ ის მიიღებს ელიფსოიდის ფორმას და ამ ელიფსოიდის თითოეული რადიუს-ვექტორის სიგრძე იქნება $1 + \alpha$, სადაც α არის ხაზოვანი გაფართოების კოეფიციენტი, აღებულია რადიუს-ვექტორის მიმართულებით და განსაზღვრული (8.6) ფორმულით. მაგ., კუბური სიმეტრიის კრისტალებისათვის, 8.1 ცხრილის მიხედვით, $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3$. ამიტომ $\alpha = \text{const}$ და კუბური კრისტალები სითბური გაფართოების მიმართ იჩენენ იზოტროპიულ თვისებებს.

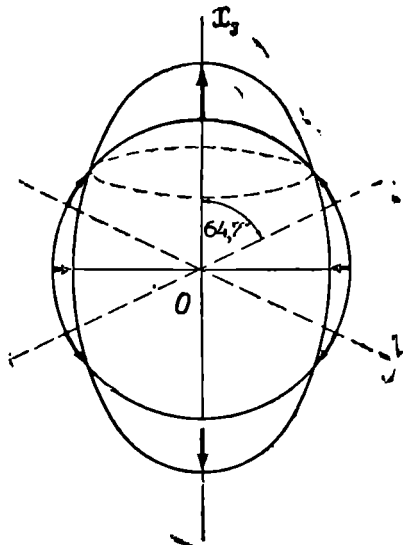
კრისტალების ხაზოვანი გაფართოების კოეფიციენტები მცირე სიდიდეებს წარმოადგენენ და განისაზღვრებიან 10^{-5} გრად⁻¹ რიგით. (8.2) ცხრილში მაგალითისათვის მოყვანილია ხაზოვანი გაფართოების მთავარი კოეფიციენტების მნიშვნელობები, გაზომილი ოთახის ტემპერატურაზე სხვადასხვა სიმეტრიის მქონე რამდენიმე კრისტალისათვის. როგორც ცხრილი გვიჩვენებს, განსაკუთრებით მცირე სითბური გაფართოების კოეფიციენტით ხასიათდება ალმასი, რომლის კრისტალურ მესერში ნახშირბადის ატომები დაკავშირებული არიან მტკიცე კოვალენტური ბმით. კვარცი ოპტიკური ღერძის მიმართულებით ფართოვდება თითქმის ორჯერ უფრო ნაკლებ, ვიდრე მისი მართობი მიმართულებით, ხოლო კალციტის სითბური გაფართოების კოეფიციენტი დადებითია მისი ოპტიკური ღერძის (3 ღერძის) გასწვრივ და უარყოფითია ამ ღერძის მართობად. ეს იმას ნიშნავს, რომ გახურების შედეგად კალციტი ფართოვდება ოპტიკური ღერძის მიმართულებით და იკუმშება ამ ღერძის მართობი მიმართულებით. არაგონიტსა და თაბაშირში გვხვდება სამივე მთავარი ხაზოვანი გაფართოების კოეფიციენტი.

კალციტის კრისტალისათვის სითბური გაფართოების მახასიათებელი ზედაპირი წარმოადგენს მესამე რიგის ღერძის ირგვლივ ზღუნვის

ც ხ რ ი ლ ი 9. 2.

კრისტალის დასახელება	სისტემა	$\alpha_1 \cdot 10^6$ გრად ⁻¹	$\alpha_2 \cdot 10^6$ გრად ⁻¹	$\alpha_3 \cdot 10^6$ გრად ⁻¹
ალმასი	კუბური	0,6		
β-Sn	ტეტრაგონალური		30,5	15,5
კვარცი	ჰექსაგონალური		14	8
კალციტი	რომბოედრული		-5,6	25
არაგონიტი	რომბული	9,9	15,7	33,3
თაბაშირი	მენოკლინური	1,6	42	29

ზედაპირს. ცხრილიდან ჩანს, რომ გაფართოების კოეფიციენტი დადებითია α_3 ღერძის მიმართულებით და უარყოფითია მის მართობად. ამიტომ კალციტიდან ამოჭრილი ერთეულოვანი რადიუსის სფერო გახურების შედეგად გაიჭიმება α_3 ღერძის გასწვრივ და შეიკუმშება $\alpha_1 = \alpha_2$ ღერძების მიმართულებით. როგორც 8.1 ნახაზიდან ჩანს, ასეთი გაფართოებისა და შეკუმშვის შედეგად კრისტალში ჩნდება მიმართულებები, რომლებისთვისაც სითბური გაფართოების კოეფიციენტი უდრის ნულს. ამ თვისებას უალრესად დიდი პრაქტიკული მნიშვნელობა აქვს. კრისტალური ფირფიტა, ამოჭრილი ნულოვანი გაფართოების მიმართულებით გახურების შედეგად არ იცვლის თავის სისქეს. ასეთი



ფირფიტისაგან დამზადებული კონდენსატორი არ შეიცვლის თავის ტევადობას ტემპერატურის ცვლილების შედეგად, რითაც ხშირად სარგებლობენ რადიოტექნიკაში.

ნახ. 8. 1. კალციტის კრისტალიდან ამოჭრილი ერთეულოვანი სფეროს სითბური გაფართოება. ნაჩვენებია კონუსური ფართეული, რომელიც არ განიცდის გაფართოებას.

მოენახოთ კუთხე კალციტის ნულოვანი სითბური გაფართოების მიმართულებასა და ბრუნვის α_3 ღერძს შორის. თუ l_1, l_2, l_3 ამ მიმართულებების მგეზავი კოსინუსებია, მაშინ (8.6) ფორმულიდან მივიღებთ:

$$(l_1^2 + l_2^2)\alpha_1 + l_3^2\alpha_3 = 0 \text{ ან რადგანაც, } l_1^2 + l_2^2 + l_3^2 = 1;$$

$$(1 - l_3^2)\alpha_1 + l_3^2\alpha_3 = 0 \text{ და } l_3 = \cos \theta$$

ამიტომ

$$\operatorname{tg}^2 \theta = -\frac{\alpha_3}{\alpha_1}.$$

ჩაესვათ ცხრილში მოცემული კოეფიციენტების მნიშვნელობები, მაშინ მივიღებთ, რომ $\theta = 64^{\circ}43'$

წინა თავში ჩვენ მივიღეთ კრისტალის მოცულობითი გაფართოების კოეფიციენტის (7.32) გამოსახულება, რომელიც ახლა შეიძლება დავაკავშიროთ ხაზოვანი გაფართოების კოეფიციენტებთან. ამისათვის

ავილოთ ერთეულოვანი კუბი, რომლის წიბოები ორიენტირებულია ხაზოვანი გაფართოების მთავარი კოეფიციენტების გასწვრივ. მაშინ 1° გათბობის შემდეგ წიბოების სიგრძე გახდება: $1+\alpha_1$, $1+\alpha_2$, $1+\alpha_3$, ხოლო მოცულობა $V=(1+\alpha_1)(1+\alpha_2)(1+\alpha_3)$. საბოლოოდ მოცულობითი გაფართოების კოეფიციენტებისათვის მივიღებთ: $\alpha=\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3$, ე. ი. უდრის ხაზოვანი გაფართოების კოეფიციენტების ჯამს. მაგალითად, კუბისათვის ის $3\alpha_1$ სიდიდის ტოლი იქნება.

სითბურ გაფართოებაზე დიდ გავლენას ახდენს კრისტალების სტრუქტურა, რომელიც, თავის მხრივ, განპირობებულია კრისტალურ მესერში მოქმედი ბმის ძალებით. დაკვირვება გვიჩვენებს, რომ სითბური გაფართოების დროს კრისტალის ზომების შეცვლა ყველაზე მეტად ხდება იმ მიმართულებით, სადაც ბმები სუსტია. ეს გასაგებიცაა, იმიტომ, რომ კრისტალის სხვადასხვა მიმართულებით ბმების ანიზოტროპიულობა იწვევს კრისტალური მესრის კვანძებში მყოფი ატომების სითბური რხევების ანიზოტროპიულობას. მაგალითისათვის განვიხილოთ ფენური სტრუქტურის მქონე კრისტალები, რომელთა თვალსაჩინო წარმომადგენლებს ჰექსაგონალური გრაფიტი წარმოადგენს. გრაფიტის თითოეულ ფენაში ნახშირბადის ატომები ძლიერი კოვალენტური ბმებით არიან დაკავშირებული, ხოლო ფენების მართობად (მექვქსე რიგის ღერძის გასწვრივ) მოქმედებენ სუსტი მოლეკულური ძალები. ამიტომ მთავარი ღერძის პარალელურად გაზომილ სითბური გაფართოების α_{\parallel} კოეფიციენტს ექნება მაქსიმალური მნიშვნელობა იმ დროს, როდესაც ღერძის მართობული მიმართულებით გაფართოების α_{\perp} კოეფიციენტი მინიმალურია. ფენურ კრისტალებში ატომების მაქსიმალური სითბური წანაცვლება ხდება ფენების მართობად, ხოლო მინიმალური წანაცვლება — ფენების პარალელურად.

§ 32. სითბოგამტარობა

თუ სხეულის სხვადასხვა ნაწილის ტემპერატურა ერთნაირი არ არის, მაშინ ადგილი ექნება ტემპერატურის გათანაბრების პროცესს. ეს პროცესი მიმდინარეობს სითბოს გადატანით სხეულის მეტად გამთბარი ადგილებიდან ნაკლებად გამთბარი ადგილებისაკენ. ამის შედეგად იქმნება სითბური ნაკადები, რომელთა ინტენსივობაც დამოკიდებულია ტემპერატურის სხვაობაზე და თვით ნივთიერების სითბოს გატარების უნარზე. სითბოს ნაკადის დახასიათება შესაძლებელია \bar{q} ვექტორის საშუალებით. ეს ვექტორი თავისი სიდიდით გამოხატავს სითბოს რაოდენობას, რომელიც გადაიტანება ნაკადის მართობად მოთავსებულ ერთეულოვან ფართობში დროის ერთეულებში და მიმართულია ტემპერატურის უსწრაფესი ცვლილების მიმართულებით. \bar{q} ვექტორის კომპონენტები q_1 , q_2 , q_3

წარმოადგენენ სითბოს რაოდენობებს, რომლებიც გადაიტანებიან შესაბამისად x_1 , x_2 , და x_3 კოორდინატთა ღერძების მართობად აღებულ ერთეულოვან ფართობებში დროის ერთეულში. ამგვარად, \vec{q} ვექტორი ყოველთვის მიმართულია სითბური ნაკადის გასწვრივ და გამოხატავს ამ ნაკადის გავლის სიჩქარეს მის მართობად მოთავსებულ ერთეულოვან ფართობში: იზოტროპიულ სხეულებში სითბოგამტარობის საშუალებით სითბოს გადატანა ხდება ტემპერატურის გრადიენტის მიმართულებით და გადატანილი სითბოს რაოდენობა ამ გრადიენტის პროპორციულია. ამიტომ შეიძლება დავწეროთ

$$\vec{q} = -k \text{grad } T, \quad (8.7)$$

სადაც k პროპორციულობის კოეფიციენტს სითბოგამტარობის კოეფიციენტი ეწოდება. ის ყოველთვის დადებით სიდიდეს წარმოადგენს. კომპონენტებში განტოლება (8.7) მიიღებს შემდეგ სახეს

$$q_i = -k \text{grad}_i T. \quad (8.8)$$

კრისტალებში \vec{q} ვექტორის მიმართულება შეიძლება არ თანხვდებოდეს ტემპერატურის გრადიენტის მიმართულებას და ზოგად შემთხვევაში (8.7) გამოსახულების მაგივრად გვექნება

$$q_i = -k_{ij} \text{grad}_j T. \quad (8.9)$$

აქ k_{ij} კოეფიციენტები აკავშირებენ ორ ვექტორულ სიდიდეს: \vec{q} და $\text{grad } T$; ამიტომ ისინი ქმნიან მეორე რანგის ტენზორს, რომელსაც სითბოგამტარობის კოეფიციენტების ტენზორი ეწოდება:

$$[k_{ij}] = \begin{bmatrix} k_{11} & k_{12} & k_{13} \\ k_{21} & k_{22} & k_{23} \\ k_{31} & k_{32} & k_{33} \end{bmatrix} \quad (8.10)$$

თითოეულ k_{ij} კოეფიციენტს აქვს სრულიად გარკვეული ფიზიკური მნიშვნელობა. ამის გამოსარკვევად გადავწეროთ (8.9) განტოლება გაშლილი სახით:

$$\begin{aligned} q_1 &= -k_{11} \frac{\partial T}{\partial x_1} - k_{12} \frac{\partial T}{\partial x_2} - k_{13} \frac{\partial T}{\partial x_3}; \\ q_2 &= -k_{21} \frac{\partial T}{\partial x_1} - k_{22} \frac{\partial T}{\partial x_2} - k_{23} \frac{\partial T}{\partial x_3}; \\ q_3 &= -k_{31} \frac{\partial T}{\partial x_1} - k_{32} \frac{\partial T}{\partial x_2} - k_{33} \frac{\partial T}{\partial x_3}. \end{aligned} \quad (8.11)$$

ახლა, მაგალითისათვის, წარმოვიდგინოთ, რომ ერთეულის ტოლი ტემპერატურული გრადიენტი მიმართულია ox_1 ღერძის გასწვრივ, მაშინ სითბოს ის რაოდენობა, რომელიც გაივლის ამ ღერძისადმი მარ-

თობ ერთეულოვან ფართობში დროის ერთეულში, განსაზღვრული იქნება — k_{11} კოეფიციენტით. ამავე დროს ნულისაგან განსხვავებული იქნებიან კოეფიციენტები — k_{21} და $-k_{31}$, რომლებიც წარმოადგენენ სითბურ ნაკადებს x_2 და x_3 ღერძების პარალელურად. ამიტომ ზოგადად შეიძლება ითქვას, რომ კოეფიციენტი k_{ij} განსაზღვრავს სითბოს იმ რაოდენობას, რომელიც გაივლის x_i ღერძის მიმართულებით, როდესაც ერთეულის ტოლი ტემპერატურის უარყოფითი გრადიენტი მიმართულია x_j ღერძის გასწვრივ.

ჩვენ მივიღებთ დამტკიცების გარეშე, რომ სითბოგამტარობის კოეფიციენტების ტენზორი წარმოადგენს სიმეტრიულ ტენზორს და გვაქვს ტოლობა

$$k_{ij} = k_{ji}. \quad (8.12)$$

ამიტომ $[k_{ij}]$ ტენზორი შეიძლება დავიყვანოთ მთავარ ღერძებზე, მაშინ (8.10) მიიღებს შემდეგ სახეს:

$$[k_{ij}] = \begin{pmatrix} k_{11} & 0 & 0 \\ 0 & k_{22} & 0 \\ 0 & 0 & k_{33} \end{pmatrix}$$

სადაც $k_{11} = k_1$; $k_{22} = k_2$; $k_{33} = k_3$ სითბოგამტარობის მთავარი კოეფიციენტებია. ახლა (8.11) განტოლებები მარტივდებიან:

$$q_1 = -k_1 \frac{\partial T}{\partial x_1}; \quad q_2 = -k_2 \frac{\partial T}{\partial x_2}; \quad q_3 = -k_3 \frac{\partial T}{\partial x_3}. \quad (8.13)$$

სითბოგამტარობის კოეფიციენტების მახასიათებელი ფართეულის განტოლება ზოგადი სახით იქნება

$$k_{ij} x_i x_j = 1, \quad (8.14)$$

რომელიც მთავარ ღერძებზე გადასვლის შემდეგ მიიღებს სახეს

$$k_1 x_1^2 + k_2 x_2^2 + k_3 x_3^2 = 1. \quad (8.15)$$

k_1 , k_2 და k_3 ყოველთვის დადებითი სიდიდეებია., ამიტომ (8.15) განტოლება წარმოადგენს სითბოგამტარობის კოეფიციენტების ელიფსოიდს. ამ ელიფსოიდის ფორმა და განლაგება კრისტალში უნდა აკმაყოფილებდეს ნეიმანის პრინციპს და, მაშასადამე, შეთანხმებული უნდა იყოს კრისტალის სიმეტრიასთან. ამ მხრივ სითბოგამტარობის კოეფიციენტების ტენზორისათვის მარტებულია ყოველივე ის, რაც აღნიშნული იყო ნებისმიერი მეორე რანგის სიმეტრიული ტენზორის მიმართ. ვინაიდან სითბოგამტარობისა და ელექტროგამტარობის მაკროსკოპული აღწერა სრულიად მსგავსია და ხდება მეორე რანგის სიმეტრიული ტენზორების საშუალებით, ამიტომ სითბოგამტარობის ზოგიერთი კერძო შემთხვევა

განიხილება ჩვენს მიერ შემდეგ თავში კრისტალების ელექტროგამტარობასთან დაკავშირებით.

თუ (8.7) განტოლებიდან განსაზღვრული იქნება ტემპერატურული გრადიენტი, მაშინ მივიღებთ მის შებრუნებულ განტოლებას

$$(\text{grad } T)_i = -r_{ij} q_j. \quad (8.16)$$

r_{ij} კოეფიციენტები წარმოადგენენ $(k_{ij})^{-1}$ მატრიცის ელემენტებს და, (1.12) ფორმულის შესაბამისად, განისაზღვრებიან როგორც

$$r_{ij} = (-1)^{i+j} \frac{A_{ji}}{\Delta}.$$

სადაც A_{ji} არის Δ დეტერმინანტში k_{ij} ელემენტის ალგებრული დამატება. r_{ij} კოეფიციენტები აკავშირებენ ორ ვექტორულ სიდიდეს და ქმნიან მეორე რანგის ტენზორს. ამ ტენზორს სითბური წინააღმდეგობის კოეფიციენტების ტენზორი ეწოდება. ვინაიდან სითბური გამტარობის k_{ij} კოეფიციენტების ტენზორი სიმეტრიულია ($k_{ij} = k_{ji}$), ასევე სიმეტრიული იქნება სითბური წინააღმდეგობის კოეფიციენტების $[r_{ij}]$ ტენზორიც; ამიტომ

$$r_{ij} = r_{ji}. \quad (8.17)$$

თუ $[r_{ij}]$ ტენზორი დაყვანილია მთავარ ღერძებზე, მაშინ (8.16) განტოლებები მარტივდება და მივიღებთ

$$\frac{\partial T}{\partial x_1} = -r_{11} q_1, \quad \frac{\partial T}{\partial x_2} = -r_{22} q_2, \quad \frac{\partial T}{\partial x_3} = -r_{33} q_3. \quad (8.18)$$

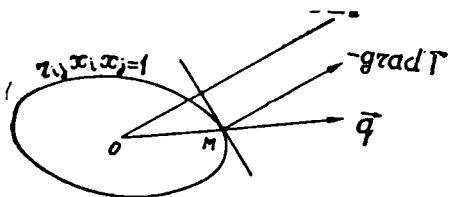
აქ $r_{11} = r_1$, $r_{22} = r_2$ და $r_{33} = r_3$ სითბური წინააღმდეგობების მთავარი კოეფიციენტებია.

სითბური წინააღმდეგობის ტენზორის მახასიათებელი ზედაპირი $r_{ij} x_i x_j = 1$ მთავარი ღერძების მიმართ მიიღებს სახეს: $r_1 x_1^2 + r_2 x_2^2 + r_3 x_3^2 = 1$. ეს იქნება სითბური წინააღმდეგობის კოეფიციენტების ტენზორული ელიფსოიდი.

(8.18) და (8.13) გამოსახულებების შედარება გვიჩვენებს, რომ:

$$r_1 = \frac{1}{k_1}; \quad r_2 = \frac{1}{k_2}; \quad r_3 = \frac{1}{k_3}. \quad (8.19)$$

სითბური წინააღმდეგობის მთავარი კოეფიციენტები სითბოგამტარობის მთავარი კოეფიციენტების უკუპროპორციულ სიდიდეებს წარმოადგენენ და შესაბამისი ელიფსოიდების ნახევარღერძების სიგრძეებიც იმავე დამოკიდებულებაში უნდა იმყოფებოდნენ. სითბოგამტარობის კოეფიციენტების ელიფსოიდის მთავარი ღერძები თანხვედრიან სითბური წინააღმდეგობის ელიფსოიდის მთავარ ღერძებს.



ნახ. 8. 2. სითბოს წერტილოვანი წყაროს ირგვლივ იზოთერმულ ზედაპირებს წარმოადგენენ სითბური წინაღობის ტენზორული ელიფსოიდები. ამ ზედაპირის რადიუს-ვექტორი — \vec{q} ვექტორია, ხოლო ნორმალი — $\text{grad } T$.

სიოდს, მაშინ \vec{q} ვექტორებს ყოველთვის ექნებათ ამ ელიფსოიდის რადიუს-ვექტორის მიმართულება. რადიუს-ვექტორის ელიფსოიდთან გადაკვეთის წერტილში ამ ელიფსოიდის მიმართ აგებულ გარე ნორმალს, (8.16) გამოსახულების თანახმად, ექნება $\text{grad } T$ მიმართულება. ეს იმას ნიშნავს, რომ ამ შემთხვევაში ელიფსოიდი $r_{ij}x_i x_j = 1$ ემსგავსება იზოთერმულ ზედაპირს (ნახ. 8.2). ამგვარად, კრისტალში სითბოს წერტილოვანი წყაროს ირგვლივ იზოთერმული ზედაპირები წარმოდგენილი იქნებიან კონცენტრული ელიფსოიდების (სახით, რომლებიც თავისი ფორმითა და განლაგებით სითბური წინაღობის კოეფიციენტების ელიფსოიდების მსგავსნი არიან. ეს სურათი ელექტროგამტარობისა და ელექტროწინაღობის ანალოგიურია, მხოლოდ იმგანსხვავებით, რომ იქ იზოთერმული ზედაპირების როლს ეკვიპოტენციალური ზედაპირები ბსრულებენ.

კრისტალური მესრის სტრუქტურა, ატომების ურთიერთქმედების ფორმა, კრისტალური მესრის დეფექტები საგრძნობ გავლენას ახდენენ კრისტალების სითბოგამტარობაზე, ცნობილია, რომ კრისტალის სითბოგამტარობა გაცილებით მეტია, ვიდრე შესაბამისი ამორფული სხეულის. მაგალითად, კრისტალური კვარცის სითბოგამტარობა დაახლოებით ათჯერ მეტია, ვიდრე მინისებრი კვარცის. კრისტალების სითბოგამტარობა ტემპერატურის დაწვეის დროს იზრდება, ხოლო ამორფული სხეულებისათვის, პირიქით, მცირდება.

როგორც ცდები გვიჩვენებენ, კრისტალების სითბოგამტარობა იზრდება იმ მიმართულებით, სადაც ბმები უფრო მტკიცეა. ამიტომ ფენოვანი სტრუქტურების, მაგალითად, გრაფიტის შემთხვევაში სითბოგამტარობა მეტია ფენების მიმართულებით და ნაკლებია ფენებისადმი მართობი მიმართულებით (მთავარი ღერძის გასწვრივ).

ლიტერატურა

1. Шубников А. В., Флинт Е. Е., Бокий Г. Б. Основы кристаллографии. Изд-во АН СССР, 1940.
2. Най Дж. Физические свойства кристаллов. Изд-во «Мир», 1967.

კრისტალების ელექტრული თვისებები

§ 33. კრისტალების ელექტროგამტარობა

ატომების ურთიერთქმედების განხილვის დროს ჩვენ დავინახეთ, რომ კრისტალურ მესერში ატომების ბმის ესა თუ ის სახე განაპირობებს კრისტალის ძირითად ფიზიკურ და ქიმიურ თვისებებს. ასე, მაგალითად, ლითონური კრისტალები, მათ მესერში თავისუფალი ელექტრონების არსებობის შედეგად, ხასიათდებიან კარგი ელექტრონული გამტარობით. ლითონების ელექტროგამტარობა ტემპერატურის ზრდასთან ერთად მცირდება. არალითონურ კრისტალებში, პირიქით, ვალენტური ელექტრონები მჭიდროდ არიან დაკავშირებულნი თავის ელექტრონულ გარსებთან ან დაკავებულნი ატომთშორისი ბმის შექმნით. ამის გამო დაბალი ტემპერატურისა და სუსტი ელექტრული ველების მოქმედების დროს ასეთი კრისტალები იზოლატორებს (დიელექტრიკებს) წარმოადგენენ. ვალენტური ტიპის კრისტალები და მათი შენადნობები დნობისა და ხსნადობის პირობებშიც ინარჩუნებენ თავის იზოლატორულ თვისებებს. რაც შეეხება იონურ კრისტალებს, ისინი კარგი იზოლატორები არიან მხოლოდ დაბალი ტემპერატურების დროს, ხოლო გადნობის ან გახსნის შემდეგ ხდებიან გამტარები. ასეთ შემთხვევაში ადგილი აქვს იონური ხსნაობის გამტარობას. სუფთა იონური გამტარობით ხასიათდებიან ელექტროლიტური ხსნარები, სადაც დენის გავლას თან ახლავს ელექტროლიზის მოვლენა.

ზოგიერთ კრისტალში ვალენტურ და გამტარობის ზონებს შორის მცირე შუალედი, ამიტომ ტემპერატურის ზრდის შედეგად ვალენტური ელექტრონების ნაწილი გამტარობის ზონაში გადადის და ელექტრონული გამტარობის წარმოშობის მიზეზი ხდება. ასეთი კრისტალები ნახევარგამტარებს წარმოადგენენ. ტემპერატურის მოქმედებით წარმოშობილ ელექტროგამტარობას ნახევარგამტარის საკუთრივი ელექტროგამტარობა ეწოდება. ნახევარგამტარის ელექტროგამტარობა ტემპერატურის ზრდის შედეგად ექსპონენციალურად იზრდება. აღსანიშნავია, რომ ნახევარგამტარული კრისტალების ელექტროგამტარობა ძლიერ არის დამოკიდებული მინარევებზე, რომლებიც შეიძლება კრისტალში არსებობდნენ, და ამ მინარევების ხასიათზე. ნახევარგამტარის ელექტროგამტარობას, რომელიც მინარევებით არის გამოწვეული, არასაკუთრივი ან მინარეული ეწოდება.

კრისტალების ელექტროგამტარობა სტრუქტურულად მგრძნობიარე თვისებების ჯგუფს მიეკუთვნება. ეს იმას ნიშნავს, რომ ატომების მცირე-

დი წანაცვლება კრისტალურ მესერში, კრისტალის დეფორმაცია, გარე ნივთიერების მინარევის უმნიშვნელო რაოდენობა საგრძნობლად ცვლის ელექტროგამტარობას. კრისტალები, რომლებიც ჩვეულებრივ პირობებში არ ატარებენ დენს, შეიძლება დაელექტროვდნენ სითბური და მექანიკური ზეგავლენით ან დასხივების შედეგად.

ცნობილია, რომ მყარი და ერთგვაროვანი ნივთიერების ნებისმიერ წერტილში დენის \vec{j} სიმკვრივე ელექტრული ველის \vec{E} ვექტორის პროპორციულია (ომის კანონი)

$$\vec{j} = \sigma \vec{E}. \quad (9.1)$$

პროპორციულობის σ კოეფიციენტი დამახასიათებელია მოცემული ნივთიერებისათვის და არ არის დამოკიდებული გამტარის ფორმაზე. ის გამოხატავს ნივთიერების უნარს გაატაროს ელექტრული დენი. ამ სიდიდეს ნივთიერების ელექტროგამტარობა ეწოდება. ელექტროგამტარობის შებრუნებულ სიდიდეს გამტარის ხვედრითი წინაღობა წარმოადგენს. ხვედრითი წინაღობისათვის (9.1) ფორმულა მიიღებს შემდეგ სახეს

$$\vec{E} = \rho \vec{j}, \quad (9.2)$$

$$\text{სადაც } \rho = \frac{1}{\sigma},$$

იზოტროპიულ სხეულებში, სადაც ყველა მიმართულება ეკვივალენტურია, დენის სიმკვრივის \vec{j} ვექტორის მიმართულება თანხვედება ველის დაძაბულობის \vec{E} ვექტორის მიმართულებას და კოეფიციენტები ρ ან $\sigma = \frac{1}{\rho}$ სკალარულ სიდიდეებს წარმოადგენენ.

ერთგვაროვან და ანიზოტროპიულ სხეულებში, რომლებსაც, კერძოდ, კრისტალები წარმოადგენენ, დენის მიმართულება შეიძლება არ თანხვედეს ველის პოტენციალის გრადიენტს. მართლაც, თუ განვიხილავთ, მაგალითად, ტეტრაგონალურ კრისტალს (ნახ. 9.1), ძნელი წარმოსადგენი იქნება, რომ ერთი და იგივე პოტენციალების სხვაობამ გამოიწვიოს ერთნაირი დენის სიმკვრივე კრისტალის მთავარი ღერძის მიმართულებით (x_2) და მის მართობულ სიბრტყეში, ვინაიდან ეს ორი მიმართულება მკვეთრად განსხვავდება ერთიმეორისაგან როგორც ატომთშორისი მანძილებით, ისე ატომების განლაგებით. ეს იმას ნიშნავს, რომ ღერძის პარალელური და მართობი მიმართულებით, როგორც გამტარობას, ისე ხვედრით წინაღობას შეიძლება ჰქონდეს განსხვავებული მნიშვნელობები. მაგალითისათვის განვსაზღვროთ კუთრი წინაღობა რომელიმე მიმართულებისათვის, რომელიც კრისტალის მთავარ ღერძთან ადგენს φ კუთხეს. ელექტრული ველის დაძაბულობას ამ მიმართულებით ექნება შემდეგი მნიშვნელობა:

$\vec{E}_\varphi = \rho_\varphi \vec{j}_\varphi$. დავშალოთ \vec{E} ვექტორი შემდგენებად კრისტალის მთავარი ღერძის პარალელური (E_{\parallel}) მიმართულებით და მის მართობად (E_{\perp}); მაშინ $E_{\parallel} = E_\varphi \cdot \cos \varphi$, $E_{\perp} = E_\varphi \sin \varphi$ და $E_\varphi = E_{\parallel} \cos \varphi + E_{\perp} \sin \varphi$. მეორე მხრივ, დენი, რომელიც E_{\parallel} გავლენით გაივლის, განისაზღვრება როგორც $E_{\parallel} = \rho_{\parallel} j_{\parallel} = \rho_{\parallel} j_\varphi \cos \varphi$; ასევე $E_{\perp} = \rho_{\perp} j_{\perp} = \rho_{\perp} j_\varphi \sin \varphi$. აქედან, ცხადია, რომ ხვედრითი წინაღობის მნიშვნელობა, ამ შემთხვევაში, განსაზღვრული იქნება გამოსახულებით

$$\rho_\varphi = \rho_{\parallel} \cos^2 \varphi + \rho_{\perp} \sin^2 \varphi,$$

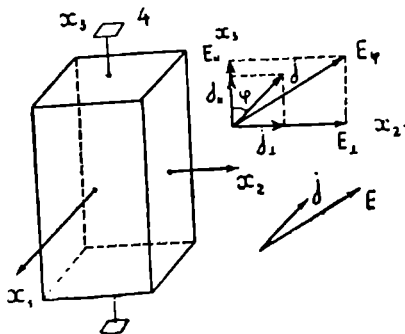
სადაც ρ_{\parallel} და ρ_{\perp} კრისტალის კუთარ წინაღობათა მნიშვნელობებია, როდესაც ელექტრული დენი გადის მთავარი ღერძის პარალელური და მისი მართობი მიმართულებით. თუ $\rho_{\parallel} \neq \rho_{\perp}$, \vec{E} და \vec{j} ვექტორები ნებისმიერი მიმართულებით ურთიერთპარალელურები აღარ იქნებიან. მაგ., β -Si ტეტრაგონალური კრისტალებისათვის 0°C ტემპერატურაზე $\rho_{\parallel} \cdot 10^9 = 13,3$ ომ. სმ, ხოლო $\rho_{\perp} \cdot 10^9 = 9,05$ ომ. სმ. ასეთ პირობებში წრფივი დამოკიდებულება \vec{E} და \vec{j} ვექტორებს შორის არ შეიძლება განისაზღვროს ერთი პროპორციულობის კოეფიციენტით, როგორც ამას ადგილი ჰქონდა იზოტროპიულ სხეულებში.

როგორც ზემოთ იყო ნაჩვენები (იხ. თავი V, § 19), კოეფიციენტები, რომელნიც ამყარებენ ზოგად თანფარდობას ორ ვექტორულ სიდიდეს შორის, ადგენენ მეორე რანგის ტენზორს; ამიტომ (9.2) ტოლობა ახლა შეიძლება ასე დაიწეროს

$$E_i = \rho_{ik} j_k, \quad (9.3)$$

ან გაშლილი სახით:

$$\begin{aligned} E_1 &= \rho_{11} j_1 + \rho_{12} j_2 + \rho_{13} j_3 \\ E_2 &= \rho_{21} j_1 + \rho_{22} j_2 + \rho_{23} j_3 \\ E_3 &= \rho_{31} j_1 + \rho_{32} j_2 + \rho_{33} j_3 \end{aligned} \quad (9.4)$$



ნახ. 9. 1. ტეტრაგონალური კრისტალის მთავარი ღერძის პარალელურად და მის მართობად ხვედრით წინაღობას ρ_{\parallel} და ρ_{\perp} სხვადასხვა მნიშვნელობები გააჩნიათ, ამიტომ \vec{E} და \vec{j} ვექტორების პარალელურობა ნებისმიერი φ მიმართულებით ირღვევა.

(9.3) და (9.4) გამოსახულებებში 9 კოეფიციენტი ρ_{ik} შეადგენენ კუთრი წინალობის ტენზორს

$$[\rho_{ik}] = \begin{bmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{13} \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \rho_{23} \\ \rho_{31} & \rho_{32} & \rho_{33} \end{bmatrix} \quad (9.5)$$

ანიზოტროპიული კრისტალებისათვის (9.1) ტოლობის ნაცვლად შეიძლება ასევე დაიწეროს ომის განზოგადებული კანონი

$$j_i = -\sigma_{ik}(\text{grad } \varphi)_k = \sigma_{ik}E_k, \quad (9.6)$$

სადაც σ_{ik} ელექტროგამტარობის ტენზორია, ხოლო φ — ელექტრული ველის პოტენციალი

$$[\sigma_{ik}] = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \quad (9.7)$$

კუთრი ელექტროწინალობის მატრიცა კუთრი ელექტროგამტარობის მატრიცის შებრუნებულია

$$(\rho_{ik}) = (\sigma_{ik})^{-1}. \quad (9.8)$$

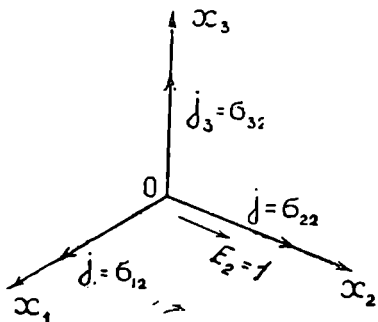
შეიძლება დამტკიცდეს, რომ

$$\sigma_{ik} = \sigma_{ki} \text{ და } \rho_{ik} = \rho_{ki}. \quad (9.9)$$

ამგვარად, კუთრი გამტარობისა და ელექტროწინალობის ტენზორები წარმოადგენენ მეორე რანგის სიმეტრიულ ტენზორებს. თითოეულ σ_{ik} კოეფიციენტს გარკვეული ფიზიკური შინაარსი გააჩნია. ასე, მაგ., თუ ერთეულოვანი დაძაბულობის ელექტრული ველი მიმართულია OX_2

ღერძის პარალელურად (ნახ. 9.2), მაშინ ამ ღერძის მიმართულებით გავლილი დენის სიმკვრივე σ_{22} კოეფიციენტით გამოიხატება, ხოლო დენის განივი ნაკადები, რომელნიც OX_1 და OX_3 ღერძების პარალელურად გაივლიან, ამ შემთხვევაში ტოლი იქნებიან σ_{12} და σ_{32} . ამგვარად, მიუხედავად იმისა, რომ ველი მიმართულია OX_2 [ღერძის გასწვრივ, გვაქვს ნულისაგან განსხვავებული j -ის კომპონენტები არა მარტო OX_2

ღერძის მიმართულებით, არამედ OX_1 და OX_3 ღერძების მიმართულებითაც.



ნახ. 9. 2. დენის სიმკვრივის კომპონენტები, როდესაც ველი მიმართულია OX_2 ღერძის პარალელურად.

კუთრი ელექტროგამტარობისა და ელექტროწინაღობის ტენზორების მიმართ [მართებულია ყოველივე 'ის, რაც აღნიშნული იყო მეორე რანგის სიმეტრიული ტენზორების შესახებ. თუ კოორდინატთა ღერძები მიმართული იქნება ტენზორის მთავარი მიმართულებების პარალელურად, ყველა კოეფიციენტი, გარდა მთავარი დიაგონალური კოეფიციენტებისა, გაუტოლდება ნულს და ტენზორი მიიღებს სახეს

$$[\sigma_{ik}] = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{33} \end{bmatrix} \quad (9.10)$$

აღნიშნოთ კოეფიციენტები σ_{11} , σ_{22} და σ_{33} , შესაბამისად, σ_1, σ_2 , და σ_3 -ით. მათ კრისტალის კუთრი გამტარობის მთავარი კოეფიციენტები ეწოდება. ახლა განტოლება (9.6) შეიძლება მარტივად დაიწეროს !

$$j_1 = \sigma_1 E_1; \quad j_2 = \sigma_2 E_2; \quad j_3 = \sigma_3 E_3. \quad (9.11)$$

(9.11) განტოლებიდან ჩანს, რომ თუ ელექტრული ველი σx_3 ღერძის პარალელურია, ე. ი. $E_1 = E_2 = 0$, მაშინ $j_1 = j_2 = 0$ და დენის სიმკვრივის \vec{j} ვექტორიც σx_3 ღერძის პარალელურია. ამგვარად, როდესაც ველის დაძაბულობა მიმართულია რომელიმე მთავარი ღერძის პარალელურად, \vec{j} ვექტორი \vec{E} ვექტორის პარალელურია. ამავე დროს, თითოეული ამ ღერძის გასწვრივ გამტარობას შეიძლება ჰქონდეს განსხვავებული მნიშვნელობა. თუ \vec{E} ველის მიმართულება არ არის მთავარი ღერძების პარალელური, როგორც დავინახეთ კუთრი ელექტროწინაღობის განხილვის შემთხვევაში, \vec{E} და \vec{j} ვექტორების პარალელურობაც დარღვეული იქნება.

მეორე რიგის მახასიათებელი ზედაპირი კუთრი გამტარობის ტენზორის კოეფიციენტებისათვის გამოისახება განტოლებით

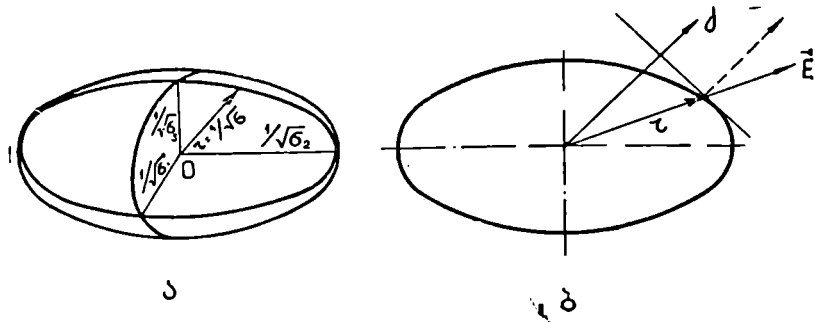
$$\sigma_{ik} x_i x_k = 1. \quad (9.12)$$

მთავარი ღერძების მიმართ (9.12) განტოლება მიიღებს მარტივ სახეს

$$\sigma_1 x_1^2 + \sigma_2 x_2^2 + \sigma_3 x_3^2 = 1. \quad (9.13)$$

(9.13) წარმოადგენს ელექტროგამტარობის ტენზორის მახასიათებელი ელიფსოიდის განტოლებას. ამ ელიფსოიდის ნახევარღერძების სიგრძე იქნება:

$$\frac{1}{\sqrt{\sigma_1}}; \quad \frac{1}{\sqrt{\sigma_2}}; \quad \frac{1}{\sqrt{\sigma_3}}.$$



ნახ. 9. 3. ა. კუთრი ელექტროგამტარობის მახასიათებელი ელიფსოიდი ბ. ელიფსოიდის ცენტრალური კვეთა. ნაჩვენებია მახასიათებელი ელიფსოიდის რადიუს-ვექტორისა და ნორმალის თვისებები.

როგორც 9.3ა ნახაზიდან ჩანს, ამ ელიფსოიდის ნებისმიერი რადიუს-ვექტორის სიგრძე განისაზღვრება სიდიდით $\frac{1}{\sqrt{\sigma}}$, სადაც σ ელექტროგამტარობის მნიშვნელობაა რადიუს-ვექტორის მიმართულებით. ამავე ნახაზზე მოყვანილია ტენზორული ელიფსოიდის ცენტრალური კვეთი (ნახ. 9.3 ბ), რომელიც გამოხატავს ამ ზედაპირის რადიუს-ვექტორისა და ნორმალის თვისებებს. თუ ველის დაძაბულობა მიმართულია რადიუს-ვექტორის პარალელურად, დენის სიმკვრივის ვექტორს ექნება ნორმალის მიმართულება. მხოლოდ მთავარი მიმართულებების გასწვრივ ისინი თანხვედრიან ერთმანეთს.

(9.5) ფორმულით განსაზღვრული კუთრი წინააღმდეგობის $[\rho_{ik}]$ ტენზორის მახასიათებელი ზედაპირი მთავარი ღერძების მიმართ გამოიხატება ელიფსოიდით

$$\rho_1 x_1^2 + \rho_2 x_2^2 + \rho_3 x_3^2 = 1, \quad (9.14)$$

სადაც ρ_1, ρ_2, ρ_3 კრისტალის მთავარი კუთრი წინააღმდეგობებია. ამის შედეგად (9.3) დამოკიდებულებანი მარტივდება და იღებენ შემდეგ სახეს:

$$E_1 = \rho_1 i_1; \quad E_2 = \rho_2 i_2; \quad E_3 = \rho_3 i_3; \quad (9.15)$$

(9.11) და (9.15) შედარება გვაძლევს:

$$\rho_1 = \frac{1}{\sigma_1}; \quad \rho_2 = \frac{1}{\sigma_2}; \quad \rho_3 = \frac{1}{\sigma_3}. \quad (9.16)$$

კუთრი გამტარობის ტენზორის მთავარი ღერძები თანხვედრა კუთრი წინააღმდეგობის ტენზორის მთავარ ღერძებს.

კუბური სიმეტრიის კრისტალები ელექტროგამტარობის მიმართ იზოტროპიულ სხეულებს წარმოადგენენ. მეორე რიგის მახასიათებელი ზედაპირი ასეთ შემთხვევაში სფეროა და კუთრი ელექტროგამტარობის განსაზღვრისათვის საკმარისია ერთი რიცხვი (სფეროს რადიუსი). ოპტიკურად ერთდერძა კრისტალებისათვის, რომლებსაც ტრიგონალური, ტეტრაგონალური და ჰექსაგონალური სისტემების კრისტალები მიეკუთვნებიან, მახასიათებელი ზედაპირი ბრუნვის ელიფსოიდია, რომლის დიდი ნახევარღერძი მიმართულია მესამე, მეოთხე ან მეექვსე რიგის სიმეტრიის ღერძების პარალელურად და ელიფსოიდის ბრუნვის ღერძს წარმოადგენს. ამგვარად, მახასიათებელი ზედაპირის სრული განსაზღვრისათვის საკმარისია ორი რიცხვი — დიდი და პატარა ნახევარღერძების სიგრძე. ჩვენს აღნიშვნებში ეს იქნება ρ_{11} და ρ_1 ან σ_{11} და σ_1 . მართლაც, თუ კოორდინატთა ღერძი OX_3 მიმართულია სიმეტრიის მთავარი ღერძის პარალელურად და ელიფსოიდის ნახევარღერძები თანხვდება კოორდინატთა ღერძებს, კუთრი გამტარობის ტენზორი მიიღებს სახეს:

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 \end{bmatrix}$$

რომბული სისტემის კრისტალები ხასიათდებიან სამი ურთიერთმართობი მეორე რიგის სიმეტრიის ღერძების არსებობით. მაგრამ მახასიათებელი ელიფსოიდის ნახევარღერძებიც ასეთივე სიმეტრიით არიან განლაგებულნი. ამიტომ რომბულ კრისტალში საკმარისია კოორდინატთა ღერძებზე ავირჩიოთ მეორე რიგის სიმეტრიის ღერძები და მახასიათებელი ელიფსოიდის ნახევარღერძები წარვმართოთ მათ პარალელურად. ასეთ შემთხვევაში ელიფსოიდის სრული განსაზღვრისათვის საკმარისია სამი რიცხვი — ელიფსოიდის სამი ნახევარღერძის სიგრძე.

მონოკლინური სისტემის კრისტალებში გვხვდება ერთი მეორე რიგის სიმეტრიის ღერძი ან სიმეტრიის სიბრტყის მართობი მიმართულება. როგორც ვიცით, ასეთ კრისტალებში OX_2 კოორდინატთა ღერძს ირჩევენ მეორე რიგის ღერძის პარალელურად. ამავე მიმართულებით უნდა წარიმართოს ტენზორული ელიფსოიდის ერთ-ერთი ნახევარღერძი, მაშინ მეორე რიგის ზედაპირის განტოლებაში არ იქნება x_2 -ის შემცველი წევრები გარდა წევრისა, სადაც შედის x_2^2 . ამიტომ ტენზორის დამოუკიდებელი კომპონენტების რიცხვი გახდება ოთხი:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & 0 & \sigma_{31} \\ 0 & \sigma_{22} & 0 \\ \sigma_{31} & 0 & \sigma_{33} \end{bmatrix}$$

რა თქმა უნდა, მთავარი ღერძების საშუალებით დამოუკიდებელი კომპონენტების რიცხვი შეიძლება დაყვანილ იქნას სამამდე. მაგრამ მონოკლინურ კრისტალში მეორე რიგის სიმეტრიის ღერძის მართობ სიბრტყეში კოორდინატთა ღერძების არჩევა ნებისმიერია, ამიტომ საჭიროა განისაზღვროს ამ სიბრტყეში მდებარე მთავარი ღერძების ორიენტაცია კოორდინატთა ღერძების მიმართ. ეს იქნება მეოთხე კომპონენტი.

ტრიკლინური სისტემის კრისტალებში სიმეტრია არავითარ შეზღუდვას არ უქმნის ტენზორული ელიფსოიდის მდებარეობას. ასე რომ, ამ შემთხვევაში ელიფსოიდის სიდიდისა და მდებარეობის განსაზღვრისათვის საჭიროა ტენზორის ყველა ექვსი კომპონენტი.

კუთრი წინაღობის მნიშვნელობები ზოგიერთი კრისტალისათვის მოცემულია 9.1 ცხრილში.

ც ხ რ ი ლ ი 9.1

ზოგიერთი კრისტალის კუთრი წინაღობა ρ (ომი, სმ)

კრისტალები	სისტემა	t°C	$\rho_{\parallel} \cdot 10^6$	$\rho_{\perp} \cdot 10^6$
β -Sn	ტეტრაგონალური	0	13,1	9,
Cd	ჰექსაგონალური	0	7,65	6,26
Bi	რომბოედრული	0	127	100
Cu	კუბური	18	1,6	
კვარცი	ჰექსაგონალური	18	$1 \cdot 10^{20}$	$3 \cdot 10^{22}$

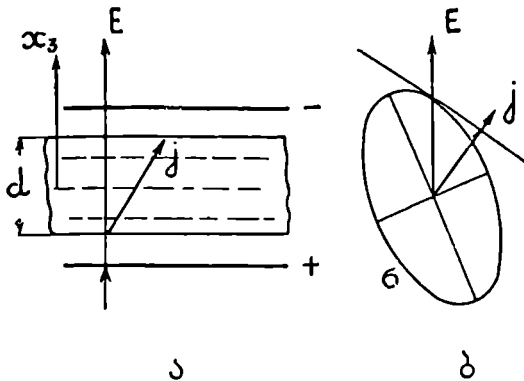
როგორც ცხრილიდან ჩანს, ლითონების კუთრი წინაღობა სხვადასხვა კრისტალოგრაფიული მიმართულებით უმნიშვნელოდ იცვლება;

მაგ., კადმიუმისათვის $\frac{\rho_{\parallel}}{\rho_{\perp}} = 1,22$, ხოლო ბისმუტისათვის $\frac{\rho_{\parallel}}{\rho_{\perp}} = 1,27$. დი-

ელექტრიკულ კრისტალებში ეს ცვლილება შეიძლება საკმაოდ დიდი იყოს მაგ., კვარცისათვის კუთრი წინაღობა მთავარი ღერძის მართობ სიბრტყეში რამდენიმე ასეულჯერ მეტია, ვიდრე მთავარი ღერძის გასწვრივ. გახურების შედეგად ლითონების კუთრი წინაღობა იცვლება, მაგრამ ეს ცვლილებაც შედარებით უფრო მცირეა, ვიდრე დიელექტრიკულ კრისტალებში. ზოგიერთი ლითონი დაბალი ტემპერატურების დროს გადადის ზეგამტარულ მდგომარეობაში და მისი ელექტროწინაღობა ნულს უტოლდება.

დენის გავლა კრისტალურ ფირფიტაში

აივლოთ პარალელური წახნაგების მქონე ბრტყელი კრისტალური ფირფიტა, რომლის სისქე d ბევრად ნაკლებია მის სიგრძესა და სიგანეზე. მაშინ კიდური ეფექტები შეიძლება მხედველობაში არ მივიღოთ და თუ



ნახ. 9. 4. ა. დენის გავლა კონდენსატორის ფირფიტებს შორის მოთავსებულ პარალელურ წახნაგებიან ბრტყელ კრისტალში. ბ. კუთრი ელექტროგამტარობის კოეფიციენტების ელიფსოიდის კვეთი. \vec{E} და \vec{j} ვექტორების განლაგება.

კრისტალის პარალელურ წახნაგებზე მოდებული იქნება პოტენციალთა სხვაობა φ , ფირფიტის შიგნით ეკვიპოტენციალური ზედაპირები ამ წახნაგების პარალელური სიბრტყეებით განლაგდებიან (ნახ. 9.4ა,) ხოლო ველის დაძაბულობა ფირფიტის წახნაგების მართობი იქნება. 9.4 ბ ნახაზზე ნაჩვენებია კუთრი ელექტროგამტარობის კოეფიციენტების ელიფსოიდის კვეთა, \vec{E} — ველის დაძაბულობისა და \vec{j} — დენის სიმკვრივის ვექტორების განლაგება. როგორც ნახაზიდან ჩანს, კრისტალის შიგნით ამ ვექტორების მიმართულება ერთმანეთს არ თანხვდება. ვინაიდან ველის დაძაბულობის მიმართულება და სიდიდე ჩვენთვის ცნობილია, განესაზღვროთ დენის ვექტორის კომპონენტები. ამისათვის ავირჩიოთ კოორდინატთა სისტემა და Ox_3 ღერძი მივმართოთ კრისტალური ფირფიტის მართობად.

მაშინ $E = E_3$, $E_1 = E_2 = 0$ და (9.6) -ის თანახმად,

$$j_1 = \sigma_{13} E_3; j_2 = \sigma_{23} E_3; j_3 = \sigma_{33} E_3. \quad (9.17)$$

(9.17)-დან ჩანს, რომ დენის ვექტორის არც ერთი კომპონენტი ნულის ტოლი არ არის. ცხადია, დენი, რომელიც კრისტალში გაივლის, მისი პარალელური წახნაგების მართობად განსაზღვრება j_3 კომპონენტით, ხოლო j_1 და j_2 კომპონენტები განსაზღვრავენ დენის ნაკადებს კრისტალური ფირფიტის სიბრტყეში. ამიტომ კრისტალში გავლილი დენისათვის შეიძლება დაიწეროს

$$j_3 = \sigma_{33} E. \quad (9.18)$$

ეს ტოლობა გვიჩვენებს, რომ σ_{33} კოეფიციენტი, რომელიც წარმოადგენს კუთრ ელექტროგამტარობას კრისტალური ფირფიტის მართობი მიმართულებით, ამავე დროს განსაზღვრავს კრისტალში გავლილ დენს და ამიტომ უშუალოდ შეიძლება გაიზომოს. ასეთივე მეთოდით ხდება კრისტალის დანარჩენი ორი σ_{11} და σ_{22} კუთრი გამტარობის მთავარი კოეფიციენტების გაზომვა სხვაგვარად ორიენტირებულ კრისტალურ ფირფიტაში. თუ მთავარი კოეფიციენტები განსაზღვრულია და დადგენილია მთავარი ღერძების ორიენტაცია (სხვადასხვა მიმართულებით გაზომვის საშუალებით), შესაძლებელია წინასწარ დადგინდეს დენის სიდიდე, რომელსაც სხვადასხვა ორიენტაციის კრისტალური ფირფიტა გაატარებს მოცემული მიმართულებით.

დენის გავლა კრისტალურ ღერძში

ამოვქრათ კრისტალიდან ცილინდრული ფორმის წვრილი და რძე-ლი ღერო (ნახ. 9.5), რომლის ბოლოებზე მოდებულია პოტენციალთა სხვაობა. ვინაიდან წვრილ მავთულებში დენი შესაძლებელია გადიოდეს მხოლოდ გამტარის გასწვრივ, ამიტომ ღეროში გაივლის j სიმკვრივის დენი, რომლის მიმართულება ამ შემთხვევაში სრულიად განსაზღვრული იქნება და შესაძლებელი ხდება (9.4) ფორმულის გამოყენება ρ_{ij} კოეფიციენტების განსაზღვრის მიზნით. ავირჩიოთ x_1 ღერძი ღეროს პარალელურად, მაშინ:

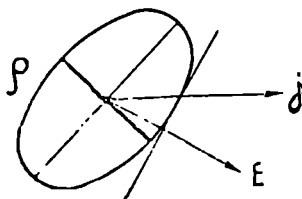
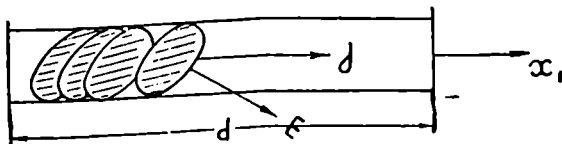
$j_2 = j_3 = 0$, ხოლო $j_1 = j$ და (9.4)-დან მივიღებთ:

$$E_1 = \rho_{11}j \quad E_2 = \rho_{21}j \quad E_3 = \rho_{31}j. \quad (9.19)$$

როგორც ვხედავთ, ველის დაძაბულობის \vec{E} ვექტორის მიმართულება არ თანხვედება კრისტალური ღეროს ღერძს და ადგენს მასთან გარკვეულ კუთხეს. ამის გამო იზოპოტენციალური ზედაპირები, რომელნიც პარალელურ სიბრტყეებს წარმოადგენენ, იმავე კუთხით იქნებიან დახრილი კრისტალის ღერძის მიმართ. ღეროს ღერძის პარალელური E_1 კომპონენტი შეიძლება განისაზღვროს, თუ ცნობილია $\varphi_1 - \varphi_2$ პოტენციალთა სხვაობა ღეროს ბოლოებზე და ღეროს d სიგრძე. ასეთ შემთხვევაში გვექნება

$$E_1 = \frac{\varphi_1 - \varphi_2}{d} = \rho_{11}j. \quad (9.20)$$

(9.20) ფორმულაში პოტენციალთა სხვაობა, სიგრძე და დენის ძალა შეიძლება უშუალოდ იქნან გაზომილი და განისაზღვროს კუთრი ელექტროწინალობის ρ_{11} კოეფიციენტი x_1 ღერძის მიმართულებით. ასეთივე წესით შეიძლება გაიზომოს კუთრი წინალობის მთავარი კოეფიციენ-



ნახ. 9. 5. დენის გავლა ცილინდრული ფორმის გრძელ და ვიწრო კრისტალურ ღეროში. კუთრი წინაღობის კოეფიციენტების ელიფსი.

\vec{E} და \vec{j} ვექტორების განლაგება ღეროს მიმართ.

ტები დანარჩენი ღერძების მიმართ, როდესაც კრისტალური ღერო იქნება შესაბამისად ამოკრილი. 9.5 ნახაზზე ნაჩვენებია კუთრი ელექტროწინაღობის კოეფიციენტების ელიფსოიდი და \vec{E} , \vec{j} ვექტორების განლაგება. ამ ელიფსოიდის რადიუს-ვექტორის სიგრძე $0x_1$ ღერძის გასწვრივ იქნება $\frac{1}{\sqrt{\rho_{11}}}$.

დენის გავლის განხილული მაგალითები ბრტყელპარალელურწახნაგებიან კრისტალურ ფირფიტაში და გრძელ ცილინდრულ ღეროში შეიცავენ კრისტალებში კუთრი ელექტროგამტარობისა და კუთრი წინაღობის კოეფიციენტების ექსპერიმენტული გაზომვის ძირითად მეთოდებს.

§ 94. ელექტრული მოვლენები დიელექტრიკულ კრისტალებში

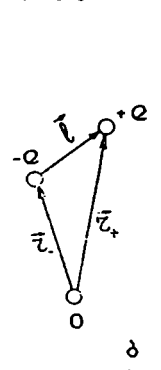
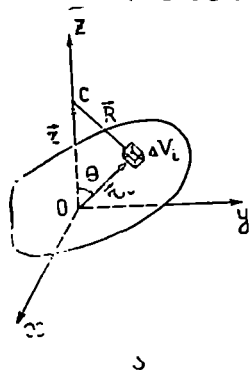
დიელექტრიკების უმრავლესობა იონური ტიპის კრისტალებს მიეკუთვნება. წმინდა ქიმიური ელემენტები, როგორც წესი, არ კრისტალდებიან იონური ტიპის მესერში. იონური კრისტალები ძირითადად არაორგანული ნაერთებია, რომლებსაც თავისი გარკვეული ქიმიური ფორმულა გააჩნიათ. ასე, მაგ., NaCl, MgO, KBr და მრავალი სხვა იონური კრისტალების ტიპური წარმომადგენლებია და ამავე დროს კარგი იზოტატორები.

იონური კრისტალის კრისტალური მესრის კვანძებში მოთავსებულია არა ცალკეული მოლეკულები MgO ან $NaCl$, არამედ იონები Na^+ , Cl^- , Mg^{++} , O^- და ამიტომ იონური კრისტალი წარმოადგენს ერთ ვეებერთელა მოლეკულას. იონებს შორის მოქმედებენ მიზიდვის კულონური ძალები.

ზოგიერთ შემთხვევაში, ხელსაყრელია, იონური კრისტალური მესერი, ისევე როგორც ნებისმიერი სხვა ტიპის მესერი, დაიყოს ელემენტარულ უჯრედებად. თითოეულ ასეთ უჯრედში თავსდება დადებითი და უარყოფითი იონების თანაბარი რიცხვი, რის გამოც უჯრედი მთლიანად ნეიტრალურია. თუ ასეთ ელემენტარულ უჯრედს პირობით წარმოვიდგენთ როგორც მოლეკულას, მაშინ შეიძლება ვილაპარაკოთ იონური კრისტალის „მოლეკულურ“ აღნაგობაზე.

დიელექტრიკებს მიეკუთვნება აგრეთვე კოვალენტური კრისტალების ნაწილი (მაგალითად, ალმასი) და მოლეკულური კრისტალები. ამ უკანასკნელ ჯგუფში, გარდა მყარ მდგომარეობაში მყოფი ინერტული გაზებისა, შედიან არაორგანული ნივთიერებები, რომელთა კრისტალური მესერი დისკრეტული მოლეკულებისაგან შედგება ($HgCl_2$, NH_3 , CH_4 , CO_2 და ა. შ.), და ორგანული შენაერთები. როგორც ვხედავთ, დიელექტრიკები კრისტალების საკმაოდ დიდ ჯგუფს შეადგენენ და ამ ჯგუფის კრისტალები, უმრავლეს შემთხვევაში, მოლეკულური წყობის არიან.

მოლეკულა მუხტების შედარებით რთულ სისტემას წარმოადგენს. ეს განსაკუთრებით ითქმის ორგანულ ნივთიერებათა მოლეკულებზე, რომლებიც შეიძლება შეიცავდნენ რამდენიმე ასეულ ატომს, და, მაშასადამე, დამუხტული ნაწილაკების — უარყოფითი ელექტრონებისა და



დადებითი ატომბირთვების დიდ რიცხვს. ჩვეულებრივ პირობებში ეს მუხტები ერთმანეთს აწონასწორებენ და მოლეკულა მთლიანად ელექტრონეიტრალურია.

წარმოვიდგინოთ, რომ ჩვენ გვაქვს მუხტების ნებისმიერი განაწილება, რომელიც $\rho(x, y, z)$ სიმკვრივით ხასიათდება. ეს განაწილება შეიძლება, კერძოდ, მოლეკულას წარმოადგენდეს. გამოვყოთ მასში მოცულობის მცირე ელემენტი Δv_i , რომელიც r_i მანძილით არის დაშორებული კოორდინატთა სათავისგან

ნახ. 9. 6 ა. მოლეკულაში განაწილებული მუხტების მიერ შექმნილი ველი C-წერტილში.
ბ. ორი ტოლი და საწინააღმდეგო ნიშნის მუხტისაგან შემდგარი სისტემა.

(ნახ. 9. 6 ა); მაშინ, როგორც ცნობილია ელექტრობის კურსიდან, მუხტების სისტემის მიერ შექმნილი პოტენციალი ველის რომელიმე C წერტილში, რომელიც მუხტებისაგან საკმაოდ დიდი r მანძილით არის დაშორებული, შეიძლება წარმოვიდგინოთ შემდეგი სახით

$$\varphi_c = \frac{A_0}{r} + \frac{A_1}{r^2} + \frac{A_2}{r^3} + \dots, \quad (9.21)$$

სადაც

$$A_0 = \sum_i \rho_i \Delta v_i;$$

$$A_1 = \sum_i r_i \cos \theta \rho_i \Delta v_i;$$

A_0 გამოსახავს სისტემის მთელ მუხტს.

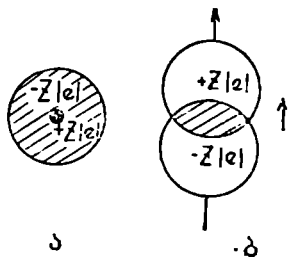
თუ მუხტების სისტემა მთლიანად ელექტრონეიტრალურია

$$A_0 = \sum_i \rho_i \Delta v_i = 0$$

და პოტენციალი ძირითადად განისაზღვრება მწკრივის შემდეგი წევრით

$$\varphi_c = \frac{1}{r^2} \sum r_i \cos \theta \rho_i \Delta v_i. \quad (9.22)$$

ამ გამოსახულებაში $r_i \cos \theta$ წარმოადგენს \vec{r}_i ვექტორის პროექციას OC -მიმართულებაზე (ჩვენს შემთხვევაში z ღერძზე). ასე, რომ A_1 წევრი მთლიანად გამოხატავს დადებითი და უარყოფითი მუხტების ფარდობით წანაცვლებას OC ღერძის გასწვრივ. ასეთ წანაცვლებას შეიძლება ადგილი ჰქონდეს მაშინაც, როდესაც სისტემა მთლიანად ნეიტრალურია. მაგალითისათვის 9.7 ნახაზზე ნაჩვენებია მუხტის განაწილების ორი შემთხვევა. პირველ შემთხვევაში (ნახ. 9.7 ა) სისტემა მთლიანად ელექტრონეიტრალურია ($A_0 = 0$) და სხვადასხვა ნიშნის მუხტების სიმძიმის ცენტრები ერთმანეთს თანხვედრიან ($A_1 = 0$). მეორე შემთხვევაში (ნახ. 9,7 ბ), თუმცა ატომი ისევ მთლიანად ნეიტრალურია ($A_0 = 0$), მაგრამ z ღერძის გასწვრივ



ნახ. 9.7 ა. მუხტების განაწილება ნეიტრალურ ატომში. ბ. მთელი მუხტი $A_0 = 0$, დიპოლური მომენტი $A_1 \neq 0$.

დადებითი და უარყოფითი მუხტების ურთიერთწანაცვლების შედეგად იქმნება ნულისაგან განსხვავებული დიპოლური მომენტი ($A_1 \neq 0$).

თუ მხედველობაში მივიღებთ, რომ $r_i \cos \Theta = \vec{r}_0 \cdot \vec{r}_i$, სადაც \vec{r}_0 ნებისმიერი მიმართულების ერთეულოვანი ვექტორია, (9.22) მიიღებს სახეს

$$\varphi = \frac{r_0}{r^2} \sum_i \vec{r}_i \rho_i \Delta v_i. \quad (9.23)$$

ცხადია, რომ $\rho_i \Delta v_i = e_i$; ამის გამო ნებისმიერი წერტილის პოტენციალისათვის, რომელიც r მანძილით არის დაშორებული მოლეკულისაგან, მივიღებთ

$$\varphi = \frac{r_0}{r^2} \sum_i \vec{r}_i e_i. \quad (9.24)$$

აქ შეჯამება ხდება ყველა სახის მუხტებისათვის და $\sum_i \vec{r}_i e_i$ გამოხატავს

მთელი სისტემის ელექტრულ მომენტს. როგორც ვხედავთ, ელექტრული მომენტი წარმოადგენს ვექტორს, რომელიც მუხტებისა და სათანადო რადიუს-ვექტორების ნამრავლთა ჯამით იზომება. აღენიშნოთ ეს ვექტორი \vec{p} -თი, მაშინ

$$\vec{p} = \sum_i \vec{r}_i e_i, \quad (9.25)$$

კერძოდ, როდესაც სისტემა ორი ტოლი და საწინააღმდეგო ნიშნის მუხტებისაგან შედგება (ნახ. 9.6 ბ).

$$\vec{p} = \sum_i \vec{r}_i e_i = e(\vec{r}_+ - \vec{r}_-) = e\vec{l},$$

სადაც \vec{l} ვექტორი გავლებულია უარყოფითი მუხტიდან დადებითისაკენ. თუ მხედველობაში მივიღებთ (9.25) გამოსახულებას, მაშინ (9.24) ფორმულა ასე დაიწერება

$$\varphi = \frac{r_0}{r^2} \vec{p} = \frac{\vec{r}_0 \cdot \vec{p}}{r^3}. \quad (9.26)$$

როგორც ჩანს, e_i მუხტების სისტემის პოტენციალი ველის ნებისმიერ წერტილში ამ სისტემის ელექტრული მომენტის პროპორციულია. მაგრამ, ცნობილია, რომ ასევე გამოიხატება \vec{p} მომენტის მქონე დიპოლის მიერ შექმნილი ველის პოტენციალიც დიპოლიდან საკმაოდ დაშორებულ წერტილში. ამიტომ შეიძლება ითქვას, რომ მუხტების ნებისმიერი

მაგრამ ნეიტრალური სისტემა, რომლის ელექტრული მომენტი უდრის \vec{p} -ს, თავისი მოქმედებით ასეთივე მომენტის მქონე დიპოლის ეკვივალენტურია.

მიღებული შედეგი საშუალებას იძლევა დიელექტრიკის განხილვისას რეალური, საკმაოდ რთული მოლეკულების ნაცვლად განვიხილოთ მათი ეკვივალენტური დიპოლების ერთობლიობა.

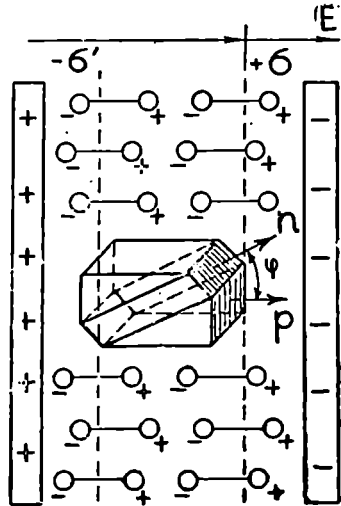
დიელექტრიკების პოლარიზაცია

თუ დიელექტრიკს მოვათავსებთ ელექტრულ ველში, მაგალითად, ორ პარალელურ დამუხტულ ფირფიტას შორის (ნახ. 9.8), ველის მოქმედების შედეგად მისი ატომებისა და მოლეკულების განლაგებაში და საერთოდ მთელი კრისტალის ელექტრულ მდგომარეობაში მნიშვნელოვანი ცვლილებები მოხდება. სახელდობრ, დიელექტრიკის ატომებსა და მოლეკულებში მყოფი სხვადასხვა ნიშნის მუხტები ველის ზეგავლენით წაინაცვლებენ ურთიერთსაწინააღმდეგო მიმართულებით. დადებითი და უარყოფითი მუხტების ცენტრები უკვე აღარ თანხვდებიან ერთმანეთს და მოლეკულა ემსგავსება ელექტრულ დიპოლს, რომელსაც \vec{p} მომენტი გააჩნია. ამ პროცესს დიელექტრიკის პოლარიზაცია ეწოდება. პოლარიზებული დიელექტრიკი შეიძლება განვიხილოთ როგორც \vec{p} მომენტების მქონე დიპოლების ერთობლიობა, ხოლო მთელი დიელექტრიკის პოლარიზაცია გავზომოთ \vec{P} ვექტორით, რომელიც მოცულობის ერთეულში მყოფი მოლეკულების დიპოლური მომენტების ვექტორულ ჯამს წარმოადგენს

$$\vec{P} = \sum_i \vec{p}_i. \quad (9.27)$$

ეს ჯამი ვრცელდება დიელექტრიკის მოცულობის ერთეულში მოთავსებულ ყველა მოლეკულაზე.

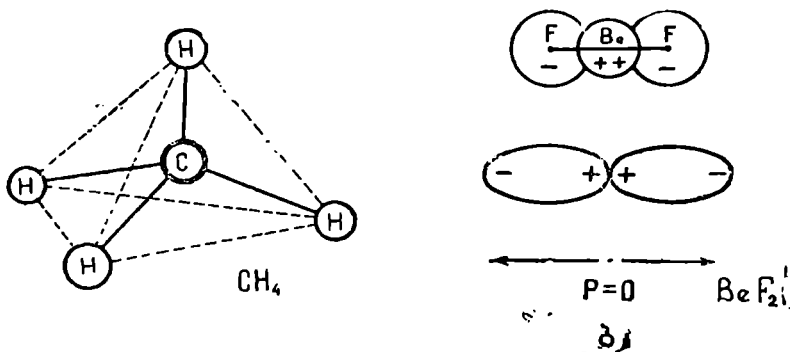
მოლეკულების აღნაგობის მიხედვით დიელექტრიკები იყოფა ორ ჯგუფად: პირველ ჯგუფს შეეკუთვნება დიელექტრიკები, რომელ-



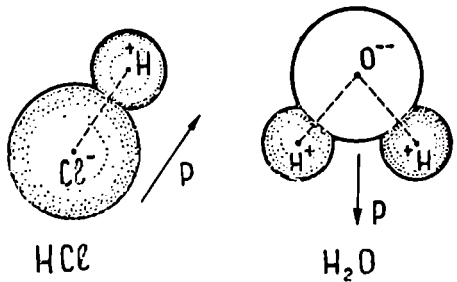
ნახ. 9. 8. პოლარიზებული მოლეკულების განლაგება იზოტროპულ დიელექტრიკში.

თა მოლეკულებში შემავალი მუხტები იმდენად სიმეტრიულად არიან განლაგებული, რომ როდესაც გარეშე ველი არ მოქმედებს, მათი საკუთარი ელექტრული დიპოლური მომენტი ნულის ტოლია. ასეთ მოლეკულებს არაპოლარული (პომეოპოლარული) მოლეკულები ეწოდება. არაპოლარულ მოლეკულებს წარმოადგენენ მაგ., მეთანი (CH_4), ეთანი (C_2H_6), CCl_4 , CO_2 , BeF_2 , BF_3 , H_2 და მრავალი სხვა. 9.9 ნახაზზე ნაჩვენებია მუხტების განლაგება მეთანისა და BeF_2 -ის მოლეკულაში. ორივე შემთხვევაში ატომების სიმეტრიული განლაგების შედეგად მოლეკულის სრული დიპოლური მომენტი ნულის ტოლია.

დიელექტრიკების მეორე ჯგუფს მიეკუთვნება ისეთი ნივთიერებები, რომელთა მოლეკულებს თავისი მუხტების არასიმეტრიული განლაგების გამო გააჩნიათ საკუთარი ნულისაგან განსხვავებული დიპოლური მომენტი. ასეთ მოლეკულებს პოლარული მოლეკულები ეწოდება. პოლარული მოლეკულები გააჩნიათ: გაზებს NO_2 , CO , NH_3 , H_2S , SO_2 ; სითხეებს — წყალს, ორგანულ მჟავებს, ქლოროფორმს, აცეტონს, ქლორმეთანს, HCl და სხვას. წყალი ტიპური პოლარული დიელექტრიკია. როგორც 9.10 ნახაზიდან ჩანს, წყლის მოლეკულას აქვს ნულისაგან განსხვავებული დიპოლური მომენტი იმის გამო, რომ ის არ არის წრფივი. კუთხე უანგბადისა და ორი წყალბადის ატომების დამაკავშირებელ მიმართულებებს შორის უდრის $104,5^\circ$. დიპოლური მომენტის არსებობის გამო წყალი საუკეთესო გამხსნელია, კერძოდ, დიდი მნიშვნელობა აქვს ელექტროლიტების გახსნას წყალში. საქმე იმაშია, რომ კრისტალური მესრის დასანგრევად საჭიროა მძლავრი ურთიერთქმედება გამხსნელის მოლეკულებსა და იონებს შორის. ეს ურთიერთქმედება ხორციელდება წყლის ძლიერი



ნახ. 9. 9. მოლეკულის სიმეტრი. გავლენა საკუთარი დიპოლური მომენტის სიდიდეზე. ა. მეთანის (CH_4) მოლეკულა წარმოადგენს ტეტრაედრს, რომლის ოთხ წვეროში წყალბადის ატომებია განლაგებული, ხოლო ცენტრში — ნახშირბადის ატომი. ასეთი სიმეტრიულობის გამო $\vec{P}=\vec{0}$. ბ. BeF_2 -ის მოლეკულა წრფივია. მისი დიპოლური მომენტი $\vec{P}=\vec{0}$



ნახ. 9. 10. პოლარული მოლეკულები.

მოლეკულური დიპოლების საშუალებით. საზოგადოდ, დიელექტრიკი, რომელიც პოლარული მოლეკულებისაგან შედგება, საგრძნობლად განსხვავდება არაპოლარული მოლეკულების შემცველი დიელექტრიკისაგან. ეს განსხვავება გამოწვეულია იმით, რომ არაპოლარულ მოლეკულებთან დიელექტრიკში გარეშე ველი თითოეულ მოლეკულაში აინდუცირებს მცირე დიპოლურ მომენტს, იმ დროს, როდესაც პოლარული ნივთიერება ყოველთვის შეიცავს საკმაოდ ძლიერ დიპოლებს. როდესაც გარეშე ველი არ მოქმედებს, ეს დიპოლები ნებისმიერი მიმართულებით უწყსრიგოდ არიან განლაგებულნი. გარეშე ელექტრული ველი ახდენს მხოლოდ მათ ორიენტირებას ველის მიმართულებით. მიუხედავად ამ განსხვავებისა, საბოლოო მაკროსკოპული ეფექტი ორივე სახის დიელექტრიკისათვის განისაზღვრება პოლარიზაციის \vec{P} ვექტორით, ე. ი. დიელექტრიკის ერთეული მოცულობის ელექტრული მომენტით. ცხადია, რომ, როგორც ინდუცირებული დიპოლური მომენტის სიდიდე, ისე ორიენტირებული დიპოლების რიცხვი დამოკიდებულია ველის დაძაბულობისაგან, რომელიც უშუალოდ მოქმედებს მოლეკულაზე დიელექტრიკის შიგნით

$$P = \chi E$$

χ მოცემული დიელექტრიკის თვისებებთან არის დაკავშირებული და მას დიელექტრიკული პოლარიზებადობა (ამთვისებლობა) ეწოდება. იზოტროპულ დიელექტრიკებში \vec{P} ვექტორის მიმართულება ყოველთვის თანხვედრა ველის \vec{E} დაძაბულობის მიმართულებას, ამიტომ ვექტორული სახით შეიძლება დაიწეროს

$$\vec{P} = \chi \vec{E} \quad (9,28)$$

როგორც 9.8 ნახაზიდან ჩანს, პოლარიზებული, ერთგვაროვანი დიელექტრიკის შიგნით თავისუფალი მუხტები არ წარმოიშობა, მაგრამ

მის ზედაპირზე იქმნება ორივე ნიშნის არაკომპენსირებული მუხტები. (გამოყოფილია პუნქტირით) გარკვეული $\pm\sigma$ ზედაპირული სიმკვრივით. ამ მუხტებს ბმული მუხტები ეწოდება. გამოვყოთ დიელექტრიკის შიგნით მცირე პარალელეპიპედი, რომლის სიგრძე არის l , ხოლო ფუძის ფართობი S . პოლარიზაციის შედეგად პარალელეპიპედის ფუძეებზე გაჩნდება e მუხტები, რომელთა სიმკვრივე იქნება $\sigma = \frac{e}{S}$. მაგრამ, ასე-

თივე მნიშვნელობა ექნება პოლარიზაციას $p = \frac{el}{S \cdot l} = \frac{e}{S}$

ამგვარად

$$p = \pm\sigma.$$

თუ პოლარიზაციას განიცდის არაერთგვაროვანი დიელექტრიკი, მაშინ მუხტი მისი მოცულობის შიგნითაც წარმოიშობა.

არსებობს სამი ძირითადი მიზეზი, რომლებიც განაპირობებს ორივე ტიპის დიელექტრიკის პოლარიზაციას გარეშე ველის გავლენით.

1. ელექტრული ველის გავლენით ხდება ატომებისა და იონების დადებითი და უარყოფითი მუხტების გადაადგილება ურთიერთსაწინააღმდეგო მიმართულებით. ატომებში ინდუცირდება დიპოლური მომენტები.

2. ველის მოქმედებით შესაძლებელია დადებითი და უარყოფითი იონების ურთიერთწინააღმდეგობა, რის შედეგად წარმოიშობა იონური პოლარიზაცია.

3. ველის გავლენით პოლარულ მოლეკულებში არსებული მუდმივი დიპოლები შებრუნდებიან და მიიღებენ ორიენტაციას ველის მიმართულებით. წარმოიშობა პოლარიზაცია, გამოწვეული დიპოლების ორიენტაციით.

ატომებისა და იონების პოლარიზაცია

თავისუფალ ატომში ან იონში (ნახ. 9.7 ა) ელექტრონული მუხტის განაწილება, გასაშუალებელი დროში, ხასიათდება სფერული სიმეტრიით და თავისი სიმძიმის ცენტრით თანხვედება დადებითად დამუხტული ბირთვის სიმძიმის ცენტრს. ასეთი ატომის ელექტრული მომენტი უდრის ნულს. გარეშე ველის მოქმედებით ელექტრონული მუხტი და ბირთვი წაინაცვლებენ ერთმანეთის მიმართ და ატომში ინდუცირდება დიპოლური მომენტი \vec{p} (ნახ. 9.7 ბ). ამ მომენტის სიდიდე დამოკიდებული იქნება იმაზე, თუ რამდენად იოლად ხდება მოცემული ატომის ელექტრონული გარსის დეფორმირება გარეშე ველის მოქმედებით, და თვით ამ ველის დაძაბულობაზე. ამიტომ შესაძლებელია დავწეროთ, რომ

$$\vec{p} = \alpha_e \vec{E}. \quad (9.29)$$

პროპორციულობის კოეფიციენტი α_e მოცემული ატომის ელექტრონული გარსის თვისებებთან არის დაკავშირებული; მას ატომის (ელექტრონული) პოლარიზებადობა ეწოდება. ატომურ პოლარიზებადობას მოცულობის განზომილება აქვს და ის 10^{-24} სმ³ ერთეულებში იზომება. 9.2 ცხრილში მოყვანილია ზოგიერთი ატომის პოლარიზებადობის მნიშვნელობები. როგორც ცხრილიდან ჩანს, წყალბადს და ტუტე ლითონებს — ლითიუმს, ნატრიუმს და კალიუმს აქვს ატომური პოლარიზებადობის დიდი მნიშვნელობა, რომელიც თანდათან იზრდება ატომური ნომრის ზრდასთან ერთად. ინერტული გაზების პოლარიზებადობა გაცილებით უფრო მცირეა, თუმცა ატომურ ნომერთან დამოკიდებულება აქაც იგივეა, α -ს მნიშვნელობა იზრდება პელიუმიდან კრიპტონისაკენ. ეს აიხსნება იმით, რომ ტუტე ლითონების ატომები, რომლებიც შედარებით სუსტად დაკავშირებულ ვალენტურ ელექტრონს შეიცავენ, გარეშე ველის მოქმედებით დეფორმირდებიან უფრო იოლად, ვიდრე ინერტული გაზების ატომების ელექტრონული გარსები. ამავე დროს ატომური ნომრის ზრდასთან ერთად სუსტდება კავშირი პერიფერიულ ელექტრონებთან, რაც, თავის მხრივ, პოლარიზებადობის ზრდას იწვევს. თუ ნივთიერების ატომები ან მოლეკულები ერთმანეთისაგან დიდი მანძილით არიან დაშორებული, როგორც მაგალითად, გაიშვიათებულ გაზებში, მაშინ ცალკეულ მოლეკულაზე იმოქმედებს \vec{E} გარეშე ველი და ყველა დანარჩენი მოლეკულის მოქმედება შეიძლება უგულებელყოფილ იქნას. ასეთ შემთხვევაში პოლარიზაციის ვექტორი \vec{P} იქნება

$$\vec{P} = N\vec{p}. \quad (9.30)$$

სადაც \vec{p} ცალკეული ატომის ან მოლეკულის დიპოლური მომენტია ინდუცირებული ველის მიერ, ხოლო N — მოლეკულების რიცხვი მოცულობის ერთეულში. (9.29) და (9.30) ფორმულების შედარება გვაძლევს

$$\vec{P} = N\alpha_e \vec{E}. \quad (9.31)$$

ხოლო (9.28)-თან შედარების შემდეგ

$$\chi = N\alpha_e. \quad (9.32)$$

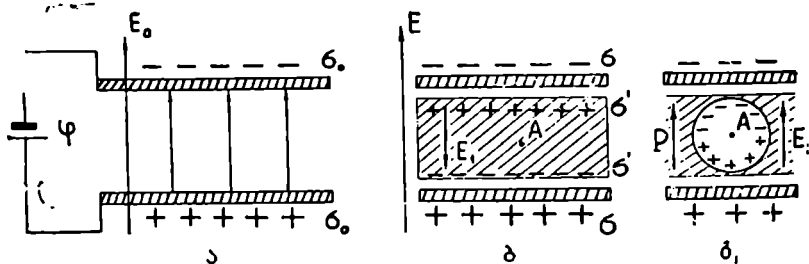
ცხრილი 9. 2.

ელემენტი	$\alpha \cdot 10^{24}$ სმ ³	ელემენტი	$\alpha \cdot 10^{24}$ სმ ³
H	0,66	He	0,21
Li	12	Ne	0,4
Na	27	Ar	1,6
K	34	Kr	2,5

(9.32) აკავშირებს დიელექტრიკულ პოლარიზებადობას ელექტრონულ პოლარიზებადობასთან იმ შემთხვევაში, როდესაც დიპოლების ურთიერთქმედება მხედველობაში არ მიიღება. რა თქმა უნდა, სითხეებში და, მით უმეტეს, კრისტალებში ასეთ მარტივ დამოკიდებულებას ადგილი არა აქვს. ეს გამოწვეულია იმით, რომ კრისტალებში მყოფ მოლეკულაზე მოქმედებს არა მარტო გარეშე ველი, არამედ ველები, რომლებსაც მის ირგვლივ მდებარე მოლეკულები ან იონები ქმნიან. ამიტომ ელექტრული ველი, რომელიც მოქმედებს დიელექტრიკში მყოფ ატომზე ან მოლეკულაზე და ფაქტიურად განაპირობებს ატომის პოლარიზაციას, განსხვავებულია გარეშე ველის დაძაბულობისგან. მიუხედავად ამისა, არაპოლარულ (პომეოპოლარულ) მოლეკულებსა და კრისტალებში პოლარიზაციის მექანიზმი ატომების პოლარიზაციის ელექტრონული მექანიზმის ანალოგიურია და პირველი მიახლოებით არაპოლარული ნივთიერების პოლარიზებადობა შეიძლება მივიღოთ ატომურ პოლარიზებადობათა ჯამის ტოლად. უფრო ზუსტი დამოკიდებულების დასადგენად საჭირო ხდება დიელექტრიკში მოლეკულაზე უშუალოდ მოქმედი ველის გამოანგარიშება.

დიელექტრიკში მოქმედი ელექტრული ველი

გამოვარკვეით როგორია ველის დაძაბულობა, რომელიც უშუალოდ მოქმედებს ატომზე ან მოლეკულაზე დიელექტრიკის შიგნით. საზოგადოდ, შიგა ველის გამოთვლა ნებისმიერი სიმეტრიის კრისტალებისათვის რთული ამოცანაა, რომელიც შედარებით მარტივდება მხოლოდ კუბური სიმეტრიის კრისტალებისათვის. ავიღოთ ბრტყელი კონდენსატორი ორი პარალელური დამუხტული ფირფიტის სახით (ნახ. 9.11 ა), და დავუშვათ, რომ მუხტის ზედაპირული სიმკვრივე ამ ფირფიტებზე უდრის $\pm\sigma$. კონდენსატორის შიგნით შექმნილია ერთგვაროვანი ველი, რომლის \vec{E}_0 დაძაბულობა ამ ფირფიტების მართობად არის მიმართული. მოვთავსოთ კონდენსატორის ფირფიტებს შორის კუბური სიმეტრიის კრისტალური



ნახ. 9. 11. კრისტალური დიელექტრიკის პოლარიზაცია ბრტყელ კონდენსატორში.

დიელექტრიკი. მაშინ ველის მოქმედების შედეგად მოხდება დიელექტრიკის პოლარიზაცია და კრისტალის თითოეული ატომი ან მოლეკულა ელემენტარულ დიპოლად გადაიქცევა. დიელექტრიკის შიგნით ელემენტარული დიპოლების მუხტები ერთმანეთს აბათილებენ და მხოლოდ კრისტალური ფირფიტის ზედაპირზე რჩება $\pm \sigma'$ ზედაპირული სიმკვრივის არაკომპენსირებული მუხტი (ნახ. 9.11 ბ). როგორც ნახაზი გვიჩვენებს, ბმული მუხტების მიერ შექმნილი ორი დამუხტული პარალელური სიბრტყე, თავის მხრივ, წარმოშობს \vec{E}_1 დაძაბულობის ველს, რომელიც მიმართულია პოლარიზაციის შემქმნელი გარეშე მუხტების ველის საწინააღმდეგო მიმართულებით და სიდიდით უდრის $4\pi\sigma' = 4\pi P$, ასე რომ

$$\vec{E}_1 = -4\pi\vec{P}. \quad (9.33)$$

განვიხილოთ კონდენსატორის ფირფიტებს შორის მოთავსებული დიელექტრიკული კრისტალის რომელიმე A წერტილში მოთავსებული ატომი. შიგა ველის დაძაბულობა \vec{E}_0 , რომელიც უშუალოდ ამ ატომზე მოქმედებს, შეიძლება წარმოვიდგინოთ შემდეგი ველების ჯამის სახით

$$\vec{E}_0 = \vec{E}_0 + \vec{E}_1 + \vec{E}_2 + \vec{E}_3, \quad (9.34)$$

სადაც \vec{E}_0 გარეშე მუხტების მიერ შექმნილი ველის დაძაბულობაა, ხოლო \vec{E}_1 , \vec{E}_2 , \vec{E}_3 — ამ მუხტების მიერ დიელექტრიკის \vec{P} პოლარიზაციის შედეგად წარმოშობილი დიპოლების ველები. აქედან \vec{E}_1 ველი უკვე განსაზღვრულია (9.33) გამოსახულებით. ეს დიელექტრიკის ზედაპირზე წარმოშობილი ბმული მუხტების მიერ შექმნილი ველია, რომელიც მიმართულია პოლარიზაციის შემქმნელი ველის საწინააღმდეგოდ; ამიტომ \vec{E}_1 ველს დეპოლარიზაციის ველი ეწოდება. დეპოლარიზაციის ველი დამოკიდებულია დიელექტრიკის ფორმაზე და პოლარიზაციის მიმართულებაზე. გამოირკვეა, რომ ერთგვაროვანი პოლარიზაცია შესაძლებელია მხოლოდ ელიფსოიდის ფორმის სხეულისათვის, რომელიც მოთავსებულია გარეშე ერთგვაროვან ველში. თუ ეს გარეშე ველი ელიფსოიდის რომელიმე მთავარი ღერძის პარალელურია, დეპოლარიზაციის ველი დიელექტრიკის პოლარიზაციის პრპორციულია

$$E_1 = -kP,$$

სადაც k დეპოლარიზაციის ფაქტორია და ბრტყელი ფირფიტის ფორმის კრისტალისათვის, როდესაც ველი მიმართულია ფირფიტის სიბრტყეების მართობულად, უდრის 4π . ელიფსოიდის სამი მთავარი ღერძისათვის დეპოლარიზაციის ფაქტორების ჯამი უდრის აგრეთვე 4π -ს ($k_1 + k_2 + k_3 = 4\pi$), ხოლო სფეროსათვის ის $\frac{4\pi}{3}$ -ის ტოლია.

ახლა განვიხილოთ რას წარმოადგენენ \vec{E}_2 და \vec{E}_3 ველები. ამისათვის დავებრუნდეთ დიელექტრიკის A წერტილში მოთავსებულ ატომს (ნახ. 9.11ბ). როგორც აღვნიშნეთ, პოლარიზაციის შედეგად როგორც A ატომი, ისე დიელექტრიკის დანარჩენი ატომები ან მოლეკულები გადაიქცევიან პატარა დიპოლებად და იმოქმედებენ A წერტილში მყოფ დიპოლზე. კრისტალში, როგორც A წერტილის მახლობლად, ისე მისგან დაშორებით, პოლარიზაციის მიმართულებით სხვადასხვა ორიენტაციით განლაგებულია დიპოლების დიდი რიცხვი. ყველა ამ დიპოლის ველების მოქმედება A წერტილში მყოფ დიპოლზე შეიძლება გამოვთვალოთ მეთოდით, რომელიც პირველად ლორენცმა შემოიღო. ამ მეთოდის მიხედვით მთელი დიელექტრიკი A წერტილის ირგვლივ უნდა გაიყოს ორ ნაწილად. პირველ ნაწილს მიეკუთვნება დიელექტრიკის ის არე, რომელიც უშუალოდ ესაზღვრება A წერტილს ან მის მახლობლად იმყოფება, ხოლო მეორე არეში მოხვდება ყველა დანარჩენი დიპოლი, რომელთა მანძილებიც A წერტილამდე იმდენად დიდია, რომ ცალკეული დიპოლის განლაგებას და სიდიდეს მნიშვნელობა არა აქვს.

ასეთი დაყოფის მიზნით ერთგვაროვნად პოლარიზებულ დიელექტრიკში A წერტილის ირგვლივ ამოვკრათ სფერო, რომლის რადიუსიც ატომთა შორის მანძილებთან შედარებით დიდია (ნახ. 9.11 გ); მაშინ სფეროს შიგნით მოთავსებული დიპოლების \vec{E}_3 ველის გამოსათვლელად საჭიროა მხედველობაში მივიღოთ თითოეული ცალკეული დიპოლის მოქმედება A წერტილში მყოფ დიპოლზე. რაც შეეხება დიელექტრიკის იმ ნაწილს, რომელიც მოთავსებულია სფეროს გარეთ, საკმაოდ დიდ მანძილზე A წერტილიდან, მისთვის დიელექტრიკის ატომური აღნაგობა შეიძლება მხედველობაში არ მივიღოთ და ჩავთვალოთ, რომ გვაქვს ნივთიერების უწყვეტი განაწილება, რომლის \vec{P} პოლარიზაციაც მუდმივია როგორც სიდიდით, ისე მიმართულებით. პოლარიზაციის გავლენით სფერული ღრუს და დიელექტრიკის გამყოფი ზედაპირის ყოველ წერტილში წარმოიშობა ბმული მუხტების ფენა, რომლის სიმკვრივეც \vec{P} ვექტორის ნორმალური შემდგენის ტოლი იქნება ($\sigma = \pm P_n$). ბმული მუხტების მიერ შექმნილი \vec{E}_2 ველის მოქმედება A წერტილში მოთავსებულ დიპოლზე ეკვივალენტური იქნება ყველა იმ დიპოლის მოქმედებისა, რომლებიც სფეროს გარეთ იმყოფებიან. \vec{E}_2 ველს ლორენცის ველი ეწოდება. მისი მიმართულება ნაჩვენებია 9.11 გ ნახაზზე. ელექტრობის კურსიდან ცნობილია, რომ ერთგვაროვნად პოლარიზებული სფეროს მიერ შექმნილი ველი ეკვივალენტურია იმ ველისა, რომელსაც ჰქმნის მის ცენტრში მოთავსებული დიპოლი, რომლის ელექტრული მომენტი სფეროს

სრული პოლარიზაციის ტოლია, ე. ი. $P_0 = \frac{4}{3} \pi r_0^3 P$, სადაც r_0 სფეროს რადიუსია. ახლა (9.26) ფორმულის საშუალებით შეიძლება გამოვთვალოთ სფეროზე მდებარე ნებისმიერი წერტილის φ_i პოტენციალი და შემდეგ გამოსახულებით $\vec{E} = -\text{grad } \varphi_i$ სფერული ღრუს ცენტრში მოქმედი ველის დაძაბულობა

$$\vec{E}_2 = \frac{4\pi}{3} \vec{P}. \quad (9.35)$$

როგორც (9.35) გვიჩვენებს, სფერული ღრუს ცენტრში მოქმედი ველი, გამოწვეული სფეროს გარეთ მდებარე დიელექტრიკის პოლარიზაციით, ამ პოლარიზაციის პირდაპირპროპორციულია.

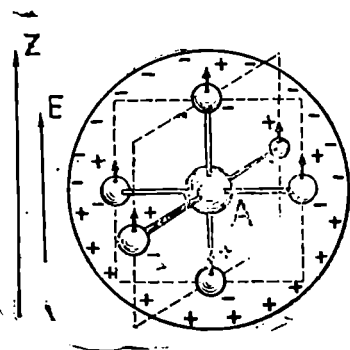
\vec{E}_3 ველის განსაზღვრის მიზნით საჭიროა განვიხილოთ A ატომზე დიელექტრიკის იმ ნაწილის მოქმედება, რომელიც უშუალოდ ესაზღვრება მას ან იმყოფება მის მახლობლად იმდენად, რომ მისი ატომური სტრუქტურის უგულვებლყოფა შეუძლებელია. ეს დიელექტრიკის ის ნაწილია, რომელიც მოთავსებულია A წერტილის ირგვლივ ამოჭრილი სფეროს შიგნით. თუ კრისტალი, რომელსაც ჩვენ ვიხილავთ, არის კუბური სიმეტრიის, მაშინ A ატომი კუბური კრისტალური მესრის ერთ-ერთ კვანძში იქნება მოთავსებული და მის ირგვლივ მდებარე მეზობელი დიპოლები კუბური მესრის სიმეტრიის მიხედვით იქნებიან განლაგებულნი (ნახ. 9.12). ამიტომ პირველ რიგში გასათვალისწინებელია A ატომზე ექვსი უახლესი დიპოლის მოქმედება, ხოლო შემდეგ — ყველა დიპოლის, რომლებიც მოთავსებულია მეორე, მესამე და ა. შ. საკოორდინაციო სფეროებზე.

გამოვიყენოთ (9.26) ფორმულა

და რადგან $\vec{E} = -\text{grad } \varphi$, მივიღებთ, რომ ერთი დიპოლის მიერ შექმნილი ველის დაძაბულობა განისაზღვრება შემდეგი სახით

$$\vec{E} = \frac{3(\vec{p}r) \vec{r} - pr^2}{r^5}. \quad (9.36)$$

ფიზიკურად უსასრულო მცირე სფეროს შიგნით, რომელიც გამოყოფილია A წერტილის ირგვლივ, იმყოფება წერტილოვანი დიპოლების გარკვეული რიცხვი



ნახ. 9. 12. \vec{E}_3 ველის განსაზღვრა. დიპოლების განლაგება კუბური სიმეტრიის კრისტალის შიგნით ამოჭრილ სფეროში.

(დიპოლს ეწოდება წერტილოვანი, თუ მისი სიგრძე მცირეა დიპოლებს შორის მანძილთან შედარებით). მაშინ წერტილოვანი დიპოლების სისტემის მიერ შექმნილი ველი გამოიხატება როგორც ჯამი

$$\vec{E}_3 = \sum_i \frac{3(\vec{p}_i \vec{r}_i) \vec{r}_i - r_i^2 \vec{p}_i}{r_i^5}. \quad (9.37)$$

სადაც \vec{p}_i — i -ური ატომის დიპოლური მომენტი.

როგორც 9.12 ნახაზი გვიჩვენებს, სფეროს შიგნით მარტივი კუბური მესრის კვანძებში მოთავსებული წერტილოვანი დიპოლები ურთიერთპარალელურად არიან განლაგებული. თუ დიპოლური მომენტების მიმართულებად ავირჩევთ z ღერძის მიმართულებას, მაშინ (9.37) ფორმულა მარტივდება

$$E_3 = \sum_i \frac{3p_i z_i^2 - r_i^2 p_i}{r_i^5}. \quad (9.38)$$

თუ გავითვალისწინებთ სფერული ღრუსა და კუბური კრისტალის სიმეტრიულობას

$$\sum_i \frac{z_i^2}{r_i^5} = \sum_i \frac{y_i^2}{r_i^5} = \sum_i \frac{x_i^2}{r_i^5};$$

ამიტომ

$$\sum_i \frac{r_i^2}{r_i^5} = 3 \sum_i \frac{z_i^2}{r_i^5}$$

და, მაშასადამე $\vec{E}_3 = 0$.

ასევე შეიძლება დამტკიცდეს, რომ \vec{E}_3 ველი ნულის ტოლია წახნაგდაცენტრებული და მოცულობითად დაცენტრებული კუბური მესრებისათვის, იზოტროპიულ სითხეებში, ამორფულ დიელექტრიკებში და გაზებში.

ამგვარად, შიგა ველის დაძაბულობის (9.34) გამოსახულებაში განსაზღვრულია ყველა კომპონენტი. საჭიროა მხოლოდ რამდენიმე შენიშვნის გაკეთება გარეშე მუხტების ველის \vec{E}_0 დაძაბულობის შესახებ. საქმე იმაშია, რომ \vec{E}_0 წარმოადგენს ველს, რომელიც შექმნილია კონდენსატორის ფირფიტებზე σ ზედაპირული სიმკვრივით განაწილებული თავისუფალი მუხტების მიერ, როდესაც ფირფიტებს შორის არის ვაკუუმი. თუ კონდენსატორის ფირფიტებს შორის მოვათავსებთ დიელექტრიკს, მაშინ \vec{E}_0 ველის გავლენით მოხდება მისი პოლარიზაცია, გაჩნდება ბმული მუხ-

ტები, რომელნიც, თავის მხრივ, გამოიწვევენ თავისუფალი მუხტების გადანაწილებას და შეცვლიან მოქმედი ველის დაძაბულობას. წვლილი, რომელსაც პოლარიზებული ნივთიერება შეიტანს ველის დაძაბულობაში, განისაზღვრება იმ დაძაბულობით, რომელსაც შექმნის $\sigma' = -P$ სიმკვრივის ბმული მუხტი ვაკუუმში. ამიტომ მოქმედი \vec{E} ველი წარმოადგენს ორი ველის ჯამს

$$\vec{E} = \vec{E}_0 - 4\pi\vec{P},$$

აქედან

$$\vec{E}_0 = \vec{E} + 4\pi\vec{P}. \quad (9.39)$$

შევიტანოთ (9.33), (9.35) და (9.39) მნიშვნელობები (9.34) გამოსახულებაში და მივიღოთ მხედველობაში, რომ ჩვენ მიერ არჩეული კუბური სიმეტრიის კრისტალისათვის $\vec{E}_3 = 0$, მაშინ მივიღებთ

$$\vec{E}_3 = \vec{E} + 4\pi\vec{P} + (-4\pi\vec{P}) + \frac{4\pi}{3}\vec{P} = 0,$$

ან საბოლოოდ

$$\vec{E}_3 = \vec{E} + \frac{4\pi}{3}\vec{P}. \quad (9.40)$$

(9.40) გვიჩვენებს, რომ ეფექტური ველი, რომელიც მოქმედებს A წერტილში მყოფ ატომზე, იზრდება დიელექტრიკის პოლარიზაციის ზრდასთან ერთად.

შემოვიღოთ ელექტრული ინდუქციის ვექტორი \vec{D} . ამისათვის აღვნიშნოთ

$$\vec{D} = \vec{E} + 4\pi\vec{P}. \quad (9.41)$$

იზოტროპიული დიელექტრიკებისათვის, რომლებსაც ჩვენ აქამდე ვიხილავდით (კუბური კრისტალები ელექტრულად იზოტროპიულნი არიან) (9.28)-ის თანახმად

$$\begin{aligned} \vec{D} &= \vec{E} + 4\pi\chi\vec{E} = (1 + 4\pi\chi)\vec{E}; \\ 1 + 4\pi\chi &= \epsilon. \end{aligned} \quad (9.42)$$

მივიღებთ

$$\vec{D} = \epsilon\vec{E}. \quad (9.43)$$

აქ ϵ დიელექტრიკულ შედწვევადობას წარმოადგენს, თუ განვსაზღვრავთ χ დიელექტრიკულ პოლარიზებადობას (9.42)-დან და ჩავსვათ (9.28)-ში, მივიღებთ

$$\vec{P} = \frac{\epsilon - 1}{4\pi}\vec{E}. \quad (9.44)$$

როგორც დაინახეთ, დიელექტრიკში ატომზე ან მოლეკულაზე მოქმედებს ეფექტური ველი, რომელიც განსაზღვრულია (9.40) გამო-სახულებით. ამიტომ (9.31) ფორმულაში, რომელიც აკავშირებს დიე-ლექტრიკის პოლარიზაციას ველის დაძაბულობასთან, უნდა შევიტან-ნოთ ეფექტური ველის მნიშვნელობა; მაშინ მივიღებთ

$$\vec{P} = N\alpha_e \left(\vec{E} + \frac{4\pi}{3} \vec{P} \right);$$

აქედან

$$\chi = \frac{N\alpha_e}{1 - \frac{4\pi}{3} N\alpha_e}. \quad (9.45)$$

(9.45) ფორმულაში $\frac{4\pi}{3} N\alpha_e$ წევრი გამოხატავს პოლარიზებადობის ზრდას, რომელიც დიელექტრიკის პოლარიზებული ატომების ურთი-ერთქმედებით არის გამოწვეული. თუ პოლარიზებადობის მიღებულ მნიშვნელობას დავაკავშირებთ დიელექტრიკულ შეღწევადობასთან (9.42)-ის საშუალებით, მაშინ

$$\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} = \frac{4\pi}{3} N\alpha_e. \quad (9.46)$$

(9.46) გამოსახულებას კლაუზიუს-მოსოტის განტოლება ეწოდება. ამ განტოლების საშუალებით შესაძლებელია ატომური α_e პოლარიზე-ბადობის გაანგარიშება, თუ გაზომილია ნივთიერების ϵ დიელექტრიკუ-ლი შეღწევადობა. გაზომვისათვის უფრო მოსახერხებელი სახის მისაცე-მად (9.46)-ის ორივე მხარე გავამრავლოთ მოლეკულურ მოცულობაზე $V = \frac{M}{\rho}$, სადაც M გრამმოლის მასაა, ხოლო ρ — სიმკვრივე, და მივიღოთ მხედველობაში, რომ $VN = L$ ავოგადროს რიცხვია; მაშინ საბოლოოდ დაიწერება

$$\frac{M}{\rho} \frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} = \frac{4\pi}{3} L\alpha_e, \quad (9.47)$$

სადაც α ნივთიერების ერთი გრამმოლის პოლარიზებადობაა.

ცნობილია, რომ დიელექტრიკულ შეღწევადობასა და ნივთიერების გარდატეხის მაჩვენებელს შორის არსებობს დამოკიდებულება $\epsilon = n^2$. თუ შევიტანთ (9.46) ფორმულაში დიელექტრიკული შეღწევადობის ამ მნიშვნელობას, მივიღებთ

$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = \frac{4\pi}{3} N\alpha_e. \quad (9.48)$$

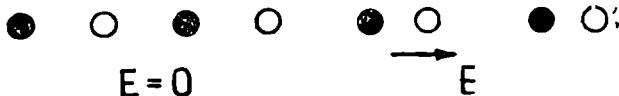
(9.48) საშუალებას იძლევა მრავალი კრისტალისათვის საკმაოდ კარგი სიზუსტით განისაზღვროს ელექტრონული პოლარიზებადობა გარდატეხის მაჩვენებლის საშუალებით. საზოგადოდ, თუ ატომი მოთავსებულია ცვლად ელექტრულ ველში, ელექტრული (ატომური) პოლარიზებადობა დამოკიდებული იქნება რხევის სიხშირეზე. ეს განსაკუთრებით კარგად ჩანს იონურ კრისტალებში.

იონური პოლარიზაცია

როგორც ადრე აღვნიშნეთ, იონური კრისტალების კრისტალური მესრის კვანძებში მოთავსებულია დადებითი და უარყოფითი იონები. თუ ასეთ კრისტალს მოვათავსებთ ელექტრულ ველში, ველის გავლენით მოხდება სხვადასხვა ნიშნის იონების ურთიერთწინააღმდეგობა (ნახ. 9.13), ისე, რომ საბოლოოდ კრისტალური მესრის ანიონური ნაწილი გადაინაცვლებს კათიონური ნაწილის მიმართ და კრისტალის საწინააღმდეგო წახნაგებზე წარმოიშობა სხვადასხვა ნიშნის ზედაპირული მუხტები. მაგრამ იონური კრისტალების α_i პოლარიზებადობაში წელილი შეაქვს არა მარტო იონებს შორის მანძილის შეცვლას, არამედ თვით იონების ელექტრონული გარსების დეფორმაციასაც (ელექტრონული პოლარიზებადობა), რომელიც იონებში ხდება ისევე, როგორც ატომებში. გამოირკვა, რომ მოცემული კრისტალისათვის ექსპერიმენტულად შესაძლებელია ელექტრონულ α_e და იონურ α_i პოლარიზებადობათა გარჩევა. ეს გარჩევა დამყარებულია იმ ფაქტზე, რომ იონური კრისტალებისათვის დიელექტრიკული შეღწევადობა გარეშე მოქმედი ველის სიხშირის ფუნქციას წარმოადგენს. დაბალი სიხშირეების შემთხვევაში დიელექტრიკული შეღწევადობა (ϵ სტატიკური) დამოკიდებულია როგორც იონების ელექტრონული გარსის დეფორმაციაზე (ელექტრონული პოლარიზაცია), ისე იონების ურთიერთგადაინაცვლებაზე (იონური პოლარიზაცია) და, მაშასადამე, ელექტრონულ და იონურ პოლარიზებადობათა ფუნქციას წარმოადგენს

$$\epsilon_{st} = f(\alpha_i, \alpha_e). \quad (9.49)$$

მაღალი სიხშირის ველში, როგორცია, მაგალითად, ხილული სინათლე, დიელექტრიკული შეღწევადობა თითქმის მთლიანად ელექ-



ნახ. 9. 13. სხვადასხვა ნიშნის იონების გადაინაცვლება ელექტრული ველის გავლენით.

ტრონული პოლარიზებადობით არის გამპირობებული. ეს აიხსნება იმით, რომ მაღალი სიხშირის რხევების დროს მძიმე იონები ვერ მიყვებიან ველის სწრაფ ცვლას და იონური პოლარიზაცია არ წარმოიშობა. ამავე დროს ელექტრონულ პოლარიზაციას ადგილი ექნება იმის გამო, რომ მსუბუქი ელექტრონები ველთან ერთად დაიწყებენ რხევას. ამგვარად, ოპტიკურ არეში

$$\epsilon_{\text{ობ}} = f(\alpha_e). \quad (9.50)$$

ოპტიკურ არეში დიელექტრიკული შეღწევადობა (9.48) ფორმულით განისაზღვრება. (9.49) და (9.50) გამოსახულებების შედარება გვიჩვენებს, რომ სტატიკურ და ოპტიკურ დიელექტრიკულ შეღწევადობებს შორის უნდა არსებობდეს გარკვეული განსხვავება. ეს განსხვავება მართლაც იქნა ექსპერიმენტულად დადგენილი, როდესაც აღმოჩნდა, რომ სტატიკური დიელექტრიკული შეღწევადობა ყოველთვის მეტია, ვიდრე ოპტიკური. 9.2 ცხრილში მოყვანილია რამდენიმე მაგალითი სტატიკურ და ოპტიკურ დიელექტრიკულ შეღწევადობათა შედარებისათვის. ვინაიდან ოპტიკური დიელექტრიკული შეღწევადობა დამოკიდებულია ელექტრონული გარსის პოლარიზებადობაზე, იონური კრისტალებისთვის სხვაობა სტატიკურ და ოპტიკურ დიელექტრიკულ შეღწევადობებს შორის განსაზღვრავს იონურ პოლარიზებადობას, ამიტომ

$$\Delta f = \epsilon_{\text{სტ}} - \epsilon_{\text{ობ}}. \quad (9.51)$$

ც ხ რ ი ლ 9.3

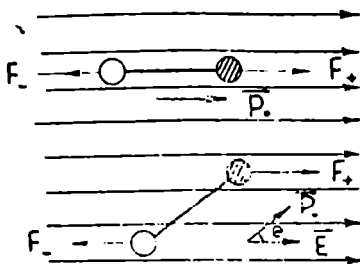
კრისტალი	ϵ სტატიკური	$\epsilon_{\text{ობ}} = n^2$	კრისტალი	ϵ სტატიკური	$\epsilon_{\text{ობ}} = n^2$
LiF	9.27	1.90	RbCl	5.0	2.18
NaCl	5.62	2.25	NaBr	5.99	2.62
KCl	4.68	2.17	KBr	4.78	2.33

გამოთვლები გვიჩვენებენ, რომ უფრო მაღალ სიხშირეებზე, ვიდრე ინფრაწითელი ტალღის სიხშირეა, იონური პოლარიზაციის ნაწილი თითქმის მთლიანად ქრება და, პირიქით, როდესაც გარეშე ველის სიხშირე უახლოვდება რადიო სიხშირეების არეს, იონური პოლარიზაცია უკვე შესამჩნევი ხდება და დიელექტრიკული შეღწევადობის მნიშვნელობა უახლოვდება სტატიკურ მნიშვნელობას.

**დიაოლუბის ორიენტაციით გამოწვეული
პოლარიზაცია**

განვიხილოთ დიელექტრიკები, რომლებიც შეიცავენ პოლარულ მოლეკულებს. როგორც ვიცით, ასეთ მოლეკულებს გააჩნიათ საკუთარი ნულისაგან განსხვავებული ელექტრული მომენტი \vec{p}_0 მაშინაც კი,

როდესაც გარეშე ველის დაძაბულობა $\vec{E}=0$. ასეთი დიელექტრიკების პოლარიზაცია, რა თქმა უნდა, შეიცავს ყველა ზემოთ აღნიშნული პოლარიზაციის ელემენტებს, მაგრამ მათი წვლილი ამ შემთხვევაში უმნიშვნელოა და ძირითადი მნიშვნელობა ენიჭება ქაოსურად განლაგებული მოლეკულური დიპოლების შემობრუნებას გარეშე ველის მოქმედებით და მათ ორიენტირებას



ნახ. 9. 14. დიპოლი ერთგვაროვან ველში. დიპოლზე მოქმედებს ძალთა წყვილი.

ველის მიმართ (ნახ. 9.14). \vec{E} დაძაბულობის გარეშე ველში ასეთი დიპოლის ენერგია განისაზღვრება როგორც ჯამი

$$u = e\varphi + e'\varphi' = e(\varphi - \varphi'),$$

სადაც φ და φ' გარეშე ველის პოტენციალებია e და e' მუხტების განლაგების წერტილებში, ხოლო $e' = -e$. თუ მუხტებს შორის მანძილს აღვნიშნავთ l -ით და დიპოლი წერტილოვანია, მიახლოებით შეიძლება დაიწეროს

$$\varphi = \varphi' + \frac{\partial \varphi}{\partial l} l = \varphi' + l \text{grad } \varphi = \varphi' - l \vec{E}$$

და

$$u = -e l \vec{E} = -p_0 \cdot \vec{E}. \quad (9.52)$$

დიპოლისათვის, რომლის მომენტი ველის მიმართულებასთან აღენს Θ კუთხეს, (ნახ. 9.14) საბოლოოდ მივიღებთ

$$u = -p_0 \cdot E \cos \Theta. \quad (9.53)$$

როგორც ჩანს, დიპოლის ენერგია მინიმალურია, როდესაც დიპოლი მიმართულია ველის პარალელურად. შემობრუნების პროცესში მოლეკულა გაივლის წონასწორობის მდგომარეობას და დაიწყებს რხევას ამ მდგომარეობის ირგვლივ. მაგრამ ეს პროცესი მიღევადი იქნება, ვინაიდან ყოველი რეალური მოლეკულა სხვა მოლეკულების გარემოცვაში იმყოფება, რომელნიც ამუხრუჭებენ მის მოძრაობას. მიუხედავად იმისა, რომ $\Theta=0$ შეესაბამება ენერგიის მინიმუმს, ყველა დიპოლის ორიენტირება გარეშე \vec{E} ველის პარალელურად არ ხდება, იმიტომ, რომ არსებობს პროცესები, რომლებიც ეწინააღმდეგებიან მოლეკულების მოწესრიგებულ განლაგებას. ასეთი პროცესებია მოლეკულების სითბუ-

რი მოძრაობა და მათი ურთიერთშეხლა. ამ პროცესების შედეგად დიპოლების ორიენტაციით გამოწვეული პოლარიზაცია ტემპერატურის ზრდის შედეგად კლებულობს, ხოლო დაბალი ტემპერატურებისა და ძლიერი გარეშე ველის მოქმედების დროს უახლოვდება თავის მაქსიმალურ მნიშვნელობას. ეს ის მდგომარეობაა, როდესაც ყველა დიპოლი ორიენტირებულია ველის გასწვრივ და პოლარიზაცია ხდება ნაჭერი. ნაჭერი პოლარიზაციის მნიშვნელობა განისაზღვრება ტოლობით

$$P_{\text{ნაჭ}} = N p_0, \quad (9.54)$$

ყველა დანარჩენ შემთხვევაში დიელექტრიკის ორიენტაციული პოლარიზაცია გამოსახული იქნება შემდეგი სახით

$$P = N p_0 \overline{\cos \Theta}, \quad (9.55)$$

სადაც N მოლეკულების რიცხვია მოცულობის ერთეულში, ხოლო $\overline{\cos \Theta}$ არის სითბური წონასწორობის დროს ყველა მომენტისათვის გასაშუალებული $\cos \Theta$ -ის მნიშვნელობა. თუ თერმოდინამიკური წონასწორობის პირობებში მოლეკულაზე არ მოქმედებს გარეშე ველი, დიპოლები ქაოსურად და საშუალოდ თანაბრად იქნებიან განაწილებული სივრცეში.

მაგრამ გარეშე მაორიენტირებელი \vec{E} ველის მოქმედების შედეგად ეს განაწილება დაირღვევა. ბოლცმანის თეორემის მიხედვით იმისი ალბათობა, რომ დიპოლების მომენტები განლაგდებიან ველის მიმართ $d\Theta$ კუთხურ შუალედში, პროპორციული იქნება $e^{u/kT}$ წევრის, სადაც k ბოლცმანის მუდმივაა, ხოლო T — აბსოლუტური ტემპერატურა. თუ დიპოლის ენერჯის მნიშვნელობას ავიღებთ (9.53) ფორმულიდან, მაშინ $e^{-P_0 E \cos \Theta / kT}$. ახლა შესაძლებელია განისაზღვროს საშუალო კოსინუსი

$$\overline{\cos \Theta} = \frac{\int_0^\pi \cos \Theta e^{-P_0 E \cos \Theta / kT} \sin \Theta d\Theta}{\int_0^\pi e^{-P_0 E \cos \Theta / kT} \sin \Theta d\Theta}. \quad (9.56)$$

გამოთვლის შედეგად ირკვევა, რომ საშუალო კოსინუსი.

$$\overline{\cos \Theta} = \text{ctha} - \frac{1}{a} = L(a), \quad (9.57)$$

სადაც $L(a)$ ლანჯევენის ფუნქციას წარმოადგენს, ხოლო $a = \frac{P_0 E}{kT}$. a -ს

მცირე მნიშვნელობისათვის $L(a)$ ფუნქცია მცირეა, ხოლო a -ს დიდი მნიშვნელობებისათვის — მიისწრაფის ერთისაკენ. ეს ორი ზღვრული მნიშვნელობა შეესაბამება ნივთიერების სუსტსა და ნაჭერობის პოლარიზაცი-

ებს. როდესაც $a \ll 1$, $L(a)$ ფუნქცია საკმაო სიზუსტით უახლოვდება $a/3$ სიდიდეს, ამიტომ მისი ჩასმა (9.55) ფორმულაში მოგვცემს

$$P = N p_0 \overline{\cos \Theta} = N p_0 \cdot \frac{a}{3} = \frac{N p_0^2}{3kT} E; \quad (9.58)$$

აქედან, ერთი მოლეკულისათვის აღებული ორიენტაციული პოლარიზებადობისათვის მივიღებთ

$$\alpha_0 = \frac{p_0^2}{3kT} \quad (9.59)$$

ახლა მოლეკულის სრული პოლარიზებადობა შეიძლება წარმოვიდგინოთ, როგორც ჯამი

$$\alpha_c + \alpha_i + \frac{p_0^2}{3kT}. \quad (9.60)$$

გაიშვიათებულ გაზებში დიელექტრიკის პოლარიზებადობის მისაღებად საკმარისია ეს ჯამი გავამრავლოთ მოცულობის ერთეულში მყოფი მოლეკულების N რიცხვზე.

(9.58) ფორმულა მიღებულია იმ დაშვებით, რომ მოლეკულური დიპოლები თავისუფლად ბრუნვენ გარეშე ველის ზეგავლენით. ასეთი დაშვება მართლაც შესაძლებელია გაზებისა და სითხეებისათვის. კრისტალებში მოლეკულების ბრუნვა გაძნელებულია მათი ძლიერი ურთიერთქმედების შედეგად. მოლეკულურ კრისტალებში დიპოლების ბრუნვის უნარიანობა დამოკიდებულია მოლეკულის სიმეტრიულობაზე და დანარჩენ მოლეკულებთან ურთიერთქმედების ძალებზე. ასე, მაგალითად, თუ მოლეკულა სფერული ფორმისაა და მცირე დიპოლური მომენტი გააჩნია, ის უფრო იოლად შემობრუნდება გარეშე ველის ზეგავლენით, ვიდრე ნაკლებად სიმეტრიული. სითხეებში, სადაც პოლარული მოლეკულები გვაქვს, ადგილი აქვს სამივე ტიპის პოლარიზებადობას; ამიტომ ასეთი სითხეები მაღალი დიელექტრიკული შეღწევადობით ხასიათდებიან. მაგალითად, წყლისათვის $\epsilon = 81$ და იზრდება ტემპერატურის დაწევის დროს. შეიმჩნევა, რომ ასეთი სითხეების გამყარების პროცესში დიელექტრიკული შეღწევადობა, უმრავლეს შემთხვევაში ერთბაშად ეცემა და იღებს ისეთ მნიშვნელობებს, რომელნიც მხოლოდ ელექტრონული და იონური პოლარიზებადობით არიან განპირობებულნი. ეს აიხსნება იმით, რომ გამყარების დროს ხდება მოლეკულების „გაყინვა“, ისინი კარგავენ შემობრუნების უნარს და აღარ იღებენ მონაწილეობას ორიენტაციული პოლარიზაციის პროცესში. ამის დამადასტურებელია ისიც, რომ ასეთ მყარ ნივთიერებათა დიელექტრიკული შეღწევადობა უკვე აღარ არის დამოკიდებული ტემპერატურის ცვლილებაზე.

ზოგიერთი სითხის მოლეკულები გამყარების პროცესში არ კარგავენ ბრუნვის უნარს და ინარჩუნებენ მას გაცილებით დაბალ ტემპერა-

ტურამდე. მაგალითად, თხევადი HCl იყინება 165°K დროს, მაგრამ მისი დიელექტრიკული შეღწევადობა განაგრძობს ზრდას ტემპერატურის შემცირების მიუხედავად. მხოლოდ 100°K მიღწევისას მოლეკულები კარგავენ ბრუნვის უნარს და ორიენტაციული პოლარიზაცია თითქმის ქრება.

გარდა ტემპერატურისა, ორიენტაციული პოლარიზაციის მნიშვნელობაზე დიდ გავლენას ახდენს გარეშე ველის სიხშირე. ცნობილია, რომ წყლის სტატიკური დიელექტრიკული შეღწევადობა ოთახის ტემპერატურაზე დაახლოებით უდრის 81 და ინარჩუნებს ასეთ მნიშვნელობას მანამ, სანამ გარეშე ველის სიხშირე არ გასცილდება 10^{10} ჰერცს. სიხშირის შემდგომი ზრდის შედეგად შეღწევადობის მნიშვნელობა მცირდება 1,77-მდე, რაც დამახასიათებელია არაპოლარული სითხეებისათვის. ეს იმით აიხსნება, რომ მაღალი სიხშირეების დროს დიპოლები ვერ მიჰყვებიან ველის რხევებს და პოლარიზაცია ისაზღვრება მხოლოდ ელექტრონული პოლარიზებადობით.

ანიზოტროპიული დიელექტრიკები

მოლეკულები მუხტების საკმაოდ რთულ სისტემებს წარმოადგენენ და ატომებთან შედარებით ნაკლებად სიმეტრიული არიან. ამის გამო ისინი შეიძლება ანიზოტროპიულები იყვნენ მთელი რიგი თვისების მიმართ. ერთ-ერთ ასეთ თვისებას პოლარიზაცია წარმოადგენს. 9.9 ბ ნახაზზე წარმოდგენილია BeF_2 მოლეკულის სქემა. ეს შედარებით მარტივი, წრფივი და სიმეტრიული მოლეკულაა, მაგრამ, მიუხედავად ამისა, ის გაცილებით იოლად პოლარიზდება თავისი ღერძის გასწვრივ, ვიდრე მისი მართობი მიმართულებით; ამიტომ ერთი და იგივე დაძაბულობის გარეშე ველი შექმნის ამ მოლეკულაში განსხვავებულ დიპოლურ მომენტებს იმის მიხედვით, თუ როგორ იმოქმედებს ეს ველი მოლეკულის ღერძის პარალელურად, თუ მის მართობად.

მიუხედავად მოლეკულების ასეთი ანიზოტროპიულობისა, მათი ქაოსური განლაგების შედეგად გაზური, თხევადი და ამორფული დიელექტრიკები ელექტრულად იზოტროპიულები არიან. ასეთივე იზოტროპიულობას იჩენენ კუბური სიმეტრიის დიელექტრიკული კრისტალებიც.

იზოტროპიული და ერთგვაროვანი დიელექტრიკებისათვის ადგილი ჰქონდა (9.28), (9.41), (9.42) და (9.43) დამოკიდებულებებს. ამ შემთხვევაში χ და ϵ მუდმივი სიდიდეებია და \vec{E} , \vec{D} , \vec{P} ვექტორები ურთიერთ პარალელურები არიან.

კუბური სიმეტრიის კრისტალებს გარდა ყველა დანარჩენი კრისტალი ანიზოტროპიულ დიელექტრიკებს წარმოადგენენ. ასეთ კრისტალებში მოლეკულებს აქვთ გარკვეული ორიენტაცია სივრცეში და ამიტომ

მათი განლაგება ნებისმიერი მიმართულებით დამოკიდებულია მხოლოდ კრისტალის სიმეტრიაზე. ეს იმას ნიშნავს, რომ სხვადასხვა მიმართულებით, როგორც პოლარიზებადობას, ისე დიელექტრიკულ შეღწევადობას შეიძლება ჰქონდეს განსხვავებული მნიშვნელობები, რომელნიც დამოკიდებული იქნებიან \vec{E} ველის მიმართულებაზე. ამიტომ, (9.28) დამოკიდებულება უნდა შეიცვალოს უფრო ზოგადი ხასიათის დამოკიდებულებით

$$p_i = \chi_{ij} E_j. \quad (9.61)$$

აქ \vec{P} და \vec{E} ვექტორებია, ამიტომ χ_{ij} კოეფიციენტები ადგენენ მეორე რანგის ტენზორს, რომელსაც დიელექტრიკული პოლარიზებადობის $[\chi_{ij}]$ ტენზორი ეწოდება. ასეთივე ხასიათის დამოკიდებულებას ექნება ადგილი დიელექტრიკული შეღწევადობისათვის

$$D_i = \epsilon_{ij} E_j. \quad (9.62)$$

შეიძლება დამტკიცდეს, რომ როგორც $[\chi_{ij}]$ დიელექტრიკული პოლარიზებადობის, ისე $[\epsilon_{ij}]$ დიელექტრიკული შეღწევადობის ტენზორები სიმეტრიული ტენზორებია და ადგილი ექნება ტოლობას:

$$\chi_{ij} = \chi_{ji}; \quad \epsilon_{ij} = \epsilon_{ji}.$$

მეორე რანგის სიმეტრიული ტენზორები $[\chi_{ij}]$ და $[\epsilon_{ij}]$ შესაძლებელია დავიყვანოთ მთავარ ღერძებზე, მაშინ ნულს გაუტოლდება ყველა კომპონენტი, გარდა მთავარ დიაგონალზე მდგომი χ_{ii} და ϵ_{ii} სახის კომპონენტებისა. $\chi_{11} = \chi_1$, $\chi_{22} = \chi_2$, $\chi_{33} = \chi_3$ კოეფიციენტებს პოლარიზებადობის მთავარი კოეფიციენტები ეწოდება, ხოლო $\epsilon_{11} = \epsilon_1$, $\epsilon_{22} = \epsilon_2$, $\epsilon_{33} = \epsilon_3$ კრისტალის მთავარი დიელექტრიკული შეღწევადობებია. კავშირი ამ ორ სიდიდეს შორის, როგორც ზემოთ იყო ნაჩვენები, მყარდება (9.42) ფორმულის საშუალებით, რომელიც ანიზოტროპიული დიელექტრიკებისათვის იღებს შემდეგ სახეს

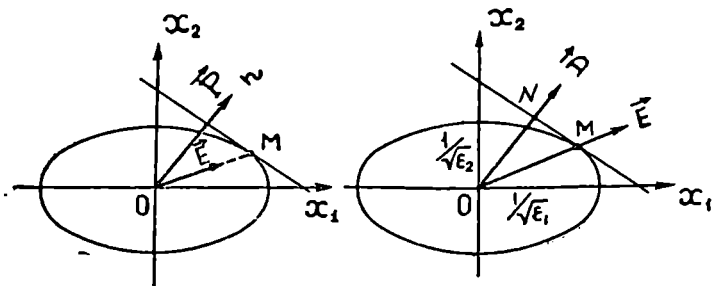
$$\epsilon_{ij} = 1 + 4\pi\chi_{ij}, \quad (9.63)$$

ხოლო მთავარი მნიშვნელობებისათვის (9.63) განტოლებიდან მივიღებთ:

$$\epsilon_1 = 1 + 4\pi\chi_1; \quad \epsilon_2 = 1 + 4\pi\chi_2; \quad \epsilon_3 = 1 + 4\pi\chi_3.$$

ამგვარად, კრისტალის დიელექტრიკული თვისებები ხასიათდებიან სამი მთავარი დიელექტრიკული შეღწევადობით ან პოლარიზებადობის სამი მთავარი კოეფიციენტით. ასეთ შემთხვევაში (9.61) და (9.62) გამოსახულებები მარტივდებიან:

$$\begin{aligned} p_1 &= \chi_1 E_1; & p_2 &= \chi_2 E_2; & p_3 &= \chi_3 E_3; \\ D_1 &= \epsilon_1 E_1; & D_2 &= \epsilon_2 E_2; & D_3 &= \epsilon_3 E_3. \end{aligned} \quad (9.64)$$



ნახ. 9. 15. $[\chi_{ij}]$ და $[\epsilon_{ij}]$ ტენზორების მახასიათებელი ელიფსოიდების კვეთები და \vec{E} , \vec{P} და \vec{D} ვექტორების განლაგება კრისტალში.

დიელექტრიკული შეღწევადობის ტენზორის მახასიათებელი ზედაპირის განტოლებას ექნება შემდეგი სახე

$$\epsilon_{ij}x_ix_j = 1, \quad (9.65)$$

ხოლო პოლარიზებადობის ტენზორული ზედაპირისათვის გვექნება

$$\chi_{ij}x_ix_j = 1. \quad (9.66)$$

მთავარი ღერძების მიმართ (9.65) განტოლება გამარტივდება

$$\epsilon_1x_1^2 + \epsilon_2x_2^2 + \epsilon_3x_3^2 = 1. \quad (9.67)$$

(9.67) წარმოადგენს ელიფსოიდის განტოლებას, რომელიც შეიძლება დაიწეროს შემდეგი სახით

$$\frac{x_1^2}{\left(\frac{1}{\sqrt{\epsilon_1}}\right)^2} + \frac{x_2^2}{\left(\frac{1}{\sqrt{\epsilon_2}}\right)^2} + \frac{x_3^2}{\left(\frac{1}{\sqrt{\epsilon_3}}\right)^2} = 1.$$

9.15 ნახაზზე მოყვანილია $[\chi_{ij}]$ და $[\epsilon_{ij}]$ ტენზორების მახასიათებელი ელიფსოიდების კვეთები. თუ ელექტრული ველის დაძაბულობის \vec{E} ვექტორი მიმართულია ელიფსოიდის ნებისმიერი M წერტილის რადიუს-ვექტორის პარალელურად, მაშინ \vec{P} და \vec{D} ვექტორებს ამ წერტილზე გამავალი მხები სიბრტყის მიმართ ნორმალების მიმართულება ექნებათ. \vec{E} , \vec{P} და \vec{D} ვექტორები თანხვედრიან ერთმანეთს მხოლოდ ტენზორის მთავარი მიმართულებების გასწვრივ, ე. ი. ელიფსოიდის ნახევარღერძების მიმართულებით. ტენზორული ზედაპირის თვისებებიდან შესაძლებელია \vec{D} ვექტორის მიმართულებასთან ერთად დავადგინოთ მისი სიდიდეც. მართლაც, თუ 9.15 ბ ნახაზზე ნორმალის მიმართულებით გადავზომავთ ON მანძილს ელიფსოიდის ცენტრიდან M წერტილში გამავალი მხები

სიბრტყის გადაკვეთამდე, მაშინ, (1.51) თვისების თანახმად, შეიძლება დაიწეროს

$$|D| = \frac{1}{CN}.$$

ამით განსაზღვრული იქნება ელექტრული ინდუქციის ვექტორის როგორც სიდიდე, ისე მიმართულება.

ახლა შესაძლებელია ვისარგებლოთ (1.60) შედეგით და ავაგოთ ზედაპირი, რომელსაც შემოწერს ელექტრული ინდუქციის \vec{D} ვექტორის ბოლო \vec{E} ვექტორის ნებისმიერი ცვლილების დროს. სიმარტივისათვის დავუშვათ, რომ გვაქვს ერთეულოვანი დაძაბულობის \vec{E} ველი, მაშინ, როდესაც $[\epsilon_{ij}]$ ტენზორის მახასიათებელი ზედაპირის რადიუს-ვექტორი შემოწერს ტენზორულ ელიფსოიდს, ნახევარღერძებით $\frac{1}{\sqrt{\epsilon_1}}, \frac{1}{\sqrt{\epsilon_2}}, \frac{1}{\sqrt{\epsilon_3}}$,

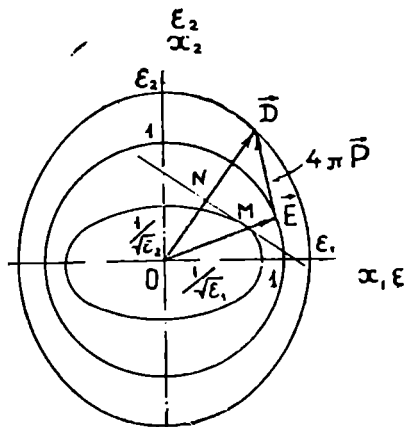
\vec{E} ვექტორის ბოლო შემოწერს ერთეულოვანი რადიუსის სფეროს. რაც შეეხება \vec{D} ვექტორს, (9.64) ფორმულების შესაბამისად, ვინაიდან $E_1^2 + E_2^2 + E_3^2 = 1$, მივიღებთ, რომ

$$\frac{D_1^2}{\epsilon_1^2} + \frac{D_2^2}{\epsilon_2^2} + \frac{D_3^2}{\epsilon_3^2} = 1$$

და, მაშასადამე, \vec{D} ვექტორის ბოლო მოთავსებულია ელიფსოიდზე

$$\frac{x_1^2}{\epsilon_1^2} + \frac{x_2^2}{\epsilon_2^2} + \frac{x_3^2}{\epsilon_3^2} = 1, \quad (9.68)$$

რომლის ნახევარღერძების სიგრძე არის $\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3$. (9.68) წარმოადგენს დიელექტრიკულ შეღწევადობათა ელიფსოიდს. 9.16 ნახაზზე მოცემულია დიელექტრიკულ შეღწევადობათა ელიფსოიდის, ველის დაძაბულობის ერთეულოვანი სფეროსა და შეღწევადობათა ტენზორის მახასიათებელი ელიფსოიდის ნახაზის სიბრტყით კვეთა. როგორც ნახაზი გვიჩვენებს, თუ მოცემულია ელექტრული ველის დაძაბულობის ვექტორის მიმართულება კრისტალში და მივი-



ნახ. 9. 16. დიელექტრიკულ შეღწევადობათა ელიფსოიდის, ერთეულოვანი სფეროს და დიელექტრიკულ შეღწევადობათა ტენზორის მახასიათებელი ზედაპირის მთავარი კვეთები.

ლებთ მხედველობაში $\vec{D} = \vec{E} + 4\pi\vec{P}$ ტოლობას, შესაძლებელია განისაზღვროს ინდექციის \vec{D} ვექტორისა და პოლარიზაციის $4\pi\vec{P}$ ვექტორის განლაგება \vec{E} ველის მოცემული მიმართულებისათვის.

ელექტროსტატიკური ველი ანიზოტროპულ დიელექტრიკში

ცნობილია, რომ $\vec{E} = -\text{grad } \varphi$, $\vec{D} = \epsilon\vec{E}$, და $\text{div } \vec{D} = 4\pi\rho$ განტოლებები განსაზღვრავენ ელექტროსტატიკურ ველს ნებისმიერი ერთგვაროვანი და იზოტროპიული ნივთიერებისათვის. ეს იმას ნიშნავს, რომ თუ მოცემულია მუხტების განაწილების ρ სიმკვრივე და ϵ დიელექტრიკული მუდმივა, შესაძლებელია განისაზღვროს, φ , \vec{E} და \vec{D} მნიშვნელობები სივრცის ყველა წერტილისათვის. დიელექტრიკული კრისტალები ანიზოტროპულ გარემოს წარმოადგენენ, ამიტომ \vec{D} და \vec{E} ვექტორების მნიშვნელობები შეიძლება იცვლებოდეს წერტილიდან წერტილში. ასეთ შემთხვევაში, (9.62) ფორმულის თანახმად, $D_i = \epsilon_{ij}E_j$ და თუ მივიღებთ, რომ ϵ_{ij} არ არის დამოკიდებული x_i კოორდინატებზე, მაშინ შეიძლება დავწეროთ

$$\frac{\partial D_i}{\partial x_i} = \epsilon_{ij} \frac{\partial E_j}{\partial x_i}$$

მაგრამ $\frac{\partial D_i}{\partial x_i} = 4\pi\rho$ (რადგან $\text{div } D = 4\pi\rho$), ამიტომ

$$\epsilon_{ij} \frac{\partial E_j}{\partial x_i} = 4\pi\rho.$$

ჩავსვათ ამ გამოსახულებაში E_j -ის მნიშვნელობა $E = -\text{grad } \varphi$ განტოლებიდან, რომელიც ინდექსებში მიიღებს სახეს $E_j = -\frac{\partial \varphi}{\partial x_j}$, მაშინ საბოლოოდ მივიღებთ

$$\epsilon_{ij} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i \partial x_j} = -4\pi\rho. \quad (9.69)$$

თუ დიელექტრიკული შეღწევადობის ϵ_{ij} ტენზორი დაყვანილია მთავარღერძებზე, (9.69) განტოლება გამარტივდება და მიიღებს შემდეგ სახეს

$$\epsilon_1 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_1^2} + \epsilon_2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_2^2} + \epsilon_3 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_3^2} = -4\pi\rho. \quad (9.70)$$

აქ $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$ კრისტალის მთავარი დიელექტრიკული შეღწევადობებია. კრისტალის იმ ნაწილებისათვის, სადაც მოცულობითი მუხტი არ არის, ე. ი. $\rho=0$, განტოლება კიდევ უფრო მარტივდება

$$\varepsilon_1 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_1^2} + \varepsilon_2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_2^2} + \varepsilon_3 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_3^2} = 0. \quad (9.71)$$

(9.70) და (9.71) განტოლებები წარმოადგენენ კრისტალების ელექტროსტატიკის ძირითად განტოლებებს.

სიმაზარის გავლენა

დიელექტრიკული პოლარიზებადობის $[\chi_{ij}]$ და დიელექტრიკული შეღწევადობის $[\varepsilon_{ij}]$ ტენზორები მეორე რანგის სიმეტრიული ტენზორებია და მათთვის მართებულია ყოველივე ის, რაც ნათქვამი იყო მეორე რანგის სიმეტრიული ტენზორების მიმართ. ზოგად შემთხვევაში კრისტალის დიელექტრიკული თვისებების აღწერისათვის საჭიროა ტენზორის ექვსივე კომპონენტის განსაზღვრა. მეორე რანგის სიმეტრიული $[\varepsilon_{ij}]$ ტენზორი შესაძლებელია დავიყვანოთ მთავარ ღერძებზე და მაშინ ის ხასიათდება სამი $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$ მთავარი მნიშვნელობით. ასეთი ტენზორის გეომეტრიულ გამოხატულებას წარმოადგენს სამღერძა ელიფსოიდი, რომლის განლაგება კრისტალში და მისი ფორმა დამოკიდებულია კრისტალის სიმეტრიაზე. კრისტალებისათვის, რომელნიც ტრიკლინურ, მონოკლინურ ან რომბულ სისტემებს მიეკუთვნებიან, ტენზორის სამივე მთავარი მნიშვნელობა ერთმანეთისაგან განსხვავდება $\varepsilon_1 \neq \varepsilon_2 \neq \varepsilon_3$ და ელიფსოიდის სამივე ღერძს განსხვავებული მნიშვნელობები აქვთ. მაგალითად, PbSO_4 რომბული სიმეტრიის კრისტალისათვის $\varepsilon_1=27,5$ $\varepsilon_2=54,6$, $\varepsilon_3=27,3$. ტრიკლინურ კრისტალებში მთავარი მიმართულებები არ არიან დაკავშირებულნი რომელიმე კრისტალოგრაფიულ ღერძთან. მონოკლინური სისტემის კრისტალებისათვის ელიფსოიდის ერთი ღერძი ყოველთვის მიმართულია მეორე რიგის ღერძის ან სიმეტრიის სიბრტყისადმი მართობის პარალელურად, ხოლო რომბულ კრისტალებში სამივე მთავარი მიმართულება ფიქსირებულია სამი ურთიერთმართობი სიმეტრიის ღერძით.

ტრიგონალური, ტეტრაგონალური და ჰექსაგონალური სისტემების კრისტალებში ტენზორული ზედაპირი წარმოადგენს ბრუნვის ელიფსოიდს ($\varepsilon_1=\varepsilon_2 \neq \varepsilon_3$). ამ ელიფსოიდის ბრუნვის ღერძი მიმართულია შესაბამისი 3,4 და 6 ღერძების გასწვრივ. დანარჩენი ორი ღერძის არჩევა ნებისმიერია. კუბური სიმეტრიის კრისტალებში ტენზორის სამი მთავარი მნიშვნელობა ერთმანეთის ტოლია ($\varepsilon_1=\varepsilon_2=\varepsilon_3$), ხოლო მთავარი

მიმართულებები ემთხვევა კუბის ღერძებს. ამის გამო α კვარცის ჰექსაგონალური კრისტალებისათვის $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 4,49$; $\epsilon_3 = 4,55$; რუთილის (TiO_2 -ის მოდიფიკაცია) ტეტრაგონალური კრისტალებისათვის $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 86$; $\epsilon_3 = 170$; ხოლო NaCl -ის კუბური კრისტალებისათვის $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 5,6$.

§ 35. პიროელექტრობა

ტემპერატურის ცვლილების შედეგად ზოგიერთი კრისტალი პოლარიზდება. ასე, მაგალითად, თუ ჭთურმალინის კრისტალს, რომლის სიმეტრია ხსიათდება $3m$ ჯგუფით, გავაცივებთ, ხოლო შემდეგ შევიტანთ მაღალტემპერატურიან თერმოსტატში, აღმოჩნდება, რომ მესამე რიგის ღერძის საწინააღმდეგო ბოლოებზე გაჩნდება სხვადასხვა ნიშნის მუხტები; თუ გახურება-გაცივების პროცესს შევებრუნებთ, მუხტებიც შეიცვლიან თავის ნიშანს, ე. ი. ის ბოლო, რომელიც გაცივების შემდეგ იმუხტებოდა დადებითად, გახურების შემდეგ დაიმუხტება უარყოფითად და ა.შ. ტემპერატურის ცვლილების შედეგად დიელექტრიკული კრისტალების ზედაპირზე მუხტის გამოჩენის მოვლენას ეწოდება პიროელექტრული ეფექტი; სიმეტრიის ღერძს, რომლის ბოლოებზე ჩნდება მუხტები — კრისტალის ელექტრული ღერძი.

კრისტალებში შესაძლებელია საწინააღმდეგო მოვლენაც, როდესაც ელექტრული ღერძის ბოლოების ხელოვნურად დაელექტროების შედეგად წარმოიშობა ტემპერატურის სხვაობა. ეს მოვლენა ცნობილია ელექტროკალორიული ეფექტის სახელწოდებით.

პიროელექტრული მუხტების გამოჩენა კრისტალის ზედაპირზე შესაძლებელია მოხდეს ისეთ კრისტალებში, რომლებსაც თავისი შინაგანი მულმივი პოლარიზაცია გააჩნიათ და აქვთ უნარი ტემპერატურის ცვლილების გავლენით მოახდინონ მუხტების დამატებითი გადანაცვლება გარკვეული მიმართულებით. მუხტების გადანაცვლების მიმართულება წარმოადგენს პოლარიზაციის მიმართულებას და ყოველთვის ხდება კრისტალის ელექტრული ღერძის პარალელურად.

თუ ტემპერატურის ცვლილება მცირეა და ხდება მთელ კრისტალში, პირველი მიახლოებით შეიძლება ჩავთვალოთ, რომ პოლარიზაციის ვექტორის ცვლილება კრისტალის ტემპერატურის ცვლილების პროპორციულია და ამიტომ

$$\Delta p_i = k_i \Delta T, \quad (9.72)$$

სადაც k_i სამი პიროელექტრული კოეფიციენტი; ეს კოეფიციენტები აკავშირებენ ტემპერატურას (სკალარულ სიდიდეს) პოლარიზაციის ვექტორთან და, როგორც ცნობილია (იხ. თავი V, § 19), წარმოად-

გენენ $\vec{K}(k_1, k_2, k_3)$ ვექტორს, რომელსაც პიროელექტრული ვექტორი ეწოდება. ამგვარად, პიროელექტრობა წარმოადგენს კრისტალის ისეთ ფიზიკურ თვისებას, რომლის აღწერაც ვექტორის საშუალებით ხდება. მაგრამ პოლარიზაციის \vec{P} ვექტორი ∞m სიმეტრიის პოლარული ვექტორია და ასეთივე სიმეტრია ექნება პიროელექტრულ \vec{K} ვექტორს. ამიტომ პიროელექტრული თვისებები შეიძლება ჰქონდეს მხოლოდ ისეთ კრისტალებს, რომელთაც განსაკუთრებული პოლარული მიმართულებები გააჩნიათ. აქედან უშუალოდ გამომდინარეობს, რომ სიმეტრიის ცენტრის შემცველი კრისტალები არ შეიძლება იქნენ პიროელექტრულ თვისებებს ($\vec{K}=0$). გარდა II სიმეტრიის ცენტრის შემცველი კლასებისა, არსებობს სხვა კლასებიც, რომელნიც არ შეიცავენ განსაკუთრებულ პოლარულ მიმართულებებს.

მიმართულებას ან ღერძს ეწოდება განსაკუთრებული, თუ კრისტალში არ არსებობს ამ ღერძის სარკულად ან შეთავსებით ტოლი ღერძი. სხვაგვარად რომ ვთქვათ, კრისტალში არ არსებობს ისეთი სიმეტრიული ოპერაცია, რომელიც ახდენს მოცემული ღერძის გამეორებას (აქ მიმართულების შეცვლა საწინააღმდეგო მიმართულებით ითვლება გამეორებად). პოლარული ეწოდება ისეთ ღერძს, რომლის ბოლოები არ შეიძლება შეუთავსდნენ ერთმანეთს კრისტალურ კლასში არსებული სიმეტრიული გარდაქმნების საშუალებით. ამიტომ, თუ წერტილოვან ჯგუფში შედის მხოლოდ მეორე, მესამე, მეოთხე ან მეექვსე რიგის ღერძები, ისინი იქნებიან განსაკუთრებული და პოლარული ღერძები და პიროელექტრული \vec{K} ვექტორიც აუცილებლად იქნება მიმართული ამ ღერძების გასწვრივ. გამონაკლისს წარმოადგენს მხოლოდ პირველი რიგის ღერძი, რომელიც არაფრით არ ზღუდავს პიროელექტრული ვექტორის მიმართულებას, და ერთი სიმეტრიის სიბრტყის შემცველი კლასი. ამ უკანასკნელ შემთხვევაში \vec{K} ვექტორს შეიძლება ჰქონდეს ნებისმიერი მიმართულება m სიბრტყეში და მისი კოორდინატები იქნება $(k_1, 0, k_3)$. თუ გვაქვს სიმეტრიის კლასი 32, მესამე რიგის ღერძი იქნება განსაკუთრებული ღერძი, მაგრამ პოლარული არ იქნება და, პირიქით, მეორე რიგის ღერძები იქნებიან პოლარულნი, მაგრამ არა განსაკუთრებული.

თუ ამ კრიტერიუმით მივუღებთ ყველა სიმეტრიის კლასს, მაშინ აღმოჩნდება, რომ არსებობს მხოლოდ 10 სიმეტრიის კლასი, სადაც შეიძლება ველოდოთ პიროელექტრულ ეფექტს. ესენია:

1, 2, 3, 4, 6, m $2mm$, $3m$, $4mm$, $6mm$.

ეს ჯგუფები ∞m ჯგუფის ქვეჯგუფებს წარმოადგენენ და მათ პოლარული კლასები ეწოდება. აქედან ჩანს, რომ პიროელექტრობას უნდა ველოდოთ ისეთ კრისტალებში, რომლებსაც გააჩნიათ ერთი ბრუნვის ღერძი ან ამ ღერძთან ერთად მასზე გამავალი სიმეტრიის სიბრტყეები. ზემოთ აღნიშნული თურმალინის კრისტალის გარდა პიროელექტრული თვისებით ხასიათდებიან ჩვეულებრივი შაქრის კრისტალები სეგნეტის მარილი და მრავალი სხვა.

§ 36. პიეზოელექტრობა

კრისტალის პოლარიზაციის შეცვლა შესაძლებელია, აგრეთვე, მექანიკური ძაბვების მოქმედებით, რომლებიც ცვლიან ელემენტარული დიპოლების სიდიდეს და მათ განლაგებას. დეფორმაციის გავლენით კვარცისა და თურმალინის კრისტალების ზედაპირზე ელექტრული მუხტების წარმოშობა პირველად შეამჩნია პ. კიურომ 1880 წელს. ამ მოვლენას პირდაპირი პიეზოელექტრული ეფექტი ეწოდება. დღეისათვის ცნობილია ასზე მეტი კრისტალი, რომლებსაც პიეზოელექტრული თვისებები გააჩნია და ყველა ისინი წარმოადგენენ პოლარული მიმართულების მქონე დიელექტრიკულ კრისტალებს.

ამგვარად, პიეზოელექტრობა უნდა განვიხილოთ როგორც ისეთი ფიზიკური თვისება, რომელიც აკავშირებს მექანიკური ძაბვებისა და ელექტრული პოლარიზაციის ფიზიკურ სიდიდეებს. კრისტალის დაძაბული მდგომარეობა ხასიათდება მეორე რანგის სიმეტრიული $[σ_{ij}]$ ტენზორით, ხოლო ძაბვების შედეგად წარმოშობილი პოლარიზაცია განისაზღვრება პოლარიზაციის \vec{P} ვექტორით, რომელიც კრისტალის მოცულობის ერთეულის ელექტრულ მომენტს წარმოადგენს; აღვნიშნოთ ამ ვექტორის კომპონენტები p_1, p_2, p_3 . მაშინ, როგორც ცდები გვიჩვენებენ, პოლარიზაციის ვექტორის თითოეული კომპონენტი წრფივად არის დაკავშირებული ძაბვების ტენზორის ყველა კომპონენტთან, ამიტომ შეიძლება დავწეროთ

$$p_i = d_{ijk} \sigma_{jk} \quad (9.73)$$

(9.73)-ში d_{ijk} კოეფიციენტებს პიეზოელექტრული მოდულები ეწოდება. ისინი აკავშირებენ მეორე რანგის $[σ_{jk}]$ ტენზორს p_i ვექტორთან და როგორც ნაჩვენებია იყო (იხ V § 19), შეადგენენ მესამე რანგის ტენზორს. ზოგად შემთხვევაში პიეზოელექტრული მოდულების $|d_{ijk}|$ ტენზორს გააჩნია $3^3 = 27$ კომპონენტი და (9.73) განტოლებები გაშლილი სახით ასე შეიძლება ჩაიწეროს:

	σ_{11}	σ_{22}	σ_{33}	σ_{23}	σ_{32}	σ_{13}	σ_{31}	σ_{12}	σ_{21}	
ρ_1	d_{111}	d_{122}	d_{133}	d_{123}	d_{132}	d_{113}	d_{131}	d_{112}	d_{121}	(9.74)
ρ_2	d_{211}	d_{222}	d_{233}	d_{223}	d_{232}	d_{213}	d_{231}	d_{212}	d_{221}	
ρ_3	d_{311}	d_{322}	d_{333}	d_{323}	d_{332}	d_{313}	d_{331}	d_{312}	d_{321}	

მაგრამ დაბეჭდვის $[\sigma_{ij}]$ ტენზორი მეორე რანგის სიმეტრიული ტენზორია და ამიტომ

$$d_{ijk} = d_{ikj}. \quad (9.75)$$

ეს საშუალებას გვაძლევს გადავიღეთ მატრიცულ აღნიშვნებზე; $\sigma_{11} = \sigma_1$, $\sigma_{22} = \sigma_2$, $\sigma_{33} = \sigma_3$, ეს ნორმალური დაბეჭდვებია x_1 , x_2 და x_3 ღერძების გასწვრივ. (9.74) ცხრილის მიხედვით შემდეგი ადგილი უჭირავთ $\sigma_{23} = \sigma_{32} = \sigma_4$, მხებ დაბეჭდვებს, რომლებიც მოქმედებენ x_1 ღერძის ირგვლივ. შემდეგ არიან მხები დაბეჭდვები x_2 ღერძის ირგვლივ $\sigma_{13} = \sigma_{31} = \sigma_5$ და ბოლოს მხები დაბეჭდვები x_3 ღერძის ირგვლივ $\sigma_{12} = \sigma_{21} = \sigma_6$. ამ ტოლობებიდან ცხადია, რომ:

$$\begin{aligned} d_{11} &= d_{111} & d_{26} &= 2d_{212} \\ d_{12} &= d_{122} & d_{33} &= d_{333} \\ d_{14} &= 2d_{123} & d_{34} &= 2d_{323} \end{aligned} \quad (9.76)$$

მაშინ (9.74) ცხრილი ჩაიწერება უფრო მოკლედ:

	σ_{11}	σ_{22}	σ_{33}	σ_{23}	σ_{31}	σ_{12}	
ρ_1	d_{11}	d_{12}	d_{13}	d_{14}	d_{15}	d_{16}	(9.77)
ρ_2	d_{21}	d_{22}	d_{23}	d_{24}	d_{25}	d_{26}	
ρ_3	d_{31}	d_{32}	d_{33}	d_{34}	d_{35}	d_{36}	

ამგვარად, (9.75) ტოლობის შედეგად, პიეზოელექტრული მოდულების (d_{ijk}) ტენზორის დამოუკიდებელი კომპონენტების რიცხვი ხდება 18, ხოლო განტოლება (9.73) მიიღებს სახეს

$$p_i = d_{ij}\sigma_j \quad (i=1, 2, 3; j=1, 2, \dots, 6). \quad (9.78)$$

გამოვარკვეით პიეზოელექტრული მოდულების ფიზიკური შინაარსი. ამისათვის წარმოვიდგინოთ, რომ კრისტალზე მოქმედებს σ_{11} გამჭიმავი დაბეჭ. ასეთი დაბეჭის მოქმედებით კრისტალში წარმოშობილი პოლარიზაციის კომპონენტებს (9.74) ფორმულების თანახმად, ექნებათ შემდეგი მნიშვნელობა:

$$p_1 = d_{111}\sigma_{11}, \quad p_2 = d_{211}\sigma_{11}, \quad p_3 = d_{311}\sigma_{11}.$$

აქედან ჩანს, რომ მოდულები d_{111} , d_{211} , d_{311} წარმოადგენენ პოლარიზაციის ვექტორის შემდგენელს, როდესაც x_1 ღერძის მიმართულებით მოქმედებს ერთეულოვანი გამჭიმავი დაბეჭ. ასეთივე მნიშვნელობა

ექნება ყველა იმ მოდულს, რომელთა ბოლო ორი ინდექსი ერთნაირია. დანარჩენ შემთხვევაში პოლარიზაციის პროცესში თავისი წვლილი მხებ დაბეჭდვას ცემაქვთ, რაც თავის გამოსახლებას შესაბამისი მოდულების მნიშვნელობებში პოულობს.

პიეზოელექტრულ კრისტალებში შესაძლებელია საწინააღმდეგო მოვლენაც, როდესაც გარეშე ელექტრული ველის გავლენით კრისტალი იცვლის თავის გარეგან ფორმას, ე. ი. დეფორმირდება. ამ მოვლენას შებრუნებული პიეზოელექტრული ეფექტი ეწოდება. შებრუნებულ პიეზოელექტრულ ეფექტში ელექტრული ველის დაძაბულობის ვექტორის კომპონენტები დაკავშირებული არიან დეფორმაციის ტენზორის კომპონენტებთან წრფივი დამოკიდებულებით. თერმოდინამიკური განხილვის საფუძველზე შეიძლება დამტკიცდეს, რომ შებრუნებულ პიეზოელექტრულ ეფექტში ელექტრული ველისა და დეფორმაციის დამაკავშირებელი პროპორციულობის კოეფიციენტები იგივე პიეზოელექტრული მოდულებია, რომლებიც აკავშირებენ პოლარიზაციის ვექტორს დაბეჭდვთან. ამიტომ შეიძლება დავწეროთ

$$\varepsilon_{jk} = d_{1jk} E_1. \quad (9.79)$$

გაშლილი სახით ε_{jk} თითოეული მნიშვნელობისათვის მივიღებთ:

$$\varepsilon_{11} = d_{111} E_1 + d_{211} E_2 + d_{311} E_3;$$

$$\varepsilon_{12} = d_{112} E_1 + d_{212} E_2 + d_{312} E_3.$$

თუ გადავალთ მატრიცულ (ორინდექსიან) აღნიშვნებზე, მაშინ პირველი განტოლება მიიღებს სახეს

$$\varepsilon_1 = d_{11} E_1 + d_{21} E_2 + d_{31} E_3;$$

ხოლო მეორისთვის გვექნება

$$\varepsilon_6 = d_{16} E_1 + d_{26} E_2 + d_{36} E_3$$

მაგრამ ასეთივე სახე ექნება განტოლებას ε_{21} კომპონენტისათვის. იმისათვის, რომ გვექნოდეს კომპაქტური დაწერის საშუალება, საჭიროა შემოვიღოთ კოეფიციენტები ისეთივე წესით, როგორც ეს იყო ზემოთ (9.76). მაშინ დეფორმაციის ტენზორის კომპონენტების შეცვლა მოხდება შემდეგი გზით:

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{12} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{13} & \varepsilon_{23} & \varepsilon_{33} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & \frac{1}{2} \varepsilon_6 & \frac{1}{2} \varepsilon_5 \\ \frac{1}{2} \varepsilon_6 & \varepsilon_2 & \frac{1}{2} \varepsilon_4 \\ \frac{1}{2} \varepsilon_5 & \frac{1}{2} \varepsilon_4 & \varepsilon_3 \end{bmatrix}$$

კოეფიციენტი $1/2$ გაჩნდება განტოლების ორივე მხარეს და შეიკვეცება. ახლა (9.79) განტოლების ნაცვლად გვექნება:

$$e_j = d_{ij} E_i \quad (i=1, 2, 3; \quad j=1, 2 \dots 6). \quad (9.80)$$

(9.80)-ის საფუძველზე, შებრუნებული პიეზოელექტრული ეფექტისათვის შეიძლება შევადგინოთ (9.77)-ის მსგავსი ცხრილი:

	e_1	e_2	e_3	e_4	e_5	e_6	
E_1	d_{11}	d_{12}	d_{13}	d_{14}	d_{15}	d_{16}	(9.81)
E_2	d_{21}	d_{22}	d_{23}	d_{24}	d_{25}	d_{26}	
E_3	d_{31}	d_{32}	d_{33}	d_{34}	d_{35}	d_{36}	

სიმეტრიის გავლენა პიეზოელექტრულ მოდულაზზე

როგორც აღნიშნული იყო, პიეზოელექტრული თვისებებით ხასიათდებიან პოლარული დიელექტრიკული კრისტალები. გარდა პიროელექტრიკების 10 კლასისა, რომლებსაც ერთი პოლარული მიმართულება აქვთ, პოლარულ კლასებს მიეკუთვნება კიდევ 11 კლასი, რომლებსაც რამდენიმე პოლარული მიმართულება გააჩნიათ. დანარჩენი 11 კლასი ცენტროსიმეტრიული კლასია და, რა თქმა უნდა, ისეთ კრისტალში რომელსაც სიმეტრიის ცენტრი გააჩნია, არც ერთი მიმართულება არ შეიძლება იყოს პოლარული.

გარდა ამისა, V თავში ნაჩვენებია იყო, რომ თუ ვისარგებლებთ მესამე რანგის ტენზორის კომპონენტების გარდაქმნით, რომელიც სამი კოორდინატის ნამრავლის გარდაქმნის ანალოგიურია:

$$d'_{ijk} = a_{ie} a_{jm} a_{kn} d_{cmn}; \quad x'_i x'_j x'_k = a_{ie} a_{jm} a_{kn} x_e x_m x_n,$$

მაშინ იმ კრისტალებში, სადაც სიმეტრიის ცენტრი არსებობს და ხდება გარდაქმნა: $x_1 \rightarrow -x_1; x_2 \rightarrow -x_2; x_3 \rightarrow -x_3$, ყველა პიეზოელექტრული მოდული გაუტოლდება ნულს. საზოგადოდ კი ამავე შედეგს იძლევა ნეიმანის პრინციპის განხილვა, რომლის თანახმად ცენტროსიმეტრიულ კრისტალებს არ შეიძლება გააჩნდეთ ისეთი ფიზიკური თვისებები, რომელთა აღწერაც ხდება კენტი რანგის ტენზორით; ამიტომ, საბოლოოდ, პიეზოელექტრული თვისებები შეიძლება გააჩნდეს შემდეგი 21 კრისტალური კლასის კრისტალებს:

$$1, 2, 3, 4, 6, \bar{4}, m, 2mm, 3m, 4mm, 6mm, \bar{6}, 222, 32, 422, 62, \bar{4}2m, \bar{6}2m, 23, 43, \bar{4}3m.$$

ინვერსიის ცენტრს გარდა სხვა სიმეტრიის ელემენტებიც მოქმედებენ პიეზოელექტრულ მოდულაზზე და ამცირებენ მათ რიცხვს 18-დან ტრიკლინური კრისტალებისათვის ერთამდე კუბური სიმეტრიის კრისტ-

ტალებში. ზემოთ (იხ. თავი V, § 20) ნაჩვენები იყო, თუ როგორ მოქმედებენ მეორე, მესამე მეოთხე, მეექვსე რიგის სიმეტრიის ღერძები და სიმეტრიის სიბრტყე პიეზოელექტრული მოდულების ტენზორის კომპონენტებზე. თითოეული კრისტალური კლასი, მასში შემავალი სიმეტრიის ელემენტების მოქმედების შედეგად, ქმნის პიეზოელექტრული მოდულების გარკვეულ ცხრილს. მაგალითისათვის განვიხილოთ რომბული სისტემის კლასი 222. ამ კლასში კოორდინატა ღერძები მიმართულია სამ ურთიერთმართობ მეორე რიგის სიმეტრიის ღერძის პარალელურად. როგორც ვიცით, როდესაც x_1 კოორდინატა ღერძის პარალელურად მოქმედებს მეორე რიგის სიმეტრიის ღერძი, ნულს გაუტოლდება ყველა ის მოდული, რომლებიც თავის ინდექსებში შეიცავენ ორ ერთიანს ან საერთოდ არ შეიცავენ ერთიანებს. იგივე ითქმის x_2 და x_3 ღერძების პარალელურად მოქმედი სიმეტრიის ღერძების მიმართ. ამიტომ, თუ აღნიშნულ მოდულებს გამოვრიცხავთ (9.74) ცხრილიდან, მივიღებთ 222 კლასის შესაბამის პიეზოელექტრული მოდულების მატრიცას:

$$0 \ 0 \ 0 \ d_{14} \ 0 \ 0$$

$$0 \ 0 \ 0 \ 0 \ d_{25} \ 0$$

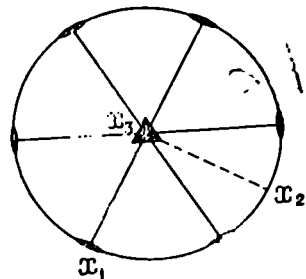
$$0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ d_{36}$$

რომელიც მხოლოდ სამ კომპონენტს შეიცავს. მოდულების ასეთი ცხრილი ექნება, კერძოდ, სეგნეტის მარილის ყ მოდიფიკაციას, რომელიც რომბული სისტემის 222 სიმეტრიის კლასში დაკრისტალდება. ამ ნივთიერებისათვის მეორე რიგის ღერძები ერთდროულად ოპტიკურ და ელექტრულ ღერძებს წარმოადგენენ. როგორც ცხრილი გვიჩვენებს, პიეზოელექტრული პოლარიზაცია, ამ შემთხვევაში, განისაზღვრება შემდეგი სახით:

$$p_1 = d_{14}\sigma_{23}; \quad p_2 = d_{25}\sigma_{31}; \quad p_3 = d_{36}\sigma_{12}.$$

აქედან ჩანს, რომ პიეზოელექტრული ეფექტი სეგნეტის მარილში შეიძლება წარმოიშვას მხოლოდ ძვრის ძაბვების ხარჯზე.

ერთ-ერთ მეტად გავრცელებულ პიეზოელექტრიკს კვარცი წარმოადგენს. კვარცი დაკრისტალდება ტრიგონალური სისტემის 32 კლასში. ვინაიდან ეს კლასი არ შეიცავს სიმეტრიის სიბრტყეებს, არსებობს კვარცის ორი ენანტიომორფული მოდიფიკაცია: მარჯვენა და მარცხენა კვარ-



ნახ. 9. 17. α -კვარცის 32 კლასის სიმეტრიის ელემენტების და კოორდინატა ღერძების განლაგება.

ცი. მარჯვენა კვარცისათვის იღებენ კოორდინატთა ლერძების მარჯვენა სისტემას, ხოლო მარცხენა კვარცისათვის — მარცხენა სისტემას. მესამე რიგის ლერძი კრისტალის ოპტიკურ ლერძს წარმოადგენს და არჩეულია კოორდინატთა x_3 ლერძად (ნახ. 9.17): მის მართობად განლაგებულია სამი პოლარული მეორე რიგის ლერძი. ეს ლერძები კრისტალის ელექტრულ ლერძებს წარმოადგენენ. ერთ მათგანს ირჩევენ x_1 კოორდინატთა ლერძად, ხოლო x_2 და x_1 ლერძების მართობად იღებენ x_2 კოორდინატთა ლერძს. ასეთნაირად არჩეულ კოორდინატთა სისტემაში პიეზოელექტრული მოდულების ტენზორი იღებს შემდეგ სახეს:

	σ_1	σ_2	σ_3	σ_4	σ_5	σ_6
p_1	d_{11}	$-d_{11}$	0	d_{14}	0	0
p_2	0	0	0	0	$-d_{14}$	$-2d_{11}$
p_3	0	0	0	0	0	0

და შეიცავს მხოლოდ ორ კომპონენტს. ამიტომ (9.78) განტოლების თანახმად, ძაბვების შედეგად წარმოშობილი პოლარიზაციის ვექტორის შემდგენებისათვის მივიღებთ:

$$\begin{aligned} p_1 &= d_{11}\sigma_1 - d_{11}\sigma_2 + d_{14}\sigma_4; \\ p_2 &= -d_{14}\sigma_5 - 2d_{11}\sigma_6; \\ p_3 &= 0. \end{aligned} \quad (9.82)$$

აქედან ჩანს, რომ არ არსებობს ისეთი ძაბვა, რომელიც შეძლებს აღძრას პოლარიზაცია მესამე რიგის (ოპტიკური) ლერძის მიმართულებით. თუ გამჭვირავი ძაბვა მოქმედებს x_1 ლერძის პარალელურად, მაშინ

$$p_1 = d_{11}\sigma_1; \quad p_2 = 0; \quad p_3 = 0$$

და პოლარიზაცია x_1 ლერძის მიმართულებით ხდება. x_2 ლერძის პარალელურად მოქმედი გამჭვირავი σ_2 ძაბვა, როგორც მატრიცა გვიჩვენებს, არ იწვევს პოლარიზაციას ამ ლერძის მიმართულებით, მაგრამ იწვევს პოლარიზაციას ისევ x_1 ლერძის გასწვრივ

$$p_1 = -d_{11}\sigma_2; \quad p_2 = 0; \quad p_3 = 0.$$

ამრიგად, x_1 მეორე რიგის სიმეტრიის ლერძის მიმართულებით პოლარიზაციის აღძვრა შესაძლებელია ან გაჭიმვის შედეგად x_1 ლერძის გასწვრივ ან იმავე სიდიდის შემკუმშავი ძაბვით, რომელიც იმოქმედებს x_2 ლერძის მიმართულებით. ამიტომ კვარცის კრისტალში მეორე რიგის სიმეტრიის ლერძს ელექტრული ლერძი ეწოდება. როგორც მატრიცა გვიჩვენებს, ელექტრული ლერძის მიმართულებით კრისტალის პოლარიზება შეუძლია აგრეთვე ამ ლერძის მიმართ ძვრის ძაბვებსაც. თუ კრისტალი იმყოფება ყოველმხრივი თანაბარი წნევის ქვეშ,

მაშინ $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3$, ხოლო ძვრის ძაბვები უტოლდება ნულს. ამიტომ $p_1 = p_2 = p_3 = 0$ და პიეზოელექტრულ ეფექტს ადგილი არა აქვს. კვარცის კრისტალისათვის პიეზოელექტრულ მოდულებს აქვთ შემდეგი მნიშვნელობები: $d_{11} = 6,8 \cdot 10^{-6} \text{ cgse}$ და $d_{14} = -1,8 \cdot 10^{-8} \text{ csge}$.

როგორც აღენიშნეთ, პიეზოელექტრულ თვისებებს იჩენენ კრისტალები, რომლებსაც ერთი ან რამდენიმე პოლარული მიმართულება გააჩნიათ. ასეთი მიმართულებებით ხასიათდება 21 კრისტალური კლასი და ამიტომ უნდა არსებობდეს პიეზოელექტრული მოდულების 21 სხვადასხვა მატრიცა. ფაქტიურად ასეთი მატრიცების რიცხვი არის 16. ეს ხდება იმიტომ, რომ 43 კლასის სიმეტრიის გამო შესაბამისი მატრიცის ყველა კომპონენტი უტოლდება ნულს, ხოლო კლასების: 6 და 4, $6mm$ და $4mm$; 622 და 422; 23 და $\bar{4}3m$ მატრიცები ერთნაირია. ასე, მაგალითად, კუბური სისტემის 23 და $\bar{4}3m$ კლასებისათვის მატრიცას აქვს შემდეგი სახე:

$$\begin{array}{ccccc} 0 & 0 & 0 & d_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & d_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_{14} \end{array}$$

და ნულისაგან განსხვავებულია მხოლოდ ერთი მოდული; ამავე დროს, ყველაზე დაბალი სიმეტრიის ტრიკლინური სისტემის 1 კლასისათვის გვექნება სრული (9.77) მატრიცა.

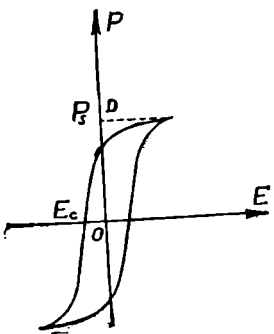
იმის გამო, რომ არსებობს ზუსტი პროპორციულობა პიეზოელექტრული კრისტალის მექანიკურ დატვირთვასა და მასზე წარმოშობილი მუხტის რაოდენობას შორის, პიეზოელექტრობით ხშირად სარგებლობენ მექანიკური ძალების, წნევის, აჩქარების და სხვა სიდიდეების გასაზომად. პიეზოელექტრული კრისტალები ფართო გამოყენებას პოულობენ რადიოტექნიკაში; მათგან აშუადებენ მიკროფონებს, ადაპტორებს, იყენებენ რადიოსიხშირეების სტაბილიზაციისათვის და ა. შ.

§ 37. სეზნენტოელექტრობა

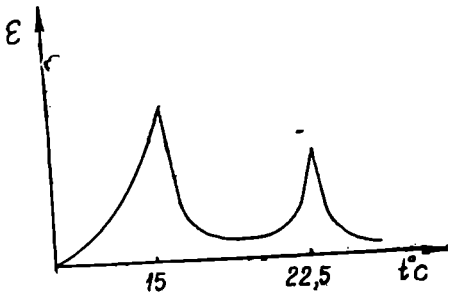
ჩვენ დავინახეთ, რომ მუდმივი (სპონტანური) პოლარიზაციით ხასიათდება რიგი დიელექტრიკული კრისტალებისა, რომლებიც თავის პოლარიზაციას ავლენენ მხოლოდ განსაკუთრებულ პირობებში; მაგალითად, პიროელექტრული კრისტალები პოლარიზდებიან გარკვეული მიმართულებით მხოლოდ ტემპერატურის ცვლილების შედეგად, ხოლო პიეზოელექტრული კრისტალების პოლარიზაცია შედგენდება დეფორმაციის შემდეგ. ამავე დროს, არსებობენ კრისტალები, რომლებიც ასევე ამჟღავნებენ პოლარიზაციის თვისებას, ე. ი. გააჩნიათ ნულისაგან განსხვავებული ელექტრული მომენტი მაშინაც კი, როდესაც გარეშე ველი არ

მოქმედებს, ყოველგვარი განსაკუთრებული პირობების გარეშე, მაგრამ იჩენენ ამ თვისებას მხოლოდ განსაზღვრულ ტემპერატურულ შუალედში და გარკვეული მიმართულებით. ამ ტემპერატურულ შუალედში ველის მოქმედება იწვევს პოლარიზაციის ზრდას ნაჭერობამდე (ნახ. 9.18). როდესაც ველი მცირდება $E=0$ მნიშვნელობამდე, დიელექტრიკი რჩება პოლარიზებულ მდგომარეობაში და მუდმივი P_* პოლარიზაცია განისაზღვრება OD ორდინატით, რომელიც მიიღება ნაჭერობის მრუდის წრფივი მონაკვეთის ექსტრაპოლაციით; იმისათვის, რომ სპონტანური პოლარიზაცია გაქრეს, საჭიროა კრისტალზე ვიმოქმედოთ საწინააღმდეგო მიმართულების ელექტრული F_c ველით, რომლის სიდიდეც განსაზღვრავს კოერციტულ ძალას. საწინააღმდეგო მიმართულების ველის სიდიდის შემდეგი ზრდა იწვევს კრისტალის სპონტანური პოლარიზაციის მიმართულების შეცვლას საწინააღმდეგო მიმართულებით. ამგვარად, ჩნდება პოლარიზაციული ჰისტერეზისის მარყუჟი (ნახ. 9.18). კრისტალები, რომელნიც, პიროველექტრული კრისტალებისაგან განსხვავებით, ხასიათდებიან მცირე კოერციტული ძალით და ამიტომ იოლად იცვლიან მუდმივი (სპონტანური) პოლარიზაციის მიმართულებას საწინააღმდეგო მიმართულებით, გარეშე ცვლადი ველის გავლენით სეგნეტოელექტრულ კრისტალებს წარმოადგენენ (სეგნეტის მარილის $NaKCl_4H_4O_8$ სახელწოდების მიხედვით, სადაც ეს თვისება პირველად იყო აღმოჩენილი).

ზინაიდან სეგნეტოელექტრულ კრისტალებში მუდმივი პოლარიზაციისათვის არსებობს სრულიად გარკვეული მიმართულებები, ამიტომ გასაგებია, რომ სეგნეტოელექტრული თვისებები შეიძლება გააჩნდეს მხოლოდ იმ კრისტალებს, რომლებსაც სიმეტრიის ცენტრი არ გააჩნიათ.



ნახ. 9. 18. სეგნეტოელექტრული კრისტალის ჰისტერეზისის მარყუჟი.



ნახ. 9. 19. დიელექტრიული შეღწევალობის ტემპერატურისაგან დამოკიდებულება. კიურის წერტილში ϵ'' იღებს მაქსიმალურ მნიშვნელობებს.

საერთოდ, ყველა სეგნეტოელექტრული კრისტალი, ამავე დროს, პიეზოელექტრიკს წარმოადგენს, მაგრამ ყველა პიეზოელექტრიკი არ ამჟღავნებს სეგნეტოელექტრულ თვისებებს. სეგნეტოელექტრული კრისტალები ეკუთვნიან იმავე სიმეტრიის კლასებს, რომლებიც დამახასიათებელი იყო პიროელექტრული კრისტალებისათვის.

სეგნეტოელექტრულ მდგომარეობაში გადასვლა გარკვეულ ტემპერატურებზე ხდება. ამ ტემპერატურებს კიურის დიელექტრიკული წერტილები ეწოდება. სეგნეტის მარილში აღმოჩნდა ორი კიურის წერტილი: ერთი ზედა ($T = +22,5^{\circ}\text{C}$) და მეორე ქვედა ($T = -15^{\circ}\text{C}$). ამ ტემპერატურებს შორის კრისტალი იმყოფება სეგნეტოელექტრულ (პოლარიზებულ) მდგომარეობაში. კიურის წერტილების მიღწევისას მკვეთრად იცვლება ნივთიერების დიელექტრიკული თვისებები. კერძოდ, ამ წერტილებში დიელექტრიკული შეღწევადობის მნიშვნელობები აღწევენ მაქსიმუმს (ნახ. 9.19). ეს მიუთითებს იმაზე, რომ კიურის წერტილებში ადგილი აქვს ფაზურ გარდაქმნას. ეს ფაზური გარდაქმნა იწვევს ელემენტარული უჯრედის სიდიდის და სიმეტრიის შეცვლას, ცვლის კრისტალის ენერგიას, პიეზოელექტრულ მოდულებს და ა. შ. ამ წერტილების შესაბამისი ტემპერატურების ზევით და ქვევით პისტერეზისის მარყუჟი ქრება და E და P სიდიდეებს შორის მყარდება წრფივი დამოკიდებულება. კრისტალი პოლარიზებული მდგომარეობიდან არაპოლარიზებულ (პარალელურ) მდგომარეობაში გადადის.

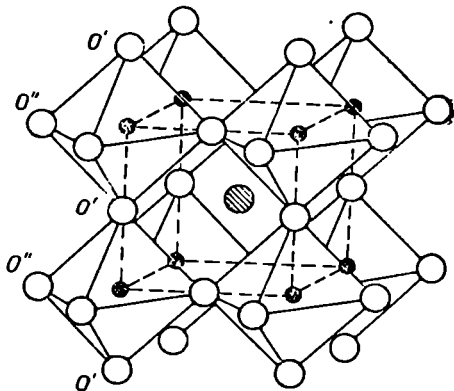
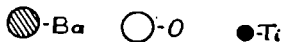
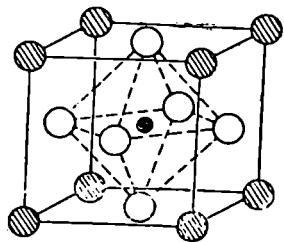
დღეისათვის ცნობილია სეგნეტოელექტრიკების სამი ძირითადი ჯგუფი: პირველ ჯგუფს მიეკუთვნება თვით სეგნეტის მარილი და მისი იზომორფული მარილები. არასეგნეტოელექტრულ მდგომარეობაში, ე. ი. კიურის წერტილების ზევით და ქვევით სეგნეტის მარილი რომბული სისტემის 222 სიმეტრიის კლასს ეკუთვნის. როდესაც ნივთიერება გადადის სეგნეტოელექტრულ მდგომარეობაში, მაშინ მასში იქმნება მუდმივი პოლარიზაციის მიმართულებები. ამის გამო კრისტალის სიმეტრია სეგნეტოელექტრულ არეში ხდება უფრო დაბალი, ვიდრე ჩვეულებრივ არაპოლარიზებულ მდგომარეობაში. ასეთივე განსაკუთრებული მიმართულებით ხასიათდებოდნენ პიროელექტრიკებიც; ამიტომ სეგნეტოელექტრულ არეში კრისტალები უნდა ეკუთვნოდნენ რომელიმე პიროელექტრულ კლასს, კერძოდ, სეგნეტის მარილი, ასეთ მდგომარეობაში, მიეკუთვნება მონოკლინური სისტემის 2 კლასს, ხოლო სეგნეტოელექტრული ღერძი თანხვედება რომბული მოდიფიკაციის a ღერძს.

სეგნეტოელექტრული კრისტალების მეორე ჯგუფს ქმნიან ტუტე ლითონების ფოსფატები. ამ ჯგუფის ძირითადი წარმომადგენლებია კალიუმის ფოსფატი KH_2PO_4 და მისი იზომორფული წარმომადგენლები. ეს კრისტალი სეგნეტოელექტრულ მდგომარეობაში გადადის — 140°C . ამ დროს მისი ტეტრაგონალური სიმეტრია იცვლება რომბული სიმეტრიით.

სეგნეტოელექტრიკების შესამე ჯგუფს მიეკუთვნებიან იონური კრისტალები, რომლებიც პეროვსკიტის (ABX_3) სტრუქტურულ ტიპში დაკრისტალდებიან. პეროვსკიტი არის $CaTiO_3$ მინერალის სახელწოდება. მისი სტრუქტურა მოცემულია 9.20-ა ნახაზზე. ასეთივე სტრუქტურით ხასიათდება ამ ჯგუფის სეგნეტოელექტრიკების ყველაზე თვალსაჩინო წარმომადგენელი — ბარიუმის ტიტანატი ($BaTiO_3$). როგორც ნახაზი გვიჩვენებს, ეს სტრუქტურა კუბურია. Ba^{2+} იონები კუბის წვეროებში თავსდება, O^{2-} იონები — წახნაგების ცენტრებში, ხოლო Ti^{4+} იონები — კუბის ცენტრში შექმნილ სიციარიელეში. ეს სიციარიელე ოქტაედრულია და ამიტომ Ti -ის თითოეული იონი გარშემორტყმულია ჟანგბადის ექვსი იონით. პეროვსკიტის ტიპის სტრუქტურისათვის დამახასიათებელია ის, რომ ჟანგბადის იონებისაგან შემდგარი კოორდინაციული ოქტაედრები ეხებიან ერთმანეთს (ნახ. 9.20-ბ). ოქტაედრებს შორის თავსდება ბარიუმის იონები. ნივთიერება კრისტალდება პეროვსკიტის ტიპის სტრუქტურაში, მხოლოდ იონების რადიუსებს შორის გარკვეული თანფარდობის არსებობის შემთხვევაში (იხ. VI, § 24).

ბარიუმის ტიტანატში დადგენილია სეგნეტოელექტრული გარდაქმნის სამი წერტილი: $T_1 = 120^\circ C$, $T_2 = 5^\circ C$ და $T_3 = -80^\circ C$. ამ გარდაქმნების შესაბამისად, ტემპერატურის დაწვეის პროცესში, ბარიუმის ტიტანატი კუბური სისტემის $m3m$ კლასიდან გადადის უფრო დაბალი სიმეტრიის კლასებში, ჯერ ტეტრაგონალური სისტემის $4mm$ კლასში, შემდეგ რომბული სისტემის $2mm$ კლასში, და ბოლოს რომბოედრული სისტემის $3m$ კლასში. ყველა ამ მოდიფიკაციის ელემენტარული უჯრედები მიიღება საწყისი კუბური უჯრედის მცირე დეფორმაციის შედეგად. როგორც რენტგენოსტრუქტურული გამოკვლევები აჩვენებენ, კრისტალის დეფორმაცია ხდება სპონტანური პოლარიზაციის ვექტორის (სეგნეტოელექტრული ღერძის) მიმართულებით. ასე, მაგალითად, $120^\circ - 5^\circ$ შუალედში სეგნეტოელექტრული ღერძი მიმართულია კუბის წიბოს პარალელურად და ელემენტარული უჯრედის წაგრძელებაც ამ მიმართულებით ხდება. ეს ღერძი c ღერძად აღინიშნება. ამავე დროს, c ღერძის მართობი a ღერძი მოკლდება და კუბური უჯრედი გადადის ტეტრაგონალურში. რომბულ უჯრედში სეგნეტოელექტრული ღერძი კუბის წახნაგის დიაგონალის პარალელურია, ხოლო რომბოედრში კუბის სივრცობრივ დიაგონალს მიყვება.

კრისტალების სეგნეტოელექტრულ მექანიზმში გარკვეულ როლს ასრულებენ როგორც ელექტრონული პოლარიზებადობა, ისე იონების გადანაცვლება კრისტალურ მესერში. ეს გადანაცვლება განაპირობებს მესრის სიმეტრიის შეცვლას კიურის წერტილის გადასვლის დროს. კერძოდ, ბარიუმის ტიტანატის სტრუქტურის შემთხვევაში ბარიუმის და ტიტანის კათიონები ინაცვლებენ კუბის წიბოს გასწვრივ ზევით (ნახ. 9.20).

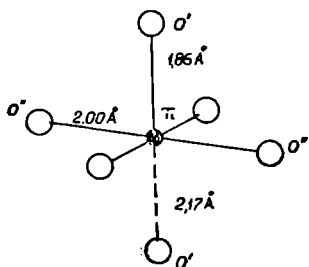


ნახ. 9. 20. ბარიუმის ტიტანატის ($BaTiO_3$) სტრუქტურა. ა. ელემენტარული უჯრედი. ბ. ჟანგბადის იონების ოქტაედრების განლაგება.

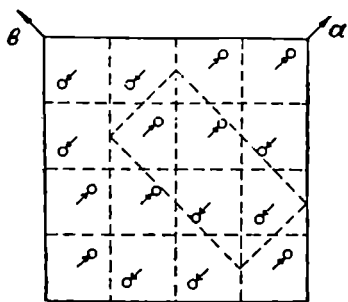
ბარიუმის კათიონის გადანაცვლება უდრის $0,06\text{\AA}$, ხოლო ტიტანის კათიონის გადანაცვლება გაცილებით მეტია და უდრის $0,2\text{\AA}$, ამავე დროს, მესრის ანიონური ნაწილი დეფორმირდება შედარებით მცირედ. ჟანგბადის ანიონები, რომლებიც გვერდული წახნაგების ცენტრებში არიან მოთავსებულნი და ნახაზზე აღინიშნებიან O'' , თითქმის არ ინაცვლებენ. მაგრამ ის ანიონები, რომლებიც ტიტანების შემაერთებული ხაზის გასწვრივ მდებარეობენ (O'), ინაცვლებენ $0,03\text{\AA}$ სიდიდით საწინააღმდეგო მიმართულებით. ამის შედეგად ტიტანის ირგვლივ ჟანგბადის იონების ოქტაედრული გარემოცვა მახინჯდება. ერთი მანძილი $Ti-O'$ მოკლდება, ხოლო მეორე ასეთივე მანძილი გრძელდება (ნახ. 9.21). იონების ასეთი ასიმეტრიული გადანაცვლების შედეგად ბარიუმის ტიტანატის კუბური მესერი გადადის ტეტრაგონალურ მესერში.

დიელექტრიკების პოლარიზაციის განხილვის დროს ჩვენ დაინახეთ, რომ, თუ კვანძში მოთავსებული ატომის გარემოცვა შეესაბამება კუბურ სიმეტრიას, მაშინ ეფექტური ველი, რომელიც ამ ატომზე იმოქმედებს გარეშე \vec{E} ველის მიერ გამოწვეული \vec{p} პოლარიზაციის შედეგად, (9.40) გამოსახულების მიხედვით ტოლი იქნება $\vec{E} + \frac{4\pi}{3}\vec{P}$. ბარიუმის

ტიტანატის სტრუქტურაში Ba და Ti იონების მეზობლები მართლაც კუბური სიმეტრიის შესაბამისად არიან განლაგებულნი. მაგრამ



ნახ. 9. 21. ჟანგბადის იონების განლაგება ტიტანის ირგვლივ ტეტრაგონალურ მესერში.



ნახ. 9. 22. ტყვიის ცირკონატის ანტი-სეგნეტოელექტრული სტრუქტურა.

ჟანგბადის იონის გარემოცვა კუბურ სიმეტრიას არ შეესაბამება და, როგორც სტრუქტურიდან ჩანს (ნახ. 9.20 ბ), თითოეული O' ატომის უახლოესი მეზობელი მხოლოდ ორი ტიტანის ატომია, განლაგებული ერთ წრფეზე. ამგვარად, ბარიუმის ტიტანატის სტრუქტურისათვის დამახასიათებელია ვერტიკალური წრფივი ძეწკვების $O'-Ti-O'-Ti$ არსებობა. ეს ძეწკვები, როგორც ჩანს, განაპირობებენ სეგნეტოელექტრულ თვისებებს, რომლებიც დამახასიათებელია პეროვსკიტის ტიპის კრისტალებისათვის. საქმე იმაშია, რომ ეფექტური ველის მნიშვნელობისათვის (9.40) ფორმულა აქ არ გამოდგება და საჭირო ხდება უფრო ზოგადი გამოთვლების ჩატარება. ამ გამოთვლების შედეგად ირკვევა, რომ ბარიუმის ტიტანატის სტრუქტურაში განსაკუთრებით ძლიერია ურთიერთქმედება ტიტანისა და O' ატომებს შორის და ამიტომ იქმნება ისეთი შინაგანი ველები, რომელნიც რამდენიმეჯერ აღიღებენ ტიტანის პოლარიზებადობას იმასთან შედარებით, რაც მოსალოდნელია $\vec{E} + \frac{4\pi}{3}\vec{P}$ ველის მოქმედების შედეგად.

პეროვსკიტის ტიპის სტრუქტურაში შინაგანი ველის სიდიდე ცენტრალური იონის (Ti) მახლობლად შეიძლება იმდენად დიდი გახდეს, რომ გადააჭარბოს დრეკად ძალებს, რომელნიც ეწინააღმდეგებიან იონების მოძრაობას კრისტალში და გამოიწვიოს იონების ის ასიმეტრიული განაწილება, რომელიც აღნიშნული იყო ზემოთ. კერძოდ, ჟანგბადისა და ტიტანის იონების განლაგება ერთ წრფეზე ველის ასეთ გაძლიერებას უწყობს ხელს.

წვლილი, რომელიც იონურ წანაცვლებას შეაქვს სპონტანური პოლარიზაციის საერთო სიდიდეში, შეადგენს 30%-ს. დანარჩენი 70% გაპირობებულია ელექტრონული პოლარიზებადობით.

ზოგიერთ შემთხვევაში გვხვდება იონური კრისტალები, რომელთა სტრუქტურა, ბარიუმის ტიტანიტის მსგავსად, შედგება თავისთავად პოლარიზებული იონების ძეწყვებისაგან. მაგრამ იმ განსხვავებით, რომ პოლარიზაციის მიმართულება ნებისმიერ ორ მეზობელ ძეწყვში ანტიპარალელურია და ამის გამო საერთო სპონტანური პოლარიზაცია უდრის ნულს. ასეთ ნივთიერებას ანტისეგნეტოელექტრიკს უწოდებენ. ნივთიერებათა ამ ჯგუფის წარმომადგენელია ტყვიის ცირკონატი ($PbZrO_6$), რომელსაც პეროვსკიტის ტიპის სტრუქტურა გააჩნია. 9.22 ნახაზზე მოყვანილია ამ ნივთიერების სტრუქტურა ანტისეგნეტოელექტრულ მდგომარეობაში, როდესაც ელემენტარული უჯრედი ხდება რომბული. a და b რომბული უჯრედის ღერძებია. როგორც ნახაზი გვიჩვენებს, ტყვიის იონების გადანაცვლება შეწყვილებულ პარალელურ მწკრივებში ხდება ანტიპარალელურად a ღერძის მიმართულებით. ამის შედეგად წარმოიშობა ზესტრუქტურა და ელემენტალური უჯრედის b ღერძი ორჯერ იზრდება.

ანტისეგნეტოელექტრულ თვისებებს იჩენენ აგრეთვე $NaNbO_3$, $PbHfO_3$ და რამდენიმე სხვა კრისტალი.

ლიტერატურა

1. Тамм И. Е. Основы теории электричества. Издательство технико-теоретической литературы, 1954.
2. Книттель Ч. Введение в физику твердого тела. Издательство физико-математической литературы, 1963.
3. Кэди У. Пьезоэлектричество и его практическое применение. Издательство «ИЛ», 1949.
4. Жданов Г. С. Физика твердого тела. Издательство МГУ, 1961.
5. Bhagavantam S. Crystal Symmetry and Physical Properties; Academic Press 1966.
6. Най Дж. Физические свойства кристаллов. Издательство «Мир», 1967.
7. Уэрт Ч. Томсон Р. Физика твердого тела. Издательство «Мир» 1966.

კრისტალების მაგნიტური თვისებები

კრისტალების მაკროსკოპულ ფიზიკურ თვისებებს შორის, რომლებსაც ჩვენ ამ წიგნში ვიხილავთ, მაგნიტური თვისებები გარკვეული თავისებურებით გამოირჩევა. ზოგიერთ მათგანზე უკვე ვილაპარაკეთ მაგნიტური სიმეტრიის ჯგუფების განხილვის დროს. ფერომაგნიტური და ანტიფერომაგნიტური კრისტალების ატომური სტრუქტურის შესწავლა მოითხოვს სპინების გარკვეული ორიენტაციის გათვალისწინებას. მაგნიტური მომენტების მოწესრიგება კრისტალებში ქმნის ამ კრისტალების სიმეტრიის ახალ ტიპს, რომელსაც მაგნიტური სიმეტრია ეწოდება, და მაგნიტური სიმეტრიის ჯგუფებით განისაზღვრება. მაგნიტური სიმეტრიის ჯგუფების განხილვის დროს შემოღებული იყო ახალი სიმეტრიის ელემენტი R , რომელიც გულისხმობს დროის ნიშნის ან დენის მიმართულების შეცვლის ოპერაციებს. მაგნიტურ თვისებებთან დაკავშირებით R ოპერაცია გამოხატავს დენის მიმართულების შეცვლას ან, რაც იგივეა, მაგნიტური მომენტის მიმართულების საწინააღმდეგო მიმართულებით შეცვლასთან დაკავშირებულ გარდაქმნას.

ატომებში ელექტრონების საკუთარი მოძრაობა ქმნის წრიულ დენებს და განაპირობებს შესაბამისი მაგნიტური მომენტების წარმოშობას. მაგნიტური მომენტების როლს სპინები ასრულებენ. სპინების მოწესრიგებული ორიენტაცია გარკვეული მიმართულებით ან ორიენტაციის შეცვლა საწინააღმდეგო მიმართულებით, როდესაც იცვლება მუხტის მოძრაობის მიმართულება, შეადგენს R ოპერაციის შინაარსს. ამგვარად, მაგნიტური სტრუქტურის მქონე კრისტალებში R გარდაქმნა წარმოადგენს სპინების მიმართულების შეცვლის ოპერაციას.

R გარდაქმნა დიდ გავლენას ახდენს კრისტალებში არსებული სხვა სახის სიმეტრიის ელემენტებზე. მაგალითისათვის განვიხილოთ ორი ერთნაირი წრიული კონტური, სიმეტრიულად განლაგებული $x_1 O x_3$ სიბრტყის მიმართ (ნახ. 10.1). თუ დენების მიმართულებას კონტურებში (ნაჩვენებია ისრით) მხედველობაში არ მივიღებთ, მაშინ $x_1 O x_3$ სიბრტყე ამ კონტურებისათვის იქნება სიმეტრიის სიბრტყე, ხოლო $O x_3$ ღერძი — მეორე რიგის სიმეტრიის ღერძი. თუ კონტურების ბრუნვას (ან დენის გავლის მიმართულებას) მივიღებთ მხედველობაში, მაშინ, თუმცა $x_1 O x_3$ სიბრტყე ისევ სიმეტრიის სიბრტყედ დარჩება (თუ დენის მიმართულება ორივე კონტურში ერთნაირია), მაგრამ $O x_3$ ღერძი უკვე აღარ იქნება მეორე რიგის სიმეტრიის ღერძი. R გარდაქმნის შემოღების

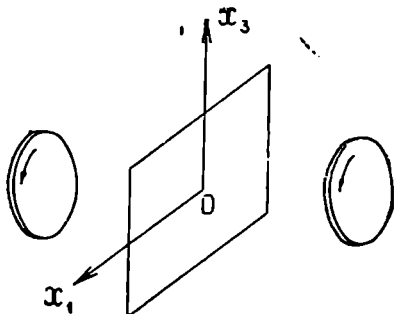
შედეგად მაგნიტური სიმეტრიის წერტილოვანი ჯგუფების რიცხვი, როგორც ნაჩვენებია ზემოთ (§ 15), აღწევს 90-ს.

ისეთი კრისტალები, რომლებსაც მაგნიტური სტრუქტურა არ გააჩნიათ (მაგნიტურად მოუწესრიგებელი), თავისი მაკროსიმეტრიის აღწერისათვის საჭიროებენ მხოლოდ 32 წერტილოვან ჯგუფს, რომელნიც მაგნიტური ჯგუფებისაგან განსხვავებით შეიძლება შეიცავდნენ R ოპერაციას, როგორც სიმეტრიის დამოუკიდებელ ელემენტს.

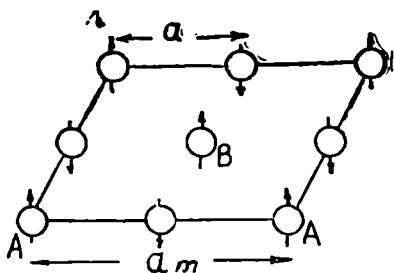
კრისტალების მაგნიტურ სტრუქტურასთან დაკავშირებით, უნდა აღინიშნოს, რომ არსებობს გარკვეული განსხვავება მაგნიტური სტრუქტურის ელემენტარულ უჯრედსა ან, მოკლედ, მაგნიტურ უჯრედსა და ჩვეულებრივ კრისტალოქიმიურ უჯრედს შორის, რომელიც ზემოთ იყო განსაზღვრული. ეს განსხვავება ნათლად ჩანს ორგანზომილებიანი მესრის შემთხვევისათვის 10.2 ნახაზზე. A და B ტიპის ატომები ქიმიურად იდენტური ატომებია და ამიტომ მათ შორის უმოკლესი მანძილი a წარმოადგენს კრისტალოგრაფიული უჯრედის პარამეტრს. მაგნიტური სტრუქტურის თვალსაზრისით ეს ატომები განსხვავდებიან სპინების საწინააღმდეგო მიმართულებით, ამიტომ მაგნიტური უჯრედის პარამეტრი a_m ტოლი იქნება მანძილის ორ უახლოეს და სპინების ერთნაირი მიმართულების მქონე AA ატომებს შორის. ნახაზიდან ჩანს, რომ მაგნიტური ელემენტარული უჯრედი შეიძლება უდრიდეს კრისტალოქიმიურ უჯრედს ან მთელ რიცხვჯერ აღემატებოდეს მას. სპინების განლაგების შესწავლა კრისტალურ მესერში შესაძლებელი გახდა მხოლოდ ნეიტრონულ-დიფრაქციული მეთოდების დამუშავების შემდეგ.

როგორც ზემოთ იყო აღნიშნული (§19), მრავალი ფიზიკური თვისება და მათ შორის მაგნიტური თვისებებიც შეიძლება დავაკავშიროთ ამ თვისებების განმსაზღვრელ ფიზიკურ სიდიდეებთან. ზოგადად ეს კავშირი გამოისახება (5.1) ფორმულით

$$P_{ijk...} = a_{ijk...} + b_{ijk...} + c_{ijk...} + \dots + Q_{emn...}$$



ნახ. 10.1. ბრუნვის მიმართულების გაყენა სიმეტრიის ელემენტებზე.



ნახ. 10. 2. კრისტალოქიმიური (a) და მაგნიტური (a_m) ელემენტალური უჯრედები.

ფიზიკური სიდიდეები $P_{ijh}\dots$ და $Q_{emn}\dots$ წარმოადგენენ სხვადასხვა რანგის ტენზორებს. თუ ამ ტენზორების რანგი, შესაბამისად, არის m და n , მაშინ მათი დამაკავშირებელი $a_{ijh}\dots emn\dots$ კოეფიციენტები ქმნიან ტენზორს, რომლის რანგიც იქნება $m+n$.

კრისტალების მაგნიტური თვისებების განხილვის დროს P და Q სიდიდეები წარმოადგენენ მაგნიტურ ვექტორებს, როგორცაა მაგნიტური ველის დაძაბულობა \vec{H} , მაგნიტური ინდუქცია \vec{B} და მაგნიტური მომენტი \vec{M} . ეს ვექტორები უკავშირდებიან ერთმანეთს კოეფიციენტებით, რომელნიც გარკვეულ ფიზიკურ თვისებებს გამოხატავენ და ქმნიან მეორე რანგის ტენზორებს. ამ ტენზორებს მაგნიტური ტენზორები ეწოდება. მათ, პირველ რიგში, მიეკუთვნებიან მაგნიტური ამთვისებლობის და მაგნიტური შეღწევადობის ტენზორები, პირომაგნეტიზმის, პიეზომაგნეტიზმის, მანგიტოსტრიქციის გამომხატველი სიდიდეები და სხვა.

მაგნიტური ველის, მაგნიტური ინდუქციისა და მაგნიტური მომენტის ვექტორები აქსიალური ვექტორებია და მათი გარდაქმნა ხდება აქსიალური ვექტორების გარდაქმნის წესის მიხედვით: $H'_i = \pm a_{ij} H_j$. აქსიალური ვექტორი ყოველთვის დაკავშირებულია ბრუნვის მიმართულებასთან. მაგალითად, მაგნიტური მომენტი დამოკიდებულია კონტურში დენის მიმართულებაზე და თუ დენის მიმართულება შეიცვლება საწინააღმდეგო მიმართულებით, მაგნიტური მომენტის ვექტორიც შეიცვლის თავის მიმართულებას საწინააღმდეგოდ. ამიტომ R ოპერაციის შემოღების შემდეგ მაგნიტური ვექტორების გარდაქმნა, (5.2) ფორმულის თანახმად, მიიღებს შემდეგ სახეს $H'_i = -(\pm a_{ij}) H_j$, ეს იმას ნიშნავს, რომ თუ ბრუნვისა და არეკვლის შედეგად აქსიალური ვექტორი არ იცვლის ნიშანს, R ოპერაციის მოქმედებით ის ნიშანს იცვლის.

§ 38. დიამაგნიტური და პარამაგნიტური ამთვისებლობა

ატომის მაგნიტური მომენტი წარმოადგენს ელექტრონების ორბიტაზე მოძრაობის შედეგად წარმოშობილი მაგნიტური მომენტების, ელექტრონების საკუთარი მაგნიტური მომენტების (სპინების) და ბირთვის მაგნიტური მომენტის ვექტორულ ჯამს. ბირთვის მაგნიტური მომენტი, დაახლოებით, ათასჯერ მცირეა, ვიდრე ელექტრონის მაგნიტური მომენტები; ამის გამო ჩვენი ამოცანებისათვის ის შესაძლებელია მხედველობაში არ მივიღოთ, თუმცა, მიუხედავად ბირთვული მაგნიტური მომენტების სიმცირისა, მათი საშუალებით (მესბაუერის ეფექტი, ბირთვული მაგნიტური რეზონანსის მეთოდი) შესაძლებელია დიდი ინფორმაციის მიღება კრისტალური მესრის მაგნიტური ველის შესახებ.

ატომებისა და მოლეკულების მაგნიტური მომენტების ჯამი, აღებული ნივთიერების მოცულობის ერთეულისათვის, შეადგენს მოცულობის ერთეულის მაგნიტურ მომენტს \vec{M} . მას ნივთიერების დამაგნიტება ეწოდება

$$\vec{M} = \sum \vec{\rho}_m. \quad (10.1)$$

იზოტროპულ სხეულებში დამაგნიტება მაგნიტური ველის დაძაბულობის პირდაპირპროპორციულია და შეიძლება დავწეროთ

$$\vec{M} = \eta \vec{H}, \quad (10.2)$$

სადაც η — პროპორციულობის კოეფიციენტი მოცულობით მაგნიტურ ამთვისებლობას წარმოადგენს. ხშირად დამაგნიტება განისაზღვრება როგორც ნივთიერების მასის ერთეულის მაგნიტური მომენტი ან ერთი გრამ-ატომის მაგნიტური მომენტი. ასეთ შემთხვევაში მას, შესაბამისად, კუთარი ან მოლარული დამაგნიტება ეწოდება, ხოლო სათანადო η კოეფიციენტები კუთარ $\left(\frac{\eta}{\rho}\right)$ ან მოლარულ $\left(\frac{\eta}{\rho A}\right)$ მაგნიტურ ამთვისებლობებს გამოხატავენ. აქ ρ სიმკვრივეა, ხოლო A — ატომური ან მოლეკულური წონა. თუ მაგნიტური ამთვისებლობა სკალარული სიდიდეა, მაშინ ფორმულა (10.2) \vec{M} და \vec{H} ვექტორების კოლინეარობის პირობას გამოხატავს. η შეიძლება იყოს $\eta < 0$ ან $\eta > 0$. როდესაც მაგნიტური ამთვისებლობა უარყოფითია, ნივთიერებას დიამაგნიტური ეწოდება. ასეთ შემთხვევაში \vec{M} და \vec{H} ვექტორები ურთიერთსაწინააღმდეგოდ არიან მიმართულნი.

საზოგადოდ, ცნობილია, რომ დიამაგნიტურ თვისებებს იჩენენ ის ნივთიერებები, რომელთა ატომებს ან მოლეკულებს საკუთარი მაგნიტური მომენტი არ გააჩნიათ ($\rho_m = 0$). ასეთი ატომების ელექტრონული გარსები მთლიანად შეესებულია (მაგალითად, ყველა ინერტული გაზი ან კოვალენტური კრისტალი) და მათი ორბიტალური L და სპინური S მაგნიტური მომენტები უდრიან ნულს. ნივთიერების დამაგნიტება, ამ შემთხვევაში, ხდება მხოლოდ გარეშე მაგნიტური ველის გავლენით.

დიამაგნიტიზმი დაკავშირებულია ელექტრონების მოძრაობასთან ბირთვის ირგვლივ. ეს მოძრაობა ქმნის წრიულ დენს, რომლის მაგნიტური მომენტიც i დენის ძალისა და კონტურის S ფართობის პროპორციულია

$$\rho_m = \frac{1}{c} iS. \quad (10.3)$$

თუ ერთ წამში ელექტრონი v -ჯერ შემოუვლის ბირთვის, მაშინ $i = ev$, ხოლო კუთხური სიჩქარე $\omega = 2\pi\nu$ და ამიტომ

$$p_m = \frac{e\omega}{2\pi c} \pi r^2 = \frac{er^2}{2c} \omega. \quad (10.4)$$

როგორც ჩანს, ელექტრონის ორბიტალური მაგნიტური მომენტი მისი კუთხური სიჩქარის პროპორციულ სიდიდეს წარმოადგენს. ჩვეულებრივ პირობებში დიამაგნიტური ატომების ცალკეული ელექტრონების მაგნიტური მომენტები ერთმანეთს აკომპენსირებენ და მთლიანად ატომის საკუთარი მაგნიტური მომენტი ნულის ტოლია. თუ ნივთიერებას შევიტანთ მაგნიტურ ველში, მოძრავ ელექტრონებზე დამატებით იმოქმედებს ლორენცის ძალა

$$\vec{F} = \frac{e}{c} \vec{v} \times \vec{H}, \quad (10.5)$$

რომლის მოქმედებით ელექტრონების მოძრაობა შეიცვლება. შეიძლება დამტკიცდეს, რომ გარეშე მაგნიტური ველის გავლენით ატომის ელექტრონული გარსი იწყებს პრეცესიას ველის მიმართულების ირგვლივ (ნახ. 10.3) გარკვეული კუთხური სიჩქარით

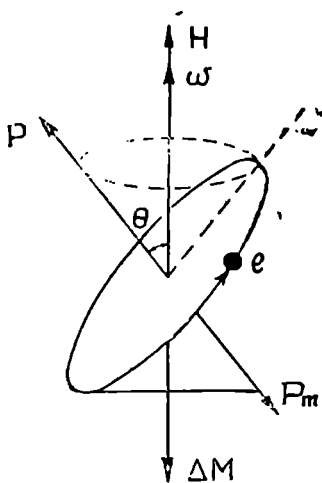
$$\omega_L = -\frac{eH}{2mc}. \quad (10.6)$$

\vec{H} ვექტორის პარალელური ღერძის ირგვლივ ელექტრონების მოძრაობა დამატებითი ω_L კუთხური სიჩქარით, (10.4) ფორმულის თანახმად, წარმოშობს დამატებით $\Delta\vec{M}$ მაგნიტურ მომენტს. როგორც ნახაზი გვიჩვენებს, ეს დამატებითი მაგნიტური მომენტი, რომელსაც ატომი შეიძენს ელექტრონების პრეცესიული მოძრაობის შედეგად, მიმართული იქნება მაგნიტური ველის \vec{H} ვექტორის საწინააღმდეგოდ. სხვაგვარად, რომ ვთქვათ, სხეული დამაგნიტდება ველის საწინააღმდეგო მიმართულებით, რაც, თავის მხრივ, განაპირობებს დიამაგნიტურ ეფექტს.

იმის გამო, რომ დიამაგნიტიზმი დაკავშირებულია ელექტრონების ორბიტალურ მოძრაობასთან, ის, წარმოადგენს ნივთიერების უნივერსალურ თვისებას და არ ჩნდება მხოლოდ ისეთ ნივთიერებაში, სადაც დიამაგნიტური ეფექტის გადაფარვა ხდება უფრო მძლავრი საწინააღმდეგო ეფექტებით.

გამოთვლები გვიჩვენებენ, რომ ნივთიერების მოცულობის ერთეულის მაგნიტური ამთვისებლობა გამოისახება შემდეგი ფორმულით

$$\eta = -\frac{Ze^2 n}{6mc^2} \bar{r}^2, \quad (10.7)$$



ნახ. 10. 3. ელექტრონების პრეცესია გარე მგანტიური ველის მიმართულების ირგვლივ.

მაგნიტური მომენტი გააჩნიათ ($p_m \neq 0$). ამიტომ პარამაგნიტური თვისებებით გამოირჩევიან ატომები, რომლებსაც ელექტრონების კენტი რიცხვი აქვთ ან მათი შიგა ელექტრონული გარსები შეუვსებელია (გარდამავალი ელემენტები, იშვიათი მიწა-ელემენტები, აქტინიდები). გარდამავალი ან იშვიათი მიწა-ელემენტების პარამაგნიტიზმი დაკავშირებულია შეუვსებელი d და f ელექტრონული შრეების არსებობასთან. ჰუნდის წესის მიხედვით, ელექტრონები ავსებენ ამ შრეებს ისე, რომ სრული სპინური მომენტი იყოს მაქსიმალური. ასეთ შემთხვევაში სისტემის სრული ორბიტალური მომენტი L და სრული სპინი S ნულისაგან განსხვავდება და ნულისაგან იქნება განსხვავებული მათი შესაბამისი მაგნიტური მომენტებიც, რომლებსაც, კვანტური მექანიკის თანახმად, შემდეგი სახე აქვთ:

$$\sqrt{L(L+1)} m_B; \quad 2\sqrt{S(S+1)} m_B. \quad (10.8)$$

აქ m_B ატომის მაგნეტური მომენტის ერთეულს — ბორის მაგნეტონს წარმოადგენს. როგორც ორბიტალური მაგნიტური მომენტის, ისე სპინ-მომენტის ვექტორების პროექციები გარე მგანტიური ველის მიმართულებაზე იღებენ დისკრეტულ მნიშვნელობებს (იკვანტებიან) სათანადო კვანტური რიცხვების შესაბამისად. ამიტომ Θ კუთხე (ნახ. 10.3), მაგნიტურ მომენტსა და მაგნიტური ველის დაძაბულობას შორის შეიძლება იღებდეს მხოლოდ გარკვეულ მნიშვნელობებს. ატო-

სადაც n ატომების რიცხვია მოცულობის ერთეულში, ხოლო \bar{r}^2 — ელექტრონებსა და ატომბირთვებს შორის მანძილის კვადრატის საშუალო სიდიდე $\bar{r}^2 = \bar{x}_1^2 + \bar{x}_2^2 + \bar{x}_3^2$.

როგორც (10.7) ფორმულა გვიჩვენებს, დიამაგნიტური ამთვისებლობა განისაზღვრება ატომში ელექტრონული მუხტის განაწილებით და არ არის დამოკიდებული ტემპერატურაზე. ამ ფორმულით გამოთვლილი მაგნიტური ამთვისებლობა კარგად თანხვდება ექსპერიმენტულ მონაცემებს და უმრავლეს შემთხვევაში 10^{-6} რიგის სიდიდეს წარმოადგენს.

ნივთიერებას, რომლისთვისაც $\eta > 0$, პარამაგნიტური ეწოდება. პარამაგნიტური ნივთიერების ატომებს და მოლეკულებს საკუთარი მუდმივი

მი, რომელსაც ნულისაგან განსხვავებული მაგნიტური მომენტი გააჩნია, შეიძლება განვიხილოთ როგორც p_m მომენტის მქონე მაგნიტური დიპოლი. როდესაც ატომებზე, არ მოქმედებს გარეშე მაგნიტური ველი, ატომების მაგნიტური მომენტები (მაგნიტური დიპოლები), სითბური მოძრაობის შედეგად, ქაოსურად იქნებიან განაწილებული სივრცეში და ნივთიერების დამაგნიტება $M=0$. ასეთი ნივთიერება მაგნიტდება მხოლოდ გარეშე მაგნიტური ველის მოქმედების შედეგად, რომელიც ახდენს ცალკეული ატომების მაგნიტური მომენტების ორიენტაციას ველის გასწვრივ. მაგნიტიკის დამაგნიტება ველის მიმართულებით, როდესაც $p_m \neq 0$, წარმოადგენს პარამაგნიტურ ეფექტს და ის ბევრად უფრო ძლიერია, ვიდრე დიამაგნიტური ეფექტი; ამიტომ ნივთიერებები, რომელთა ატომებსაც გააჩნიათ ნულისაგან განსხვავებული საკუთარი მაგნიტური მომენტები, პარამაგნიტურია.

მაგნიტური მომენტების ორიენტაცია გარეშე მაგნიტური ველის მიერ ისეთივე პროცესია, როგორც დიელექტრიკებში დიპოლების ორიენტაციაა ელექტრული ველის გავლენით. ამის გამო მაგნიტური მომენტის და გარეშე ველის ურთიერთქმედების ენერჯისათვის, (9.58) ფორმულის ანალოგიურად, შეიძლება დაიწეროს

$$U = -p_m H \cos \Theta = -\vec{H} \cdot \vec{p}_m. \quad (10.9)$$

მაშინ, ბოლცმანის თეორემის თანამხად, თერმოდინამიკური წონასწორობის პირობებში ველის მიმართ Θ კუთხით ორიენტირებული მომენტების რიცხვი პროპორციული იქნება $\exp\left(\frac{p_m H \cos \Theta}{kT}\right)$ მამრავლის. ამის

საფუძველზე შეიძლება განისაზღვროს მაგნიტიკის დამაგნიტების ვექტორი, რომელიც, ისევე როგორც დიელექტრიკების შემთხვევაში, (9.60) ფორმულის მსგავსად, იღებს შემდეგ სახეს

$$\vec{M} = \frac{n \cdot p_m^2}{3kT} \vec{H}. \quad (10.10)$$

აქ n მოლეკულების რიცხვია მოცულობის ერთეულში; k — ბოლცმანის მუდმივა, ხოლო T — აბსოლუტური ტემპერატურა. აქედან, პარამაგნიტური ამთვისებლობისათვის ვიღებთ

$$\eta = \frac{n \cdot p_m^2}{3kT} = \frac{c}{T}. \quad (10.11)$$

სადაც $c = \frac{n p_m^2}{3k}$ წარმოადგენს კიურის მუდმივას. (10.11) ფორმულა გამოხატავს კიურის კანონს, რომელიც პარამაგნიტური ამთვისებლობისათვის ამყარებს აბსოლუტური ტემპერატურის მიმართ უკუპროპორციულ დამოკიდებულებას.

დაბალი ტემპერატურებისა და ძლიერი ველების პირობებში პარამაგნეტიკის დამაგნიტება ხასიათდება ნაჯერობით. ნაჯერობას ადგილი აქვს მაშინ, როდესაც ველის გასწვრივ ორიენტირებულია ყველა ატომის მაგნიტური მომენტები

$$\vec{M}_{\text{მაგ}} = n \cdot \vec{p}_m. \quad (10.12)$$

ზოგიერთი ნივთიერებისათვის ადგილი აქვს ამთვისებლობის გადახრას კიურის კანონით გათვალისწინებული ტემპერატურული დამოკიდებულებისაგან. ვაისმა ყურადღება მიაქცია იმ გარემოებას, რომ პარამაგნეტიკში მოქმედებს არ \vec{H} გარეშე ველი, არამედ ეფექტური ველი, რომელიც წარმოადგენს \vec{H} ველისა და დამატებითი ველის მოქმედებათა ჯამს. დამატებითი ველი წარმოიშობა ნივთიერების დამაგნიტებისას და წარმოადგენს ადებულ ატომზე მეზობელი ატომების მოქმედების შედეგს. ეს ველი დამაგნიტების პროპორციულია

$$\vec{H}_{\text{ფი}} = \vec{H} + k_1 \vec{M}, \quad (10.13)$$

სადაც k_1 პროპორციულობის კოეფიციენტი. თუ $\vec{H}_{\text{ფი}}$ მნიშვნელობას ჩავსვამთ (10.10) ფორმულაში, ამთვისებლობისათვის მივიღებთ

$$\eta = \frac{c_1}{T - \Theta}. \quad (10.14)$$

აქ Θ გარკვეულ ტემპერატურას წარმოადგენს. (10.14) დამოკიდებულება ცნობილია კიური-ვაისის კანონის სახელწოდებით.

გარდა იმ კავშირისა, რომელსაც (10.2) დამოკიდებულება ამყარებს მაგნიტური ველის დაძაბულობის \vec{H} ვექტორსა და \vec{M} დამაგნიტების ვექტორს შორის, იზოტროპიული სხეულებისათვის ცნობილია მაგნიტური ინდუქციის \vec{B} ვექტორის კავშირი აღნიშნულ მაგნიტურ ვექტორებთან

$$\vec{B} = \vec{H} + 4\pi \vec{M}, \quad (10.15)$$

ან თუ შევიტანთ \vec{M} ვექტორის მნიშვნელობას (10.2) -დან მივიღებთ

$$\vec{B} = (1 + 4\pi\eta) \vec{H};$$

აღვნიშნოთ

$$1 + 4\pi\eta = \mu, \quad (10.16)$$

მაშინ

$$\vec{B} = \mu \vec{H}. \quad (10.17)$$

კოეფიციენტს, რომელიც \vec{B} და \vec{H} ვექტორებს აკავშირებს, ნივთიერების მაგნიტური განვლადობა ეწოდება. როგორც (10.16) ფორმულა გვიჩვენებს, მაგნიტური განვლადობა $\mu < 1$ დიამაგნეტიკებისათვის და $\mu > 1$ — პარამაგნიტური ნივთიერებისათვის.

კრისტალები ანიზოტროპიულ სხეულებს წარმოადგენენ და ამიტომ \vec{M} ვექტორი შეიძლება არ იყოს ყოველთვის \vec{H} ვექტორის პარალელური. ასეთ შემთხვევაში η უკვე არ წარმოადგენს სკალარულ სიდიდეს და მისი განსაზღვრისათვის უნდა მივმართოთ (5.1) ზოგად დამოკიდებულებას ორ ფიზიკურ სიდიდეს შორის, რომელიც მოყვანილი იყო ამ თავის დასაწყისში. თუ შევადარებთ მას (10.2) განტოლებას, დავინახავთ, რომ P და Q სიდიდეების როლს ახლა \vec{M} და \vec{H} აქსიალური ვექტორები ასრულებენ; ამიტომ მათი დამაკავშირებელი კოეფიციენტები წარმოდგენილი იქნებიან მეორე რანგის ტენზორით და (10.2) დამოკიდებულება ზოგად შემთხვევაში მიიღებს სახეს

$$M_i = \eta_{ij} H_j. \quad (10.18)$$

η_{ij} მაგნიტური ამთვისებლობის ტენზორის კომპონენტებია

$$[\eta_{ij}] = \begin{bmatrix} \eta_{11} & \eta_{12} & \eta_{13} \\ \eta_{21} & \eta_{22} & \eta_{23} \\ \eta_{31} & \eta_{32} & \eta_{33} \end{bmatrix} \quad (10.19)$$

(10.18) განტოლება წარმოადგენს (10.2) განტოლების განზოგადებას ანიზოტროპიული გარემოსათვის. ასევე (10.15) ზოგადი დამოკიდებულება მაგნიტურ ვექტორებს შორის ტენზორულ აღნიშვნებში ჩაიწერება

$$B_i = H_i + 4\pi M_i, \quad (10.20)$$

ან

$$B_i = H_i + 4\pi \eta_{ij} H_j = (\delta_{ij} + 4\pi \eta_{ij}) H_j.$$

ახლა (10.16) და (10.17) ფორმულებისათვის მივიღებთ:

$$\delta_{ij} + 4\pi \eta_{ij} = \mu_{ij}; \quad (10.21)$$

$$B_i = \mu_{ij} H_j. \quad (10.22)$$

აქ μ_{ij} მაგნიტური განვლადობის ტენზორია, ხოლო δ_{ij} — ერთეულოვანი ტენზორი. ვინაიდან $[\delta_{ij}]$ და $[\eta_{ij}]$ მეორე რანგის ტენზორებია, $[\mu_{ij}]$ მეორე რანგის ტენზორს წარმოადგენს.

დამაგნიტებელი კრისტალის ენერჯიის განხილვის საშუალებით შეიძლება დამტკიცდეს, რომ მაგნიტური განვლადობის ტენზორის μ_{ij} კომპონენტებს შორის ადგილი აქვს დამოკიდებულებას

$$\mu_{ij} = \mu_{ji} \quad (10.23)$$

მაშასადამე $[\mu_{ij}]$ ტენზორი სიმეტრიულია. მაშინ (10.21) ფორმულების საფუძველზე სიმეტრიულია მაგნიტური ამთვისებლობის $[\eta_{ij}]$ ტენზორიც და $\eta_{ij} = \eta_{ji}$. ორივე $[\mu_{ij}]$ და $[\eta_{ij}]$ მეორე რანგის სიმეტრიული ტენზორები, (10.21)-ის თანახმად, შეიძლება დავიყვანოთ საერთო მთავარ ღერძებზე. თუ კოორდინატთა ღერძებს ავირჩევთ ამ სამი ურთიერთმართობი მიმართულების გასწვრივ, ტენზორის ყველა კომპონენტი, გარდა μ_{11} , μ_{22} , μ_{33} ან η_{11} , η_{22} , η_{33} , გაუტოლდება ნულს. აღნიშნოთ $\mu_{11} = \mu_1$; $\mu_{22} = \mu_2$; $\mu_{33} = \mu_3$. სიდიდეები μ_1 , μ_2 , μ_3 და, შესაბამისად, η_1 , η_2 , η_3 ტენზორული ელიფსოიდის ნახევარღერძებს განსაზღვრავენ; მათ კრისტალის მთავარი მაგნიტური განვლადობები ან მთავარი ამთვისებლობები ეწოდება. ამგვარად, კრისტალის მაგნიტური ამთვისებლობა მთლიანად განისაზღვრება მისი მთავარი ამთვისებლობის η_1 , η_2 , η_3 სიდიდით და მიმართულებით. ასე, მაგალითად, კადმიუმის ჰექსაგონალური კრისტალებისათვის $\eta_1 = \eta_2 = -17,4 \cdot 10^{-6}$, $\eta_3 = -28,5 \cdot 10^{-6}$.

ბერილიუმსაც ჰექსაგონალური მესერი გააჩნია, მაგრამ ის პარამაგნიტურია, ამიტომ $\eta_1 = \eta_2 = 27,6 \cdot 10^{-6}$, $\eta_3 = 12,9 \cdot 10^{-6}$.

ამბობენ, რომ კრისტალი პარამაგნიტური ან დიამაგნიტურია მოცემული მთავარი ღერძის მიმართულებით, თუ η სიდიდე ამ მიმართულებისათვის, შესაბამისად, დადებითი ან უარყოფითია. არის შემთხვევები, როდესაც კრისტალი დიამაგნიტურია ერთი მთავარი მიმართულებით და პარამაგნიტურია მეორის მიმართ.

მთავარი მიმართულების პარალელურად ტენზორული ზედაპირის რადიუს-ვექტორი და ნორმალი ერთმანეთს თანხვდებიან; ამიტომ, თუ \vec{H} ველი მიმართულია რომელიმე მთავარი მიმართულებით, მაგალითად, OX_1 ღერძის პარალელურად, მაშინ, (10.18) და (10.22) ფორმულების თანახმად, მაგნიტური მომენტის \vec{M} ვექტორს და ინდუქციის \vec{B} ვექტორს იგივე მიმართულება ექნებათ. OX_1 ღერძის შემთხვევაში: $\vec{M} = \eta_1 \vec{H}$; $\vec{B} = \mu_1 \vec{H}$ და $\mu_1 = 1 + 4\pi\eta_1$. სამი ურთიერთმართობი მთავარი მიმართულებების გასწვრივ \vec{H} , \vec{M} და \vec{B} ვექტორები, ისევე, როგორც იზოტროპულ სხეულებში, ერთმანეთის პარალელური ვექტორებია.

მაგნიტური ამთვისებლობის $[\eta_{ij}]$ და განვლადობის $[\mu_{ij}]$ ტენზორები მეორე რანგის სიმეტრიული ტენზორებია. მათი შესაბამისი ტენზორული ელიფსოიდების განლაგება და ფორმა დამოკიდებულია კრისტალის სიმეტრიაზე. კრისტალის სიმეტრიასთან დამოკიდებულების მხრივ მაგნიტური ტენზორების მიმართ მართებული რჩება ყოველივე ის, რაც ნათქვამი იყო ზემოთ, დიელექტრიკული შეღწევადობის $[\epsilon_{ij}]$ და დიელექტრიკული პოლარიზებადობის $[\chi_{ij}]$ ტენზორების შესახებ. აქ მხოლოდ დამატებით უნდა აღინიშნოს ის გარემოება, რომელიც დაკავშირებულია R

ოპერაციასთან. როგორც ვიცით, R ოპერატორი მოქმედებს M და \vec{H} მაგნიტურ ვექტორებზე და ცვლის მათ ნიშანს:

$$R\vec{M}_i = -\vec{M}_i; \quad (10.24)$$

$$R\vec{H} = -\vec{H}. \quad (10.25)$$

მაგრამ პარამაგნიტური კრისტალებისათვის, როდესაც გარეშე მაგნიტური ველი არ მოქმედებს, $\vec{M} = 0$ და ამიტომ R ოპერაცია რა იწვევს კრისტალის მდგომარეობის შეცვლას. ეს იმას ნიშნავს, რომ პარამაგნიტური და დიამაგნიტური კრისტალების სიმეტრიის აღწერა შესაძლებელია ისეთი წერტილოვანი ჯგუფებით, რომლებიც შეიცავენ R ოპერატორს, როგორც დამოუკიდებელ სიმეტრიის ელემენტს და წარმოადგენენ 32 წერტილოვანი ჯგუფისა (G ჯგუფები) და G' (E, R) ჯგუფის პირდაპირ ნამრავლს (იხ. § 15) და, პირიქით, ჯგუფები, რომელნიც შეიცავენ R ოპერატორს, როგორც დამოუკიდებელ ელემენტს, არ შეიძლება იყვნენ მაგნიტური სიმეტრიის ჯგუფები.

§ 30. პირომაგნიტიზმი

პიროელექტრობის ანალოგიური მოვლენა მაგნიტურ კრისტალებში პირომაგნიტიზმია. ზოგიერთი კრისტალი იჩენს უნარს დამაგნიტდეს ან განმაგნიტდეს ტემპერატურის ცვლილების შედეგად. თუ მთელ კრისტალში ტემპერატურა იცვლება ΔT სიდიდით, მაშინ დამაგნიტების ვექტორის სათანადო ცვლილება განისაზღვრება ტოლობით

$$\Delta M_i = q_i \Delta T. \quad (10.26)$$

აქ q_i სამი პირომაგნიტური კოეფიციენტია. ამგვარად, პირომაგნიტური თვისების აღწერა კრისტალებში ხდება \vec{q} ვექტორის საშუალებით.

ცნობილია შებრუნებული ეფექტიც, როდესაც კრისტალის დამაგნიტების ან განმაგნიტების შედეგად იცვლება მისი ტემპერატურა. ამ მოვლენას მაგნიტოკალორიული ეფექტი ეწოდება და მას მეტად მნიშვნელოვანი პრაქტიკული გამოყენება აქვს. საქმე იმაშია, რომ კრისტალის ადიაბატური დამაგნიტების შედეგად მისი ტემპერატურა იზრდება, ხოლო მაგნიტური მომენტების მოწესრიგებული განლაგების შედეგად ენტროპია მცირდება. განმაგნიტება დაკავშირებულია განწესრიგების პროცესთან და ტემპერატურის მკვეთრ შემცირებას იწვევს. ასეთი გზით მიღწეულია ძალიან დაბალი ტემპერატურები (მილიკელვინამდე).

ვინაიდან დამაგნიტების \vec{M} ვექტორი $\propto 1/m$ სიმეტრიის მქონე აქსი-ალური ვექტორია, პირომაგნიტიზმი უნდა ვეძებოთ ისეთ კრისტა-

ლებში, რომლებსაც გააჩნიათ განსაკუთრებული ბრუნვითი მიმართულებები. ამავე დროს, ცხადია, რომ აღნიშნული ფიზიკური თვისებებისათვის საჭიროა კრისტალს ჰქონდეს სპონტანური დამაგნიტების უნარი მაგნიტური ველის მოქმედების გარეშეც, ე. ი. გააჩნდეს ნულისაგან განსხვავებული მაგნიტური მომენტების მოწესრიგების ან განწესრიგების საშუალება. ეს იმას ნიშნავს, რომ ფერომაგნიტური, პირომაგნიტური და მაგნიტოკალორიული თვისებები მიეკუთვნებიან ისეთ ფიზიკურ თვისებებს, რომელთა სიმეტრია დაკავშირებულია მაგნიტური სიმეტრიის ჯგუფებთან. ამ ჯგუფებს შორის პირომაგნიტიზმის და მაგნიტოკალორიული თვისებების მატარებლები, როგორც აღვნიშნეთ, შეიძლება იყოს ისეთი კრისტალები, რომლებსაც ბრუნვის განსაკუთრებული მიმართულება გააჩნიათ და ამავე დროს oo/m ზღვრული ჯგუფის ქვეჯგუფებს წარმოადგენენ. ასეთ მოთხოვნებს აკმაყოფილებს 31 ჯგუფი. ამათგან, ჩვეულებრივი წერტილოვანი სიმეტრიის 13 ჯგუფი 1, $\bar{1}$, m , 2, 3, 4, 6, $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$, $\frac{2}{m}$, $\frac{4}{m}$, $\frac{6}{m}$, და, შესაბამისი, მაგნიტური სიმეტრიის ჯგუფები \underline{m} , $\underline{2}$, $\underline{2/m}$ და სხვ.

§ 40. პიეზომაგნიტიზმი

გარე ძაბვების მოქმედების შედეგად ზოგიერთი კრისტალი მაგნიტდება, ე. ი. მას უჩნდება ნულისაგან განსხვავებული მაკროსკოპული მაგნიტური მომენტი, რომლის სიდიდე მოდებული ძაბვის პროპორციულია. ეს მოვლენა პიეზოელექტრული ეფექტის ანალოგიურია მაგნიტურ კრისტალებში და თუმცა თეორიულად ის დიდი ხანია ცნობილია, მისი ექსპერიმენტული აღმოჩენა მოხერხდა მხოლოდ 1959 წელს CoF_2 და MnF_2 კრისტალებში მათ ანტიფერომაგნიტურ მდგომარეობაში. ზოგად დამოკიდებულებას მაგნიტური მომენტის ვექტორის M_i კომპონენტებსა და ძაბვის ტენზორის σ_{jk} კომპონენტებს შორის აქვს შემდეგი სახე

$$M_i = Q_{ijk} \sigma_{jk}. \quad (10.27)$$

აქ Q_{ijk} პიეზომაგნიტიზმის ტენზორის კომპონენტებია. ეს ტენზორი, (10.27) განტოლების თანახმად, წარმოადგენს მესამე რანგის აქსიალურ ტენზორს.

როგორც ვიცით, ნეიმანის პრინციპის მიხედვით, სიმეტრიის ცენტრის მქონე კრისტალებს არ შეიძლება ჰქონდეთ ფიზიკური თვისებები, რომელთა აღწერაც ხდება კენტი რანგის ტენზორით (§ 20). ამის შესაბამისად, კენტი რანგის პოლარული ტენზორის კომპონენტები უტოლდება ნულს სიმეტრიის ცენტრის შემცველ 11 კლასში. მაგრამ თუ სი-

მეტრიის ცენტრი ასეთ მოქმედებას ახდენს კენტი რანგის პოლარულ ტენზორზე, მაშინ კენტი რანგის აქსიალურ ტენზორზე, როგორც პიეზომაგნიტიზმის $[Q_{ijk}]$ ტენზორია, ასეთივე მოქმედება ექნება ანტისიმეტრიის $\bar{1}$ ცენტრს. ეს იმას ნიშნავს, რომ ყველა მაგნიტურ კლასში, რომლებიც შეიცავენ ანტისიმეტრიის ცენტრს, $[Q_{ijk}]$ ტენზორის კომპონენტები გაუტოლდება ნულს. 4.4 ცხრილი გვიჩვენებს, რომ ასეთი იქნება მაგნიტური სიმეტრიის 21 კლასი:

$$\begin{aligned} &\bar{1}, \underline{2/m}, \underline{2/m}, \underline{mmm}, \underline{mmm} \underline{4/m}, \underline{4/m}, \underline{4/mmm}, \underline{4/mmm}, \\ &\underline{4/mmm}, \underline{3}, \underline{3m}, \underline{3m}, \underline{6/m}, \underline{6/m}, \underline{6/mmm}, \underline{6/mmm}, \\ &\underline{6/mmm}, \underline{m3}, \underline{m3m}, \underline{m3m}. \end{aligned}$$

დანარჩენი კლასებისათვის, ისევე როგორც ეს კეთებოდა პიეზოელექტრული მოდულებისათვის, შეიძლება შემოწმდეს სიმეტრიის ელემენტების მოქმედება პიეზომაგნიტური ტენზორის კომპონენტებზე. ასეთი შემოწმების შედეგად ვლინდება, რომ კიდევ სამ კლასში: $\bar{4}3m$, 432 . $m3m$ ტენზორის კომპონენტები უტოლდება ნულს. დანარჩენ 66 კლასში პიეზომაგნიტიზმის არსებობა პრინციპულად შესაძლებელია. ცალკეულ კლასში შემავალი სიმეტრიის ელემენტები მოქმედებენ ტენზორის კომპონენტებზე და საგრძნობლად ამცირებენ მათ რიცხვს. ეს შემცირება იმდენად მეტია, რამდენადაც უფრო მაღალია კლასის სიმეტრია. ასე, მაგალითად, დაბალი სიმეტრიის კლასებისათვის m , 2 , $2/m$ მატრიცას აქვს შემდეგი სახე:

$$\begin{array}{ccccccc} 0 & 0 & 0 & Q_{14} & Q_{15} & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & Q_{24} & Q_{26} & 0 & \\ Q_{31} & Q_{32} & Q_{33} & 0 & 0 & Q_{36} & \end{array}$$

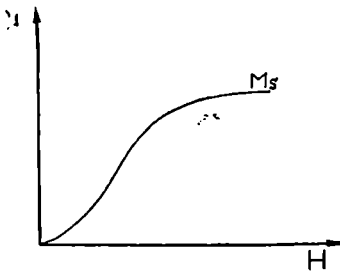
ხოლო კლასებისათვის: 422 , $4mm$, $\bar{4}2m$, $4/mmm$, 622 , $6mm$, $\bar{6}m2$, და $6/mmm$ მიიღებს სახეს:

$$\begin{array}{ccccccc} 0 & 0 & 0 & Q_{14} & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -Q_{14} & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \end{array}$$

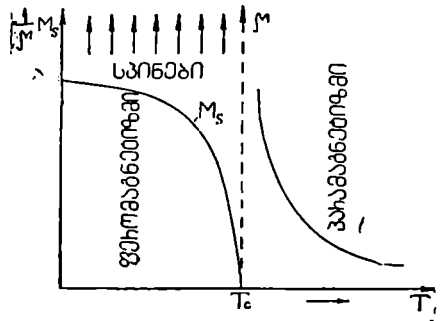
და ა.შ.

§ 41. ფერომაგნიტიზმი და ანტიფერომაგნიტიზმი

აქამდე ჩვენ ვიხილავდით კრისტალების ისეთ მაკროსკოპულ ფიზიკურ თვისებებს, რომლებსაც ძირითადად აქვთ ტენზორული ხასიათი, და ვარკვევდით ამ თვისებების კავშირს კრისტალების სიმეტრიასთან. ამ თვალსაზრისით ფერომაგნიტიზმის და ანტიფერომაგნიტიზ-



ნახ. 10. 4. ფერომაგნიტური ნივთიერებისათვის დამაგნიტების მრულს ქასასიათებს ნაჭერობა.



ნახ. 10. 5. ფერომაგნეტიკის ნაჭერი დამაგნიტების ტემპერატურული სვლა. პარამაგნიტური ამთვისებლობის დამოკიდებულება ტემპერატურისაგან.

მის თვისებები არ თავსდებიან არჩეული სქემის ჩარჩოებში, რადგან თავისი ბუნებით უფრო მეტად დაკავშირებული არიან კრისტალების ატომურ სტრუქტურასთან, ვიდრე იმ თვისებებთან, რომლებზედაც ზემოთ იყო ლაპარაკი. მაგრამ რამდენადაც განხილული იყო მაგნიტური სიმეტრიის ჯგუფები, შესაძლებელია ფერომაგნიტური და ანტიფერომაგნიტური კრისტალების ატომური სტრუქტურის დაკავშირება მაგნიტური სიმეტრიის კლასებთან.

ზოგიერთ პარამაგნიტურ ნივთიერებაში, ტემპერატურის დაწვევის დროს, ადგილი აქვს გარდაქმნას, რომლის შედეგად ირღვევა წრფივი დამოკიდებულება დამაგნიტების \vec{M} ვექტორსა და \vec{H} ვექტორებს შორის. ეს დამოკიდებულება ახლა გამოიხატება დამაგნიტების რთული მრუდით, რომელსაც ნაჭერობა ახასიათებს (ნახ. 10.4). ფერომაგნიტურ ნივთიერებებში, რომელთა უმნიშვნელოვანესი წარმომადგენლები რკინა, ნიკელი, კობალტი და მათი შენადნობებია, დამაგნიტება აღწევს ნაჭერობას უკვე ოთახის ტემპერატურასა და საკმაოდ სუსტი მაგნიტური ველების მოქმედების დროს. ნაჭერობის დამაგნიტება ფერომაგნეტიკში თავისი სიდიდით ბევრად ჭარბობს ჩვეულებრივი პარამაგნეტიკის დამაგნიტებას. ფერომაგნიტური გარდაქმნა გარკვეულ ტემპერატურაზე ხდება. ამ ტემპერატურას კიურის ტემპერატურა ეწოდება (T_c). კიურის ტემპერატურის ზევით ნივთიერება ჩვეულებრივი პარამაგნეტიკის თვისებებს იჩენს, ხოლო ამ წერტილის ქვევით ფერომაგნიტურ მდგომარეობაშია. საზოგადოდ, ტემპერატურის ზრდის შედეგად ფერომაგნეტიკის ნაჭერობის დამაგნიტება (M_g) მცირდება და კიურის ტემპერატურის დროს უტოლდება ნულს (ნახ. 10.5). პარამაგნიტური ნივთიერების მაგ-

ნიტური ამთვისებლობის ტემპერატურისაგან დამოკიდებულება გამო-
იხატება კიურის, ვაისის კანონით (10.1). ეს ფორმულა ახლა შეიძლება ასე
დაიწეროს

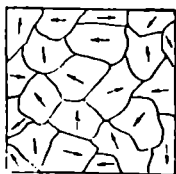
$$\eta = \frac{c}{T - T_c} \quad (10.28)$$

სადაც T_c კიურის ტემპერატურაა ფერომაგნიტიკისათვის. 10.5 ნახაზ-
ზე ნაჩვენებია პარამაგნიტური ამთვისებლობის ტემპერატურული სვლა.
პარამაგნიტური არე მდებარეობს კიურის ტემპერატურის ზევით (მარ-
ჯვნივ).

როგორც აღენიშნეთ, პარამაგნიტური ნივთიერების ატომებსა და
მოლეკულებს გააჩნიათ საკუთარი, ნულისაგან განსხვავებული მაგ-
ნიტური მომენტები. ამ მხრივ ისინი გარკვეული მომენტის მქონე მაგ-
ნიტურ დიპოლებს ემსგავსებიან. ცნობილია, რომ მაგნიტური მო-
ნენტის შეფარდება შესაბამისი მოძრაობის რაოდენობის მომენტთან
(გირომაგნიტური ფარდობა M/p) ელექტრონის სპინისათვის ორ-
ჯერ უფრო დიდია, ვიდრე ორბიტალური მომენტებისათვის. ამიტომ თუ
ექსპერიმენტულად გაიზომება გირომაგნიტური M/p ფარდობა, შესაძ-
ლებელია დადგინდეს ორბიტალურ თუ სპინურ მომენტებთან არის და-
კავშირებული დიპოლის მაგნიტური მომენტი. ცდები გვიჩვენე-
ბენ, რომ ფერომაგნიტური ნივთიერების დამაგნიტება დაკავშირებუ-
ლია ელექტრონების მაგნიტურ მომენტებთან და, მაშასადამე, დიპოლების
მაგნიტური მომენტები განპირობებულია ელექტრონების სპინებით. ის
ფაქტი, რომ ფერომაგნიტური ნივთიერების დამაგნიტება აღწევს ნაჯე-
რობას, უკვე სუსტი გარეშე ველის მოქმედების დროს გვაფიქრები-
ნებს, რომ ფერომაგნიტიკში ველის მოქმედების გარეშეც არსებობს
სპონტანური დამაგნიტების არეები. ამ არეების მაგნიტური მო-
მენტები აღწევენ საკმაოდ დიდ მნიშვნელობას. ეს აიხსნება იმით,
რომ ამ არეებში ხდება ყველა ელექტრონის სპინების შეკრება, ე. ი. ისი-
ნი ერთმანეთის პარალელურები და ერთმხრივ მიმართული არიან. ასეთ
არეებს დომენები ეწოდება. ჩვეულებრივ პირობებში დომენების მაგნი-
ტური მომენტები ქაოსურად არიან განაწილებული სხეულში და ამი-
ტომ მისი მაკროსკოპული დამაგნიტება ნულის ტოლია (ნახ. 10.6). ძლი-
ერი გარეშე ველი ახდენს ყველა ამ მომენტის ორიენტაციას ველის გას-
წვრივ და ნივთიერებას შეექმნება შესამჩნევი მაგნიტური მომენტი. რო-
დესაც ყველა დომენის სპინები ერთმანეთის პარალელურები ხდე-
ბიან, მაგნიტური მომენტი აღწევს თავის ნაჯერობას. 10.5 ნახაზზე
ეს მდგომარეობა წარმოდგენილია პარალელური და ერთმხრივ მი-
მართული ისრების სახით. ამგვარად, ფერომაგნიტური მდგომარეობა
დაკავშირებულია სპინების განლაგების მოწესრიგებასთან, რომელსაც
ადგილი აქვს კიურის ტემპერატურის ქვევით. ეს იმას ნიშნავს, რომ



ა



ბ

ნახ. 10. 6. დომენების მაგნიტური მომენტების განაწილება; ა. მონოკრისტალში, ბ. პოლიკრისტალურ ნივთიერებაში. სხეულის სრული მაგნიტური მომენტი უდრის ნულს.

ნებისმიერი პარამაგნეტიკი შეიძლება გადავიდეს ფერომაგნიტურ მდგომარეობაში, თუ მასში აღმოჩნდება ისეთი ძალები, რომელნიც აიძულებენ ატომებისა და იონების მაგნიტურ მომენტებს მიიღონ ერთი გარკვეული მიმართულების ორიენტაცია. მაღალი ტემპერატურის დროს სითბური მოძრაობის შედეგად დომენები იშლებიან. დომენების საზღვრები არ არის აუცილებელი თანხვდებოდნენ კრისტა-

ლების ან კრისტალური მოზაიკის ბლოკების საზღვრებს.

ძალები, რომლებიც ელექტრონების სპინების ურთიერთპარალელურ ორიენტირებას ახდენენ, არ არიან მაგნიტური ბუნების. როგორც კვანტური მექანიკის საშუალებით მტკიცდება, სპინების ორიენტაცია ხდება გაცვლითი ძალების მოქმედებით, რომელნიც, როგორც კოვალენტური და იონური ბმების განხილვის დროს იყო ნაჩვენები, წარმოიშობიან ატომური ორბიტალების გადაფარვის შედეგად, როდესაც იქმნება ჰარბი ელექტრონული სიმკვრივის მქონე არე ორ დაახლოებულ ატომს შორის. ელექტრონების სპინების პარალელური ან ანტიპარალელური ორიენტაცია დამოკიდებულია გაცვლითი A ინტეგრალის ნიშანზე. A ინტეგრალის მნიშვნელობა ორელექტრონიანი სისტემისათვის განსაზღვრულია (6.33) ფორმულით და, თავის მხრივ, დამოკიდებულია გადაფარვის S ინტეგრალზე (6.23). ორი i და j ატომის გაცვლითი ურთიერთქმედება ხასიათდება გაცვლითი ენერგიით, რომელიც S_i და S_j სპინებისათვის იღებს შემდეგ სახეს

$$E_g = -2AS_i S_j. \quad (10.29)$$

აქ A გაცვლითი ინტეგრალია, რომლის ნიშანზე არის დამოკიდებული პარალელურად იქნება მიმართული S_i და S_j სპინები, თუ ანტიპარალელურად. კოვალენტური ბმის განხილვისას აღნიშნული იყო, რომ მიზიდვის ურთიერთქმედების დროს გაცვლითი A ინტეგრალი უარყოფითი სიდიდეა და სპინებს ანტიპარალელური ორიენტაცია გააჩნია. A ინტეგრალის დადებით მნიშვნელობას შეესაბამება სპინების პარალელური განლაგება, რაც დამახასიათებელია ფერომაგნიტური ნივთიერებისათვის. სათანადო გამოთვლებით შესაძლებელია გაცვლითი ინტეგრალის დაკავშირება კიურის T_C ტემპერატურასთან, ვინაიდან, რამდენადაც მეტია გაცვლითი A ინტეგრალის მნიშვნელობა, იმდენად მეტი სითბური kT_C ენერგია იქნება საჭირო ფერომაგნიტური მდგომარეობის დასაშლელად.

ამგვარად, ფერომაგნიტური მდგომარეობისათვის დამახასიათებელია სპინების მოწესრიგებული განლაგება, რის შედეგად ისინი ურთიერთპარალელურ და ერთმხრივ მიმართულ ორიენტაციას იჭერენ. ცალკეული ატომის მაგნიტური მომენტის მიმართულების დადგენა და, მაშასადამე, ნივთიერების მაგნიტური სტრუქტურის გამოკვლევა შესაძლებელი გახდა ნეიტრონების დიფრაქციის მეთოდის გამოყენებით. ცხადია, რომ კრისტალური კლასები, რომლებშიც შესაძლებელია ფერომაგნიტური სტრუქტურის არსებობა, უნდა ვეძებოთ 90 მაგნიტურ კლასებს შორის. მაგრამ ყველა ეს კლასი ვერ დააკმაყოფილებს ფერომაგნეტიკისათვის საჭირო პირობებს. საქმე იმაშია, რომ ფერომაგნეტიკს აქვს უნარი იქონიოს სპონტანური მაგნიტური მომენტი, ამიტომ ის უნდა ეკუთვნოდეს ისეთ მაგნიტურ კლასს, რომლის სიმეტრიული გარდაქმნები ტოვებენ უცვლელად მაგნიტური მომენტის, როგორც აქსიალური ვექტორის, ერთ კომპონენტს მაინც. ეს იმას ნიშნავს, რომ ფერომაგნიტური თვისებები შეიძლება ჰქონდეს იმ კრისტალებს, რომელნიც ერთდროულად პირომაგნეტიკებიც არიან. როგორც დავინახეთ, ასეთი არის 31 კლასი. 10.1 ცხრილში მოყვანილია ფერომაგნიტური კლასები და მითითებულია მაგნიტური მომენტის დასაშვები მიმართულება სიმეტრიის ელემენტების მიმართ.

ც ხ რ ი ლ ი 10. 1

ფერომაგნიტური მაგნიტური კლასები

მაგნიტური კლასები	მაგნიტური მომენტის დასაშვები მიმართულება
1, $\bar{1}$	ნებისმიერი
2	ღერძის გასწვრივ
$\bar{2}$	ღერძის მართობულად
m	სიბრტყის მართობულად
\bar{m}	სიბრტყის გასწვრივ
2/m	ღერძის გასწვრივ
$\bar{2}/m$	ღერძის მართობულად
$\bar{2} \bar{2} \bar{2} \bar{2} \bar{m} \bar{m}$	2 ღერძის გასწვრივ
$\bar{2} \bar{m} \bar{m}$	$\bar{2}$ ღერძის და m სიბრტყის მართობულად
$\bar{m} \bar{m} \bar{m}$	m სიბრტყის მართობულად
4, $\bar{4} \bar{2} \bar{2}$, 4/m, $\bar{4} \bar{m} \bar{m}$, $\bar{4}$,	მთავრი ღერძის მიმართულების გასწვრივ
4/ $\bar{m} \bar{m} \bar{m}$, $\bar{4} \bar{2} \bar{m}$, 3, $\bar{3} \bar{2}$, $\bar{3} \bar{m}$,	
$\bar{3}$, $\bar{3} \bar{m}$, $\bar{6}$, $\bar{6} \bar{m} \bar{2}$, 6 $\bar{6} \bar{2} \bar{2}$	
6/m, $\bar{6} \bar{m} \bar{m}$, 6/ $\bar{m} \bar{m} \bar{m}$	

ფერომაგნიტიზმის მსგავსად, ანტიფერომაგნიტიზმი ცალკეული ატომების მაგნიტური მომენტების მოწესრიგებულ განლაგებასთან არის დაკავშირებული. მაგრამ თუ პირველ შემთხვევაში ადგილი აქვს ელექტრონების სპინების პარალელურ და ერთმხრივ მიმართულ მოწესრიგებას, ანტიფერომაგნიტიზმისათვის დამახასიათებელია სპინების ანტიპარალელური განლაგება, როგორც ეს 10.7 ნახაზზე ისრებით არის ნაჩვენები. სპინების ასეთ განლაგებას ადგილი აქვს, როდესაც გაცვლითი ინტეგრალის მნიშვნელობა უარყოფითია.

ანტიფერომაგნიტიკის გადასვლა ჩვეულებრივ პარამაგნიტურ მდგომარეობაში ხდება გარკვეულ ტემპერატურაზე, რომელსაც ანტიფერომაგნიტური კიურის წერტილი ეწოდება. ხშირად ამ ტემპერატურას კიდევ ნეელის ტემპერატურას უწოდებენ. უფრო დაბალ ტემპერატურაზე, ვიდრე ნეელის ტემპერატურაა, პარამაგნიტიკი გადადის ანტიფერომაგნიტურ მდგომარეობაში და ელექტრონების სპინები იღებენ ანტიპარალელურ მოწესრიგებულ განლაგებას. სპინების ასეთი განლაგების შედეგად თითოეული ელემენტარული უჯრედის მაგნიტური მომენტი უტოლდება ნულს და ამიტომ ანტიფერომაგნიტიკს, ისევე როგორც პარამაგნიტიკს, არაა გააჩნია სპონტანური დამაგნიტების მაკროსკოპული მაგნიტური მომენტი. ნივთიერებაში ანტიფერომაგნიტური კიურის წერტილის გავლა შესამჩნევი ხდება მაგნიტური ამთვისებლობის ტემპერატურისაგან დამოკიდებულების მიხედვით, რომელიც გარდაქმნის წერტილში იძლევა მაქსიმუმს (ნახ. 10.7). ანტიფერომაგნიტურ არეში ტემპერატურის შემცირებასთან ერთად მცირდება η ამთვისებლობაც, რადგან ასეთ შემთხვევაში სითბური მოძრაობა უკვე ნაკლებად არღვევს სპინების ანტიპარალელურ განლაგებას. ამგვარად, ანტიფერომაგნიტიკის η ამთვისებლობა მაქსიმალურია, როდესაც $T = T_c$. ანტიფერომაგნიტური გარდაქმნის წერტილი აღინიშნება აგრეთვე სითბოტევადობისა და სითბური ფაქტორების კოეფიციენტის ანომალური სვლით.

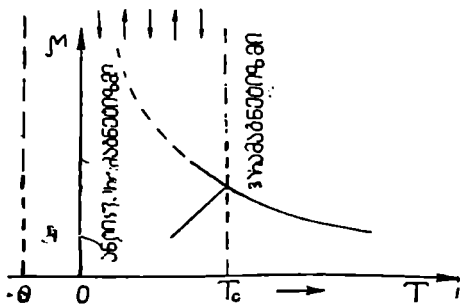
ატომების მაგნიტური მომენტების მოწესრიგებული (პარალელური ან ანტიპარალელური) განლაგების გამო, ფერომაგნიტიკები და ანტიფერომაგნიტიკები მიეკუთვნებიან მაგნიტურად მოწესრიგებულ ნივთიერებათა ჯგუფს. დღეისათვის ცნობილია ასეთი ნივთიერების საკმაოდ დიდი რაოდენობა როგორც ლითონებს შორის, ისე ნახევარგამტარებსა და დიელექტრიკებში. მაგნიტური მოწესრიგება, თავის მხრივ, დაკავშირებულია კრისტალური მესრის კვანძებთან, ვინაიდან ატომები და იონები, რომელთა სპინების განლაგების მოწესრიგებაზეა ლაპარაკი, მოთავსებული არიან მესრის კვანძებში და ქმნიან გარკვეულ

მაგნიტურ სტრუქტურას. სიმეტრიის მხრივ ეს სტრუქტურები განისაზღვრებიან მაგნიტური სიმეტრიის 90 კლასით. ფერომაგნიტურ კრისტალებში ყველა სპინის ერთნაირი მიმართულების გამო სტრუქტურის აღწერა შესაძლებელია ერთიან მაგნიტურ მესერში. ანტიფერომაგნიტურ კრისტალებში სპინების ანტიპარალელური განლაგება უკვე ამის საშუალებას არ იძლევა და ამ შემთხვევაში სტრუქტურის აღწერისათვის საჭირო ხდება რამდენიმე ქვემესრის განხილვა. უმარტივეს შემთხვევაში, როდესაც გვაქვს AB შემადგენლობის მესერი (მაგალითად, $CsCl$), შესაძლებელია მისი წარმოდგენა ერთიმეორეში ჩასმული ორი ქვემესრის სახით, ისე რომ, ერთი ქვემესრის იონის უახლოესი მეზობლები მოთავსებული იქნებიან მეორე ქვემესრის კვანძებში (ნახ. 10.8). A ქვემესრის ატომების მომენტებს ერთნაირი მიმართულება აქვთ, ხოლო B ქვემესრის ატომების მომენტები ასევე ერთი მიმართულების არიან, მაგრამ — ანტიპარალელურები A ატომების მიმართ. თითოეული ქვემესერი შედგება ქიმიურად იდენტური ატომებისაგან. ასეთ პირობებში, თუ მივიღებთ, რომ ანტიფერომაგნიტურ ურთიერთქმედებას ადგილი აქვს მხოლოდ უახლოეს მეზობლებს შორის, მაგნიტური ამთვისებლობის ტემპერატურისაგან დამოკიდებულების გამოსახულებას ექნება კიური-ვაისის კანონის სახე:

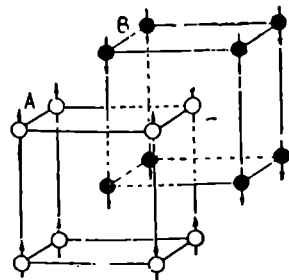
$$\eta = \frac{c}{T + \Theta} \quad (10.30)$$

და $\Theta = T_c$.

ერთ-ერთ პირველ ნივთიერებას, რომელშიც ნეიტრონების დიფრაქციის საშუალებით აღმოჩენილი იყო ცალკეული ატომების მაგნიტური მო-



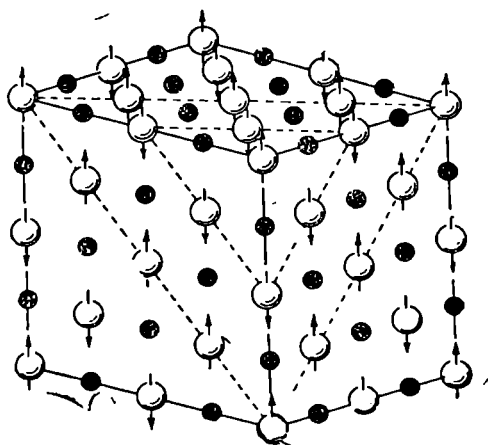
ნახ. 10.7. მაგნიტური ამთვისებლობის ტემპერატურისაგან დამოკიდებულების მრუდი ანტიფერომაგნიტური გარდაქმნის წერტილში იძლევა მაქსიმუმს.



ნახ. 10.8. AB შემადგენლობის მესერი წარმოადგენს ერთიმეორეში ჩასმულ A და B ქვემესრებს.

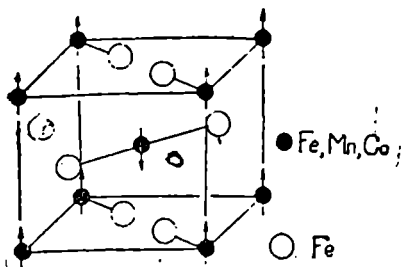
მენტების ანტიპარალელური განლაგება, წარმოადგენს მანგანუმის ჟანგი (MnO). გარკვეულ ტემპერატურულ შუალედში ანტიფერომაგნიტურ თვისებას იჩენს α -Mn, Cr, ამ ლითონებისა და რკინის, კობალტის, ნიკელის ჟანგეულები (FeO, CoO, NiO), ფტორიდები (MnF₂, FeF₂, CoF₂, NiF₂), ქლორიდები (FeCl₂, CoCl₂), ზოგიერთი იშვიათ მიწათა ლითონები და მრავალი სხვა. 10.9 ნახაზზე მოცემულია მანგანუმის ჟანგის (MnO), მაგნიტური სტრუქტურა. როგორც ნახაზი გვიჩვენებს, მანგანუმის ჟანგს აქვს NaCl-ის ტიპის სტრუქტურა. მანგანუმის იონები (Mn²⁺), რომლებიც გამოსახული არიან მსხვილი სფეროების სახით, ქმნიან წახნაგდაცენტრებულ კუბურ მესერს. ამ ატომების მაგნიტური მომენტების მიმართულება ნაჩვენებია ისრებით. მაგნიტური სტრუქტურა, რომელიც ამ ნივთიერებაში წარმოიშობა, დამახასიათებელია იმით, რომ ყოველ (111) სიბრტყეში განლაგებული ატომების მაგნიტურ მომენტებს აქვთ ერთნაირი მიმართულება, მაგრამ მომდევნო სიბრტყეებში მათი ორიენტაცია ურთიერთსაწინააღმდეგოა. ამიტომ მთლიანად უჯრედის მაგნიტური მომენტი ნულის ტოლია. ასეთი განლაგების შედეგად, კუბის წიბოს გასწვრივ სპინების ერთნაირი მიმართულების მქონე ატომები გვხვდება ატომური მესრის მხოლოდ ორი პერიოდის შემდეგ, ე. ი. მაგნიტური სტრუქტურის პერიოდი ორჯერ დიდია, ვიდრე ატომური სტრუქტურის პერიოდი.

10.10 ნახაზზე ნაჩვენებია ორვალენტიანი რკინის ფტორიდის (FeF₂) მაგნატური სტრუქტურა. ასეთივე ტიპის სტრუქტურებს ქმნიან MnF₂ და CoF₂. აქ ლითონების იონები თავსდებიან მოცულობით დაცენტრებულ-



ნახ. 10. 9. MnO მაგნიტური სტრუქტურა. ისრებით ნაჩვენებია Mn²⁺ იონის სპინების განლაგება მანგანუმის ჟანგის მესერში.

ლი ტეტრაგონალური მესრის კვანძებში, მაგრამ ისე, რომ უჯრედის წვეროებში მოთავსებულ იონებს და უჯრედის ცენტრში მოთავსებულ იონს აქვთ სპინების ანტიპარალელური მიმართულება მეოთხე რიგის ლერძის გასწვრივ. ასეთი განლაგების შედეგად მაგნიტური სტრუქტურის პერიოდი სივრცობრივი დიაგონალის გასწვრივ ორჯერ დიდდება ატომურ სტრუქტურასთან შედარებით და ამიტომ იცვლება ბრავეს მესრის ტიპი, რადგან მოცულობით დაცენტრებული უჯრედის მაგივრად ვიღებთ მარტივ უჯრედს. სამივე ეს ნივთიერება მიეკუთვნება მაგნიტური სიმეტრიის $\underline{4/mmm}$ კლასს.

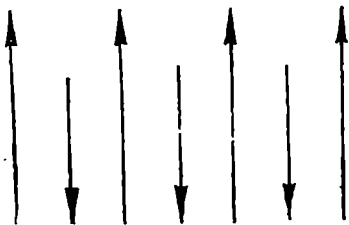


ნახ. 10. 10. FeF_2 ანტიფერომაგნიტიკის მაგნიტური სტრუქტურა.

უნდა აღინიშნოს, რომ ატომების მაგნიტური მომენტების ანტიპარალელურ განლაგებას, რომელიც ანტიფერომაგნიტურ მდგომარეობას შეესაბამება, შესაძლებელია ადგილი ჰქონდეს მაგნიტური სიმეტრიის ნებისმიერ კლასში, იმ კლასების ჩათვლითაც, რომლებიც აღნიშნული იყო ზემოთ, როგორც ფერომაგნიტური კლასები.

შ ე რ ი ტ ა ზ ი

ანტიფერომაგნიტიკში ანტიპარალელურად განლაგებული მაგნიტური მომენტები ყოველთვის არ ახდენენ ერთმანეთის სრულ კომპენსაციას. ეს ხდება მაშინ, როდესაც ნივთიერება შეიცავს სხვადასხვა სახის ატომებს, რომელთა მაგნიტური მომენტებიც შეიძლება სხვადასხვა სიდიდის იყოს. გარდა ამისა, საწინააღმდეგოდ მიმართული მაგნიტური მომენტების მქონე ატომების რიცხვიც შეიძლება არ იყოს ერთნაირი. ამ შემთხვევებში, როგორც 10.11 ნახაზიდან ჩანს, რჩება მცირე სიდიდის არაკომპენსირებული მაგნიტური მომენტი, რომელიც განსაზღვრავს სუსტ ფერომაგნიტიზმს მოცემულ ანტიფერომაგნიტიკში. ასეთ მოვლენას ადგილი აქვს არალითონური ხასიათის მაგნიტურ ნივთიერებებში, რომლებსაც ფერიტები ეწოდება. ცხადია, იმისათვის, რომ ანტიფერომაგნიტურ კრისტალში შესაძლებელი გახდეს სუსტი ფერომაგნიტიზმის გამოვლინება, აუცილებელია ეს კრისტალი თავისი სიმეტრიით ეკუთვნოდეს 10.1 ცხრილში მოცემულ ფერომაგნიტური მაგნიტური სიმეტრიის კლასებს. ამიტომ ფერიტები მხოლოდ ამ კლასების შესაბამისი სიმეტრიის



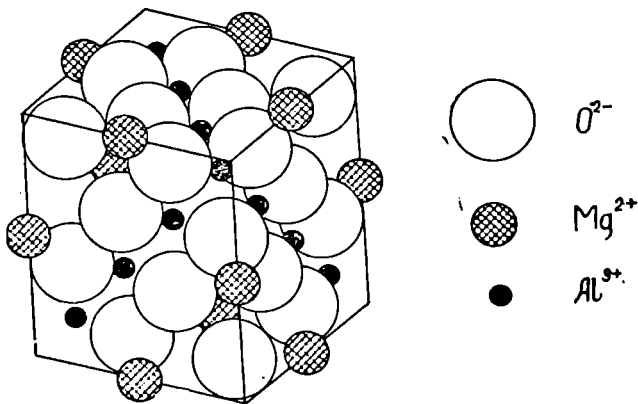
ნახ. 10. 11. ფერიტებისათვის დამახასიათებელი სპინების განლაგება.

კრისტალებს შორის შეიძლება არსებობდნენ.

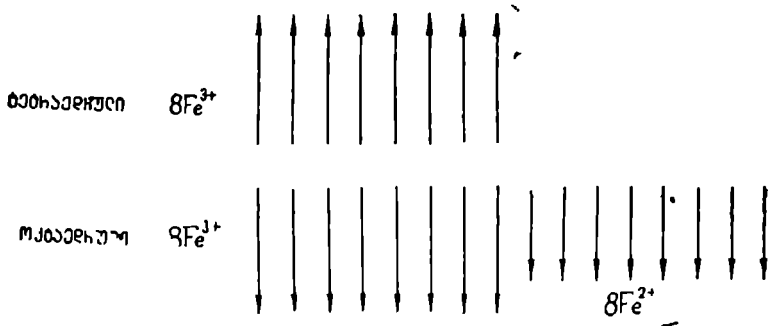
ფერიტებმა უაღრესად ფართო გამოყენება ჰპოვეს თანამედროვე ტექნიკის უმნიშვნელოვანეს დარგებში და განსაკუთრებით მაღალი სიხშირეების ტექნიკაში მათი დიდი კუთრი წინამძღვრობის გამო. საკმარისია აღინიშნოს, რომ ისინი წარმოადგენენ ელექტრონული გამო-

მთვლელი მანქანების მეხსიერების მექანიზმის ძირითად ნაწილს და რომ ამ მანქანებისათვის ფერიტული ტორაიდების რიცხვი, რომელსაც მრეწველობა უშვებს, ასეულ მილიარდს აღწევს.

უმარტივესი ფერიტები წარმოადგენენ ლითონების ორმაგ ჟანგულებს, რომელთა ზოგად ქიმიურ ფორმულას აქვს შემდეგი სახე: $M^{II}O \cdot Fe_2O_3$, სადაც M^{II} ორვალენტიანი ლითონის იონია; მაგალითად, Mn^{2+} , Mg^{2+} , Cu^{2+} , Co^{2+} , Ni^{2+} , Zn^{2+} , Fe^{2+} , Cd^{2+} ან იგივე ფორმულა შეიძლება დაიწეროს სხვაგვარად $M^{II}M^{III}_2O_4$; აქ მეორე ლითონი Mn^{III} , სამვალენტია ლითონის იონია, მაგალითად, Al^{3+} , V^{3+} , Cr^{3+} , Mn^{3+} , Fe^{3+} , Ca^{3+} , Zn^{3+} და ა. შ. ამ სახის ნაერთებს შპინელის ტიპის ($MgAl_2O_4$ —მინერალის სახელწოდების მიხედვით) კუბური სტრუქტურა აქვს. შპინელის სტრუქტურა იქმნება ჟანგბადის O^{2-} იონების კუბური უმჭიდროესი წყობის შედეგ-



ნახ. 10.12. შპინელის ($MgAl_2O_4$) კრისტალური სტრუქტურა. Mg^{2+} იონები მოთავსებულია ტეტრაედრულ სივრცეებში, ხოლო Al^{3+} იონები იჭერენ ოქტაედრულ პოზიციებს.



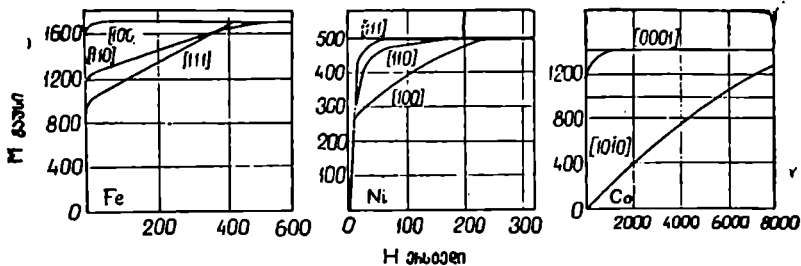
ნახ. 10. 13. სპინების განლაგების სქემა მაგნეტიკში ($FeO \cdot Fe_2O_3$).

გად (ნახ. 10.12). MFe_2O_4 შპინელის ელემენტარული უჯრედი 8 მოლეკულას შეიცავს, ე. ი. მასში ჟანგბადის 32 ატომია, 16 — სამვალენტიანი რკინის იონი და 8 — M ტიპის ლითონის იონი. ლითონების კათიონებს დაკავებული აქვთ 8 ტეტრაედრული და 16 ოქტაედრული სივარცლეულები. სულ ამ უჯრედში, კუბური უმჭიდროესი წყობის შესაბამისად, არის 32 ოქტაედრული და 64 ტეტრაედრული სივარცლეულები. მაგნეტიკის შემთხვევაში ($FeO \cdot Fe_2O_3$) ორვალენტიანი რკინის 8 იონი ($8Fe^{2+}$) და სამვალენტიანი რკინის 8 იონი ($8Fe^{3+}$) თავსდება 16 ოქტაედრულ მდებარეობაში (სივარცლეულებში), ხოლო სამვალენტიანი რკინის დანარჩენი 8 იონი — ტეტრაედრულ მდებარეობაში (ნახ. 10.13). Fe^{3+} იონების მომენტები ანტიპარალელურად არიან განლაგებული და ამიტომ ერთმანეთს აბათილებენ. გაუბათილებელი რჩება მხოლოდ Fe^{2+} იონების მომენტები, რომელნიც განაპირობებენ ფერომაგნეტიზმის წარმოშობას.

არსებობს მოწესრიგებული მაგნიტური მომენტების მქონე კრისტალების (ფერიტების) სხვა სტრუქტურული ტიპებიც, რომლებსაც ჩვენ აქ არ განვიხილავთ.

§ 42. დამაგნიტების მიმართულება. მაგნიტოსტრიქცია

10.14 ნახაზზე მოცემულია რკინის, ნიკელისა და კობალტის მონოკრისტალების დამაგნიტების მრუდები სხვადასხვა კრისტალოგრაფიული მიმართულებისათვის ხონდისა და კაიას მიხედვით. როგორც ვხედავთ, ფერომაგნიტური ნივთიერების მონოკრისტალებში მუშაობა, რომელიც უნდა შესრულდეს ნაჯერობის დამაგნიტების მისაღწევად, დამოკიდებულია მიმართულებაზე. ზოგიერთი კრისტალოგრაფიული ღერძის გასწვრივ ნაჯერი დამაგნიტების მიღწევა შესაძლებელია იოლად, მცირე მუ-



ნახ.10.14. რკინის, ნიკელის და კობალტის მონოკრისტალების სხვადასხვა მიმართულებით დამაგნიტების მრუდები (ხონდი და კაია).

შაობის დახარჯვით. ასეთ მიმართულებებს იოლი დამაგნიტების მიმართულებები ეწოდება (მაგალითად, $\langle 100 \rangle$ რკინისათვის). ამავე დროს არსებობს მიმართულებები, რომელთა გასწვრივ კრისტალის დამაგნიტება მოითხოვს მაქსიმალურ მუშაობას. ეს არის ძნელი დამაგნიტების მიმართულებები ($\langle 1010 \rangle$ კობალტში). სხვაობა ამ ორი მიმართულებით შესრულებულ მუშაობებს შორის წარმოადგენს კრისტალების მაგნიტური ან იზოტროპიის ენერჯიას. 10.14 ნახაზზე მოყვანილი მრუდების საშუალებით შესაძლებელია მოცულობის ერთეულის დამაგნიტების ენერჯია განისაზღვროს როგორც HdM . ამავე მრუდებით შეიძლება დადგინდეს ანიზოტროპიის ენერჯიაც. ცდები გვიჩვენებენ, რომ ნაჭერობამდე კრისტალის დამაგნიტება, ძნელად დამაგნიტების მიმართულებით, მოითხოვს გაცილებით მეტი ენერჯიის დახარჯვას, ვიდრე იოლი დამაგნიტების მიმართულებით. კობალტისათვის, მაგ., ანიზოტროპიის ენერჯია დაახლოებით $5 \cdot 10^6$ ერჯი/სმ³ ტოლია.

თითოეული კრისტალური სინგონიისათვის არსებობს მაგნიტური ანიზოტროპიის ენერჯიის კრისტალოგრაფიული მიმართულებისაგან დამოკიდებულების ფორმა, რომელიც კრისტალოგრაფიული ღერძების მიმართ დამაგნიტების მიმართულების ($\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$) მგეზავ კოსინუსებზე არის დამოკიდებული. მაგალითად, კუბური სინგონიისათვის მას აქვს შემდეგი სახე

$$U_3 = k_1(\alpha_1^2\alpha_2^2 + \alpha_2^2\alpha_3^2 + \alpha_3^2\alpha_1^2) + k_2\alpha_1^2\alpha_2^2\alpha_3^2. \quad (10.31)$$

სადაც k_1, k_2 მუდმივი სიდიდეებია.

რკინისათვის იოლი დამაგნიტების მიმართულებებია $\langle 100 \rangle$, ხოლო კუბის დიაგონალები $\langle 111 \rangle$ ძნელი დამაგნიტების მიმართულებებია. ჰექსაგონალური სინგონიისათვის

$$U_3 = k_1' \sin^2\Theta + k_2'' \sin^4\Theta. \quad (10.32)$$

აქ Θ კუთხეა დამაგნიტების ვექტორსა და ჰექსაგონალურ ღერძს შორის. კობალტისათვის $k_1 = 4,1 \cdot 10^6$ ერგი/სმ³, $k_2 = 1,0 \cdot 10^6$ ერგი/სმ³. ჰექსაგონალური ღერძი იოლი დამაგნიტების ღერძია, ხოლო ნებისმიერი მიმართულება მის მართობულად — ძნელი დამაგნიტების მიმართულება.

მაგნიტური ანიზოტროპიის ენერგია დამოკიდებულია მესრის დეფორმაციაზე. მაგ., თუ კუბს გავჭიმავთ დიაგონალის გასწვრივ და მოვახდენთ მის მცირედ გარომბოედრებას, ეს შეცვლის სხვაობას იოლი და ძნელი დამაგნიტების ენერგიებს შორის და შეიძლება შეამციროს ანიზოტროპიის ენერგია. ამიტომ, თუ კრისტალის დეფორმაციით გამოწვეული ანიზოტროპიის ენერგიის შემცირება უფრო მეტი იქნება, ვიდრე დეფორმაციით მიღებული დრეკადი ენერგია, ასეთი დეფორმაცია ენერგეტიკულად უფრო ხელსაყრელი იქნება და განხორციელდება კრისტალურ მესერში. ეს არის მიზეზი იმისა, რომ ხშირად დამაგნიტების ყოველგვარ ცვლილებას კრისტალი გაჭიმვით ან შეკუმშვით პასუხობს. ამავე მიზეზით ხდება ფერომაგნიტური კრისტალების დეფორმაცია კიურის წერტილის გავლის დროს.

ამ მოვლენას, რომელიც პიეზომაგნიტიზმის საწინააღმდეგო ეფექტს წარმოადგენს, ეწოდება მაგნიტოსტრიქცია.

მაგნიტოსტრიქციული გაჭიმვის ან შეკუმშვის მიმართულება დამოკიდებულია დამაგნიტების (ველი) მიმართულებაზე კრისტალოგრაფიული ღერძების მიმართ. თუ ამ მიმართულების მგვხვ კოსინუსებს აღვნიშნავთ α_i , მაშინ კრისტალში წარმოშობილი ϵ_{ij} დეფორმაციისათვის შეიძლება დაიწეროს

$$\epsilon_{ij} = \lambda_{ijkl} \alpha_k \alpha_l. \quad (10.33)$$

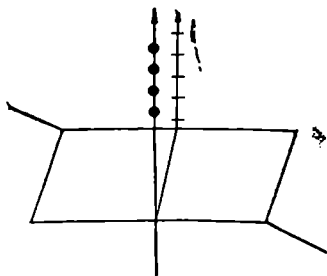
აქ λ_{ijkl} მაგნიტოსტრიქციული მუდმივებია. ისინი შეადგენენ მეოთხე რანგის ტენზორს. მაგნიტოსტრიქციული მუდმივები განისაზღვრებიან იმ შეფარდებითი წაგრძელებით, რომელსაც მიიღებს ნაჭერობამდე დამაგნიტებული კრისტალი ველის მიმართულებით. ამ მუდმივებს სხვადასხვა მიმართულებით შეიძლება ჰქონდეთ სხვადასხვა ნიშანი; მაგ., ნიკელის და კობალტის კრისტალები ნაჭერობამდე დამაგნიტების დროს იკუმშებიან დამაგნიტების მიმართულების გასწვრივ და გრძელდებიან ამ მიმართულების მართობულად. რკინა, პირიქით, გრძელდება დამაგნიტების მიმართულებით და ა. შ.

1. Д о р ф м а н Я. Г. Магнитные свойства и строение веществ. Изд-во Технико-теоретической литературы, 1955.
 2. Ж д а н о в Г. С. Физика твердого тела. Изд-во МГУ, 1961.
 3. К и т т е л ь Ч. Введение в физику твердого тела. Изд-во физико-математической литературы, 1963.
 4. В о н с о в с к и й С. В. Магнетизм микрочастиц. Изд-во «Наука», 1973.
 5. С м о л е н с к и й Г. А. и др. Физика магнитных диэлектриков. Изд-во «Наука», Л., 1974.
-

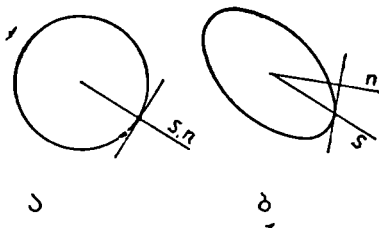
კრისტალების ოპტიკური თვისებები

§ 43. ორმაგი სხივთება კრისტალებში

კუბური სისტემის კრისტალებს გარდა, ნებისმიერი სხვა სიმეტრიის კრისტალებში სინათლის გავლის დროს ადგილი აქვს მოვლენას, რომელსაც ორმაგი სხივთება ეწოდება. ეს მოვლენა მდგომარეობს შემდეგში. თუ მაგალითად, კალციტის (CaCO_3) კრისტალის რომბოედრის გვერდის მართობად გავატარებთ სხივების ვიწრო კონას, ის დაიშლება ორ კონად. ერთი კონა გაივლის კრისტალს გარდატეხის გარეშე, ხოლო მეორე კონა კრისტალის შიგნით გადაიხრება პირველი კონისაგან და კრისტალიდან გამოსვლის შემდეგ ამ კონის პარალელურ მიმართულებას მიიღებს (ნახ. 11.1). პირველ სხივებს ჩვეულებრივ სხივებს უწოდებენ, ხოლო მეორეებს — არაჩვეულებრივ სხივებს. ამ მიზეზის გამო ნებისმიერი საგანი, თუ მას კრისტალური ფირფიტის საშუალებით ვათვალიერებთ, გარებული ჩნდება. ცნობილია, რომ კრისტალიდან გამოსული ორივე სხივი მთლიანად პოლარიზებულია. არაჩვეულებრივ სხივებში რხევები ხდება ორივე სხივის განლაგების სიბრტყეში, ხოლო ჩვეულებრივი სხივების რხევები — ამ სიბრტყისადმი მართობ სიბრტყეში.



ნახ. 11. 1. ორმაგი სხივთება კალციტის (CaCO_3) კრისტალურ ფირფიტაში. სხივი ეცემა რომბოედრის მართობად.



ნახ. 11. 2. ა. ტალღური ზედაპირი იზოტროპულ სხეულში. ბ. ტალღური ზედაპირი ანიზოტროპულ სხეულში. S-სხივი და n-ნორმალი არ თანხვედებიან.

არჩევენ ბუნებრივ და ხელოვნურ ორმაგ სხივთეტებას. ბუნებრივი ორმაგი სხივთეტება კრისტალებში დაკავშირებულია მათ ბუნებრივ ანიზოტროპიულობასთან. ხელოვნური ორმაგი სხივთეტება შეიძლება გამოწვეული იყოს გარეშე ელექტრული ველის მოქმედებით (ელექტროოპტიკური ეფექტი) ან მექანიკური ძაბვების მოქმედებით (ფოტოდრეკადობა).

წარმოვიდგინოთ, რომ კრისტალის შიგნით აღებულია სინათლის წერტილოვანი წყარო. სინათლის ტალღა ამ წერტილიდან ვრცელდება კრისტალში ყველა მიმართულებით გარკვეული სიჩქარით. თუ დავაფიქსირებთ ტალღის მიერ დროის ერთეულში ყველა მიმართულებით გავლილ მანძილს, მივიღებთ ზედაპირს, რომელსაც ტალღური ზედაპირი ეწოდება. ცხადია, რომ იზოტროპიულ სხეულებში, სადაც სინათლე ერთნაირი სიჩქარით ვრცელდება, ყველა მიმართულებით ტალღური ზედაპირი სფეროს წარმოადგენს. ამ სფეროს თითოეული რადიუს-ვექტორი თანხვედბა სინათლის გავრცელების მიმართულებას და, მაშასადამე, წარმოადგენს სინათლის სხივს. მაგრამ სფერული ზედაპირისათვის რადიუს-ვექტორის მიმართულება იგივეა, რაც ტალღური ზედაპირისადმი ნორმალის მიმართულება (ნახ.11.2 ა); ამიტომ იზოტროპიულ სხეულებში სინათლის სხივი და სინათლის ნორმალი თანხვედბიან ერთმანეთს. კრისტალებში სინათლის გავრცელების სიჩქარეს სხვადასხვა მიმართულებით შეიძლება სხვადასხვა მნიშვნელობა ჰქონდეს; ამიტომ ტალღურ ზედაპირს უფრო რთული ფორმა ექნება. ამ ზედაპირის ფორმის გამოსარკვევად გავიხსენოთ, რომ დიელექტრიკულ შეღწევადობათა ტენზორის მახასიათებელი ზედაპირი, (9. 67) მიხედვით, წარმოადგენს ელიფსოიდს

$$\frac{x_1^2}{\left(\frac{1}{\sqrt{\epsilon_1}}\right)^2} + \frac{x_2^2}{\left(\frac{1}{\sqrt{\epsilon_2}}\right)^2} + \frac{x_3^2}{\left(\frac{1}{\sqrt{\epsilon_3}}\right)^2} = 1. \quad (11.1)$$

რომლის ნახევარღერძები $\frac{1}{\sqrt{\epsilon_1}}$, $\frac{1}{\sqrt{\epsilon_2}}$, $\frac{1}{\sqrt{\epsilon_3}}$ განისაზღვრებიან სამი ϵ_1 , ϵ_2 , ϵ_3 მთავარი დიელექტრიკული შეღწევადობით; ამავე დროს, ელექტრული ინდუქციის \vec{D} ვექტორის ბოლო, კრისტალში შემოწერს ელიფსოიდს, რომელსაც დიელექტრიკულ შეღწევადობათა ელიფსოიდი ეწოდება და შეიძლება შემდეგი სახით დაწიეროს

$$\frac{x_1^2}{(\sqrt{\epsilon_1})^2} + \frac{x_2^2}{(\sqrt{\epsilon_2})^2} + \frac{x_3^2}{(\sqrt{\epsilon_3})^2} = 1. \quad (11.2)$$

ამ ელიფსოიდის ნახევარღერძების სიგრძე არის $\sqrt{\epsilon_1}$, $\sqrt{\epsilon_2}$, $\sqrt{\epsilon_3}$. თუ მხედველობაში მივიღებთ ოპტიკის კურსიდან ცნობილ ტოლობებს:

$$n = \sqrt{\epsilon}; \quad v = \frac{c}{n} = \frac{c}{\sqrt{\epsilon}}; \quad (11.3)$$

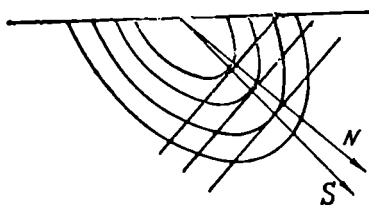
სადაც c სინათლის გავრცელების სიჩქარეა ვაკუუმში, ხოლო n — ნივთიერების გარდატეხის მაჩვენებელი, მაშინ დიელექტრიკულ შეღწევალობათა მთავარი მნიშვნელობებისათვის მივიღებთ:

$$n_1 = \sqrt{\epsilon_1}; \quad n_2 = \sqrt{\epsilon_2}; \quad n_3 = \sqrt{\epsilon_3}; \quad v_1 = \frac{c}{\sqrt{\epsilon_1}}; \quad v_2 = \frac{c}{\sqrt{\epsilon_2}}; \quad v_3 = \frac{c}{\sqrt{\epsilon_3}}.$$

ჩავსვათ ეს მნიშვნელობები (11.1)-ში

$$\frac{x_1^2}{v_1^2} + \frac{x_2^2}{v_2^2} + \frac{x_3^2}{v_3^2} = 1, \quad (11.4)$$

აქ v_1, v_2, v_3 სინათლის მთავარი სიჩქარეებია კრისტალში. (11.4) ელიფსოიდს ფრენელის ელიფსოიდი ეწოდება. ის წარმოადგენს კრისტალში სინათლის გავრცელების ტალღურ ზედაპირს. ამ ზედაპირის თითოეული რადიუს-ვექტორის მიმართულება თანხვდება სინათლის სხივის გავრცელების მიმართულებას, ე. ი. მიმართულებას, რომელშიც რეალურად, წერტილიდან წერტილში ხდება სინათლის რხევების გადაცემა, გადაეცემა სინათლის ენერგია. იმისათვის, რომ მივიღოთ აღებული რადიუს-ვექტორის შესაბამისი ნორმალის მიმართულება, საჭიროა რადიუს-ვექტორისა და ელიფსოიდის გადაკვეთის წერტილში გავატაროთ მხები სიბრტყე და ტალღური ზედაპირის ცენტრიდან აღვმართოთ ნორმალი ამ სიბრტყის მიმართ (ნახ. 11.2 ბ). სხივისა და ნორმალის მიმართულებები ერთმანეთს თანხვებიან მხოლოდ ელიფსოიდის მთავარიღერძების გას-



ნახ. 11.3. სინათლის S სხივი წარმოადგენს რხევების გადაცემის მიმართულებას. სინათლის N ნორმალი წარმოადგენს სინათლის ტალღების გავრცელების მიმართულებას.

წერტილში მიმართულებებისათვის ისინი ერთმანეთს არ თანხვებიან. როგორც 11.3 ნახაზიდან ჩანს, ნორმალი განსაზღვრავს სინათლის ტალღების გავრცელების (ტალღური ფრონტის) მიმართულებას. ამიტომ, კრისტალში საჭიროა განვასხვავოთ სინათლის v_s სიჩქარე სხივის გასწვრივ და სინათლის v_n სიჩქარე — ნორმალის მი-

მართულებით. ვინაიდან სინათლის გარდატეხის კანონები მართებულია ტალღური ზედაპირების ნორმლებისათვის, გარდატეხის მაჩვენებელი განისაზღვრება შემდეგი სახით

$$n = \frac{c}{v_n}. \quad (11.5)$$

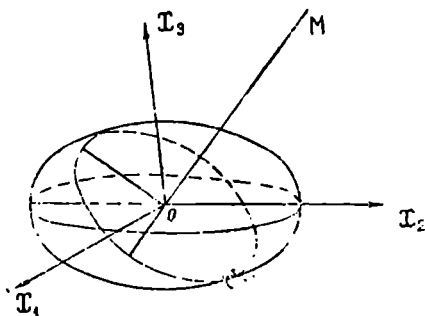
ფრენელის ელიფსოიდის მსგავსად, (11. 2) განტოლების გამოყენებით, შეიძლება დაიწეროს გარდატეხის მაჩვენებლების ელიფსოიდი

$$\frac{x_1^2}{n_1^2} + \frac{x_2^2}{n_2^2} + \frac{x_3^2}{n_3^2} = 1. \quad (11.6)$$

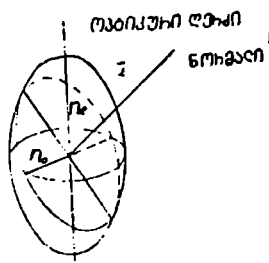
(11. 6) ელიფსოიდის ოპტიკური ინდიკატრისა ეწოდება: აქ n_1 , n_2 , n_3 კრისტალის მთავარი გარდატეხის მაჩვენებლებია, ხოლო x_1 , x_2 , x_3 კოორდინატა ლერძები მიმართული არიან დიელექტრიკული შეღწევალობის $[E_{ij}]$ ტენზორის მთავარი ლერძების პარალელურად.

| კრისტალებში ორმაგი სხივთეხის არსებობის შედეგად, როგორც ფრენელის ელიფსოიდი, ისე ოპტიკური ინდიკატრისა ორმაგ ოპტიკურ ფართეულებს წარმოადგენენ. თუ გავზომავთ ჩვეულებრივი და არაჩვეულებრივი სხივების გარდატეხის მაჩვენებლებს შესაბამისი ნორმალეხის სხვადასხვა მიმართულებისათვის, შესაძლებელია ავაგოთ გარდატეხის მაჩვენებლების ორმაგი ფართეული. როგორც ირკვევა, ეს ორმაგი ფართეული შედგება სფეროსა და ელიფსოიდისაგან. სფერო შეესაბამება ჩვეულებრივ სხივებს. ეს იმას ნიშნავს, რომ ჩვეულებრივი სხივების გარდატეხის მაჩვენებელი ერთნაირია ყველა მიმართულებით და, მაშასადამე, ეს სხივები ერთი და იგივე სიჩქარით ვრცელდებიან კრისტალში. არაჩვეულებრივი სხივების გარდატეხის მაჩვენებლების განაწილება კრისტალში ხდება ელიფსოიდის სახით. (11. 6) წარმოადგენს ამ ელიფსოიდის განტოლებას. ზოგად შემთხვევაში ინდიკატრისა სამღერძა ელიფსოიდია, რომლის ნახევარღერძები კრისტალის მთავარი გარდატეხის მაჩვენებლებია. არსებობს მიმართულება, რომელშიც სფერო და ელიფსოიდი ერთმანეთს ეხებიან ორ დიამეტრალურად საწინააღმდეგო წერტილში. ამ მიმართულებით ჩვეულებრივ და არაჩვეულებრივ სხივებს გააჩნიათ ერთნაირი გარდატეხის მაჩვენებლები და, მაშასადამე, ვრცელდებიან ერთნაირი სიჩქარით. ასეთ მიმართულებას კრისტალის ოპტიკური ლერძი ეწოდება. ოპტიკური ლერძის გასწვრივ ორმაგ სხივთეხას ადგილი არ აქვს.

ოპტიკურ ინდიკატრისას აქვს ერთი მნიშვნელოვანი თვისება, რომელიც შემდეგში მდგომარეობს. როგორც აღნიშნული იყო, ნებისმიერი მიმართულებით კრისტალში ვრცელდება ორი ტალღა, რომლებსაც ერთი ნორმალი (გავრცელების მიმართულება) აქვთ. ავიჩიოთ რომელიმე მიმართულება OM (ნახ. 11.4) და გამოვარკვიოთ როგორი იქნება იმ ტალღების გარდატეხის მაჩვენებლები, რომლებიც OM მიმართულებით გავრცელდებიან. ამისათვის სამკარისია გავატაროთ მაჩვენებლების ელიფსოიდის (ინდიკატრისას) ცენტრალური კვეთა სიბრტყით, რომელიც OM მიმართულების მართობი იქნება. ასეთი კვეთა წარმოადგენს ელიფსს. ამ ელიფსის ნახევარღერძების სიგრძეები განსაზღვრავენ იმ ორი ტალღის გარდატეხის მაჩვენებლებს, რომლებიც OM



ნახ. 11. 4. ოპტიკური ინდიკატრისა. O.M ნორმალთან დაკავშირებულია ორი ტალღა, რომელთა გარდატეხის მაჩვენებლები ელიფსის ნახევარღერძებით განისაზღვრებიან.



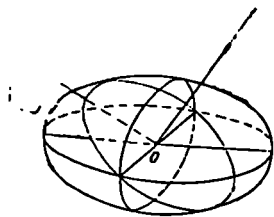
ნახ. 11. 5. ერთღერძა კრისტალუბის ოპტიკური ინდიკატრისა.

მიმართულებით ვრცელდებიან. კერძოდ, თუ ტალღური ნორმალი მიმართულია OX_1 ღერძის პარალელურად, შესაბამისი ტალღების გარდატეხის მაჩვენებლები იქნებიან მთავარი მაჩვენებლები n_2 და n_3 . აქედან გამომდინარეობს, რომ კუბურ კრისტალებში, რომლებსაც ორმაგი სხივთება არ აქვთ, ოპტიკური ინდიკატრისა უნდა წარმოადგენდეს სფეროს, ვინაიდან სფეროს ნებისმიერი ცენტრალური კვეთა წრესაა.

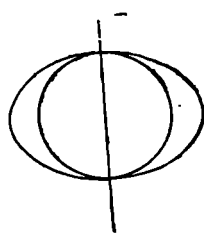
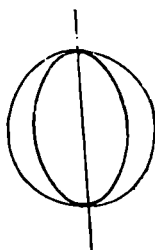
ოპტიკური ინდიკატრისას ფორმა და განლაგება კრისტალებში ექვემდებარება ნეიმანის პრინციპს. ამიტომ ჰექსაგონალურ, ტეტრაგონალურ და რომბოედრულ კრისტალებში, რომლებსაც ერთი მთავარი ღერძი გააჩნიათ, ოპტიკური ინდიკატრისა ამ ღერძის ირგვლივ ბრუნვის ელიფსოიდს წარმოადგენს (ნახ. 11. 5). თუ ჩვეულებრივი სხივების გარდატეხის მაჩვენებელს n_0 აღვნიშნავთ, არაჩვეულებრივი სხივების გარდატეხის მაჩვენებელს — n_e , ხოლო ბრუნვის ღერძად ავირჩევთ X_3 ღერძს, მაშინ ინდიკატრისას განტოლება აღნიშნული სინგონიის კრისტალებისათვის მიიღებს შემდეგ სახეს

$$\frac{x_1^2}{n_0^2} + \frac{x_2^2}{n_0^2} + \frac{x_3^2}{n_e^2} = 1.$$

ამ ელიფსოიდის მხოლოდ ერთი ცენტრალური კვეთა წარმოადგენს წრესა. ეს კვეთა მდებარეობს მთავარი ღერძის მართობ სიბრტყეში და, მასასადამე, ბრუნვის ღერძის მიმართულებით ორმაგ სხივთებას ადგილი არა აქვს. ჰექსაგონალური, ტეტრაგონალური და რომბოედრული სისტემების კრისტალებში 6, 4 და 3 რიგის ღერძები წარმოადგენენ ოპტიკურ ღერძებს. იმის გამო, რომ ბრუნვის ელიფსოიდს გააჩნია მხოლოდ



ნახ. 11. 6. ორღერძა კრისტალების ოპტიკური ინდიკატრისა.



ნახ. 11. 7. ერთღერძა კრისტალის ტალღური ზედაპირები.

ერთი ასეთი სახის ცენტრალური კვეთა, აღნიშნული ტიპის კრისტალებს ოპტიკურად ერთღერძა კრისტალები ეწოდება. კრისტალი ითვლება დადებითად. თუ არაჩვეულებრივი სხივების გარდატეხის მაჩვენებელი მეტია შესაბამისი ჩვეულებრივი სხივების გარდატეხის მაჩვენებელზე $n_e > n_o$, და უარყოფითად — თუ $n_e < n_o$.

რომბული, მონოკლინური და ტრიკლინური სისტემების კრისტალებისათვის ოპტიკური ინდიკატრისა სამღერძა ელიფსოიდს წარმოადგენს. როგორც 11.6 ნახაზიდან ჩანს, სამღერძა ელიფსოიდში შესაძლებელია გატარდეს წრიული სახის ორი ცენტრალური კვეთა. ეს იმას ნიშნავს, რომ ასეთ კრისტალებში არსებობს ორი მიმართულება, სადაც ორმაგ სხივთეხას ადგილი არა აქვს. ამიტომ მათ ოპტიკურად ორღერძა კრისტალები ეწოდება.

ასეთივე ორმაგი ფართეულების აგება შესაძლებელია ფრენელის (11.4) ელიფსოიდის საშუალებით, თუ გადაზომილი იქნება ჩვეულებრივი და არაჩვეულებრივი სხივების სიჩქარეები. მიღებული ფართეულები. ამ შემთხვევაში, წარმოადგენენ ტალღურ ზედაპირებს. ჩვეულებრივი სხივების ტალღური ზედაპირი სფეროს წარმოადგენს, ხოლო არაჩვეულებრივი სხივებისათვის — ელიფსოიდს. იმ მიმართულებით, სადაც სფერო და ელიფსოიდი ერთმანეთს ეხებიან. ორივე ტალღა ერთი და იგივე სიჩქარით ვრცელდება. ეს იქნება ოპტიკური ღერძის მიმართულება. 11. 7 ნახაზზე მოცემულია ერთღერძა კრისტალების ტალღური ზედაპირების კვეთები დადებითი და უარყოფითი კრისტალებისათვის. გარდატეხის მაჩვენებლებთან შედარებით, აქ დამოკიდებულება იქნება საწინააღმდეგო, ე. ი. კრისტალი იქნება დადებითი, თუ $v_e < v_o$, და უარყოფითი. თუ $v_e > v_o$.

ელექტრული ველის ან გარეშე ძაბვების მოქმედების შედეგად კრისტალების ოპტიკური თვისებები იცვლებიან. ისეთი ოპტიკურად იზოტროპული სხეულებიც კი, როგორცაა, მინა ან კუბური სიმეტრიის კრისტალები, გარეშე ველის ან ძაბვების მოქმედების შედეგად იჩენენ ორმაგი სხივთეხის თვისებას, ხოლო კრისტალებში, რომლებშიც ორმაგი სხივთეხის ადგილი ჰქონდა, ეს მოვლენა განიცდის გარკვეულ ცვლილებას. კრისტალების ოპტიკური თვისებების ცვლილება, უწინარეს ყოველისა, თავის გამოსახულებას პოულობს ოპტიკური ინდიკატრისას ფორმისა და მისი განლაგების ცვლილებაში.

ოპტიკური ინდიკატრისას განტოლება შეიძლება დაიწეროს სხვა სახით, თუ შემოვიღებთ აღნიშვნებს:

$$B_1 = \frac{1}{n_1^2} = \frac{1}{\epsilon_1}; \quad B_2 = \frac{1}{n_2^2} = \frac{1}{\epsilon_2}; \quad B_3 = \frac{1}{n_3^2} = \frac{1}{\epsilon_3}. \quad (11.7)$$

მაშინ (11.6) განტოლება მიიღებს შემდეგ სახეს

$$B_1 x_1^2 + B_2 x_2^2 + B_3 x_3^2 = 1. \quad (11.8)$$

ამ განტოლებაში B_1, B_2, B_3 წარმოადგენენ მთავარ დიელექტრიკულ შეღწევადობათა შებრუნებულ სიდიდეებს: მათ შეფარდებითი დიელექტრიკული შეუღწევადობები ეწოდება. ვინაიდან $|\epsilon_{ij}|$ წარმოადგენს მეორე რანგის სიმეტრიულ ტენზორს, B_{ij} კოფიციენტებიც კმნიან მეორე რანგის დიელექტრიკულ შეუღწევადობათა $|B_{ij}|$ ტენზორს, ხოლო განტოლება (11.8) ამ ტენზორის მახასიათებელ ზედაპირს წარმოადგენს, როდესაც x_1, x_2, x_3 ტენზორის მთავარი ღერძებია. თუ კოორდინატთა ღერძები არ არიან არჩეული $|B_{ij}|$ ტენზორის მთავარ ღერძებად, მაშინ (11.8) განტოლება დაიწერება ზოგადი სახით

$$B_{11}x_1^2 + B_{22}x_2^2 + B_{33}x_3^2 + 2B_{23}x_2x_3 + 2B_{31}x_3x_1 + 2B_{12}x_1x_2 = 1, \quad (11.9)$$

ან, მოკლედ

$$B_{ij}x_i x_j = 1. \quad (11.10)$$

$|B_{ij}|$ ტენზორის კომპონენტები დაკავშირებული არიან გარდატეხის მაჩვენებლებთან (11.7) ტოლობების საშუალებით. სადაც n_1, n_2, n_3 კრისტალის მთავარი გარდატეხის მაჩვენებლებია: ამიტომ (11.8), (11.9) და (11.10) წარმოადგენენ ოპტიკური ინდიკატრისას განტოლებებს. როგორც ვხედავთ, ოპტიკური ინდიკატრისას განტოლების კოფიციენტები იმავე დროს დიელექტრიკულ შეუღწევადობათა $|B_{ij}|$ ტენზორის კომპონენტებია.

ზემოთ ნაჩვენები იყო, რომ დიელექტრიკული შეღწევადობა გარეშე მოქმედი ველის სისხირის ფუნქციას წარმოადგენს. ამავე დროს, ის

მგრძნობიარეა კრისტალზე მოდებული ძაბვებისა და დეფორმაციების მიმართ. ეს იმას ნიშნავს, რომ აღნიშნული მიზეზების გავლენით შეიძლება მოხდეს დიელექტრიკული შეღწევადობის და, მაშასადამე, გარდატეხის მაჩვენებლის მცირედი შეცვლა, რაც გამოიწვევს ოპტიკური ინდიკატრისას ზომის, ფორმისა და კრისტალში მისი განლაგების ცვლილებას. ეს ცვლილება, რა თქმა უნდა, იმოქმედებს $|B_{ij}|$ ტენზორის კომპონენტებზე და ამიტომ (11. 9) განტოლება დაიწერება ასეთი სახით

$$B'_{11}x_1^2 + B'_{22}x_2^2 + B'_{33}x_3^2 + 2B'_{21}x_2x_1 + 2B'_{31}x_3x_1 + 2B'_{12}x_1x_2 = 1. \quad (11.11)$$

სხვაობები: $B'_{11} - B_{11}$, $B'_{22} - B_{22}$... რომლებსაც ჩვენ მოკლედ აღვნიშნავთ ΔB_i , განსაზღვრავენ ინდიკატრისას შეფარდებითს დეფორმაციას.

გარეშე ელექტრული ველის გავლენით კრისტალის გარდატეხის მაჩვენებლის შეცვლას ელექტროოპტიკური ეფექტი ეწოდება. თუ ინდიკატრისას დეფორმაცია გამოწვეულია გარეშე ელექტრული \vec{E} ველის მოქმედებით, მაშინ ელექტროოპტიკური ეფექტის განმსაზღვრელ განტოლებას ექნება შემდეგი სახე

$$\Delta B_{ij} = f_{ijk} E_k. \quad (11.12)$$

f_{ijk} კოეფიციენტებს ელექტროოპტიკური კოეფიციენტები ეწოდება. ისინი აკავშირებენ მეორე რანგის $[\Delta B_{ij}]$ ტენზორს \vec{E} ვექტორთან და ქმნიან მესამე რანგის ტენზორს (იხ. თავი V, § 20). $[f_{ijk}]$ ტენზორი ახასიათებს კრისტალის ელექტროოპტიკურ თვისებებს. ეს თვისებები დაკავშირებულია იმ გარემოებასთან, რომ დიელექტრიკული შეღწევადობა წარმოადგენს გარეშე ველის სიხშირის ფუნქციას, და თუ დაბალი სიხშირეების შემთხვევაში ველს გავლენა თათქმის შეუმჩინეველა. ოპტიკური სიხშირეების არეში დიელექტრიკული შეღწევადობის მცირე ცვლილება გარდატეხის მაჩვენებლის მცირე ცვლილების ეკვივალენტურია.

$[\Delta B_{ij}]$ ტენზორი მეორე რანგის სიმეტრიული ტენზორია და $\Delta B_{ij} = \Delta B_{ji}$, ამიტომ

$$f_{ijk} = f_{jik}. \quad (11.13)$$

ამის გამო, დამოუკიდებელი კომპონენტების რიცხვი მცირდება 27-დან 18-მდე და შესაძლებელი ხდება გადასვლა ორინდექსიან აღნიშვნაზე (5. 24) წესის მიხედვით, მაშინ ელექტროოპტიკური ეფექტის გამომსახველი (11. 12) განტოლება მიიღებს შემდეგ სახეს

$$\Delta B_i = f_{ik} E_k \quad (i=1, 2, \dots, 6, k=1, 2, 3), \quad (11.14)$$

(11. 14) განტოლება (9.79) განტოლების ანალოგიურია, რომელიც დაწერილი იყო შებრუნებული პიეზოელექტრული ეფექტისათვის და პიეზოელექტრული მოდულების საშუალებით აკავშირებდა დეფორმაციის ტენზორს ელექტრული ველის დაძაბულობის \vec{E} ვექტორთან. ამიტომ სიმეტრიის გავლენა ელექტროობტიკურ კოეფიციენტებზე ისეთივეა, როგორც ეს აღწერილი იყო პიეზოელექტრული მოდულებისათვის.

გარეშე ველის მოქმედების გარდა ხელოვნური ორმაგი სხივთებვა კრისტალებში შეიძლება წარმოიშვას გარეშე ძაბვების ან დეფორმაციის შედეგად. კრისტალის გარდატეხის მაჩვენებლის შეცვლას მექანიკური ძაბვების მოქმედებით ფოტოდრეკადობა ეწოდება. ამ თვისების განმსაზღვრელ ძირითად განტოლებას ექნება შემდეგი სახე

$$\Delta B_{ij} = q_{ijk} \sigma_{ke} \quad (11.15)$$

სადაც $[\sigma_{ke}]$ ძაბვების ტენზორია, ხოლო q_{ijk} კოეფიციენტებს პიეზოობტიკური კოეფიციენტები ეწოდება. ისინი აკავშირებენ ორი მეორე რანგის ტენზორს და ქმნიან მეოთხე რანგის $|q_{ijk}|$ პიეზოობტიკურ ტენზორს. ეს ტენზორი განსაზღვრავს ინდიკატრისას მდგომარეობას, როდესაც კრისტალზე მოქმედებენ გარეშე ძაბვები.

ასეთივე სახის განტოლება შეიძლება დაიწეროს დეფორმაციებისათვის, მაშინ

$$\Delta B_{ij} = P_{ijke} \varepsilon_{ke} \quad (11.16)$$

სადაც $[\varepsilon_{ke}]$ დეფორმაციის ტენზორია, P_{jike} — დრეკადობტიკური კოეფიციენტები. დრეკადობტიკურ და პიეზოობტიკურ კოეფიციენტებს შორის არსებობს გარკვეული კავშირი. (7.38) თანახმად, $\sigma_{ke} = c_{kcmn} \varepsilon_{mn}$ და $\Delta B_{ij} = q_{ijk} c_{kcmn} \varepsilon_{mn}$, ხოლო (11. 16) მიხედვით $\Delta B_{ij} = P_{ijmn} \varepsilon_{mn}$

$$P_{ijmn} = q_{ijk} c_{kcmn} \quad (11.17)$$

თუ ვისარგებლებთ (7. 40) ფორმულით, $\varepsilon_{mn} = s_{mnke} \sigma_{ke}$; მაშინ

$$q_{ijk} = P_{ijmn} s_{mnke} \quad (11.18)$$

სადაც c_{kcmn} დრეკადი მოდულებია, ხოლო s_{mnke} — დრეკადი მუდმივები.

ზოგად შემთხვევაში, კრისტალზე შესაძლებელია ერთდროულად მოქმედებდეს როგორც გარეშე ველი, ისე ძაბვები. მაშინ კრისტალის ელექტროობტიკური და ფოტოდრეკადი თვისებები გამოხატული იქნება ერთი განტოლებით

$$\Delta B_{ij} = f_{ijk} E_k + q_{ijk} \sigma_{ke} \quad (11. 19)$$

$[\Delta B_{ij}]$, და $[\sigma_{ke}]$ ტენზორების სიმეტრიულობის გამო ხდება პიეზობტიკური და დრეკადობტიკური დამოუკიდებელი კოეფიციენტების

რიცხვის შემცირება. ეს შემცირება დაკავშირებულია შემდეგ ტოლობებთან:

$$q_{ijk} = q_{jike};$$

$$q_{ijhe} = q_{ijeh}. \quad (11.20)$$

ამ ტოლობების შედეგად მეოთხე რანგის $[q_{ijhe}]$ ტენზორის დამოუკიდებელი კომპონენტების რიცხვი 81-დან მცირდება 36-მდე. ამიტომ, ამ შემთხვევაშიც შესაძლებელი ხდება ორინდექსიან აღნიშვნებზე გადასვლა; მაშინ (11. 15) მიიღებს შემდეგ სახეს

$$\Delta B_i = q_{ik} \sigma_k \quad (i, k = 1, 2 \dots 6). \quad (11.21)$$

ახლა (11.17) და (11. 18) ტოლობების ნაცვლად გვექნება:

$$P_{ik} = q_{im} c_{mk};$$

$$q_{ik} = P_{im} s_{mk}. \quad (11. 22)$$

$[q_{ik}]$ და $[P_{ik}]$ მეოთხე რანგის ტენზორების კომპონენტების ორინდექსიან აღნიშვნებში გადაყვანის დროს საჭირო ხდება კოეფიციენტების შემოღება, როგორც ეს იყო დრეკადი მოდულების მეოთხე რანგის ტენზორის კომპონენტებისათვის (იხ. 7.48); მაშინ მივიღებთ:

$$q_{ijhe} = q_{mni}, \text{ როდესაც } m = 1, 2 \dots 6, \text{ ხოლო } n = 1, 2 \text{ ან } 3;$$

$$2q_{ijhe} = q_{mni}, \text{ როდესაც } m = 1, 2 \dots 6, \text{ ხოლო } n = 4, 5 \text{ ან } 6;$$

$$P_{ijhe} = P_{mni}, \quad m \text{ და } n \text{ მნიშვნელობისათვის.} \quad (11. 23)$$

ასეთი გადასვლის შემდეგ პიეზოოპტიკური კოეფიციენტების ტენზორი ტრიკლინური სისტემის კრისტალებისათვის მიიღებს შემდეგ სახეს:

q_{11}	q_{12}	q_{13}	q_{14}	q_{15}	q_{16}	
q_{21}	q_{22}	q_{23}	q_{24}	q_{25}	q_{26}	
q_{31}	q_{32}	q_{33}	q_{34}	q_{35}	q_{36}	
q_{41}	q_{42}	q_{43}	q_{44}	q_{45}	q_{46}	(11.24)
q_{51}	q_{52}	q_{53}	q_{54}	q_{55}	q_{56}	
q_{61}	q_{62}	q_{63}	q_{64}	q_{65}	q_{66}	

სიმეტრიის გავლენით ხდება $[q_{mni}]$ და $[P_{mni}]$ ტენზორების დამოუკიდებელი კომპონენტების რიცხვის შემდგომი შემცირება. ასე, მაგალითად, უკვე ტეტრაგონალური სისტემის $\bar{4}2m$, 422 და $4/mmm$ კლასებისათვის (11.24) მატრიცა საგრძნობლად მარტივდება:

$$\begin{array}{cccccc}
 q_{11} & q_{12} & q_{13} & 0 & 0 & 0 \\
 q_{12} & q_{11} & q_{13} & 0 & 0 & 0 \\
 q_{31} & q_{31} & q_{33} & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & q_{44} & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & q_{44} & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & q_{66}
 \end{array} \quad (11.25)$$

როგორც აღვნიშნეთ, სიმეტრიის გავლენა კრისტალების ოპტიკურ თვისებებზე თავის გამოხატულებას პოულობს ოპტიკური ინდიკატრისას ფორმასა და განლაგებაში. მეორე მხრივ, გარეშე დაბეჭედიან ელექტრული ველიც გარკვეულად მოქმედებენ ოპტიკური ინდიკატრისას მდგომარეობაზე. ამ მოქმედების მკაფიოდ წარმოსადგენად უნდა ვიქონიოთ მხედველობაში რომ, როგორც კრისტალს თავისუფალ მდგომარეობაში, ისე გარეშე მოქმედებას, იქნება ეს გარკვეული მიმართულებით მოქმედი ელექტრული ველი თუ დაბეჭედი, გაჩნდა თავისი საკუთარი სიმეტრია. არსებობს ერთი ზოგადი პრინციპი, რომელიც საშუალებას იძლევა დავადგინოთ, თუ როგორი იქნება საბოლოო ჯამში ის სიმეტრია, რომელიც გავლენას მოახდენს ოპტიკურ ინდიკატრისაზე. ეს პრინციპი ცნობილია კიურის პრინციპის სახელწოდებით და მდგომარეობს შემდეგში: კრისტალს, რომელიც იმყოფება გარეშე მოქმედების ქვეშ, გააჩნია მხოლოდ ის სიმეტრიის ელემენტები, რომლებიც საერთოა ორივესათვის — კრისტალისათვის, როდესაც ის იმყოფება მოქმედების გარეშე და მოქმედებისათვის კრისტალის გარეშე. მაგალითად, თუ მესამე, მეოთხე ან მეექვსე რიგის სიმეტრიის ღერძების მქონე კრისტალებში მექანიკური დაბეჭედი მიმართული იქნება ამ ღერძების პარალელურად, მაშინ კრისტალი იქნება ოპტიკურად ერთღერძა, ვინაიდან 3,4 ან 6 რიგის ღერძი იქნება ერთადერთი საერთო სიმეტრიის ელემენტი დაბეჭედისა და კრისტალისათვის; ამიტომ ოპტიკური ინდიკატრისა იქნება ბრუნვის ელიფსოიდი, რომლის ბრუნვის ღერძი დაბეჭედის მიმართულების პარალელურია. თუ იმავე სიმეტრიის კრისტალებში დაბეჭედი მიმართული იქნება ნებისმიერი სხვა მიმართულებით, მაგალითად, რომელიმე მეორე რიგის ღერძის პარალელურად, კრისტალი ოპტიკურად ორღერძა გახდება. იგივე მართებული იქნება ელექტრული ველის მოქმედების მიმართაც და ა. შ.

თუ მხედველობაში არ მივიღებთ სინჯლის დისპერსიას, მაშინ არსებობს ოპტიკური სიმეტრიის მხოლოდ სამი ჯგუფი, რომლებიც შეესაბამებიან ცენტრალური ტალღური ზედაპირების სიმეტრიის სამ შესაძლებელ სახეს. ეს იქნება სფერული სიმეტრიის $o\infty m$ ჯგუფი, ბრუნვის ელიფსოიდის სიმეტრიის o/mmm ჯგუფი და სამღერძა ელიფსოიდის mmm სიმეტრიის ჯგუფი.

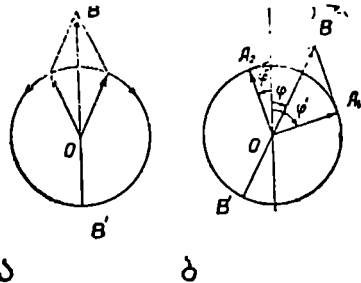
§ 44. პოლარიზაციის სიბრტყის ბრუნვა

სინათლის ორმაგი სხივთების გარდა, ზოგიერთ კრისტალში ადგილი აქვს პოლარიზაციის სიბრტყის ბრუნვას. ეს მოვლენა მდგომარეობს შემდეგში: თუ წრფივად პოლარიზებულ მონოქრომატულ სხივს გავატარებთ ზოგიერთ კუბურ კრისტალში ან ზოგიერთ ერთღერძა ან ორღერძა კრისტალებში ოპტიკური ღერძის მიმართულებით, შეიმჩნევა პოლარიზაციის სიბრტყის შემობრუნება გარკვეული კუთხით, ე. ი. კრისტალიდან გამოსული სხივის რხევების მიმართულება გარკვეული კუთხით შემობრუნებული იქნება საწყისი სხივის რხევების მიმართულებასთან. როგორც ცდები გვიჩვენებენ, შემობრუნების კუთხე კრისტალის სისქის პროპორციულია. პოლარიზაციის სიბრტყის ბრუნვა ხდება როგორც საათის ისრის მიმართულებით, ისე მის საწინააღმდეგოდ.

კრისტალის უნარს, შემობრუნოს პოლარიზაციის სიბრტყე, კრისტალის ოპტიკური აქტივობა ეწოდება. ოპტიკური აქტივობა განისაზღვრება იმ კუთხით, რომელზედაც შემობრუნდება პოლარიზაციის სიბრტყე, როდესაც სინათლე გაივლის 1 მმ სისქის კრისტალს და გამოისახება გრად/მმ ერთეულებში. შემობრუნების კუთხის სიდიდე დამოკიდებულია აგრეთვე სინათლის ტალღის სიგრძეზე. ამ მოვლენას სიბრტყის ბრუნვის დისპერსია ეწოდება. ტალღის სიგრძის შემცირებასთან ერთად, კრისტალის ოპტიკური აქტივობა იზრდება.

სიმეტრიის განხილვის დროს აღნიშნული იყო, რომ არსებობს კრისტალები, რომლებიც გვხვდება ორ ენანტიომორფულ (სარკულად ტოლ) ფორმაში. ასეთი კრისტალების თვალსაჩინო წარმომადგენელია კვარცი. როგორც ვიცით, ბუნებაში გვხვდება კვარცის ორი მოდიფიკაცია: მარჯვენა კვარცი და მარცხენა კვარცი. ასეთივე ორი მოდიფიკაციით არსებობს ნატრიუმის ქლორიდი (NaClO_3), HgS , KLiSO_4 და მრავალი სხვა ნივთიერება. როგორც გამოირკვა, არსებობს მკიდრო კავშირი კრისტალის გეომეტრიული ენანტიომორფიზმსა და მის მიერ პოლარიზაციის სიბრტყის შემობრუნების მიმართულებას შორის. ასე, მაგალითად, მარჯვენა კვარცი პოლარიზაციის სიბრტყესაც მარჯვნივ აბრუნებს, ხოლო მარცხენა კვარცი — მარცხნივ. საინტერესოა აღინიშნოს, რომ თუ კვარცის ფირფიტას შემოვებრუნებთ ნებისმიერი კუთხით ოპტიკური ღერძის ირგვლივ ან ოპტიკური ღერძის მიმართ ნებისმიერი ნორმალის ირგვლივ 180° , ამით პოლარიზაციის სიბრტყის ბრუნვის მოვლენაში არავითარი ცვლილება არ მოხდება. ეს იმას ნიშნავს, რომ თუ კვარცის ჩვეულებრივი სიმეტრია 32 ჯგუფით განისაზღვრება, პოლარიზაციის სიბრტყის ბრუნვის მიმართ მისი სიმეტრია ხასიათდება $\infty 2$ ჯგუფით, რომელსაც გააჩნია უსასრულო რიგის სიმეტრიის ღერძი და მისი მართობულად მეორე რიგის ღერძების უსასრულო რიცხვი. კვარცის სიმეტრიის 32 ჯგუფი წარმოადგენს $\infty 2$ ჯგუფის ქვეჯგუფს.

პოლარიზაციის სიბრტყის ბრუნვის მოვლენა აიხსნება შემდეგნაირად: წარმოვიდგინოთ, რომ გვაქვს \vec{OB} ვექტორი, რომელიც წრფივად და პარამონიულად ირხევა ნახაზის მართობ BOB' სიბრტყეში (ნახ. 11. 8 ა). ნახაზი გვიჩვენებს, რომ ასეთი პოლარიზებული სხივის წარმოდგენა რხევის ნებისმიერი მომენტისათვის შესაძლებელია ორი ერთნაირი სიდიდის \vec{A}_1 და \vec{A}_2 ვექტორების ჯამის სახით, რომელნიც O წერტილის ირგვლივ ბრუნავენ საწინააღმდეგო მიმართულებით ერთნაირი კუთხური სიჩქარით. ამგვარად, ფორმალურად ნებისმიერი წრფივად პოლარიზებული სხივი შეიძლება წარმოვიდგინოთ როგორც საწინააღმდეგო წრიული პოლარიზაციის მქონე ორი სხივის ჯამი, რომლებიც ერთი მიმართულებით ვრცელდებიან ერთნაირი სიჩქარით (ობტიკური ღერძის მიმართულებით). ნივთიერებაში შესვლის შემდეგ, ნებისმიერი წრფივად პოლარიზებული ტალღა იშლება ორ წრიულად პოლარიზებულ ტალღად, რომელთაგან ერთი მარჯვენა, ხოლო მეორე მარცხენა ბრუნვით ხასიათდება. მაგრამ თვით კრისტალი მარჯვენა ან მარცხენა ბრუნვის ობტიკურად აქტიურ გარემოს წარმოადგენს. ამის გამო, ეს ორი წრიულად პოლარიზებული ტალღა, ასეთ გარემოში გავრცელდება განსხვავებული სიჩქარით და თუ კრისტალში შესვლის დროს ორივე ტალღა ერთნაირ ფაზაში იმყოფებოდა, კრისტალიდან ისინი გარკვეული ფაზათა სხვაობით გამოვლენ. კრისტალიდან გამოსვლის მომენტში ელექტრული ინდუქციის \vec{OA}_1 და \vec{OA}_2 ვექტორები, თუმცა კვლავ იბრუნებენ ურთიერთსაწინააღმდეგო მიმართულებით ერთნაირი კუთხური სიჩქარით, მაგრამ ვერტიკალურ ხაზს ერთდროულად აღარ გადაკვეთენ (ნახ. 11. 8 ბ) და მათი ტოლქმედი \vec{QB} ვექტორის რხევის სიბრტყე გადახრილი იქნება ვერტიკალური მიმართულებიდან φ კუთხით, რომელიც პოლარიზაციის სიბრტყის შემობრუნების კუთხეს წარმოადგენს. ნახაზიდან ჩანს, რომ ფაზათა სხვაობა $\varphi' - \varphi'' = 2\varphi$ კუთხის ტოლია. ამგვარად, პოლარიზაციის სიბრტყის შემობრუნების კუთხე უდრის ორ წრიულად პოლარიზებულ ტალღას შორის ფაზათა სხვაობის ნახევარს; თუ წრიულად პოლარიზებული ტალღების გარდატეხის მაჩვენებლებს აღვნიშნავთ n' და n'' , ხოლო d — კრისტალის სისქეს, მაშინ სელათა სხვაობა ამ ტალღებს შორის იქნება $d(n' - n'')$. ეს სელათა სხვაობა შენარჩუნებული



ნახ. 11. 8. პოლარიზაციის სიბრტყის ბრუნვა კრისტალში იმ სხივისათვის, რომელნიც ობტიკური ღერძის მიმართულებით ვრცელდებიან.

იქნება კრისტალიდან გამოსვლის შემდეგაც, როდესაც ორივე ტალღას ჰაერში ექნება ერთი და იგივე ტალღის სიგრძე λ . იმისათვის, რომ მივიღოთ ფაზათა სხვაობა, საკმარისია სვლათა სხვაობა გავამრავლოთ $\frac{2\pi}{\lambda}$ სიდიდეზე; მივიღებთ

$$2\varphi = \frac{2\pi}{\lambda} d(n' - n''),$$

ხოლო პოლარიზაციის სიბრტყის შემობრუნების φ კუთხე განისაზღვრება შემდეგი გამოსახულებით

$$\varphi = \frac{\pi d}{\lambda} (n' - n''). \quad (11.26)$$

(11.26) ფორმულიდან შესაძლებელია პოლარიზაციის სიბრტყის კუთხრი ბრუნვის $\rho = \frac{\varphi}{d}$ ან კრისტალის ოპტიკური აქტივობის განსაზღვრა

$$\rho = \frac{\varphi}{d} = \frac{\pi}{\lambda} (n' - n''). \quad (11.27)$$

თუ კრისტალისათვის გაზომილია ოპტიკური აქტივობა, (11. 27)-ის საშუალებით შესაძლებელია განისაზღვროს წრიულად პოლარიზებულის ტალღების ორმაგი სხივთეხის სიძლიერე

$$n' - n'' = \rho \frac{\lambda}{\pi}. \quad (11.28)$$

ოპტიკურად აქტიური კრისტალების უმრავლესობისათვის $n' - n''$ წარმოადგენს 10^{-4} სიდიდეს; მიუხედავად ამისა, იმის გამო, რომ (11.26)-ში d მაკროსკოპული სიდიდეა და ბევრად დიდია ტალღის სიგრძესთან შედარებით, პოლარიზაციის სიბრტყის ბრუნვის კუთხე შესაძლებელია საკმაოდ დიდ სიდიდეს წარმოადგენდეს. ასე მაგალითად, მარჯვენა კვარცისათვის შემობრუნების კუთხე $\varphi = 21,7^\circ$.

როგორც აღენიშნეთ, ზოგიერთი ნივთიერების კრისტალები შეიძლება არსებობდნენ ორ ენანტიომორფულ ფორმაში; მაგალითად, მარჯვენა და მარცხენა კვარცი და მრავალი სხვა. კრისტალების მსგავსად, ასეთივე ორ ენანტიომორფულ ფორმაში შეიძლება არსებობდეს ზოგიერთი ნივთიერების მოლეკულები. მაგალითად, ღვინის სიმკვავის მოლეკულები არიან როგორც მარჯვენა, ისე მარცხენა ბრუნვის. ასეთ ნივთიერებებს აქვთ უნარი აბრუნონ პოლარიზაციის სიბრტყე როგორც კრისტალურ, ისე თხევად ან ამორფულ მდგომარეობაში. ენანტიომორფიზმის გამოვლენა, გავრცელებული მოლეკულებზე, ცნობილია ოპტიკური იზომერიის სახელწოდებით. თუ ნივთიერება შეიცავს მარჯვენა და მარცხენა

ბრუნვის მოლექულების ერთნაირ რიცხვს, ის კარგავს ოპტიკური აქტივობის უნარს.

აქტიური კრისტალების უმრავლესობა გადნობის ან გახსნის შემდეგ კარგავენ პოლარიზაციის სიბრტყის ბრუნვის უნარს. ასეთ კრისტალებში, როგორც ჩანს, ოპტიკური აქტივობა მოლექულების ფორმასთან კი არ არის დაკავშირებული, არამედ თვით კრისტალის ფორმასა და მის სტრუქტურასთან. შემჩნეულია, რომ ოპტიკურად აქტიური კრისტალები მიეკუთვნებიან ძირითადად ისეთ კრისტალურ კლასებს, რომლებშიც სიმეტრიის ელემენტებად შეიცავენ მხოლოდ ღერძებს. როგორც ვიცით, არსებობს 11 წმინდა ღერძული კლასი, ესენია:

1, 2, 3, 4, 6, 222, 32, 422, 622, 23, 432.

ასეთი სიმეტრიის კრისტალებს აქვთ უნარი აბრუნონ პოლარიზაციის სიბრტყე. გამოწვევის შეადგენს კიდევ ოთხი კლასი:

$\bar{4}$, m , $2mm$, $\bar{4}2m$.

რომელთა სიმეტრია აგრეთვე იძლევა სიბრტყის ბრუნვის შესაძლებლობას, თუმცა ისინი არ წარმოადგენენ ენანტიომორფულ კლასებს.

კრისტალის ოპტიკური აქტივობა ითვლება დადებითად, თუ ის პოლარიზაციის სიბრტყეს აბრუნებს საათის ისრის მიმართულებით დამკვირვებლისათვის, რომელიც შემავალი სხივის გასწვრივ იყურება. ვინაიდან ბრუნვა შეიძლება იყოს მარჯვენა ან მარცხენა, მას აკავშირებენ კოორდინატთა სისტემასთან. დადებით კრისტალს აგრეთვე მარჯვენა ბრუნვის კრისტალს უწოდებენ და კოორდინატთა სისტემას ირჩევენ ისე, რომ დადებითი კრისტალის სიბრტყის ბრუნვა ემთხვეოდეს მარჯვენა სისტემაში OX_1 ღერძის ბრუნვის მიმართულებას OX_2 ღერძისაკენ, OX_3 ღერძის ირგვლივ. ამგვარად, სიბრტყის ბრუნვის ნიშანი დამოკიდებულია კოორდინატთა სისტემის არჩევისაგან.

აქამდე ჩვენ განვიხილავდით პოლარიზაციის სიბრტყის ბრუნვას ამორფული სხეულების ან კუბური სიმეტრიის კრისტალების მიერ, ხოლო ერთღერძა ან ორღერძა კრისტალებისათვის ვიღებდით მხოლოდ ოპტიკური ღერძის მიმართულებას. ყველა ამ შემთხვევაში ორმაგ სხივთეხას ადგილი არ აქვს და პოლარიზაციის სიბრტყის კუთრი ბრუნვა განისაზღვრება ρ სიდიდით, (11. 27) გამოსახულების საფუძველზე.

ცლები გვიჩვენებენ, რომ კრისტალის უნარი აბრუნოს პოლარიზაციის სიბრტყე ან მისი ოპტიკური აქტივობა ყველა მიმართულებით, ერთნაირი არ არის. ზოგად შემთხვევაში პოლარიზაციის სიბრტყის ბრუნვის სიდიდე კრისტალში დამოკიდებულია მიმართულებაზე და, მასთანაა-მე, ამ მიმართულების მგვზავი კოსინუსების ფუნქციას წარმოადგენს; სხვადასხვა მიმართულებით პოლარიზაციის სიბრტყის ბრუნვის სიდიდის

შესაფასებლად შემოყავთ პარამეტრი G , რომელიც ამ ბრუნვის სიდიდეს ახასიათებს და დამოკიდებულია მიმართულებისაგან. როგორც ირკვევა, პოლარიზაციის სიბრტყის ბრუნვის სიდიდის განაწილება კრისტალის შიგნით სხვადასხვა მიმართულებით ხასიათდება მეორე რიგის ზედაპირით, რომელიც ზოგადი სახით შეიძლება ასე დაიწეროს

$$G = g_{11}l_1^2 + g_{22}l_2^2 + g_{33}l_3^2 + g_{23}l_2l_3 + g_{32}l_3l_2 + g_{13}l_1l_3 + g_{31}l_3l_1 + g_{12}l_1l_2 + g_{21}l_2l_1 \quad (11. 29)$$

ან მოკლედ

$$G = g_{ij}l_i l_j. \quad (11. 29')$$

აქ l_1, l_2, l_3 არჩეული მიმართულების მგეზავი კოსინუსებია, ხოლო g_{ij} კოეფიციენტები აღწერენ კრისტალის ოპტიკურ აქტივობას კოორდინატთა სისტემაში, რომელშიც სინათლის ნორმალის მგეზავი კოსინუსებია l_1, l_2, l_3 .

ეს კოეფიციენტები ქმნიან მეორე რანგის ტენზორს, რომელსაც გირაციული ტენზორი ეწოდება, ხოლო (11. 29) მეორე რიგის ზედაპირს — გირაციის ზედაპირი. $[g_{ij}]$ ტენზორი სიმეტრიული ტენზორია $g_{ij} = g_{ji}$ ამიტომ ტენზორი ზოგად შემთხვევაში შეიძლება ჩაიწეროს შემდეგი სახით:

$$\begin{array}{ccc} g_{11} & g_{12} & g_{13} \\ & g_{22} & g_{23} \\ & & g_{33} \end{array} \quad (11.30)$$

ხოლო განტოლება (11. 29) ახლა დაიწერება უფრო კომპაქტურად

$$G = g_{11}l_1^2 + g_{22}l_2^2 + g_{33}l_3^2 + 2g_{23}l_2l_3 + 2g_{31}l_3l_1 + 2g_{12}l_1l_2.$$

ცნობილია, რომ მეორე რანგის სიმეტრიული ტენზორი მთავარღერძებზე გადასვლით, შეიძლება დავიყვანოთ ისეთ სახეზე, როდესაც მისი ყველა კომპონენტი, გარდა დიაგონალური კომპონენტებისა, გაუტოლდებიან ნულს

$$\begin{array}{ccc} g_1 & 0 & 0 \\ 0 & g_2 & 0 \\ 0 & 0 & g_3 \end{array}$$

აქ g_1, g_2, g_3 გირაციული ტენზორის მთავარი კომპონენტებია. ამ კომპონენტების ფიზიკური მნიშვნელობის დასადგენად წარმოვიდგინოთ, რომ წრფივად პოლარიზებული სხივი მიმართულია x_1 ღერძის პარალელურად, მაშინ, (11. 29) გამოსახულების თანახმად

$$G = g_1$$

და, მაშასადამე, g_1 წარმოადგენს პოლარიზაციის სიბრტყის კუთრ ბრუნვას x_1 კოორდინატთა ღერძის გასწვრივ. ანალოგიურად, g_2 და g_3 განსაზღვ-

რავენ სიბრტყის კუთრი ბრუნვის სიდიდეს შესაბამისი ლერძის მიმართულებით.

ზემოთ აღნიშნული იყო, რომ პოლარიზაციის სიბრტყის ბრუნვის ნიშანი დამოკიდებულია კოორდინატთა სისტემის არჩევისაგან. ეს იმას ნიშნავს, რომ, თუ არეკვლის ან ინვერსიის შედეგად გადავალთ მარჯვენა კოორდინატთა სისტემიდან მარცხენაზე, ან, პირიქით, ოპტიკური აქტიობის ნიშანი უნდა შეიცვალოს. ასეთ პირობებში, თუ გვინდა, რომ G სიდიდის ნიშანი არ იყოს დამოკიდებული კოორდინატთა სისტემის არჩევისაგან, მისი გარდაქმნის კანონი უნდა დაეწეროს შემდეგი სახით

$$G = \pm G'.$$

ნიშანი “+”, აიღება იმ შემთხვევაში, როდესაც გარდაქმნა მარჯვენა სისტემას ტოვებს ისევე მარჯვენა სისტემად, ხოლო ნიშანი “-” იმ შემთხვევაში, როდესაც მარჯვენა სისტემა გარდაიქმნება მარცხენა სისტემად (ან პირიქით). ახლა განვიხილოთ როგორ სახეს მიიღებს გირაციული ზედაპირის (11. 29) განტოლება, როდესაც x_i კოორდინატთა სისტემიდან გადავიღვართ x_i' კოორდინატთა სისტემაზე. აქ l_i და l_i სიდიდეები გარდაიქმნებიან როგორც ჩვეულებრივი ვექტორები:

$$l_i = a_{hi} l'_h, \quad l_j = a_{mj} l'_m;$$

ამიტომ

$$\pm G' = g_{ij} a_{hi} l'_h a_{mj} l'_m$$

ან

$$G' = g'_{km} l'_k l'_m,$$

სადაც

$$g'_{km} = \pm a_{hi} a_{mj} g_{ij}. \quad (11. 31)$$

ამგვარად, იმისათვის, რომ გირაციული ზედაპირის (11. 29) განტოლებამ შეინარჩუნოს თავისი ფორმა, ნებისმიერ კოორდინატთა სისტემაში საჭიროა g_{ij} კოეფიციენტების გარდაქმნა მოხდეს (11. 31) ფორმულის საფუძველზე; მაგრამ ზემოთ (I, § 2) ნაჩვენები იყო, რომ ნიშანი \pm განასხვავებს პოლარული ვექტორის გარდაქმნას აქსიალური ვექტორის გარდაქმნისაგან. ასევე, (11. 31) წარმოადგენს მეორე რანგის ტენზორის კომპონენტების გარდაქმნის ფორმულას იმ განსხვავებით, რომ დამატებულია ნიშანი \pm . ამიტომ შეიძლება დავასკვნათ, რომ გირაციული $[g_{ij}]$ ტენზორი წარმოადგენს მეორე რანგის აქსიალურ ტენზორს.

განვიხილოთ სიმეტრიის გავლენა გირაციული $[g_{ij}]$ ტენზორის კომპონენტებზე. მიუხედავად იმისა, რომ გირაციული ტენზორი აქსიალურია, არ არის საჭირო მაგნიტური სიმეტრიის 90 კლასის განხილვა, ვინაიდან აქ არ მონაწილეობენ მაგნიტური ველის ან მომენტის ვექტორები. ამიტომ საკმარისია დავკმაყოფილდეთ მხოლოდ 32 წერტილოვანი ჯგუფით და განვიხილოთ ცალკეული სიმეტრიის ელემენტთა გავლენა ტენზორის

კომპონენტებზე იმის გათვალისწინებით, რომ თუ გარდაქმნის შედეგად იცვლება კოორდინატთა სისტემა, საჭიროა კომპონენტის წინ დაიწეროს მინუსი. ამავე დროს, კოორდინატთა სისტემის გარდაქმნამ არ უნდა შეცვალოს ტენზორის კომპონენტის მნიშვნელობა, ე. ი. $g'_{ij} = g_{ij}$. აქედან უშუალოდ გამომდინარეობს, რომ ინვერსიის შემთხვევაში, როდესაც მარჯვენა სისტემა გადადის მარცხენაში (ან პირიქით) და ამიტომ $g'_{ij} = -g_{ij}$, ტენზორის ყველა კომპონენტი უნდა უდრიდეს ნულს $g_{ij} = 0$. ამგვარად, სიმეტრიის ცენტრის მქონე კრისტალებში არ შეიძლება აბრუნონ პოლარიზაციის სიბრტყე.

კოორდინატთა სისტემის სახეს ცვლის აგრეთვე არეკვლა m სიბრტყეში. თუ ეს სიბრტყე x_3 ღერძის მართობულია, გარდაქმნას ექნება შემდეგი სახე:

$$x_1 \rightarrow x_1, \quad x_2 \rightarrow x_2, \quad x_3 \rightarrow -x_3, \quad \text{ამიტომ } g_{11} \rightarrow -g_{11}, \quad g_{22} \rightarrow -g_{22}, \\ g_{33} \rightarrow -g_{33}, \quad g_{12} \rightarrow -g_{12}, \quad g_{13} \rightarrow g_{13}, \quad g_{23} \rightarrow g_{23}$$

და გირაციული ტენზორისათვის მივიღებთ:

$$\begin{array}{ccc} 0 & 0 & g_{13} \\ & 0 & g_{23} \\ & & 0 \end{array} \quad (11.32)$$

მიუხედავად იმისა, რომ სიმეტრიის m კლასი არ წარმოადგენს ენანტიომორფულ კლასს, გირაციული ტენზორის ორი კომპონენტი განსხვავდება ნულისაგან და ამიტომ m სიმეტრიის კრისტალები შესაძლებელია იყვნენ ოპტიკურად აქტიურნი. პირველი რიგის ღერძისათვის როდესაც კრისტალს არაერთი სიმეტრია არ გააჩნია, მართებული იქნება (11.30) ცხრილი. $4\bar{2}m$ კლასის კრისტალებისათვის გირაციული ტენზორი იღებს შემდეგ სახეს:

$$\begin{array}{ccc} 0 & g_{12} & 0 \\ & 0 & 0 \\ & & 0 \end{array} \quad (11.33)$$

ამ ცხრილიდან ჩანს, რომ აღნიშნული სიმეტრიის კრისტალებში ოპტიკური აქტივობა ოპტიკური ღერძის მიმართულებით უდრის ნულს ($g_{33} = 0$) და პოლარიზაციის სიბრტყის ბრუნვა შესაძლებელია მხოლოდ იმ მიმართულებით, სადაც ადგილი აქვს ორმაგ სხივთტეხას.

ასეთივე ცხრილების შედგენა გირაციული ტენზორის კომპონენტებისათვის შესაძლებელია სიმეტრიის ყველა 15 კლასისათვის, რომლებიც ზემოთ იყო ჩამოთვლილი.

ლიტერატურა

1. Шубников А. В. Оптическая кристаллография. Изд-во АН СССР, 1950.
2. Най Дж. Физические свойства кристаллов. Изд-во «Мир» 1967.
3. Bhagavantam S. Crystal Symmetry and Physical Properties. Academic Press, 1966.

შ ი ნ ა ა რ ს ი

შეორე გამოცემისათვის	3
ავტორისათვის	4
I თავი. წრფივი გარდაქმნები, ტენზორები, მატრიცები, უკუშეხი	7
§ 1. წრფივი ორთოგონალური გარდაქმნები სამგანზომილებიან სივრცეში	7
კოორდინატთა გარდაქმნის მატრიცის დეტერმინანტი	9
ეილერის კუთხეები	11
სამგანზომილებიანი სივრცის წრფივი გარდაქმნები	13
წერტილის კოორდინატების ნამრავლის გარდაქმნა	14
§ 2. სკალარები და ვექტორები	15
§ 3. ტენზორები	21
ტენზორის კომპონენტებისა და წერტილის კოორდინატების ნამრავლის გარდაქმნა	23
ტენზორების ზოგიერთი თვისება	24
სიმეტრიული და ანტისიმეტრიული ტენზორები	27
შეორე რიგის მახასიათებელი ზედაპირის თვისებები	29
ტენზორის მთავარი ღერძები და მთავარი მნიშვნელობები	33
§ 4. მატრიცები	36
მატრიცების დაყვანა დიაგონალურ სახეზე	40
ზოგიერთი გარდაქმნის წარმოდგენა მატრიცების საშუალებით	43
§ 5. ჭგუფთა თეორიის ელემენტები	45
იზომორფული და პომომორფული ჭგუფები	48
ქვეჭგუფები	50
შეუღლებული ელემენტების კლასები	52
გადანაცვლებანი	53
ინვარიანტული ქვეჭგუფები, ფაქტორ-ჭგუფი	57
ჭგუფების გადამრავლება	60
ჭგუფების წარმოდგენა	60
დაყვანადი და დაუყვანადი წარმოდგენები. ხასიათები	64
II თავი. კრისტალების წარმოშობა	72
§ 6. კრისტალების ჩასახვა	74
კრისტალების ჩასახვის პირობები	75
კრისტალური ჩანასახების შექმნა	78
ჩანასახის კრიტიკული ზომა	81
კურკლის კედლებისა და მინარეების გავლენა	86
§ 7. კრისტალების ზრდა	87
კრისტალების ზრდის თეორიები	90
კოსელის და სტრანსკის თეორია	99
კრისტალების ზრდის დისლოკაციური თეორია	103

III თავი. პრინციპების აპეაზულება	107
§ 8. კრისტალი, როგორც მაკროსკოპული სხეული	107
რაციონალურ ფარდობათა კანონი	110
წახნაგების სიმბოლოები	110
კოორდინატთა სისტემის არჩევა კრისტალებში	114
ზონები	117
კრისტალების წარმოდგენა გეგმილებში	121
§ 9. კრისტალური მესერი	125
კრისტალური მრავალწახნაგი და მესერი	130
კვანძური სიბრტყეებისა და კვანძური ლერქების ინდექსები	130
§ 10. ინდექსების გარდაქმნები	134
§ 11. შებრუნებული მესერი	143
შებრუნებული მესრის ზოგიერთი თვისება	149
§ 12. რენტგენის სხივების დიფრაქცია და შებრუნებული მესერი	152
შებრუნებული მესერი და არეკვლის (ევალდის) სფერო	157
ინტერფერენციული ფუნქცია და შებრუნებული მესერი	160
შებრუნებული მესრის კვანძების ზომები და ფორმა	166
კრისტალის სტრუქტურა და შებრუნებული მესერი	167
IV თავი. პრინციპების სიმეტრია	171
§ 13. მაკროსკოპული კრისტალების სიმეტრია	171
§ 14. მაკროსიმეტრიის ელემენტები	174
მაღალი რიგის ლერქების კომბინაციები	183
სიმეტრიის ლერქების და სიბრტყეების ურთიერთგანლაგება	186
§ 15. სიმეტრიის წერტილოვანი ჯგუფები	190
ბრუნვის ჯგუფები	195
მეორე გვარის წერტილოვანი ჯგუფები	190
წერტილოვანი ჯგუფების აღნიშვნები. კრისტალური კლასები. სინგონიები	204
წერტილების კომპლექსები. მარტივი ფორმები	206
§ 16. მაკროსკოპული კრისტალების ანტისიმეტრია	218
მაგნიტური სიმეტრიის წერტილოვანი ჯგუფები (ფერადი ჯგუფები)	224
§ 17. კრისტალური მესრის სიმეტრია	230
დისკონტინუუმის სიმეტრიის ელემენტები	233
§ 18. ტრანსლაციური ჯგუფები	240
§ 19. სივრცობრივი ჯგუფები	251
ორგანომომლებიანი სივრცის სივრცობრივი ჯგუფები	262
წერტილების სისტემები და კოორდინატები	266
V თავი. სიმეტრიის ბავლენა პრინციპების ფიზიკურ თვისებებზე	269
§ 20. ფიზიკური თვისებები, როგორც ორი ფიზიკური სიდიდის თანაფარდობა	269
ფიზიკური თვისებების საკუთარი სიმეტრია	274
§ 21. კრისტალების სიმეტრიის გავლენა ტემპორებით გამოსახულ ფიზიკურ თვისებებზე	275

VI თავი. ბმის ძალაში კრისტალურ მასარში და კრისტალბანის, სტრუქტურა	289
§ 22. კოვალენტური (ვალენტური) ბმა პიბრიდული ორბიტალები	291 306
§ 23. კოვალენტური კრისტალების სტრუქტურა	310
§ 24. იონური ბმა	314
§ 25. იონური კრისტალები და მათი სტრუქტურა იონების ზომები. იონური რადიუსები იონების რადიუსების გავლენა მესხის მდგრადობაზე. იონების პოლარიზაცია. კოორდინაციული რიცხვი სფეროების უმკიდროესი წყობა იონური კრისტალების სტრუქტურული ტიპები	319 322 327 332 339
§ 26. ლითონური ბმა. ლითონების სტრუქტურა ლითონების სტრუქტურა და ატომური რადიუსები მყარი ხსნარების სტრუქტურა შუალედური ფაზები	341 350 352 357
§ 27. მოლეკულური ბმა. მოლეკულური კრისტალების სტრუქტურა მოლეკულური კრისტალების სტრუქტურა წყალბადური ბმა დონორულ-აქცეპტორული ურთიერთქმედება	362 372 373 375
VII თავი. კრისტალბანის მუქანის ტიპური თვისებები	377
§ 28. ძაბვების ტენზორი	377
§ 29. დეფორმაციების ტენზორი	384
§ 30. დრეკადობის ტენზორი დეფორმაციის ენერჯია სიმეტრიის გავლენა კუმშვალობა	391 394 397 403
VIII თავი. კრისტალბანის სითბური თვისებები	405
§ 31. სითბური გავართობა	405
§ 32. სითბოგამტარობა	410
IX თავი. კრისტალბანის ელექტრული თვისებები	415
§ 33. კრისტალების ელექტროგამტარობა დენის გავლა კრისტალურ ფირფიტაში დენის გავლა კრისტალურ ღეროში	415 422 424
§ 34. ელექტრული მოვლენები დიელექტრიკულ კრისტალებში დიელექტრიკების პოლარიზაცია ატომებისა და იონების პოლარიზაცია დიელექტრიკში მოქმედი ელექტრული ველი კავშირი დიელექტრიკისა და ატომის პოლარიზებადობებს შორის იონური პოლარიზაცია დიპოლების ორიენტაციით გამოწვეული პოლარიზაცია ანიზოტროპიული დიელექტრიკები ელექტროსტატიკური ველი ანიზოტროპულ დიელექტრიკში სიმეტრიის გავლენა	425 429 432 434 440 441 442 446 450 451
33. ე. სანაძე	513

§ 35. პიროელექტრობა	452
§ 36. პიეზოელექტრობა	454
სიმეტრიის გავლენა პიეზოელექტრულ მოდულებზე	457
§ 37. სეგნეტოელექტრობა	460
X თავი. პრისტალების მაგნიტური თვისებები	467
§ 38. დიამაგნიტური და პარამაგნიტური ამთვისებლობა	469
§ 39. პირომაგნიტიზმი	477
§ 40. პიეზომაგნიტიზმი	478
§ 41. ფერომაგნიტიზმი და ანტიფერომაგნიტიზმი	479
ანტიფერომაგნიტიზმი	484
ფერიტები	487
§ 42. დამაგნიტების მიმართულება. მაგნიტოსტრექცია	489
XI თავი. პრისტალების ოპტიკური თვისებები	493
§ 43. ორმაგი სხივთტება კრისტალებში	493
ხელოვნური ორმაგი სხივთტება კრისტალებში	490
§ 44. პოლარიზაციის სიბრტყის ბრუნვა	504

რედაქტორები: ჩ. გურგენიძე, ვ. გოგსაძე
სამხატვრო რედაქტორი თ. შესხი
ტექნიკური რედაქტორი ე. მუზაშვილი
უფროსი კორექტორი ბ. ჯობაეა
კორექტორი ი. მანჯავეიძე
გამომშვები თ. მაქავეარიანი

ИБ № 1919

გადაეცა წარმოებას 25.05.86. ხელმოწერილია დასაბეჭდად 19.12.86.
ქალაქის ზომა 60×90¹/₁₆. საბეჭდი ქალაქი № 1, გარნიტურა
ენა. ბეჭდვა მალალი. ნაბეჭდი თაბახი 32,25. საღებავგატარება
32,38. სააღრიცხვო-საგამომცემლო თაბახი 30,68.
უე 10879. ტირაჟი 1000. შეკვეთის № 429.

ფასი 1 ზან. 20 კაპ.

გამომცემლობა „განათლება“, თბილისი, ორჯონიკიძის ქ. № 50.
Издательство «Ганатლება», Тбилиси, ул. Орджоникидзе № 50.

1986

საქართველოს სსრ გამომცემლობათა, პოლიგრაფიისა და წიგნის
ვაჭრობის საქმეთა სახელმწიფო კომიტეტის ბეჭდვითი სიტყვის
კომბინატი, თბილისი, მარჯანიშვილის ქ. № 5.

Комбинат печати Государственного комитета Грузинской ССР
по делам издательств, полиграфии и книжной торговли,
Тбилиси, ул. Марджанишвили, 5.