

**O‘ZBEKISTON RESPUBLIKASI OLIY VA O‘RTA
MAXSUS TA‘LIM VAZIRLIGI
MIRZO ULUG‘BEK NOMIDAGI O‘ZBEKISTON
MILLIY UNIVERSITETI**

**O‘ ZBEKISTON RESPUBLIKASI FANLAR AKADEMIYASI
YADRO FIZIKASI INSTITUTI**

I. Xidirov

QATTIQ JISM FIZIKASI

5A140204 - Kondensatsiyalangan muhit fizikasi va matetialshunoslik
(Qattiq jism fizikasi) bavalavriat mutaxassisligi bo‘yicha
o‘quv qo‘llanma

**Toshkent
«MUMTOZ SO‘Z»
2019**

UO‘K: 539.12

KBK 22.383

I. Xidirov. **Qattiq jism fizikasi.** O‘quv qo‘llanma. Toshkent, 2019. 388 bet.

Ushbu o‘quv qo‘llanmada qattiq jism fizikasi asoslari chuqurlashtirilgan holda bayon qilingan bo‘lib, unda shu vaqtgacha mavjud bo‘lgan an‘anaviy darsliklardan farqli holda qattiq jismlarning yangi sohasi bo‘lgan nanostrukturalar va nanomateriallar haqidagi bilimlar ham yoritilgan. O‘quv qo‘llanma materiallari oliy o‘quv yurtlarida o‘rganiladigan “Kondensirlangan muhit fizikasi” fanining katta bo‘limi bo‘lgan “Qattiq jism fizikasi” kursi bo‘yicha bakalavriat talabalari uchun o‘quv dasturini qamrab olgan holda ushbu kursning barcha bo‘limlariga, jumladan, o‘ta o‘tkazuvchanlik va magnetizmga tegishli asosiy materiallarni o‘z ichiga oladi. O‘quv qo‘llanmadan universitetlarning va boshqa oliy o‘quv yurtlarining shu sohaga tegishli bakalavriat va magistratura talabalari, izlanuvchi katta ilmiy xodimlar ham foydalanishlari mumkin.

Taqrizchilar:

S. Djumanov, fizika-matematika fanlari doktori, professor

A. S. Risboyev, fizika-matematika fanlari doktori, professor

A. A. Xolmo‘minov, fizika-matematika fanlari doktori, professor

O‘zbekiston Respublikasi Oliy va o‘rta maxsus ta’lim Vazirligining
2018 yildagi 531 - sonli buyrug‘iga asosan nashrga tavsiya etilgan
ISBN 978-9943-6084-1-2

© I.Xidirov, 2019

© «MUMTOZ SO‘Z», 2019

KIRISH

Qattiq jism fizikasi fizikaning katta bo'limlaridan biridir. Hozirgi kunda esa qattiq jism fizikasi fan va texnikaning taraqqiyoti hisobiga yangi kashfiyotlar bilan yana ham boyib bormoqda. Masalan, nanokristallar fizikasi, nanotexnologiya paydo bo'ldi va axborotlar hamda kompyuterlar texnologiyasida, meditsinada va xalq xo'jaligining barcha sohalarida qo'llanilib, katta yutuqlarga erishilmoqda. Yangi kristallar – fullerit, karbin, grafen va nanonaylar (uglerodning yangi modifikatsiyalari), kvazikristallar kashf qilinib, ular texnika va sanoatga jadal suratlar bilan tatbiq etilmoqda. O'tao'tkazgich holatiga o'tish temperaturasi (kritik temperaturasi ($T_k \geq 86$ K)) yuqori bo'lgan o'tao'tkazgichlar kashf qilindi va bu soha ham jadal rivojlanib bormoqda. Odamlar qattiq jismlar fizikasi sohasidagi so'nggi kashfiyotlardan amaliy maqsadlarda keng foydalanishga ulgurdilar. Inson faoliyatida qattiq jismlar muhim rol tutgani uchun qattiq jism fizikasi qonuniyatlarini o'rganish alohida ahamiyat kasb etadi. Muallif bir necha yillar davomida Toshkent Davlat pedagogika universitetida va O'zbekiston Milliy universitetida qattiq jism fizikasi maxsus kursi bo'yicha nazariy va amaliy mashg'ulotlar olib borganda, O'zbekiston Fanlar akademiyasining Yadro fizikasi institutida izlanuvchi katta ilmiy xodimlardan malakaviy imtihonlar qabul qilishda qattiq jism fizikasining barcha bo'limlari bo'yicha o'zbek tilida o'quv qo'llanmasi bo'lishiga ehtiyoj borligi sezildi. Shu sababdan muallif "Qattiq jism fizikasi" fani bo'yicha ushbu o'quv qo'llanmani yozishni lozim topdi. An'anaviy o'quv qo'llanma yoki darsliklardan farqli holda, ushbu kitobda qattiq jism fizikasi sohasidagi fanning yangi yutuqlari haqida ham ma'lumot berildi. Jumladan, yuqori temperaturali o'tao'tkazgichlar haqidagi fanning ushbu sohasidagi so'nggi yutuqlari hisobga olinib, ular haqida bir muncha keng ma'lumot berildi. XXI asrning boshida nanotexnologiya va nanomateriallar sohasida inqilobiy taraqqiyot kuzatildi. Buning natijalari iqtisodiy rivojlangan mamlakatlarda inson faoliyatining barcha sohalarida (sanoatda, mudofada, informatsiya texnologiyasida, radioelektronikada, energetikada, transportda, biotexnologiyada, meditsinada, ekologiyada) allaqachon keng foydalanilmoqda. XXI asr nanotexnologiya asri bo'ladi deb bashorat qilinmoqda. Ilmiy texnika taraqqiyotining kelajagi nanotexnologiya va nanomateriallar sohasidagi amaliy va fundamental masalalarni zamon talablari darajasida jadal hal qila oladigan mutaxassislarga alohida talab qo'yadi. Bunday

mutaxassislar tayyorlash uchun oliy o'quv yurtlari tegishli ixtisosliklarining o'quv dasturlariga nanotexnologiya va nanomateriallar haqidagi bilimlarni kiritish zarur. Shu nuqtai nazardan mazkur kitobga nanokristallarning va nanomateriallarning tuzilishi va xossalari haqida ma'lumotlar kiritildi. Taraqqiy etgan ko'p mamlakatlarda (AQShda, Angliyada, Rossiyada, Yaponiyada, Xitoyda) nanotexnologiya sohasidagi tadqiqotlarni va ishlanmalar yaratishni jadal rivojlantirishni ko'zda tutuvchi milliy dasturlar qabul qilingan. Bu soha uchun mutaxassislar tayyorlash uchun katta e'tibor berilmoqda.

Kristallografiya bo'yicha o'zbek tilida qo'llanma yoki darslik yo'qligini, lekin tegishli mutaxassislarning bu sohadagi bilimlarini chuqurlashtirish zarurati borligi tufayli mazkur qo'llanmada kristallarning tuzilishiga birmuncha kengroq o'rin berildi. Qattiq jismlar bo'yicha ko'pchilik darsliklarda magnetizmning fizik asoslari yetarlicha to'la bayon qilinmaydi. Ushbu kitobda esa magnetizmning fizikaviy asoslari izchil va birmuncha to'la bayon qilishga harakat qilindi. Kitobning tuzilishi uning o'quvchilarida qattiq jism fizikasi fani haqida to'la tasavvur hosil qilishga imkon beradi deb umid qilamiz.

Qo'llanmaning mazmunini va ko'lamini belgilashda undan oliy o'quv yurtlarining qattiq jism fizikasi o'rganiladigan fakultetlarining bakalavatura va magistratura talabalari va ilmiy tadqiqot muassalarining izlanuvchi katta ilmiy xodimlari ham foydalanishi mumkin bo'lishligi nazarda tutildi. Shuning uchun barcha mavzularni ma'lum bir izchillik bilan chuqur, ayni paytda imkon boricha soddalik bilan bayon qilishga harakat qilindi. O'quvchilarning e'tiborini alohida jalb qilish uchun qo'llanmada ishlatilgan barcha fizikaviy va matematikaviy terminlar qora harflar bilan berildi.

Qo'llanmani yozishda asosan qattiq jism fizikasi bo'yicha keyingi 10-15 yillarda taraqqiy etgan xorijiy g'arb mamlakatlarda chop etilgan yangi adabiyotlar bilan birgalikda INTERNET materiallaridan, shuningdek, dunyo miqiyosidagi ko'pchilik mutaxassislar tomonidan e'tirof etilgan an'anaviy qo'llanmalardan va darsliklardan ham foydalanildi.

Qo'llanmaning qo'lyozmasini etibor bilan o'qib chiqqanlari uchun va o'z foydali mulohazalarini bildirganlari, qo'lyozma kamchiliklarini ko'rsatganlari uchun taqrizchilar fizika-matematika fanlari doktorlari, professorlar S. Jumanovga, A. S. Risboyevga va A. A. Xolmo'minovga samimiy tashakkurimni bildiraman. Shuningdek, qo'lyozmani e'tibor bilan o'qib chiqib, texnikaviy kamchiliklarini ko'rsatganligi uchun

fizika-matematika fanlari nomzodi U.T.Qurbonovga minnatdorchilik bildiraman.

Kitob bo'yicha o'z fikr va mulohazalarini (shu jumladan tanqidiy qarashlarini), kamchiliklarni khidirovi@yandex.ru elektron pochta orqali bildirgan o'quvchilarga muallif oldindan samimiy tashakkur izhor qiladi.

I bob. QATTIQ JISMLARNING TUZILISHI

1.1. Moddaning kondensatsiyalangan holatlari haqida umumiy tushunchalar

Qattiq jismlar moddaning kondensatsiyalangan holatlaridan biri bo'lib, juda katta guruhini tashkil qiladi. Qattiq jismlarning moddaning kondensatsiyalangan holatlari orasida tutgan o'zni haqidagi tasavvurlar to'la bo'lishligi uchun moddaning kondensatsiyalangan holatlari haqida umumiy tushunchalar berib o'tishni lozim topdik. Temperatura va bosimga bog'liq holda moddaning uchta - qattiq, suyuq va gaz agregat holatlarida bo'lishi mumkinligini yaxshi bilamiz. Bu holatlarni faqat bosim va temperaturadan iborat termodinamikaviy parametrlar belgilaydi. Moddalar haqidagi bilimlarning kengayishi natijasida ma'lum bo'ldiki, moddaning uch agregat holati makroskopik jismlarning mumkin bo'lgan barcha holatlarini belgilay olmas ekan. Ma'lum bir shart-sharoitlar ta'sirida moddalar olti xil kondensatsiyalangan (zichlashgan) holatda bo'lishi mumkinligi aniqlangan. Moddalarning qattiq va suyuq holatlari umumiy nom bilan **kondensatsiyalangan (yoki kondensirlangan) holat** deb ataladi. Barcha moddalar kondensatsiyalangan holatda gazlarga nisbatan quyidagi bir qator umumiylikka ega.

1. Ularning qisiluvchanligi gazlarnikiga nisbatan millionlarcha marta kichik.

2. Gaz zarralarining o'zaro ta'siri hisobga olmaslik darajada zaifdir. Shuning uchun ularni tashkil etgan atomlari yoki molekulalari uch o'lchovli fazoda tartibsiz ilgarilama harakatda bo'ladi. Ular faqat o'zaro to'qnashgandagina elastik sharlar kabi itarilishadi. Kondensatsiyalangan moddaning tashkil etgan zarralarining o'zaro tortishuv kuchlari mavjudligi tufayli ular orasidagi masofa o'z diametrlari o'lchamlariga yaqin bo'lib, gazlarda esa bu masofa atmosfera bosimida gaz zarralarining o'lchamlaridan o'nlab marta katta bo'ladi.

3. Kondensatsiyalangan holatda moddalarning tashkil etgan zarralari orasidagi tortishish kuchlari yetarli darajada katta bo'lib, bu kuchlar zarralarning bir-biriga nisbatan ilgarilama harakat qilishiga yo'l qo'ymaydi. Zarralar faqat o'z muvozanat vaziyatiga mos keluvchi nuqta atrofida issiqlik tebranishlarida bo'lishadi. Kondensatsiyalangan sistemalarning zarralari faqat kam hollardagina qo'shni bo'sh (vakant) tugunlarga yoki tugun oraliqlariga translyatsiyaviy sakrashlar qiladi. Zarralarning tebranma harakatlari qattiq jismlarda kvantlangan bo'lib, asosan

past temperaturalarda namoyon bo'ladigan qiziq kvant hodisalariga sabab bo'ladi.

4. Kondensatsiyalangan sistemalar odatdagi bosimlarda muayyan zichlikka ega bo'lib, modda miqdori o'zgaras bo'lganda tashqi kuchlarsiz ichki bog'lanish kuchlari tufayli o'z hajmini saqlasa, gaz o'zi uchun ajratilgan butun hajmni egallaydi.

5. Tashkil etgan zarralari orasidagi ta'sir (tortishish va itarishish) kuchlari elektr tabiatiga ega.

Kondensatsiyalangan sistemalarning sanab o'tgan umumiy xossalari ularning tashkil etgan zarralari orasidagi ta'sirlashish xarakteri va energiyasi belgilaydi. Zarralar orasidagi ta'sir kuchlari ularni ma'lum bir muvozanat vaziyati atrofida ushlab turadi va ularning harakatini cheklaydi. Suyuqliklarni tashkil etgan atomlarining yoki molekulalarining o'rtacha potensial energiyasi ularning o'rtacha kinetik energiyasiga taxminan teng bo'lib, bu omil suyuqliklarning oquvchanligini ta'minlaydi. Qattiq jismlarda zarralarining o'rtacha potensial energiyasi ularning o'rtacha kinetik energiyasidan katta bo'ladi. Natijada qattiq jismlar o'z shakli va hajmini saqlash qobiliyatiga ega. Gaz zarralarining esa o'rtacha potensial energiyasi ularning o'rtacha kinetik energiyasidan ancha kichik bo'lgani uchun zarralari orasidagi masofa o'lchamlaridan katta bo'lib, hamma vaqt ilgirilama harakatda bo'ladi.

1.2. Moddaning kondensatsiyalangan holatlari klassifikatsiyasi

Hozirgacha mavjud bo'lgan adabiyotlarda kondensatsiyalangan sistemalarni besh guruhga bo'ladilar: suyuqliklar, shishalar, amorf moddalar, kristallar va suyuq kristallar. Ammo nanokristallar haqidagi bilimlarning hozirgi kundagi rivoji ularni kondensatsiyalangan sistema-ning alohida turi sifatida qarashga imkon beradi. Shuning uchun biz kondensatsiyalangan sistemani olti guruhga bo'lamiz. Ularni qisqacha ta'riflab o'tamiz.

Suyuqliklar. Suyuqliklar muvozanatda bo'lgan, izotrop, oquvchanlik xossasiga ega bo'lgan, shu tufayli o'z shaklini oson o'zgartira oladigan sistema. Biroq zarralarining orasidagi masofani o'zgartirish uchun katta kuch kerak. Bunga sabab suyuqlik molekulalari orasidagi masofani ozgina kamayishi bilan ham ular orasida katta itarish kuchlarini hosil bo'lishidir. Bu suyuqliklarning zaif siqiluvchanlikka ega bo'lishiga va o'zining muayyan hajmini saqlash xossasiga ega bo'lishiga sabab bo'ladi. Suyuqlik molekulalari orasida tortishish kuchlari mavjud bo'lib,

ma'lum temperaturalargacha bu kuchlar tufayli molekulalar bir-birini ushlab turadi. Ammo bu tortishish kuchlari molekulalarning fazoda bir-biriga nisbatan tartibsiz holda joylashib, harakatlanishiga va siljishiga qarshilik ko'rsatish uchun yetarli emas. Suyuqlik zarralarining joylashuvida faqat bir necha atomlararo masofalardagina tartiblanish (**yaqin tartiblanish**) mavjud bo'lib, ko'p hollarda, ayniqsa, yuqori temperaturalarda butunlay tartib bo'lmaydi. Boshqacha aytganda suyuqlik molekulalari orasidagi o'zaro ta'sirning potensial energiyasi molekulalarning kinetik energiyasiga yaqin bo'ladi. Bu hol suyuqlik molekulalarining ilgarilama harakat qilishiga - suyuqlikning oqishiga sabab bo'ladi. Ideal suyuqliklar uchun siqilish moduli G nolga teng. Gazlardagi kabi faqat bo'ylama elastik to'liqlar tarqaladi (bundan gipertovushlar mustasno). Suyuqliklar gazlarni suyultirish yo'li bilan ham, kattiq jismlarni eritish yo'li bilan ham olinishi mumkin. Turli suyuqliklar turlicha elektr xossalariga ega bo'lishi mumkin. Masalan, toza suv dielektrikdir. Turli gaz va tuzlar kirishmasi bo'lgan suv esa elektr o'tkazgichdir. Metallar esa suyuq holatga o'tganda o'zining elektr, issiqlik va optikaviy xossalarini saqlaydi. Si (kremniy), Ge (germaniy) kabi yarimo'tkazgichlar suyulganda ularda elektr o'tkazuvchanlik paydo bo'lib, metallarnikiga yaqinlashib keladi. Biroq ayrim yarimo'tkazgichlar (masalan, HgSe) eriganda elektr o'tkazuvchanligi kamayadi yoki zaif elektr o'tkazuvchanligi saqlanadi (masalan, Sb_2 , Se_3 va boshqalarda). Suyuq holatda ularning elektr o'tkazuvchanligining yarimo'tkazgichlarga xos temperaturaviy bog'liqligi saqlanadi. Bir qator suyuq yarimo'tkazgichli materiallar borki, temperatura ortishi bilan yarimo'tkazgichlik xossasini yo'qotib, metall xossasiga ega bo'lib qoladi. Masalan, Te – Se sistema qattiq va suyuq holatlarda yarimo'tkazgichdir. Ammo Te bilan boyigan suyuq Te - Se eritmani qizdirishda davom etilsa, elektr o'tkazuvchanligi tez ortib boradi va metallarnikidek bo'lib qoladi. Aksincha, ushbu qotishma Se bilan boy bo'lsa, avvalgisiga teskari effekt kuzatiladi, ya'ni temperatura ortishi bilan elektr o'tkazuvchanlik kamayib, uning temperaturaviy bog'liqligi yarimo'tkazgichlarning tabiatidek bo'lib qoladi.

2. Shishalar kvazimuvozanatli sistemalaridir. Atomlarining joylashuvida suyuqliklardagidek yaqin tartiblanish kuzatiladi. Tartiblanish taxminan 5–10 Å masofalardagina kuzatilib, nuqsonlar shunchalik ko'pki, bundan katta masofalarda uzoq tartiblanish kuzatilmaydi. Fizikaviy **xossalari kristallning barcha yo'nalishda bir xil, ya'ni izotrop**. Ko'p hollarda shaffof moddalardir. Qattiq jismlarning xossalariga ega.

Masalan, siljish moduli noldan farqli. Mo'rt. Bo'ylama va ko'ndalang elastik to'liqlar tarqalishi mumkin. Faqat shishalargagina xos bo'lgan qator fizikaviy xossalari mavjud. Amalda barcha shishalar zaif lyuminessensiyalanadi. Moddaning issiqlik ta'sirida emas, ko'rinuvchi yorug'lik, ultrabinafsha, rentgen yoki gamma nurlar, elektronlar oqimi va boshqa elementar zarralar bilan bombardimon qilish, ishqalanish va maydalash natijasida, ximiyaviy reaksiyalar yoki elektr maydon ta'sirida atomlarining yoki molekulalarining uyg'onib, so'ngra normal holatiga o'tishi natijasidagi nurlanishiga **lyuminessensiya** hodisasi deyiladi. Lyuminessensiya hodisasida jismning temperaturasi xona temperatura-sida yoki undan past ham bo'lishi mumkin. Shuning uchun bunday nurlanish **sovuq nurlanish** deb ham ataladi. Shishalarning kichik sohalaridagi mexanik kuchlanishlar va birjinslimaslik ikkilanma nur sindiruvchanlikka sabab bo'ladi. Moddalar shisha holatida odatda diamagnit bo'lib, kamyob yer elementlari qo'shilganda paramagnitga aylanadi.

Ko'pgina oddiy moddalar (Se, As, P), oksidlar (B_2O , SiO_2 , FeO_2), suvli eritmalar (H_2O_2 , H_2SO_4 , H_3PO_4 , $HClO_4$, KOH), ayrim oddiy elementlarning (As, P, Ge) xalkogenidlari, ba'zibir galogenidlar va karbonatlar suyuq holatda bo'la oladi. Qotishma va metallarni kristallanishga kuchli moyilligi tufayli ularning suyuq holatidan shisha holatini olish juda qiyin. Buning uchun odatda ularning suyulmalariga yo'nalgan bog'lanishli elementlar (bor, qremniy, fosfor) qo'shib, katta tezlik ($\nu = 10^5 \div 10^6$ K/s) bilan sovutish kerak. Metall shishalar temperaturaga sust bog'lanishli elektr qarshilikka va tovushni kam yutish xossasiga ega.

Shishalarni o'ta sovugan suyuqlik deb qarash mumkin. Shisha hosil bo'lish jarayoni temperaturaning ma'lum bir ΔT oralig'ida sodir bo'lib, bu oraliq **shishalanish oralig'i** deb ataladi. Ayni moddaning suyuq holatidan shisha holatiga o'tishi qaytar jarayon bo'lib, shu xususiyati bilan moddaning amorf holatidan butunlay farq qiladi.

3. Amorf jismlar. Amorf jismlar moddalarning kuchli darajadagi muvozanatsiz noturg'un (metastabil), fizikaviy xossalari izotrop, tashkil etgan zarralarining joylashuvida yaqin, ya'ni bir necha atom masofalari doirasidagina tartiblanish (yaqin tartiblanish) bo'lgan holatidir. Natijada ular muayyan tashqi geometrik shaklga ega bo'lmaydi (amorf so'zi grekcha shaklsiz demakdir). Yaqin tartiblanish asta-sekin buzilib, atomlar orasida tartibsiz joylashish kuzatiladi. Shuning uchun ham amorf moddalar aniq erish temperaturasiga ega emas. Moddaning shisha

holatidan farqli holda, uning suyuq holatidan amorf holatiga o'tishi qaytmas jarayondir. Aytish mumkinki, moddaning har qanday shisha holati amorf holatdir, biroq moddaning har qanday amorf holati shisha holati emas. Amorf jism qizdirilsa, avval kristall holatga o'tishi kuzatilib, ma'lum bir temperatura oralig'ida suyuq holatga o'tadi. Qaytadan oddiy sovutish yo'li bilan amorf holatni olish mumkin emas. Moddalarning amorf holatini olish uchun suyuq holatidan kristall holatiga o'tishga imkon bermaydigan darajadagi juda katta tezlik ($v = 10^4 \div 10^{10}$ K/s) bilan keskin sovutish kerak. Bunday tezlik bilan sovutish usullaridan biri suyuq moddaning tomchilarini yaxshi issiqlik o'tkazuvchanlika ega bo'lgan katta tezlik bilan aylanayotgan massiv rangli metallardan (masalan, misdan) yasalgan diskka purkashdir. Amorf moddaning tuzilishi olingan suyuqligining tuzilishiga juda yaqin bo'ladi. Chunki amorflanish vaqtida suyuqlik strukturasi «muzlab», past temperaturada zarralari harakatchanligini yo'qotadi va qattiq bo'lib qoladi. Bundan keyingi sovutish bilan uning tuzilishini o'zgartirish mumkin emas. Chunki past temperaturalarda zarralar diffuziyasi amalda to'xtaydi.

Amorf jismlar qattiq jismlarning barcha mexanik xossalariga ega bo'lgani holda, o'ta qattiqligi, mustahkamligi, ximiyaviy barqarorligi tufayli katta amaliy ahamiyat kasb etadi. Shu bilan birga juda mo'rt, chatnash xossasiga ega. Amorf holatdagi moddalar lyuminessensiya xossasiga ega emas. Ularning ko'pchiligi yo ferromagnit, yo antferromagnitlardir. Amorf yarimo'tkazgichlar bir qator muhim xossalarga ega bo'lganligi uchun amalda foydalanish uchun tadqiqotlar olib borilmoqda. Amorf yarimo'tkazgichlar uch guruxga bo'linadi: amorf kovalent yarimo'tkazgichlar (amorf Ge, Si, InSb, GaAs va boshqalar), xalkogenid shishalar (masalan, $As_{31}Ge_{30}Se_{21}Te_{18}$), oksidli shishalar (masalan, $V_2O_5 - P_2O_5$) va dielektrik plyonkalar (SiO_x , Al_2O_3 , Si_3N_4 va boshqalar). Amorf yarimo'tkazgichlarda ham kristall yarimo'tkazgichlardek elektronlari-ning taqiqlangan zonasi ($0.01 - 3.5$ eV) bo'ladi (lokallashgan holatlar mavjudligi istisno tariqasida). Amorf selen avvaliga fotodatchik material sifatida, keyinroq kserografiyada qo'llanila boshlandi. Keyingi vaqtlarda xalkogenid shishalar - elementlar Davriy sistemasining 2-, 3- va 4-guruhlar elementlari sistemalarining VI gurux elementlari (S, Se, Te) bilan hosil qilgan birikmalari o'rganilmoqda. Ular infraqizil nurlarga shaffofligi, katta elektr qarshiligi va yuksak fotosezgirliги tufayli uzatuvchi televizor trubkalarida va gologrammalar yozishda foydalanilmoqda. Keyingi vaqtlarda amorf kremniy monokristall kremniyga

nisbatan arzon bo'lganligi uchun quyosh batareyalarida foydalanilmoqda va shu bois bu yo'nalishda fundamental va amaliy tadqiqotlar olib borish kuchaymoqda.

Ayrim amorf moddalar dielektrik plyonkalar MDP (metall - dielektrik - yarimo'tkazgich) strukturalarini hosil qilishda ishlatilmoqda.

4. Kristall jismlar. Kristall so'zi lotincha (krystallos - muz degani) bo'lib, kristall jismlarning eng asosiy xossasi ularning tashkil etgan zarralarining (atomlarining yoki molekulalarining) butun hajmi bo'ylab uch o'lchovli fazoda qat'iy tartib bilan joylashganligidir. Bunday tartiblanish **uzoq tartiblanish** deyiladi. Kristallarning bu xossasi ularni o'z-o'zidan muayyan yoqlarga ega bo'lgan geometriyaviy shakllarga ega bo'lishiga olib keladi. Kristallar har xil yo'llar bilan: eritmalarni sovushida, eritmaning to'yingan bug'ining sovushida, yetarlicha past temperaturalarda moddaning bug'laridan (masalan, oynadagi muz naqshlari) hosil bo'ladi. Modda suyuq holatdan (zarralarining tartibsiz ilgarilama harakatidan) kristall holatga (zarralari tartibli joylashgan holatga) o'tishi uchun ma'lum bir vaqt zarur bo'ladi. Bu vaqt **kristallanish vaqti** deb ataladi. Agar sovush tezligi ushbu kristallanish vaqtiga nisbatan qisqaroq bo'lsa, moddaning amorf yoki shishasimon holatlari hosil bo'lib, ularda zarralar yuqorida aytib o'tganimizdek suyuqliklardagidek tartibsiz joylashganicha qoladi. Fizika fanida **qattiq jism** deganda **moddaning kristall holati** nazarda tutiladi. Moddaning amorf va kristall holatlaridagi farq ularning erish (qotish) jarayonida yaxshi namoyon bo'ladi. Toza kristall moddalar amorf moddalardan farqli holda, aniq bir erish temperaturasiga ega bo'ladi.

Har qanday kristall butun hajmi bo'ylab takrorlanuvchi elementar yacheykasi bilan xarakterlanadi. Kristallarning tuzilishi ularning arxitekturasini vujudga keltiradi. Kristallar arxitekturasini (tuzilishini) o'rganuvchi fan **kristallografiya** deb ataladi. Kristall moddalar monokristallarga (mono grekcha yaxlit yoki gagona demakdir) va polikristallarga (poli grekcha ko'p demakdir) bo'linadi. Shakli va tuzilishi jihatdan o'ziga o'xshash va fazoda bir xil oriyentatsiyaga ega bo'lgan kichik kristalchalardan tarkib topgan yagona kristalldan iborat jismlar **monokristallar** yoki yaxlit kristallar deyiladi. Bunda kristalldagi atomlar va molekulalarning tuzilishi butun kristall bo'yicha saqlanadi. Monokristallarga osh tuzi, muz, olmos kabi moddalar kiradi. Kristallning tekis yoqlari yordamida tashkil topgan to'g'ri geometriyaviy shaklga ega ekanligi monokristallarning muhim tashqi belgisidir. Monokristallar

anizotropiya xossasiga ega, ularning istalgan muayyan xossasi fazoning turli yo'nalishlarida bir-biridan farq qiladi. Turli o'lchovdagi va turli oriyentatsiyali kichik monokristallchalardan tashkil topgan yaxlit qattiq jismlar **polikristallar** deb ataladi. Polikristallarga metallar, ularning qotishmalari, o'simlik tolalari, ba'zi oqsil moddalar kiradi. Polikristallarda kristall donachalari tartibsiz joylashganligi sababli uning fizik xossalari barcha yo'nalishlarda bir xil bo'lib qoladi, ya'ni **izotroplik** kasb etadi. Kristallar yaxshi o'tkazgich (metallar va ularning birikmalari, Elementlarning Dabriy sistemasidagi oralik metallarning karbidlari, nitridlari, grafit), yarimo'tkazgich (Si, Ge, ...), dielektrik (olmos, kvars, ...) xossalarini namoyon qilishi mumkin. Shuningdek, o'ta qiyin eruvchi, o'ta qattiq (oraliq metallarning karbidlari, nitridlari, olmos) yoki oson eruvchi, yumshoq (Sc, Rb, In) bo'lishlari mumkin. Har xil darajadagi plastiklik yoki mo'rtlik xossalariga ega bo'lishlari mumkin.

5. Suyuq kristallar. Ayni paytda kristallardek anizotroplik va suyuqliklardek oquvanlik xossalariga ega bo'lgan modda holati **suyuq kristall** deb ataladi. Suyuq kristallar molekulyar moddalar bo'lib, suyuqlik va kristall holatlar orasidagi oralik (**mezamorf**) holatlardir. Suyuq kristallarning bunday ikkilanma xossaga ega bo'lishiga sabab ular molekulalarining joylashuvidir. Ularda ayni paytda ma'lum bir sohalarida kristallardagidek tartiblanish, boshqa sohalarida suyuqlarnikidek yaqin tartiblanish yoki butunlay tartibsizlik mavjud bo'ladi. Ular muayyan temperaturalar oralig'ida mavjud bo'lib, bu oraliqdan pastda kristall holatda, yuqorida esa suyuq holatda bo'ladi. Cho'ziq molekulalari orasida ikki xil bog'lanish bor: uchlari bo'yicha va yon tomonlari orasida. Uchlari bo'yicha bo'lgan bog'lanish kuchlari molekulalarni bir safda tuzilishga majbur qilsa, yon tomonlar orasidagi kuchlar molekulalarga paralell yo'nalish (oriyentatsiya) beradi. Suyuq kristallarda ayrim qattiq kristallardagi singari optikaviy o'qlar mavjud bo'lib, bu o'qlar nurning ikkilanma sinishi, yorug'likning qutblanish tekisligining burilishi va boshqa optikaviy xossalarining namoyon bo'lishiga sabab bo'ladi. Qattiq kristallardagi mustahkam bog'langan optikaviy o'qlardan farqli holda, suyuq kristallardagi optikaviy o'qlar o'z yo'nalishlarini hatto zaif tashqi ta'sirlar ostida ham osongina o'zgartira oladi. Shuningdek, juda kichik kuchlanish ta'sirida ham suyuq kristall molekulalari o'z yo'nalishini oson o'zgartira oladi. Bu ularning molekulalari orasidagi ta'sir kuchlarining o'ta zaifligidandir. Ularning bu xossasidan amaliy maqsadlarda keng foydalanilmoqda. Ularning mikrometrning yuzdan bir

ulushidagi qalinlikdagi qatlamlari elektron soatlar, kalkulyatorlar, televizorlarning va mobil telefonlarning yassi ekranlari tayyorlashda ishlatilmoqda. Hozirgi vaqtda suyuq kristall hosil qiladigan bir necha ming moddalar ma'lum. Ma'lum bo'lishicha, odam miyasi o'z tabiati bilan murakkab suyuq kristall sistemasini tashkil etar ekan. Shuningdek, asab (nerv) hujayrasining qobiqlari, qizil qon donachalari – eritrotsitlar ham suyuq kristalllardir.

Suyuq kristallar garchi tabiatda ko'p uchrasa ham odamlar nigo-hidan yaqin yuz yillargacha pinhon bo'lib turgan. Uni 1888 yili Avstriya botanigi Reynitser kashf etadi. 1973 yilda ingliz ximiklari arzon xom ashyodan suyuq kristall olganlaridan keyingina ular amaliyotda keng tarqaldi va amaliy maqsadlarda ishlatila boshlandi.

Nanokristallar va nanozarralar. “Nano” termini grekcha “nanos” so'zidan olingan bo'lib, biror birlikning milliarddan bir qismi demakdir ($1 \text{ nanometr} = 10^{-9} \text{ m}$). Nanokristall deganda biz bilgan kristallarga xos bo'lgan anizotropik xossasiga ega, atomlari tartibli joylashgan va aniq tomonlaridan hech bo'lmaganda fazoning bir yo'nalishida nanoo'lchamga ($1 \div 100 \text{ nm}$) ega bo'lgan zarra tushuniladi. Qisqaroq qilib aytsak, **nanokristall** bu uch o'lchovli fazoning hech bo'lmaganda bir yo'nalishida $1 - 100 \text{ nm}$ o'lchamga ega bo'lgan kristalldir. O'lchami 100 nm dan katta bo'lgan qattiq jism **submikron zarra** deyilib, o'lchami 1 nm dan kichik qattiq jism **klaster** deb ataladi. **Nanoo'lchamdagi nanozarralar** nanokristall holatda ham, amorf holatda ham bo'lishi mumkin. Nanozarralardan tashkil topgan va tarkibida nanozarralar mavjudligi tufayli qandaydir noyob xossalarga ega bo'lgan material **nanomaterial** deyiladi.

Ma'lumki, makroskopik moddalarning fizikaviy va ximiyaviy xossalari ularning miqdoriga va o'lchamlariga nisbatan **invariantdir** (bir xildir). Nanosistemalarda esa “o'lcham effekti”, ya'ni ularning xossalari-ning o'lchamlariga bog'liq bo'lishi, kvant xossalari namoyon bo'lishi kuzatiladi.

«O'lcham effekti» tufayli nanokristallar yoki nanomateriallar fizikaviy va ximiyaviy xossalari bilan makroskopik moddalardan tubdan farq qiladi. Ularning termodinamikaviy muvozanat shartlari, holat diagrammalari, ularning xossalarini belgilovchi qonuniyatlar o'ziga xos tarzda namoyon bo'ladi. Nanokristallar va nanomateriallar haqidagi bilimlar fizikaning mustaqil bo'limi sifatida shakllanib, rivojlanib bormoqda. Fanning nanofizika, nanoximiya kabi yo'nalishlari paydo

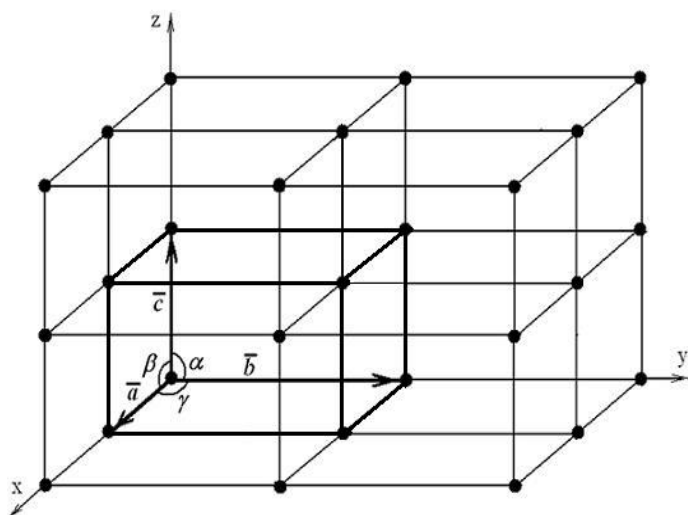
bo‘lmoqda. Nanokristallar va nanomateriallar bilan ish ko‘ruvchi nanotexnologiya paydo bo‘lib, rivojlanib bormoqda. Bu omillarning hammasi nanokristallarni yoki nanomateriallarni kondensatsiyalangan muhitning mustaqil bir turi sifatida qarashga asos bo‘ladi. Hozir nanotexnologiya turli noorganik nanokristallar olishga imkon beradi. Ular turli metall (ko‘pincha Fe) va qotishmalar asosida, Al_2O_3 , Cr_2O_3 va shu kabi sodda oksidlar, shpinel $\text{SoO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3$, kordiyerit $2\text{MgO} \cdot 2\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 3\text{Al}_2\text{O}_3$ kabi murakkab oksidlar, nitridlar (AlN , TiN kabilar), karbidlar (TiC , ZrC kabilar), karbonitridlar (TiCN), uglerod va yarimo‘tkazgichlar (SdS , CdSe , InP va boshqalar) asosida bo‘lishi mumkin.

Nanokristallar va nanomateriallar inson faoliyatining deyarli barcha sohalariga jadal sur‘atlar bilan kirib keldi. Bular informatsiya va kompyuterlar texnologiyasi, kosmonavtika, radioelektronika, mashinasozlik, biologiya va meditsina, yadroviy energetika, asbobsozlik, mudofaa sanoati va ekologiyadir.

1.3. Kristallarning tuzilishi

1.3.1. Kristall panjara

Kristallar atomlardan yoki ionlardan, yoki molekulalardan tashkil topgan bo‘lishi mumkin. Bunday atom, ion yoki molekula **asos (basis)** deb ataladi. Ideal kristallni aynan bir xil atomlarning, ionlarning yoki molekulalarning uch o‘lchovli fazoning hamma uch yo‘nalishida ma‘lum bir davriylik bilan joylashgan cheksiz qatorlari sifatida tasavvur qilish mumkin. Bazislar o‘z muvozanat markazlari atrofida faqat issiqlik tebranishlarida bo‘ladi. Bazislarning muvozanat markazlarini fazoda x , y va z yo‘nalalishlar bo‘ylab xayolan to‘g‘ri chiziqlar bilan birlashtirsak, **ideal kristall panjara** hosil bo‘ladi (1.1-rasm). Bazislarning muvozanat markazlari **kristall panjara tugunlari** deb ataladi. Koordinata boshidagi



1.1-rasm. Kristall panjara.

bazisdan x, y va z o'qlar bo'yicha eng yaqin bazislargacha bo'lgan mos holdagi $\bar{a}, \bar{b}, \bar{c}$ vektorlar **ko'chish (translyatsiya) vektorlari** deyiladi. Ushbu vektorlarning moduli bo'lgan, a, b va c kattaliklar **panjara doimiylari** deyiladi. Bu kattaliklar qaralayotgan kristallar tabiatiga qarab, o'zaro teng bo'lishi ham, teng bo'lmasligi ham mumkin. Shunindek, bu vektorlar orasidagi α, β va γ burchaklarning qiymatlari ham o'zaro har xil munosabatda (teng yoki tengmas) bo'lishlari mumkin. Istalgan kristallning uch o'lchovli fazodagi asoslari markazlarining (panjara tugunining) koordinata boshiga nisbatan joylari quyidagi ko'chish vektori bilan aniqlanadi:

$$\bar{r} = n_1\bar{a} + n_2\bar{b} + n_3\bar{c}, \quad (1.1)$$

bunda $\bar{a}, \bar{b}, \bar{c}$ vektorlar shunday tanlanishi kerakki, bunda n_1, n_2, n_3 kattaliklar faqat butun sonlarni qabul qiladi. $\bar{a}, \bar{b}, \bar{c}$ vektorlarning yo'nalishlari (mos holda koordinatalar sistemasining x, y, z yo'nalishlari bo'yicha) **ko'chish o'qlari** deyiladi. Fazoviy panjarada tugunning yoki asosning joyi berilgan koordinatalar sistemasi boshiga nisbatan aniqlanadi.

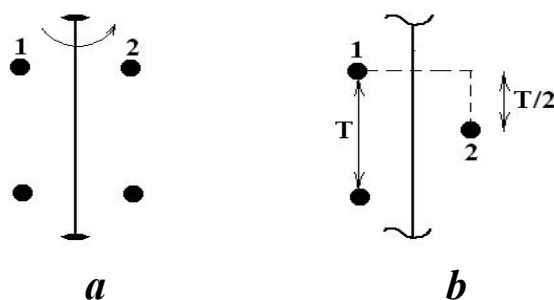
1.3.2. Kristallarda simmetriya elementlari

Kristallni tashkil etgan atomlar, ionlar yoki molekulalarning uch o'lchovli fazoda davriy joylashuvi natijasida unda simmetriya elementlari paydo bo'ladi. **Simmetriya elementlari** shunday geometrik tasavvurki, kristall bazisi (kristall atomi, ioni yoki molekulasi) ustida bu tasavvur yordamida fazoda ma'lum bir amallarni (ko'chirish, burish, akslantirish yoki ular yordamida aralash amallarni) bajarish natijasida pirovard oqibatda bazis o'z-o'zi bilan ustma-ust tushadi va barcha yo'nalishlardagi fizikaviy xossalari o'zgarishsiz qoladi. **Ko'chish vektorlari** ham simmetriya elementlari hisoblanib, **ko'chish simmetriyasi** deyiladi.

Agar kristall asosini (bazisini) tasavvurdagi biror o'qqa nisbatan ma'lum bir kichik burchakka burib, aynan shunday asos bilan ustma-ust tushirish mumkin bo'lsa, bu o'q **simmetriya o'qi** bo'ladi. Simmetriya o'qi atrofida (360° burchakda) asosni necha marta burib, aynan o'ziga o'xshashi bilan ustma-ust tushirish mumkin bo'lgan son **simmetriya o'qining tartibi** deyiladi. Bu son n quyidagi formuladan topiladi:

$$n = 360^\circ/\alpha, \quad (1.2)$$

bunda α – burish burchagi bo‘lib, 360^0 , 180^0 , 120^0 , 90^0 , 60^0 qiymatlarnigina qabul qilishi mumkin. Demak, simmetriya o‘qi faqat 1-, 2-, 3-, 4- va 6- tartibligina bo‘lishi mumkin. Mos holda ular 1, 2, ..., 6 raqamlari bilan belgilanadi. 1.2 a-rasmda 2-tartibli simmetriya o‘qi tasvirlangan. Kristallarda 5 - tartibli simmetriya o‘qi bo‘lishi mumkin emas va $n > 6$ tartibli simmetriya o‘qlari uchramaydi. Bunga sabab shuki,

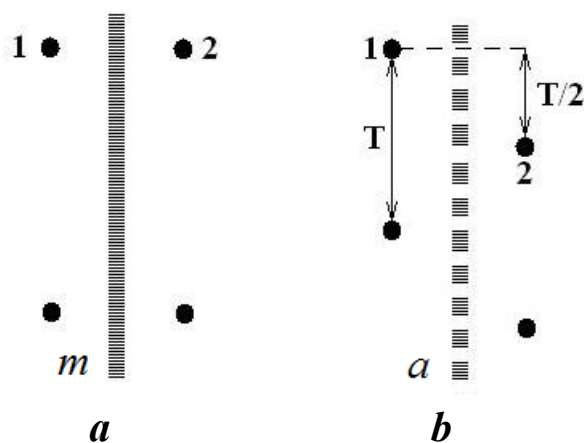


1.2-rasm. 2- tartibli simmetriya o‘qi - 2 (a) va $1/2$ davrli 2- tartibli sirpanuvchi simmetriya o‘qi - 2_1 (b).

bunday xossaga ega bo‘lgan elementar geometrik shaklni fazoda translyatsiya vektorlari orqali parallel ko‘chirib kristall panjara hosil qilib bo‘lmaydi. Masalan, ko‘z oldimizga besh qirrali yulduzchani keltiraylik. Uning markazi 5-tartibli simmetriya o‘qi bo‘ladi. Ammo ularni fazoda ko‘chirish vektorlari orqali ko‘chirib zich qilib terish mumkin emas. Yulduzchalar orasida bo‘sh joylar qoladi. Bu bo‘sh joylar **nomuvofiq bo‘shliqlar** deyiladi. Kristallarda $n > 6$ tartibli simmetriya o‘qlari bo‘lmasligi ham shunday tushuntiriladi. Ammo shuni aytib o‘tish kerakki, nanoo‘lchamli (1-100 nm) metall yoki qotishma zarralarida va klasterlarda 5- va undan yuqori tartibli simmetriya o‘qlari kuzatiladi. Bunday moddalar **kvazikristallar** deb ataladi. 5-tartibli simmetriya o‘qiga ega bo‘lgan nanozarralardan tashkil topgan makromasshtabli zarralar hosil bo‘lishi nanokristallar orasida bo‘shliqlar va ichki elastik deformatsiyalar tufayli deb tushuntiriladi. Kvazikristall birinchi marta 1984 yilda D. Shextman tomonidan alyuminiy bilan marganets qotishmasini yuqori temperaturadan sekundiga 1 mln. gradus tezlik bilan sovutilganda kuzatilgan. Bu kashfiyoti uchun Shextman 2011 yilda Nobel mukofotiga sazovor bo‘lgan. Hozirgi vaqtda ko‘plab qotishmalarining kvazikristallari kuzatilgan.

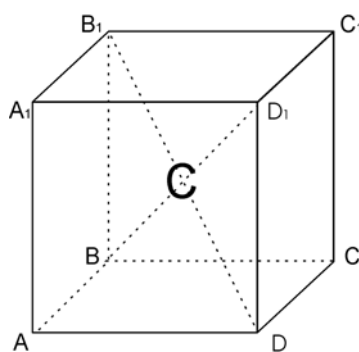
Kristallarda vintli simmetriya o‘qi ham mavjud bo‘lishi mumkin. Bu operatsiyada kristall bazisini biror o‘q bo‘yicha ma’lum bir burchakka burib, qandaydir T **ko‘chish davrining** biror ulushiga ko‘chirish

kerak (1.2 *b*-rasm). Agar nuqtalar (kristall tugunlari) sistemasining davriy takrorlanishida biror o'qqa perpendikulyar shunday tekislik topish mumkin bo'lib, nuqtalar sistemasini ushbu tekislikdan ko'zgu aks ettirib olish mumkin bo'lsa, bu nuqtalar sistemi **simmetriya tekisligiga** ega deyiladi va m bilan belgilanadi. Kristallografiyaning Xalqaro belgilashlarida m harfi mirror – ko'zgu so'zining birinchi harfidir. Simmetriya tekisligi ham simmetriya o'qiga o'xshab **oddiy** va **sirpanuvchi simmetriya tekisliklariga** bo'linadi. Sirpanuvchi simmetriya tekisliklari x , y va z o'qlariga nisbatan sirpanishiga qarab mos holda a , b va c harflari bilan belgilanadi. 1.3–rasmدا oddiy va sirpanuvchi simmetriya tekisliklari aks ettirilgan. Agar sirpanish elementar yacheykaning D diagonalni bo'yicha bo'lsa va davri D diagonalning $1/2$ qismiga teng bo'lsa, n bilan, D ning $1/4$ qismiga teng bo'lsa, d bilan belgilanadi.



1.3-rasm. Oddiy (a) va sirpanuvchi (b) simmetriya tekisliklari.

Simmetriya markazi (yoki inversiya markazi) kristallning shunday nuqtasiki, bu nuqtaga nisbatan akslangan kristallning istalgan bazisi o'ziga ekvivalent holatga o'tadi, ya'ni dastlabki va inversiya markaziga nisbatan akslangan bazislar inversiya nuqtasidan o'tgan bitta o'qda markazdan barobar uzoqlikda yotuvchi cho'qqilar hisoblanadi. 1.4 - rasmدا diagonalari kesishgan nuqta inversiya markaziga ega bo'lgan kub elementar yacheykasi ko'rsatilgan. Inversiya markazining Xalqaro belgisi $\bar{1}$. Grafiklarda c shaklida belgilanadi. Bu simmetriya elementi ustida operatsiya bajarish natijasida quyidagi o'tish sodir bo'ladi: $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$, ya'ni **inversiya markazi** mavjud bo'lganda bu markazga nisbatan kristalldagi x , y , z koordinatali biror nuqtaga $-x$, $-y$, $-z$ koordinatali aynan shunday nuqta mos keladi. Shuningdek, kristallda **inversiyali simmetriya o'qi** ham mavjud bo'lishi mumkin. Bunda atom yoki bazis



1.4-rasm. Kub kristall panjarasidagi inversiya (simmetriya) markazi.

simmetriya o'qidagidek ma'lum bir burchakka buriladi va inversiya markaziga nisbatan aks ettiriladi. Inversiyali simmetriya elementining belgilanishi $\bar{n}$ bo'lib, n butun soni simmetriya o'qining tartibini bildiradi.

Simmetriya tekisliklari, o'qlari va inversiya markazlari va ularning mumkin bo'lgan barcha kombinatsiyalari soni cheklangandir va ularning jami 32 tadir. Bitta kristalda barcha simmetriya elementlari mavjud bo'la olmaydi. 1.5-rasmda kristallardagi simmetriya elementlari va ularning belgilanishi ko'rsatilgan. 32 simmetriya elementlari to'plami matematikaviy nuqtai nazardan **simmetriyaning nuqtaviy guruhlar**i deyiladi.

Aylanish o'qlari				Vintli o'qlar				Sirpanib aks ettiruvchi tekisliklar			
Xalqaro simbol	Chizmada tasvirlash			Xalqaro simbol	Chizmada tasvirlash			Xalqaro simbol	Chizmada tasvirlash		
	vertikal.	gorizont.	naklon.		vertikal.	gorizont.	naklon.		vertikal.	gorizont.	naklon.
1	—	—	—	2 ₁				a			
2				3 ₁		—					
3		—		3 ₂		—		b			
4			—	4 ₁			—				
6		—	—	4 ₂			—	c			
Inversiya o'qlari va akslantiruvchi tekislik				4 ₃			—				
$\bar{1}$		—	—	6 ₁		—	—	n			
$\bar{3}$		—	—	6 ₂		—	—				
$\bar{4}$			—	6 ₃		—	—	d			
$\bar{6}$		—	—	6 ₄		—	—				
m	—			6 ₅		—	—				

1.5-rasm. Simmetriya elementlari va ularning chizmalarda tasvirlanishi.

Bunday deyilishiga sabab shuki, ular yordamida istalgan simmetriyaviy operatsiyalarni bajarganda kristalda hech bo'lmaganda bitta nuqta qo'zg'almas bo'lib qolaveradi yoki boshqacha aytganda, barcha 32 simmetriya elementlarini o'z-o'zlariga parallel ko'chirganda, ular koordinata boshida bitta nuqtada kesishadi. Yana ham boshqacharoq aytsak, bu 32 ta simmetriya elementlari bilan operatsiyalar bajarganda kristall bazislarining muvozanat markazlari ilgarilama harakat qilmaydi va fazoda siljimaydi. Shu nuqtai nazardan ham ular nuqtaviy guruhlar deb ataladi.

1.3.3. Kristallar singoniyalari va Brave yacheykalari

Kristall panjaraning $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$ ko'chish vektorlari modullarining (a , b , c) va ularning orasidagi α , β va γ burchaklarning (1.1-rasm) o'zaro munosabatlariga qarab kristallar yettita singoniyaga (grekcha *sin* – o'xshash, *gonia* - burchak demakdir) bo'linadi. 1.1- jadvalda bu singoniyalarning nomlari, ularning panjara doimiylari va α , β , γ burchaklari orasidagi munosabatlar berilgan. Ushbu yettita singoniyani aniqlovchi $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$ vektorlar va α , β va γ burchaklar asosida qurilgan parallelepiped **elementar yacheyka** deyiladi. Agar ushbu elementar yacheykaning

1.1-jadval

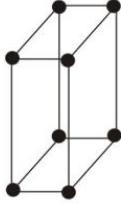
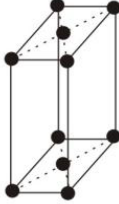
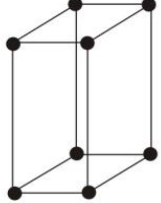
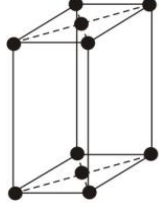
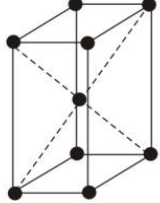
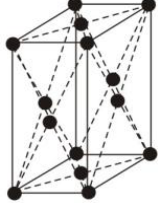
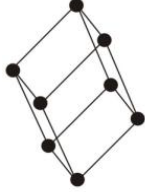
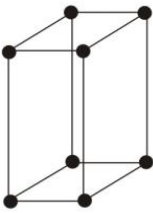
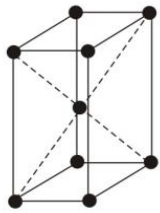
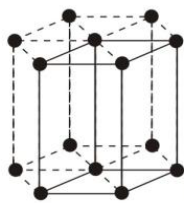
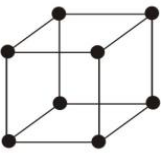
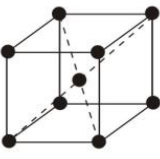
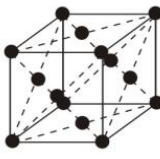
Kristallarning singoniyagalarining [xarakteristikalari.

№	Singoniya nomlari	Panjara doimiylari orasidagi munosabat	O'qlar oralaridagi burchaklarining Munosabatlari
1	Kub	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^0$
2	Tetragonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^0$
3	Geksagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^0, \gamma = 120^0$
4	Trigonal yoki romboedrik	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^0$
5	Romb	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^0$
6	Monoklin	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^0, \gamma \neq 90^0$
7	Triklin	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^0$

faqat uchlaridagina kristallni tashkil etgan zarralar (struktura elementlari-bazislar) joylashgan bo'lsa, bunday elementar yacheyka **oddiy** (primitiv) **elementar yacheyka** deyiladi. Primitiv yacheyka **P** (Primitive) harfi bilan belgilanadi. Geksagonal, trigonal va triklin singoniyalargina faqat primitiv elementar yacheykalarga ega. Boshqa singoniyalar primitiv elementar yacheykadan boshqa yana bir muncha murakkab elementar

yacheykalarga ega bo'ladi. Gap shundaki, primitiv yacheyka hamma vaqt panjara haqida to'la tasavvur bermaydi. Chunki primitiv elementar yacheyka faqat translyatsiya simmetriyasinigina to'la aks ettirib, kristaldagi boshqa simmetriya elementlarini to'la aks ettirmaydi. Ayrim hollarda elementar yacheykaning uchlaridagina (cho'qqilaridagina) emas, boshqa qismlarida ham struktura elementlari bo'lishi mumkin. Bu holda faqatgina panjara uchlari uning tugunlari bo'lmay qoladi. Masalan, kub singoniyasida kub uchlaridan tashqari uning markazida ham bitta tugun yoki tomonlarining markazlarida ham bittadan tugunlar bo'lishi mumkin. Endi bu tugunlarni koordinata boshidagi struktura elementidan translyatsiya simmetriyasi (ko'chirish vektori) yordamida olib bo'lmaydi va simmetriyaning boshqa elementlarini qo'llashga to'g'ri keladi. Shuning uchun kristall panjarada har qanday real elementar yacheykani tanlash uchun quyidagi shartlarga amal qilish kerak: **elementar yacheyka** uchun tanlangan parallelepiped minimal hajmga ega bo'lgan holda uning qirralari orasidagi to'g'ri burchaklar soni maksimal bo'lib, kristall panjaraning barcha asosiy simmetriya elementlarini o'zida mujassamlantirgan bo'lishi kerak. 1855 yili fransuz olimi O. Brave sof geometrik tasavvurlardan kelib chiqib, kristallarda faqat 14 xil elementar yacheykalargina turg'un bo'lishi mumkinligini ko'rsatdi. Bu elementar yacheykalar **Brave elementar yacheykalari** deyiladi. Ular 1.6-rasmda ko'rsatilgan. Ushbu rasmdan ko'rinib turibdiki, masalan, kub elementar yacheykasi uch xil: primitiv, hajmi markazlashgan yoki tomonlari markazlashgan bo'lishi mumkin ekan. Xalqaro belgilashlarga ko'ra hajmi markazlashgan elementar yacheykalar **I** harfi bilan belgilanadi (interior-ichki qism). Tomonlari markazlashgan yacheykalar **F** harfi bilan belgilanadi (face – tomon, yoq). Yana shunday elementar yacheykalar bo'ladiki, ularning $\vec{c}$ o'qiga perpendikulyar bo'lgan qarama-qarshi asoslarining markazlarida ham bittadan tugun, ya'ni struktura elementi bo'ladi. Bunday elementar yacheykalar **C** harfi bilan belgilanadi ($\vec{c}$ -o'qiga perpendikulyar tomonlar markazlashgan degan ma'noda). Agar panjaraning $\vec{a}$ yoki $\vec{b}$ o'qlariga perpendikulyar tomonlari markazlashgan bo'lsa, bunday elementar yacheykalar mos holda **A** yoki **B** deb belgilanadi. Ammo bular **C** elementar yacheykaning xususiy hollaridir (o'qlar o'rnini almashtirish mumkin). 1.6-rasmdan ko'rinib turibdiki, panjara tugunlari koordinatalar sistemasida x , y va z koordinatalari orqali bir qiymatli aniqlanadi.

Agar fazoviy panjaradagi tugunlar (asoslar) koordinatalarini angstromlarda yoki santimetrlarda emas, balki elementar yacheyka qirralari

Singoniya	Elementar yachayka tiplari			
	Primitiv - P	Asoslari markazlashgan - C	Hajmi markazlashgan - I	Tomonlari markazlashgan - F
Triklin				
Monoklin				
Romb				
Trigonal (romboedrik - R)				
Tetragonal				
Geksagonal				
Kub	 P		 I	 F

1.6-rasm. 14 ta oddiy va murakkab Brave yacheykalari.

bo'yicha translyatsiya birliklaridagi masshtabda belgilasak, u vaqtda panjaradagi istalgan bir nuqtani koordinata boshi bilan bog'lovchi **radius-vektor** ifodasi (1.1) endi quyidagicha aniqlanadi:

$$\vec{r} = x\vec{a} + y\vec{b} + z\vec{c}, \quad (1.3)$$

bunda x , y va z qaralayotgan nuqtaning koordinatalari hisoblanib, $0 \leq x, y, z \leq 1$ shart bajariladi. Elementar yacheykaning burchaklari uchlarida yotmaydigan nuqtalar koordinatalari kasr sonlar bo'ladi. Masalan, kub yacheykaning markazidagi nuqta koordinatasi $1/2, 1/2, 1/2$ bo'lsa, yacheyka asosining o'rtasidagi nuqta koordinatasi $1/2, 1/2, 0$ bo'ladi.

1.3.4. Kristallarning fazoviy guruhleri

Simmetriya elementlarining 32 ta nuqtaviy to'plami ularni elementar yacheyka doirasidagi biror nuqtaga nisbatan olib qaraydi. Kristall simmetriyasini uch o'lchovli fazoda olib qaralsa, simmetriya elementlari ko'payadi, vintli o'q va sirpanuvchi akslantiruvchi tekislik paydo bo'ladi. Simmetriya operatsiyalarining yangi imkoniyatlari paydo bo'ladi. Natijada nuqtaviy simmetriya elementlari va panjara translyatsiyasining mumkin bo'lgan barcha kombinatsiyasidan kristallarning mumkin bo'lgan 230 ta **fazoviy guruh** kelib chiqadi. Bu fazoviy guruhlarining mavjudligini bir vaqtda Fedorov va Shenflis isbot qilganlar (1890 y.). Kristallarning 230 fazoviy guruhlarini tashkil etgan har bir fazoviy guruhning o'zining shartli belgisi bor. Ularni belgilashni bir nechta usullari bor: Fedorov bo'yicha, Shenflis bo'yicha, German-Mogen bo'yicha va boshqalar. German-Mogen belgilashlari fazoviy guruhlarining zamonaviy Xalqaro belgilashlari sifatida qabul qilingan. Shuning uchun biz quyida faqat ushbu Xalqaro belgilashlar haqida to'laroq ma'lumot berib o'tamiz. Fedorov va Shenflis belgilashlari tarixiy ahamiyatga ega. Ammo hanuzgacha ayrim ilmiy adabiyotlarda Shenflis belgilashlaridan ham foydalanadilar. Shuning uchun "Kristallografiya bo'yicha Xalqaro jadval"da har bir fazoviy guruh tafsilotining boshida Shenflis va German-Mogen belgilashlari keltiriladi. Shenflis belgilashlarida yuqorgi va pastki indeks larga ega bo'lgan S , D , O , T kabi harflardan foydalaniladi. Bunda har bir harf ma'lum bir nuqtaviy guruhdan keltirib chiqarish mumkin bo'lgan fazoviy guruhlarining belgisi hisoblanadi. Fazoviy guruhni belgilochi harfning yuqorigi indeksi mumkin bo'lgan barcha guruhlardan aniq bittasini ifodalab, pastki indeks

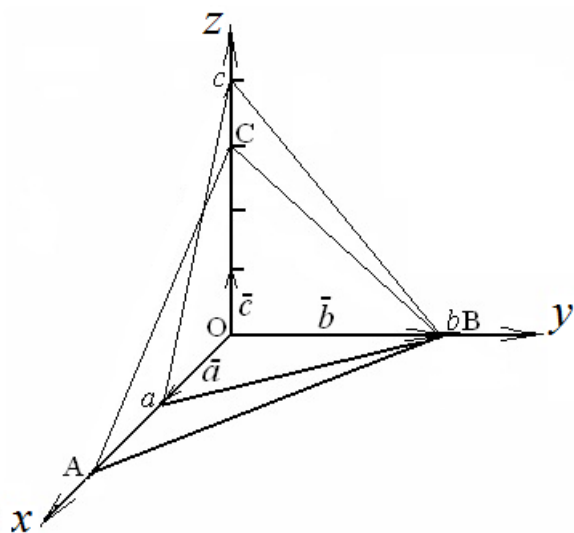
simmetriya o'qining tartibini va qaralayotgan o'qqa nisbatan vaziyatini (v-vertical yoki h-horizontal ekanligini) belgilaydi.

Xalqaro kelishuvga ko'ra, fazoviy guruhning belgilanishi Bravais elementar yacheykasining harfiy belgisidan boshlanadi. So'ngra mazkur fazoviy guruhni to'la tasavvur qilish uchun zarur (etarli) bo'lgan barcha simmetriya elementlari beriladi. Masalan, NaCl kristalli $Fm\bar{3}m$ fazoviy guruhga mansubdir. Ushbu fazoviy guruh ifodasidagi F harfi NaCl kristallining elementar yacheykasi tomonlari markazlashgan kub ekanligini bildiradi. $m - \vec{a}$ o'qiga parallel ($\vec{c}$ o'qiga perpendikulyar) simmetriya tekisligini ifodalaydi. $\bar{3}$ – uchinchi tartibli inversiya o'qi mavjudligini qayd qiladi. $\bar{3}$ sonidan keyingi m ushbu uchinchi tartibli inversiya o'qiga parallel simmetriya tekisligi mavjudligini bildiradi. Endi $I\bar{4}m$ fazoviy guruh simvolini tahlil qilamiz: I – elementar yacheykasi hajmi markazlashgan kub; $\bar{4}$ - to'rtinchi tartibli inversiya o'qi va unga parallel m simmetriya tekisligi mavjud. $I4_1/acd$ – bu hajmi markazlashgan tetragonal elementar yacheykali va x-o'qi bo'yicha 4 - tartibli vintli simmetriya o'qiga ega; unga perpendikulyar bo'lgan a va c tipidagi hamda kvadrat diagonali bo'yicha d tipidagi simmetriya tekisliklari mavjud. $R\bar{3}m$ – romboedr (trigonal) elementar yacheykali, x- o'qi bo'yicha 3 –tartibli inversiya o'qi va unga parallel m simmetriya tekisligi mavjud. Xullas, fazoviy guruhlar simvolikasida (belgilashlarda) elementar yacheyka tipidan keyin x, y, z yo'nalishlar bo'yicha eng muhim simmetriya elementlari beriladi. Fazoviy guruhlarda struktura elementlari (bazislar) simmetriya elementlarida joylashsa **xususiy holatda** (pozitsiyada), simmetriya elementlaridan tashqarida joylashsa, **umumiy holatda** (pozitsiyada) joylashgan hisoblanadi.

1.3.5. Kristall tekisliklari va yo'nalishlari indekslari

R.-J. Gay-Lussac geometriyaviy kristallografiyada **butun sonlar qonuni**ni kashf qildi (1801 y.). Bu qonun quyidagicha ta'riflanadi: kristall tomonlarini uch koordinata o'qlarida maxsus birliklarda kesuvchi kesmalarining (parametrlarining) nisbati butun va o'zaro sodda sonlardir. Fazoda kristall tomonining vaziyati uning koordinata o'qlarini kesuvchi kesmalar kattaligi bilan bir qiymatli aniqlanadi. Masalan, x, y va z koordinatalar berilgan bo'lsa, 1.7-rasmdagi ABC tomon OA, OB va OC kesmalar bilan bir qiymatli aniqlanadi. Agar har bir o'q bo'yicha kesib o'tadigan kesmalarni mos holda $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$ panjara doimiylarining mos masshtablarida tanlasak, u holda ABC tomonning holati butun sonlar

qonuniyatiga bo'ysunadi. Birlik parametrlar sifatida ayni kristallning biror tomoni, masalan, acb tomoni x, y, z o'qlarni kesib o'tishidan hosil bo'lgan kesmalar, ya'ni Oa, Ob va Oc kesmalar olinishi mumkin (1.7-rasm). U holda, $\frac{OA}{Oa} = \frac{OB}{Ob} = \frac{OC}{Oc} = \frac{2}{1} = \frac{1}{1} = \frac{3}{4} = 8:4:3$ nisbatni hosil qilamiz (kesmalar nisbati umumiy maxrajga keltirildi). Bunda OA, OB va OC kesmalarning absolyut qiymatlari o'z qiymatlarini yo'qotadi va ABC



1.7-rasm. Ikkita dipiramidaviy tomonlarning koordinata o'qlariga nisbatan holatlari.

tomonni esa o'z-o'ziga parallel istalgan holatga ko'chuvchi tomon sifatida tasavvur qilish mumkin. Odatda tomonning koordinata boshiga nisbatan holati qaraladi. Bu holda kristallografiyada fazoda kristall tekisliklarini aniqlash uchun yuqoridagidek butun kristall koordinata boshiga nisbatan o'tuvchi tekisliklar (tomonlar) sistemasi sifatida butun sonlarning to'g'ri nisbatlarini emas, balki ularning teskari qiymatlari olinadi va ularni eng kichik umumiy maxrajga keltiriladi:

$$\frac{1}{OA/Oa} : \frac{1}{OB/Ob} : \frac{1}{OC/Oc} = \frac{1}{8} : \frac{1}{4} : \frac{1}{3} = 3:6:8.$$

Ushbu misolda eng kichik umumiy maxraj qilib 24 soni olindi. Bu kattaliklarning har biri ma'lum koordinatalar o'qining ma'lum biri bo'yicha **kristall tekisligi indeksi** deyiladi va mos holda h, k, l deb belgilanadi. Tekislik indeksleri ular orasida hech qanday ishoralarsiz oddiy qavs ichiga olinadi: (hkl) yoki $(h\bar{k}l)$. 1.7-rasmdagi ABC tekislikning indeksi (368) yoki $(3\bar{6}8)$ ko'rinishida belgilanadi. Agar tekislik indeksi ichida ikki xonali son bo'lsa, u holda sonlar nuqta bilan ajratiladi. Masalan, $(10.3.4)$. Bu simvol tekislik indeksleri x o'qi bo'yicha $h = 10, y$

o'qi bo'yicha $k = 3$, z o'qi bo'yicha $l = 4$ ekanligini bildiradi. Kristallar-ning ko'pchilik real tomonlarining indekslarining soni 10 sonidan kichik bo'ladi.

Kristallografiyada kesmalar nisbatlarining teskari qiymatlarini olishga sabab shuki, bunda agar tekislik koordinata o'qlarining bironta-siga parallel bo'lsa uning indeksi cheksizlik emas, balki nol bo'ladi. Agar tekislik kristallografiyaviy o'qni manfiy yo'nalishda kesib o'tsa, mos indeks manfiy hisoblanadi va bu ishora indeks tepasiga qo'yiladi. Masalan, qarayotgan tekislik y o'qining manfiy yo'nalishida kesib o'tsin deylik. U holda ushbu tekislikning indeksleri mos holda $(h\bar{k}l)$ bo'ladi. Geksagonal singoniyada ayrim masalalarda qulaylik uchun bitta vertikal z o'qi va asosining qirralariga parallel va o'zaro 120° burchak hosil qiluvchi uchta gorizontaal x , y , t o'qlardan foydalanish qabul qilingan. Bu holda tekislikning indeksleri to'rtta sondan iborat bo'lib, $(hkil)$ yoki $(hkil)$ kabi belgilanadi. Bu yerda gorizontaal t o'qqa mos keluvchi indeks i quyidagicha aniqlanadi: $i = -(h+k)$. Ko'p hollarda bu indeksni e'tiborga olmaydilar, chunki u mustaqil ma'noga ega emas. Kristall panjara tekisliklari indeksleri uni kashf qilgan olim sharafiga **Miller indeksleri** deb ham ataladi. Shunday qilib, kristall tekisliklari-ning Miller indekslarini aniqlash uchun quyidagicha ish ko'riladi:

a) qarayotgan tekislik fazodagi koordinatalar sistemasining x , y va z o'qlarini qanday o'q birliklarida (kristall panjaraning mos doimiylarini qanday ulushlarida) kesib o'tayotganini aniqlash kerak;

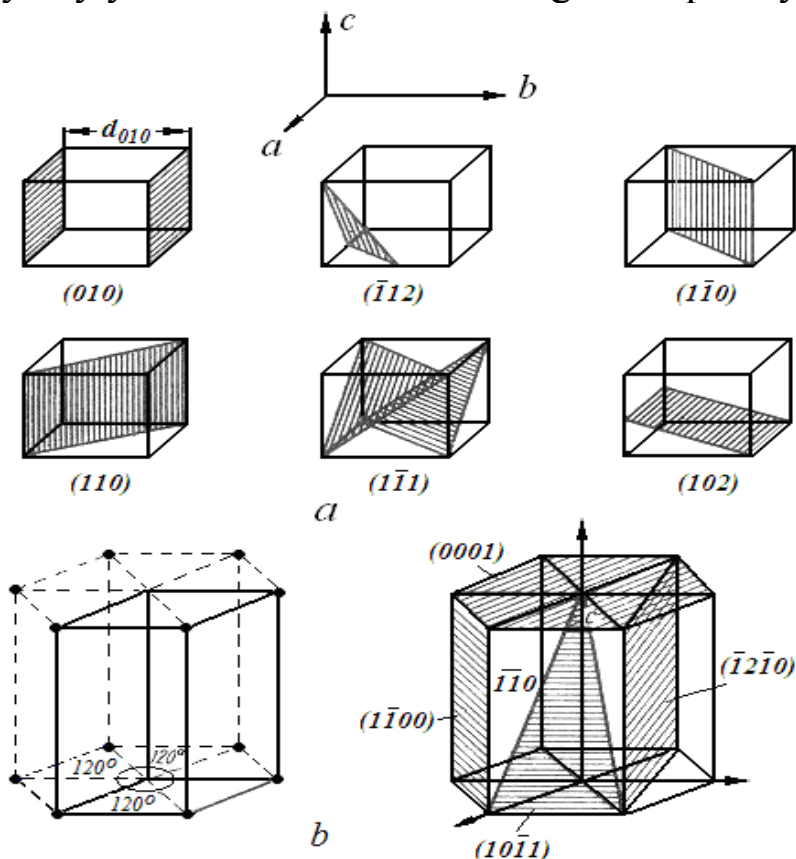
b) aniqlangan sonlarning teskari qiymatlarini olish kerak;

d) ularning munosabatini saqlagan holda eng kichik umumiy maxrajga keltirish kerak.

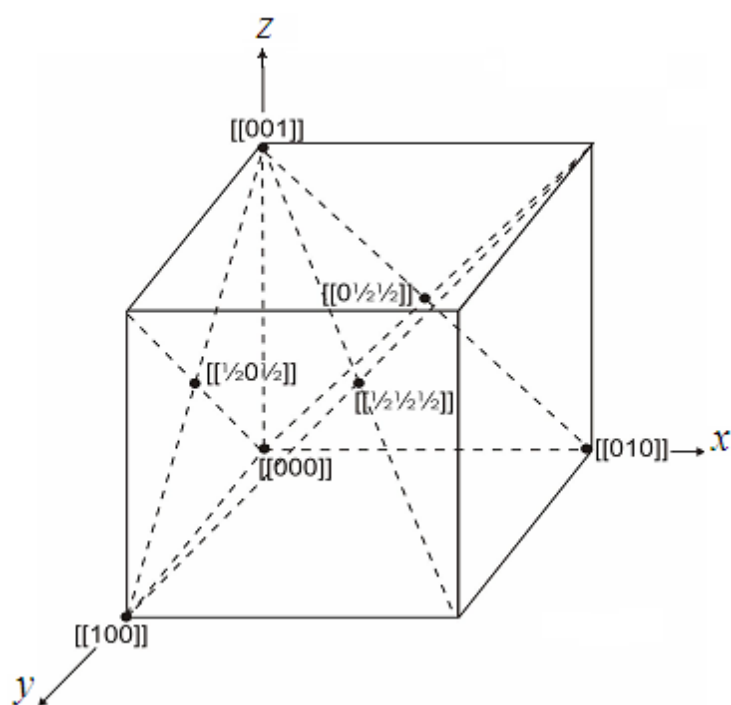
1.8 - rasmda mos holda kub (*a*) va geksagonal (*b*) kristall panjarala-rining eng muhim tekisliklari va ularning Miller indeksleri tasvirlangan. Kristall panjarasi tugunlarining panjara doimiylarining birlik ulushlarida olingan koordinatalari ularning **kristallografiyaviy indeksleri** deyiladi va ikkilangan kvadrat qavs ichida beriladi. Bunda tugunning x o'qiga mos keluvchi o'rni umumiy holda $x/a = u$ bilan, y o'qiga mos keluvchi o'rni $y/b = v$ bilan, z o'qi uchun esa $z/c = w$ bilan belgilanadi. Ushbu belgilashlarda x -, y -, z - kristall atomining yoki bazisining panjaradagi $\vec{a}$, $\vec{b}$ va $\vec{c}$ o'qlari bo'yicha koordinatalari. Tugun simvoli (belgisi) esa $[[uvw]]$ ko'rinishida belgilanadi. Masalan, hajmi markazlashgan kub elementar yacheykaning hajmining o'rtasidagi atomining (tugunning) indeksi $[[1/2 \ 1/2 \ 1/2]]$ bo'ladi. Tomonlari markazlashgan kub

panjarasining elementar yacheykasida chap tomon markazida joylashgan atomning o'ri $[[1/2 \ 0 \ 1/2]]$ bo'ladi. Hajmi markazlashgan kub elementar yacheykadagi ayrim tugunlar simvoli 1.9-rasmda berilgan.

Endi **kristallografiyaviy yo'nalishlar indekslari** bilan tanishamiz. Kristallografiyaviy yo'nalishlar indekslari deganda qaralayotgan yo'na-

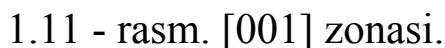


1.8 - rasm. Kub (a) va geksagonal (b) kristall panjaralarining eng muhim tekisliklari va ularning indekslari.



1.9-rasm. Hajmi markazlashgan elementar yacheykadagi ayrim tugunlar va ularning indekslari.

Maslan, x o'qi yo'nalishining indekslari $[100]$, x o'qiga perpendikulyar tekislik indekslari ham (100) ko'rinishida bo'ladi. Biror $[uvw]$ yo'nalishga parallel tekisliklar seriyasi **kristallografiyaviy zona** deyilib, bu yo'nalish esa **zona o'qi** deb ataladi.



1.3.6. Kristall panjara tekisliklari orasidagi masofa

(hkl) indekslar bilan aniqlanuvchi har bir tekisliklar guruhi ularning orasidagi tekislik masofasi d bilan ham xarakterlanib, bu masofa ikki qo'shni parallel tekisliklar orasidagi masofadir. d kattalik, tekislikning (hkl) indekslari, a , b , c panjara doimiylari va elementar yacheyka o'qlari orasidagi α , β , γ burchaklari orasida kristallarning har bir singoniyasi uchun har xil bo'lgan matematik bog'lanish ifodasidir. Bu bog'lanish kub, tetragonal, romb va geksagonal singoniyalar uchun nisbatan sodda ko'rinishga ega. Boshqa romboedr (trigonal), monoklin va triklin singoniyalar uchun ularning koordinata sistemalari orasidagi burchaklar to'g'ri burchaklar bo'lmaganligi sababli tekisliklari orasidagi masofa formulalarida bu burchaklar aks etadi va tekisliklar orasidagi masofani topish formulasi birmuncha murakkab ko'rinish kasb etadi. Odatda barcha singoniyalar uchun d ning o'rniga sodda ko'rinishda bo'lganligi uchun "kvadrat shakl" deb ataluvchi $1/d^2$ kattalik formulasi beriladi. 1.2-jadvalda turli singoniyalar uchun sodda ko'rinishdagi $1/d^2$ kattalik aniqlanadigan formulalar berilgan. Bu formulalarning keltirib chiqarilichini kristallografiyaga oid adabiyotlardan topish mumkin. Kvadrat shakl formulalaridan kelib chiqadiki, tekislikning indekslari qancha katta bo'lsa, ularning orasidagi masofa shuncha kichik bo'ladi. Bir xil tekislik orasidagi d masofaga ega bo'lgan tekisliklar guruhi **tekisliklar to'plamini** tashkil qiladi va katta qavs ichida tasvirlanadi: $\{hkl\}$. Masalan, kub singoniyasida kubning $\{100\}$ tekisliklari to'plami oltita kristallografiyaviy aynan bir xil tekisliklar to'plamidan iboratdir: (100) , $(\bar{1}00)$, (010) , $(0\bar{1}0)$, (001) va $(00\bar{1})$. Bu tekisliklar uchun 1.2-jadvalning birinchi qatoridagi formulaga ko'ra, d bir xil qiymatga ega. Har xil simmertiya operatsiyalari yordamida panjarani shunday burish mumkinki, (100) tekisliklar o'rniga (001) tekisliklar yoki boshqa qolgan to'rtta tekislik joylashadi va panjaraning yangi holati boshlang'ich holati bilan mos tushadi. Tekisliklarning **kristallografiyaviy aynanlik** xossasi ana shundan iboratdir. $\{hkl\}$ belgilash aynan bir xil tekisliklar to'plamining indekslarini bildiradi. Bunday tekisliklar kristall panjarasida simmetrik joylashgan bir xildagi tugunlardan o'tadi va ular bir xil kattalikdagi tekisliklar orasidagi masofaga ega bo'ladi. Masalan, kub singoniyasidagi oktaedr (okta – sakkiz, edra - tomon) tekisliklari bitta indekslar majmua-siga tegishlidir: $\{111\}$. Bu tekisliklar kubdagi oktaedrlarning tomonlari bo'lib, har biri alohida quyidagi indekslarga ega: $\{111\} \rightarrow (111)$, $(\bar{1}11)$, $(1\bar{1}1)$, $(11\bar{1})$, $(\bar{1}\bar{1}1)$, $(1\bar{1}\bar{1})$, $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$.

Shunday qilib, bitta $\{hkl\}$ guruhga mansub tekisliklarning har biri-ning indekslarini alohida topish uchun alohida indekslarni o'rnini almashtirish va ayrim indekslarning ishorasini o'zgartirish kerak. Tekisliklarning kristallografiyaviy aynanligining eng muhim belgisi shundan

1.2-jadval

Kristallografiyaning asosiy formulalari.

№	Sin-goniya	Turli singoniyalar uchun $1/d^2$	Elementar yacheykaning hajmi, V
1	Kub	$\frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$	a^3
2	Tetra-Gonal	$\frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$	$a^2 c$
3	Romb	$\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$	abc
4	Tri-gonal	$\frac{(h^2 + k^2 + l^2) \sin^2 \alpha + 2(hk + kl + hl)(\cos^2 \alpha - \cos \alpha)}{a^2 (1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha)}$	$a^3 \sqrt{1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha}$
5	Geksa-gonal	$\frac{4}{3} \cdot \frac{(h^2 + kh + k^2)}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$	
6	Mono-klin	$\frac{h^2}{a^2 \sin^2 \beta} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2 \sin^2 \beta} - \frac{2hl \cos \beta}{ac \sin^2 \beta}$	$abc \sin \beta$

7. Triklin singoniyasi uchun:

$$\frac{1}{d^2} = \frac{1}{V^2} \left\{ \frac{h^2 \sin^2 \alpha / a^2 + k^2 \sin^2 \beta / b^2 + l^2 \sin^2 \gamma / c^2 + 2hk(\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) / ab}{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma} + \right.$$

$$\left. \frac{2hk(\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) / bc + 2lh(\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta) / ca}{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma} \right\},$$

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

iboratki, ular tekislik orasidagi bir xil qiymatli d masofaga ega bo'ladi. Shuning uchun ham **kristallografiyaviy aynan bir xil tekisliklar soni**

istalgan bir guruh $\{hkl\}$ uchun ushbu guruhga kiruvchi indekslarining joyini va ishoralarini, tekislik orasidagi masofa kattaligini va kristall simmetriyasini o'zgar olmay qolishini hisobga olgan holdagi mumkin bo'lgan o'rin almashtirishlar soniga teng bo'ladi. Bu son kristall tekisligining **takrorlanish faktori (omili)** deyiladi. Yuqoridagi kub panjarasi uchun keltirilgan misollarda $\{111\}$ tekisliklar guruhi uchun takrorlanish faktori 8 bo'ladi. Ularning har biri uchun orasidagi masofa 1.2-jadvaldagi kub singoniyasi uchun keltirilgan formulaga ko'ra $d = a/\sqrt{3}$ bo'ladi. $\{100\}$ tekisliklar guruhi uchun o'rin almashtirish va ishorasini almashtirish yo'li bilan olgan barcha oltita tekisliklarning har birining orasidagi masofa kub singoniyasi uchun keltirilgan formulaga ko'ra $d = a$ bo'ladi. Takrorlanish faktori esa 6 bo'ladi. Agar tekisliklar guruhida Miller indekslaridan birortasi ham nol yoki ular o'zaro teng bo'lmasa, takrorlanish faktorining kub singoniyasidagi maksimal qiymati 48 tagacha yetishi mumkin.

Tetragonal singoniya uchun $\{100\}$ guruhidagi oltita tekislik 1.2-jadvaldagi formulaga ko'ra, ikki guruhga ajraydi. Ularning birinchi $\{100\}$ guruhiga to'rtta (100) , $(\bar{1}00)$, (010) , $(0\bar{1}0)$ tekislik bor. Ular uchun $d = a$ bo'lib, takrorlanish faktori 4. $\{100\}$ to'plamning ikkinchi guruhiga ikkita – (001) va $(00\bar{1})$ tekisliklar kiradi. Ularning ikkalasi uchun ham tekisliklararo masofa $d = c$ bo'lib, takrorlanish faktori 2. 1.3-jadvalda inversiya markaziga ega bo'lgan kub singoniyasining turli $\{hkl\}$ tekisliklar guruhi uchun takrorlanish faktori keltirilgan.

1.3-jadval

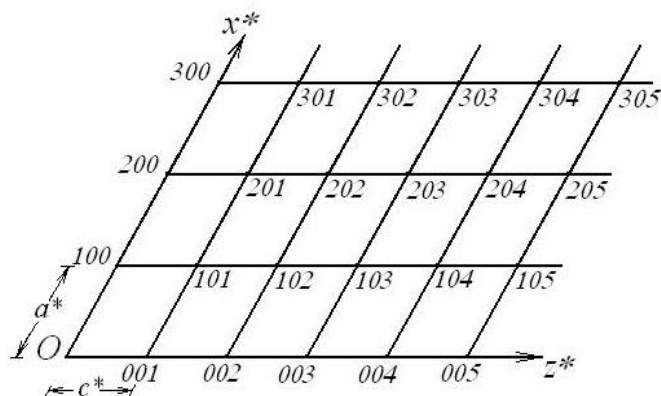
Inversiya markaziga ega kub singoniyasidagi tekisliklarning takrorlanish faktori p.

Indekslar	$\{h00\}$	$\{hh0\}$	$\{hhh\}$	$\{hk0\}$	$\{hkk\}$	$\{hkl\}$
p	6	12	8	24	24	48

1.3.7. Teskari panjara

Kristallning ko'p xususiyatlarini, masalan, tuzilishini, kristalldan qaytib, difraksiyalangan rentgen nurlarining, elektron yoki neytronlarning intensivligini o'rganish uchun kristall panjarani, ya'ni tashkil etuvchilari parallel va bir-biridan teng masofalarda joylashgan tekisliklar sistemasini, sodda qilib aytilsa, to'g'ri panjarani olib qarash qulaydir. Panjarada atomlar joylashuvi uzlukli ekanligini e'tiborga olsak, ko'z oldimizga yassi to'rlar sistemasi keladi (1.1-rasm). Bunday to'rlar siste-

masining tekisliklari ularga o'tkazilgan normallar yo'nalishlari va ikki qo'shni tekisliklar orasidagi d masofa bilan xarakterlanadi. Bu ikki kattalikni qo'shni tekisliklar orasidagi masofa d ga teskari bo'lgan bitta $d^* = K/d$ kattalik bilan almashtirish mumkin. Bu yerda K -ko'p hollarda birga teng qilib olinadigan qandaydir o'zgarmas kattalik. Agar har bir tekislik uchun $\vec{d}^*$ vektorni koordinata boshidan boshlab joylashtirsak, u holda har bir vektorning uchidagi nuqtalar berilgan fazoviy panjaradagi tekisliklar sistemasini tasvirlaydi. $\vec{d}^*$ yo'nalishlarning har biri uchun faqat $|\vec{d}^*|$ kattalikni e'las, balki unga karrali bo'lgan $n \times |\vec{d}^*|$ kattalikni qo'ysak, ularning uchlari cheksizlikka cho'zilgan uch o'lchamli panjara hosil qiladi. Bu yerda n ixtiyoriy musbat yoki manfiy butun sonlardir. Bunday panjara boshlang'ich kristall panjara bilan bir qiymatli bog'langan bo'lib, uning **teskari panjarasi** deb ataladi. Teskari panjara tushunchasi kristallografiyaning ko'p masalalarini matematikaviy usul bilan o'rganishda juda qulaydir. Bu kristall tekisliklari va teskari panjara vektorlari orasidagi bir qiymatli matematikaviy bog'lanish bilan tushuntiriladi. Teskari panjaraning har bir $[hkl]$ tuguni to'g'ri panjaradagi barcha $\{hkl\}$ tekisliklar guruhini aks ettiradi va biz koordinata boshidan bu tekisliklarga o'tkazgan normal bo'yicha joylashadi. Bu normaldagi $[hkl]$ tugundan koordinata boshigacha bo'lgan masofa mos tekisliklar orasidagi masofaga teskari proporsionaldir. Har bir teskari panjaraning simmetriyasi asosida o'zi hosil bo'lgan to'g'ri panjara simmetriyasiga mos keladi. Teskari panjaraning x^*, y^*, z^* o'qlari to'g'ri panjaraning yz, zx va xy tekisliklariga perpendikulyar bo'ladi. Ortogonal o'qlarga ega bo'lgan kub, tetragonal va romb singoniyaga mansub kristallar uchun x va x^*, y va y^*, z va z^* yo'nalishlar mos tushadi. Agar to'g'ri panjaraning qaysidir o'qi boshqa ikki o'qlariga perpendikulyar bo'lmasa (boshqa singoniyalar uchun), u teskari panjaraning mos o'qiga kollinear (parallel) bo'la olmaydi. 1.12-rasmda monoklin singoniyali kristall panjaraning teskari panjarasi keltirilgan. Bu rasmda Ox^* o'q bo'yicha takrorlanish



1.12-rasm. Monoklin singoniyasidagi kristall teskari panjarasining $h0l$ tekisliklari to'ri.

davri a^* to'g'ri panjaradagi $d_{100} = a \sin \beta$ bo'lgan tekisliklararo masofaga teskari proporsional (1.2-jadvalning 6- qatoridagi formulaga qarang). Ox^{*} o'qi bo'yicha koordinata boshiga eng yaqin 100 nuqta esa yz tekislikka parallel bo'lgan barcha (100) tekisliklar guruhini ifodalaydi.

Koordinata boshidan $2a^*$ masofada ikkinchi 200 nuqta joylashgan bo'lib, u bir-biridan $d_{200} = \frac{1}{2} a \sin \beta$ masofada joylashgan (200) tekisliklar guruhiga mos keladi. Keyingi 300 nuqta bir-biridan $\frac{1}{3} a \sin \beta$ masofada joylashgan (300) tekisliklar guruhiga mos keladi. Oz^{*} o'q bo'yicha $c^* = K/c \sin \beta$ takrorlanish davriga ega bo'lgan 001, 002, 003, ... nuqtalar mos holda bir-biridan $c \sin \beta$, $\frac{1}{2} c \sin \beta$, ... masofalarda joylashgan (001), (002), ... tekisliklarga mos keladi. Xuddi shunga o'xshash, chizma tekisligiga perpendikulyar bo'lgan y^{*} o'qi bo'yicha $b^* = K/b$ interval bilan (010), (020), (030), ... tekisliklar olingan.

1.3.8. Kristall panjara atomlari orasidagi masofani hisoblash

Kristall panjarada atomlarning muayyan tartib bilan joylashuvidan har bir atom uch o'lchamli fazoda koordinata boshiga nisbatan o'zining x , y va z koordinatalari bilan xarakterlanishi kelib chiqadi. Atomlar orasidagi masofani aniqlash ularning og'irlik markazlari orasidagi masofani aniqlash demakdir. Ortogonal (orthogonios – to'g'ri burchakli) koordinatalar sistemasida panjara atomlari orasidagi qandaydir r masofani aniqlash x , y , z koordinatalari ma'lum bo'lgan ikki matematika-viy nuqtalar orasidagi masofani aniqlashning o'zginasidir. Demak, agar koordinatalari mos holda x_1, y_1, z_1 va x_2, y_2, z_2 bo'lgan ikki atom orasidagi r masofa quyidagicha aniqlanadi:

$$r^2 = (x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2. \quad (1.4)$$

Ushbu formula bilan kub, tetragonal va romb singoniyali kristallardagi atomlar orasidagi masofa aniqlanadi. Odatda kristallografiyada atomlarning koordinatalari elementar yacheykaning mos o'qlardagi doimiylarining ulushlarida beriladi. Shuning uchun masofani aniqlashdan oldin uni uzunlik birligiga aylantirish kerak. Masalan, kub singoniyali kristallardagi atomlar orasidagi masofani uzunlik birligida topish uchun (1.4) ifodani quyidagi ko'rinishda olish kerak:

$$r^2 = [(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2] a^2, \quad (1.5)$$

bunda a – panjara doimiysi.

Geksagonal, monoklin, trigonal va triklin singoniyali strukturalar uchun (1.4) formula murakkablashadi. Chunki bu singoniyalarning koordinatalar sistemasi to‘g‘ri burchakli (ortogonal) bo‘lmaganligi uchun atomlar orasidagi masofani hisoblashda koordinata o‘qlari orasidagi burchaklarni e‘tiborga olish kerak. Umumiy holda (triklin sistema uchun) atomlar orasidagi masofa quyidagi formula bo‘yicha hisoblanadi:

$$r^2 = (x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2 + 2(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)\cos\gamma + (x_2 - x_1)(z_2 - z_1)\cos\beta + 2(y_2 - y_1)(z_2 - z_1)\cos\alpha, \quad (1.6)$$

bunda α -, β - va γ - koordinata o‘qlari orasidagi burchaklar.

Geksagonal va monoklin kristallar uchun (1.6) formula bir muncha soddalashadi. Chunki bu sistemalarda ikkita burchak 90° bo‘lgani uchun (1.1-jadvalga qarang) ularning kosinusi nol bo‘ladi. Chunonchi, monoklin strukturalar uchun (1.6) formula quyidagi ko‘rinishni oladi:

$$r^2 = (x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2 + 2(x_2 - x_1)(z_2 - z_1)\cos\gamma. \quad (1.7)$$

Geksagonal strukturalar uchun esa u quyidagicha bo‘ladi:

$$r^2 = (x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2 - (x_2 - x_1)(y_2 - y_1). \quad (1.8)$$

Agar (1.8) ifodani uzunlik birliklarida hisoblamoqchi bo‘lsak, u quyidagi ko‘rinishni oladi:

$$r^2 = [(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 - (x_2 - x_1)(y_2 - y_1)]a^2 + (z_2 - z_1)^2c^2, \quad (1.9)$$

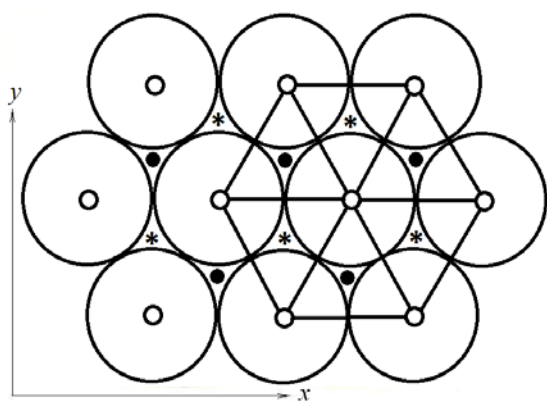
bunda mos holda $a = b$ - kristallning x va y o‘qlar bo‘yicha, c – z o‘q bo‘yicha panjara doimiylari.

1.3.9. Sharlarning zich joylashish prinsipi. Metallarning kristall panjarasi turlari va tugunlararo bo‘shliqlar

Kristall panjaradagi atomlar yoki ionlar bir-birlari bilan o‘zaro tortishish kuchlari orqali mahkam bog‘langan bo‘ladi. Shu bilan birga ular zichligi keskin ortadigan darajada bir-biriga yaqinlasha ham olmaydilar. Ularning bunday tabiati ma’lum darajada kristall panjara

modelini qattiq sharlarni zich taxlash yoʻli bilan olish mumkinligini koʻrsatadi. Sharlardan turgʻun panjara yasash uchun terilgan sharlarning umumiy hajmi va ular oralarida qolgan boʻshliklar hajmi minimal qiymatga ega boʻlishi kerak, yaʼni sharlarni mumkin qadar zich joylashtirishimiz kerak. Termodinamikaviy nuqtai nazardan sistemaning muvozanati uning $F = U - TS$ erkin energiyasining minimum qiymati bilan aniqlanadi. $T = 0$ boʻlganda $F = U$ boʻladi, U - va S - mos holda sistemaning potentsial energiyasi va entropiyasi. Tortishuvchi sharlar sistemasining potentsial energiyasining minimum qiymatiga sharlarning mumkin boʻlgan eng koʻp qoʻshnilari boʻlgan konfiguratsiyasi, yaʼni ularni band qilgan hajmining eng kichik qiymatiga toʻgʻri keluvchi sharlarning eng zich joylashgan holati mos keladi: $F_{min} \rightarrow U_{min} \rightarrow V_{min}$. Pirovardda $V = V_{min}$ shart sharlarning **zich joylashish prinsipini** ifoda qiladi.

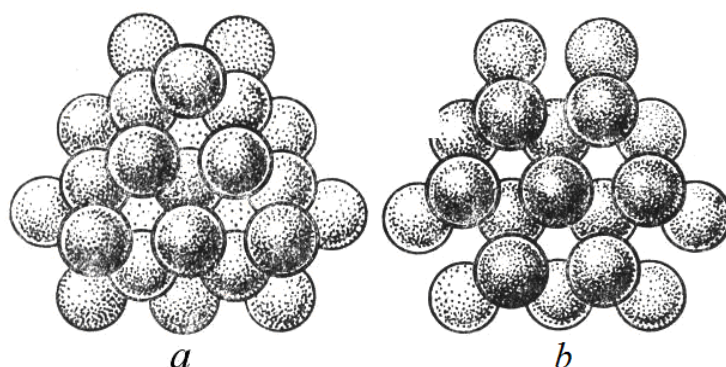
Sharlarni qanday qilib taxlasak turgʻun boʻlishini sxematik tarzda koʻrib chiqamiz. Birinchi qatorga sharlarni x va y ynoʻnalishlarda joylashgan gorizontall tekislikda zich qilib terib chiqamiz. Bu qator sharlarining markazlarini A tipdagi holatlar deb belgilaymiz (1.13-rasm).



1.13-rasm. Kristall panjaradagi zich taxlangan atomlarning mumkin boʻlgan turlari:
 ○ - A tipdagi holat; ● - B tipdagi joy; * - C tipdagi joy.

Bundan keyingi qatorlardagi sharlarning oʻzlarini emas, balki ular markazlarining proyeksiyalarini gorizontall tekislikda olib qarash maqsadga muvofiqdir. Bunday tasvirlashda sharlarning yoki atomlarning effektiv oʻlchamlari tasvirlanmasa ham kristalldagi atom tekisliklari orasidagi masofa haqida tasavvur hosil boʻladi. Birinchi qator ustiga ikkinchi qator sharlarini ikki xil yoʻl bilan turgʻun boʻladigan qilib joylashtirish mumkin. Ikkinchi qator sharlarini ular markazlarining proyeksiyalari gorizontall tekislikning yoki B tipdagi, yoki C tipdagi holatlarga mos boʻlib tushadigan qilib joylashtirish kerak. Undan keyingi

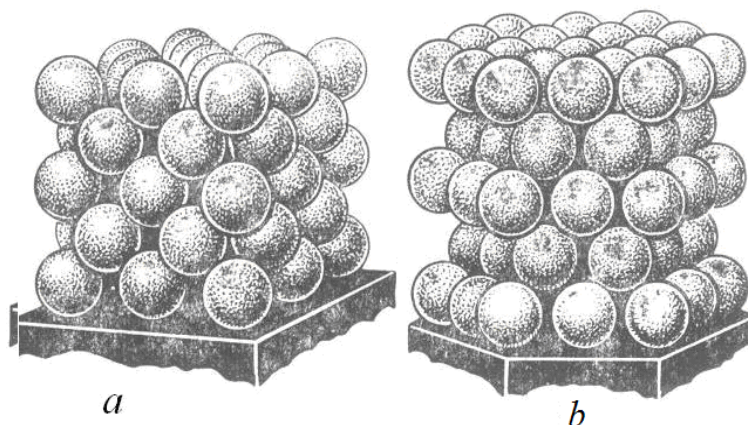
qatorlardagi sharlarning markazlari proyeksiyalari ushbu ko‘rib o‘tgan uch tipdagi joylarning birontasi bo‘yicha joylashadi. Eng ko‘p zichlashish har ikki qo‘shni qatordagi sharlar markazlari A, B va C tiplarga mos keluvchi har xil joylarda joylashganda kuzatiladi. Chunki bunda keyingi sharlarning bo‘rtiklari avvalgi qatorning chuqurchalariga to‘g‘ri keladi va sharlarning taxlangan qatorlarining tugunlari bo‘ladi. Sharlarni ABCABCABC tartibda joylashtirsak, **tomonlari markazlashgan kub panjara** hosil bo‘ladi (1.14-rasm, *a*). Agar sharlarni ABABABAB... tartibda joylashtirsak, **zich taxlangan geksagonal kristall panjara** hosil bo‘ladi (1.14-rasm, *b*). Fazoni sharlar bilan har ikkala variant bilan to‘ldirsak ham ularning zichliklari va elementar yacheykalarining koordinatsiyaviy sonlari bir xil 12 ta (qatlamdagi yaqin qo‘shni atomlar soni 6 ta, ustki va pastki tomonlarda 3 tadan) sharlar bo‘ladi, ammo simmetriya elementlari har xil bo‘ladi.



1.14-rasm. Kub (*a*) va geksagonal (*b*) qonuniyat bilan zich joylashgan sharlarning proyeksiyalari.

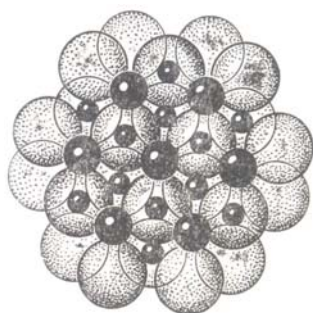
Elementar yacheykadagi biror atomga yoki ionga eng yaqin bo‘lgan qo‘shni atomlarining soni **koordinatsiya soni** deyiladi. Davriylik tufayli elementar yacheykadagi istalgan atom bir xil qo‘shni atomlar soniga ega bo‘ladi. Shuning uchun bu son panjaraning xarakteristikasi hisoblanadi. Ushbu eng yaqin qo‘shni atomlarni (yoki ionlarni) bir-birlari bilan birlashtirsak, qandaydir ko‘pyoq hosil bo‘ladi. Bu ko‘pyoqqa **koordinatsiyaviy ko‘pyoq** deyilib, ular turli strukturalar uchun turlicha shakldagi ko‘pyoqlar bo‘ladi. Magniy strukturalari tipidagi (Mg) zich taxlangan geksagonal strukturalarda (fazoviy guruhi $P6_3/mmc$) koordinatsiyaviy son - 12. Mis (Cu) strukturalari tipidagi tomonlari markazlashgan kub strukturalarda (fazoviy guruh $Fm\bar{3}m$) ham koordinatsiyaviy son 12 bo‘ladi. Ammo NaCl ion kristallining xuddi ana shu fazoviy ($Fm\bar{3}m$)

guruhdagi tomonlari markazlashgan kub strukturasida koordinatsiyaviy son 6 bo‘ladi. Gap shundaki, yacheykadagi **ionning koordinatsiyaviy soni** deganda, biror ionga eng yaqin qarama-qarshi ishorali ionlar soni tushuniladi. Koordinatsiyaviy son qanchalik katta bo‘lsa, elementar yacheyka shunchalik ko‘p atomlardan yoki ionlardan tashkil topgan bo‘ladi. Binobarin, kristall panjara shunchalik zich taxlangan bo‘ladi. 1.15-rasmda sharlarni ikki xil usul bilan zich taxlab hosil qilingan tomonlari markazlashgan kub (a) va geksagonal (b) panjaralar tasvirlangan. Sharlarni ko‘rib o‘tgandek, ikki xil joylashtirishning muhim amaliy ahamiyatga ega bo‘lgan farqlari bor. Geksagonal joylashtirishda zich yassi qatlamlar perpendikulyar joylashadigan faqat bitta yo‘nalish



1.15-rasm. Sharlarning kub (a) va geksagonal (b) qonuniyatlar bilan zich joylashishi.

bo‘lib, kub qilib joylashda bunday yo‘nalishlar to‘rttadir. Ushbu hol u yoki bu tipdagi joylashtirishdan hosil bo‘lgan kristallarning fizikaviy xossalari bir-biridan keskin farq qilishiga olib keladi. Zich joylashgan sharlarning orasidagi fazolar ikki xil bo‘shliqni hosil qiladi. Bir xil shar (atom) to‘rtta sharlar bilan qurshalgan bo‘lsa, ikkinchi xil shar oltita sharlar bilan qurshalgan bo‘ladi. Birinchisining koordinatsiyaviy soni 4 bo‘lsa, ikkinchisining 6 bo‘ladi (1.16-rasm). Oralarida hosil bo‘lgan birinchi tur bo‘shliqni hosil qilgan to‘rtta sharlarning markazlari tetra-



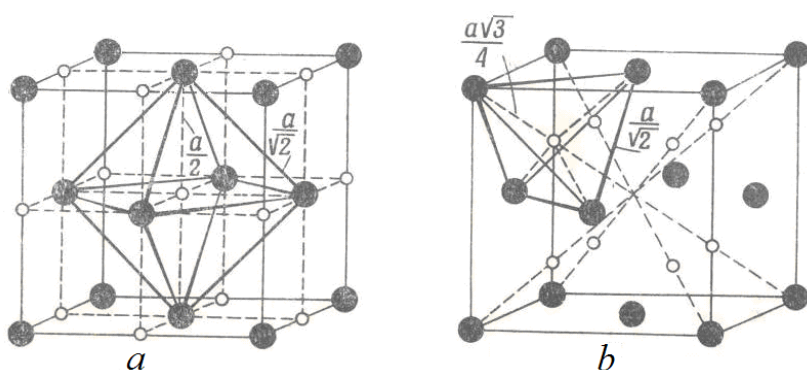
1.16-rasm. Zich taxlangan sharlar oralaridagi tetraedr va oktaedr bo‘shliqlar.

edrning (grekcha tetra-to'rt, edra-yoq, tomon) uchlarida joylashgan bo'ladi. Shuning uchun bu turdagi bo'shliq **tetraedraviy bo'shliq** deyiladi. Ikkinchi tur bo'shliqni hosil qilgan oltita sharlarning markazlari oktaedr (oktaedr - oltiyoq) uchlarida joylashgan bo'ladi. Shu sababdan bu turdagi bo'shliq **oktaedraviy bo'shliq** deb ataladi. Agar zich taxlangan sharlarning radiusini bir birlik R ga teng deb olsak, geksagonal va tomonlari markazlashgan kristall panjaralarda tetraedraviy va oktaedraviy bo'shliqlarga joylashuvi mumkin bo'lgan sharlarning radiuslari mos holda $0.225R$ va $0.41R$ bo'ladi. Ko'rinib turibdiki, geksagonal va tomonlari markazlashgan kristall panjaralarda tetraedraviy bo'shliqlarning hajmi oktaedraviy bo'shliqlar hajmiga qaraganda ancha kichik bo'ladi. Zich joylashtirilgan n ta sharlarga n ta oktaedraviy va $2n$ ta tetraedraviy bo'shlik to'g'ri keladi, ya'ni zich joylashuvning bitta shariga 1 oktaedr va 2 ta tetraedr bo'shliq to'g'ri keladi. Bu qonuniyat kub joylashuv uchun ham, geksagonal joylashuv uchun ham o'rinlidir.

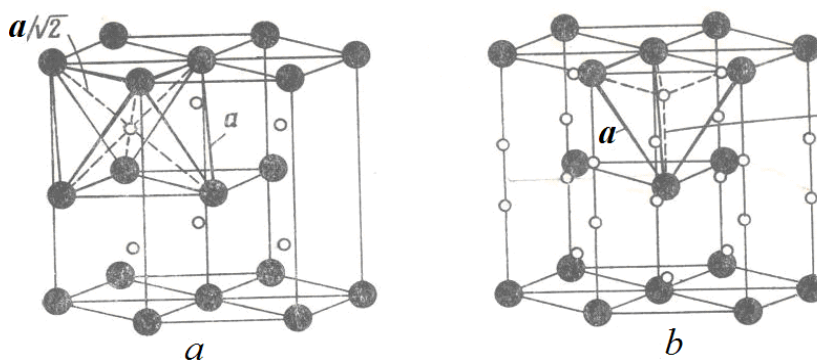
Sharlarning ikkita eng sodda zich joylashish qonuniyatini bilgan holda sharlarni har xil zich joylashtirish variantlari soni cheksiz ko'p bo'lishi mumkinligini tasavvur qilish qiyin emas. Haqiqatdan ham, sharlarni geksagonal joylashtirishda uchinchi qatlam birinchi qatlamni takrorlaydi. Demak, bunday joylashtirish ikki qatlamlidir. Sharlarni kub qonuniyati bilan zich joylashtirishda to'rtinchi qatlam birinchi qatlamni qaytaradi. Demak, bunday joylashtirish uch qatlamlidir. Agar dastlabki uchta qavatni «kub» qonuniyati bilan hosil qilib, to'rtinchi qavatdagi sharlarni ikkinchi qavatdagi joylashuvini qaytaradigan qilib joylasak, to'rt qavatli joylashuv hosil bo'ladi. Besh qavatli joylashuvni olish uchun dastlabki uchta qavatni kub qonuniyati bilan hosil qilib, keyingi ikkita joylashtirishni geksagonal joylashtirish qonuniyati bilan amalga oshirish kerak. Joylashtirishlar holatlarini yuqoridagi belgilangan harflar orqali belgilasak, to'rt qavatli joylashtirish tartibi ABCBABC..., besh qavatli joylashtirish tartibi esa ABCABABCAB... bo'ladi va hakoza. Har qanday ko'p qavatli zich joylashuvni tasvirlash uchun uchta harf kifoyadir, ya'ni zich joylashtirishning asosiy uchta varianti bo'lib, qolgan variantlarini ularning kombinatsiyasidan hosil qilish mumkin.

Ko'p metallarning elementar yacheykasi eng sodda bo'lib, quyidagi uchtdan bittasiga mansub bo'ladi: tomonlari markazlashgan kub, hajmi markazlashgan kub va atomlari zich joylashgan geksagonal yacheykalar. Metallardagi tomonlari markazlashgan kub va geksagonal kristall panjaralari hosil bo'lishi panjaradagi metall atomlarni qattiq sharlar sifatida

qarab, ularning vaziyati turg'un bo'lishi uchun ular o'zaro zich va qulay joylashuvi kerakligi bilan tushuntiriladi. Ularning elementar yacheykalari va tugunlararo oktaedraviy va tetraedraviy bo'shliqlari ko'rgazmali bo'lishi uchun kattalashtirilgan erkin masshtabda 1.17 - va 1.18-rasmlarda tasvirlangan. Zich joylashish prinsipi turli sinf moddalarining kristall panjarasini aniqlashda muhim rol o'ynaydi. Bunda mumkin qadar katta koordinatsiyaviy songa ega bo'lgan panjara energiyaviy jihatdan qulay bo'ladi. Ammo bu prinsip zarralar orasida to'yinmagan va yo'nalishga ega bo'lmagan bog'lanish kuchlari bo'lmagan hollardagina ularning konfiguratsiyasini aniqlaydi. Masalan, hajmi markazlashgan kub panjarasini (1.19-rasm) sharlarning zich joylashtirish yo'li bilan

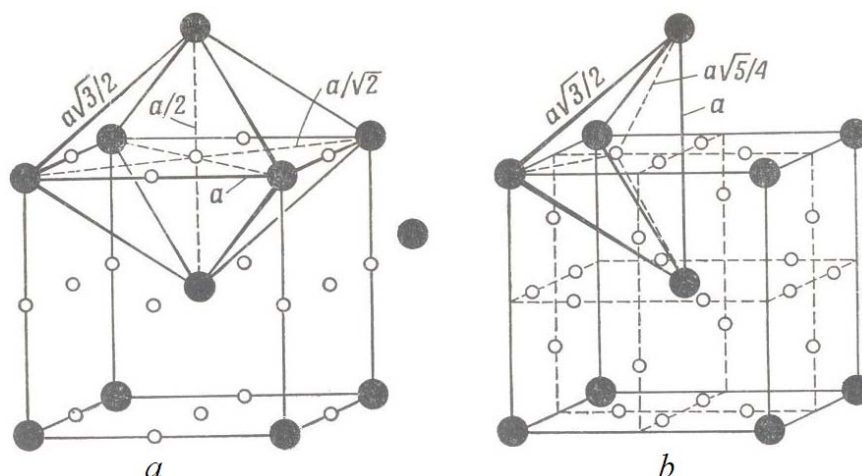


1.17-rasm. Tomonlari markazlashgan kub panjaradagi oktaedraviy (a) va tetraedraviy (b) bo'shliqlar. o -bo'shliq, ● - metall atomi.



1.18-rasm. Atomlari zich joylashgan geksagonal panjaradagi oktaedr (a) va tetraedr (b) bo'shliqlar. o -bo'shliq, ● - metall atomi.

olib bo'lmaydi. Bunday strukturada atomlar kub diagonali bo'ylab zichlashadi. Hajmi markazlashgan kub panjaradagi tetraedraviy bo'shliq hosil qilgan sferaning radiusi $0.291R$, oktaedr bo'shliq hosil qilgan sfera radiusi esa $0.154R$ bo'ladi. Demak, geksagonal va tomonlari markaz-



1.19-rasm. Markazlashgan kub panjaradagi oktaedraviiy (a) va tetraedraviiy (b) bo'shliqlar. o -bo'shliq, ● - metall atomi.

markazlashgan panjaralardan farqli holda, hajmi markazlashgan kubda tetraedr bo'shliq o'lchami oktaedr bo'shliq o'lchamidan katta bo'ladi.

Kristall panjaralardagi oktaedraviiy va tetraedraviiy bo'shliklarga atom radiuslari metall atomlaridan kichik bo'lgan vodorod, uglerod, kislorod kabi metallmaslarning atomlari suqilib kirib, nafaqat suqilmali kirishmalar, balki juda ko'p miqdorda suqilib kirib, **suqilma qotishmalar** hosil qiladi. Masalan, titanning uglerod yoki azot bilan hosil qilgan tomonlari markazlashgan kub shaklidagi kristall panjarasining oktaedraviiy bo'shliqlarining barchasini metallmasslar atomlari ishg'ol qilib, sanoatda va texnikada juda keng foydalanuvchi o'ta qiyin eruvchi (3000 °C temperaturada) va agressiv (ishqorli va kislotali) muhitlarga chidamli TiC titan karbidlarini yoki TiN titan nitridlarini hosil qiladi.

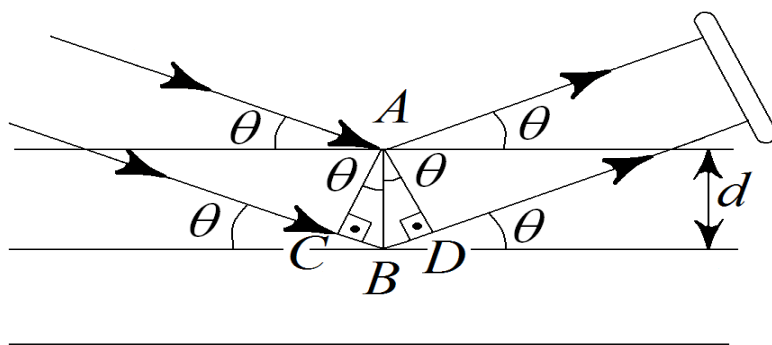
1.3.10. Kristall panjaradagi difraksiya hodisasi.

Bregg qonuni. Kristall panjarasining tuzilishini o'rganish

Tabiiy holda uchraydigan monokristallarning - **minerallarning** to'g'ri geometriyaviy shaklga ega bo'lishi, ayni kristallarning tomonlari orasidagi burchaklarning o'zgarmasligi va ularning anizotropiya xossasiga ega bo'lishligi tufayli juda qadim zomondayoq odamlarni kristallar juda kichik «g'ishtcha»larning tartibli joylashuvidan hosil bo'ladi degan xulosaga kelishlariga sabab bo'lgan va kristallarni o'rganuvchi fan **kristallografiya** nazariy jihatdan rivojlanib boravergan. Amaliy kristallografiyaning rivojlanishiga 1895 yilda nemis fizigi Rentgen kashf etgan rentgen nurlari sabab bo'ldi. Bu nurlar tabiati ancha vaqtgacha noma'lum bo'lib qoladi. Shuning uchun ham dastavval bu nurlarni **X-nurlar** deb

ataganlar. 1912 yilda Maks fon Laue rentgen nurlari yorug'lik nurlariga nisbatan juda qisqa to'liq uzunlikka ega bo'lgan elektromagnit nurlari bo'lishi kerak degan farazni ilgari surdi. U agar bu nurning to'liq uzunligi kristallardagi davriy ravishda tartibli joylashgan atomlar orasidagi masofa tartibida bo'lsa, kristallarni juda kichik panjara doimiysiga ega bo'lgan difraksiyaviy panjara deb qarash mumkin va kristallarda rentgen nurlarining difraksiyasi hodisasini kuzatish mumkin degan g'oyani ilgari surdi. Bu nazariy qarash shu yilning o'zidayoq Fridrix va Knippinglar tomonlaridan X- nurlari bilan mis kuporosida o'tkazilgan tajribalarda amalda tasdiqlandi va bu nurlar birinch bo'lib kashf qilgan Rentgen sharafiga **rentgen nurlari** deb atala boshlandi. Bu kashfiyoti uchun Rentgen fizika sohasida birinchi Nobel mukofatiga sazovor bo'ldi. Keyinroq rentgen nurlarining difraksiyasi nazariyasini ota-bola Bregglar rivojlantirdilar. Kristallardagi difraksiya nazariyasi bo'yicha ishlari uchun Laue, ota-bola Bregglar Nobel mukofotiga sazovor bo'ldilar.

Kristallarda rentgen nurlari difraksiyasi qonunlari yorug'lik nurlari difraksiyasi qonunlari bilan bir xildir. Kristallardagi rentgen nurlarining difraksiyasi qonuniyatini keltirib chiqarish uchun 1.20-rasmga murojat qilamiz. Kristallda tartib bilan joylashgan atomlar o'zaro parallel tekisliklar hosil qiladi. Bunda har bir atom nurni qaytaruvchi markaz hisob -



1.20-rasm. Vulf-Bregg qonunini keltirib chiqarish.

lanadi. Faraz qilamiz monoxromatik (bir xil to'liq uzunlikdagi) rentgen nurlari parallel tekisliklar sistemasiga θ sirpanish burchagi bilan tushmoqda (1.20 - rasm). Difraksiyaviy maksimumlar hosil bo'lish shartiga ko'ra agar turli tekisliklardan qaytayotgan nurlarning yo'llar farqi $CB + BD$ biror yo'nalishda butun to'liq uzunliklar soniga karrali

(kogerent) bo'lsa, ushbu yo'nalishda bu nurlar bir-birini kuchaytiradi, ya'ni difraksiyaviy maksimumlar hosil bo'ladi:

$$CB + BD = n\lambda, \quad (1.10)$$

bunda λ - rentgen nurlarining to'liq uzunligi, $n = 1, 2, 3, \dots$ Odatda birinchi tartibli difraksiyaviy maksimumlar bilan ish ko'riladi. 1.20-rasmdan

$$CB = BD = d\sin\theta \quad (1.11)$$

ekanligi kelib chiqadi. Bunda d – kristallning qaralayotgan tekisliklari orasidagi masofa. (1.10) ifodaga ko'ra (1.11) ifodani quyidagicha yozish mumkin:

$$2d\sin\theta = n\lambda, \quad (1.12)$$

bunda n – difraksiyaviy maksimum tartibi. Odatda $n = 1$ tartibli maksimumlar o'rganiladi. Bu formulani bir vaqtda Bregg va Vulf keltirib chiqargani uchun kristallarda difraksiyaviy maksimum hosil bo'lish shartini ifodalovchi **Vulf-Bregg formulasi** deb ataladi. (1.12) formuladan kelib chiqadiki, $\sin\theta_{\text{maks}} = 1$ bo'lganligi uchun kristallarda bu qonuniyat $\lambda > 2d$ shartni qanoatlantiruvchi to'liq uzunlikka ega bo'lgan nurlar (masalan, yorug'lik to'liqlari) uchun bajarilmaydi.

Vulf-Bregg qonuni faqat rentgen nurlarigagina emas, balki harakatdagi elektronlar va neytronlar uchun ham o'rinlidir. Ma'lumki, harakatdagi elektronlar yoki neytronlarning to'liq uzunligi De-Broyl formulasi bilan aniqlanadi:

$$\lambda = \frac{h}{mv}, \quad (1.13)$$

bunda h – Plank doimiysi, m – elektron yoki neytron massasi, v - ularning tezligi. (1.13) formuladan ko'rinib turibdiki, elektron yoki neytronning energiyasini shunday tanlab olish mumkinki, ularning to'liq uzunligi kristallardagi atomlar orasidagi masofa tartibida bo'ladi va ularning kristallardagi difraksiyasi kuzatiladi.

Qattiq jismlarning kristall panjarasini o'rganish uchun rentgen nurlaridan ham, elektronlar va neytronlar difraksiyalaridan ham foydalailadi. Bu usullardan tashqari difraksiyaviy bo'lmagan usullar ham mavjud. Ammo ular kristall panjara tuzilishi haqida to'g'ridan-to'g'ri ma'lumot

bermaydi. Rentgen nurlarining panjaradagi atomlardan sochilish amplitudasi, binobarin, difraksiyaviy maksimumlar intensivligi atomlarning elementlar Davriy sistemasidagi tartib soniga (elektronlar zaryadi soniga) darajali bog‘lanishda bo‘ladi. Daraja ko‘rsakichi elementning turiga bog‘liq. Bu bog‘lanish shu narsaga olib keladiki, agar panjarada tartib raqamlari bir-biriga yaqin atomlar bo‘lsa, rentgen nurlari ularni “farqlamaydi”. Agar kristall panjara kuchli farq qiluvchi katta va kichik tartib raqamli atomlardan tashkil topgan bo‘lsa, rentgen nurlari kichik tartib raqamli atomlarni katta tartib raqamli atomlar fonida “sezmay” qoladi. Bundan tashqari rentgen nurlari kristalldagi atomlar-ning elektron qavatidan qaytib difraksiyalangani uchun panjaradagi atomlar markazi - yadroning koordinatalarini aniqlashni murakkablash-tiradi.

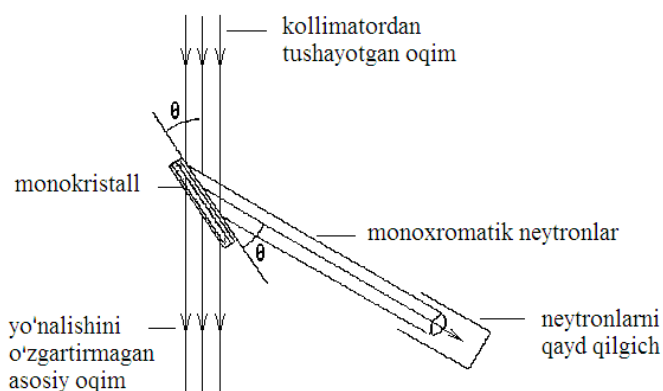
Elektronlarning moddaga kirish qobiliyati juda yomon bo‘lganligi uchun elektronlar difraksiyasidan faqat qattiq jismlarning yuza qismini sifat jihatdan o‘rganish mumkin.

Neytronlar difraksiyasi avvalgi difraksiya usullariga qaraganda bir qator afzalliklarga ega. Birinchidan, neytronlarning moddalarga kirish qobiliyati nihoyatda katta (yutilish nihoyatda kam); ikkinchidan, ular atomlarning elektron qavatlaridan emas, balki, yadrolardan qaytib difraksiyalangani uchun kogerent sochilish amplitudasi rentgen nurlaridan farqli ravishda, atomlarning tartib raqamiga mutlaqo bog‘liq bo‘lmay, har bir atomning yadrosi tabiatigagina bog‘liq bo‘ladi. Hatto kristalldagi vodorod atomining panjaradagi o‘rnini ham metallarnikidek aniqlik bilan aniqlay oladi. Oxirga effekt tufayli neytronlarning sochilish amplitudasi ularning sochilish burchagiga bog‘liqligi bo‘lmaydi. Ushbu sanab o‘tilgan afzalliklar tufayli neytron difraktogrammasini tahlil qilish va hisoblash juda soddalashadi va kristall strukturasi aniqlash bo‘yicha o‘tkaziladigan eksperiment aniqligi oshadi. Shuni e‘tiborga olish kerakki, yuqorida aytib o‘tgan difraksiyaviy usullarning uchovi ham kristallarni o‘rganishda keng qo‘llaniladi va bir-birining kamchiliklarini to‘ldiradi.

Neytronlar manbasi sifatida yadro reaktorlari kerak bo‘ladi. Yadro reaktorlarining bunyod etilishi fizik-eksperimentatorlar qo‘liga qattiq jismlarni o‘rganish uchun katta imkoniyatlar berdi. Yadro reaktorining aktiv zonasida sodir bo‘ladigan zanjirli yadro reaksiyasida turli energiyali neytronlar ajralib chiqadi. Bu neytronlardan faqat to‘lqin uzunligi (1.12) formulaga ko‘ra, kristall tekisliklari orasidagi masofalardan kichik bo‘lgan ($\lambda \leq d$) neytronlarga kristallarda difraksiyalana oladi. Bunday to‘lqin uzunlikdagi neytronlar **issiqlik neytronlari** deb ataluvchi, ener-

giyalari $0.01-0.025 \text{ eV}$ bo'lgan neytronlardir. Shuni ham e'tiborga olish kerakki, ularning kristalldagi difraksiyasi chaplanib ketmasligi uchun ulardan **monoxromatik** (bir xil) to'lg'in uzunlikdagilarini ajratib olish kerak. Buning uchun zanjirli yadro reaksiyasi vaqtida yadro reaktorining aktiv zonasidan chiqayotgan turli to'lg'in uzunlikdagi neytronlardan faqat monoxromatik to'lg'inlarnigina ajratib olish, ya'ni neytronlarni **monoxromatizatsiya** qilish kerak. Ushbu maqsadda monokristallardan va Vulf-Bregg qonunini ifodalovchi (1.12) formuladan foydalaniladi. 1.21-rasmda yadro reaktoridan chiqayotgan turli to'lg'in uzunlikdagi neytronlardan monoxromatik to'lg'in uzunlikka ega bo'lgan neytronlar olishning prinsipial sxemasi berilgan. Atom reaktoridan chiqayotgan neytronlarni parallel yo'naltiruvchi maxsus tirqish-kollimatoridan o'tib, monoxromatorga tushadi va biror qayd qilingan θ Bregg burchagi ostida faqat (1.12) formulani qanoatlantiradigan bir xil to'lg'in

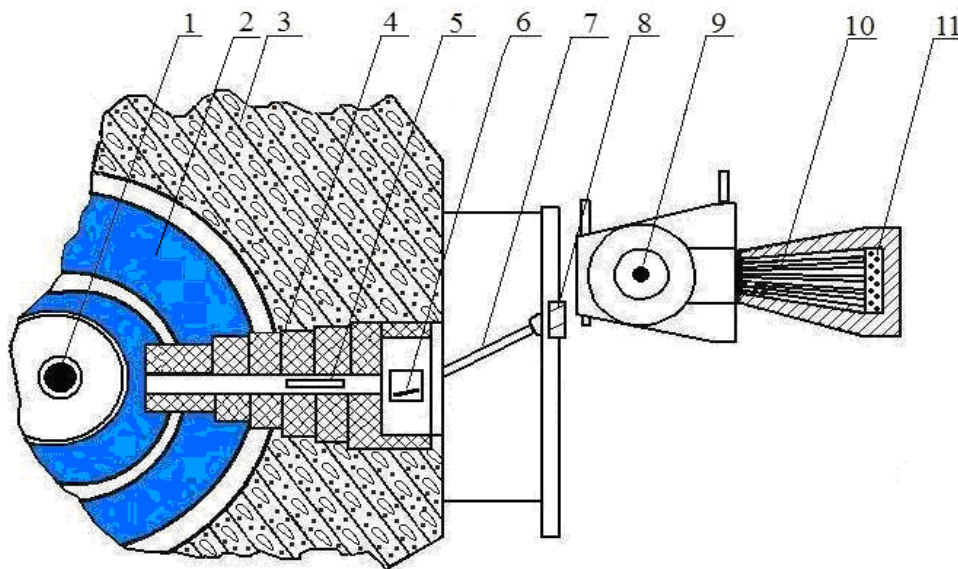
1.21-rasm. Yadro reaktoridan chiqayotgan neytronlarni monoxromatizatsiya qilish.



uzunlikdagi **monoxromatik** neytronlarga qaytadi. Bregg burchagi θ ni tanlash yo'li bilan tegishli burchak ostida kerakli to'lg'in uzunlikdagi neytronlar oqimini hosil qilish mumkin. 1.22-rasmda O'zbekiston Fanlar akademiyasi Yadro fizikasi institutining VVR-SM tipidagi yadro reaktorining gorizontall kanaliga o'rnatilgan DN-500 neytron difraktometrining sxemasi berilgan. Kristall monoxromatorga (mis monokristallining (111) tekisligiga) tushadigan neytronlar oqimining yoyilishini birinchi kollimator 5 belgilaydi. U kollimator kristall - monoxromator 6 oldiga o'rnatilgan. Dvigatel yordamida ochib-yopib turish mumkin bo'lgan cho'yan himoyada asosiy kanal bilan 30° burchak hosil qilgan 102 mm diametrli kanal ochilgan. Monoxromatik neytronlarni kollimatsiya qilish uchun qo'shimcha kanalga bir tirqishli kollimator 7 o'rnatilgan. Monoxromatizatsiya qilingan neytronlar ikkinchi kollimator 7 orqali

o'tib, namuna 9 ga tushadi. Namunada difraksiyalangan neytronlar uchinchi kollimator sistemasi 10 da kollimatsiya bo'lganidan keyin detektor 11 orqali qayd qilinadi. (1.12) formula bo'yicha hisoblashlarning ko'rsatishicha, monoxromatik neytronlarning to'liq uzunligi $\lambda=1.085 \text{ \AA}$ (bu to'liq uzunlikdagi neytronlarning energiyasi $\varepsilon=0.14 \text{ eV}$ ga to'g'ri keladi).

Qurilma monitor kanali bilan ta'minlangan. Monitor sifatida gelyli



1.22-rasm. O'zbekiston Fanlar akademiyasining Yadro fizikasi institutining VVR-SM tipidagi yadro reaktorining gorizontol (issiqlik) kanaliga o'rnatilgan DN-500 neytron difraktometrining sxemasi (2019 y.). 1-reaktorning zanjirli yadro reaksiyasi boradigan aktiv zonasi, 2- sovutgich (suv), 3- biologik himoya qobiq, 4 - tez neytronlarni sekinlashtiruvchi grafit seksiylari, 5- birinchi kollimator, 6-monoxromator-neytronlar (111) tekisligiga tushadigan mis monokristalli, 7- ikkinchi kollimator, 8-shiber, 9-kristall panjarasi o'rganiladigan namuna, 10-parallel tirqishlar, 11- kristalda difraksiyalangan neytronlarni qayd qiluvchi o'n juft detektorlar sistemasi.

proporsional qayd qilgich ishlatilgan. Monitor namunaga tushayotgan neytronlar oqimi o'zgarishlarini hisobga olib, namunaga tushayotgan neytronlar oqimining ma'lum bir tanlangan miqdori ta'minlangandagina o'lchanayotgan nuqtada o'lchashlarni tugatib, detektorlarni keyingi nuqtaga o'tishini boshqaradi. Monitor ikkinchi kollimator tirqishiga parallel holda shunday o'rnatiladiki, u namunaga tushayotgan neytronlar oqimining yo'lini to'smasligi kerak. Monoxromatizatsiya qilingan neytronlar oqimi yo'liga shiber 8 o'rnatilgan bo'lib, uning vazifasi neytronlar oqimini eksperimentdan tashqari vaqtlarda to'sib, zarur bo'lganda ochib

turishdan iborat. Shiber neytronlardan himoya qila oladigan turli xil himoyaviy materiallardan tashkil topgan.

Difraksiya usullari bilan kristallarni o'rganishning asosiy prinsipari bilan qisqacha tanishtiramiz. Agar kristallning elementar yacheykasining strukturaviy tipi (singoniyasi) ma'lum bo'lsa, u holda difraksiyaviy maksimumlar qaysi qaytaruvchi hkl tekisliklarga tegishli ekanligini quyidagicha uch etapda amalga oshiriladi:

a) tajribada olingan neytronogramma bo'yicha kristallning qaytaruvchi tekisliklarining Bregg burchaklari aniqlanadi;

b) mumkin bo'lgan barcha hkl Miller indeksleri uchun (1.12) formula bo'yicha kristall mansub bo'lgan singoniya uchun tegishli bo'lgan tekisliklar orasidagi masofa d dan foydalanib, Bregg burchaklari hisoblanadi;

c) olingan bu ikki natijalar taqqoslanadi.

Bregg burchagini hisoblash $\sin\theta$ ifodani hisoblash orqali amalga oshiriladi. Masalan, kub singoniyasi uchun hisoblash (1.12) formulaga 1.2 -jadvaldagi kub panjara tekisliklari orasidagi masofa uchun berilgan

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (1.14)$$

ifodani qo'yish bilan bajariladi. U holda $\sin^2\theta$ uchun natijaviy formula quyidagicha bo'ladi:

$$\sin^2\theta = \frac{\lambda^2(h^2 + k^2 + l^2)}{4a^2} . \quad (1.15)$$

Shu tariqa tetragonal sistema uchun

$$\sin^2\theta = \frac{\lambda^2(h^2 + k^2 + l^2)}{4a^2} + \frac{\lambda^2}{4c^2l^2} , \quad (1.16)$$

ifodani hosil qilamiz. Qolgan singoniyalar uchun ham kvadratik shakllar shu tariqa topiladi. Har bir singoniya uchun o'zining kvadratik shakli bo'lib, ular 1.2 - jadvalda berilgan.

Bayon qilingan usul bilan difraksiyaviy maksimumlarning burchak vaziyatlarini aniqlagach, ularning intensivligini aniqlashga kirishiladi. Agar namuna kukun (poroshok) holida bo'lsa, eksperimentda kuzatila-

digan rentgen difraksiyasi maksimumlari intensivligi quyidagi formula bilan aniqlanadi:

$$I(hkl) = k \frac{(1 + \cos^2 2\theta) p(hkl) |F(hkl)|^2}{\sin^2 \theta \cos \theta} A(hkl) \exp\left(-2B \frac{\sin^2 \theta}{\lambda^2}\right) = I_0 \exp\left(-2B \frac{\sin^2 \theta}{\lambda^2}\right), \quad (1.17)$$

bunda $p(hkl)$ – qaytaruvchi tekisliklarning takrorlanish faktori, $F(hkl)$ – tekshirilayotgan namunaning elementar yacheykasining biror h , k , l tekisligi uchun **strukturaviy faktori**; $A(hkl)$ – yutilish faktori bo‘lib, issiqlik neytronlari uchun juda kichik kattalik va shuning uchun ham amalda hisobga olinmaydi: B -issiqlik tebranishlari faktori bo‘lib, quyidagi ifoda orqali aniqlanadi:

$$B = 8\pi^2 \overline{u^2} / 3, \quad (1.18)$$

bunda λ - neytronlarning to‘lqin uzunligi. $\overline{u^2}$ – atomning o‘rtacha to‘la (dinamikaviy plus statik) kvadratik siljishi:

$$\overline{u^2} = \overline{u_d^2} + \overline{u_s^2}, \quad (1.19)$$

bunda $\overline{u_d^2}$ - atomlarning issiqlik tebranishlari tufayli hosil bo‘lgan dinamikaviy siljishi, $\overline{u_s^2}$ - atomlarning radiuslaridagi farq yoki birikma tarkibining stexiometriyadan chetlashuvi tufayli hosil bo‘ladigan atomlarning statik siljishi. Issiqlik faktorining effektiv qiymati tajriba ma’lumotlari asosida $\ln \frac{I(hkl)}{I_0}$ ifodaning $\frac{\sin^2 \theta}{\lambda^2}$ ga bog‘lanish grafigi chizi-

lib, ushbu to‘g‘ri chiziqlarning absissaga nisbatan og‘ish burchagi orqali bir qiymatli topiladi. (1.17) formuladagi $F(hkl)$ kattalik struktura faktorining qiymatlari elementar yacheykadagi atomlarning koordinatalariga va kristall tekisliklarining Miller indekslariga bog‘liq bo‘ladi. Bu miqdoriy bog‘lanishni ifodalovchi funksiya yassi to‘lqin funksiyasi bo‘lib, uni aniq hisoblash mumkin. U quyidagi ko‘rinishga ega:

$$F(hkl) = \sum f_n \cos 2\pi (hx_n + ky_n + lz_n) + \sum f_n \sin 2\pi (hx_n + ky_n + lz_n), \quad (1.20)$$

bunda n – atomlarning turi, x_n -, y_n -, z_n - lar atomlarning koordinatalari, h , k , l nurlarni qaytaruvchi tekisliklarning Miller indekslari, f -nurning hkl

indeksga mos keluvchi muayyan Vulf-Bregg burchagi uchun atomdan **sochilish faktori**. Neytron uchun bu faktor sochilish burchagiga bog'liq bo'lmagan har bir element uchun o'zgarmas kattalik bo'lib, neytronning yadrolarda **kogerent sochilish amplitudasi** (b_n) deyiladi. Shuni aytib o'tish kerakki, neytronlar difraksiyasi uchun (1.17) formuladagi θ burchakka bog'liq bo'lgan koeffitsiyent bir muncha shakl o'zgarishiga uchraydi.

Kristallarning elementar yacheykasini difraksiya usullari bilan o'rganish "Tanlab ko'rish va xatolar" usuli bilan amalga oshiriladi. Bu usulning mohiyati shundan iboratki, tajribada olingan difraksiya manzarasidagi difraksiyaviy maksimumlarning burchak vaziyatlari va intensivliklari kristall panjarasining biror tanlangan modeli asosida hisoblab chiqilgan qiymatlari bilan taqqoslanadi. Agar eksperimentda kuzatilgan difraksiyaviy maksimumlarning Bregg burchaklari va intensivliklari tanlangan model bo'yicha hisoblab topilgan qiymatlarga mos kelsa, model to'g'ri tanlangan hisoblanadi. Bunda hisoblab topilgan va tajribada aniqlangan difraksiyaviy maksimumlar intensivliklari uchun muqarrar emaslik faktori minimal bo'lgan model to'g'ri topilgan deb hisoblanadi. Bunda polikristallarning murakkab strukturalari uchun muqarrar emaslik faktorining qiymati 7 % dan ortmasligi kerak. Muqarrar emaslik faktori quyidagicha aniqlanadi:

$$R = \frac{\sum_{i=1}^n I_{\text{эксн.}} - I_{\text{хис.}}}{\sum_{i=1}^n I_{\text{эксн.}}}, \quad (1.21)$$

bunda $I_{\text{эксп.}}$ - eksperimentda kuzatilgan difraksiyaviy maksimum intensivligi, $I_{\text{his.}}$ - difraksiyaviy maksimumning tanlangan model bo'yicha hisoblab topilgan intensivligi. Hozirgi vaqtda kristall strukturalarini difraktogramalar bo'yicha aniqlashda juda qulay bo'lgan difraktogramaning to'la profilli tahlili deb ataluvchi "Fullprofile analysis" (Full-Prof) programmlaridan (Ritveld usulidan) foydalaniladi.

1.3.11. Kristallarning rentgenografiyaviy zichligi

Ayrim amaliy masalalarni hal qilishda (masalan, qattiq eritmaning tipini aniqlashda, qotishmaning g'ovaklik darajasini aniqlashda) kristallarning rentgenografiyaviy zichligini bilish kerak bo'ladi. Agar kristallning elementar yacheykasini xarakterlovchi parametrlar uning rentgeno-

grammasining tahlili tufayli ma'lum bo'lsa, ular orqali kristallning elementar yacheykasidagi n atomlar sonini va uning $V_{yach.}$ hajmini aniqlash (tegishli singoniya uchun 1.2-jadvalga muvofiq), so'ngra esa zichligini quyidagi formula orqali hisoblash mumkin:

$$\rho = \frac{M_{ya}}{V_{ya}} = \frac{n \times A_{o'r.} \times 1.667 \times 10^{-27} \text{ kg}}{V_{ya}}, \quad (1.22)$$

bunda $M_{ya} = n \times A_{o'r.} \times 1.667 \times 10^{-27} \text{ kg}$ - elementar yacheykadagi atomlarning massasi, $A_{o'r.}$ - elementar yacheykadagi atomlarning o'rtacha og'irligi. Agar qattiq eritma kristallining tarkibi $c_1, c_2, c_3, \dots, c_i$ - atom ulushlarida berilgan bo'lsa, u quyidagicha aniqlanadi:

$$A_{o'r.} = \sum c_i A_i.$$

Agar tarkib $w_1, w_2, \dots, w_i$ - massalar ulushlarida berilsa,

$$A_{o'r.} = \sum_i w_i A_i$$

bo'ladi. Agar qattiq eritmaning zichligi biror usul bilan (masalan piknometriya usuli bilan) aniqlangan bo'lsa va uning panjara doimiylari ma'lum bo'lsa, qattiq eritmaning elementar yacheykasida nechta atom borligini (1.22) formula bilan aniqlab, eritma tipini aniqlash mumkin.

Savollar va masalalar

1. Moddaning qanday kondensatsiyalangan holatlarini bilasiz?
2. Kristall panjara nima?
3. Kristallardagi simmetriya elementlari nima?
4. Kristallar singoniyalari nima va ular nechta?
5. Elementar yacheyka qanday shartlarga ko'ra tanlanadi va ular nechta?
6. Kristallarning qaytaruvchi tekisliklarining indekslari nima?
7. Kristalldagi yo'nalishlar va tugunlar indekslari nima va ular qanday belgilanadi?
8. Qaytaruvchi tekisliklarning takrorlanish faktori nima?
9. Kristall tekisliklari orasidagi masofa qanday aniqlanadi?
10. Teskari panjara nima?
11. Kristallarda difraksiya hodisasi qanday sodir bo'ladi.
12. Kristall panjaraning fazoviy guruhi nima?
13. Kristallning $Fd\bar{3}m$, $Ia\bar{3}$, $P\bar{3}m1$ va $P6_3/mmc$ fazoviy guruhlari qanday talqin qilinadi?
14. Struktura faktori nima va u qanday kattaliklarga bog'liq?
15. Agar biror tekislik kristal qirralarini $a = 6$; $b = 12$; $c = 3$ o'q birliklarida kesib o'tsa, bu tekislikning (hkl) simvolini toping.

Javob: (214).

16. Kub singonisidagi hkl , hhl , hhh va $hk0$ tekisliklarning takrorlanish faktorlarini toping.

Javob: 48; 24; 8; 24.

17. Misning elementar yacheykasidagi atomlarning koordinatalari $0,0,0$; $0, 1/2, 1/2$; $1/2, 0, 1/2$; $1/2, 1/2, 0$ bo'lsa, uning elementar yacheykasini ixtiyoriy o'q birliklarida chizing va u qanday yacheyka ekanligini ayting.

Javob: Tomonlari markazlashgan kub.

18. Volframning elementar yacheykasidagi atomlarning koordinatalari $0, 0, 0$; $1/2, 1/2, 1/2$ bo'lsa, u Bravening qanday elementar yacheykasi ekanligini ayting.

Javob: Hajmi markazlashgan kub.

18. Volframning elementar yacheykasidagi atomlarning koordinatalari $0, 0, 0$; $1/2, 1/2, 1/2$ bo'lsa, uning elementar yacheykasini ixtiyoriy o'q birliklarida chizing va u Bravening qanday elementar yacheykasi ekanligini ayting.

Javob: Hajmi markazlashgan kub.

20. Nima uchun kristallarda yorug'lik nurlarining difraksiyasi kuzatilmaydi?

21. Neytronlar difraksiyasi bilan kristallarni o'rganishning boshqa difraksiyaviy usullardan afzalligi nimalardan iborat?

22. Tomonlari markazlashgan kub strukturali (Ni) ning panjara doimiysi $a = 3.524 \text{ \AA}$ bo'lsa, to'lqin uzunligi $\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$ bo'lgan rentgen nurlarida olingan (111), (220) va (311) tekisliklardan hosil bo'lgan difraksiyaviy maksimumlarning kuzatilish burchaklari topilsin.

Javob: Mos holda 2θ : $44^\circ 22'$; 76° ; $92^\circ 06'$.

23. Sirkoniyning geksagonal α modifikatsiyasining (α -Zr) panjara doimiylari $a = 3.231 \text{ \AA}$; $b = 5.147 \text{ \AA}$. Uning quyidagi (hkl): (100); (002); (101); (112); (212) tekisliklari orasidagi d masofalarni toping.

Javob: Mos holda ($\text{\AA}$ larda): 2.7992; 2.5738; 2.4592; 1.3687; 0.9786.

24. To'lqin uzunligi $\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$ bo'lgan rentgen nurlarida $2\theta_r = 31^\circ 56'$ burchak ostida kuzatilgan biror elementning difraksiyaviy maksimumi $\lambda = 1.085 \text{ \AA}$ to'lqin uzunlikka ega bo'lgan issiqlik neytronlari difraksiyasida qanday burchak ostida kuzatiladi?

Javob: $2\theta_n = 22^\circ 14'$.

25. To'lqin uzunligi $\lambda = 1.085 \text{ \AA}$ bo'lgan issiqlik neytronlarining kinetik energiyasi necha eV bo'ladi?

Javob: 0.14 eV .

26. Tarkibida marganets (Mn) bo'lgan bir fazali austenit po'latning tarkibi massa ulushlari bo'yicha quyidagicha: 86.36 % Fe, 12.3 % Mn, 1.34 % C. Uning zichligi $\rho = 7.83 \text{ g/sm}^3$, kub panjarasining doimiysi $a = 3.630 \text{ \AA}$. Elementar yacheykada nechta atom borligini toping.

Javob: 4.25. Bu songa yaqin son 4. Demak, elementar yacheykada 4 ta atom bor.

II bob. REAL KRISTALLAR. KRISTALLARDAGI NUQSONLAR

2. 1. Kristallardagi nuqsonlar

Avvalgi bobda kristallarning tuzilishini o'rganganda kristallning tashkil etuvchi asoslarining (bazislarining) markazlari kristall panjarada muntazam geometriyaviy shakl hosil qilib joylashadi deb qaradik. Bunday kristall **ideal kristal** hisoblanadi Ammo bu juda ham ideallashtirilgan model bo'lib, amalda biz real kristallar bilan ish ko'ramiz. **Real kristallar** tuzilishida tashkil etuvchilarining joylashuvida aniq geometriyaviy qonuniyatlardan ko'plab chetlanishlar, ya'ni **nuqsonlar** kuzatiladi. Bu nuqsonlar kristallarning u yoki bu xossalariga kuchli ta'sir etadi. Shuning uchun ularni o'rganish muhim ahamiyat kasb etadi. Kristalldagi nuqsonlarning tabiatiga va tuzilishiga qarab juda ko'p sinflarga ajratish mumkin. Lekin ularni geometriyaviy tuzilishiga qarab asosan quyidagi to'rtta guruhga birlashtirish mumkin. 1. Nuqtaviy yoki nol o'lchovli nuqsonlar. 2. Chiziqli yoki bir o'lchamli nuqsonlar. 3. Sirti yoki ikki o'lchamli nuqsonlar. 4. Uch o'lchovli yoki hajmiy nuqsonlar. Bu nuqsonlarni har birini alohida ko'rib chiqamiz.

2.2. Kristallardagi nuqtaviy nuqsonlar

2.2.1. Kristallardagi nuqtaviy nuqsonlarning turlari

Kristall panjarasining bir-biridan yakkaalangan nuqtalaridagi o'lchamlari atomlar o'lchamlari qatori bo'lgan nuqsonlar **nuqtaviy** yoki **nol o'lchovli nuqsonlar** deb ataladi. Nuqtaviy nuqsonlarni energiyaviy, elektron va atom nuqsonlariga bo'lish mumkin.

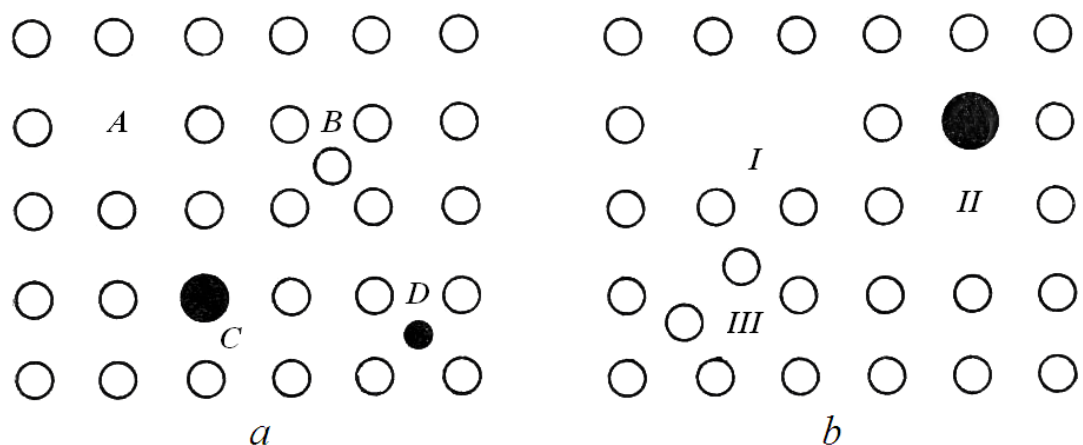
Eng ko'p tarqalgan energiyaviy nuqsonlarga atomlarning issiqlik tebranishlari tufayli kristall panjarasi davriyligining vaqtincha buzilishlari kiradi. Bu nuqsonni xarakterlovchi miqdoriy kattalik panjaradagi atomlarning issiqlik tebranishlari amplitudasi bo'lib, ular **atomlarning o'rtacha kvadratik siljishi** ham deyiladi va $\overline{u_d^2}$ ifoda bilan belgilanadi. Bu nuqsonlar **dinamikaviy buzilishlar** deb ham ataladi. Bunday nuqsonlarga yana turli xil radiatsiya (yorug'lik, rentgen va γ -nurlari, α -nurlar, neytronlar va boshqa shu kabi omillar) ta'siri tufayli panjaraning vaqtinchalik qo'zg'algan holatlari kiradi.

Elektron nuqsonlarga kristall elektronlarining to'lmagan energetik zonalaridagi **ortiqcha** yoki **yetishmagan elektronlar** (kristalldagi yetishmagan valent bog'lanishlar - «kovak»lar) va **eksitonlar** kiradi. Ba'zan kristalldagi elektron yutgan foton yoki issiqlik energiyasi elek-

tronning energiyaviy taqiqlangan zonadan o'tkazuvchanlik zonasiga o'tishi uchun yetarli bo'lmaydi. Bu holda elektron taqiqlangan zonaning biror sathida qoladi. Ushbu elektronning o'rnida esa kovak qoladi. Kovak musbat zaryadga ega bo'lganligi uchun taqiqlangan zonaga o'tgan elektron bilan Kulon torishish kuchi ta'sirida "elektron-kovak" juftini hosil qiladi. Bu juftlikka **eksiton** deyiladi. Demak, eksiton bu Kulon kuchlari bilan bog'langan «elektron - kovak» juftidan iboratdir. Bu juftlik bitta ionda bo'lsa **Frenkel eksitoni**, turli atomlarga tegishli bo'lsa **Vane-Mott eksitoni** deyiladi. Eksiton kristalldagi qandaydir ionlar juftida lokallashib (o'troq bo'lib) qolmay, balki butun kristall bo'ylab harakatlanishi mumkin. Binobarin, eksiton ta'siri kuchli lokalizatsiyalangan bo'lmay, balki ko'p atomlar hajmiga tarqalgan bo'ladi. Eksiton elektr jihatdan neytral bo'lganligi uchun elektr o'tkazuvchanlikka ta'siri bo'lmaydi.

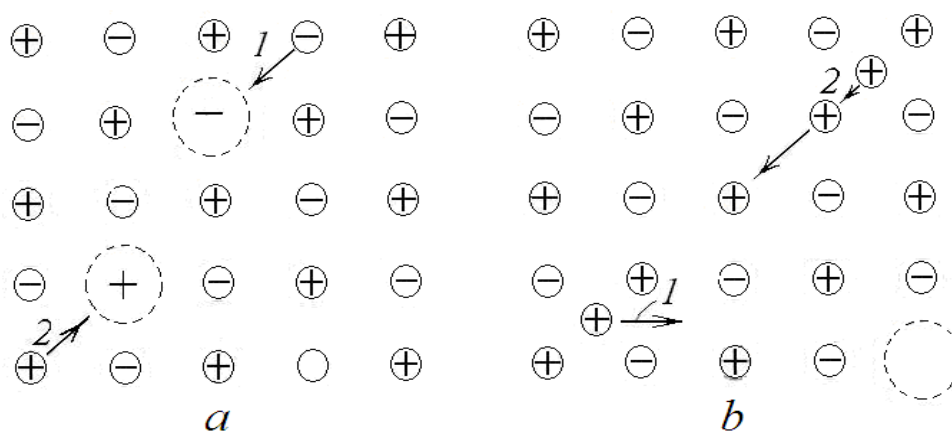
Ion kristallarda o'tkazuvchanlik elektronlari va kovaklarning tabiati yarimo'tkazgichdagilarga qaraganda ancha murakkabdir. Yarimo'tkazgichda elektronlarning tashqi maydondagi harakati energiyaviy zonasining tuzilishi bilan bevosita bog'liq bo'lgan effektiv massasi orqali aniqlanadi. Endi faraz qilaylik, ion kristallda erkin elektron paydo bo'lsin. Bu elektronni qurshab olgan atomlar ionlashgan bo'lganligi uchun elektronning zaryadi o'ziga yaqin ionlarning qutblanishiga, ya'ni iondagi musbat va manfiy zaryadlarning qarama-qarshi tomonlarda joylashishuviga olib keladi. Ion kristallarning o'tkazuvchanlik zonasidagi erkin elektron va kristall panjara qutblanishi kompleksi **polyaron** deyiladi. Elektron kristall panjarada harakatlanar ekan, o'zi bilan mazkur qutblangan sohani o'zining ortidan ergashtirib ketadi. Bu ionlar pozitsiyalarining qayta taqsimlanishiga sabab bo'ladi. Bunda harakatlanayotgan elektronning effektiv massasi ortadi. Shuning uchun ham ion kristallardagi elektronli o'tkazuvchanlikni **polyaron o'tkazuvchanlik** deyiladi.

Atomiy nuqsonlarga quyidagi nuqsonlar kiradi: panjara tugunlaridagi **bo'shliqlar** - vakansiyalar (**Shottki nuqsonlari**), tugunlar orasidagi **ortiqcha atom** (**Frenkel nuqsoni**), panjara tugunidagi begona-**kirishma** (primes) **atom**, tugunlar orasidagi **suqilma** (asosiy atom radiusidan kichik radiusli) **atom**. Bu nuqsonlar 2.1-rasmda aks ettirilgan. Nuqtaviy nuqsonlar oddiy komplekslarga yoki bir muncha murakkab guruhlarga - **klasterlarga** birlashishi mumkin (2.1, *b* -rasm). Bular: I-**bivakansiya** (ikki vakansiyaning yonma - yon kelishi), II -**vakansiya va**



2.1-rasm. Nuqtaviy nuqsonlar. a: A-bo'sh tugun (bo'shliq yoki vakansiya), B-tugunlar orasidagi atom, C - panjara tugunidagi begona atom-kirishma, D- tugunlar orasidagi suqilma (asosiy atom radiusidan kichik radiusli) atom. b: nuqson komplekslari va klaster.

kirishma atom, III - tugun chizig'larida oraliqlaridagi ortiqcha atomlar – **kraudion** (crowd – to'planma, zichlanma). Shuni aytib o'tish kerakki, ion va kovalent bog'lanishli kristallarda nuqsonlar elektr zaryadiga ega bo'ladi. Ion bog'lanishli kristallar uchun 2.2-rasm, *a* da vakansiyalar hosil bo'lishi bilan bog'liq bo'lgan nuqsonlar (**Shottki nuqsonlari**) punktir aylanalar bilan va 2.2-rasm *b* da esa ayrim ionlarning tugunlar orasiga tushib qolishi bilan bog'liq bo'lgan nuqsonlar - **Frenkel nuqsonlari** tasvirlangan. Ion bog'lanishli kristallning elektr jihatdan neytralligi saqlanishi uchun Shottki va Frankel nuqsonlarining soni kationlar uchun ham, anionlar uchun ham teng bo'lishi kerak. Kristallda musbat va manfiy zaryadlar soni teng bo'lganligi uchun 2.2-rasm, *a* da strelka 1 bilan ko'rsatilgan vakansiyaga faqat anion, strelka 2 bilan ko'rsatilgan vakansiyaga esa faqat kation kelib joylashishi mumkin. Kationlar o'lchamlari anionlarnikidan ancha kichik bo'lganligi uchun odatda ion bog'lanishli kristalllarda Frenkel nuqsonlarini faqat kationlar hosil qiladi. 2.2-rasm, *b* da strelka 1 bilan belgilangan kation harakati nuqsonni qo'shni holatga o'tkazishi mumkin. Ammo kation o'ziga qo'shni bo'lgan tugundagi kationni tugunlar orasiga itarib chiqarib, uning o'rniga o'zi joylashuvi ham mumkin (strelka 2). 2.3 - rasmda ayrim nuqtaviy nuqsonlar tufayli kristall panjaraning buzilishi tasvirlangan. Atomlar orasidagi bog'lanishning bir qismi buzilishi natijasida birinchi koordinatsiyaviy sferadagi atomlarni vakansiya markaziga qarab siljishiga sabab bo'ladi. Bir ismli biror A atomlar orasidagi quyidagi

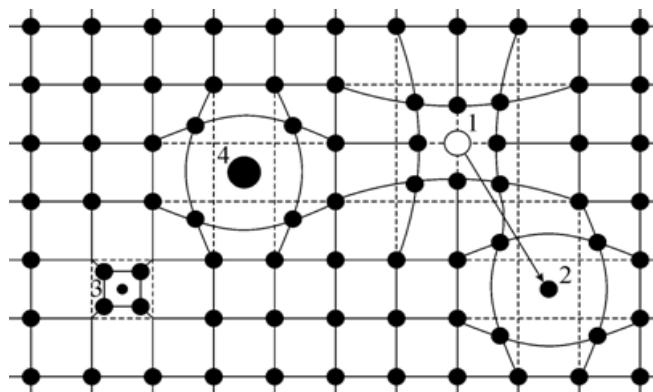


2.2-rasm. Ion bog‘lanishli kristall strukturadagi nuqtaviy nuqsonlar turlari. a – vakansiyalarning (Shottki nuqsonlarining) paydo bo‘lishi; b - qo‘shimcha ionlarni panjara tugunlaridagi ionlar oraliqlariga joylashuvi (Frenkel nuqsonlari).

Born-Mayer potentsiali

$$U_{AA} = -\frac{a}{r^m} + be^{\frac{r}{\rho}}, \quad (2.1)$$

ko‘rinishda bo‘lib, bunda a - va b - lar tajribadan aniqlanuvchi doimiy kattaliklar, r - atomlar orasidagi masofa, m va ρ daraja ko‘rsatgichlar siqiluvchanlik koeffitsiyentidan aniqlanuvchi kattaliklar. 2.1 - formula yordamida taxminiy hisoblar vakansiya atrofida ikkinchi koordinatsiyaviy sferadagi atomlar vakansiya markazidan birinchi koordinatsiyaviy sferadagi atomlarga nisbatan uzoqroq joylashuvini ko‘rsatadi (2.3-rasm, nuqta 1 atrofi). Panjara tugunlaridagi nuqtaviy buzilishlar panjaraning **statik buzilishlari** deb ataladi. Statik buzilishlarni miqdor jihatdan

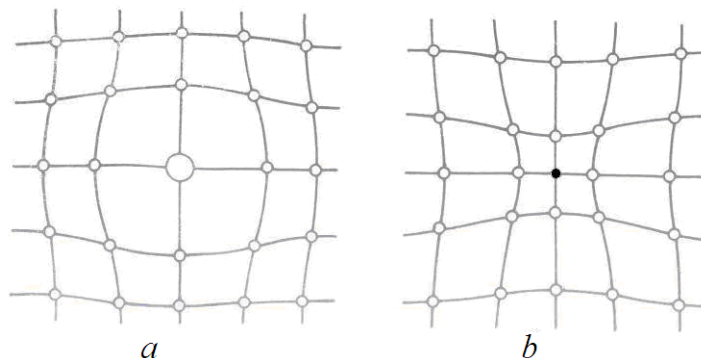


2.3-rasm. Nuqtaviy nuqsonlar tufayli kristall panjaraning lokal buzilishlari: 1- vakansiya; 2-tugunlar orasiga o‘tib qolgan panjaraning o‘z atomi; 3-o‘lchami panjara atomining o‘lchamidan kichik bo‘lgan suqilma kirishma atom; 4-o‘lchami panjara atomining o‘lchamidan katta bo‘lgan tugunlar orasidagi kirishma atom.

xarakterlovchi kattalik **oʻrtacha kvadratik statik siljish** deb ataladi va $\overline{u_s^2}$ ifoda bilan belgilanadi. Yuqorida tilga olgan atomlarning issiqlik tebranishlarini xakterlovchi oʻrtacha kvadratik siljish $\overline{u_d^2}$ va oʻrtacha kvadratik statik siljishlar additivlik qonuniyatiga boʻysunadi va (1.19) formulaga koʻra atomning **toʻla oʻrtacha kvadratik siljishini** tashkil qiladi. 2.3-rasmdan koʻrinib turibdiki, kristall panjaraga kirib qolgan begona atomlar – kirishmalar tufayli ham nuqtaviy nuqsonlar hosil boʻlar ekan. Nuqtaviy nuqsonlar ichida **kirishmalar** muhim va keng tarqalgan nuqsonlardan hisoblanadi. Zamonaviy texnika juda toza kristallar olishni taqozo qiladi. Ammo hozirgi tozalash usullari mutlaq toza kristallar olish imkoniyatini bermaydi. **Eng toza kristallar** tarkibida ham kamida 10^{-9} % begona kirishma elementlar boʻladi. Begona atomning tabiatiga bogʻliq holda, u kristall panjaraning oktaedr yoki tetraedr tugunlari orasida eritma shaklida yoki tugunlardagi atomlarni almashtiruvchi eritma sifatida mavjud boʻladi. Odatda kirishma atom radiusi panjarani hosil qilgan asosiy atom radiusidan kichik boʻladi va toza kristallarda kirishma atomlari vakansiyalardan kam boʻladi. Agar kirishma atomlari konsentratsiyasi (10 % dan) koʻp boʻlsa bunday kristallar **kirishmali eritma** deyiladi. Odatda atom radiuslari kichik boʻlgan O, C, B, N va H atomlari metall atomlari bilan I Bobda aytib oʻtganimizdek, **suqilma eritmalar** hosil qiladi (masalan: TiC, TiN, TiH₂). Suqilma eritmalarda kirishma atomlar kristallning oktaedrik yoki tetraedrik tugunlari oraliqlarida joylashadi. Atom radiuslari yaqin boʻlgan metallar **oʻrin almashinuvchi eritmalar** hosil qiladi (masalan: NiAl, CuZn, AuCu). Oʻrin almashuvchi eritmalaridagi atomlar kristall panjara tugunlarida birlarining oʻrinlarini almashtira oladi. Shunday qilib, kirishma atomning miqdori kristallda juda kam miqdordagi (10^{-9} % dan bir necha % gacha) kirishma sifatidan to birikmaning asosiy tashkil etuvchisi miqdori tartibida (10 va undan yuqori % gacha) boʻlishi mumkin. Agar birikmani tashkil etuvchi elementlarning nisbati butun sonlar nisbati (1:1, 2:1, 3:1, 4:3, ...) kabi boʻlsa, birikma **stexiometriyaviy birikma** deyiladi. Masalan, NaCl, AuCu, Cu₃Au, TiC, Ti₂N, Nb₄N₃. Tarkibi stexiometriya-dan chetlangan kristallar **nostexiometriyaviy** kristallar deyiladi. Misol tariqasida oʻzgaruvchan tarkibli TiC_x titan karbidining va TiN_x titan nitridining tomonlari markazlashgan kub fazasini keltirish mumkin. Bu suqilma qotishmalarda (C va N) metallmaslarnin konsentratsiyasi $x = 0.5$ miqdordan ham kam boʻlishi mumkin, ammo mazkur faza turgʻun boʻladi. Muayyan faza turgʻunligi saqlanadigan konsentratsiyalar sohasi

ushbu fazaning **gomogenlik sohasi** deb ataladi.

Ba'zan panjaraning ayrim tugunini begona (kirishma) atom band qilish hollari kuzatiladi. 2.4-rasmda kristall panjaradagi asosiy atomning o'rnini asosiy atomning o'lchamidan kichik va katta kirishma atom band qilishi natijasida panjaraning buzilishi tasvirlangan. Ushbu rasmlardan ko'rinib turibdiki, panjaraga kirib qolgan begona atomlar nuqsonlari panjaradagi asosiy modda atomlarining statik siljishlariga olib kelar ekan. Ion va kovalent bog'lanishli kristallardagi kirishma atom asosiy



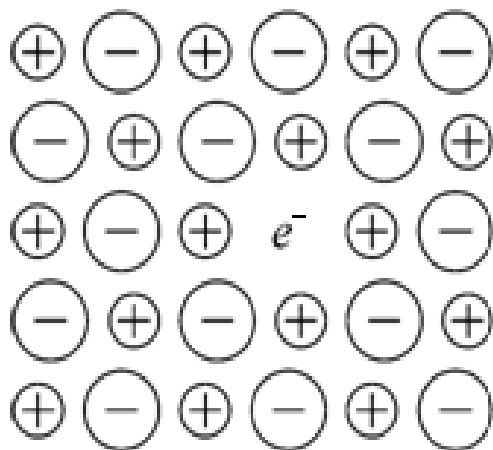
2.4-rasm. Kristall panjarasining tugunida asosiy modda atomidan boshqa begona atom paydo bo'lishi bilan bog'liq buzilishlar. a – tugundagi katta o'lchamli kirishma atom; b – tugundagi kichik o'lchamli suqilma kirishma atom.

modda atomlaridan boshqacha valentlikka ega bo'lishi mumkin. Agar almashinuvchi kirishma atom asosiy modda atomidan katta valentlikka ega bo'lsa (masalan, NaCl kristallidagi natriy ionini Na^+ kalsiy ioni Ca^{++} bilan almashtirilsa), u vaqtda panjaraning kation qismida bitta vakansiya hosil bo'ladi. Chunki, kristallarda musbat va manfiy valentliklar tengligi qonuni odatda qat'iy bajariladi. Shunday qilib, bir xil nuqson boshqa nuqsonni paydo bo'lishiga olib keladi.

Ba'zan yorug'lik spektrining nuqsonsiz kristall yutmaydigan sohasida nuqson tufayli yutilishi sodir bo'ladi. Bunday nuqsonlar **rang markazlari** deyiladi. Rang markazlari **xususiy** va **kirishmali** bo'lishi mumkin. Rang markazlari nuqsonlarning elektronlarni yutishi natijasida hosil bo'lsa, **elektronli rang markazlari** deyiladi. Agar rang markazlari nuqsonlarning "kovak"larni yutishi natijasida hosil bo'lsa, **"kovak"li rang markazlari** deyiladi. Bu markazlar ayni paytda kristallning **ranglanish markazlari** hisoblanadi.

Kristall panjarasidagi nuqsonlar elektronlarning energiya sathlaridagi elektronlarni yoki «kovak»larni tortib olishga intiladi. Masalan, shunday ta'sirlashuv natijasida manfiy ion vakansiyasi bilan chegaradosh elek-

trondan tashkil topgan nuqson – **F rang markazi** hosil bo‘ladi (2.5-rasm). Bunday hol ishqoriy galogen kristallarda kuzatiladi. Ayrim lokallashgan strukturaviy nuqsonlar bilan chegaradosh bir va ko‘proq elektronlar yoki «kovak»lardan tashkil topgan nuqsonlar bir muncha boshqacharoq rang markazlarini tashkil qiladi. Ishqoriy galogen kristallarda har biri o‘zining optikaviy, elektr va magnit xarakteristikalariga ega bo‘lgan ko‘p tipdagi rang markazlari mavjud.



2.5-rasm. Manfiy ion vakansiyasi bilan chegaradosh elektrondan tashkil topgan nuqson – **F rang markaz**ning hosil bo‘lishi.

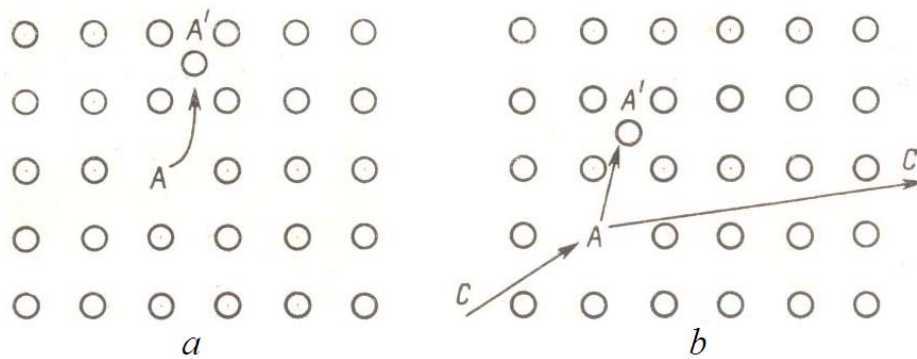
Frenkel va Shottki nuqsonlari kristalldagi ko‘p jarayonlarga kuchli ta’sir qiladi. Ular zaryad tashuvchilarning sochilishiga sabab bo‘lib, ularning harakatchanligini kamaytiradi. Bu nuqsonlar zaryad tashuvchi manbalar, ya’ni donor yoki akseptor bo‘lib xizmat qilishi mumkin. Turli nuqsonlar, jumladan, kirishmalar kristallning optikaviy, magnit, mexanikaviy va termodinamikaviy xossalari sezilarli va hatto ayrim hollarda kuchli ta’sir qilishi mumkin. Bu ta’sir ayniqsa yupqa yarimo‘tkazgich plyonkalarida va mayda kristalli namunalarda kuchli namoyon bo‘ladi. Kirishmalar zaryad tashuvchilarning samarali sochilish markazlari bo‘lib, mutlaq nol temperaturada ham yo‘qolmaydigan elektr qarshilikka sabab bo‘ladi. Ular yarimo‘tkazgichlarda yangi energetik sathlar hosil qiladi va **kirishmali o‘tkazuvchanlik** paydo bo‘lishiga olib keladi.

2.2.2. Nuqtaviy nuqsonlarning hosil bo‘lish mexanizmlari

Issiqlik fluktuatsiyasi tufayli har qanday kristallarda tashqi ta’sirsiz ham vakansiyalar paydo bo‘lib va yo‘qolib turadi. Vakansiya hosil bo‘lishi ikki bosqichda amalga oshadi. Avval issiqlik fluktuatsiyasi tufayli kristall sirtidagi birorta atom yoki ion ortiqcha energiyaga ega bo‘lib, o‘zining muvozanatdagi tugunidan (markazidan) chiqadi va kristall

sirtida adsorbsiyalanadi. Ikkinchi bosqichda hosil bo'lgan vakansiya hosil bo'lishiga ketgan energiyadan kichik bo'lgan **aktivatsiya energiyasini** yengib, kristall ichkarisiga bir joydan boshqa joyga qarab harakatlanishi mumkin. Kristalldagi adsorbsiyalangan atom esa kristall sirti bo'ylab diffuziyalanadi. Issiqlik fluktuatsiyasi tufayli ayrim atomning ichki bug'lanishi, ya'ni muvozanat markazini (panjara tugunini) tark etib, tugunlar orasiga o'tishi ham kuzatilishi mumkin (2.6-rasm, *a*). Bu holda «vakansiya-tugunlararo atom»dan iborat **Frenkel jufti** deb ataluvchi nuqson hosil bo'ladi.

Kristalldagi «ichki bug'lanish» uchun sirtki bug'lanishga qaraganda ko'proq energiya zarur bo'ladi. Chunki bunda bug'lanayotgan atom ko'proq atomlar bilan bog'lanish kuchlarini yengishi kerak. O'z tugunini tark etgan atom diffuziya tufayli kristall sirtiga chiqib ketishi ham



2.6-rasm. Frenkel juftining hosil bo'lishi. *a* – ichki bug'lanish;
b – A atomli kristallni *C* zarralar bilan bombardimon qilish.

mumkin, birorta vakansiya bilan rekombinatsiyalanishi ham mumkin. Frenkel jufti, ya'ni «vakansiya-tugunlararo atom» jufti kristallni biror $E > 30-50$ eV energiyali *C* zarralar (elektronlar, protonlar, neytronlar yoki ionlar) bilan bombardimon qilganda ham hosil bo'ladi (2.6-rasm, *b*). Juda katta energiyali zarralar bilan bombardimon qilganda kristallda **siljishlar kaskadi** hosil bo'ladi. Nuqtaviy nuqsonlar va ularning to'plami (kraudionlar) plastik deformatsiya yoki toblash tufayli ham hosil bo'ladi. Metallarda biror *T* temperaturadagi *n* vakansiyalar sonining atomlar soni (*N*)ga muvozanatli nisbatini quyidagicha ifodalash mumkin:

$$n/N = Ae^{-\frac{E_v}{k_B T}}, \quad (2.2)$$

bunda E_V - vakansiya hosil bo'lishi uchun kerak bo'lgan umumiy energiya (u turli kristallar uchun 1-2 eV qiymatlar orasida yotadi), k_B - Bolsman doimiysi, A – birdan uncha katta farq qilmaydigan entropiya hadi (tomonlari markazlashagan kristallarda ~ 1 soniga teng). (2.2) ifodadan ko'rinib turibdiki, vakansiyalarning muvozanatli miqdori temperatura ortishi bilan eksponensial ortadi. $E_f = 1$ eV bo'lgan metallarda erish temperaturasi yaqinida vakansiyalarning nisbiy konsentratsiyasi $10^4 - 10^5$ tagacha yetishi mumkin.

Ion kristallarda qarama-qarshi ishorali juft vakansiyalarning muvozanatli konsentratsiyasi quyidagicha ifodalanadi:

$$n/N = A' e^{-\frac{E_p}{2k_B T}}, \quad (2.3)$$

bunda E_p – juft vakansiya hosil bo'lish energiyasi (ishqoriy gologenli birikmalar uchun ~ 1 eV). Yuqorida aytgandek, ion bog'lanishli kristallarda vakansiyalar bo'lganda zaryadlar neytralligi tugunlararo ionlar bilan ta'minlanishi kerak. Masalan, AgCl va AgBr kristallarda asosiy nuqtaviy nuqsonlar kumush ionlari vakansiyalari va tugunlararo kumush ionlari, ya'ni **Frenkel juftlari** ekanligi tajribalarda ko'rsatilgan. Vakansiyalar va divakansiyalarning (qo'sh vakansiyalar) birlashish darajasini baholash qiyin, lekin bu ko'rsatgich temperatura ortishi bilan kamayishi kerak. Shuningdek, vakansiyalarni kirishma atomlari bilan birlashuv tendensiyasi mavjud. Ko'pgina kristallarda yuqori temperaturalarda mavjud bo'ladigan vakansiyalar toblash natijasida xona temperaturasida o'ta to'yingan vakansiyalar sifatida saqlanadi. Ular klasterlar hosil qilib yoki kristall donachalari chegaralariga, dislokatsiyalarga, kovaklarga va kirishmalarga diffuziyalanib, kamayishga intiladi.

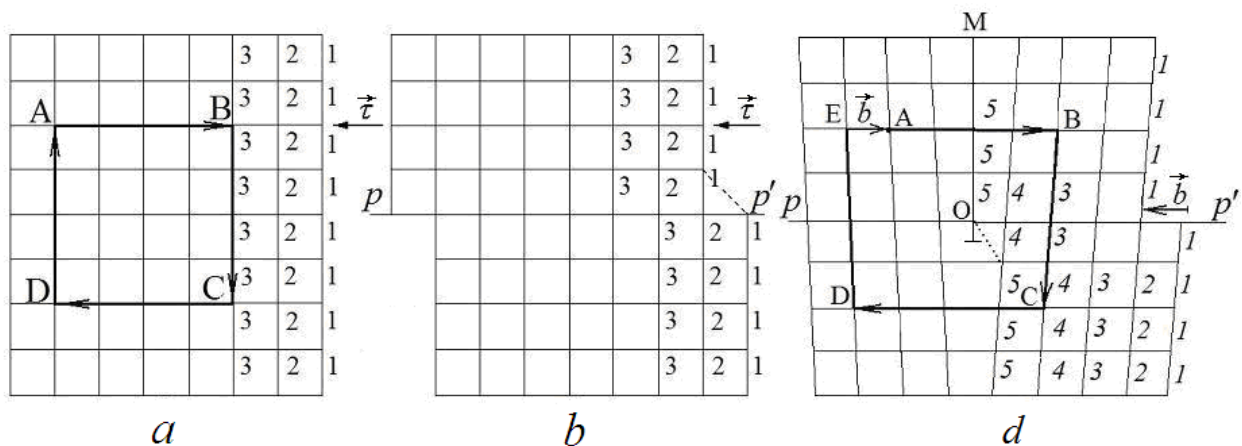
Panjaradagi vakansiyalar kristall tarkibini stexiometriyadan chetlanishida ham kuzatiladi. Masalan, tomonlari markazlashgan kub TiC titan karbidining tarkibi (1200 °C temperaturada) uglerod bo'yicha $\text{TiC}_{0.33}$ konsentratsiyagacha kamayishi mumkin. Bunda kristalldagi oktaedr tugun oraliqlarining 33 foizi uglerod atomlari tomonidan ishg'ol qilinib, 67 foiz oktaedrlar vakansiya bo'lib qoladi. Natijada oktaedr tugun oraliqlari ekvivalentligi buziladi. Tabiiyki, bunday keng diapazonda o'zgaruvchi nuqsonlar kristallning xossalarini katta diapazonda o'zgartirishi mumkin. Bundan kristallning xossalarini maqsadga muvofiq holda o'zgartirish uchun foydalanish mumkin.

2.3. Chiziqli yoki bir o'lchovli nuqsonlar

Chiziqli nuqsonlarga dislokatsiyalar kiradi (dislocatio (lotincha) – siljish, ko'chish). Agar panjaradagi atom tekisligi kristallning ma'lum bir qismidagina mavjud bo'lsa, bu tekislik oxiri chiziq shaklidagi nuqson - dislokatsiya bo'ladi. Sodda qilib aytganda, **dislokatsiya** – bu kristall atom tekisliklarining parrallelligining buzilishidir. Dislokatsiyalar plastik deformatsiya tufayli hosil bo'lishi mumkin. Ammo aynan shunday dislokatsiyalar kristalllarda ularni o'stirishda mustaqil holda ham hosil bo'lishi mumkin. Dislokatsiyalar o'lchamlari fazoning ikki yo'nalishida juda kichkina bo'lib, uchinchi yo'nalishda istagancha uzun bo'lishi mumkin. Shuning uchun ular **bir o'lchamli nuqsonlar** deb ham ataladi. Dislokatsiyaning alohida qarash mumkin bo'lgan ikki xili bor. Biri chiziqli yoki chegaraviy, ikkinchisi esa vintli dislokatsiyalardir. Istalgan bir boshqa dislokatsiyalar bu ikki xil dislokatsiyalarning kombinatsiyasidan iborat bo'lib, yo sirtmoq hosil qilib uchlari birlashadigan, yo kristallning ichki yoki tashqi sirtiga chiquvchi fazoviy egri chiziqni tashkil qiladi.

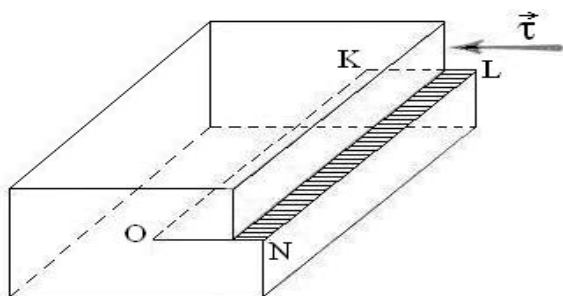
2.3.1. Chiziqli va vintsimon dislokatsiyalar

Chiziqli dislokatsiyalar. Faraz qilamiz bizning ixtiyorimizda atom tekisliklari parallel bo'lgan ideal kristall mavjud (2.7-rasm, *a*). Kristallning ustki birinchi yarmidan uning pastki ikkinchi qismiga nisbatan pp' sirg'anish tekisligi bo'yicha chapga yo'nalgan $\bar{\tau}$ siljituvchi kuchlanish qo'yamiz. Bu kuch ta'sirida kristallning bir qismi ikkinchi qismiga nisbatan bir atomlararo masofaga siljiydi (2.7-rasm, *b*). Bunda 1, 1, 1, ... atomlar qatori uzilib, ular orasidagi bog'lanish buziladi. Biroq bu bog'lanish o'rniga 1, 1, 1, ... va 2, 2, 2, ... , keyin 2, 2, 2, ... va 3, 3, 3, ... va hakoza atom qatorlari orasida mos atom zanjirlarining bir atomlararo masofaga siljishi natijasida aynan oldingidek bog'lanish paydo bo'ladi. Ammo atomlararo bog'lanish tufayli atomlar orasidagi bog'lanishning uzilishi kristall sirtiga emas uning ichiga ko'chadi. 2.7, *d* - rasmda bu uzilish 5, 5, 5, ... atomlar qatoriga to'g'ri keladi. Natijada kristallda ortiqcha yarim tekislik (5, 5, 5, ... qatorning ustki qismi) paydo bo'ladi. Bu yarim tekislik **ekstratekislik** deyiladi (2.7-rasmda OM chizig'i). Bu tekislik fazoda 2.8 – rasmda aks etdirilgan. Kristalldagi siljish butun tekislik bo'yicha sodir bo'lmay, balki uning faqat OKLN qismi bo'yicha sodir bo'ladi. Ekstratekisliklar tamom bo'lgan tugunlardan o'tgan chiziq **dislokatsiya chizig'i** yoki **dislokatsi**



2.7 - rasm. Kristall atom tekisliklarining siljituvchi kuchlanish natijasida ko‘chishi. a – ko‘chishgacha bo‘lgan holat, b - ko‘chishdan keyingi holat, d – tekislik siljishining kristall ichkarisiga ko‘chishi.

deyiladi va $u \perp$ belgi bilan belgilanadi. 2.7, d-rasmdagi tekislikning siljish yo‘nalishini va kattaligini belgilovchi $\vec{b}$ vektor **siljish** yoki **Byurgers vektori** deb ataladi. Bu vektor chiziqli dislokatsiyaning chizig‘iga perpendikulyar bo‘ladi.

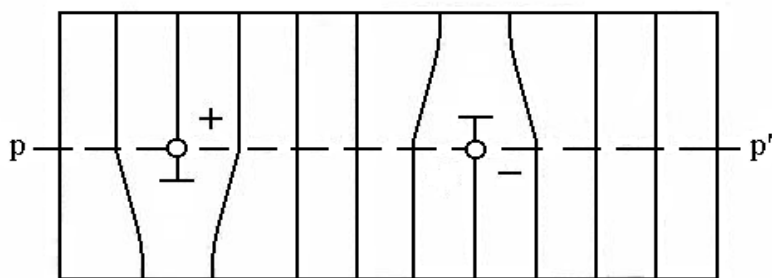


2.8-rasm. Kristallda dislokatsiyaning paydo bo‘lishi.

Byurgers vektori kattaligi atomlarning issiqlik tebranishlarini va elastik siljishlarni hisobga olmaganda panjara doimiysiga teng yoki karrali bo‘lishi mumkin. Byurgers vektori kattaligi panjara doimiysiga teng bo‘lgan dislokatsiya **birlik** yoki **birlik quvvatli dislokatsiya** deb ataladi.

Kristallda dislokatsiya o‘qi atrofida ko‘proq deformatsiyalangan kuchlanishli **tor soha (shnur)** hosil bo‘ladi. Bu o‘q bo‘yicha o‘tadigan tor soha **dislokatsiya yadrosi** deyiladi. Dislokatsiya chizig‘i ustida atomlar orasidagi masofa odatdagi panjaradagiga nisbatan kichkina bo‘ladi (panjara siqiladi). Dislokatsiya yadrosidan pastda atomlar orasidagi masofa odatdagi panjaraga nisbatan katta bo‘ladi (panjara kengayadi). Dislokatsiya yadrosidan chapga, o‘ngga, pastga va yuqoriga tomon panjaraning buzilishi asta-sekin kamaya boradi va nihoyat dislokatsiya yadrosidan biror masofada atomlarning tartibli joylashishi tiklanadi.

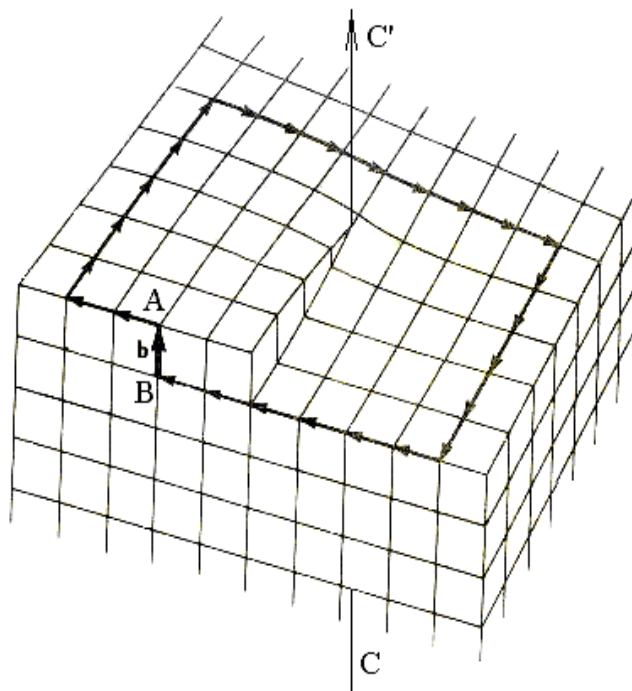
Ideal kristallning tugunlar hosil qilgan istalgan tekisligida biror A nuqtadagi tugunni biror parallelogramm bo'yicha har xil kattalikdagi va sondagi translyatsiyalar qilib, yana o'sha tugunga qaytish mumkin (2.7-rasm, *a*). Ideal panjaralarda **Byurgers konturi** deb ataluvchi bunday ABCDA konturlar berk bo'ladi. Ammo real kristallarda dislokatsiya atrofidan o'tkazilgan ABCDA Byurgers konturi berk bo'lmaydi (2.7-rasm, *d*). Bu konturni berk qilish uchun $\overrightarrow{EA} = \vec{b}$ Byurgers vektori qadar ortiqcha yana bir marta translyatsiya qilish kerak. 2.7, *d* -rasmdagi dislokatsiya chizig'i rasm tekisligiga perpendikulyardir. Ekstratekislik chiziqli o'lchamga ega (2.8-rasmda OK chiziq). Shuning uchun bunday dislokatsiya **chiziqli dislokatsiya** deb ataladi. Ba'zan uni **chegaraviy dislokatsiya** ham deydlar. Nuqtaviy nuqsonlarga nisbatan chiziqli dislokatsiyalar uzunligi millionlab atomlararo masofaga, ba'zan kristallning bir chekkasidan boshqa chekkasigacha cho'zilgan bo'ladi. Dislokatsiya yadrosining diametri nuqtaviy nuqsonlar o'lchamlari tartibida, ya'ni bir necha atomlar diametri oralig'idagi masofada ($\sim 5 - 10 \text{ \AA}$) bo'ladi. Agar ekstratekislik siljish tekisligining ustki qismida bo'lsa, bu holda **dislokatsiya musbat**, pastki qismida bo'lsa **manfiy** hisoblanadi (2.9-rasm). Birgina dislokatsiya haqida gap ketganda uning ishorasi ahamiyatga ega emas. Ammo bir necha dislokatsiyalarning o'zaro ta'sirida ularning ishorasi muhim ahamiyat kasb etadi.



2.9-rasm. Qarama-qarshi ishorali chegaraviy dislokatsiyalar.

Vintsimon dislokatsiyalar. Vintsimon yoki spiralsimon dislokatsiyalarning Byurgers vektori dislokatsiya chizig'iga parallel bo'ladi. Dislokatsiyaning bu turi 2.10-rasmda tasvirlangan. Bunday dislokatsiyalar ham kristall qismini bir panjara doimiysi kattaligiga yoki unga karrali siljishi natijasida paydo bo'lishi mumkin. Aytaylik, 2.10-rasmda tasvirlangan dislokatsiyaga perpendikulyar tekislik bo'yicha yuqoridan A nuqtadan boshlab, chapga tomon atomdan atomga qarab harakat

qilamiz. Ushbu rasmda ko'rsatilgan tekislikdagi atomlarning tashqi qatori vintli dislokatsiya atrofidagi konturni aks ettiradi. Vintsimon dislokatsiyaning kristall sirtidagi supachasi kristallning nisbatan zaif o'ta to'yinishi yoki o'ta sovushi natijasida u yerda atomlarning cho'kishi natijasida paydo bo'ladi. 2.10-rasmdan ko'rinib turibdiki, vintsimon dislokatsiyada Byurgers konturi yassi emas, balki vintsimondir.



2.10-rasm. Kristalldagi vintli dislokatsiya.

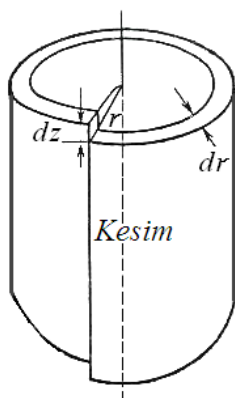
Vintsimon dislokatsiyaning yadrosidan tashqarida chiziqli dislokatsiyadagi kabi panjarada hosil bo'lgan so'nuvchi elastik deformatsiya tufayli zaif g'alayonlangan to'g'ri tuzizilishini saqlaydi. Vintsimon dislokatsiyalar ikki xil - chap va o'ng vintli bo'ladi. Ular ham chiziqli dislokatsiyalar kabi o'zaro ta'sirlashadi va chap va o'ng dislokatsiyalar uchrashganda ularning **annigilyatsiyasi** (barham topishi) sodir bo'ladi (ular bir-birini so'ndiradi). Real hollarda chiziqli va vintsimon dislokatsiyalarning kombinatsiyasi uchraydi. Bu hollarda ixtiyoriy sirg'anuvchi tekislikli **egri chiziqli dislokatsiyalar** hosil bo'ladi.

2.3.2. Dislokatsiyalar energiyasi

Dislokatsiyalar energiyasini hisoblash uchun kristallni elastik qattiq jism sifatida qaraymiz. Vintli dislokatsiya energiyasini hisoblash chiziqli dislokatsiyaning energiyasini hisoblashga qaraganda ancha oson. Shu

bilan birga bunday hisoblash natijalari chiziqli dislokatsiya energiyasini hisoblash natijalariga yaqin bo‘lib chiqadi. Avval silindr shaklidagi mukammal kristall olamiz va uni bo‘ylamasiga kesamiz. Bu kecmanning ikki tomonini bir-biriga nisbatan b masofa qadar siljitamiz (2.11-rasm). Bunda elementar dA ish bajariladi. Bunday siljish sodir bo‘lishi uchun kesim sirti bo‘ylab taqsimlangan kuchlar qo‘yish kerak. Bu kuchlar silindrning qismlarini bir-biriga nisbatan $dz=b$ masofaga siljitishi uchun bajargan ishi dislokatsiyaning elastik energiyasi hisoblanadi va u quyidagicha aniqlanadi:

$$U_D = \int \vec{F} \vec{b} dA. \quad (2.4)$$



2.11-rasm. Dislokatsiya energiyasini hisoblashga doir.

Ushbu integral kesim yuzasining butun yuzasi bo‘yicha olinadi. F – kesim yuzasining bitta nuqtasiga mos keluvchi o‘rtacha kuch. Qaralayotgan masalada aynan o‘rtacha kuchni olish kerak. Chunki istalgan nuqtadagi kuch siljish davomida noldan maksimal qiymatgacha o‘zgaradi. F kuchni hisoblash uchun quyidagicha mulohazalar qilamiz. Kristallni konsentrik joylashgan silindrik qobiqlardan tuzilgan deb qaraymiz. Dislokatsiya kristallning markazida joylashgan deb faraz qilamiz. Har bir qobiqni silindr bo‘ylab kesib chiqamiz (2.11-rasm). So‘ngra qobiq kesimining bir tomonini ikkinchi tomoniga nisbatan b masofaga siljitamiz. Agar qobiqning qalinliga dr yetarli darajada kichik bo‘lsa, u vaqtda qobiqning geometrik shakli siljishga to‘sqinlik qiluvchi kuchni hisoblash uchun uncha ahamiyatga ega bo‘lmaydi. Xususan, qobiqni yassi plastinkaga aylantirsak, bu kuchning kattaligi o‘zgarmaydi. Bu holda qaralayotgan masala plastinkaning siljish deformatsiyasini hisoblashga keltiriladi. Kichik deformatsiyaviy siljishlar uchun Guk qonuni tamomila o‘rinlidir. Demak, silindrik qobiqda dislokatsiya markazidan r masofada joylashgan qavatda $\vec{b}$ kattalikka siljishni vujudga keltirish uchun

$$\vec{f} = \frac{G\vec{b}}{2\pi r}, \quad (2.5)$$

kuch kerak bo‘ladi. Bunda $\vec{f}$ - birlik yuzaga keltirilgan kuch, G – qaralayotgan materialning siljish moduli.

Silindr kesim yuzasining bir nuqtasiga mos keluvchi $\vec{F}$ o‘rtacha kuch $\vec{f}$ kuchning yarmiga teng bo‘ladi:

$$\vec{F} = \frac{G\bar{b}}{4\pi r}. \quad (2.6)$$

U holda (2.4) va (2.6) ifodalarga ko‘ra dislokatsiya energiyasi quyidagicha aniqlanadi:

$$U_D = \int \frac{Gb^2}{4\pi r} dA.$$

Ammo $dA = dzdr$ bo‘lganligi uchun l uzunlikdagi dislokatsiya energiyasi uchun quyidagi ifodalarni yozish mumkin:

$$U_D = \int_{r_0}^{r_1} \int_0^l \frac{Gb^2}{4\pi r} dzdr = \frac{Gb^2 l}{4\pi} \ln \frac{r_1}{r_0}. \quad (2.7)$$

Ushbu ifodadan ko‘rinib turibdiki, ma’lum bir l uzunlikdagi dislokatsiya energiyasi integralning r koordinata bo‘yicha olgan chegaralariga bog‘liq. Bundan cheksiz katta kristallning ayrim dislokatsiyasining energiyasi ham cheksiz katta bo‘lishi kelib chiqadi. Odatdagi o‘lchamga ega (masalan, tomonining uzunligi 1 sm bo‘lgan) kristallar ham juda ko‘plab dislokatsiyalarga ega bo‘ladi. Ularning kristallda tartibsiz taqsimlanishi har bir dislokatsiya atrofidagi deformatsiyalarni o‘zaro kompensatsiyalanishiga olib keladi. Natijada taxminan dislokatsiyalar orasidagi o‘rtacha masofaga teng bo‘lgan masofalarda elastik kuchlanishlar yo‘qolib ketadi. Tajribalarni ko‘rsatishicha kristallardagi ayrim dislokatsiyalar orasidagi o‘rtacha masofa 10^4 ta atomlar orasidagi masofaga teng. Demak, dislokatsiya energiyasi hisoblanayotganda ular orasidagi r masofa bundan katta bo‘lmasligi kerak. Bu masofa dislokatsiyaning o‘rtacha zichligi n bilan quyidagicha bog‘langan:

$$r = \frac{1}{\rho_{dis}} = n^{-1/2}.$$

Dislokatsiyalarning xarakterli konsentratsiyasi metallarda 10^{11} m^{-2} , dielektrlarda esa 10^8 m^{-2} .

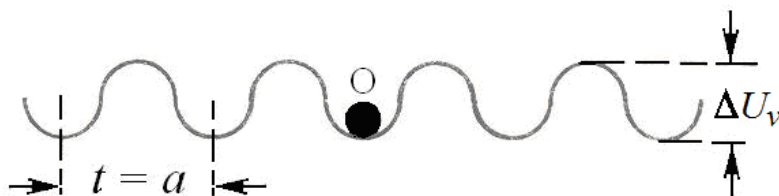
Turli xil qattiq jismlar uchun dislokatsiya energiyasi kuchli farq qiladi. Uzunligi bir atomlararo masofada bo'lgan istalgan vintsimon dislokatsiyalar energiyasi 3-10 eV oralig'ida yotadi. Dislokatsiya hosil bo'lishining energiyasining bunday katta qiymati ularning hosil bo'lishining temperaturaga bog'liq bo'lmasligiga, ya'ni **atermiklik**ka sabab bo'ladi. Temperatura ta'sirida 2.2-formula bo'yicha vakansiyalar hosil bo'lishidan farqli holda, jismning kristall holati saqlanadigan butun temperatura oralig'ida issiqlik fluktuatsiyasi hisobiga dislokatsiyalar hosil bo'lish ehtimoliyati juda kichkinadir. Dislokatsiyani uzunligi kamayishi bilan energiyasi kamayuvchi elastik ip sifatida qarash mumkin. (2.7) ifodadan dislokatsiyaning chiziqli taranglik kuchini topish mumkin:

$$T = dU_D/dl \approx Gb^2. \quad (2.8)$$

Chiziqli taranglashish ta'sirida egri chiziqli dislokatsiya o'z uzunligini kamaytirishga intiladi. Chiziqli yoki chegaraviy dislokatsiyaning potensial energiyasi vintsimon dislokatsiya energiyasi bilan Puasson koeffitsiyenti ν orqali quyidagicha bog'langan bo'ladi:

$$U_{cheg} = U_v/(1-\nu). \quad (2.9)$$

2.12-rasmda sirpanish tekisligida joylashgan O dislokatsiya yadrosining potensial reliefi keltirilgan. Mexanikaviy kuchlanishlar bo'lmaganda dislokatsiya yadrosi relief egri chizig'ining birorta minimumida joylashgan va muvozanat vaziyatida bo'ladi. Dislokatsiyani qo'shni muvozanat vaziyatiga o'tkazish uchun qo'shni holatni ajratib turuvchi ΔU_v balandlikli potensial barerni yengishi uchun etarli bo'lgan kuch qo'yish kerak. Bu kuch **Payerls kuchi** deyilib, u tinch holatdagi ishqalanish kuchiga



2.12-rasm. Kristalldagi dislokatsiyaning potensial bareri (to'sig'i).

o'xshaydi. Taqribiy hisoblashlar dislokatsiya siljishining kritik kuchlanishini quyidagicha aniqlash mumkinligini ko'rsatadi:

$$\tau_{kr} = \tau_0 \approx \frac{Gb}{3a} \frac{\Delta U_D}{U_D}, \quad (2.10)$$

bunda G - siljish moduli, b – siljish vektori, a - potensial to‘siq energiyasining o‘zgarish davri, $\frac{\Delta U_D}{U_D}$ - dislokatsiyaning potensial to‘siqni yengishdagi potensial energiyasining nisbiy o‘zgarishi. Ushbu formula bilan hisoblashlar kritik kuchlanish tajriba natijalariga mos keluvchi juda kichkina kattalik ekanligini ko‘rsatdi: $\tau_{kr} \sim G \cdot 10^{-4}$. Binobarin, dislokatsiyalarning harakati uchun nisbatan kichik kuchlanishlar yetarli bo‘ladi.

Endi harakatlanayotgan dislokatsiyaning to‘la energiyasini hisoblaymiz. Dislokatsiyaning (harakat tezligi $v = 0$ bo‘lgan tinch holatidagi) potensial energiyasi U_0 dislokatsiya kristallda hosil qilgan ichki kuchlanish va dislokatsiya yadrosi energiyalarini o‘z ichiga oladi deb faraz qilaylik. Tabiiyki, kritik siljish kuchlanishidan katta siljish kuchlanishida ($\tau > \tau_{kr}$ bo‘lganda) kristallda dislokatsiya tezlanish bilan harakat qiladi va uning to‘la energiyasi kinetik energiya hisobiga ortadi. Frenkel Ya. I. ko‘rsatishicha, o‘zining elastik kuchlanish maydonini elituvchi kristalldagi dislokatsiyaning harakat tenglamasi shaklan m_0 tinchlik massasiga ega bo‘lgan zarraning harakatini xarakterlovchi maxsus nisbiylik nazariyasi beradigan tenglamaga o‘xshash ekan. v tezlik bilan harakatlanuvchi dislokatsiyaning to‘la energiyasi quyidagicha aniqlanadi:

$$U = \frac{U_0}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad (2.11)$$

bunda $\beta = v/v_{tov}$ bo‘lib, bu yerda yorug‘lik tezligi o‘rniga dislokatsiya nazariyasida chegaraviy tezlik rolini bajaruvchi quyidagi

$$v_{tov.} = \sqrt{\frac{G}{\rho}}$$

ko‘ndalang tovushning kristalldagi tarqalish tezligi olinadi. Bu yerda ρ kristallning zichligi. Demak, (2.11) ifodani quyidagicha yozish mumkin:

$$U = \frac{U_0}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{v_{tov.}}\right)^2}}. \quad (2.12)$$

Harakatlanayotgan dislokatsiyaning massasi

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \beta^2}}$$

bo'ladi. Bunda dislokatsiyaning tinchlikdagi massasi quyidagicha aniqlanadi:

$$m_0 = U_0 / v_{\text{tov}}^2.$$

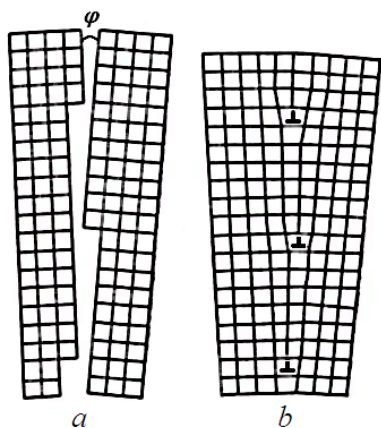
Kinetik energiyasi dislokatsiyaning tinch holatdagi potensial energiyasiga teng bo'ladigan tezlik bilan harakatlanadigan dislokatsiyalar **tez dislokatsiyalar** hisoblanib, ular uchun $\beta \geq \sqrt{\frac{3}{2}} = 0.85$ bo'ladi.

Kichik $v = 0.1 \times v_{\text{tov}} \sim 0.5 \text{ km/s}$ tezlik bilan harakatlanadigan dislokatsiyaning energiyasi atigi 1 % ga ortsa, katta $v = 0.85 v_{\text{tov}} \sim 4.3 \text{ km/s}$ tezliklarda dislokatsiyaning to'la energiyasi ikki borobar ko'payadi ($U = 2U_0$). Dislokatsiya energiyasining keyingi ko'payishiga energiya sochilishi yo'l qo'ymaydi. Dislokatsiya energiyasining sochilishi quyidagi uch xil sababga ko'ra sodir bo'ladi. 1. Termoelastik sochilish. 2. Radiatsiyaviy sochilish. 3. Fononlar bilan to'qnashish natijasidagi sochilish. 1. Energiyaning termoelastik sochilishida jism dislokatsiyasining siljish tekisligining bir tomonida adiabatik siqilishi va siljish tekisligining ikkinchi tomonida adiabatik kengayishi tufayli mos sohalarida uning temperaturasi $\pm \Delta T$ ga kamayadi yoki ko'payadi. Hosil bo'lgan temperatura gradiyenti issiqlik o'tkazuvchanlik tufayli barham topadi. 2. Dislokatsiyani ma'lum bir chiziqli taranglikka ega bo'lgan elastik ipga o'xshatish mumkin. Dislokatsiya harakati davomida kristalldagi Payerls barerini yengishi uchun siljish tekisligida yotgan atomlarni tez $f = v_{\text{tov}}/b \sim 10^{13} \text{ s}^{-1}$ chastota bilan ko'tarilishi va pastga tushishi bilan sodir bo'ladi. Bu esa kristallda dislokatsiyaning bir qism energiyasining olib ketuvchi elastik to'lqinlarni vujudga kelishiga sabab bo'ladi. Bunday sochilish **radiatsiyaviy sochilish** deyiladi. 3. Dislokatsiyaning sirpanish tekisligi bilan kesishuvchi kristalldagi issiqlik elastik to'lqinlari (fononlar) sirg'anish tekisligida dislokatsiyani tebranishini vujudga keltiruvchi davriy o'zgaruvchi urinma kuchlanish vujudga keltiradi. Tinch turgan dislokatsiyaga har tomondan ta'sir qiluvchi elastik to'lqinlarning (fononlarning) teng ta'sir etuvchi kuchi nolga teng bo'ladi. Dislokatsiya harakatlanayotganda esa uning harakatni boshqarib boruvchi tomoni orqasidan erga-

shib boruvchi tomoniga nisbatan ko'p sonli fononlar bilan to'qnashadi. Natijada dislokatsiya harakatiga halaqit qiluvchi va uni to'xtatuvchi natijaviy kuch paydo bo'ladi. Bu kuchni yengish uchun panjaraning qo'zg'alishiga sarf bo'luvchi qo'shimcha energiya talab qilinadi.

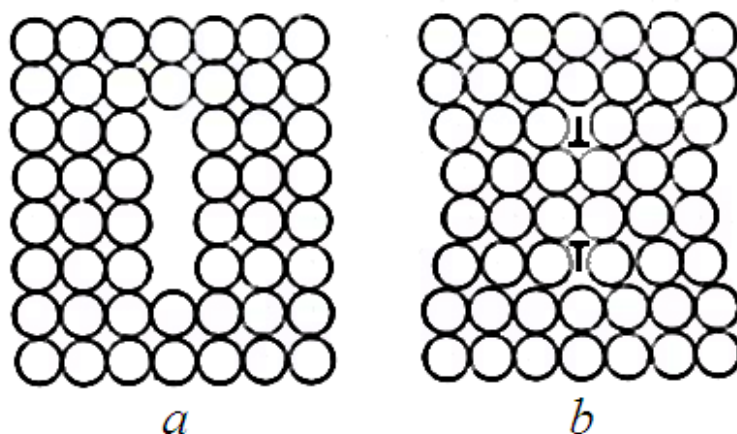
2.3.3. Dislokatsiyalarning paydo bo'lishi va harakati

Kristallarda dislokatsiyalar plastik deformatsiyalar - cho'zilish, qisilish, egilish natijasida kristallning yuqori kuchlanish paydo bo'lgan joylarida hosil bo'ladi. Kristallarni kesish, sayqallash jarayonlari natijasida ham dislokatsiyalar hosil bo'ladi. Kristallni boshqa moddadan yasalgan taglik ustida o'stirganda ikki xil moddalarda **nomutanosib dislokatsiyalari** vujudga keladi. Shuningdek dislokatsiyalar kristallarni o'stirish jarayonida ham paydo bo'ladi. Agar o'stirilayotgan kristallning ayrim bloklarining oriyentatsiyalari birmuncha mos kelmasa, ularning qo'shilgan joylarida dislokatsiyalar hosil bo'lishi mumkin. 2.13-rasm, *a* da kristallning buzilmagan panjaraga ega bo'lgan ikkita bloki aks ettirilgan. Ushbu bloklarning umumiy chegara hosil qilib qo'shilishi

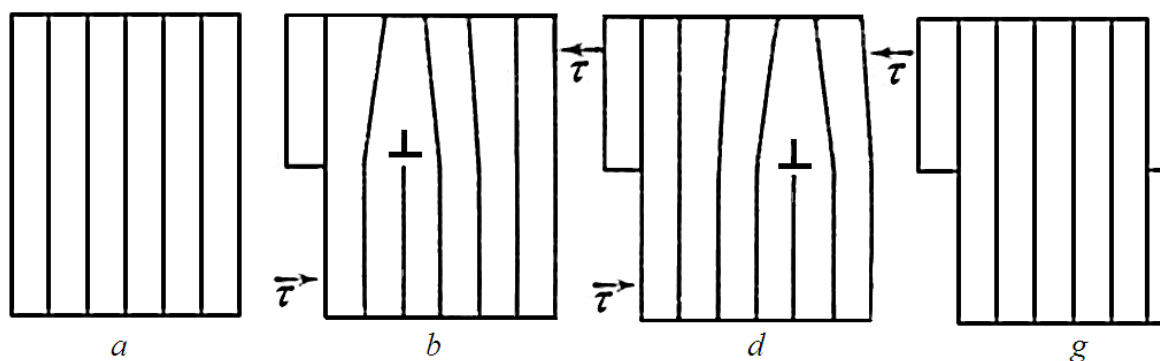


2.13-rasm. Kristallda ikkita blokning qo'shilishi natijasida dislokatsiyaning paydo bo'lishi. *a* – panjarasi buzilmagan dastlabki bloklar, *b* – bloklarning qo'shilishi natijasida dislokatsiyaning hosil bo'lishi.

natijasida chiziqli dislokatsiyalar hosil bo'ladi (2.13-rasm, *b*). Dislokatsiyalar kristalldagi nuqtaviy nuqsonlar to'plangan joylarda ham paydo bo'lishi mumkin. Bu hol 2.14-rasmda tasvirlangan. Bunday nuqsonlar atrofida panjaraning deformatsiyasi tufayli ularning o'rnida dislokatsiya hosil bo'ladi (2.14-rasm, *b*). Nuqtaviy nuqsonlar kabi dislokatsiyalar ham kristall bo'ylab harakatlanishi mumkin. 2.15-rasmda kristallning ustki qismiga nisbatan pastki qismini siljituvchi kuch ta'sirida qanday qilib chiziqli dislokatsiya kristall ichida ko'chib, pirovard oqibatda kristallning sirtiga chiqishi va yo'qolib ketishi tasvirlangan. Dislokatsiyalarning bunday yo'qolishi yuqorida qayd qilingan vakansiyalarning yo'qolishi



2.14-rasm. Kristallda nuqtaviy nuqsonlarning (vakansiyalarning) to'plangan joylarida (a) dislokatsiyalarning paydo bo'lishi (b).



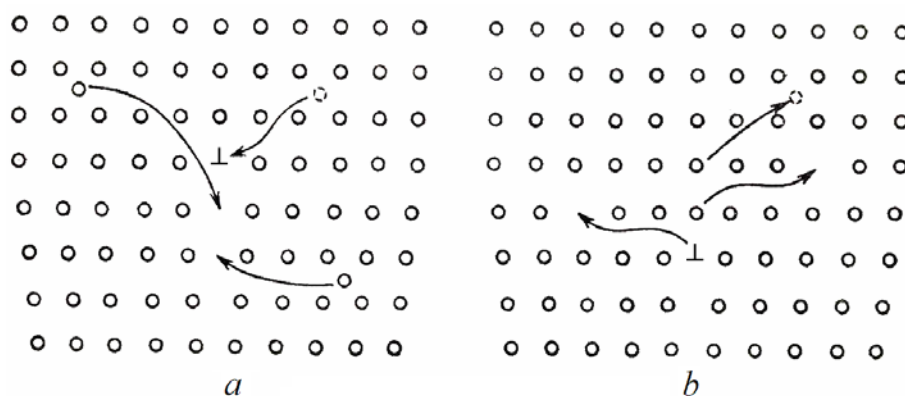
2.15-rasm. Siljish jarayonida chiziqli dislokatsiyaning paydo bo'lishi va ko'chishi (sirg'anishi). *a*–dastlabki muvozanatli holat, *b*– τ kuchlanish ta'sirida dislokatsiyaning paydo bo'lishi, *d* – dislokatsiyaning harakati, *g* –dislokatsiyaning kristall sirtida yo'qolishi.

bilan aynan o'xshashdir.

Dislokatsiyaning sirg'anish tekisligi bo'ylab harakati **dislokatsiyaning sirg'anishi** deyiladi. Bir xil ishorali dislokatsiyalar yaqinlashganda ularning elastik kuchlanish maydoni qo'shiladi va dislokatsiyalarning o'zaro elastik energiyasi ko'payadi. Har xil ishorali dislokatsiyalar yaqinlashganda ularning o'zaro elastik energiyasi kamayadi. Binobarin, bir xil ishorali dislokatsiyalar o'zaro itarilishadi, har xil ishoraliklari o'zaro tortishadi. Har ikkala ishorali dislokatsiya ham kristall sirtiga chiqqanda u yerda bitta supacha, ya'ni **siljish chizig'ini** hosil qiladi. O'qlari bitta siljish tekisligida bo'lgan har xil ishorali dislokatsiyalar uchrashsa, ularning **annigilyatsiyasi**, ya'ni ularning barham topishi sodir bo'ladi. Agar o'qlar har xil siljish tekisliklarida bo'lsa, ular yaqinlashib muvoza-

nat holatida bir-birining qarama-qarshisida joylashadi. Natijada kristallda **dislokatsiyalar to'ri** paydo bo'ladi.

Dislokatsiyalarning sirg'anishi deb xarakterlangan harakatdan tashqari dislokatsiyalarning «o'rmalashi» (perepolzaniye) deb nom olgan harakati ham mavjud. **Dislokatsiyalarning o'rmalashi** deganda chiziqli tashkil etuvchisi bo'lgan dislokatsiyaning ekstratekisligining kristall ichkarisiga yoki aksincha bu tekislikning qisman kristall sirtiga siljishi tushuniladi. Dislokatsiyalarning bunday harakati real kristallarda kuzatilishiga qaramay, ekstratekislikning real fizikaviy ob'ekt sifatida kristall ichidagi to'g'ridan-to'g'ri harakati deb tushunmaslik kerak. Dislokatsiyaning bunday harakati kristalldagi ayrim atomlarning ekstratekislik chegarasiga kelib, ekstratekislik qatorini to'ldirishi orqali amalga oshadi (2.16-rasm, *a*). Tabiiyki, bunda atomlarini yo'qotgan boshqa qatorda ekstratekislik paydo bo'ladi. O'rmalash ekstratekislikning pastki qismi-



2.16-rasm. Dislokatsiyaning atomlarni qo'shib olish (*a*) va ekstratekislikdan chiqarib tashlash (*b*) yo'llari bilan o'rmalashi.

da panjaradagi vakansiyalarning annigilyatsiyasi tufayli ham sodir bo'ladi (2.16-rasm, *b*). Natijada kristallning ichki qicmidan vakansiyalarning chiqib ketishi sodir bo'ladi. Dislokatsiyaning o'rmalashi dislokatsiyaning pp' siljish tekisligining (2.7-rasm) yuqoriga yoki pastga harakatiga mos keladi. Agar dislokatsiyaning harakati pastga bo'lsa, u holda dislokatsiya kristalldan qo'shimcha atom yutadi, agar yuqoriga bo'lsa, u vakansiya yutadi.

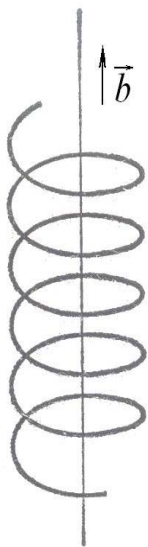
Dislokatsiyalarning o'rmalashi quyidagi to'rtta mexanizm orqali sodir bo'ladi.

1. Panjaradagi vakansiyalarning ekstratekislik oxirida annigilyatsiya bo'lishi natijasida.
2. Panjarada ekstratekislik oxiri yaqinida vakansiyalar paydo bo'lishi tufayli.

Bunday jarayonda panjaradagi qo'shni atom

ekstratekislik oxiriga sakrab o'tadi. Natijada ekstratekislik kristall ichkarisiga qarab harakatlanadi. Bunday yo'l bilan hosil bo'lgan vakansiya esa kristall ichkarisiga erkin diffuziyalanishi mumkin. 3. Ekstratekislik oxiriga panjara tugunlari orasidagi suqilma atomlar o'tishi mumkin. 4. Ekstratekislik oxiridan atomlarni panjaraning yaqin tugunlari orasiga sakrash natijasida kristall ichida suqilma atomlar hosil bo'lishi natijasida.

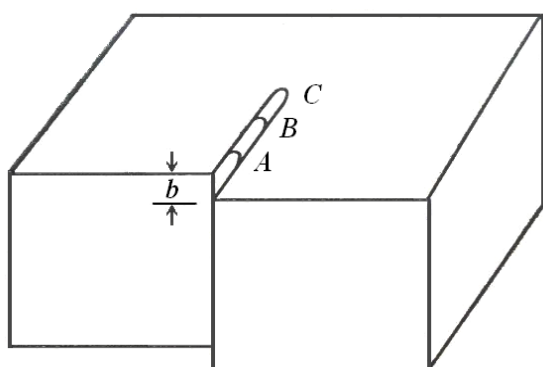
Vintsimon dislokatsiyalarning harakati hozirgina biz ko'rib o'tgan harakatlardan katta farq qiladi. Chunki vintsimon dislokatsiya chiziqli dislokatsiyadek yagona sirg'anish tekisligiga ega emas va Byurgers vektori dislokatsiya o'qiga parallel yo'nalgandir. Shuningdek, u ekstratekislikka ega emas. Shuning uchun vintsimon dislokatsiyaning harakati ancha murakkab bo'ladi. Bu harakat chiziqli dislokatsiyalarning o'rmalashiga mos keladi. Agar vintsimon dislokatsiya spiral bo'lib eshilsa, u vaqtda spiral chiziqli, ya'ni chegaraviy tashkil etuvchilarga ega bo'lishi kerak va ular o'rmalash imkoniyatiga ega bo'ladilar. Bunday o'rmalash 2.17-rasmda tasvirlangan. O'rmalash spiralning radial yo'nalishida kengayishga olib keladi. Vintsimon dislokatsiya spirali hosil bo'lishi hisobiga o'rmalashning chegaraviy tashkil etuvchilari yuzaga keladi.



2.17-rasm. Vintsimon dislokatsiyaning o'rmalashi.

Vintsimon dislokatsiyalar ham sirg'anishi mumkin. Ma'lumki, vintsimon dislokatsiyaning hamma tekisliklari Byurgers vektoriga ega. Shuning uchun sof vintsimon dislokatsiya istalgan yo'nalishda sirg'anishi mumkin. Demak vintsimon dislokatsiya tarkibiga kirgan barcha tekisliklar ravon sirg'anishi mumkin. Vintsimon dislokatsiyaning kristall orqali o'tishida kristall shakli chiziqli dislokatsiyaning o'tishidagiga

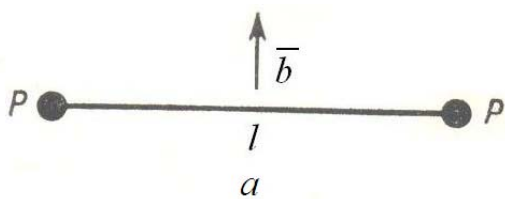
qaraganda bir muncha boshqacha bo‘ladi. Vintsimon dislokatsiyadagi atom tekisliklarining joylashuvining (2.10 - rasm) tahlili shuni ko‘rsatadiki, chiziqli dislokatsiyadan (2.15-rasm) farqli holda kristall sirtidagi supacha vintsimon dislokatsiyaga parallel emas. Supacha kristall sirtida vintsimon dislokatsiyaning ikkita oxirgi nuqtalarida mavjud va dislokatsiya kristall orqali harakatlanganda supacha uning orqasidan boradi. 2.18-rasmda vintsimon dislokatsiyaning harakati tasvirlangan. Dislokatsiyaning A nuqtadan B nuqtaga va B nuqtadan C nuqtaga harakati natijasida $\vec{b}$ yo‘nalishdagi siljishni ta’minlab, supacha balandligi b uning orqasidan harakatlanadi.



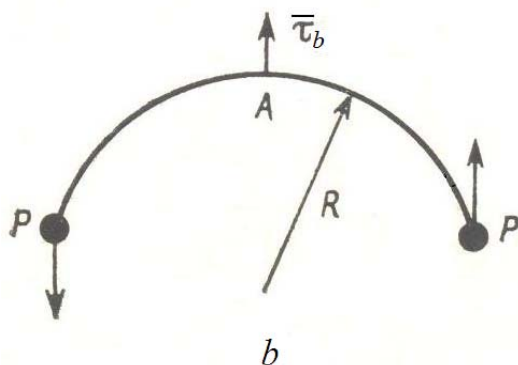
2.18 - rasm. Vintsimon dislokatsiyaning harakati.

2.3.4. Dislokatsiyalarning to‘siqlarni yengib o‘tishi va Frank –Rid manbasi

Faraz qilamiz, Byurgers vektori chizma tekisligida va vertikal yo‘nalgan. Dislokatsiya PP nuqtalarda mahkamlangan bo‘lib, bu nuqtalar harakatda ishtirok etmaydi (2.19-rasm, a). Bunday mahkamlangan nuqtalar qaralayotgan dislokatsiyaning boshqa dislokatsiyalar bilan kesishuv nuqtalari, kirishma atomlar va boshqa nuqsonlar bo‘lishi mumkin. Dislokatsiyaning muvozanat holatiga PP to‘g‘ri chiziq mos kelib, uning chiziqli taranglik energiyasi Tl (T -sirt taranglik kuchi, l – PP masofa uzunligi) minimal bo‘ladi. $\vec{\tau}_s$ siljish kuchlanishi ta’sirida dislokatsiya R radiusli aylana yoyi tariqasida egila boshlaydi. Bunda aylananing markaziga yo‘nalgan chiziqli taranglik kuchining normal tashkil etuvchisi paydo bo‘ladi (2.19-rasm, b). Hosil bo‘lgan egri chiziqli dislokatsiyada vintsimon tashkil etuvchisi paydo bo‘ladi. Dislokatsiyaning keyingi cho‘zilishida uning radiusi minimal $R_{\min}=l/2$ qiymatgacha kamayadi. Bu vaqtda PAP yarim aylana cho‘qqisi A nuqtada sof chegaraviy dislokatsiya, P nuqtalarda esa o‘qlari antiparallel bo‘lgan vintsimon

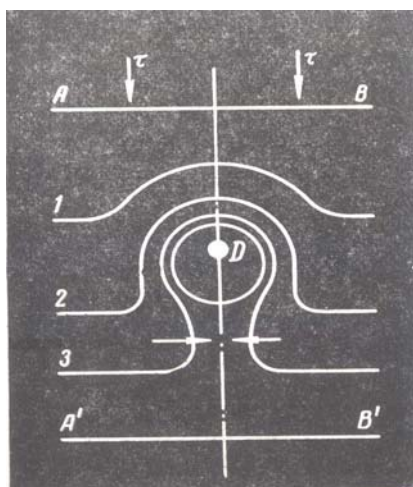


2.19-rasm. PP nuqtalarda mahkamlangan dislokatsiya (a) va mahkamlangan dislokatsiyaning choʻzilishi (b).



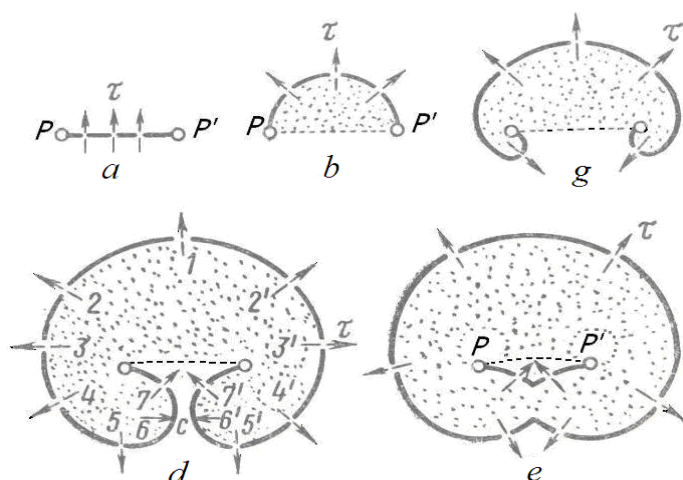
dislokatsiyalar hosil boʻladi. $\vec{\tau}_s$ kuchlanishning undan keyingi kattalashuvida chegaraviy dislokatsiyaning A nuqtadagi qismi $\vec{\tau}_b$ kuchlanish yoʻnalishida, vintsimon dislokatsiyalarning P nuqtalardagi qismlari esa P nuqtalarni aylanib oʻtib, qarama-qarshi tomonga $\vec{\tau}_b$ kuchlanish yoʻnalishiga perpendikulyar holda harakatlana boshlaydi. Faraz qilaylik, urinma kuchlanish $\vec{\tau}$ taʼsirida siljish tekisligida harakat nuqtada sof chegaraviy dislokatsiya, P nuqtalarda esa oʻqlari antiparallel boʻlgan vintsimon dislokatsiyalar hosil boʻladi. $\vec{\tau}_b$ kuchlanishning undan keyingi kattalashuvida chegaraviy dislokatsiyaning A nuqtadagi qismi $\vec{\tau}_b$ kuchlanish yoʻnalishida, vintsimon dislokatsiyalarning P nuqtalardagi qismlari esa P nuqtalarni aylanib oʻtib, qarama-qarshi tomonga $\vec{\tau}_s$ kuchlanish yoʻnalishiga perpendikulyar holda harakatlana boshlaydi. Faraz qilaylik, urinma kuchlanish $\vec{\tau}$ taʼsirida siljish tekisligida harakat qilayotgan dislokatsiya yoʻlida biror qoʻzgʻalmas D toʻsiq uchradi. Bunday toʻsiq qaralayotgan dislokatsiyaning boshqa dislokatsiyalar bilan kesishish nuqtasi, kirishma atomlar va boshqa nuqsonlar boʻlishi mumkin. 2.20-rasmda AB dislokatsiyaning D toʻsiqni yengib oʻtishining nazariy sxemasi keltirilgan. Dislokatsiya D nuqtaga asta-sekin yaqinlasha borib, toʻsiqni aylanib oʻtuvchi sirtmoq hosil qiladi (1-, 2- va 3- holatlar). Toʻsiqdan keyin sirtmoq yopiladi (4-holat). Agar kristalda sirpanish sodir boʻlishi faqat mavjud boʻlgan dislokatsiyalarning kristall sirtiga chiqishi evaziga sodir boʻlganda edi, plastik deformatsiya jarayonida kristalldagi bor dislokatsi-

yalar tamom bo'lgan va kristall mukammal holatga o'tgan bo'lar edi. Ammo bu kristallning deformatsiyalanish darajasi ortishi bilan panjara-



2.20-rasm. Dislokatsiyaning to'siqni aylanib o'tishi.

ning buzilishi kuchayishi va dislokatsiya zichligining ortishini ko'rsatuvchi tajriba natijalariga ziddir. Shuning uchun plastik deformatsiyaga sabab bo'luvchi dislokatsiyalar tashqi kuch ta'sirida kristalda sirpanishlarning sodir bo'lish jarayoni natijasida ko'plab hosil bo'ladi, ya'ni ko'payadi. Dislokatsiyalarning bunday hosil bo'lib, ko'payish jarayoni mexanizmini birinchi marta Frank va Rid kashf qildilar (1950). Bu mexanizmni tushunish uchun 2.19-rasmda ko'rganimizdek, PP' nuqtalarda qo'zg'almas qilib mahkamlangan dislokatsiyaning (2.21-rasm, a) harakatini ko'ramiz. Tabiiyki, bu nuqtalar dislokatsiya harakatida ishtirok etmaydi. Ular dislokatsiyalarning **Frank-Rid manbasi** deb ataladi. Tashqi kuchlanish τ ta'sirida dislokatsiya cho'zila boshlaydi va



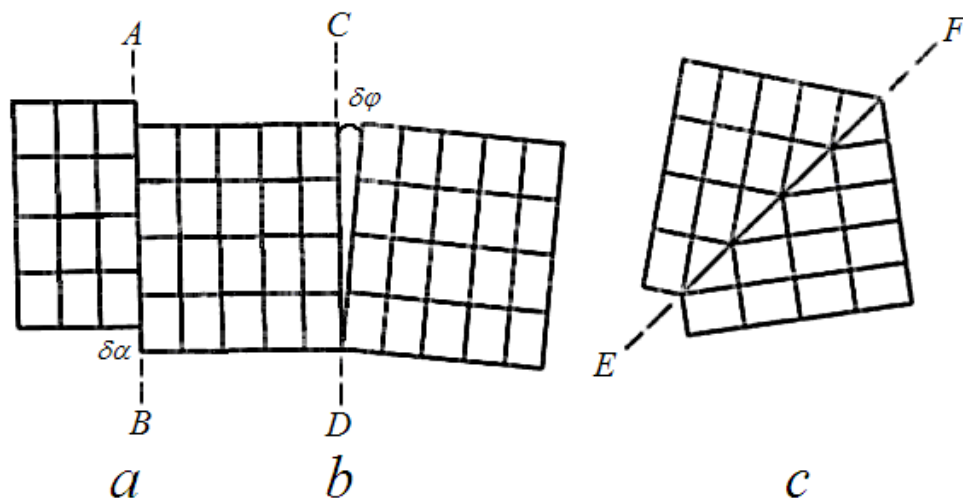
2.21-rasm. Frank-Rid manbasida dislokatsiyaviy sirtmoqlarning generatsiyasi (hosil bo'lishi).

qandaydir vaqt ichida yarim aylana shaklini oladi (2.21-rasm, *b*). Undan keyin jarayon o'z-o'zidan davom etib, dislokatsiyaning ikkita spiralsimon qismi hosil bo'ladi (2.21-rasm, *g*). Ularning *C* nuqtada uchrashuvi (2.21-rasm, *d*) dislokatsiyani ikkiga ajralishiga olib keladi: bittasi tashqi berk aylana ko'rinishida, ikkinchisi ichki-*PP'* dastlabki holatiga to'g'ri keladi (2.21-rasm, *e*). Tashqi dislokatsiya kristallning tashqi sirtiga qadar kattalashib, elementar siljishga sabab bo'ladi. Ichki dislokatsiya esa dastlabki *PP'* holatni egallaydi va τ kuchlanish ta'sirida yana qaytadan cho'zilib, o'sib yuqorida tasvirlagan jarayonni qaytadan davom ettiradi. Bunday jarayon sirpanish tekisligi bo'yicha kristallning bir qismini ikkinchi qismiga nisbatan sezilarli siljishini ta'minlab, istalgancha ko'p marta takrorlanishi mumkin. Frank-Rid manbasi dislokatsiyalarning ko'payishining mumkin bo'lgan ko'plab mexanizmlaridan biridir. Real kristallarda dislokatsiyalarning ko'payishi odatda ancha murakkab jarayondir.

2.4. Kristallardagi yassi yoki ikki o'lchamli nuqsonlar

Bunday nuqsonlar **sirt nuqsonlari** deb ham atalib, ikki xil bo'ladi: tashqi va ichki. Kristallning boshqa muhit yoki fazalar bilan chegaralangan sirtidagi nuqsonlar **tashqi yassi nuqsonlar** hisoblanadi. Ichki yassi nuqsonlar kristall panjarasining bir fazoviy oriyentatsiyasidan boshqa oriyentatsiyasiga o'tgan joylarida paydo bo'ladi. Ichki yassi nuqsonlarga jism tashkil topgan bloklar, qiyofadosh tekisliklar chegaralari, taxlanish xatoliklari va chiziqli dislokatsiyalarning qatorlari kiradi. Ularning o'lchamlari faqat nuqsonlar joylashgan tekislik sirtiga o'tkazilgan normal yo'nalishidagina juda kichkina bo'lib, fazoning qolgan ikki yo'nalishida atom diametridan bir necha marta katta bo'ladi. Kristallarni o'rganishga bag'ishlangan dastlabki ishlardayoq ularning tashqi yuzalari ideal geometriyaviy yuzalardan farq qilishligi va notekisligi kuzatilgan edi. Juda mukammal deb hisoblangan kristallning tomonlarini yetarli darajada kattalashtirib qaralsa, silliq emasligi ko'rinadi. Kristallning tashqi yuzasidagi bunday yassi nuqsonlar kristall panjaraning ichki tuzilishidan kelib chiqadigan natijadir. Faqat ideal monokristallgina makroskopik masshtabda yaxlit bitta blokdan tashkil topgan bo'ladi. Amalda esa har qanday kristall juda ko'p mayda kristallchalardan yoki **bloklardan** tuzilgan bo'lib, bundan hatto real monokristallar ham istisno emas. Ikkita qo'shni bloklar *AB* tekisligi bo'yicha panjara doimiysi *a* ga karrali bo'lmagan δa masofaga parallel siljigan (2.22-

rasm, *a*) yoki $\delta\varphi$ burchakka burilgan bo'lishi mumkin. Bu burchak o'nlab sekundlar, minutlar va hatto graduslar bilan o'lchanishi mumkin.



2.22-rasm. Kristallning blokli tuzilishi: *a*- blokning parallel siljishi; *b* – qo'shni bloklarning burchak hosil qilishi; *c* - qiyofadosh bloklar.

Odatda bu burchak kristallarning **mozaiklik darajasini** xarakterlaydi. Mozaika bloklarining o'lchamlari odatda 10^{-6} m dan 10^{-3} m gacha bo'lishi mumkin. $\Delta\varphi < 5^\circ$ shartni qanoatlantiradigan burchak hosil qilgan bloklar **kichik burchakli chegaralar** deyilib, bunday hollar asosan monokristallarda, ayrim hollarda esa polikristallarda ham kuzatiladi. Katta burchakli chegaralarga ($\Delta\varphi > 5^\circ$) ega bo'lgan kristallar polikristallar hisoblanadi. Agar polikristallni tashkil etgan kristallchalar yoki kristall donachalari fazoda bir xil oriyentatsiyaga ega bo'lsa, ular **tekstura** deyiladi va teksturali polikristall xossalari bilan monokristallga yaqinlashadi. Ko'p hollarda kristallarda **qiyofadoshlik tekisligi** deb ataluvchi biror tekislikka nisbatan simmetrik **qiyofadosh sohalar** kuzatiladi (2.22-rasm, *c*). Bu sohalarining kristall panjaralari qiyofadoshlik tekisligiga nisbatan ko'zgu akslanishini hosil qiladi. Qiyofadosh bloklar kristallni o'stirishda deformatsiyaviy ta'sir natijasida hosil bo'lishi mumkin.

Kristallarda uchrab turadigan yassi nuqsonlardan yana biri **taxlanish nuqsonlari** shundan iboratki, bunda kristalldagi atomlarning zich taxlanish tartibi buziladi. Masalan, kub panjarali kristallning zich taxlanishidagi atom qatlamlaridagi xatoni quyidagicha ifodalash mumkin: ABCABCABCACBACBA ..., bu qatlamlarda ABC tartib bilan taxlanish tartibi oxirgi qatlamlarda buzilgan. Taxlanish xatolari kristallanish jarayoni davomida, qattiq holatda qayta kristallanishda

(qizdirishda, polimorfizm), shuningdek plastik deformatsiyalarda vujudga keladi.

Amalda keng foydalanadigan ko'pchilik qattiq jismlar kichik kristallchalardan tashkil topgan polikristallar yoki kristall poroshoklaridir. Kristall modda strukturasining tartiblanish darajasi uning shaklining turli-tumanligiga sabab bo'ladi: ideal va mozaikali real monokristallar, qiyofadosh bloklardan, fazoda turli oriyentatsiyaga va o'lchamlarga ega bo'lgan kristallchalardan, yoki teksturalardan tashkil topgan polikristallar kuzatiladi. Bloklar chegaralarida materialning zichligi, kristall panjarasi, kristalchalarning mahalliy oriyentatsiyalari keskin o'zgargani uchun yassi nuqsonlar ularning mexanikaviy, optikaviy, elektrofizikaviy xossalriga kuchli ta'sir etadi.

2.5. Kristallardagi hajmiy nuqsonlar

O'lchamlari fazoning uchta yo'nalishida ham mos yo'nalishdagi panjara doimiylaridan katta bo'lgan kristall nuqsonlari **hajmiy nuqsonlar** deb ataladi. Bu nuqsonlar **makroskopik nuqsonlar** deb ham ataladi. Makroskopik nuqsonlar nuqtaviy, nuqtaviy va yassi nuqsonlarning (mikronuqsonlarning) birlashuvi natijasida hosil bo'ladi. Bunday nuqsonlarga nuqtaviy nuqsonlar klasterlari, darzlar (chatnashlar), panjaradagi kovaklar, sirtlardagi chuqurchalar (ochiq kovaklar), kristalldan ajralgan ortiqcha elementlar va matritsa fazasidan farq qiluvchi fazalar va boshqa shu kabi nuqsonlar kiradi. Makronuqsonlarning paydo bo'lishiga kristallni olishda uning butun hajmi bo'yicha temperaturaning bir xil bo'lmasligi, ya'ni temperatura gradiyenti katta rol o'ynaydi. Darzlar hosil bo'lishiga dislokatsiyalarning bloklar chegaralarida tormozlanishi asosiy sabablardan biridir. Shuningdek, bunga turli ishorali dislokatsiyalar tekisliklarining kesishib o'zaro ta'siri ham sabab bo'lishi mumkin. Kovaklarni vakansiyalarning to'plami deb qarash mumkin. Kovaklar diffuziya yo'li bilan va materialga termoishlov berish jarayonida hosil bo'ladi. Vakansiyalar donalararo chegaralarga va dislokatsiyalarga diffuziya yo'li bilan keladi va u yerlarda to'planib, kovaklar hosil qiladi. Materialni ayniqsa erish temperaturasiga yaqin temperaturalarda qizdirilsa, ko'p vakansiyalar hosil bo'ladi. Keskin sovutish - toblash natijasida past temperaturada ular saqlanib qoladi. Termoishlovni ko'p marta takrorlashda vakansiyalar miqdori oshib boradi, bu esa mos holda kovaklar sonining va ularning o'lchamlarining ortishiga olib keladi. Umuman, jismni ko'p marta qizdirish va sovutish natijasida nuqsonlar

soni va turlari ortib boradi. Jismlarning bunday holatlari **materialning charchashi** deb ataladi. Charchagan materialning mexanik xossalari nuqsonlar ko'payishi tufayli tubdan yomonlashadi, mo'rtlashadi. Masalan, ayrim mexanizmlar ishlaganda ishqalanish (ish bajarish) hisobiga yuqori temperaturagacha (mingdan yuqori graduslargacha) qiziydi. Ish jarayoni to'xtaganda esa soviydi. Demak, materiallarni ekspluatatsiyasi charchash tufayli cheksiz davom etishi mumkin emas. Ma'lum bir foydalanish muddatidan keyin material o'zining dastlabki xossasidan qisman yoki butunlay mahrum bo'ladi.

2.6. Kristallarning fizikaviy va ximiyaviy xossalarining ularning real tuzilishiga bog'liqligi

Dislokatsiya va materiallarning mustahkamligi. Dislokatsiyalar va ularning boshqa nuqsonlar, jumladan, nuqtaviy nuqsonlar bilan ta'sirlashuvi kristallarning mexanikaviy xossalariga kuchli ta'sir etadi va ularni boshqarishga imkon beradi. Qattiq jismlarning plastikligi ularda mavjud bo'lgan dislokatsiyalarga va ularning siljish imkoniyatiga bog'liq bo'ladi. Mutlaq ideal dislokatsiyasiz kristall eng yuqori mustahkamlikka ega bo'ladi. Chunki bunday kristallni deformatsiyalash uchun juda katta energiya sarflab, kristallni tashkil etgan atomlarini yoki molekulalarini ularning bog'lanish kuchlarini yengib, uzib olish yoki ularni o'z joylaridan qo'zg'atish kerak. Kristallning dislokatsiyasiz ideal mahkamligini baholash uchun atomlararo bog'lanish kuchini kristall kesimining birlik yuzasiga to'g'ri keluvchi atomlar soniga ko'paytirish kerak. Amalda esa siljishga mustahkamlik real kristallarda ideal kristallar uchun hisoblab topilganiga qaraganda ming-o'n ming marta kichik bo'ladi. Bunga sabab yuqorida qayd etganimizdek, dislokatsiyalar tufayli kristall tekisliklarining kichik kuchlar ta'sirida osongina sirg'anishidir. Demak, dislokatsiyalar tufayli kristallarga osonlik bilan mexanik ishlov berish (cho'zish, siqish, bolg'alash, egish, shakl berish) mumkin. Ipsimon kristallarning haddan tashqari yuqori mexanikaviy xossalari ularning strukturasi mukammalligidadir. Bunday kristallar amalda dislokatsiyalar va boshqa nuqsonlarga ega bo'lmaydi, yuqori darajadagi tozalikka ega bo'ladi, ularning sirti ham nihoyatta silliq bo'ladi. Bunday mukammallik faqat ularni o'stirish shart-sharoitlari bilangina emas, balki ularning o'lchamlari nuqson paydo bo'lishiga yo'l qo'ymaydigan darajada kichik bo'lishi bilan ham bog'liqdir.

Mustahkamlikni mukammal kristall yaratish orqali oshirish murak-

kab va qimmat usuldir. Kristallarning mustahkamligini oshirishda dislokatsiyalarni boshqa nuqsonlar bilan ta'sirlashuvidan foydalanadilar. Ko'pchilik sof monokristallar kam miqdordagi dislokatsiyalarga ega bo'lgan holda nuqtaviy va boshqa nuqsonlardan deyarli holi bo'ladi. Bunday materiallar yumshoq va plastikdir. Kristallarning mustahkamligini orttirishning yo'llaridan biri kristallni kirishma atomlar bilan legirlashdir. Ular dislokatsiyalarning harakatiga tormozlovchi ta'sir ko'rsatadi. Katta o'lchamli kirishma atomlari dislokatsiya yadrosining yuqori qismidagi kengaygan sohaga, matritsa atomidan o'lchami kichik bo'lgan kirishma atomlar esa dislokatsiya yadrosining pastki qismidagi toraygan sohada joylashadi. Shu tariqa dislokatsiya chizig'ida kirishma atom bilan boyigan soha hosil bo'ladi va dislokatsiyaning harakatiga to'sqinlik qiladi (boshqacha aytganda dislokatsiyaning energiyasini kamaytiradi). Natijada materialning mustahkamligi ortadi. Dislokatsiya chizig'idagi kirishma atom bilan boyigan soha **Kottrell atmosferasi** deyiladi. Kottrel atmosferasi dislokatsiyalarni mahkamlovchi markazlar hisoblanadi.

Materiallarning mustahkamligini legirlash yo'li bilan oshirishga po'lat yaxshi misol bo'ladi. O'ta mustahkam sof temir monokristallari olish juda mushkul, shu bilan birga bu kristallar juda plastikdir. Ular $5 \cdot 10^5 \text{ N/m}^2$ kuchlanishda plastik deformatsiyalana boshlaydi. Ammo temir asosidagi shunday qotishma olish mumkinki, u sof temir monokristaliga nisbatan 100 marotaba katta kuchlanishlargacha plastik deformatsiyaga uchramaydi. Temirning mustahkamligini bunday orttirish uchun uni uglerod, azot yoki marganets, volfram, xrom, molibden va vanadiy kabi metallar bilan legirloydilar. Ushbu legirlovchi elementlar yo ximiyaviy birikma holida, yo alohida element sifatida dislokatsiyalar bilan ta'sirlashib, ularning harakatini tormozlaydilar va shu tariqa po'latning mustahkamligini orttiradi. Bundan tashqari po'latda mayda kristallitlar serob bo'lib, ularning chegaralari dislokatsiyalarni tutib qoladilar.

Kristallni yuqori temperaturadan keskin sovutish toblash yo'li bilan mayda zarrali (blokli, donali) yuqori mustahkamlikka ega bo'lgan material olinadi. Bunda kichik donalar chegaralari dislokatsiyalarning harakati uchun katta **to'siq** hisoblanadi. Ammo dislokatsiyalar kristall donachalari chegarasida to'planib, lokal kuchlanishlar konsentratsiyasining to'planishiga va yoriqlar paydo bo'lishiga olib kelishi mumkin. Tabiiyki, dislokatsiyalar boshqa dislokatsiyalar bilan ham ta'sirlashadilar

Dastlab kristall oson deformatsiyalanadi. Ammo deformatsiya kuchayishi bilan keyingi davom ettirish uchun katta kuchlanish kerak bo'la boshlaydi. Bunga sabab deformatsiya davomida dislokatsiyalar soni keskin ortadi. Natijada dislokatsiyalar tartibsiz holda bir-birlari bilan kesishib, keyingi harakatlari qiyinlashib ketadi va material mustahkamligi ortadi. Bu hodisa **parchinlash (naklep)** deyiladi. Parchinlash mustahkam material olishning keng tarqalgan usullaridan biri bo'lib, u sovuq holda deformatsiyalash (metall listlarni valiklar orasidan o'tkazish, cho'zish) orqali amalga oshiriladi.

Metallarni eng yuqori darajada mustahkamlash dislokatsiyalarning 10^{12} - 10^{13} sm^{-2} zichliklarida kuzatiladi. Zichlikni undan ortib ketishi metall mustahkamligini keskin kamayishiga olib keladi. Bunga sabab shuki, kristall panjarasiga dislokatsiyalar orqali haddan tashqari katta energiya uzatilishi tufayli panjara turg'unligi yo'qoladi.

Dislokatsiyalarni kristall bo'ylab oson sirpanishi va boshqa nuqsonlar bilan ta'sirlashuvi materiallarni toblashdan, mexanik ishlovdan yoki radiatsiya ta'sir ettirgandan keyin kuzatiladigan relaksatsiyaviy jarayonlarda o'ziga xos bir tarzda namoyon bo'ladi. Masalan, titanning nostexiometriyaviy nitrid fazalarida 1500°C temperaturadan toblagandan keyin ularda hosil bo'lgan noturg'un nuqtaviy nuqsonlar va dislokatsiyalarning o'zaro ta'sirlashuvi jarayoni xona temperaturasida ichki ishqalanishni uzoq vaqt davomida (turli fazalarida 3.5 sutkadan 10 sutkagacha) ossillyatsiyalanib turishiga sabab bo'ladi. Bunday jarayonni kristallni toblash natijasida paydo bo'lgan noturg'un dislokatsiyalarni o'zaro va noturg'un nuqsonlar bilan ta'sirlashib ko'payishi, kristall sirtida va donachalari chegaralarida yo'qolishi va qayta taqsimlanishi bilan tushuntirish mumkin. O'xshash hodisa mexanik kuchlanish qo'yilganda qo'rg'oshinda ham bir necha sutka davomida kuzatilgan. Nostexiometriyaviy titan karbid (TiC_x) va karbogidridlarini (TiC_xH_y) turli dozalarda γ -nurlantirilgandan keyin xona temperaturasida ularning ichki ishqalanishini 6-12 soat davomida ossillyatsiyaviy o'zgarishi kuzatilgan. Kuzatilgan hodisa noturg'un radiatsiyaviy nuksonlar bilan dislokatsiyalarning ta'sirlashuvi davomida sistemaning termodinamik muvozanatga intilishi bilan tushuntiriladi. γ -nurlantirishdan keyin titan karbidi va karbogidridlaridagi ichki ishqalanishning ossillyatsiyaviy o'zgarishi nurlantirishning dastlabki etaplarida kuchli bo'lib, keyingi etaplarida nurlantirish dozalarini ortishida sezilarli susayadi. Bu hol keyingi etaplarda dislokatsiyalarni birlamchi lokallashgan radiatsiyaviy

nuqsonlarda mahkamlanishi bilan tushuntiriladi. Ichki ishqalanishning γ -nurlantirilgan titan karbogidridida vaqt bo'yicha ossilyatsiyaviy o'zgarishi titan karbidida nisbatan kuchli zaiflashgan bo'lib, buni dislokatsiyalarning vodorod atomlarida mahkamlanishi (bog'lanishi) bilan tushuntirish mumkin. Bu omil qotishmalardagi «vodorod mo'rtlashuv» mexanizmlaridan biri bo'lishi mumkin.

Yarimo'tkazgich kristallarning elektr xossalarini ulardagi nuqsonlarga bog'liqligi. Ma'lumki, yarimo'tkazgich kristallar gomopolyar tipidagi (bir xil qutbli) bog'lanishga ega. Bunday kristallarda har bir dislokatsiya chizig'i bo'ylab bir qator uzilgan bog'lanishlar paydo bo'ladi. Tajribalarning ko'rsatishicha olmos tipidagi (Si, Ge) kristallardagi dislokatsiyaning sirg'anish tekisligining tipiga, o'qining yo'nalishiga va boshqa qo'shimcha holatlariga bir panjara doimiysi doirasida turli miqdordagi uzilgan bog'lanishlar to'g'ri keladi. Uzilgan bog'lanishli elektronlar yo kristallning o'tkazuvchanlik zonasiga o'tishi mumkin, yo atom o'zining atrofida juftlangan elektron hosil qilishi uchun ikkinchi elektronni biriktirib olishi mumkin. Birinchi holda dislokatsiya o'tkazuvchanlikka donorlar qatori kabi ta'sir ko'rsatadi. Ikkinchi holda esa u akseptorlar qatoridek ta'sir ko'rsatadi. Kremniy va germaniyda, xususiyl holda dislokatsiyalar akseptorlar bo'ladi. Agar dislokatsiyada hamma akseptor sathlar band bo'lsa dislokatsiya chiziqlari manfiy zaryadlangan bo'ladi. Bunday holat esa o'tkazuvchanlik elektronlarining sochilishiga, binobarin, elektronlar va "kovaklar" harakatchanligiga kuchli ta'sir ko'rsatadi. Bundan tashqari dislokatsiyada uzilgan bog'lar elektr zaryad tashuvchilar konsentratsiyasini kamayishiga olib keladi. Dislokatsiyalarda va boshqa nuqsonlarda kirishma atomlarning to'planishi ham kristall dislokatsiyalarining tuzilishiga va demak, yarimo'tkazgich materiallarning elektr o'tkazuvchanligiga kuchli ta'sir ko'rsatadi. Nuqtaviy nuqsonlarning tabiati ham yarimo'tkazgichlarning elektr xossalariga har xil ta'sir ko'rsatadi. Aynan bir kirishma atom tugunlar orasiga tushuviga yo tugunda, yo dislokatsiyada joylashuviga qarab, kristallning elektr xossasiga mutlaqo har xil ta'sir qilishi mumkin. Chunonchi, bir holatda u (kirishma atom) donor rolini o'ynasa, boshqa holatda akseptor yoki neytral bo'lishi mumkin.

Ion kristallarning optikaviy xossalarining ulardagi nuqsonlarga bog'liqligi. Nuqsonli ion kristallar o'ziga xos optikaviy xossalarga ega bo'ladi. Bu ma'noda ayniqsa ishqoriy goloid birikmalar yaxshi o'rganilgan. Masalan, NaCl yoki KCl kristallini mos holdagi ishqoriy metall

bug'ida qizdirish ularni mos holda sariq yoki ko'k rangga ega bo'lishiga olib keladi. Ularning yutilish spektrlarida yutilishning keng sohalarini kuzatishga muvaffaq bo'lindi. Bunday spektrlarning yutilish maksimumi NaCl uchun 465 nm, KCl uchun 563 nm tashkil etadi. Bu polosalar F-polosalar deb ataladi. **F- polosani** De-Bur quyidagicha tushuntirdi. Natriy yoki kaliy bug'laridagi atomlar ularning mos kristall tuzlariga kirib, kristallning anion qismida nuqtaviy nuqsonlar hosil qiladi. Bu nuqsonlarga valentlikni kompensatsiyalovchi elektronlar borib tushadi. Bu rang markazlari **F- markazlar** deyiladi. Kvant mexanikasi nuqtai nazaridan ular vodorod atomiga juda o'xshash. Bunday elektron o'zining asosiy holatidan tashqari qator uyg'otilgan holatlarga ega. F- yutilish ushbu elektronning asosiy holatidan birinchi uyg'otilgan holatiga o'tishi bilan bog'liq ekanligi tajribalarda tasdiqlangan. F- markazlardan tashqari kristallning har xil nuqsonlari bilan bog'liq **V-**, **R₁-**, **R₂-**, **M-** va **N-** markazlar mavjud. Masalan, **V- markaz** kristall panjaraning kation qismida "tirqish"larni tutuvchi vakansiyalarning paydo bo'lishi bilan bog'liq. Kristallarning optikaviy spektrida V- markazlarga mos keluvchi yutilish polosalari mavjud.

Kristalldagi nuqsonlarni xossalariining anizotropiyasiga ta'siri. Kristallografiyaviy yo'nalishlar odatda dislokatsiya o'qlari bilan mos tushadi. Ko'p hollarda nuqtaviy nuqsonlar ham ma'lum bir qator bo'yicha terilib qoladi. Buning natijasida mazkur yo'nalishlarda mukammal kristallarning anizotropiyasiga nisbatan kuchliroq anizotropiya namoyon bo'ladi. Bu hol ayniqsa nuqsonlarga kirishma atomlar tushib qolsa yaqqolroq namoyon bo'ladi. Bunday hollar hatto kub simmetriyali kristallarda ham optikaviy xossalariining anizotropiyasiga olib kelishi mumkin. Turli usullar bilan olingan kristallar o'zlarining kristall panjaralarining real tuzilishlari bilan, binobarin, xossalari bilan anchagina farq qiladi. Kristallda sintez qilingan tagligiga, birlamchi reaktivlari va boshqa shart-sharoitlarga bog'liq holda turli miqdorda mikrokirishmalar bo'ladi. Bu mikrokirishmalar olingan kristallarning fizikaviy xossalariiga sezilarli ta'sir qiladi. Kristallning tarkibi mutlaqo bir xil bo'lgan taqdirda ham ular real strukturalari bilan farq qiladi. Chunonchi, tartiblanish darajasi, dislokatsiyalar soni va konfiguratsiyasi, kristallni o'sish tezligiga bog'liq bo'lgan mukammalligi va boshqa parametrlari turlicha, demak xossalari aynan bir xil bo'lmaydi. Bir xil moddaning polikristall va monokristal holatlarining elektr xossalari, masalan, tok tashuvchilarining harakatchanligi turlichadir. Moddaning xossalariini o'rganishda uning

qattiq, suyuq yoki gaz holatda ekanligini e'tiborga olish kerak. Qattiq jismlarning xossalarini o'rganishda esa ularning individual (o'ziga xos) holatlarini hisobga olish kerak.

Kristall nuqsonlarini kuzatish usullari. Ba'zi hollarda dislokatsiyalar va boshqa nuqsonlar haqida ma'lumot olish ushbu kristallarning nuqsonlarga bog'liq bo'lgan fizikaviy va ximiyaviy xossalarini o'rganish orqali amalga oshiriladi. Kristall tomonining yuzasiga dislokatsiya chiqqan joyda kristall panjara maksimal kuchlanishga ega bo'lib, bu nuqtadagi atomni yulib olish uchun kerak bo'lgan energiya mukammal strukturali tomondagi atomni yulib olish uchun kerak bo'lgan energiyaga qaraganda bir muncha kamroq bo'ladi. Bunday tajriba uchun shart-sharoitlarni tanlab, natijani mikroskop orqali kuzatish mumkin. Dislokatsiyalarni kuzatish usullaridan ko'p tarqalgani **yedirish (travleniye)** usulidir. Ayrim moddalar uchun bug'latish usuli yaxshi natija beradi. Yedirish yoki bug'latish usullarida dislokatsiyalar kristall sirtiga (yuzaga) chiqqan joylarda mikroskopda yaxshi ko'rish mumkin bo'lgan o'lchamlargacha **yedirish chuqurchalari** qoladi. Elektronmikroskopik tadqiqotlar eng yaxshi natijalar beradi. Hozirgi vaqtda "manzaralash" (dekorirovaniye) usulining turli variantlari juda yaxshi ishlab chiqilgan. Bu usulda maqbul (masalan, rangli) kirishma tanlab olish kerak bo'ladi. Bu kirishma dislokatsiyalarda o'tirib, ularning manzarasini hosil qiladi. Shaffof kristallarning nuqsonlarida o'tirgan shaffof bo'lmagan kirishmalar nuqsonlarni mikroskop ostida ko'rinadigan qilib qo'yadi. Shaffof kristallardagi dislokatsiyalar chegaralaridagi keskin kuchlanishlarni qutblangan yorug'lik orqali ko'rinadigan qilish mumkin. Bu usul kristallning hajmidagi nuqsonlarni ko'rishda qo'l keladi. Boshqa ko'pgina usullar ham bor. Ammo ular xususiy xarakterga egadir.

Savollar va masalalar

1. Kristall panjarasining nuqsonlari deb nimalarga aytiladi va ular necha xil bo'ladi?
2. Kristall panjarasidagi dinamikaviy buzilishlar nima?
3. Eksiton nima?
4. Panjaraning statik buzilishlari nima?
5. Qanday nuqtaviy nuqsonlarni bilasiz?
6. Kristallardagi qanday rang markazlarini bilasiz?
7. Nuqtaviy nuqsonlar hosil bo'lish mexanizmlari qanday?
8. Dislokatsiyalar nima va ularning qanday xillari bor?
9. Ekstratekislik nima? Dislokatsiya yadrosichi?
10. Byurgers vektori nima? Byurgers konturichi?
11. Payerls kuchi nima?
12. Dislokatsiya energiyasi qanday kattaliklarga bog'liq?
13. Dislokatsiyalarning Frank-Rid manbasi nima?
14. Materialning charchashi deb nimaga aytiladi?
15. Kristallarning fizikaviy va ximiyaviy xossalari namoyon bo'lishida ulardagi nuqsonlarning rollari qanday?
16. Tajribalarning ko'rsatishicha alyuminiy metallida vakansiya (Shottki nuqsoni) hosil bo'lishi uchun taxminan 0.75 eV energiya talab qilinadi. Xona temperaturasiidagi termodinamikaviy muvozanatdagi alyuminiyda vakansiyalar miqdori qancha bo'ladi? Erish temperaturasi (660 K) yaqin temperaturadachi?
Javob: 10^{18} m^{-3} ; $\approx 10^{25} \text{ m}^{-3}$.
17. Agar alyuminiyning erish temperaturasiidagi vakansiyalar konsentratsiyasi $n_v \approx 10^{25} \text{ m}^{-3}$ bo'lsa, uning erish temperaturasi topilsin.
Javob: $T_{erish} \approx 933 \text{ K}$.
18. Kristalldagi vakansiya hosil bo'lish energiyasi 0.75 eV bo'lsin. Suqilma atom hosil bo'lish energiyasi esa 3 eV . Xona temperaturasiidagi Shottki nuqsonlari sonining Frenkel nuqsonlarining soniga nisbati topilsin.
Javob: $\frac{n_{Sh}}{n_F} \approx \exp\left[-\frac{2E_{Sh} - E_F}{2k_B T}\right] = \exp(18.1) = 7.37 \times 10^7$.
19. Silindr shaklidagi kristalldagi dislokatsiya qobig'i radiusining yadrosining radiusiga nisbati $r_l/r_0 = 5 \times 10^3$, Byurgers vektorining son qiy-mati $2.5 \times 10^{-10} \text{ m}$, dislokatsiya shnurining uzunligi $l = 2.5 \text{ \AA}$, kristallning siljish moduli $G \approx 10^{11} \text{ N/m}^2$ bo'lsa, bu dislokatsiya hosil qilgan elastik maydon energiyasini hisoblang.

Javob: 10×10^{-19} joul ≈ 6 eV.

20. Agar kub strukturali kristalldagi qo'shni dislokatsiyalar orasidagi masofa 10^4 atomlararo masofaga teng bo'lib, panjara doimiysi $a = 4.2$ Å bo'lsa, dislokatsiya zichligi qancha?

Javob: $n \approx 1.9 \times 10^6$ m².

21. Yung moduli 5×10^{11} N/m², Puasson koeffitsiyenti $\nu = 0.2$ bo'lgan materialdagi dislokatsiyaning Byurgers vektorining kattaligi $b = 2 \times 10^{-10}$ m bo'lsa, ushbu dislokatsiya hosil qilgan chiziqli taranglik kuchini hisoblang.

Javob: $T = 0.8$ N/m.

III. KRISTALLARDAGI XIMIYAVIY BOG‘LANISHLARNING TURLARI VA ULARNING FIZIKAVIY ASOSLARI

3.1. Kristall panjaralaridagi kuchlar

Har qanday qattiq jism, jumladan kristall jismlar siqishga ham, cho‘zishga ham qarshilik ko‘rsatadi. Bundan jismlarni tashkil etgan atomlar, molekulalar yoki ionlar orasida itarish **kuchlari ham, tortishish kuchlari** ham mavjud degan xulosa kelib chiqadi. Xuddi o‘sha kuchlar ta’sirida qattiq jism o‘zining shaklini saqlash xossasiga ega bo‘ladi. Boshqa har qanday qattiq jismlar kabi muayyan kristall panjaraga (singoniyasiga) ega kristallar ham ularni tashkil etgan tashkil etuvchilari orasidagi tortishish va itarish kuchlarining o‘zaro muvozanati tufayli o‘z panjarasini, tashkil etgan atomlarining (molekulalarining yoki ionlarining) fazoning uch yo‘nalishi bo‘yicha joylashuvidagi davriyligini saqlaydi. Bu kuchlarning tabiati kristall moddasining turiga bog‘liqdir. Ammo hamma hollarda ham umumiy qonuniyatlar kuzatiladi. Kristallning tashkil etuvchilari shunday masofada joylashgan bo‘ladiki, tortishish va itarilish kuchlarining teng ta’sir etuvchisi nolga teng bo‘ladi. Kristallni tashkil etgan zarralar bu holatga mos keluvchi nuqta atrofida tebranma harakatda bo‘ladi. Nazariya va tajribalarning ko‘rsatishicha, kristalldagi itarish kuchlari atomlar orasidagi masofa kamayishi bilan tortishish kuchlariga qaraganda tezroq ko‘payib, aksincha masofa kattalashganda tezroq kamayar ekan. Kristallning tashkil etuvchilari orasidagi tortishish kuchi quyidagicha aniqlanadi:

$$F_{tort.} = - \frac{b}{r^{m+1}}, \quad (3.1)$$

bunda b - o‘zgarmas kattalik, r - tortishuvchi zarralar orasidagi masofa, m - tortishish kuchining fizikaviy tabiatiga bog‘liq bo‘lgan o‘zgarmas kattalik. Tortishuv kuchi va u hosil qilgan potensial energiya minus ishora bilan, itarishish kuchi va unga mos kelgan potensial energiya plyus ishora bilan olinadi.

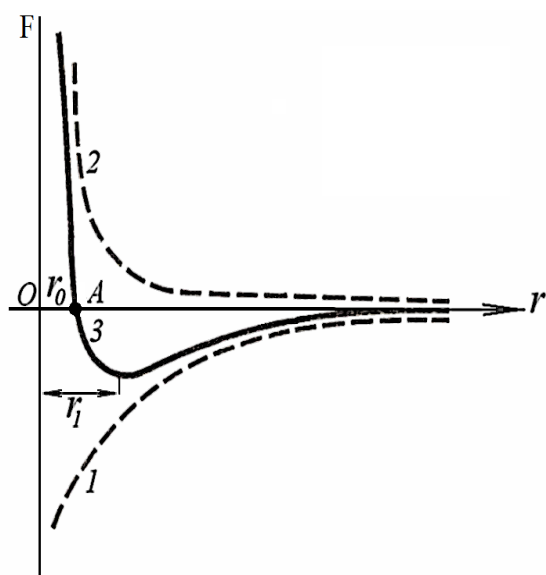
Zamonaviy nazariy qarashlarga ko‘ra, itarish kuchlarining zarralar orasidagi masofaga bog‘lanishi quyidagi tenglama bilan aniqlanishi mumkin:

$$F_{itar.} = \frac{a}{r^{n+1}}, \quad (3.2)$$

bunda a - va n - qaralayotgan kristall uchun doimiylar, r – zarralar orasidagi masofa. r masofa kamayishi bilan itarish kuchlari tortishish kuchlariga qaraganda kuchliroq ortishi uchun $m < n$ shart bajarilishi kerak. Masalan, ayrim kristallar uchun $n = 12$, $m = 6$ deb faraz qilinadi. Ko‘rib o‘tgan ikki kuchning teng ta’sir etuvchisi quyidagicha aniqlanadi:

$$F = F_{\text{tort.}} + F_{\text{itar.}} = -\frac{b}{r^{m+1}} + \frac{a}{r^{n+1}}. \quad (3.3)$$

Bu kuchlarning kristallni tashkil etgan atomlar yoki molekulalar orasidagi masofaga bog‘liqlik grafigi 3.1 - rasmda tasvirlangan. Absissa o‘qi bo‘yicha atomlar yoki molekulalar orasidagi masofa r , ordinata o‘qi bo‘yicha esa tortishuvchi kuch (1), itarishuvchi kuch (2) va bu kuchlarning teng ta’sir etuvchisi (3) qo‘yilgan.



3.1-rasm. Kristallning tashkil etuvchi zarralari orasidagi ta’sir etuvchi kuchlar: 1- tortishish kuchi; 2-itarishuv kuchi; 3-teng ta’sir etuvchi kuch.

Teng ta’sir etuvchi kuch 3 quyidagi $r < OA = r_0$ masofalarda itarilish kuchi, undan katta masofalarda tortishish kuchi sifatida namoyon bo‘ladi. Tashqi kuchlar ta’sir etmaganda panjara elementlarining muvozanat holatida teng ta’sir etuvchi kuchning qiymati nol bo‘lgan A nuqtaga mos keladi. Bu holat uchun ta’sirlashuvchi zarralarning potensial energiyasi minimum bo‘ladi. Teng ta’sir etuvchi kuch $F = -\frac{dU}{dr}$ ekanligini hisobga olsak, ta’sirlashayotgan ikki zarraning to‘la potensial energiyasi tortishish va itarilish potensial energiyalarining yig‘indisiga teng bo‘ladi:

$$U(r) = U_{\text{tort}} + U_{\text{itar}} = -Ar^{-m} + Br^{-n}, \quad (3.4)$$

bunda r , m va n kattaliklar mos holda (3.2) va (3.3) formulalardagi kattaliklar, A va B kattaliklar musbat doimiylar. Funksiya (3.4) minimumga ega bo'lishligi uchun $n > m$ shart bajarilishi shart. Energiyaning minimumlik shartidan zarralar muvozanatda turuvchi masofasini aniqlaymiz:

$$r_0 = \sqrt[n-m]{\frac{nB}{mA}}. \quad (3.5)$$

Kristall siqilganda atomlar orasidagi masofa r_0 dan kichiklashadi va itarilish kuchi ustun keladi. Shuning uchun kristallni siqiluvchanligi juda kam. Agar cho'zish orqali kristalldagi atomlar orasidagi masofani kattalashtirsak, teng ta'sir etuvchi kuch tortishuvchi kuch bo'ladi. Tashqi kuch ta'sirida hosil bo'lgan har ikki holda ham panjaradagi kuchlar zarralarni muvozanat holatiga qaytarishga intiladi. Biroq zarralar orasidagi masofani kattalashuvida tortishish kuchi ma'lum bir chegara-gacha - r_1 masofagacha ortadi. $r > r_1$ masofalarda bu kuchning ortishi zaiflashadi. Demak, atomlarni $r > r_1$ masofalarga uzoqlashtiruvchi tashqi kuch ularni bir-biridan ajratib yuborish uchun yetarli bo'ladi. Bu kuch kristallni **uzilishga mahkamligi** deyiladi. Ammo amalda kristallarni uzish uchun anchagina kam kuch talab qilinadi. Bunga sabab, birinchidan, kristalldagi nuqsonlar bo'lsa, ikkinchi tomondan kichik kuchlar ta'sirida sodir bo'ladigan plastik deformatsiya natijasida panjara elementlari orasidagi o'zaro ta'sirlashish kuchlarini o'zgarishidir. 3.1-rasmdan ko'rinib turibdiki, kristall elementlariga teng ta'sir etuvchi kuch muvozanat holatiga mos keluvchi A nuqtaga nisbatan asimmetrikdir. Bundan kelib chiqadiki, $r - \Delta r$ masofalarda itarish kuchi $r + \Delta r$ masofalardagi tortishish kuchlaridan kattadir. Buning natijasida atomlarning tebranish amplitudasi ortishi bilan ularning o'rtacha tebranish nuqtasi A holatdan katta masofa tomon siljiydi - kristall kengayadi. Shunday qilib, kristallarni issiqlikdan kengayishi panjaradagi teng ta'sir etuvchi kuchning atomning muvozanat holatiga mos keluvchi nuqtaga nisbatan asimmetriyasi sabab ekan.

Kristallarning siqiluvchanligi ham teng ta'sir etuvchi kuchning tikligi bilan aniqlanadi. U qanchalik tik bo'lsa, siqiluvchanlik shunchalik kam bo'ladi, ya'ni panjara atomlari orasidagi o'rtacha masofani kamaytirish uchun shunchalik katta kuch kerak bo'ladi. Demak, kichik issiqlikdan kengayish koeffitsiyentli moddalar, masalan, olmos, zaif siqiluvchanlikka va yuqori erish temperaturasiga ega bo'ladi. Aksincha, issiqlikdan kengayish koeffitsiyenti katta bo'lgan moddalar, masalan,

ishqoriy metallar yuqori siqiluvchanlikka va past erish temperaturasiga ega bo‘ladi.

3.2. Kristallardagi ximiyaviy bog‘lanishlarning klassifikatsiyasi

Kristallni tashkil qilgan atomlar orasida gravitatsiya, magnit va elektr kuchlari ta’sir qilishi mumkin. Hisoblashlarning ko‘rsatishicha, gravitatsiyaviy o‘zaro ta’sir energiyasi juda zaif bo‘lib, kristalldagi atomlarni ushlab tura olmaydi. Atomlar orasidagi magnit ta’sirlashuv energiyasi haqida ham shu gapni aytish mumkin. Demak, kristall bazislarini uning tugunlarida ushlab turuvchi kuch elektr tabiatiga ega bo‘lishi kerak. Haqiqatdan ham, bir-biridan $0.2-0.3 \text{ nm}$ masofada (panjara doimiysi masofasida) joylashgan ikkita o‘zaro ta’sirlashuvchi elementar elektr zaryadlarining o‘zaro ta’sirlashuv energiyasi:

$$U_{kul} = -\frac{e^2}{r} = -(5 \div 7) \text{ eV}$$

ekanligi hisoblab topilgan. Bu qiymat kristalldagi atomlarning elektr ta’sirlashuvining bog‘lanish energiyasiga mos keladi. Bunda bog‘lanish atomlarning valent elektronlari orqali amalga oshiriladi. Hamma turdagi qattiq jismlar uchun ular atomlari yoki molekulalari orasidagi tortishish kuchlari ham, itarilish kuchlari ham elektr tabiatiga ega bo‘lib, bu ta’sir kuchlari o‘ziga xos tarzda namoyon bo‘ladi. Fizikaviy, ximiyaviy, elektr, magnit va boshqa xossalariga qarab, kristall qattiq jismlarni to‘rt turga bo‘lish mumkin: ion kristallar, metallar, valent kristallar va molekulyar kristallar. Bu kristallarning asosiy xarakterli xossalarini aytib o‘tamiz.

Ion kristallar elementlarning kuchli musbat va manfiy ionlaridan tashkil topgan. Ular temperatura o‘sishi bilan diffuziyaviy harakatchanligi kuchayishi tufayli ortuvchi ion o‘tkazuvchanlikka ega. Erkin elektronlari yo‘q va shaffofdir.

Metallar panjaradagi erkin elektronlar orqali o‘zaro bog‘langan elementlarning musbat ionlaridan tashkil topgan bo‘lib, katta elastiklikka, issiqlik va elektr o‘tkazuvchanlikka ega. Ularda elektr zaryadini tashuvchilar erkin elektronlardir. Shaffof bo‘lmay o‘ziga xos metall rangi deb ataluvchi ranga ega. Erish temperaturasi keng oraliqda yotadi.

Valent yoki atom kristallar Elementlar Davriy sistemasining o‘rta ustunlaridagi yengil elementlardan tashkil topgan. Qoida tariqasida elektron o‘tkazuvchanlikka ega emas, biroq yuqori temperaturalarda ularning

ayrimlari yarimo'tkazuvchanlik xossalriga ega bo'lib qoladi. Ular nisbatan katta qattqlikka va mo'rtlikka ega. Ko'pchiligi shaffofdir.

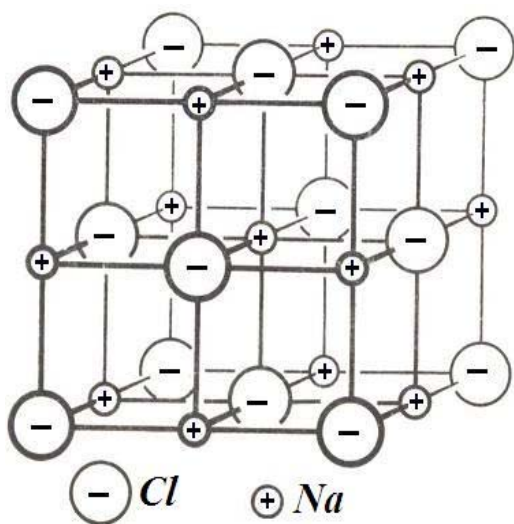
Molekulyar kristallar inert atomlardan va to'yingan molekulalardan tashkil topgan bo'ladi. Ular past erish va qaynash temperaturalariga ega. Elektr o'tkazuvchanlikka ega emas. Turg'un molekulalar ko'rinishida bug'lanadi.

Ammo ushbu sanab o'tgan to'rtta qattiq jism turlari shartli bo'lib, qat'iy muayyan bitta turga kirmaydigan **aralash bog'lanishli** kristallar ham mavjud.

Sanab o'tgan bog'lanishlarning har birining tabiatini alohida ko'rib chiqamiz.

3.3. Ion bog'lanishli kristallar

Ion bog'lanishli kristallarni musbat va manfiy valentli elementlar hosil qiladi. Kristalldagi ion bog'lanishni **qutbli**, **geterqutbli** yoki **elektrovalentli** bog'lanish deb ham ataydilar. Bunda musbat valentli element manfiy valentli elementga bir yoki bir necha valent elektronini berib, musbat ionga (**kationga**), ortiqcha elektronga ega bo'lgan element esa manfiy ionga (**anionga**) aylanib, ular orasida Kulon tortishish kuchi paydo bo'ladi. Demak turli valentli elementlardan kristall paydo bo'lishi ikki bosqichda amalga oshadi: 1) elektr jihatdan neytral elementlardan musbat va manfiy ionlar hosil bo'ladi; 2) turli ishorali ionlar orasidagi elektr tortishuv (Kulon) kuchlari ta'sirida mustahkam ximiyaviy birikma hosil bo'ladi. Ion bog'lanishli kristallar musbat va manfiy zaryadli ionlari fazoda tartib bilan joylashgan fazoviy panjarani hosil qiladi. Misol tariqasida 3.2-rasmda *NaCl* kristallining elementar yacheykasi keltirilgan. Ion kristallarda ionlar orasidagi tortilish va itarilish kuchlari sferik simmetriyaga ega. Shuning uchun turli ishorali zaryadga ega bo'lgan ionlarni bir-birlariga tortiluvchi qattiq (siqilmaydigan) sharlarga o'xshatish mumkin. Bu holda kristall panjaradagi atomlar zich taxlanish prinsipini qanoatlantiradi. Ion kristallar hosil bo'lishida tortishuv kuchlari itarilish kuchlaridan ustun kelishi uchun bir ionning yaqin qo'shnisi uning qarama-qarshi zaryadiga ega bo'lgan ion bo'lishi kerak. Shu bilan birga, qarama-qarshi elektr zaryadiga ega bo'lgan ionlar orasidagi masofa ularning ion radiuslarining yig'indisidan ($r_1 + r_2$) kichik bo'lishi mumkin emas. Bunday va bundan kichik masofalarda ularning yaqinlashishiga qarshilik ko'rsatuvchi itarishuv kuchlari paydo bo'ladi. Ionlar mumkin bo'lgan eng kichik r_0 muvozanat masofasigacha

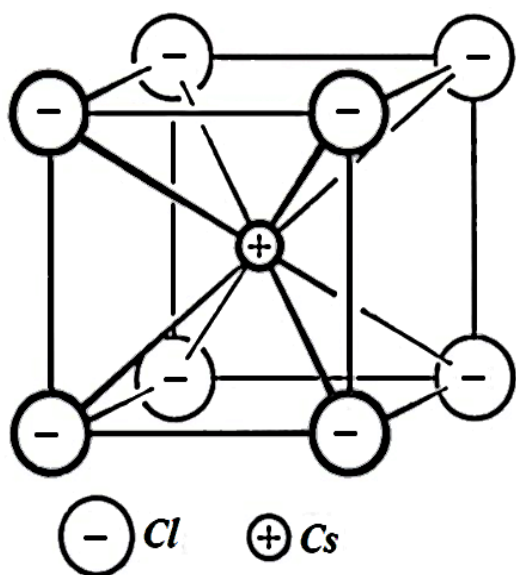


3.2-rasm. NaCl kristallining elementar yacheykasidagi ionlarning joylashuvi.

bir-biriga yaqinlasha oladilar. Ammo musbat va manfiy ionlar bu masofadan yaqin kelsa, ularning ichki elektron qavatlarini bir-biriga yaqinlashib keladi. Ammo aynan bir xil energiyaviy holatda faqat bitta elektron bo'lishi mumkin degan Pauli prinsipiga ko'ra, elektron orbitalarining bir-birining ichiga kirishi mumkin emas va shuning uchun $r < r_0$ masofalarda ionlarning elektron orbitalari orasida kuchli itarishuvchi kuch paydo bo'ladi va ionlarni r_0 masofaga qaytaradi. Ion kristallarning strukturasi o'rganish ulardagi ion bog'lanish yo'nalishiga va to'yinishga ega emasligini ko'rsatadi. Haqiqatdan ham istalgan ionning elektr maydoni sfera shaklida bo'ladi. Binobarin, ion bog'lanishga **yo'nalganlik** xos emas. Bu bog'lanishga **to'yinganlik** ham xos emas. Chunki ionlar ayrim atomlar o'lchamidan ancha katta masofalarda barcha yo'nalishdagi qo'shni ionlar bilan ham ta'sirlasha oladilar. Demak, ion bog'lanishli kristallar molekulyar tuzilishga ega emas. Ionlarning o'lchamlari asosan ulardagi ortiqcha yoki yo'qotilgan elektronlar soniga bog'liq. Bir xil shartlar bajarilganda ionda elektronlar, mos holda manfiy elektr zaryadi qancha ko'p bo'lsa, uning diametri ham mos holda shuncha katta bo'ladi. Aksincha, ionning musbat elektr zaryadi qancha ko'p bo'lsa, diametri shuncha kichik bo'ladi. Bundan shu xulosa kelib chiqadiki, kationning diametri anionning diametridan kichik bo'ladi. Shuning uchun kationlar panjarada ancha katta diametrli anionlar hosil qilgan tugunlar orasida joylashadi. Agar kationlar o'lchami tugunlar orasiga joylasha olmaydigan darajada katta bo'lsa, bu holda ular qatlamlarning zich taxlanishini bir muncha g'ovaklashtirib, anionlar orasini bir muncha kengaytiradi.

Ion bog'lanishli kristalda biror ionni eng yaqin sferada o'rab turgan

qarama-qarshi ionlar soni, ya'ni koordinatsiyaviy son qarama-qarshi ishorali zaryadga ega ionlarning ion radiuslarining nisbatiga bog'liq. Bu nisbat 1 soniga qancha yaqin bo'lsa, koordinatsiyaviy son shuncha katta bo'ladi. Masalan NaCl kristallida $r_{Na^+} = 0.98 \text{ \AA}$; $r_{Cl^-} = 1.81 \text{ \AA}$; $\frac{r_{Na^+}}{r_{Cl^-}} = 0.54$ va $K = 6$. 3.2-rasmdan ko'rinib turibdiki, natriyning markaziy ionini 6 ta qo'shni xlor ionlari qurshab olgan. Ammo NaCl bilan bir xil ximiyaviy formulaga (stexiometriyaga) ega bo'lgan CsCl kristallining elementar yacheykasi markazlashgan kub bo'lib, $r_{Cs^+} = 1.65 \text{ \AA}$; $r_{Cl^-} = 1.81 \text{ \AA}$; $\frac{r_{Cs^+}}{r_{Cl^-}} = 0.91$ va $K=8$ dir (3.3-rasm). 3.3-rasmdan ko'rinib turibdiki, seziyning musbat ion xlorning sakkizta manfiy ionining yaqin qurshovida joylashgan.



3.3-rasm. CsCl kristallining elementar yacheykasi.

Shunday qilib, ion kristalli qanday elementar yacheykaga ega bo'lishligi ionlar radiuslarining nisbatiga bog'liq. NaCl kristallida xlorning ion radiusi ($1.81 \text{ \AA}$) natriy ionining ($0.98 \text{ \AA}$) radiusidan deyarli ikki marta katta. Ionlar radiuslarining bunday nisbatida natriy xlorning kub yacheykasining markaziga yana bitta ion sig'maydi va yacheyka markazlashgan kub bo'la olmaydi. CsCl kristallida xlor va seziy ionlarining radiuslari yaqin (mos holda $1.81 \text{ \AA}$ va $1.65 \text{ \AA}$). Shuning uchun kub yacheykaning markaziga yana bitta ion sig'ishi mumkin va bu holda zich taxlangan struktura – hajmi markazlashgan kub kristall panjarasi hosil bo'lishi energetik nuqtai nazardan foydali bo'ladi.

Ionli kristallar panjarasi turini hosil bo'lishida ionlar radiuslarining ro'q-

lini yana quyidagi misollar bilan ko'rsatish mumkin. Tashqi ta'sirlar, chunonchi, temperatura va bosim ta'sirida ionlarning radiuslari o'zgaradi va mos holda ularning kristall panjarasi ham o'zgaradi. Temperatura ortishi bilan anion radiusi kation radiusiga qaraganda tezroq kattalashadi. Shuning uchun ayrim kristallar, masalan, xlorli seziy va xlorli rubidiy yuqori temperaturalarda o'z strukturalarini o'zgartiradi: markazlashgan kub primitiv kubga o'tadi. Aksincha bosim kattalashganda anion radiusi kation radiusiga qaraganda tezroq kamayadi, Bu ionlarning radiuslarini yaqinlashuviga va kristall panjarasini primitiv kubdan mrakazlashgan kubga aylanishiga olib keladi.

Ion kristallar quyi temperaturalarda erkin elektronlari bo'lmaganligi uchun elektr tokini deyarli o'tkazmaydi va hatto izolyatordir, yuqori temperaturalarda yaxshi ion o'tkazuvchanlikka va infraqizil nurlarni kuchli yutish koeffitsiyentiga ega. Ionli tuzlar eritmasining elektr o'tkazuvchanligi yuqori. Bu ular eriganda ionlarga dissotsiyanishini ko'rsatadi. Ammo ion kristallarning ayrimlari izolyator bo'lishiga qaramasdan magnitlanish xossasiga ega, ya'ni ular o'zida dielektrik va metall magnit xossalarini mujassamlashtirgan. Bu moddalar umumiy ferritlar nomi bilan yuritilib, katta amaliy ahamiyatga ega. Ularning umumiy formulasi quyidagicha: $Me^{2+}Fe_2^3+O_4^{2-}$, bu yerda Me^{2+} qandaydir ikki valentli metall. Ferritning kristall panjarasida kislorod atomlari metall atomlarining valent elektronlarini o'ziga tortib oladi, shuning uchun panjara metall ionlaridan va kislorodning O^{2-} ionlaridan tashkil topadi. Ferritning xossasi uning tarkibiga kirgan metallning turiga bog'liq. Ferritlarning radiotexnikada va elektronikaning boshqa sohalarida qo'llanilishi, asosan shu bilan bog'liq, ular energiya isrofiga olib keluvchi induksiyaviy uyurma toklar hosil qilmasdan kichkina hajmda magnitlanishlari mumkin.

Ionlar orasidagi masofa qisqa bo'lganligi uchun ionlararo ta'sir qiluvchi elektrostatik kuchlar nisbatan juda yuqori. Shuning uchun ion kristallar qattiq va zaif uchuvchanlik xossasiga ega bo'lgan va yuksak mexanikaviy mustaxkamlikka va nisbatan yuqori erish temperaturasiga (masalan, NaCl - 800 °C, KCl - 790 °C) ega bo'lgan materiallardir. Ion kristallar eriganda elektr o'tkazuvchan material bo'lib qoladi. Ularni deformatsiyalash uchun katta kuch kerak bo'ladi. Bir xil strukturali ion kristallarda manfiy va musbat ionlarning valentligi qancha katta bo'lib, ularning radiuslarining yig'indisi qancha kichkina bo'lsa, ular orasidagi ta'sir kuchlari shuncha katta bo'ladi. Ionlar orasidagi tortishuvchi

kuchlar qancha katta bo'lsa, kristallning erish temperaturasi va qattiqligi shuncha yuqori, uchuvchanligi va eruvchanligi shuncha kam bo'ladi. Ayni paytda ion kristallar mo'rt bo'ladi. Bunga sabab shuki, hatto uncha katta bo'lmagan deformatsiyalarda ham kation va anionlar shunday siljiydilarki, natijada bir xil ishorali ionlar orasidagi itarishish kuchlari turli ishorali ionlarning tortishish kuchlaridan katta bo'lib qoladi va kristall osongina parchalanadi. Ion kristallar suvda oson eriydi va kation hamda anionlarga dissotsiatsiyalanadi. Tabiiyki, bunday eritma elektr tokinini yaxshi o'tkazadi.

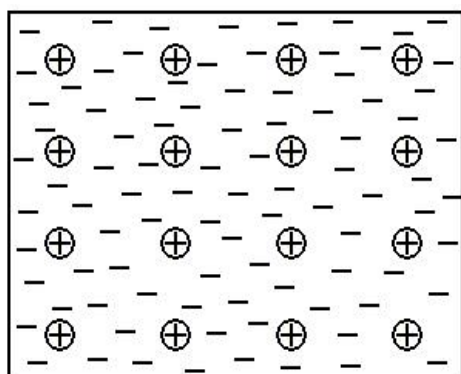
Yuqori temperaturalarda ayrim ion kristallarning bug'lanishi har holda sezilarli bo'lib qoladi. Tajribalarning ko'rsatishicha, ion kristalllarning bug'lari neytral molekulalardan tashkil topar ekan. Masalan, natriy xlor kristallining bug'lanishida ion bog'lanishli va katta dipol momentiga ega bo'lgan NaCl molekulasida ajraladi. Bug'lanishda molekula hosil bo'lishiga sabab shuki, kristall sirtidan qarama-qarshi ion juftining ajralishiga alohida ionlarning ajralishiga qaraganda kam energiya talab qilinadi ekan.

Ko'pgina tuzlar, oksidlar, sulfidlar ion bog'lanishli panjaralar hosil qiladi. Ularning kristall panjarasi NaCl yoki CsCl kristallariniqiga qaraganda ancha murakkabdir. Ion kristallar faqat atomlarning ionlaridagina emas, balki bir necha atomlardan tashkil topgan ionlar (masalan, SO_4^{2-} , SiF_6^{2-} , NH_4^+) kompleksidan tuzilgan bo'lishi ham mumkin. Chunonchi, $CaSO_4$ tuzi shunday tuzilgan. Murakkab ionlarning atomlari o'zaro kovalent bog'lanishga ega bo'ladi (masalan, SO_4^{2-} molekulasida oltingugurt S va kislorod O atomlari). Ion bog'lanishli kristallarga yuqorida ko'rib o'tgan birikmalardan boshqa yana $CaCl$, CaF_2 , CdI_2 , SiO_2 , TiO_2 , Al_2O_3 kabi birikmalar misol bo'la oladi.

3.4. Metall bog'lanishli kristallar

Kristalllarda **metall bog'lanish** atomlarning barcha valent elektronlarining umumlashuvi (kollektivlashuvi) natijasida vujudga keladi. Bu holda valent elektronlar ayrim atomlarga emas, balki kristalldagi barcha atomlarga tegishli bo'ladi. Ular butun kristall hajmi bo'ylab harakatda bo'ladilar va vaqtning har qanday davomida hajmda tekis taqsimlangan bo'ladi. Shuning uchun bu elektronlar **erkin elektronlar** deb ataladi. Metallarda bunday elektronlar mavjudligini Mandelshtam va Papaleksining oddiy klassik tajribasi tasdiqlaydi. Bu tajribaga ko'ra, aylanayotgan metall g'altak keskin to'xtatilganda

inersiya tufayli undagi erkin elektrolar harakatini davom ettiradi va elektr toki paydo bo‘ladi. Metallarning yuqori darajadagi elektr va issiqlik o‘tkazuvchanligi ularda erkin elektronlar mavjudligining natijasidir. Valent elektronlarning umumlashtirilishi o‘z valent elektronlarini umumlashtirishga bergan atomlarning musbat o‘zaklari (ionlari) sistemasi bilan umumlashgan elektronlar sistemasi – «elektron gaz» ichida bog‘lanish vujudga kelishiga olib keladi. Go‘yo «elektron gaz» musbat ishorali atomlar o‘zaklarini «sementlaydi» (3.4-rasm). Metall kristallar hosil bo‘lish mexanizmini qisqacha ko‘rib chiqaylik. Metall bug‘larini suyuq yoki qattiq holatlariga o‘tishidagi kondensatsiyasida ularning atomlari bir-biriga shunchalik yaqinlashadiki, bunda ularning valent elektronlarining to‘lqin funksiyalari kesishadi. Buning natijasida valent elektronlar bir iondan boshqasiga o‘tish imkoniyatiga ega bo‘lib, metallning butun hajmi bo‘ylab erkin harakatlanadilar. Shu tariqa valent elektronlar muayyan atomga tegishliligi barham topib, ular metall hajmidagi barcha atomlarga tegishli bo‘lib qoladi. Shuning uchun ham ular «**umumlashgan**» yoki «**kollektivlashtirilgan**» elektronlar deb ataladi.



3.4-rasm. Metall kristall elektron gazidagi atomlarning musbat o‘zaklari.

Atomlarning musbat zaryadli o‘zaklari (musbat ionlari) oralaridagi itarishuvchi kuchlar va umumlashgan elektronlarning ularni bog‘lovchi kuchlari ta’sirida bir-biridan sistemaning potensial energiyasining minimumiga mos keluvchi ma’lum bir muvozanat masofalarda tartib bilan joylashib qoladilar. Tabiiyki, metall atomlarining musbat zaryadli o‘zaklari Kulon itarish kuchlari tufayli bir-biriga ion bog‘lanishli kristallarning ionlarichalik yaqin kela olmaydi. Ion bog‘lanishdagi kabi metall bog‘lanishga ham yo‘nalganlik va to‘yinganlik xossalari xos emas. Biror hajmdagi gaz molekulalari bilan kristalldagi elektron gaz orasida ma’lum darajada o‘xshashlik bor. Birinchi holda gaz moleku-

lari xaotik harakati bilan butun idish hajmini egallaydi, ikkinchi holda esa erkin elektronlar xaotik harakati bilan kristallning hamma hajmini egallaydi. Ammo shuni nazarda tutish kerakki, gaz molekulalari ixtiyoriy energiyaga ega bo'lishi mumkin, metallarda esa kvant nazariyasiga binoan elektronlar energiyalari faqat ruxsat etilgan qiymatlarni olishlari mumkin (kvantlangan). Gazning neytral molekulalaridan farqli holda erkin elektronlar manfiy zaryadga ega. Metallardagi elektronlarning energiyaviy taqsimoti Fermi statistikasiga bo'ysunadi.

Metall bog'lanishli kristallar boshqa turdagi kristallardan farqli holda o'ziga xos fizikaviy xossalarga va kristall strukturaga ega. Metall bog'lanishli kristallar panjaradagi umumlashgan erkin elektronlari tufayli yuqori darajadagi elektr va issiqlik o'tkazuvchanlikka ega va katta koordinatsiyaviy sonlari bilan xarakterlanadi. Katta koordinatsiyaviy songa ega bo'lishligi metallarda bog'lanish yo'nalgan xarakterda emasligidan dalolat beradi. Ko'pchilik sof metallar koordinatsiyaviy soni 12 bo'lgan zich taxlangan (zich taxlangan geksagonal yoki tomonlari markazlashgan kub) panjaralarga yoki zichligi bo'yicha unga yaqin bo'lgan hajmi markazlashgan kub panjarasiga ega bo'ladi. Ko'pchilik metallarga polimorfizm xos: turli temperaturalar oralig'ida turg'un bo'lgan turli modifikatsiyalarga ega bo'lishi mumkin. Masalan, titan va sirkoniy metallarida temperatura o'zgarishi bilan quyidagi polimorf holat o'zgarishi kuzatiladi:

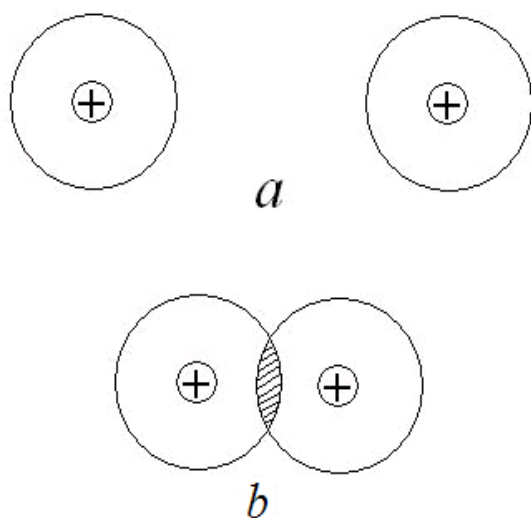


Metall bog'lanish tabiatidan bunday kristallarni ion yoki kovalent bog'lanishli kristallarga nisbatan ko'proq elastikligi kelib chiqadi. Turmushda va texnikada metallarning ahamiyati kattaligi ma'lum. Metall bog'lanishli kristallarga barcha sof metallardan (Na, Al, Cu, Au, ...) tashqari bir necha metallardan tashkil topgan o'rin almashinuvchi qattiq eritmalar (CuAu, CuZn, Cu₃Au, ...), **intermetallidlar** deb ataluvchi AuAl₂, KNa₂, CeNi₇, CaZn₅ kabi birikmalar kiradi.

3.5. Kovalent bog'lanishli kristallar

Kovalent bog'lanishli kristallarni valent yoki atom kristallar deb, ulardagi bog'lanishni **gomeopolyar bog'lanish** ham deyдилar. Dastlabki tasavvurni vodorod molekulasida ko'rib chiqamiz. Tabiiyki, ikkita vodorod atomlari bir-biridan yakkalangan holatda ularning bittadan

bo'lgan s -valent elektronlari har biri o'z to'liqin funksiyalariga ega, ya'ni aylana shaklidagi o'zlarining alohida orbitallarida harakatda bo'ladi (3.5-rasm, *a*) va ular neytral bo'lganligi uchun bir-birlari bilan ta'sirlashmaydi. Bu ikki vodorod atomlarining elektron orbitallari kesishadigan darajada yetarlicha yaqinlashtirilsa, agar ular qarama-qarshi spinga ega bo'lgan **singlet** holatlarda bo'lsa, ularning to'liqin funksiyalari bir-birini kuchaytirib, bu elektronlar har ikkala ionlarga tegishli bo'lgan yagona orbitalga ega bo'lib qoladi (3.5-rasm, *b*). Elektronlarning zichligi ikki proton oralig'ida eng katta bo'lib, har ikkala vodorod ionini ham mah-



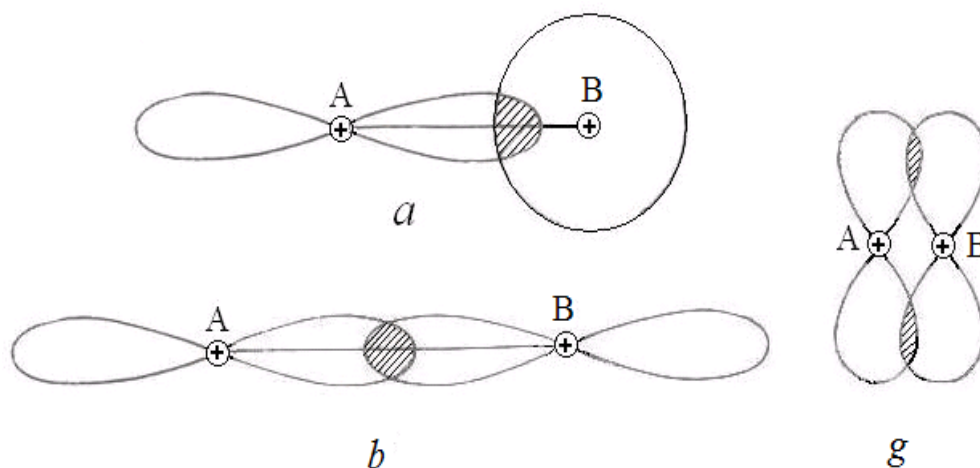
3.5-rasm. H_2 molekulasi valent s -elektronlarning kovalent bog'lanish hosil qilish sxemasi: *a* –yakkalangan vodorod atomlari; *b*-kovalent bog'lanishli vodorod molekulasi.

kam bog'lab oladi. Yadrolar orasidagi fazoning boshqa qismlarida elektronlar zichligi juda kam bo'ladi. 3.5- rasmda elektronlar zichligi katta bo'lgan soha shtrix bilan belgilangan. Ikki protonning yangi umumiy orbitasini soddalashtirib, yagona sakkiz soniga o'xshatib tasvirlash mumkin. Yadrolar oralig'ida hosil bo'lgan elektron bulutining katta zichligi mavjud bo'lishi sistemaning potensial energiyasining kamayishiga va yadrolar orasida tortishish kuchi paydo bo'lishiga olib keladi. Yadrolar orasidagi r masofani kichraytirib borsak, s -elektronlarning to'liqin funksiyalarining kesishuvi kuchayadi va yadrolar orasidagi tortishish kuchi kattalashadi. Biroq bunda bir xil zaryadli yadrolar orasidagi Kulon itarishish kuchi shiddatliroq kattalashadi. Ma'lum bir r_0 masofada tortishish va itarishish kuchlari muvozanatlashadi va sistemaning potensial energiyasi minimumiga erishib, turg'un molekula hosil bo'ladi. Yadrolar oralig'idagi elektron bulutining quyuqlashish yoki valent elektronlar to'liqin funksiyalarining kesishish darajasiga qarab, kovalent bog'lanish kuchining kattaligi haqida xulosa qilish mumkin. Kovalent bog'lanish valent elektronlar hisobiga vujudga kelganligi uchun u **valent**

bog‘lanish deb ham ataladi. Kovalent bog‘lanish asosida yadrolarning valent elektronlarining sof kvant almashuv hodisasi yotganligi uchun bunday bog‘lanishni **almashuvchi ta’sir** yoki **almashuvchi effekt** ham deyiladi. Bunday ta’sirlashuv kuchlari **almashuvchi kuchlar** deyiladi. Kovalent bog‘lanish **to‘yingan** bo‘ladi. Buni vodorod molekulasida tushuntiramiz. Vodorod molekulasining *s*-elektronlarining orbitallari kesishgan sohasida Pauli prinsipiga ko‘ra, qarama-qarshi spinli faqat ikkita elektron bo‘lishi mumkin. Demak, vodorodning kovalent bog‘lanishida uchinchi vodorod qatnashuvi mumkin emas.

Kovalent bog‘lanish faqat *s*-elektronlari bilan amalga oshadigan (3.5-rasm) boshqa hamma hollarda yaqqol **yo‘nalishga egaligi** bilan ajralib turadi. Buning ma’nosi shundan iboratki, kovalent bog‘lanish kuchlari faqat yadrolarning orasidagi masofagagina bog‘liq bo‘lmay, elektronlar bulutining zichligi eng ko‘p bo‘lgan yo‘nalishida hosil bo‘ladi. Ximiyaviy bog‘lanish mustahkamligi bog‘lanish hosil qiluvchi elektronlarning umumiy orbitallarining konfiguratsiyasiga shunday bog‘liqki, bog‘lanish hosil qiluvchi valent elektronlarining orbitallari maksimal, ichki elektronlarning orbitallari esa minimal darajada kesishishlari kerak. 3.6-rasmda har xil holatlardagi valent elektronlarning kovalent bog‘lanish hosil qilish variantlari aks ettirilgan. Agar *s*-holatdagi bitta valent elektroni bo‘lgan A atom *p*-holatda bo‘lgan bitta valent elektroniga ega bo‘lgan boshqa B atom bilan bog‘lansa, kovalent bog‘lanish *p*-elektron buluti (orbitali) yo‘nalishida hosil bo‘ladi. Ushbu holda orbitallarning maksimal kesishuvi ta’minlanib, bog‘lanish kuchi maksimal bo‘ladi.

Elektron buluti zichligi molekula o‘qi bo‘yicha to‘plangan bo‘lsa kovalent bog‘lanish **σ -bog‘lanish** (3.6-rasm, *a* va *b*), agar molekula o‘qiga perpendikulyar yo‘nalishda to‘plangan bo‘lsa (3.6 g-rasm) **π -bog‘lanish** deyiladi. Atomlar ta’sirlashganda birinchi navbatda σ -bog‘lanish hosil bo‘ladi, so‘ngra qo‘shimcha ravishda valent elektronlarining soniga qarab **bitta** yoki **ikkita π - bog‘lanish** hosil bo‘ladi. Mos holda bu bog‘lanishlar **ikkilangan** yoki **uchlangan bog‘lanishlar**, oddiy **σ -bog‘lanish** esa **bittalik bog‘lanish** deyiladi. Bittalik bog‘lanish hosil bo‘lishida ikkita valent elektroni, ikkalangan bog‘lanishda to‘rtta va uchlangan bog‘lanishda oltita valent elektronlari qatnashadi. Bir xil atomlardan tashkil topgan H₂, F₂, O₂, N₂ kabi molekulalar **gomonuklear**



3.6-rasm. Ikki (A va B) atomlar orasidagi kovalent bog‘lanish sxemasi: σ -bog‘lanish: *a* – bir atomda *s*-, ikkinchisida *p*-valent elektronlar bo‘lgan hol; *b* - har ikkala atomda ham *p*-valent elektronlar bo‘lgan hol; *g* – *p*-valent elektronlarning π -bog‘lanish hosil qilishi.

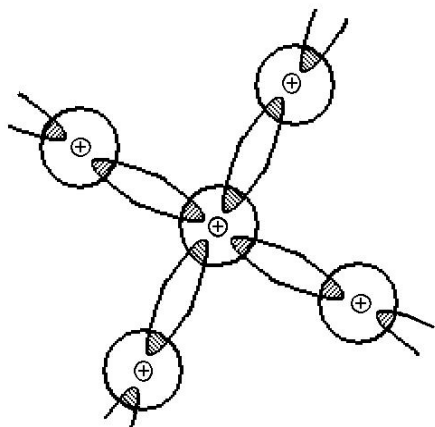
molekulalar deb ataladi.

Turli ismli atomlardan yoki atomlar guruhidan tashkil topgan molekulalar **geteronuklear molekulalar** deyiladi. Suv molekulasida H_2O ana shunday molekuladir. Bu molekulada bitta kislorod atomining ikkita *p*-valent elektronlari ikkita vodorod atomining bittadan ikkita *s*-elektroni bilan bog‘lanishga kirishadi. Bu molekulaning orbitallarini kesishuvi 3.6-rasmdagi *a* sxemaga mos keladi. Faqat bunda kesishgan orbitallar bir-biridan 107.5° ga farq qiluvchi ikki tarmoqdan iborat bo‘ladi. Bu burchak **valent burchagi** deb ataladi va uning qiymati kovalent bog‘lanishda ishtirok etuvchi valent elektronlarining qaysi orbitalda ekanligiga va soniga bog‘liq bo‘ladi.

p-valent elektronlarning orbitallarini kesishuvi natijasida hosil bo‘lgan bitta to‘g‘ri chiziq bo‘yicha yo‘nalgan ikki gantel o‘qi bo‘yicha yo‘nalgan σ -bog‘lanish 3.6, b-rasmda ko‘rsatilgan. Bunday bog‘lanish, masalan, vodorod peroksid H_2O_2 molekulasida kuzatiladi. *p*-valent elektronlarning to‘lqin funksiyalarining π -bog‘lanish hosil qilib bir-birini qoplash sxemasi 3.6 g-rasm da tasvirlangan. *d*- va *f*-orbitallardagi valent elektronlarining qo‘shma orbitallari yana ham murakkabroq bo‘ladi.

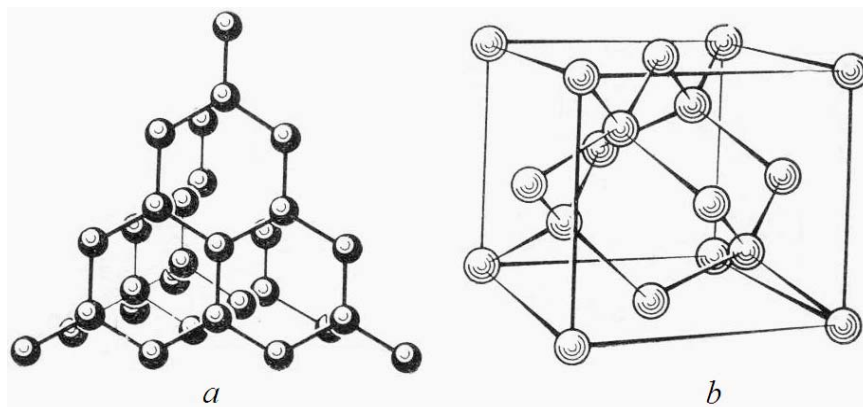
Kovalent bog‘lanishlar hosil bo‘lishining ayrim asosiy mexanizmlarini soddalik uchun molekulalar misolida ko‘rib chiqdik. Ammo valent yoki atom kristallar deb ataluvchi butun bir guruh kristallarning panjara tugunlaridagi atomlar orasida ham kovalent bog‘lanish tufayli kristall panjara shakllanadi. Olmos (C), kremniy (Si), germaniy (Ge) va kulrang

qalayi (Sn) kristallari sof kovalent bog‘lanish tufayli hosil bo‘ladi. Bu kristallar elementlar Davriy sistemasining IV b guruhida joylashgan bo‘lib, p -holatda ikkita juflashmagan valent elektronlari bor. Kristall hosil bo‘lishida ularning s -holatdagi ikkita elektronlari uyg‘onib, bittasi p -holatga o‘tib, qolgan bittasi juftsiz bo‘lib qoladi. Masalan, uglerod atomi uchun bu o‘tish quyidagicha bo‘ladi: $1s^2 2s^2 2p^2 \rightarrow 1s^2 2s 2p^3$. Bunda uchta p -elektronlar $2p_x$ -, $2p_y$ - $2p_z$ - holatlarda bo‘lib, juftlashmagan bo‘ladi. Natijada to‘rttala tashqi elektronlari ham to‘yinmagan atom juftlashmagan elektronlar bilan to‘yinishi uchun yana boshqa to‘rtta o‘zidek atomlar bilan sp -gibrid orbitallari hosil qiladi (3.7-rasm). Bu to‘rtta gibrid sp - orbitallar to‘g‘ri tetraedrning uchlariga qarab yo‘nalgan bo‘ladi.



3.7-rasm. C, Si, Ge, Sn kristallarida kovalent bog‘lanish sxemasi.

Olmos tipidagi kristallarning elementar yacheykasini bir-biriga nisbatan hajmiy diagonalining 1/4 qismiga siljigan ikkita tomonlari markazlashgan kub Brave yacheykalaridan tashkil topgan deb qarash mumkin. Olmos tipidagi kristallarda atomlarning joylashish motivi va elementar yacheykasi 3.8-rasmda berilgan. Koordinatsiyaviy soni 4 ga



3.8- rasm. Olmos kristallining tuzilishi:
a –atomlarning joylashish motivi; b-elementar yacheykasi.

teng. Kovalent bog‘lanishli kristallar ko‘pincha ximiyaviy xossalari uncha farq qilmaydigan turli elementlardan ham hosil bo‘ladi. Masalan, karborund SiC ana shunday kristallardandir. Bunday kristallarni tashkil qiluvchi elementlar yaqin elektrmanfiylikka ega bo‘lishlari kerak. Chunki bunda bir atom boshqasining elektronini uzib ola olmaydi va to‘yinish kovalent bog‘lanish hisobiga amalga oshadi. Turli ximiyaviy elementlardan tashkil topgan atom kristallarda atomlar ozdir - ko‘pdir qutblangan bo‘ladi. Dastlabki holatda sferik simmetriyaviy elektronlar konfiguratsiyasiga ega bo‘lgan atomlar kovalent bog‘lanish hosil qilgandan keyin ularning musbat va manfiy elektr zaryadlarining og‘irlik markazlari siljib qoladi. Natijada ularda atomlar orasida kovalent bog‘lanishdan tashqari elektrostatik tortishuv kuchi ham paydo bo‘ladi. Demak, bunday kristallarda ma‘lum darajada ion bog‘lanish ulushlari bo‘ladi. Aksincha ko‘pgina ion kristallarda ionlar deformatsiyalangan bo‘lib, ular orasida elektrostatik tortishishdan tashqari bog‘lanishning kovalent tashkil etuvchisi ham bo‘ladi. Shunday qilib, kristallardagi kovalent va ion bog‘lanishlar ikki chegaraviy hol bo‘lib, ularning ulushlari orasida turli nisbatlar bo‘lishi mumkin. Olmos tipidagi kristall sof kovalent bog‘lanishli kristallar yuqori erish temperaturasi, nihoyatda mustahkamligi va qattiqligi bilan ajralib turadi. Ammo bu xarakteristikalar bunday kristallarning faqat bog‘lanish xarakterigagina bog‘liq bo‘lmay, ular atomlarining orasidagi masofaga ham bog‘liq. 3.1-jadvalda aynan kovalent bog‘lanishli aynan bir xil strukturali kristallarning qattiqligi va erish temperaturasining atomlar orasidagi masofaga bog‘liqligi keltirilgan. Kovalent bog‘lanishli kristallar dielektrik (olmos) yoki yarimo‘tkazgichdir (kremniy, germaniy).

3.1-jadval

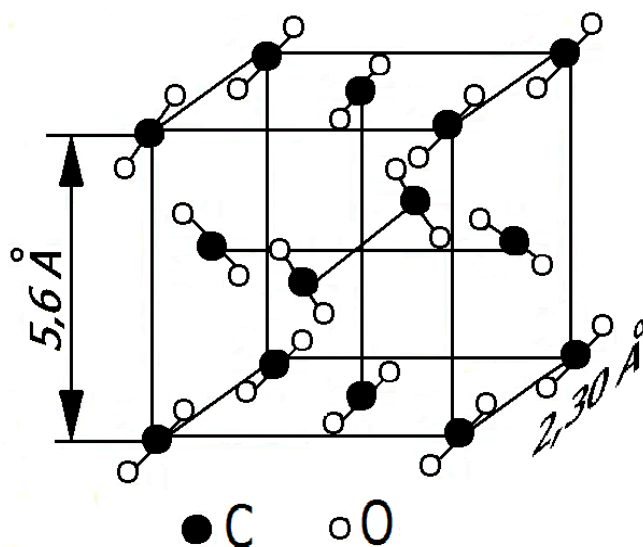
Kovalent bog‘lanishli bir xil tipdagi strukturali kristallarning ayrim xossalarning atomlar orasidagi r masofaga bog‘liqligi.

Kristall	Olmos C-C	Karborund Si-C	Kremniy Si-Si	Galliy Ge-Ge
$r, \text{\AA}$	1.54	1.89	2.35	2.43
Moos bo‘yicha qattiqligi	10.1	9.5	7.0	6.0
Erish temperaturasi $T, ^\circ\text{C}$	3550	2700	1420	9.5

3.6. Molekulyar bog‘lanishli kristallar

Molekulyar bog‘lanishli kristallar deb inert elementlarning atomlaridan yoki kovalent bog‘lanishli to‘yingan molekulalardan tashkil topgan kristallarga aytiladi. Bunday kristallar inert element atomlari yoki

kovalent bog‘lanishli to‘yingan molekulalar orasida **Van-der Vaals kuchlari** yoki **vodorod bog‘lanishli kuchlar** ta’sir qilishi natijasida paydo bo‘ladi. Bu kuchlar ta’sirida hosil bo‘lgan kristallar juda ham ko‘p. 3.9 - rasmda CO₂ molekulyar kristallining elementar yacheykasi keltirilgan. Bu yacheyka tomonlari markazlashgan kub bo‘lib, ushbu



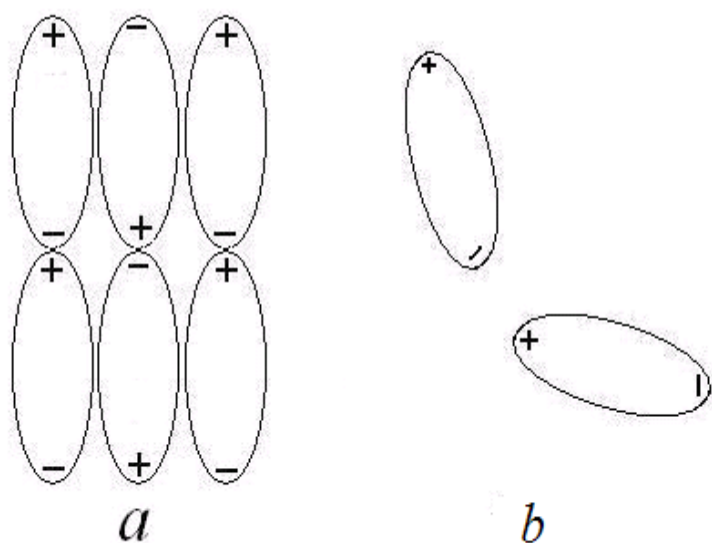
3.9-rasm. CO₂ molekulyar kristallining elementar yacheykasi.

panjaraning tashkil etuvchilari (bazisi) CO₂ molekulasini bo‘lib, ular butun panjara bo‘yicha Van-der-Vaals kuchlari bilan bog‘langan. Panjara tugunlarida uglerod atomlari joylashgan bo‘lib, ikkita kislorod atomining markazi uglerod atomida bo‘lgan gantel hosil qiladi.

Van-der-Vaals kuchlarining hosil bo‘lishi elektr jihatdan neytral atomlar va molekulalar orasida elektr maydon ta’sirida elektr dipoli momenti paydo bo‘lishi bilan tushuntiriladi. Bu kuch yuqorida ko‘rib o‘tgan barcha turdagi ximiyaviy bog‘lanish kuchlaridan eng zaifidir. Shu bilan birga ko‘p kristallarda ta’sir qiluvchi yagona kuchdir. Paydo bo‘lish tabiatiga qarab, uch xildagi Van-der Vaals kuchlarini farq qiladilar: **oriyentatsiyaviy**, **induksiya** va **dispersiya**. Bu kuchlarning hammasining asosida elektr dipollarining elektrostatik ta’sirlashuvi yotadi.

1. **Oriyentatsiyaviy Van-der-Vaals kuchlar.** Agar molekula qutblangan bo‘lsa, ya’ni doimiy elektr dipol momentiga ega bo‘lsa, bu molekulalar orasida ularni qat’iy tartibda ushlab turuvchi elektrostatik kuch paydo bo‘lib, sistemani minimum potensial energiyaga ega bo‘lishiga olib keladi (3.10-rasm, a). Qutblangan molekulalarni ma’lum bir yo‘nalishda joylashuviga sabab bo‘luvchi kuchlar **oriyentatsiyaviy Van-**

der-Vaals kuchlari deyiladi. Bunday kristallardagi molekulalarning oriyentatsiyasi issiqlik harakati tufayli buziladi. Shuning uchun moleku-



3.10-rasm. Molekulyar kristallarda oriyentatsiyaviy (a) va induksiyalangan Van-der-Vaals kuchlarining paydo bo'lishi (b).

larning oriyentatsiyasiga bog'liq bo'lgan kristallning potensial energiyasi temperaturaga kuchli bog'liq bo'ladi. Molekulalarning to'la oriyentatsiyasi saqlanadigan past temperaturalarda ularning o'zaro ta'sir energiyasi quyidagicha aniqlanadi:

$$U_{o'r} = -\frac{p_d^2}{2\pi\epsilon_0 r^2}, \quad (3.6)$$

bunda p_d – molekulaning doimiy dipol momenti, r – molekular orasidagi masofa, ϵ_0 – dielektrik doimiy. Nazariy hisoblashlarga ko'ra, yuqori temperaturalar uchun dipol molekulalarning ta'sirlashish energiyasi

$$U_{o'r} = -\frac{p_d^2}{2\pi^2\epsilon_0^2 k_B T} \frac{1}{r^2} \quad (3.7)$$

bo'lib, bunda T – temperatura, k_B – Bolsman doimiysi, qolgan belgilashlar 3.6-formuladagi kabi.

2. Induksiyaviy kuchlar. Bu kuchlar induksiya yo'li bilan amalga oshadi. Shuning uchun **induksiyaviy** yoki **deformatsiyaviy** kuch deb ham ataladi. Ayrim moddalarning qutblanmagan molekulalari kuchli qutblanish xossasiga ega bo'ladi. Bunday molekulalarga tashqi elektr maydoni ta'sir qilganda yoki qutblangan molekula yaqinlashtirilsa, elektronlar bulutining katta harakatchanligi tufayli ularda induksiyaviy

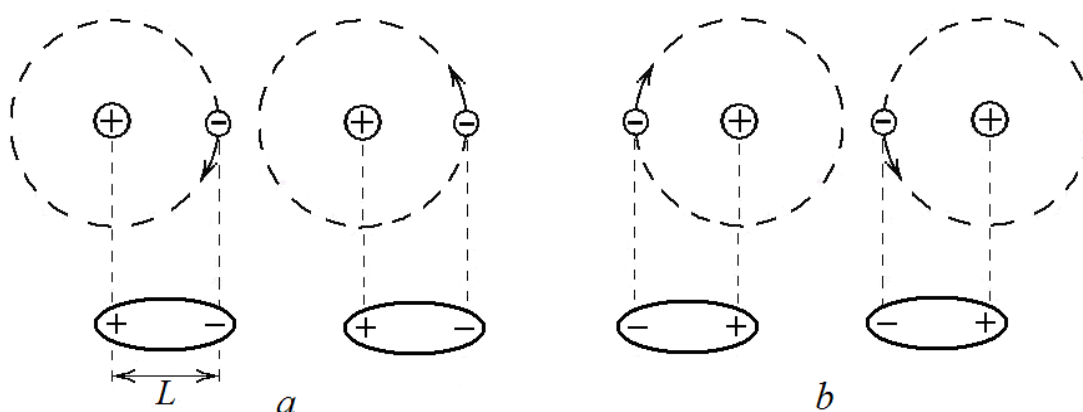
elektr momenti paydo bo‘ladi va o‘zaro ta’sirlashadi (3.10-rasm, *b*). Dipolga ega bo‘lgan birlamchi molekulalar bilan dipol momenti induksiyalangan molekulalar oralaridagi tortishish kuchi quyidagi formula bilan aniqlanadi:

$$U_{ind} = -\frac{\alpha p^2}{8\pi\epsilon_0^2 r^6}, \quad (3.8)$$

bunda α – molekulaning qutblanish darajasi, qolgan belgilashlar 3.6-formuladagi kabidir. Bu formuladan ko‘rinib turibdiki, induksiyaviy kuch tufayli hosil bo‘lgan molekulyar kristallarda o‘zaro ta’sir energiyasi temperaturaga bog‘liq emas.

3.Dispersiyaviy ta’sir kuchlari. Molekulyar kristallarda yuqorida bayon etilgan ikki xil kuchdan tashqari elektron orbitallari sferik simmetrik bo‘lgan neytral atomlar (inert element atomlari) va molekulalar (masalan, H_2 , N_2) orasida dispersiyaviy Van-der-Vals kuchlari ham vujudga kelishi mumkin. Aslida bunday atomlarning va molekulalarning o‘rtacha elektr dipoli momentlari nolga teng. Ammo ularning elektronlari oniy elektr dipol momenti hosil qilib, fazoning har xil qismida joylashadi. Agar bunday atomlar yoki molekulalar bir-biriga yetarlicha masofada yaqinlashtirilsa, bunday sistemaning potensial energiyasi minimumga erishuvi uchun elektronlarning harakati orasida doimiy dipol momenti hosil bo‘ladigan moslashuv vujudga kelib, shu tufayli ular orasida tortishish kuchlari paydo bo‘ladi. Biz bunday moslashishni vodorod molekulasida misolida ko‘rib o‘tamiz. Vodorod atomida istalgan vaqtda proton va elektron fazoning turli qismida turli tomonga yo‘nalgan elektron zaryadi va uning orbita radiusining ko‘paytmasiga teng bo‘lgan oniy dipol momentiga ega bo‘ladi. Ammo o‘zaro yetarlicha yaqin joylashgan ikki vodorod atomlari orasida elektronlari har doim bir xil yo‘nalishli oniy dipol momenti hosil bo‘ladigan qilib, harakatlari sinxronlashadi (3.11-rasm). Shu tariqa vodorodning neytral atomlari orasida tortishish kuchi paydo bo‘ladi. Agar ularning oniy dipol momentlari qarama-qarshi yo‘nalishda bo‘lsa ular itarilishadi. Ammo ular orasida tortishish kuchlari paydo bo‘ladigan elektronlar orbitallarining konfiguratsiyasi energetik jihatdan qulay bo‘ladi (sistemaning potensial energiyasi minimal qiymatga ega bo‘ladi). Faqat molekula orasidagina emas, butun kristall bo‘ylab, dispersiyaviy kuchlar paydo bo‘lib, kristall panjarasi hosil bo‘lishiga olib kelishi mumkin.

3.Kvant mexanikasi nazariy hisoblashlariga ko‘ra, zarralarning dispersiyaviy ta’sirlashish potensial energiyasi quyidagicha aniqlanadi:



3.11-rasm. L uzunlikdagi ikki effektiv oniy dipollarning ta'sirlashuviga teng kuchli bo'lgan qo'shni atomlardagi elektronlarning sinxron moslashgan harakati sxemasi.
 a – va b – elektronlar aylanishining faza bo'yicha yarim aylanish davriga farq qiluvchi holatlari.

$$U_{dis} = -\frac{3\alpha^2}{2r^2} \varepsilon_0, \quad (3.9)$$

bunda $\varepsilon_0 = h\nu_0/2$ –absolyut nol temperaturadagi ν_0 chastota bilan tebranayotgan atomlarning nolinchii tebranishlari energiyasi.

Shunday qilib, inert gazlar atomlari orasidagi o'zaro ta'sirlashish energiyasi ularning elektron orbitallari qancha kuchli deformatsiyalansa va nolinchii tebaranishlari chastotasi qancha yuqori bo'lsa shuncha katta bo'lar ekan.

Molekulyar kristallarda bir vaqtda barcha uch turdagi Van-der-Vaals kuchlari ta'sir qiladi. Bunda oriyentatsiyaviy va dispersiyaviy ta'sir energiyalari induksiyaviy ta'sir energiyasidan ko'proqdir. 3.2-jadvalda ayrim molekulalardagi yuqorida aytib o'tilgan uch xil tabiatli Van-der-Vaals kuchlari hosil qilgan potensial energiyalarining umumiy energiyadagi ulushlari foizlarda berilgan. Bu jadvaldan ko'rinib turibdiki, keltirilgan barcha moddalar uchun induksiyaviy ta'sirlashuv potensial energiyasi nisbatan juda kamdir.

Ko'rib o'tgan Van-der-Vaals kuchlari elektrostatik xarakterga ega bo'lgani uchun har qanday elektrostatik kuchlar kabi ikki xossaga ega: a) ular **to'yinmaydigan kuchlardir**, ya'ni dipollar istalgan sondagi qarama-qarshi ishorali qutblar bilan tortishadi; b) ularning ta'siri fazoda yo'nalishga ega emasdir, ya'ni barcha yo'nalishda bir xilda ta'sir qiladi. Shuning uchun Van-der-Vaals kuchlari bilan bog'langan kristallar tuzilishini ularning tashkil etuvchilarining geometriyaviy faktorlari aniqlaydi va kristall panjaralari sharlarning zich taxlanish prinsipi bo'yicha shakl-

3.2-jadval

Ayrim molekulyar kristallardagi dispersiyaviy, oriyentatsiyaviy va induksiya ta'sirlashuv energiyalarining umumiy energiyaga nisbatan ulushlari (foizlarda).

Modda	O'zaro ta'sirlashish turi		
	Dispersiyaviy	Oriyentatsiyaviy	Induksiya
Suv (H_2O)	19	77	4
Ammiak (CH_4)	50	45	5
Xlorli vodorod (HCl)	81	15	4
Uglerod oksidi (CO_2)	100	-	-

lanadi: masalan, geliy va N_2 kristallari zich taxlangan geksagonal strukturaga, boshqa inert elementlar va CN_4 tomonlari markazlashgan kub strukturaga ega. Bulardan tashqari Van-der Vals kuchlari ta'sirida hosil bo'ladigan kristallarga H_2 , O_2 , HCl , Cl_2 , I_2 , P_4 , S_8 , CO_2 (quruq muz) kabi kristallar misol bo'ladi.

Molekulyar kristallardagi Van-der-Vals bog'lanish kuchlari juda zaif bo'lganligi uchun atom yoki molekulalarning issiqlik harakati tufayli osongina uzilishi mumkin. Shuning uchun molekulyar kristallar juda past erish temperaturasi ega, oson bug'lanadi (masalan, CO_2), katta issiqlikdan kengayish koeffitsiyentiga va zaif qattqlikka ega. 3.3-jadvalda ayrim inert elementlar kristallarining erish va qaynash temperaturalari keltirilgan. Ularning erish va qaynash temperaturalari neondan ksenonga

3.3-jadval

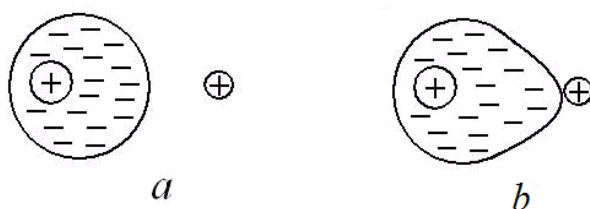
Ayrim inert elementlar molekulyar kristallarining erish va qaynash temperaturalari.

Element	$T_{erish}, ^\circ C$	$T_{qaynash}, ^\circ C$	Element	$T_{erish}, ^\circ C$	$T_{qaynash}, ^\circ C$
Ne	-248,7	-246,3	Kr	-156,9	-152,9
Ar	-189,3	-185,6	Xe	-111,8	-108,0

tomon sezilarli ortib boradi. Bunday o'zgarish shu bilan tushuntiriladiki, neondan ksenonga tomon bu elementlar elektronlarining umumiy soni ortib boradi. Sof Van-der Vals kuchlari bilan bog'langan kristallar elektr izolyatorlardir. Odatda ular elektromagnit nurlarining ultrabinafsha sohasigacha shaffofdir.

3.7. Vodorod bog‘lanishli kristallar

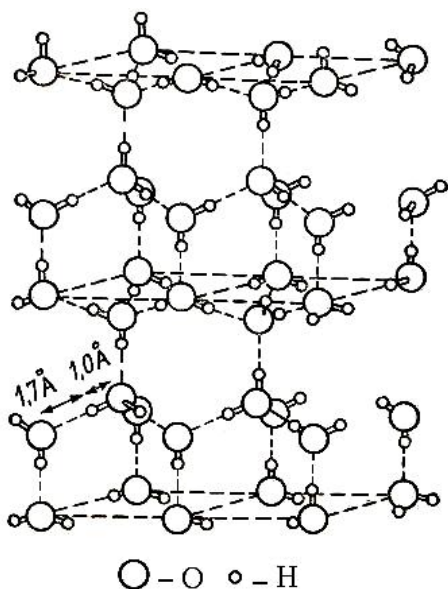
Vodorod bog‘lanish kristallardagi beshinchi xil bog‘lanish bo‘lmay, balki Van-der-Vaals bog‘lanishining xususiy holidir. Boshqacha aytganda, vodorod bog‘lanish ham elektrostatik dipol bog‘lanishdir. Ammo bu bog‘lanishning o‘ziga xos tomonlari bo‘lganligi uchun ko‘pincha uni alohida olib qaraydilar. Agar vodorod atomi ikki elektrmanfiy atomni o‘ziga tortib tursa, bunday bog‘lanishga **vodorod bog‘lanish** deyiladi. Vodorod bog‘lanishning tipik misoli suv molekullari (H_2O) orasidagi bog‘lanishdir. Bu molekulada ikkita vodorod atomi o‘z valent elektronlarini kislorod atomiga berib, «yalang‘och» protonga aylanadi. «Yalang‘och» proton qutblana ham olmaydi, kislorodning manfiy ionidan elektron ham ola olmaydi. Ammo proton, ya‘ni kation vodorod manfiy kislorod ionining elektron bulutini qutblaydi: manfiy ionning elektron buluti proton tomonga bir muncha siljiydi (3.12 *a* -rasm). Natijada manfiy ion dipol momentiga ega bo‘lib, qutblanadi. Bunday hollarda musbat ion (proton) manfiy ionni qutbladi deyiladi. Tabiiyki, qutblangan ion (dipol) bilan proton orasida turli ishorali ionlar orasidagi elektrostatik tortishish kuchidan tashqari **dipol-ion** (proton) tortishish kuchi ham paydo bo‘ladi. Umuman aytganda, ion-dipol ta’sirlashuv faqat proton bilangina yuz bermaydi, balki, biror ion boshqa ionni qutblagan hamma



3.12-rasm. Ion-dipol ta’sirlashishni tasvirlovchi sxema. *a* – protonning manfiy ionni qutblashi. *b* –elektr dipol - proton o‘zaro tasirlashuvi.

hollarda sodir bo‘ladi. Ammo ion-dipol ta’sirlashish kuchi vodorod qatnashganda katta qiymatga erishadi. Protonning o‘lchami mavjud bo‘lishi mumkin bo‘lgan barcha elektronlarga ega bo‘lgan ionlarnikidan ko‘p marta kichikdir. Shuning uchun proton manfiy ionga ancha kichik masofagacha yaqinlashishi mumkin va uni ancha effektiv qutblashi mumkin (3.12-rasm, *b*). Bu holda manfiy ionning elektron bulutining shakli shunchalik buziladiki, uni vodorod va boshqa atom orasida umumlashgan (kollektivlashtirilgan) elektronlardan farq qilish mumkin bo‘lmay qoladi. Tabiiyki, musbat ion faqat manfiy ionlarnigina qutblab qolmaydi, neytral molekulani ham qutblaydi. Bunday hollarda yana

proton eng ko‘p ta’sir ko‘rsatishi bilan boshqa musbat ionlardan farq qiladi. Kichkinagina proton ikki atomni juda yaqinlashtirishi mumkin: proton ular orasida turib har ikkalasini ham qutblaydi, hosil bo‘lgan dipollar bir-biriga tortishadi. Bunday bog‘lanishni **vodorod bog‘lanish** deyiladi. Xususiyl hollarda vodorod bog‘lanish kislorod atomlari orasida vujudga keladi. Masalan, muz va shakar kristallarida atomlar orasidagi bog‘lanish vodorod bog‘lanishdir. Muz kristallida har bir kislorod atomi to‘rtta vodorod atomi bilan tetraedr uchlari bo‘yicha qurshalgan bo‘ladi va kislorod atomi bilan ikki H (vodorod) atomi orasidagi burchak doim taxminan tetraedrik burchak 109° ga tengdir. Demak, vodorod bog‘lanish yo‘nalishga ega bo‘lgan bog‘lanishdir. Bu jihatdan u formal kovalent bog‘lanishga o‘xshab ketadi. Muz kristallida H_2O molekulalari vodorod bog‘lanish orqali muzning butun kristall panjarasini hosil qiladi (3.13-rasm).

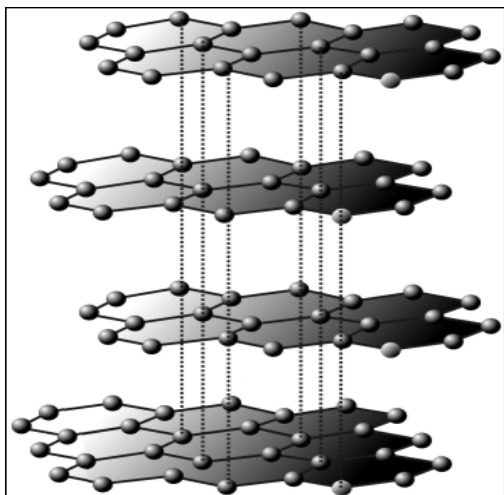


3.13-rasm. Muzning kristall panjarasi.

3.8. Aralash bog‘lanishlar

Biz yuqorida ko‘rib o‘tgan kristallardagi ion, metall, kovalent va Van-der-Vaals kuchlari bilan to‘rt xil bog‘lanishlar qattiq jismlardagi chegaraviy holatlardir. Bu to‘rt xil bog‘lanishdan istalgan bittasi kamdan-kam sof holda uchraydi. Odatda qattiq jismda ko‘rib o‘tgan hamma xil bog‘lanishlarning ulushlari uchraydi. Chunonchi, dispersiyaviy kuchlar faqat inert element atomlari va neytral molekulalar orasida vujudga keluvchi yagona kuch bo‘lgan holda, istalgan atomlar, ionlar va molekulalar orasida boshqa turdagi bog‘lanish kuchlari bilan bir qatorda ta’sir etuvchi universal kuch hamdir. Umuman boshqa turdagi barcha

bogʻlanishli kristallarda albatta Van-der-Vaals kuchlari ham mavjuddir. Buning sababi quyidagicha tushuntiriladi. Istalgan atomning (vodorod atomidan tashqari) yadroga eng yaqin elektron qavati ikkita elektron bilan toʻla boʻladi. Elementlar Davriy sistemasi boʻyicha tartib soni ortishi bilan elektronlar bilan toʻyingan ichki orbitallar soni ham ortib boradi. Buning maʼnosi shuki, bunday atomlarning ichki elektron orbitalarida shunday elektronlar guruhi borki, ular ion bogʻlanishda ham, metall bogʻlanishda ham, kovalent bogʻlanishda ham ishtirok etmaydi. Biroq qoʻshni atomlarning bu ichki elektronlari fluktuatsiyalanuvchi dipol momenti hosil qiladi va oʻzaro Van-der-Vaals kuchlari bilan taʼsirlashadi. Ammo, boshqa turdagi kuchli ximiyaviy bogʻlanish kuchlariga nisbatan uning ulushi juda kam boʻlib, ayrim hollardagina 20 % gacha yetadi. Bundan tashqari Van-der-Vaals kuchlari uzoqdan taʼsirlashuv xossasiga ega boʻlsa ham taʼsir masofasi r kattalashganda (r^{-7} qonuniyat bilan) shiddatli ravishda kamayadi. Shuning uchun koʻp hollarda asosiy kuchlar boshqa tabiatga ega boʻlgan hollarda bu kuchlar hisobga olinmaydi. Ammo koʻp hollarda qattiq jismlarda ion, kovalent va metall bogʻlanishlarning bir vaqtda mavjud boʻlishi muhim ahamiyat kasb etadi. Kovalent bogʻlanishda qanday qilib metall bogʻlanish vujudga kelishini koʻrib chiqamiz. Kovalent bogʻlanishda ikkita turli element atomlarining umumlashgan elektron juftlari ushbu atomlar orasida bir tekis taqsimlanmagan boʻladi. Boshqacha aytganda elektronlar vaqtning koʻproq qismini bir atomga nisbatan boshqa atom yaqinida koʻproq oʻtkazishi mumkin. Shu tariqa kovalent bogʻlanishda ion bogʻlanish ulushi paydo boʻladi. Koʻp kristallarda panjara elementlari orasidagi bogʻlanish qisman kovalent, qisman ion va metall bogʻlanish boʻlishi mumkin. Masalan, Davriy sistemaning IV guruh oraliq metallarining karbidlari MeC va nitridlarida MeN metall bogʻlanishdan tashqari kovalent va ion bogʻlanish turlari ham mavjud deb qaraladi. Faqat bu bogʻlanishlarning har birining ulushi haqidagi masala bahsga sabab boʻlishi mumkin. Kovalent bogʻlanish ham boʻlgani uchun karbid va nitridlar qattiq va qiyin eruvchi materiallardir. Metall bogʻlanish ulushi ham boʻlganligi uchun ular juda yaxshi oʻtkazgichlardir. Kristallarning aralash bogʻlanishlari ularning noyob va ajoyib xossalarga ega boʻlishiga sabab boʻladi. Shunday kristallarning tipik vakili sifatida uglerodning grafit modifikatsiyasini keltirish mumkin. Grafit qatlamli geksagonal kristall panjaraga ega (3.14-rasm). Har bir qatlamdagi uglerod atomlari orasidagi masofa 0.141 nm boʻlgan holda qatlamdagi har bir uglerod atomi uchta



3.14-rasm. Grafitning kristall panjarasi.

qo'shni atomlar bilan kovalent bog'lanish hosil qiladi. Shunday qilib, to'rtta valent elektrondan uchta to'yingan kovalent bog'lanish hosil qiladi. Bu uchta bog'lanish ulkan bir qatlamli molekula hosil qiladi. Bir qatlam boshqa qatlamga nisbatan yarim panjara doimiysiga siljigan bo'lib, ular orasida har bir qatlamdagi to'yingan molekulalar orqali Van-der-Vaals kuchlari ta'sir qiladi. Bundan tashqari uglerodning to'rtinchi erkin elektroni orqali qatlamlar orasida metall bog'lanish vujudga keladi. Qatlamlar bir-biridan bitta tekislik qatlamidagi uglerod atomlari orasidagi masofaga nisbatan olis, 0.34 nm masofada joylashgan bo'ladi. Mana shunday aralash bog'lanish tufayli grafitning o'ziga xos xossalari namoyon bo'ladi. Har bir qatlamdagi uglerod atomlari orasidagi kovalent bog'lanish tufayli grafitning erish temperaturasi juda yuqoridir ($T_{erish} > 3300^{\circ}\text{C}$). Qatlamlar orasidagi zaif Van-der-Vaals kuchlari va qisman metall bog'lanish tufayli o'ziga xos yumshoqdir (qalam sifatida foydalaniladi). Metall bog'lanishi tufayli ular metall rangiga va elektron o'tkazuvchanlikka egadir.

Savollar va masalalar

1. Qanday kuchlar ta'sirida kristall panjara hosil bo'ladi?
2. Nima uchun kristall elementlariga teng ta'sir etuvchi kuchlar ularning muvozanat vaziyatiga mos keluvchi nuqtasiga nisbatan asimmetrik bo'ladi?
3. Kristallardagi ximiyaviy bog'lanish turlarining klassifikatsiyasini aytib bering.
4. Ion bog'lanishli kristallarda ularning elementlari orasidagi bog'lanish kuchlarining xarakterli tomonlarini tavsiflab bering.
5. Metall bog'lanishli kristallarda bog'lanish kuchlari qanday amalga oshadi?
6. Kovalent bog'lanishli kristall elementlari orasida bog'lanish kuchlari qanday hosil bo'ladi?
7. Molekulyar bog'lanishli kristallarda bog'lanish kuchlari necha xil bo'ladi?
8. Vodorod bog'lanishli kristallarda bog'lanish kuchlarining paydo bo'lish mexanizmlari qanday?
9. Aralash bog'lanishli kristallga misol keltiring va bunday bog'lanish tabiatini tushuntirib bering.
10. Bir-biridan $3 \text{ \AA}$ masofada turgan, elektr zaryadi ikkita elementar elektr zaryadiga ega bo'lgan ionlarning kulon ta'sirlashish energiyasi necha eV bo'ladi?

Javob: $\approx -3.20 \times 10^{-18} J \approx -20 eV$.

10. Qattiq jismlardagi bog'lanish energiyasining qiymatini turli energiyaviy birliklarda ifodalash mumkin. Ko'pincha J/mol va $eV/atom$ o'lchov birliklaridan foydalaniladi. $1 J/mol$ birlikni $eV/atom$ ga aylantiring.

Javob: $\approx 1.04 \times 10^{-5} eV/atom$.

IV BOB. QATTIQ JISMLARNING MEXANIK XOSSALARI

4.1. Jismga ta'sir qiluvchi tashqi kuchlar va jism deformatsiyasi

Tashqi kuchlar ta'sirida massasi o'zgarmagan holda qattiq jism o'z o'lchamini va hajmini o'zgartiradi. Bu hodisaga **deformatsiya** (lotincha *deformatio* – buzilish) deyiladi. Bunda jismning shakli o'zgarishi ham mumkin, o'zgarmasligi ham mumkin. Agar jismga hamma tomondan siquvchi yoki cho'zuvchi teng kuchlar ta'sir qilsa, jism o'z shaklini saqlaydi. Oddiy hollarda jismga ta'sir qiluvchi tashqi kuchlar (omillar) mexanik ta'sirlardir (kuchlardir). Umuman olganda, tashqi kuchlar temperatura, magnit, elektr, nurlanish va shu kabi tashqi ta'sirlar ham bo'lishi mumkin.

Jismga ta'sir qiluvchi tashqi kuchlar (ta'sirlar) vaqt bo'yicha qanday o'zgarishiga qarab turli xarakterga ega bo'lishi mumkin.

Statik kuch (nagruzka) –noldan o'zining maksimal qiymatigacha ravon ortib boruvchi bir marta beriladigan kuch. Statik kuch doimiy yoki vaqtinchalik bo'lishi mumkin.

Dinamik (zarbaviy) kuch – jismga bir marta o'zining maksimal qiymati bilan keskin ta'sir qiluvchi kuch.

Takrorlanuvchi o'zgaruvchi kuch – jismga ko'p marta ta'sir qiluvchi kuch. Bunday kuchning o'sish va kamayish tezliklari har xil bo'lishi mumkin.

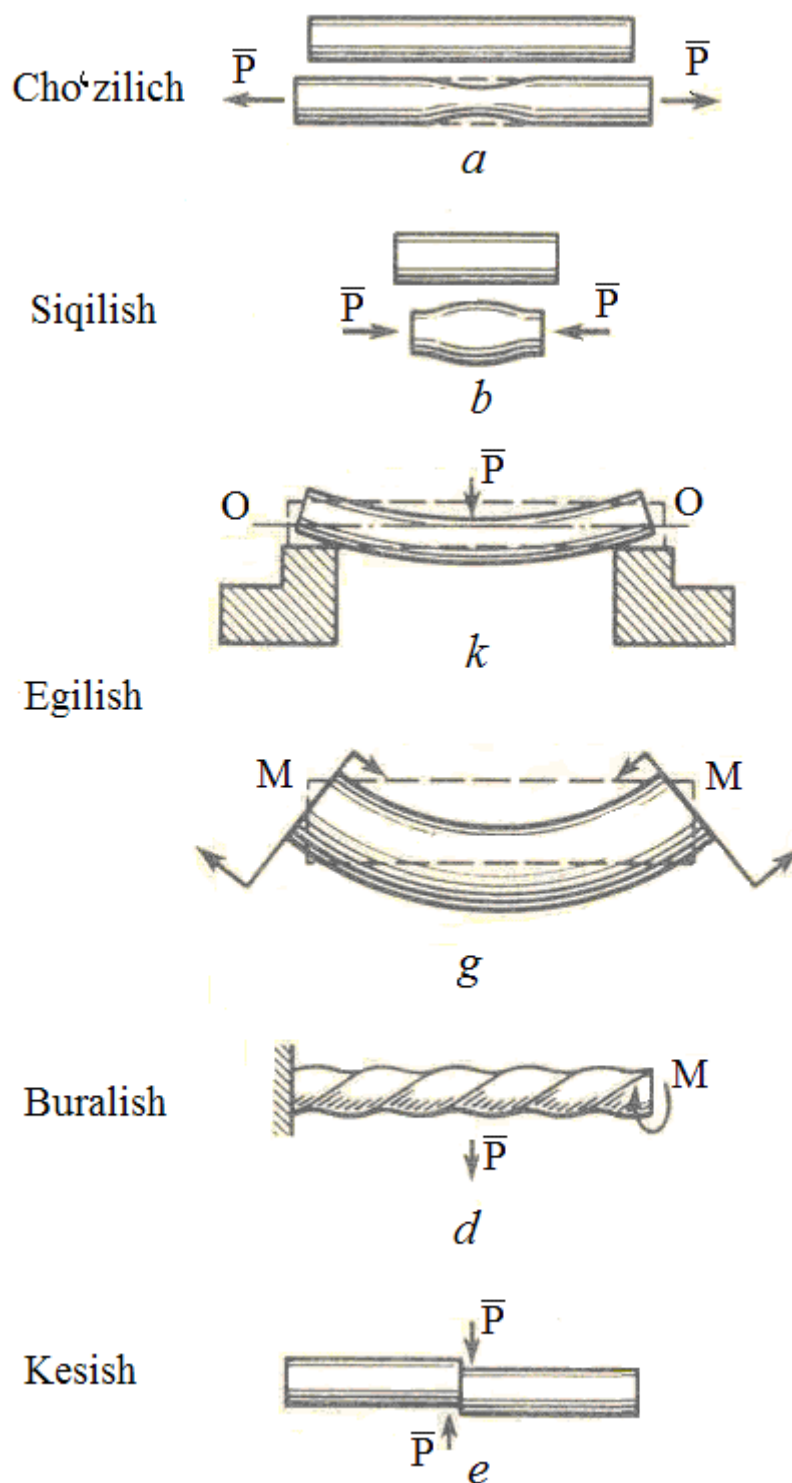
Ta'sir yo'nalishiga ko'ra, tashqi kuchlar cho'zuvchi, siquvchi, eguvchi, burovchi, va kesuvchi bo'lishi mumkin. Bu kuchlarni oddiy hol bo'lgan mexanik kuchlar misolida ko'rib chiqamiz.

Cho'zuvchi kuch deganda to'g'ri burchakli to'sinning qarama-qarshi tomondagi ko'ndalang kesimlarining og'irlik markazlariga to'sinning o'qlari bo'yicha qarama-qarshi tomonlarga yo'nalgan qilib qo'yilgan teng kattalikdagi kuchlar tushuniladi (4.1 *a*-rasm).

Agar hozir tilga olgan kuchlar o'zaro qarama-qarshi tomonlarga yo'nalgan bo'lsa, **siquvchi kuch** bo'ladi (4.1, *b*- rasm).

Eguvchi kuch to'g'ri burchakli to'sinning simmetriya tekisligidagi OO o'qqa perpendikulyar yo'nalgan bo'ladi (4.1, *k* -rasm). Eguvchi kuch to'singa uning tekisligi bo'ylab o'tgan o'qi bo'yicha qarama-qarshi tomonga yo'nalgan juft kuchlar ta'sirida ham paydo bo'ladi (4.1, *g* – rasm).

Burovchi kuch sterjenning yoki to'sinning ko'ndalang kesimi tekisligida miqdor jihatdan teng, lekin antiparallel yo'nalishda ta'sir qilayot-



4.1 –rasm. Materialni cho'zuvchi (a), siquvchi (b), eguvchi (k, g), burovchi (d) va kesuvchi (e) kuchlarning sxemalari.

gan kuchlar tufayli paydo bo'ladi (4.1, d –rasm).

Kesuvchi kuch bu material qismlarining biror kesim tekisligida birbirlariga nisbatan siljishiga olib keluvchi kuchdir (4.1, e-rasm).

Ta'sir qilayotgan kuch jismga qo'yilish xarakteriga qarab **to'plan-gan** va **taqsimlangan** bo'ladi. Taqsimlangan kuchlar **hajmiy** (hajm

bo'yicha taqsimlangan), **sirti**y (biror yuza bo'yicha taqsimlangan) va **chiziqli** taqsimlangan – jismning biror belgilangan chizig'i bo'yicha taqsimlangan bo'ladi.

To'plangan kuchlar materialning juda ham kichkina yuzasiga (nuqtasiga) qo'yiladi. **Taqsimlangan kuchlar** jismning butun yuzasiga yoki jismning biror qismining yuzasiga qo'yiladi. Agar taqsimlangan kuchlar intensivligi bir xil va doimiy bo'lsa, **tekis taqsimlangan kuchlar** deyiladi. Agar kuchlar qo'yilgan nuqtalar hamma yuzani ishg'ol qilsa, **tutash taqsimlangan kuchlar** deyiladi.

Ta'sir etuvchi kuchlarga mos ravishda deformatsiyalar ham **cho'zish**, **siqilish**, **egilish**, **buralish** va **siljish deformatsiyalariga** bo'linadi.

Jismga ta'sir qilayotgan tashqi kuchlar butunlay bartaraf bo'lganda (olib tashlanganda) yo'qoladigan deformatsiya **elastik deformatsiya** deyiladi. Aksincha, tashqi kuchlar ta'siri yo'qolganda ham saqlanadigan deformatsiya **plastik (yoki qoldiq) deformatsiya** deyiladi. Plastik deformatsiya tashqi kuch ta'sirida qattiq jismning tashkil etgan zarralarining (atomlarining yoki molekulalarining) nisbatan katta masofalarga siljishi bilan bog'liq bo'lib, jism shaklining, strukturasining va xossalarning o'zgarishi kuch ta'siri yo'qolganda ham saqlanadi. Ammo jismning makroskopik yaxlitligi saqlanadi. Plastik deformatsiya sirg'anish (II bob, 2.22, *a* – rasm) va qiyofadosh (II bob, 2.22, *c* - rasm) tekisliklar (dvoynikovaniye) orqali amalga oshadi. Plastik deformatsiyaning har ikkala mexanizmida ham deformatsiya kristall panjaraning muayyan tekisliklari va yo'nalishlari bo'yicha sodir bo'ladi. Sirg'anish kristall panjaraning eng ko'p atomlar joylashgan tekisliklari va yo'nalishlari bo'yicha sodir bo'ladi. Chunki bunday tekisliklarda va yo'nalishlarda qo'shni atom tekisliklari orasidagi masofa nisbatan katta va ular orasidagi bog'lanish eng kam bo'lganligi uchun siljituvchi τ kuchga eng kam qarshilik bo'ladi. Kristallda sirg'anish tekisliklari va yo'nalishlari qancha ko'p bo'lsa, u shuncha plastik deformatsiyaga moyil bo'ladi.

4.2. Ichki mexanik kuchlar va kuchlanish

Qattiq jismga tashqi omillar (kuchlar, temperaturaning yoki bosimning o'zgarishi va boshqalar) ta'siri tufayli qattiq jismda **ichki mexanik kuchlar** paydo bo'ladi. Bunga sabab tashqi kuch ta'sirida jism deformatsiyaga uchraydi. Bunda jismning tashkil etgan zarralari – atomlari yoki molekulalari, yoki ionlari (jism qanday bog'lanishga ega ekanligiga qarab) o'zlarining muvozanat vaziyatlaridan chetga siljiydi. Bu siljishga

elektr va magnit tabiatiga ega bo'lgan bog'lanish kuchlari qarshilik ko'rsatadi. Jismning elastik deformatsiyasi tufayli paydo bo'lib, uning zarralarining siljishiga qarama-qarshi yo'nalgan ichki kuch **elastiklik kuchi** deyiladi. Sodda holda sterjen o'qi bo'yicha bo'lgan deformatsiyada elastiklik kuchi deformatsiya natijasida sterjenning uzayish yoki qisqarish masofasiga to'g'ri proporsional bo'lib, uning zarralarining siljish yo'nalishiga teskari yo'nalganligi aniqlangan:

$$f = -g\Delta x, \quad (4.1)$$

bunda proporsionallik koeffitsiyenti g – **elastiklik koeffitsiyenti** yoki **jismning mustahkamligi** (qattiqligi) deyiladi. Bu kattalik faqat qaralayotgan jism materialining ichki tabiatiga (tashkil etgan zarralarining turiga, ichki tuzilishiga va zarralarining bog'lanish kuchlariga) bog'liq bo'ladi.

Elastiklik kuchi deformatsiyalangan jismning istalgan kesimida, shuningdek, deformatsiyaga sabab bo'lgan jism bilan kontaktda bo'lgan nuqtalarda ham paydo bo'ladi. Ichki elastik kuchlarning qiymati **kuchlanish** deb ataluvchi kattaliklarda o'lchanadi. Agar jism tashqi kuchlar ta'sirida turgan bo'lsa, uning barcha nuqtalarida mexanik kuchlanishlar paydo bo'ladi. Bunday hollarda **jism kuchlangan holatda** deb qaraladi. Bu jismda qandaydir elementar hajmni ajratib olsak, unga ikki xil kuch ta'sir qiladi. 1. Jismning hamma elementlariga ta'sir qiluvchi hajmiy kuch (masalan, og'irlik kuchi). Bu kuch hajm o'lchamiga proporsional bo'ladi. 2. Hajm elementini o'rab olgan sirt yuzasiga ta'sir qiluvchi kuch. Bu kuch hajm sirti yuzasining o'lchamiga proporsional bo'ladi. Yuza birligiga to'g'ri keluvchi bunday kuch **kuchlanish** deb ataladi. Kuchlanish jismga qo'yilgan tashqi kuchning kattaligiga (kuch qancha katta bo'lsa, u shuncha katta) va jismning o'lchamiga bog'liq (jismning ko'ndalang kesim yuzi qancha kichik bo'lsa, u shuncha katta va aksincha) bo'ladi. Binobarin, agar jismga ta'sir etayotgan F kuch jismning S qo'ndalang kesim yuziga perpendikulyar bo'lsa, kuchlanish uchun quyidagi ifoda o'rinli bo'ladi:

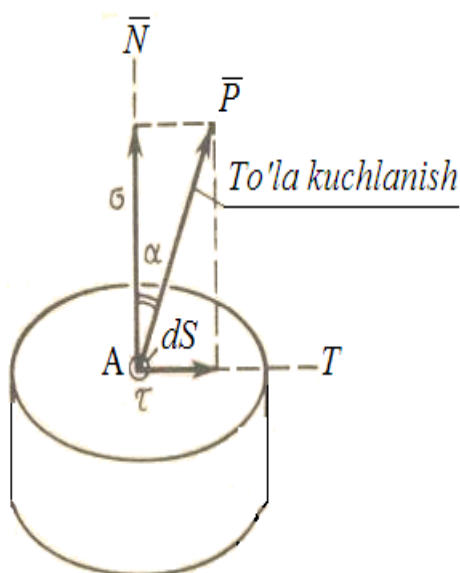
$$\sigma = \frac{F}{S}. \quad (4.2)$$

Kuchlanish tashqi ta'sir kuchining yo'nalishiga qarama-qarshi yo'nalgan bo'ladi. Agar kuchlanish jismning kesim tekisligiga perpendikulyar yo'nalishda bo'lsa, u **normal kuchlanish** deyiladi va σ (sigma) orqali belgilanadi. Jism kesimining yuzasiga urinma yo'nalishida ta'sir

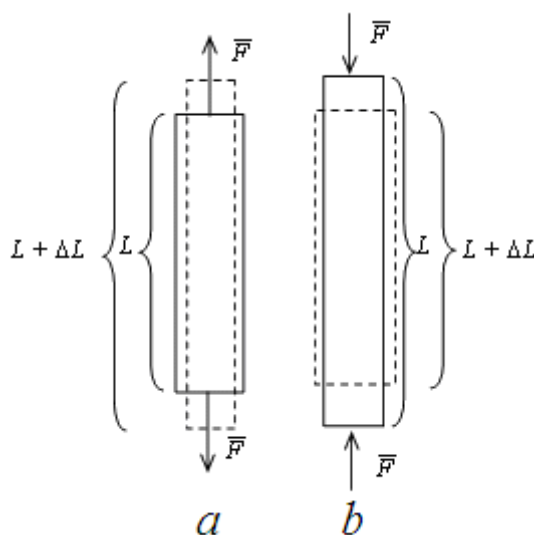
qiluvchi kuch **urinma** yoki **tangensial kuchlanish** deb ataladi va u τ (tau) bilan belgilanadi.

Ichki kuchlanishni haqiqiy yoki shartli ichki kuchlanishlar sifatida qarash mumkin. **Haqiqiy kuchlanish** jismga qo'yilgan kuchning yetarli darajadagi deformatsiya hosil qiluvchi kuchlanishlarda o'zgarib boruvchi kesim yuzasiga nisbati bilan o'lchanadi. Masalan, biror namuna yetarlicha kuchli cho'zilish deformatsiyasida asta-sekin "bo'yin" hosil bo'ladi (4.1, *a*-rasm). **Nisbiy kuchlanish**da namuna to'la buzilguncha ta'sir qilayotgan kuchni namunaning boshlang'ich kesim yuzasiga nisbati olinadi. Jismning kuchlangan holatini o'rganganda kuchlanish jismning hamma nuqtalarida bir xil (ya'ni bir jinsli) va jismning hamma qismlari statik (turg'un) muvozanatda deb qaraladi.

Endi jism deformatsiyasini xarakterlovchi asosiy fizikaviy kattaliklarni keltirib chiqaramiz. Bunda qaralayotgan jism kichik deformatsiyaga uchraydi deb qaraymiz. **Kichik deformatsiya** deganda shunday deformatsiya tushuniladiki, bunda deformatsiyalanish kattaligi jismning o'lchamiga nisbatan shunchalik kichik bo'ladiki, u jismga ta'sir qilayotgan tashqi kuchlarning joylashuviga ta'sir qilmaydi. Qattiq jismning deformatsiyasiga sabab bo'luvchi uning biror A nuqtasiga qo'yilgan istalgan yo'nalishdagi $\vec{F}$ kuchni ikkita o'zaro perpendikulyar yo'nalishdagi kuchga ajratish mumkin. Aytaylik, jismning qandaydir dS yuzasidagi biror A nuqtasiga yuzaga perpendikulyar bo'lmagan, qandaydir bir α burchak ostida $\vec{F}$ tashqi kuch ta'sir qilayotgan bo'lsin. Bu holda jismda ta'sir qilayotgan $\vec{F}$ kuchga teng va qarama-qarshi yo'nalishdagi $\vec{P}$ kuchlanish paydo bo'ladi. Tabiiyki, $\vec{F}$ kuch kabi to'la $\vec{P}$ kuchlanishni ham normal va tangensial tashkil etuvchilarga ajratish mumkin (4.2-rasm). Vaholanki, jismning ko'ndalang yuzasiga nisbatan istalgan ixtiyoriy yo'nalishdagi kuchlanishni ikkita to'g'ri chiziq bo'yicha yo'nalgan kuchlanishlarga ajratish mumkin ekan, u holda kuchlanishning miqdoriy ifodasini topish uchun bo'ylama cho'zilishdan yoki bir yo'nalishdagi siqilish deformatsiysidan foydalanamiz. Ko'ndalang kesim yuzi S bo'lgan L uzunlikdagi sterjenni ko'z oldimizga keltiraylik. Faraz qilamiz, sterjenning qarama-qarshi tomonlaridagi ko'ndalang kesim yuzalariga sterjenning o'qi bo'ylab ta'sir qiluvchi teng, ammo qarama-qarshi yo'nalgan $\vec{F}$ kuchlar ta'sir qilmoqda (4.3 - rasm). Bu kuchlar ta'sirida sterjenning uzunligi ΔL miqdorga uzayadi. Deformatsiyaning o'lchovi sifatida (deformatsiyalanish darajasini baholash uchun) mutlaq ΔL uzayishga qaraganda ε nisbiy uzayishni baholash qulayroq. Qaralayotgan



4.2-rasm. Ichki kuchlanishni normal va urinma (tangensial) kuchlanishlarga ajratish.



4.3-rasm. Sterjenning cho‘zilish (a) va siqilish (b) deformatsiyalari.

holda nisbiy uzayish quyidagicha topiladi:

$$\varepsilon = \frac{L_1 - L}{L} = \frac{\Delta L}{L}, \quad (4.3)$$

bunda L_1 – sterjenning deformatsiyadan keyingi uzunligi. Cho‘zuvchi kuchlarni musbat deb qaraymiz (4.3, a-rasm). Bu holda ΔL miqdor ham musbat bo‘ladi, sterjen uzayadi. Sterjenni siquvchi kuchlarni manfiy deb qaraymiz. Bu holda $L_1 < L$ bo‘lganligi uchun (4.3, b - rasm) ΔL elementar uzayish manfiy bo‘ladi. Buning ma’nosi shuki, sterjen bir yoki ikki tomonlama siqilsa, uning uzunligi kamayadi.

Tajribalarning ko'rsatishicha, nisbiy uzayish jismga qo'yilgan biror F kuchga to'g'ri, jismning S ko'ndalang kesim yuzasiga teskari proporsionaldir:

$$\varepsilon = g \frac{F}{S}. \quad (4.4)$$

Kuchlanishning (4.2) ifodasini e'tiborga olsak, nisbiy uzayishning kuchlanish orqali ifodasi kelib chiqadi:

$$\varepsilon = g\sigma. \quad (4.5)$$

Materialning elastiklik koeffitsiyenti bilan bir qatorda unga teskari bo'lgan kattalikdan ham foydalanadilar:

$$E = \frac{1}{g}, \quad (4.6)$$

E - **Yung moduli** yoki **elastiklik moduli** deyiladi. Ushbu (4.6) ifodaga ko'ra, nisbiy uzayishni xarakterlovchi ifoda (4.3) quyidagi ko'rinishni oladi:

$$\varepsilon = \frac{1}{E} \sigma \text{ yoki}$$

$$\sigma = E\varepsilon. \quad (4.7)$$

Oxirgi ifoda **Guk qonunini** ifodalaydi. Bu qonunga ko'ra jismdagi kuchlanish nisbiy uzayishga to'g'ri proporsionaldir. (4.7) ifodadan Yung modulining fizikaviy ma'nosi ham kelib chiqadi: Yung moduli son jihatdan jismda bir birlik nisbiy deformatsiya ($\varepsilon=1$) hosil bo'lganda vujudga keladigan kuchlanishga teng bo'lgan kattalikdir. Buning uchun (4.3) va (4.7) ifodalarga ko'ra, jismning chiziqli o'lchami ikki barobar ortishi yoki kamayishi ($\Delta L = L$ bo'lishi) kerak. Ammo bu shart rezinalar va ayrim polimerlar uchungina bajariladi. Qattiq jismlar uchun bu shart bajarilishidan ancha oldin u uziladi. Shunday bo'lsa ham Yung moduli jismning elastiklik xarakteristikasini baholashda muhim kattalik sifatida xizmat qiladi.

Yung moduli har qanday jism uchun individual kattalik bo'lib, u faqat jismni tashkil etgan atomlarning (molekulalarning yoki ionlarning) tabiatiga, ularning orasidagi masofalarga (bog'lanish kuchlariga) bog'liq

bo'ladi. Uni faqat materialning tarkibini ancha o'zgartirish yoki ichki strukturasini o'zgartirish yo'li bilan bir muncha o'zgartirish mumkin.

Tashqi kuch ta'sirida sterjenning (jismning) faqat bo'ylama o'lchami (uzunligi) emas, balki ko'ndalang o'lchami (silindr bo'lsa diametri) ham o'zgaradi. Sterjenning boshlang'ich ko'ndalang o'lchami b_0 qaralayotgan cho'zilish deformatsiyasi tufayli biror Δb miqdorga kamayadi. Siqilish deformatsiyada esa aksincha kamayishini tasavvur qilish qiyin emas. Sterjenning **ko'ndalang o'lchamining nisbiy siqilishi** (kamayishi) $\frac{\Delta b}{b_0}$

bo'ladi. Nisbiy ko'ndalang siqilishning shunga mos nisbiy uzayishga nisbati **Puasson koefitsienti** deyiladi:

$$\mu = (\Delta b/b_0):(\Delta L/L_0).$$

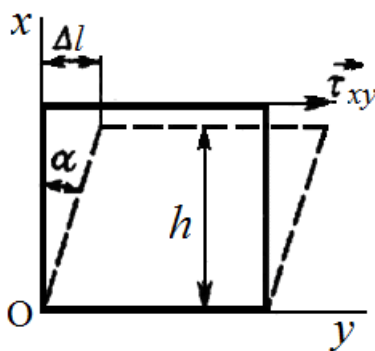
Shuni e'tiborga olish kerakki, Δb va ΔL hamma vaqt qarama-qarshi ishoraga ega bo'ladi: cho'zilish deformatsiyasida $\Delta L > 0$ va $\Delta b < 0$ bo'lib, siqilish deformatsiyasida aksincha bo'ladi. Binobarin, Puasson koefitsiyenti musbat kattalikdir. U faqat jismning ichki tabiatiga (strukturasini va tarkibiga) bog'liq bo'lib, jismning elastiklik xossasining muhim xarakteristikasi hisoblanadi. Ushbu kattalik hamma vaqt $\mu < 1/2$ ekanligini ko'rsatish mumkin.

Kichik deformatsiyalarning asosiy turi cho'zilish (va siqilish) bo'lganligi uchun Yung moduli va Puasson koefitsiyenti qattiq jismning elastiklik xossalarini to'la xarakterlaydi. Deformatsiyaga tegishli qolgan barcha koefitsiyentlar va elastiklik modullari E va μ orqali aniqlanishi mumkin. Chunonchi, **siljish moduli** G va **hajmni har tomonlama siqilish moduli** B mos holda quyidagicha aniqlanadi:

$$G = E/(2+2\mu) \text{ va } B = \frac{E}{3(1-2\mu)}.$$

Qattiq jism deformatsiyasini to'la tavsiflash uchun jismning cho'zilishi va siqilishi qonuniyatlaridan tashqari siljish deformatsiyaning qonuniyatlarini ham bilish kerak. **Siljish deformatsiyasi** jismning biror sirtiga ta'sir qiluvchi urinma (tangensial) kuchlanish natijasida paydo bo'ladi (4.2-rasm). Materiallarni mexanik sinashda deformatsiyani baholash namunaning chiziqli o'lchamlarini va siljish burchagini baholash orqali amalga oshiriladi. **Siljish burchagi** deganda deformatsiya-

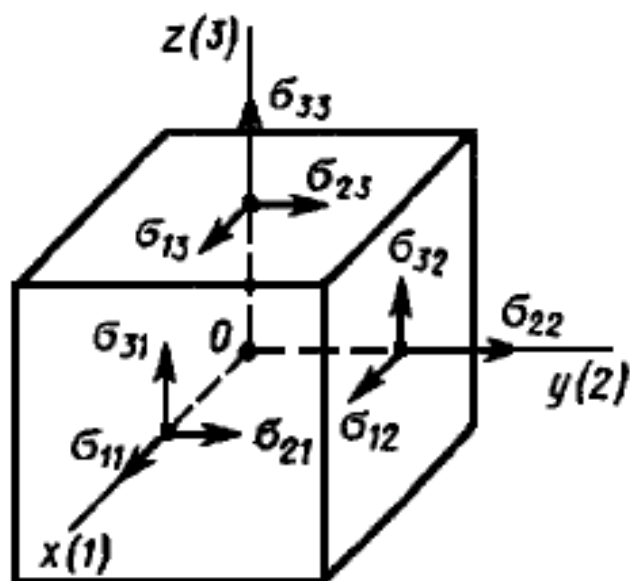
lanayotgan namuna yuzasi elementining boshlang'ich to'g'ri burchagini o'zgarish burchagi tushuniladi (4.4-rasm). Odatda bu burchak juda kichik bo'lganligi uchun uning tangens burchagi α **nisbiy siljish** (γ) ga teng deb qaraladi. Haqiqatdan, jismning siljish deformatsiyasi sxemasi bo'lgan 4.4-rasmdan ko'rinib turibdiki, $\gamma = \Delta l/h = \operatorname{tg} \alpha$ bo'lib, kichik deformatsiyalarda $\gamma \approx \alpha$ bo'ladi.



4.4-rasm. x va y o'qlar bo'yicha ta'sir qilayotgan tangensial kuch τ_{xy} ta'sirida jism shaklining va o'lchamining o'zgarishi.

4.3. Ichki mexanik kuchlanish tenzori

Ichki mexanik kuchlanish tenzor kattalikdir. Jismdagi ichki mexanik kuchlanish tenzorini keltirib chiqarish uchun kuchlanish jismda bir tekis taqsimlangan (birjinsli) va jism statik muvozanatda degan boshlang'ich shartdan foydalanamiz. Qaralayotgan jism hajmida biror ixtiyoriy O nuqtani tanlab olamiz. Koordinata boshi hajmda tanlangan O nuqtada bo'lgan to'g'ri burchakli koordinatalar sistemasini olamiz. O nuqta atrofida xayolan cheksiz kichik kub ajratamiz (4.5-rasm). Ajratib olingan elementar kubning qirralarini Ox, Oy va Oz o'qlarga parallel qilib olamiz. Keltirib chiqarmoqchi bo'lgan formulalarni yozishda qulaylik bo'lishi uchun x , y va z o'qlarni mos holda 1, 2 va 3 sonlari bilan belgilaymiz. Kubning qarama-qarshi qirralariga ta'sir qilayotgan kuchlar teng va ular muvozanatda deb qaraymiz. U holda uchta o'zaro perpendikulyar qirralarga ta'sir qilayotgan kuchlarning ta'sirini ko'rish bilan kifoyalanish mumkin. Kubning parallel bo'lmagan uchta qirralariga ta'sir qilayotgan kuchlarning har birini bitta normal va ikkita urinma, ya'ni qaralayotgan qirrada yotuvchi kuchlanishlarga ajratamiz. Bu yo'nalishlar uchun umumiy i va j belgilashlarni kiritamiz. Kub qirrasining i yo'nalishida j yo'nalishga perpendikulyar bo'lgan kuchlanishning tashkil etuvchisini σ_{ij} ko'rinishda belgilaymiz. U holda 4.5-rasmga muvofiq normal



4.5-rasm. Jism hajmidagi elementar kubning qirralariga ta'sir qilayotgan kuchlanishlar.

(cho'zuvchi yoki siquvchi) kuchlanishlar ifodasi σ_{11} , σ_{22} , σ_{33} ; urinma (siljituvchi yoki sindiruvchi) kuchlanishlar ifodasi σ_{12} , σ_{13} , σ_{23} va hokazo ko'rinishda bo'ladi. Bundan kelib chiqadiki, jismning har bir nuqtasidagi kuchlanish holati ikkinchi rang tenzorining tashkil etuvchilari bo'lgan to'qqizta σ_{ij} kattaliklar bilan xarakterlanadi:

$$T_{kuchl.} = \begin{vmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{vmatrix}. \quad (4.8)$$

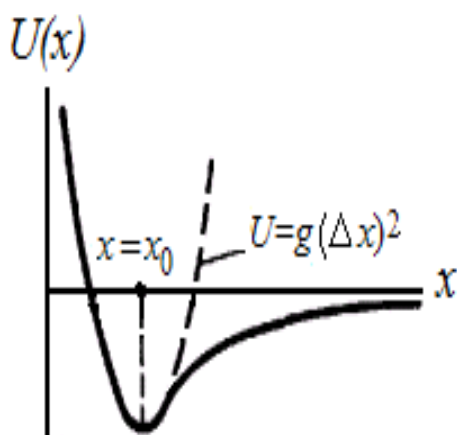
Qaralayotgan elementar kub muvozanat holatida va kuchlanish bir jinsli bo'lganligi uchun aylantiruvchi momentlar istalgan o'qqa nisbatan $\sigma_{23} = \sigma_{32}$, $\sigma_{31} = \sigma_{13}$, $\sigma_{12} = \sigma_{21}$ shartlarni bajaradi. Bundan kelib chiqadiki, kuchlanish tenzorining to'qqizta tashkil etuvchisidan faqat oltitasi mustaqil bo'lib, tenzor simmetrikdir, ya'ni tashkil etuvchilari tenzorning bosh diagonaliga simmetrik bo'lganlari o'zaro tengdir: $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$.

Qattiq jismda paydo bo'ladigan kuchlangan holati uning deformatsiyalanish va yemirilish jarayonlariga kuchli ta'sir qiladi. Kuchlangan holatning muhim xarakteristikalaridan biri "yumshoqliq" koeffitsiyentidir. Bu koeffitsiyent maksimal urinma kuchlanishning maksimal normal kuchlanishga nisbati bilan o'lchanadi. Ushbu koeffitsiyent qancha kichik bo'lsa, kuchlangan holat shuncha qattiq bo'ladi. Urinma kuchla-

nishlar plastik deformatsiyani avj olishiga, normal kuchlanishlar esa atomlararo kuchlarni uzilishiga, ya'ni qattiq jismni mo'rt yemirilishiga sabab bo'ladi.

4.4. Deformatsiyaning potensial energiyasi

Uchinchi bobda jismning zarralari orasidagi tortishuv va itarilish kuchlari ularni ma'lum bir muvozanat vaziyati atrofida ushlab turishini ko'rgan edik. Bu kuchlarning potensial energiyasi zarralar orasidagi kuchlarning teng ta'sir etuvchisi kabi (III bob, 3.1-rasm) masofaning funksiyasi bo'lgan $U(r)$ egri chiziq bo'ladi (4.6-rasm).



4.6-rasm. Qattiq jismdagi o'zaro ta'sirlashuvchi atomlar orasidagi potensial energiyaning masofaga bog'liqligi.

Aytaylik, jismning biror zarrasi tashqi kuch ta'sirida $x = x_0$ muvozanat holatidan Δx masofaga siljidi. U holda uning potensial energiyasining o'zgarishi

$$U(\Delta x) = U(r) - U(r_0) \quad (4.9)$$

bo'ladi. Bu energiya deformatsiyaning potensial energiyasi hisoblanadi. So'nggi (4.9) ifodani x ning darajasi bo'yicha Teylor qatoriga yoyib chiqamiz:

$$U(\Delta x) = \left(\frac{\partial U}{\partial r} \right)_0 \Delta x + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \right)_0 (\Delta x)^2 + \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 U}{\partial r^3} \right)_0 (\Delta x)^3 + \dots \quad (4.10)$$

Ushbu qatorda birinchi had zarraning 3.1-rasmda (III Bob) tasvirlangan zarraning muvozanat holatini belgilovchi A nuqtasiga tegishli bo'lib, muvozanat holatda u nolga teng. (4.10) qatorning kvadratlil hadi bilan chegaralanib, yuqori tartibli hadlarini kichik bo'lganligi uchun tashlab

yuboramiz. Natijada deformatsiyaning potensial energiyasi quyidagicha bo‘ladi:

$$U(\Delta x) \approx \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \right)_0 (\Delta x)^2 = \frac{1}{2} g (\Delta x)^2, \quad (4.11)$$

bunda potensial energiyaning ikkinchi tartibli hosilasi jismning elastiklik koeffitsientiga mos kelmoqda. Demak, deformatsiya energiyasi deformatsiya natijasidagi mutlaq siljishning kvadratiga proporsional ekan. Uning grafigi esa paraboladir. 4.6-rasmdagi grafikda u shtrix bilan belgilangan.

Deformatsiyaning energiyasini boshqa sodda yo‘l bilan ham chiqarish mumkin. Energiyaning saqlanish qonuniga ko‘ra, jismni deformatsiyalagan tashqi kuchning bajargan ishi jismning deformatsiya tufayli olgan ichki energiyasiga aylanadi. Aytaylik, ma’lum bir vaqt davomida noldan biror F maksimal qiymatgacha o‘zgarib borgan kuch sterjenning markaziy absissa o‘qi bo‘ylab ta’sir etib, uning o‘lchamini Δx miqdorga o‘zgartirdi. Bu kuchning bajargan ishi

$$A = F_{o'r.} \times \Delta x \quad (4.12)$$

bo‘ladi. Kuch noldan biror maksimal qiymatgacha o‘zgarib borganligi uchun uning o‘rtacha qiymati $F_{o'r.} = F/2$ bo‘ladi. Bunga ko‘ra, ifoda (4.12) quyidagicha bo‘ladi:

$$A = F \times \Delta x / 2. \quad (4.13)$$

(4.3) ifodada L ni x ga, ΔL ni Δx ga almashtirib ushbu ifodadan va (4.2) va (4.7) ifodalardan foydalanib, (4.13) ifoda uchun quyidagi tenglikni olamiz:

$$A = \frac{1}{2} \left(\frac{ES}{x} \right) \times \Delta x^2 = U(\Delta x) = \frac{1}{2} g (\Delta x)^2. \quad (4.14)$$

Shunday qilib, tashqi kuchning bajargan ishi energiyaning saqlanish qonuniga ko‘ra, jism deformatsiyasining potensial energiyasiga aylanadi. Deformatsiya energiyasi jismning butun hajmi bo‘yicha taqsimlangan. Hajm birligiga to‘g‘ri keluvchi energiya **elastiklik energiyasining hajmiy zichligini** beradi. Uni topish uchun (4.14) ifodadan foydalanamiz:

$$w = \frac{U(x)}{V} = \frac{1}{2} \left(\frac{ES}{Vx} \right) \times \Delta x^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{ES}{Sx \times x} \right) \times \Delta x^2 = \frac{1}{2} E \varepsilon^2. \quad (4.15)$$

(4.7) Guk qonunidan foydalanib, deformatsiya energiyasining hajmiy zichligi uchun yana quyidagi formulani olamiz:

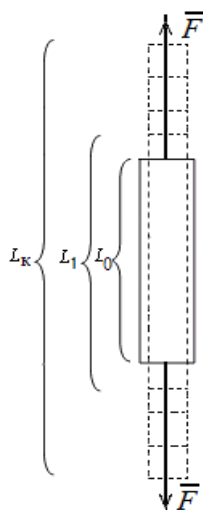
$$w = \frac{1}{2} \sigma \varepsilon.$$

4.5. Haqiqiy va shartli deformatsiyalar. Deformatsiyada superpozitsiya prinsipi

4.2 paragrafda kuchlanish haqiqiy va shartli bo'lishligini aytib o'tgan edik. Kuchlanish singari **deformatsiya** ham **haqiqiy** va **shartli** bo'ladi. **Shartli nisbiy deformatsiyani** (cho'zilish va siljishni) xarakterlovchi kattalik (4.3) ifoda bilan aniqlanuvchi nisbiy uzayishdir. **Haqiqiy nisbiy deformatsiyani** hisoblashda jismning (sterjenning) o'zgarmas boshlang'ich L uzunligini emas, deformatsiya jarayonida o'zgarib boruvchi uzunligi hisobga olinadi. Masalan, tashqi kuch ta'siridagi deformatsiya natijasida namuna - silindrning uzunligi L_0 dan L_k qadar uzaydi (o'zgardi) deylik (4.7 –rasm). U vaqtda namunaning butun deformatsiya davomidagi cho'zilishini alohida qismlarga bo'lishimiz mumkin. Namuna avval L_1 , keyin L_2 , L_3 va hakazo uzunliklarga uzayadi. U vaqtda natijaviy nisbiy cho'zilish quyidagicha bo'ladi:

$$e = \frac{L_1 - L_0}{L_0} + \frac{L_2 - L_1}{L_1} + \frac{L_3 - L_2}{L_2} + \dots + \frac{L_k - L_{k-1}}{L_{k-1}}. \quad (4.16)$$

Agar uzayishni juda mayda bo'laklarga bo'lsak, haqiqiy nisbiy uzayishni



4.7-rasm. Namuna – silindrning cho'zilish deformatsiyasidagi uzayishlari.

(deformatsiyani) topish uchun (4.16) ifodani integral bilan almashtirish mumkin:

$$e = \int_{L_0}^{L_k} \frac{dL}{L} = \ln \frac{L_k}{L_0}. \quad (4.17)$$

Shartli va haqiqiy nisbiy deformatsiyalar turlicha aniqlangan holda ularning orasida bog‘lanish bor. Nisbiy uzayishning (4.3) formulasidan quyidagi tenglikni olamiz:

$$\varepsilon = \frac{L_k - L_0}{L_0} = \frac{L_k}{L_0} - 1 \text{ yoki } \frac{L_k}{L_0} = 1 + \varepsilon. \quad (4.18)$$

(4.18) ifodaga ko‘ra, haqiqiy nisbiy deformatsiyaning ifodasi (4.17) quyidagi ko‘rinishni oladi:

$$e = \ln(1 + \varepsilon). \quad (4.19)$$

Kichik deformatsiyalarda haqiqiy va shartli nisbiy deformatsiyalar orasidagi munosabatni topamiz. Haqiqiy deformatsiyani belgilovchi (4.19) ifodani qatorga yoysak quyidagi ko‘rinishga keladi:

$$\ln(1 + \varepsilon) = \varepsilon - \frac{\varepsilon^2}{2} + \frac{\varepsilon^3}{2} - \dots$$

Deformatsiya kichik bo‘lganligi uchun qatorning birinchi hadi bilan cheklanib, darajali hadlarini tashlab yubramiz. Natijada $e \approx \varepsilon$ ekanligi, ya’ni kichik deformatsiyalarda haqiqiy va shartli nisbiy deformatsiyalar teng bo‘lishi kelib chiqadi.

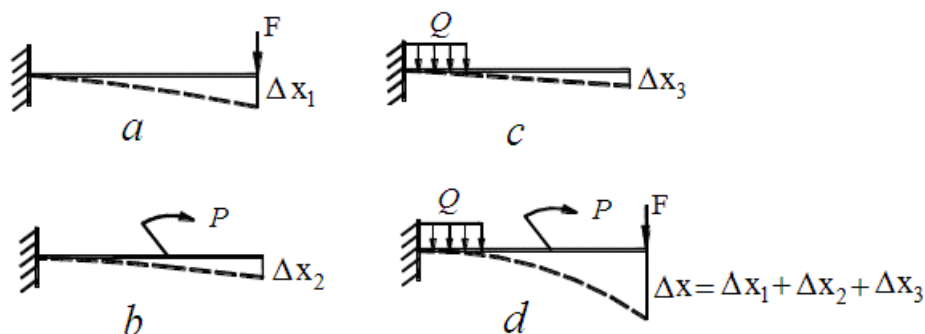
Materiallarni siqilishidagi va cho‘zilishidagi haqiqiy nisbiy deformatsiyalar o‘zaro teng bo‘lib, ishorasi bilan farq qilishini ko‘rsatish qiyin emas. Aksincha, cho‘zilishda va siqilishda nisbiy deformatsiyalar son miqdori bilan ham, ishorasi bilan ham farq qiladi. Haqiqiy nisbiy deformatsiyalar uchun **additivlik prinsipi** bajariladi. Aytaylik, namunani ikki bosqichda cho‘zamiz. Birinchi bosqichda L_0 dan L_n gacha, ikkinchi bosqichda L_n dan L_k gacha cho‘zamiz. U vaqtda natijaviy (to‘la) deformatsiya uchun quyidagi tengliklar o‘rinli bo‘ladi:

$$e_1 = \ln \frac{L_n}{L_0}; e_2 = \ln \frac{L_k}{L_n}; e_{nat.} = \ln \frac{L_n}{L_0} + \ln \frac{L_k}{L_n} = \ln \frac{L_k}{L_0} = e_1 + e_2. \quad (4.20)$$

Hozirgi misolni shartli nisbiy deformatsiya uchun ko'rsak, additivlik prinsipi bajarilmasligini ko'rish qiyin emas: $\varepsilon_{nat.} \neq \varepsilon_1 + \varepsilon_2$.

Haqiqiy deformatsiyalardagi additivlik prinsipi amaliyotda katta ahamiyatga ega. Masalan, metallarga bir necha bor bosim bilan ishlov berib, kerakli natijani olish uchun bajariladigan hisoblashlarni osonlashtiradi.

Kichik deformatsiyalarda, ya'ni deformatsiyalar tashqi kuchlarga proporsional bo'lgan hollarda deformatsiyalarning (ΔL mutlaq o'zgarishlarning) superpozitsiya prinsipi yoki ta'sir qilayotgan kuchlar ta'sirlarining mustaqillik prinsipi amal qiladi. **Superpozitsiya prinsipiga** ko'ra, agar jismga bir vaqtda bir nechta kuchlar ta'sir qilsa, u vaqtda natijaviy deformatsiya alohida kuchlarning mustaqil hosil qilgan deformatsiyalarining yig'indisiga teng. Masalan, biror balkaga absissa o'qi bo'yicha ta'sir qilayotgan F kuch, kuch momenti P va balka bo'ylab tekis taqsimlagan Q yuk hosil qilgan umumiy deformatsiya har bir alohida deformatsiyalarning yig'indisiga teng ekanligini ko'rish qiyin emas (rasm 4.8, a, b, c, d): $\Delta x = \Delta x_1 + \Delta x_2 + \Delta x_3$.



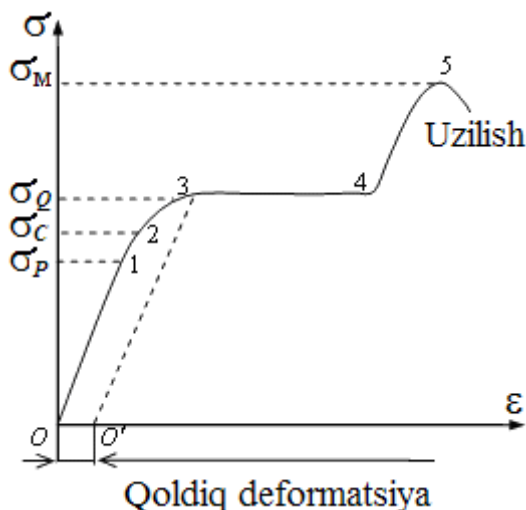
4.8 - rasm. Deformatsiyadagi superpozitsiya prinsipining sxemada ko'rinishi.

Superpozitsiya prinsipidan foydalanish amalda jismni har xil – statik, qisqa vaqt ta'sir qiluvchi yoki dinamik kuchlar ta'sirlariga qanday reaksiya berishini bashorat qilishga imkon beradi.

4.6. Qattiq jismning cho'zilish diagrammasi

Amaliyotda ichki mexanik kuchlanishning nisbiy uzayishga bog'lanish grafigini bilish kerak bo'ladi. Guk qonunini ifodalovchi (4.7) ifodadan foydalanib, ε nisbiy uzayishning tajriba orqali topilgan qiymatlariga mos keluvchi elastik deformatsiyalangan jismdagi σ normal kuchlanishni hisoblash va $\sigma = f(\varepsilon)$ bog'lanish grafigini chizish mumkin.

Bu grafik qattiq jismning **cho‘zilish diagrammasi** deyiladi. 4.9-rasmda metall namuna uchun cho‘zilish diagrammasining shartli sxemasi keltirilgan. Ushbu rasmdan ko‘rinib turibdiki, grafik 0-1 qismida koordinata boshidan o‘tuvchi to‘g‘ri chiziqdan iborat. Demak, grafikning bu qismiga to‘g‘ri keluvchi kuchlanishlarda jism deformatsiyasi elastik deformatsiya bo‘lib, Guk qonuni bajariladi, ya’ni normal kuchlanish



4.9-rasm. Metall namunalarga xos shartli cho‘zilish diagrammasi.

nisbiy uzayishga to‘g‘ri proporsional bo‘ladi. Grafikning Guk qonuni bajariladigan qismining yuqori (1) nuqtasiga mos keluvchi kuchlanish σ_P **proporsionallik chegarasi** deyiladi.

Jismga qo‘yilgan kuchning (nagruzkaning) keyingi ortishida grafikning 1-2 qismida garchi jismning elastikligi saqlansa ham σ kuchlanishning ε nisbiy uzayishga bog‘lanishi chiziqli bo‘lmay qoladi. Grafikning ushbu qismining yuqorigi 2 nuqtasiga mos keluvchi kuchlanish **elastiklik chegarasi** deyiladi va σ_C orqali belgilanadi. Odatda elastiklik chegarasi proporsionallik chegarasidan uncha katta farq qilmaydi (taxminan yuzdan bir foizi atrofida bo‘ladi). Kuchning elastiklik chegarasidan keyingi ortishida grafikning 2-3 nuqtalari orasida deformatsiya **qoldiq deformatsiya** bo‘ladi. Grafikning bu qismida ta’sir qilayotgan kuch olib tashlansa, hosil qilingan deformatsiya saqlanib qoladi.

Qoldiq deformatsiya chegarasidan keyin namuna o‘zgaras kuchlanishda uzaya boshlaydi. Bu hodisaga **materialning oquvchanligi** deyiladi. Grafikning 3-4 qismi materialning oquvchanligiga mos keladi. Qoldiq deformatsiyaning yuqori chegarasiga (nuqta 3 ga) mos keluvchi normal kuchlanish σ_Q **oquvchanlik chegarasi** deyiladi.

Oquvchanlik chegarasidan keyin jismning elastiklik xossasi ma'lum darajada tiklanadi va jism deformatsiyaga qarshilik ko'rsata boshlaydi. Bu jarayonga grafikning 4-5 qismi mos keladi. Normal kuchlanishning ma'lum bir maksimal qiymatidan keyin namunaning uzilishi sodir bo'ladi. Kuchlanishning bu maksimal qiymati (nuqta 5) **mustahkamlik chegarasi** (σ_M) deyiladi.

4.7. Qattiq jismlarda elastik uyg'onishning tarqalishi.

Bir o'lchamli bir jinsli torning tebranishi

Har qanday tutash elastik muhitda tashqi kuch ta'sirida elastik deformatsiyalar hosil bo'ladi. Qattiq jism, suyuqlik va gazlar tutash elastik muhitlardir. Tashqi ta'sir to'xtashi bilan bu deformatsiyalar ichki elastik kuchlar ta'sirida butunlay yo'qoladi. Jismning biror zarrasini muvozanat vaziyatidan chiqaruvchi tashqi kuch va zarrani muvozanat vaziyatiga qaytaruvchi ichki elastiklik kuchi ta'sirida jismning tashqi kuch ta'sir etgan nuqtasida **mexanik tebranish** yoki boshqacha aytganda **elastik uyg'onish (qo'zg'alish)** paydo bo'ladi. Jismning zarralari (atomlari) birlari bilan kuchli bog'langanligi uchun zarralaridan birining uyg'onishi qo'shni atomlarga uzatiladi. Ular o'z navbatida bu uyg'onishni uzining boshqa qo'shni atomlariga uzatadi va hakoza. Shu tariqa jismning biror nuqtasida paydo bo'lgan elastik uyg'onish jism zarralarining orasidagi kuchli ta'sirlashuv orqali jismda ma'lum bir tezlik bilan tarqaladi. Elastik uyg'onishning (tebranishning) muhitda tarqalish jarayoni **elastik** yoki **mexanik to'lqin** deb ataladi. 16-20000 *Hz* chastotalarga ega bo'lgan elastik to'lqinlar **tovush** yoki **akustik to'lqinlar** deyiladi. 16 *Hz* chastotadan kichik chastotali to'lqinlar **infratovushlar**, 20000 *Hz* chastotalardan katta chastotali to'lqinlar **ultratovushlar** deyilib, bu oxirgi ikki diapazondagi to'lqinlarni odamning eshitish organlari qabul qilmaydi.

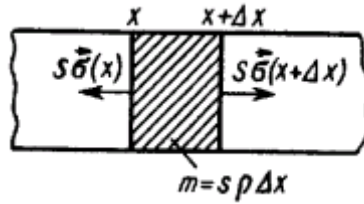
Elastik (bundan keyin mexanik) to'lqinlar bo'ylama va ko'ndalang to'lqinlarga bo'linadi. **Bo'ylama to'lqinlarda** muhit zarralarining tebranishi to'lqinning tarqalish yo'nalishida sodir bo'ladi. **Ko'ndalang to'lqinlarda** esa zarralarning tebranishi to'lqinning tarqalish yo'nalishiga ko'ndalang (perpendikulyar) yo'nalishda yuz beradi. Suyuqliklarda, gazlarda yoki gazsimon muhitlarda faqat bo'ylama to'lqinlar tarqaladi. Qattiq jismlarda bo'ylama to'lqinlar ham, ko'ndalang to'lqinlar ham tarqaladi. Mexanik to'lqinlarning muhim xususiyatlaridan biri ularning muhitda tarqalishida zarra (modda) uzatilmaydi. Yuguruvchi to'lqinlar tebranma harakatning energiyasini to'lqinning tarqalish yo'nalishida

elitadi.

Uch o'ldchovli kristallarda mexanik to'ldqinlarning tarqalish qonuniyatlarini o'rganish juda murakkab masala. Shuning uchun biz mexanik to'ldqinlarni tarqalish qonuniyatlarini elastik torda uning diskret strukturasini hisobga olmagan holda ko'ramiz. Ko'ndalang to'ldqinlarni zichligi ρ bo'lgan bir jinsli cheklanmagan torda tarqalishini ko'ramiz. Bunday torda uning har bir elementining tebranishi uzunligi bo'ylab sodir bo'ladi. Torning Δx qalinlikdagi elementiga quyidagi kuchlar ta'sir qiladi: (4.4) va (4.5) ifodalarga ko'ra, chapdan $S\sigma(x)$, o'ngdan $S\sigma(x+\Delta x)$, bunda S -torning ko'ndalang kesim yuzasi, $\sigma(x)$ - va $\sigma(x+\Delta x)$ -normal elastik kuchlanishlar (4.10-rasm). Δx elementga chap va o'ng tomondan ta'sir qilayotgan kuchlarning teng ta'sir etuvchisi F quyidagicha aniqlanadi:

$$F = S\sigma(x+\Delta x) - S\sigma(x). \quad (4.21)$$

Bu kuch ta'sirida qaralayotgan Δx element biror masofaga siljiydi.



4.10-rasm. Bir jinsli cheklanmagan torning bir qismi.

Elementning og'irlik markazining siljishining o'zgaruvchi koordinatasini x va ta'sir vaqtining funksiyasini $u(x, t)$ bilan belgilaymiz. Nyutonning ikkinchi qonuniga ko'ra, teng ta'sir etuvchi kuch F qaralayotgan elementga tezlanish beradi:

$$F = S\sigma(x+\Delta x) - S\sigma(x) = m \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}, \quad (4.22)$$

bunda m – elementning massasi, $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$ - tezlanish. Tor elementining massasi $m = \rho V = \rho S \Delta x$ bo'lganligi uchun (4.22) ifoda quyidagicha aniqlanadi:

$$\rho S \Delta x \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = S\sigma(x+\Delta x) - S\sigma(x). \quad (4.23)$$

(4.23) ifodani quyidagi ko'rinishda yozish mumkin:

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = (\sigma(x+\Delta x) - \sigma(x)) / \Delta x. \quad (4.24)$$

$\Delta x \rightarrow 0$ bo'lganda (4.24) formula quyidagi ko'rinishni oladi:

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma}{\partial x}. \quad (4.25)$$

Nuqtadagi nisbiy uzayishni $\varepsilon = \frac{\partial u}{\partial x}$ deb olsak, Guk qonunining (4.7)

ifodasi $\sigma = E \frac{\partial u}{\partial x}$ bo'ladi va quyidagi tenglama o'rinli bo'ladi: $\frac{\partial \sigma}{\partial x} = E \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$.

Bu ifodaga ko'ra, (4.25) quyidagi ko'rinishga keladi:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{E}{\rho} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \quad (4.26)$$

Ushbu (4.26) tenglama torning uzunligi bo'yicha tarqalayotgan elastik (mexanik) **to'lqin tenglamasidir**. Bu tenglamaning yechimi monoxromatik bo'ylama yuguruvchi gormonik (sinusoidal) to'lqin funksiyasi bo'ladi:

$$u = u_0 \exp[i(kx - \omega t)] = u_0 \sin 2\pi \left(\frac{x}{\lambda} - \nu t \right) = u_0 \sin(kx - \omega t), \quad (4.27)$$

bunda u_0 – tebranish amplitudasi, ν - tebranishlarining chiziqli chastotasi, $\omega = 2\pi\nu$ siklik chastota, t – vaqt, λ - to'lqin uzunligi, $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ - to'lqin soni.

(4.25) ko'rinishdagi yuguruvchi to'lqinning vaqt bo'yicha ham, fazo bo'yicha ham boshi ham, oxiri ham yo'q. Ammo real hollarda to'lqin garmonik bo'lmaydi va vaqt bo'yicha ham, fazoda (jism hajmida) cheklangan bo'ladi. Bunday to'lqinni chiziqli muhitda bir-birlariga boqliq bo'lmagan garmonik to'lqinlar sistemasiga ajratish mumkin. Bu prinsipni istalgan tabiatli to'lqinlarga tatbiq etish mumkin bo'lib, **to'lqinlarning superpozitsiya prinsipi** deyiladi.

Elastik tebranishlar manbadan tarqalar ekan, fazoning (jism hajmining) yangi-yangi qismlariga yetib boradi. Ma'lum bir t vaqt momentida tebranishlar yetib borgan nuqtalar to'plami **to'lqin fronti** deb ataladi. Bir xil fazalarda tebranayotgan nuqtalarning geometrik o'rinlari **to'lqin sirti** deyiladi. To'lqin sirtlarini sanoqsiz ko'p belgilash mumkin.

To‘lqin frontini esa ma’lum bir vaqt momentida faqat bitta o‘tkazish mumkin. (4.27) ifoda yuguruvchi yassi to‘lqin tenglamasidir. Chunki uning to‘lqin sirti ($kx - \omega t$) bir-birlariga parallel va x o‘qiga perpendikulyar tekisliklar to‘plamidir. Garmonik to‘lqinning tarqalish tezligi **fazaviy tezlik** deyiladi. U to‘lqin sirtining siljish tezligiga teng. Yassi gormonik to‘lqinning sharti ($kx - \omega t$) = sonst. Bu shartdan fazaviy tezlik kelib chiqadi:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\omega}{k} = v$$

(4.27) echimni (4.26) tenglamaga qo‘ysak, siklik chastotani to‘lqin soniga bog‘liqligini ko‘rsatuvchi **dispersiyaviy munosabatni** olamiz:

$$\omega = \sqrt{\frac{E}{\rho}} \times k = v_l k, \quad (4.28)$$

bunda v_l - bo‘ylama fazaviy to‘lqin tezligi bo‘lib, u

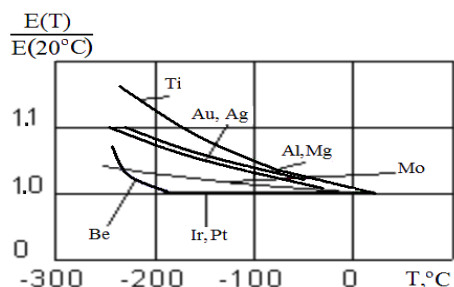
$$v_l = \sqrt{\frac{E}{\rho}} \quad (4.29)$$

tenglikdan aniqlanadi. (4.28) ifodaga ko‘ra, cheksiz uzunlikdagi bir jinsli torda tarqalayotgan tebranishning (mexanik to‘lqinning) chastotasi to‘lqin soniga chiziqli bog‘lanishda bo‘lar ekan. (4.29) formulaga ko‘ra, bo‘ylama to‘lqin yoki elastik uyg‘onish tezligi faqat jismning Yung moduliga va zichligiga bog‘liq ekan. Demak, aynan jism uchun bo‘ylama to‘lqin tezligi o‘zgarmas kattalik bo‘ladi.

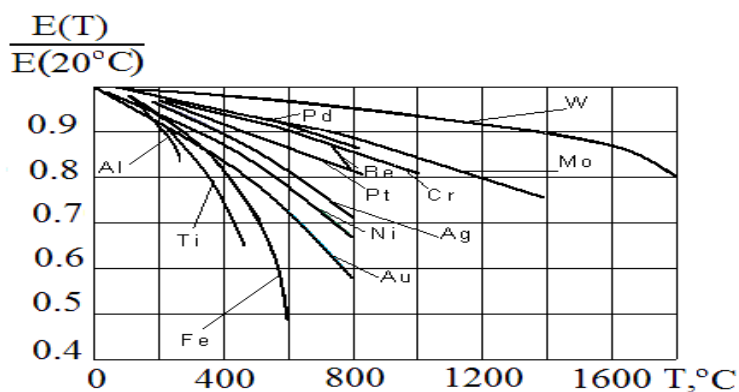
4.8. Qattiq jismlarda deformatsiyaning temperaturaga bog‘liqligi

Qattiq jismlarning mexanik xossalarining temperaturaga bog‘liqlik xarakteri bir xil toifadagi (klassdagi) materiallar uchun bir-birlariga yaqindir. Qattiq jismlarning temperaturaga ko‘proq sezgir bo‘lgan xossalari plastik deformatsiyaga qarshiligini xarakterlovchi kattaliklardir (qattiqlik, mustahkamlik chegarasi, oquvchanlik) va zarbaviy yopishqoqlikdir. Metallar va qotishmalarning mexanik xossalari temperaturaga bog‘liq holda kamroq o‘zgaradi. Aksincha metall bo‘lmagan materiallarning elastiklik moduli - 60 °C temperaturada 2 martadan ko‘proq kamayadi. 4.11- va 4.12 - rasmlarda ayrim materiallarning elastiklik modularining temperaturaga bog‘liq holda nisbiy o‘zgarishlari keltirilgan. Ushbu rasm-

lardan ko‘rinib turibdiki, umuman, qattiq jismlarning elastiklik moduli temperatura ortishi bilan kamayadi. Bunga sabab shuki, temperatura orti-



4.11-rasm. Ayrim metallarda Yung modulining past temperaturaga bog‘lanish grafigi.



4.12-rasm. Metallar Yung modulining yuqori temperaturalaridagi o‘zgarishi.

shi bilan jismning termik kengayishining ortishi natijasida atomlar orasidagi masofa ortadi. Bu esa elastiklik kuchlarining kamayishiga sabab bo‘ladi. Ushbu effektdan temperatura datchiklarida, termoelektrik relelarda va o‘lchov asboblari foydalaniladi.

Savollar va masalalar

1. Qattiq jism deformatsiyasi nima?
2. Deformatsiyalarning qanday turlarini bilasiz?
3. Qattiq jismda ichki mexanik kuchlar va kuchlanish nima?
4. Guk qonuni qanday qonun va qanday deformatsiyalar uchun bajariladi?
5. Qanday deformatsiyalar kichik deformatsiyalar deyiladi?
6. Yung moduli nima va uning fizikaviy ma'nosi nimani bildiradi?
7. Puasson koeffitsiyenti nima?
8. Elastik kuchlar qanday kuchlar?
9. Jismning elastiklik xarakteristikalari (Yung moduli, kuchlanish) uning fizikaviy holatlariga (masalan, temperaturaga) qanday bog'lanishda?
10. Deformatsiya hodisasi qattiq jismlarning atomistik tuzilishi nuqtai nazaridan qanday tushuntiriladi?
11. Deformatsiyada superpozitsiya prinsipi qanday prinsip?
12. Haqiqiy va shartli nisbiy deformatsiyalar nima?
13. Haqiqiy va shartli nisbiy deformatsiyalar orasida qanday bog'lanish bor?
14. Additivlik prinsipi qanday deformatsiyalar uchun bajariladi?
15. Siljish deformatsiyasida nisbiy siljish qanday aniqlanadi?
16. Deformatsiyaning potensial energiyasi qanday aniqlanadi?
17. Cho'zilish diagrammasi nima?
18. Materiallarning mustahkamlik chegarasi nima?
19. Deformatsiyada proporsionallik chegarasi deb nimaga aytiladi?
20. Deformatsiyada oquvchanlik chegarasi nima?
21. Qattiq jismlarda elastik uyg'onishning tarqalishi qanday sodir bo'ladi?
22. Elastik uyg'onishning qattiq jismda tarqalishi nima deb ataladi?
23. Qanday to'lqinlarga garmonik to'lqinlar deb ataladi?
24. To'lqin fronti nima?
25. To'lqin sirti nima?
26. Qattiq jismlarda to'lqinning tarqalish tezligi jismning qanday parametrlariga bog'liq?
27. Diametri 1 mm , uzunligi 2 m bo'lgan po'lat simga 5 kg massali yuk qo'yilgan. Po'lat simda paydo bo'lgan mutlaq va nisbiy uzayishni, shuningdek, mexanik kuchlanishni toping.
Javob. $\sigma = 6.2 \times 10^7\text{ Pa}$, $\varepsilon = 3.1 \times 10^{-4}$, $\Delta L = 6.2 \times 10^{-4}\text{ m} = 0.62\text{ mm}$.

28. Uzunligi 5 m, ko'ndalang kesim yuzi 2.5 mm^2 bo'lgan sim 100 N kuch ta'sirida 1 mm ga uzaydi. Simdagi kuchlanishni va Yung modulini toping.

Javob. $\sigma = 4 \times 10^7 \text{ Pa}$, $E = 2 \times 10^8 \text{ Pa}$.

29. Ixtiyoriy (chekli) uzunlikdagi sterjenni cho'zganda uzunligi 2 marta ortti, siqilganda esa 2 marta kamaydi. Siqilishdagi va cho'zilishdagi haqiqiy va shartli nisbiy deformatsiyalarni hisoblang.

Javob. Cho'zilishda: shartli nisbiy deformatsiya $\varepsilon = 1$, haqiqiysi $e = +0.69$.

Siqilishda: shartlisi $\varepsilon = -0.51$, haqiqiysi $e = -0.69$.

30. Temir sterjenda elastik to'liqinning tarqalish tezligini toping. Temir uchun $E = 2.1 \times 10^{11} \text{ Pa}$, $\rho = 7.8 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$.

Javob. $v = 5.2 \times 10^3 \text{ m/sek}$.

V. QATTIQ JISMLARDAGI ISSIQLIK HODISALARI

5.1. Kristall panjarasi atomlarining issiqlik harakati

Kristallar panjarasini tasvirlaganda uning tashkil etgan atomlarini (ionlarini yoki molekulalarini) muayyan koordinatalarga ega zarralar sifatida tasvirlanadi. Vaholanki, ular ma'lum bir ideal vaziyat atrofida tinimsiz tebranib, issiqlik harakatida bo'ladilar. Kristall atomlarining bu issiqlik tebranma harakatlarining amplitudasi ko'pchilik kristallar uchun $0.1 \text{ \AA}$ atrofida bo'lishi aniqlangan. Bu kattalik qo'shni atomlar muvozanat vaziyatida bo'lgandagi ular orasidagi masofaning 5 - 7 foizini tashkil etadi. Molekulyar kristallarda issiqlik tebranishlari molekulalarning aylanma tebranishlari va molekulalar ichidagi atomlarning tebranishlari tufayli yana ham murakkablashadi. Har qanday murakkab tebranishlarni davrli sinusoidal to'lqinlar yig'indisi sifatida tasvirlash mumkin. Shuning uchun kristallda sinusoidal (**garmonik**) ko'ndalang va bo'ylama to'lqinlar sistemasi **turg'unlashadi** deb qarash mumkin. Bu metod **Fure metodi** deyiladi. Kristallardagi zarralarning har birining tebranma harakati alohida emas (bu amalda mumkin emas), balki ularning butun kristalldagi kollektiv harakati o'rganiladi. Har bir elementar yacheykasida n ta atomi bo'lgan N_0 ta elementar yacheykadan tashkil topgan kristalldagi bunday turg'un to'lqinlar soni $(3N_0n - 6)$ ga teng bo'lib, ular panjaraning **normal (odatdagi) tebranishlari** yoki **tebranishlar modasi** deyiladi. 3 soni har bir tebranayotgan zarraning erkinlik darajasi, 6 esa kristallning bir butun holidagi uchta ilgarilama va uchta aylanma harakatlarining erkinlik darajasi bo'lib, ular tebranma harakatlar erkinlik darajasidan ayirib tashlanadi. Ammo 1 sm^3 hajmda $10^{22} - 10^{23}$ ta atom bo'lganligi, binobarin, $3N_0n \gg 6$ bo'lganligi uchun kristalldagi turg'un to'lqinlar sonini $3N_0n = 3N$ soniga teng deb olish mumkin. Har bir to'lqin o'zining tebranish amplitudasi va energiyasiga ega.

Albatta issiqlik tebranishi amplitudasi kristall yoki qattiq jism temperaturasiga bog'liq. Temperatura ortishi bilan issiqlik tebranishi amplitudasi ortib borib, yetarlicha yuqori temperaturalarda shu darajaga yetadiki, qattiq jismning erish hodisasi kuzatiladi. Qattiq jismlar atomlarining muvozanat vaziyati atrofidagi issiqlik tebranishi harakatlari absolyut (mutlaq) nol temperaturada ham to'xtamasligi isbot etilgan. Bu tebranishlar **nolinchi tebranishlar** deyiladi. Bu tebranishlar temperatura mutlaq nol temperaturadan ortib borishi bilan paydo bo'ladigan issiqlik tebranma harakatiga to'erish temperaturasigacha o'zgarmas mustaqil katta-

lik sifatida qoʻshilib boraveradi. Bu tebranishlar energiyasi turli kristallar yoki qattiq jismlar uchun turli kattalikka ega boʻlib, bu jismning energiyaviy xarakteristikalariga va jismni tashkil etgan atomlarning tabiatiga bogʻliq.

Qattiq jismni tashkil etgan atomlarning yoki molekulalarning (bundan keyin zarralarning) tebranma harakati juda murakkab jarayondir. Gap shundaki, jismdagi har bir zarra fazoning uch yoʻnalishida boshqa zarralar bilan kvazielastik kuchlar bilan bogʻlangan boʻladi. (Aks holda qattiq jism oʻz shaklini saqlamagan boʻlar edi). Natijada har bir zarraning issiqlik tebranishlari erkin boʻlmay, juda murakkab xarakter kasb etadi. Kristalldagi qoʻshni zarralar orasidagi masofalar turli yoʻnalishda turlicha va ular orasidagi oʻzaro taʼsir kuchlari ham turlichadir. Biron zarraning tebranishi boshqa zarralar orqali butun kristall boʻyicha mexanik toʻlqin sifatida tarqaladi. Bu boʻylama va koʻndalang toʻlqinlar kristall sirtiga qadar tarqalib borib, qaytadi. Qaytgan toʻlqinlar sirtga borayotgan toʻlqinlar bilan qoʻshilib, parametrlari kristallning oʻlchami va elastiklik xossalariga bogʻliq boʻlgan diskret turgʻun toʻlqinlarning murakkab sistemasini hosil qiladi. Kristalldagi issiqlik elastik toʻlqinlar mexanizmi tovush toʻlqinlarining mexanizmiga oʻxshash boʻlganligi uchun ularni **akustik toʻlqinlar** deb ataydilar. Issiqlik toʻlqinlarining diapazoni tovush toʻlqinlarining ($10^2 \div 10^3$) Hz dan 10^{13} Hz gacha boʻlgan diapozoniga toʻgʻri keladi. Kristallardagi issiqlik toʻlqinlarining tarqalish tezligi tovush toʻlqinlarining tarqalish tezligi bilan mos tushadi. Kristalldagi issiqlik tebranishi toʻlqinlarining energiyasi elektromagnit toʻlqinlari energiyasi kabi kvantlangan boʻladi. Shuning uchun akustik toʻlqinlar energiyasining “kvant”i sifatida yorugʻlik kvanti fotonga qiyoslanib, **fonon** qabul qilingan. Qattiq jismlardagi hosil boʻladigan istalgan bir n -turgʻun toʻlqin (fonon) energiyasi

$$\varepsilon_n = (n + \frac{1}{2})h\nu, \quad (5.1)$$

ifoda bilan aniqlanadi, bunda h – Plank doimiysi, ν - kristallning elastikligiga va zarraning massasiga bogʻliq boʻlgan tebranish chastotasi, $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ qiymatlar qabul qiladi. $n = 0$ boʻlgan hol **nolinchi tebranishlar energiyasiga** toʻgʻri keladi. Bundan kelib chiqadiki, kristalldagi turgʻun toʻlqinlar sistemasining energiyasi kvantlangan boʻlib, faqat diskret qiymatlar qabul qilishi mumkin. Butun kristalldagi $3N$ normal tebranishlarining energiyasining ifodasi

$$E = \sum_0^{3N} \varepsilon_n, \quad (5.2)$$

ko‘rinishda bo‘ladi.

Fononlar **kvazizarralar** oilasiga mansub. Ammo fononlar boshqa xil zarralar bo‘lgan o‘tkazgich elektronlari, fotonlar, “kovak”lar kabilar-dan farqli holda vakuumda mavjud bo‘la olmaydi. Fononning mavjud bo‘lishi uchun albatta biror moddiy muhit bo‘lishi shart bo‘lib, ular kris-tall panjarani hosil qilgan, o‘zaro ta’sirlashuvchi kuchlar bilan bog‘lan-gan zarralar sistemasida harakat impulsini tashuvchi kvazizarralardir.

Kristallardagi har bir zarra turg‘un to‘lqinlarning tuguni yoki cho‘qqisiga to‘g‘ri keladi. Demak, kristalldagi eng kichkina to‘lqin uzun-lilik quyidagi tenglikdan topiladi:

$$\lambda_{\min} = 2a, \quad (5.3)$$

bunda a – panjaradagi qo‘shni ikki atom orasidagi masofa (panjara doimiysi). Bu to‘lqin uzunlikka kristall panjarasidagi atomlar tebranish-larining maksimal chastotasi mos keladi:

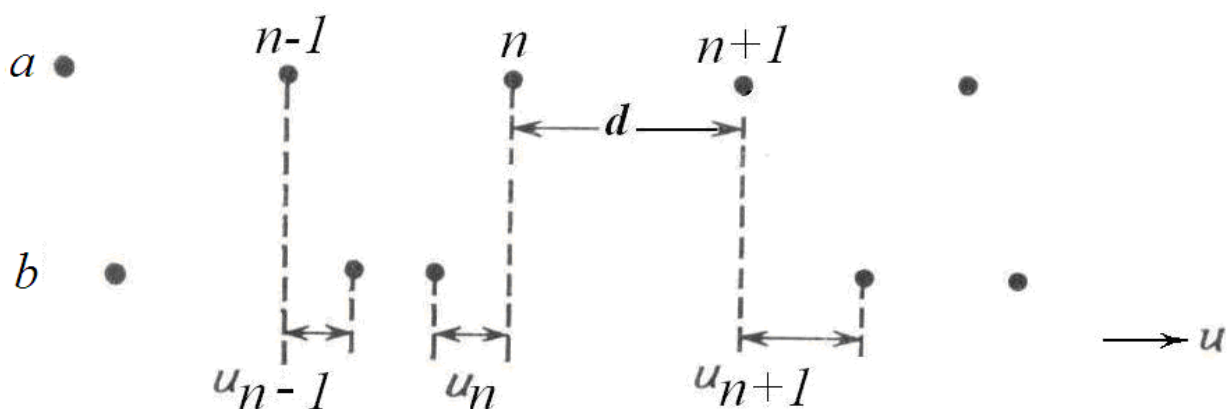
$$\omega_{\max} = 2\pi\nu/\lambda_{\min} = \pi\nu/a \quad (5.4)$$

bunda ν - to‘lqinning (tovushning) tarqalish tezligi. Oxirgi ifodadan ko‘rinib turibdiki, maksimal chastota faqat kristall atomlari orasidagi masofaga va normal to‘lqinlarning tarqalish tezligiga bog‘liq bo‘lib, ayni kristallda muayyan temperaturada o‘zgarmas kattalikdir. Bu xulosalarga nazariy hisoblashlar orqali ham kelish mumkin. Faraz qilamiz, bir-biridan davriy a masofada joylashgan M massali atomlardan tashkil top-gan cheklanmagan uzunlikdagi kristall qatorini ko‘raylik. (5.1-rasm). Aytaylik, faqat qo‘shni atomlarga o‘zaro ta’sirlashadi va ular orasida kvazielastik kuchlarga mavjud. U holda istalgan n -atomning harakat tenglamasi quyidagicha bo‘ladi:

$$M\ddot{u}_n = -g(u_n - u_{n-1}) - g(u_n - u_{n+1}) = g(u_{n-1} + u_{n+1} - 2u_n), \quad (5.5)$$

bunda g - kristallning kvazielastiklik koeffitsiyenti. Bu tenglamaning ye-chimi quyidagi yuguruvchi to‘lqin ko‘rinishida bo‘ladi:

$$u_n(t) = \exp(-i(\omega t - kna)), \quad (5.6).$$



5.1- rasm. Aynan bir xil atomlarning chiziqli qatori:
a- muvozanat vaziyatlarida, *b*-muvozanat vaziyatlaridan siljigan hol.

bunda $k = 2\pi/\lambda$ - to'liq soni, n - butun sonlar bo'lib, na - a davrli kristallning diskret davriy strukturasi tufayli hosil bo'ladigan had. Bu yassi to'liq ifodasi (5.5) tenglamaning yechimi bo'lishi uchun quyidagi shart bajarilishi zarur:

$$M\omega^2 = 4g\sin^2 \frac{ka}{2}. \quad (5.7)$$

Bu shartdan

$$\omega = 2\sqrt{\frac{g}{M}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right| \quad (5.8)$$

normal tebranishlar chastotasini to'liq soniga bog'liq ekanligi kelib chiqadi. Bu qonun **dispersiya** qonuni deyiladi. Oxirgi shartdan maksimal chastota uchun

$$\omega_{\text{maks}} = \sqrt{\frac{g}{M}} \quad (5.9)$$

qiymatni olamiz, bunda $\sqrt{\frac{g}{M}}$ - klassik garmonik ossillyatorning chastotasidir. Demak, kristallardagi normal tebranishlar uchun tebranishlarning maksimal chastotasi klassik garmonik ossillyatorning chastotasidan 2 marta katta ekan. (5.8) va (5.9) ifodalardan foydalanib, normal tebranishlar chastotasi uchun quyidagi ifodani olamiz:

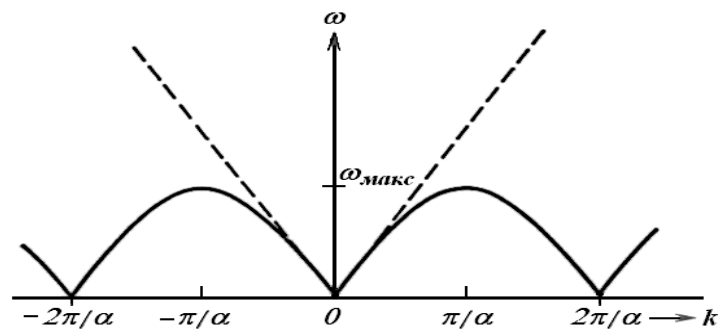
$$\omega = \omega_{\text{maks}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|. \quad (5.10)$$

Ushbu (5.10) ifodadan to'liq soni k ning davri $2\pi/a$ ekanligi kelib

chiqadi. Demak, qarayotgan tebranishlarni o'rganish uchun $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$ intervalni olish yetarli bo'ladi. Maksimal $k_{\text{maks}} = \pi/a$ to'lqin soniga minimal to'lqin uzunligi to'g'ri keladi:

$$\lambda_{\text{min}} = 2\pi/k_{\text{maks}} = 2a.$$

Shunday qilib, tor tebranishining uzluksiz spektridan farqli holda, kristall panjaraning tebranishi panjara doimiysi tartibidagi eng qisqa to'lqin uzunligiga ega bo'lar ekan. Kristallardagi normal tebranishlar chastotasining (5.10) ifoda bilan to'lqin soniga $\omega=f(k)$ ko'rinishida bog'lanishi, ya'ni **dispersiyasi** grafik ravishda 5.2-rasmda tasvirlangan. Shtrix to'g'ri chiziq tutash muhit nazariyasidan kelib chiqadigan siklik chastotaning to'lqinning tarqalish tezligi v bilan $\omega=kv$ chiziqli bog'lanishini ifodalaydi. 5.2-rasmdan ko'rinishicha, kristalldagi normal tebranishlar chastotasi ma'lum bir kichik to'lqin sonlarida dispersiya

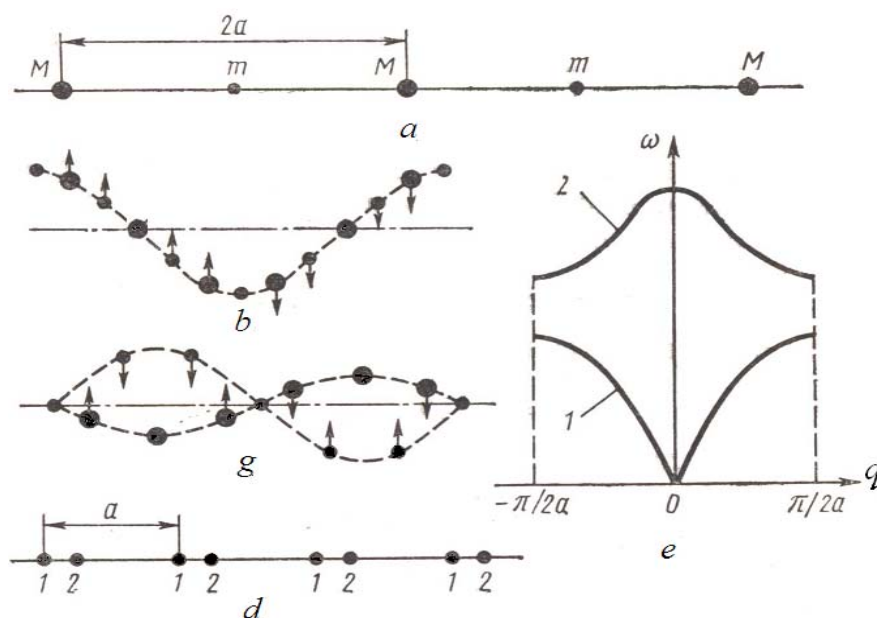


5.2-rasm. Bir xil atomlardan tashkil topgan chiziqli zanjirdagi $\omega(k)$ dispersiya grafigi.

chizig'i $\omega=kv$ to'g'ri chizig'i bilan ustma-ust tushadi, so'ngra chiziqli bog'lanishdan chetlanish kuzatiladi. Demak, kichkina k larda, ya'ni katta to'lqin uzunliklarda kristallning diskretligi ahamiyatsiz bo'lib qoladi va unda to'lqinlar tutash muhitdagidek doimiy tezlik bilan tarqaladi, ω chastota esa to'lqin soni k ning o'sishi (to'lqin uzunligining esa kamayishi) bilan chiziqli o'sadi. Bu to'lqinlarning tarqalish qonunlari qattiq jismlardagi tovush to'lqinlarining tarqalish qonunlariga mos tushganligi uchun **akustik to'lqinlar** deyiladi. Ular atomlar zanjirining tovush chastotali tebranishlarini butunlay qamrab oladi. Bu to'lqinlar kristallning issiqlik xossalarini (issiqlik sig'imi, issiqlik o'tkazuvchanligi, issiqlikdan kengayishi va shu kabi xossalarini) hosil qilishda asosiy

rol o'ynaydi. Ammo k ning qiymati ortib (to'lqin uzunligi kamayib) borishi bilan chiziqli chastotani to'lqin soniga chiziqli bog'lanishidan chetlanish kuzatilib, hatto ω chastotaning kamayishi kuzatiladi (5.2 – rasm).

Kristallarda akustik to'lqinlardan tashqari yorug'lik to'lqinlari kristall bilan ta'sirlashganda sodir bo'ladigan jarayonlarda asosiy rol o'ynovchi **optikaviy to'lqinlar** ham mavjud bo'ladi. Kristalldagi akustik va optik to'lqinlar haqida yaqqolroq tasavvur hosil qilish uchun kristall panjarada bir-biri bilan ketma-ket tartibli joylashgan katta M va kichik m massali atomlar qatorini qaraymiz (5.3-rasm, *a*). Bunday zanjirda ikki xil normal tebranishlar - akustik va optikaviy tebranishlar vujudga kelishi mumkin. Bu tebranishlar 5.3-rasmning *b* va *g* qismlarida aks ettirilgan.



5.3-rasm. Atomlar zanjirida akustik va optikaviy to'lqinlarni paydo bo'lishi.

Agar kristalldagi qo'shni atomlar 5.3, *g* - rasmda ko'rsatilgandek qarama-qarshi fazada tebranishsa, bunday tebranishlarni **optikaviy tebranishlar** deyiladi. Bunday deyilishiga sabab kristallardagi bu to'lqinlarni elektromagnit to'lqinlar orqali uyg'otish mumkin va yorug'-likning kristallardagi absorbsiyaviy spektrida, ya'ni optikaviy usul bilan kuzatish mumkin. 5.3 - rasmda akustik (egri chiziqli 1) va optik (egri chiziqli 2) to'lqinlar uchun dispersiya egri chiziqlari taqoslangan. Optikaviy normal tebranishlar uchun ham dispersiya hodisasi xos. Bunda akustik to'lqinlarning aksicha optik to'lqinlarda to'lqin soni $k = 0$ bo'lganda ω_{maks} kuzatiladi, k ning qiymati o'sishi bilan uning chastotasi kamayib

borib, $k_{\text{maks}} = \pi/2a$ da minimal qiymatga erishadi (5.3, e -rasm). Odatda optikaviy tebranishlar chastotalari polosasi akustik tebranishlar chastotalaridan yuqorida yotadi va ular orasida taqiqlangan zona mavjud. Ammo ayrim hollarda bu zonalarining qo‘shilishi kuzatiladi. Shunday kristallar mavjudki, ularning optikaviy tebranishlar chastotasi tashqi sharoitlarga (bosimga, temperaturaga, magnit maydoniga va boshqa omillarga) bog‘liq. Ba‘zan bu parametrlarning ma‘lum bir qiymatlarida optikaviy tebranishlar chastotasi nol bo‘lib qoladi. Buning natijasida panjaraning elementar yacheykasi statik deformatsiyaga uchrab, boshqa simmetriyaga o‘tishi, ya’ni kristallning faza (holat) o‘zgarishi kuzatiladi.

Kristallardagi to‘lqin uzunliklari akustik to‘lqinlarga mos keluvchi fononlar **akustik fononlar** deyilib, optikaviy to‘lqinlarga mos keluvchi fononlar **optikaviy fononlar** deb ataladi. Kristall panjaraning tebranishlarining tarqalishiga ulardagi nuqsonlar sezilarli ta’sir ko‘rsatadi. Nuqtaviy nuqsonlar panjarani lokal buzilishga olib keladi va lokal (mahalliy) tebranishlarga olib kelishi mumkin. Bu tebranishlar chastotasi nuqsonsiz panjaraning tebranishlar chastotasining taqiqlangan zonasiga to‘g‘ri kelib qolishi mumkin. Nuqtaviy nuqsonli kristallarning tebranishlari yassi to‘lqin bo‘lmaydi. Ular markazi nuqsonda bo‘lib, yo nuqsonga yaqinlashuvchi, yo nuqsondan uzoqlashuvchi sferik to‘lqinlar ko‘rinishidagi tebranishlar bo‘ladi. O‘lchami katta nuqsonlar bo‘lganda o‘ziga xos lokallashgan tebranishlar paydo bo‘lishi mumkin. Dislokatsiyalar bo‘ylab tarang tortilgan torning egilish to‘lqinlari tipidagi tebranishlar tarqalishi mumkin.

5.2. Qattiq jismlarning issiqlik sig‘imi

Qattiq jismning issiqlik sig‘imi uning muhim xarakteristikalaridan biri bo‘lib, uning mukammal nazariyasi birdaniga yaratilgan emas. Birlik massaga ega bo‘lgan jismning temperaturasini bir gradusga ko‘tarish uchun kerak bo‘lgan Q issiqlik miqdori shu jismning **issiqlik sig‘imi** deb ataladi, ya’ni:

$$C = dQ/dT. \quad (5.11)$$

Aksincha, jism temperaturasini bir gradusga sovutish uchun undan bir gradusga to‘g‘ri kelgan issiqlik miqdorini olish kerak. Jismning issiqlik sig‘imi unga issiqlik uzatish shart-sharoitlariga qarab har xil bo‘lishi mumkin. Issiqlikni uzatishning mumkin bo‘lgan turli variantlaridan chegaraviylari, amalda ko‘p ishlatiladigani, ikki xildir: o‘zgarmas

hajmdagi - C_V va o'zgarmas bosimdagi - C_P issiqlik sig'implari. Faqat kengayish hisobiga ish bajaradigan istalgan sistema uchun C_V va C_P sig'implar orasidagi bog'lanishni keltirib chiqaramiz. Aytaylik, jism o'zgarmas bosimda qizdirilmoqda. Termodinamikaning birinchi qonuniga ko'ra jismga uzatilgan issiqlik miqdori quyidagicha aniqlanadi:

$$dQ = dU + PdV. \quad (5.12)$$

bunda ichki energiya U tashqi omillarni xarakterlovchi parametrlarning va hajmning funksiyasidir, oddiy sistema uchun esa temperatura va hajmning funksiyasidir: $U = f(T, V)$. U vaqtda ichki energiyaning va issiqlik miqdorining o'zgarishi uchun quyidagi tenglikni yozish mumkin:

$$\begin{aligned} dU &= \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V dT + \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T dV, \\ dQ &= \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V dT + \left[\left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T + P \right] dV \text{ va} \\ dQ/dT &= \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V + \left[\left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T + P \right] \frac{dV}{dT}. \end{aligned} \quad (5.13)$$

Jjism deformatsiyalanmaydigan hajmga ega deb faraz qilamiz. Bu holda jism olgan issiqligi hisobiga mexanik ish bajara olmaydi. O'zgar-mas hajmda $V = \text{const}$ va $\frac{dV}{dT} = 0$ bo'lganligi uchun bu holda (5.11) - (5.13) ifodalarga ko'ra issiqlik sig'imi quyidagicha bo'ladi:

$$C_V = \delta Q_V/dT = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V. \quad (5.14)$$

Bosim o'zgarmas ($P = \text{const.}$) bo'lgan hol uchun issiqlik sig'imi (5.12), (5.13) va (4.14) ifodalarga ko'ra quyidagicha aniqlanadi:

$$C_P = \delta Q_P/dT = C_V + \left[\left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T + P \right] \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P. \quad (5.15)$$

Oxirgi ifodadan istalgan oddiy sistemalar uchun

$$C_P - C_V = \left[\left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T + P \right] \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P \quad (5.16)$$

tenglik to'g'ri ekanligi kelib chiqadi. (5.16) tenglikning o'ng tomoni musbat kattalik bo'lganligi uchun o'zgarmas bosimdagi issiqlik sig'imi o'zgarmas hajmdagi issiqlik sig'imidan katta bo'ladi: $C_P > C_V$.

O'zgarmas hajmdagi C_V va o'zgarmas bosimdagi C_P issiqlik sig'imlari gazlar uchun bir-birlaridan ancha farq qiladi. Ideal gazlar uchun ularning ichki energiyasi faqat temperaturaga bog'liq bo'lganligi uchun $\left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T = 0$ bo'ladi. 1 mol ideal gaz uchun holat tenglamasi $PV=RT$ ekanligi ma'lum (R – gazning universal doimiysi). Bundan

$$\left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P = \frac{R}{P} \quad (5.17)$$

ekanligi kelib chiqadi. (5.17), (5.16) tenglamalardan va $\left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T = 0$ shartidan ideal gazlar uchun Mayer tenglamasi kelib chiqadi:

$$C_P - C_V = \left(P \frac{R}{P} \right)_P = R.$$

Real gazlar uchun $C_P - C_V > R$ shart bajariladi. Shu bilan birga, gazning bosimi qancha katta bo'lsa, issiqlik sig'imlarining farqi R miqdordan shuncha katta bo'ladi.

Moddalarning kondensatsiyalangan holati uchun C_P va C_V kattaliklar orasidagi bog'lanishni termodinamikaning differensial tenglamalaridan foydalanib chiqarish mumkin. Bu bog'lanish quyidagicha bo'ladi:

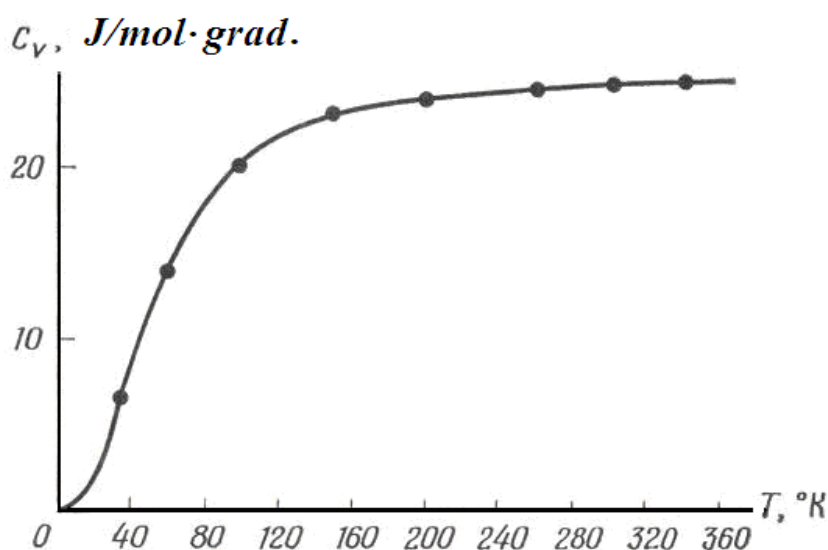
$$C_P - C_V = T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V = -T \frac{\left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P^2}{\left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_V} = T \beta^2 \frac{V}{K}, \quad (5.18)$$

bunda β - jismning issiqlikdan hajmiy kengayish koeffitsiyenti, K – siqiluvchanlik. Qattiq jismlarning issiqlikdan kengayish koeffitsiyenti uncha katta bo'lmaganligi uchun ularda C_V va C_P kattaliklarning farqi xona haroratida $(C_P - C_V) < R$ bo'lib, 3-5 % ni tashkil etadi. Temperatura

ortishi bilan bu farq orta borib, erish temperaturasida $C_P/C_V \approx 1.25$ bo‘ladi. Suyuqliklarda $C_P - C_V$ farq qattiq jismlarnikidan katta bo‘lib, tabiiyki, suyuqlikning tabiatiga bog‘liq bo‘ladi. $T \rightarrow 0$ da C_P va C_V nolga intilganligi uchun ularning farqi ham nol bo‘ladi. Fransuz fiziklari Dyulong va Pti tajribalardan (1919 y.) barcha **oddiy strukturali kristallarning** yetarlicha yuqori temperaturalarda, jumladan xona temperaturasidagi molyar issiqlik sig‘imlari bir xil va o‘zgarmas bo‘lib, o‘rtacha 25 Joul/(mol $\times$ grad) ekanini topdilar. Bu qonuniyat **Dyulong-Pti qonuni** deb nom oldi. Tajribalardan birikmalarning molyar issiqlik sig‘imi ularning tashkil etuvchilarining molyar issiqlik sig‘imlarining yig‘indisiga teng bo‘lishi, ya’ni additivlik qonuniga bo‘ysunishi aniqlandi. Bu qonun **Neyman-Kopp qonuni** deb ataladi. Aytaylik, qandaydir $A_m V_n$ birikmasi bo‘lsin. U holda additivlik qonuniga ko‘ra, bu birikmaning molyar issiqlik sig‘imi quyidagicha aniqlanadi:

$$C_V^{A_mB_n} = mC_V^A + nC_V^B. \quad (5.19)$$

Juda past temperaturalarda esa issiqlik sig‘imi C_V temperaturaning uchinchi darajasiga proporsional keskin kamayib ($C_V \sim T^3$), mutlaq nol ($T = 0$ K) temperaturada nol bo‘lishi kuzatiladi. Misol uchun, 5.4-rasmda kumushning tajribada olingan molyar issiqlik sig‘imining temperaturaga bog‘liqlik grafigi keltirilgan. Dastavval Dyulong-Pti qonunini tasdiqlovchi kristallarning issiqlik sig‘imining klassik nazariyasi yaratildi.



5.4-rasm. Kumushning molyar issiqlik sig‘imining temperaturaga bog‘lanish grafigi.

Klassik nazariyaga ko‘ra yetarlicha yuqori temperaturalarda qattiq jismlarni tashkil etgan zarralarning tebranish energiyalari katta bo‘lganda, ularning tebranma harakatlarini ma’lum darajadagi xatolik bilan bir-biriga bog‘liq bo‘lmagan mustaqil deb qarash mumkin.

Juda ko‘p tajriba natijalariga ko‘ra, temperaturaning ortishi bilan xona temperaturasidan bir muncha yuqori temperaturalarda kristallarning molyar issiqlik sig‘imining Dyulong-Pti qonunidan chetlanishi va kvazichiziqli ortishi kuzatiladi. Klassik fizika tasavvuriga ko‘ra qattiq jismning har bir tebranayotgan zarrasi uchun ma’lum bir vaqtda tebranishlarining bir erkinlik darajasiga to‘g‘ri keladigan kinetik energiyasi uning potensial energiyasiga teng bo‘ladi. Issiqlik tebranishlarining bir erkinlik darajasiga to‘g‘ri keladigan kinetik energiyasi

$$\varepsilon = k_B T/2$$

bo‘ladi, bunda k_B - Bolsman doimiysi, T -jism temperaturasi. Tebranma harakat qilayotgan zarraning o‘rtacha potensial va kinetik energiyalari teng deb qaralganligi uchun va kristallning har bir tuguni (zarrasi) uchta erkinlik darajasiga ega bo‘lganligi uchun tebranayotgan har bir tugunning to‘la energiyasi quyidagicha bo‘ladi:

$$E = 3(E_p + E_k) = 3 \times 2\varepsilon = 3k_B T. \quad (5.20)$$

Bir atomli 1 mol modda uchun ichki energiya quyidagicha bo‘ladi:

$$E_\mu = N_A E = 3N_A k_B T = 3RT, \quad (5.21)$$

bunda N_A - Avogadro soni, $R = N_A k_B$ - universal gaz doimiysi. U holda barcha ximiyaviy tarkibi sodda bo‘lgan kristall jismlarning 1 mol miqdorining issiqlik o‘zgarmas bosimdagi sig‘imi oxirgi ifoda (4.21) ga ko‘ra, quyidagi miqdorga teng va o‘zgarmas bo‘ladi:

$$C_V = dE_\mu/dT = \text{const.} = 3R \approx \mathbf{25 \text{ Joul/(mol} \times \text{grad)}}. \quad (5.22)$$

Shunday qilib, klassik fizika qarashlari asosida Dyulong- Pti qonunini tushuntirish mumkin bo‘ldi. Ko‘pgina kristallar (ayniqsa metallar) uchun Dyulong-Pti qonuni xona temperaturasida yaxshi bajariladi. Demak, bu kristallardagi issiqlik tebranishlarini xona temperaturasida bir-biriga bog‘lanmagan, mustaqil deb qarash mumkin. Ammo tajribalarning ko‘rsatishicha, ayrim kristallar uchun xona temperaturasi issiqlik sig‘imining

klassik nazariyasi (Dyulong- Pti qonuni) o‘rinli bo‘ladigan yetarlicha yuqori temperatura hisoblanmaydi. Masalan, olmos kristalli uchun Dyulong - Pti qonuni 1000 °C temperaturada bajariladi. Shuningdek, klassik qarashlar kristallarning tajribalarda kuzatiladigan temperaturaga murakkab bog‘lanishini (5.4-rasm) tushuntira olmadi. Shuningdek, kristallarning temperaturasi xona temperaturasidan ancha ortishi bilan ularning issiqlik sig‘imi doimiy qolmay, balki erish temperaturasigacha kuchli ortib boradi. Temperatura pasayishi bilan esa kristallarning issiqlik sig‘imi keskin kamayib, mutlaq nol temperaturada nolga intiladi.

Shunday qilib, kristall zarralarining mustaqil tebranma harakatiga asoslangan issiqlik sig‘imining klassik nazariyasi ularning issiqlik sig‘imlarining tajribada kuzatiladigan juda past va yetarlicha yuqori temperaturadagi o‘zgarish qonuniyatlarini tushuntira olmaydi.

5.3. Metallardagi elektron gazining issiqlik sig‘imi

Metall bog‘lanishli kristallarda kristall tugunlarida muvozanat vaziyati atrofida tebranib turuvchi atom o‘zaklaridan tashqari ushbu atom o‘zaklari sonidan kam bo‘lmagan erkin elektronlar ham mavjuddir. Ichki qavatdagi elektronlar issiqlik yutmaydi. Shuning uchun kristallarning issiqlik sig‘imi kristall panjarasining (C_p) va erkin elektronlar gazining (C_e) issiqlik sig‘imlari yig‘indisidan iborat bo‘lishi kerak:

$$C_V = C_p + C_e. \quad (5.23)$$

Biz qarayotgan elektron gazi klassik fizikadagidek oddiy gaz bo‘lganda edi, ularning issiqlik harakatining o‘rtacha energiyasi $3k_B T/2$ bo‘lib, bir mol metall bog‘lanishli kristallning (keyingi satrlarda metallning) elektron gazining energiyasi quyidagicha aniqlanar edi:

$$E_e = 3N_A k_B T/2. \quad (5.24)$$

So‘ngi ifodadan bir mol metallardagi elektron gazining issiqlik sig‘imi

$$C_e = 3N_A k_B/2 = 3R/2 \quad (5.25)$$

bo‘lib, metallning to‘la issiqlik sig‘imi (5.22) va (5.25) ifodalarga ko‘ra, quyidagicha bo‘lar edi:

$$C_V = 3R + 3R/2 = 9R/2 \approx 37 \text{ J/mol} \times \text{K}.$$

Vaholanki, tajriba natijalariga ko'ra metallar ham dielektriklar kabi yuqori temperaturalarda (xona temperaturalari atrofida) Dyulong-Pti qonunini qanoatlantirib, o'zgarmas $\approx 25 \text{ J/mol} \times \text{K}$ issiqlik sig'imiga ega bo'ladi. Bunday tajriba natijasidan kelib chiqib, shunday xulosa qilinadiki, erkin elektronlar gazi metallarning issiqlik sig'imiga sezilarli ulush qo'shmas ekan. Klassik fizika nuqtai nazaridan tushuntirish mumkin bo'lmagan bu natija kvant mexanikasi asosida osongina tushuntiriladi. Kvant mexanikasi nuqtai nazaridan metallardagi erkin elektronlar gazi **aynigan** (virojdenniy) bo'lib, harakati klassik mexanika qonunlariga emas, balki kvant mexanikasining Fermi - Dirak kvant statistikasi qonunlariga bo'ysunadi. Temperatura ko'tarilishi bilan barcha elektronlar emas, balki ularning Fermi sathi atrofidagi kam miqdordagi qismlarigina **issiqlik uyg'onishiga** uchraydi. Hisoblashlarga ko'ra, bunday elektronlarning soni taxminan quyidagicha aniqlanadi:

$$\Delta N \approx N_e \frac{k_A T}{2E_F}, \quad (5.26)$$

bunda N_e -issiqlik uyg'onishiga uchragan metallardagi elektronlar soni, E_F - Fermi sathi energiyasi. Metallar uchun issiqlik uyg'otishiga uchragan elektronlar soni ΔN juda kichik miqdorni tashkil qilar ekan. Masalan, juda yaxshi o'tkazgich bo'lgan mis uchun xona temperaturasida $E_F \approx 7 \text{ eV}$ bo'lib, $\Delta N/N < 1 \%$ tashkil qilar ekan. Issiqlik uyg'otishiga uchragan har bir elektron oddiy gaz zarrasi singari $k_B T$ miqdordagi energiya yutadi. Demak, butun issiqlik uyg'otishiga uchragan elektron gazi tomonidan yutilgan energiya (5.26) ifodani hisobga olgan holda quyidagicha bo'ladi:

$$E_e \approx k_B T \Delta N \approx N_e \frac{(k_B T)^2}{2E_F}. \quad (5.27)$$

Bundan metallardagi issiqlik uyg'onishiga uchragan elektron gazining issiqlik sig'imi quyidagicha ekanini topamiz:

$$C_e = \frac{dE_e}{dT} \approx \frac{N_e k_B^2 T}{E_F}.$$

Yana ham aniqroq hisoblashlar bajarilsa, ushbu ifoda quyidagicha bo'ladi:

$$C_e \approx \pi^2 \frac{N_e k_B^2 T}{2E_F}. \quad (5.28)$$

Agar biz qarayotgan issiqlik uygʻonishiga uchragan aynigan elektron gazini oddiy (aynimagan, klassik) gaz deb qaraganimizda edi, klassik fizikadan maʼlum boʻlganidek, uning bir mol miqdorining issiqlik sigʻimi quyidagicha boʻlar edi:

$$C_e^{kl.} = \frac{d}{dT} \left(\frac{3RT}{2} \right) = \frac{3}{2} R.$$

U holda aynigan va aynimagan elektron gazlarining issiqlik sigʻimlarining nisbati uchun quyidagi ifodani olamiz:

$$\frac{C_e}{C_e^{kl.}} \approx \pi \frac{k_B T}{E_F}. \quad (5.29)$$

Hisoblashlarning koʻrsatishicha, odatdagi temperaturalarda bu nisbat turli metallar uchun 1 % dan oshmas ekan.

Shunday qilib, kvant mexanikasining oddiy hisoblashlari koʻrsatishicha, erkin elektronlarning atigi 1 % dan kam sonligisigina faqat yuqori temperaturalar taʼsir etganda uygʻonar ekan, qolganlari esa issiqlik yutmaydi. Shuning uchun metall valent elektronlar gazining issiqlik sigʻimi kristall panjarasidagi atomlar issiqlik sigʻimiga nisbatan hisobga olmaydigan darajada kichikdir. Demak, metallarning issiqlik sigʻimi faqat kristall panjaradagi atomlarning issiqlik sigʻimidan iboratdir. Ammo mutlaq nol temperatura atrofidagi temperaturalarda kristall panjara issiqlik sigʻimi T^3 ga proporsional bogʻlanishda keskin kamayib nolga intiladi. Shu tufayli bu temperaturalarda elektron gazining issiqlik sigʻimi temperaturaga zaif bogʻlanishda boʻlganligi uchun uning ulushi sezilarli boʻlib qoladi. Ammo bu ulush panjara issiqlik sigʻimining juda kichkina miqdoriga nisbatan ekanligini unutmaslik kerak.

5.4. Kristall issiqlik sigʻimining Eynshteyn nazariyasi

Yuqorida (pp. 5.2, 5.3) aytib oʻtanimizdek, kristallarning issiqlik sigʻimining past temperaturalarda kamayib, mutlaq nol temperaturada nolga aylanishini atomlarning issiqlik tebranishlarining klassik nazariyasi bilan ham, issiqlik sigʻimining elektron tashkil etuvchisi hisobiga deb olib qarab ham tushuntirib boʻlmas edi. Bu masalani tushuntirish uchun

Eynshteyn atomlarning issiqlik tebranishlariga kvant effektini tatbiq etib tushuntirishga harakat qildi (1907 y.). U N atomdan tashkil topgan kristall panjarani bir xil ω xususiy chastotaga ega bo'lgan $3N$ mustaqil garmonik ossillyatorlar sistemasi deb qaradi. Bunda har bir chiziqli ossillyatorning o'rtacha energiyasi biror T temperaturada klassik fizikadagidek $k_B T$ qiymat bilan emas, balki nurlanish qonunini chiqarishda foton energiyasi uchun Plank (1900 y.) taklif qilganidek quyidagicha aniqlanadi:

$$\varepsilon_{o'r.} = \frac{1}{2} \hbar \omega + \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega / kT} - 1}, \quad (5.30)$$

bunda $\omega = 2\pi\nu$ - tebranishning siklik chastotasi, $\frac{\hbar \omega}{2} = \varepsilon_0$ - **nolinchi energiya** deyilib, temperatura mutlaq nol bo'lganda ham yo'qolmaydigan kristall panjaradagi **atomlarning nolinchi tebranishlarining** energiyasidir. Shuni aytib o'tish kerakki, Eynshteyn foydalangan (5.30) formulada mutlaq nol temperaturadagi nolinchi energiyani ifodalovchi birinchi had bo'lmagan edi. Chunki nolinchi energiya haqidagi ma'lumot birmuncha keyinroq kvant mexanikasida kiritilgan edi. Eynshteyn birinchi hadi bo'lmagan (5.30) formulaga kristalldagi mustaqil garmonik ossillyatorlarning $3N$ soniga ko'paytirib, kristallning ichki energiyasi uchun quyidagi ifodani oldi:

$$U = \frac{3N\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}. \quad (5.31)$$

(4.31) ifodadan kristallning issiqlik sig'imi uchun quyidagi ifoda kelib chiqadi:

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{3N(\hbar\omega)}{(e^{\hbar\omega/k_B T} - 1)^2} \times \frac{(\hbar\omega)^2}{k_B T^2} \times e^{\hbar\omega/k_B T}. \quad (5.32)$$

Nolinchi energiya o'zgarmas bo'lganligi uchun bu tenglamani (5.30) ifodani $3N$ ga ko'paytirib ham olish mumkin. Eynshteyn taklif etgan tassavur bo'yicha ikki chegaraviy hol uchun issiqlik sig'imi qanday aniqlanishini ko'rib chiqamiz.

1. Yuqori temperaturalarda $k_B T \gg \hbar \omega$ bo'lganligi uchun qatorga yoyib $e^{\hbar\omega/kT} \approx 1 + \hbar\omega/kT$ va $e^{\hbar\omega/kT} \approx 1$ deb olishimiz mumkin. U holda (5.32) ifodadan

$$C_V = 3Nk_B. \quad (5.33)$$

ekanligi kelib chiqadi. Agar N sonini bir mol modda miqdori N_A (Avagadro soni) uchun olsak, (5.33) ifodadan kristallning bir moli uchun issiqlik sig'iminin qiymati

$$C_V = 3N_A k_B = 3R \quad (5.34)$$

bo'ladi. Shunday qilib, Eynshteyn nazariyasidan yuqori temperaturada kristallning issiqlik sig'imi uchun Dyulong- Pti qonuni o'rinli ekanligi kelib chiqadi.

2. Past temperaturalarda $k_B T \ll \hbar \omega$ bo'ladi. Bu shartga ko'ra (5.32) ifodaning maxrajidagi 1 sonini tashlab yuborsak bo'ladi. U holda (5.32) ifodadan issiqlik sig'imi uchun quyidagi formula kelib chiqadi:

$$C = \frac{3N(\hbar\omega)^2}{k_B T^2} \times e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}}. \quad (5.35)$$

Temperatura o'zgarganda (5.35) ifodadagi eksponensial ko'paytma maxrajidagi T^2 hadga nisbatan tezroq o'zgaradi. Shuning uchun temperatura mutlaq nolga intilganda ($T \rightarrow 0$) (5.35) ifodaga ko'ra, issiqlik sig'imi nolga eksponensial yaqinlashadi. Vaholanki, tajribalarning ko'rsatishicha kristallarning issiqlik sig'imi mutlaq nol temperaturada nolga eksponensial emas, balki T^3 qonuniyat bilan yaqinlashadi. Binobarin, Eynshteyn nazariyasi past temperaturalarda issiqlik sig'iminin o'zgarishini sifat jihatdan tushuntirib bera oladi, xolos. Past temperaturalarda mutlaq nol temperaturagacha kristallar issiqlik sig'imi nolga temperaturaning kubiga proporsional yaqinlashishini Debay nazariyasi bilan tushuntirish mumkin bo'ldi.

5.5. Debay nazariyasi va Debay temperaturasi

Kristall panjaraning tebranishini va u bilan bog'liq bo'lgan kristallning termodinamikaviy xossalarini, shu jumladan issiqlik sig'iminin temperaturaga bog'lanish qonuniyatlarini tushuntirib beruvchi nazariya 1912 yili Debay tomonidan taklif qilindi. Debay nazariyasida qattiq jism atomlari chekli oraliqda (0 dan ω_D Debay chastotasigacha) bo'lgan chastotalar bilan tebranuvchi izotrop elastik muhit deb qaraladi. Yuqorida aytib o'tdikki, N_0 ta elementar yacheyka va har bir yacheykada esa n ta atomi bo'lgan kristall panjara $3N_0 n - 6 \approx 3N$ ta tebranish erkinlik

darajasiga ega. Mexanika nuqtai nazaridan bunday sistemani har biri sistemaning alohida normal tebranishiga mos keluvchi $3N$ ta mustaqil ossillyator deb qarash mumkin. Umumiy holda bunday sistemaning termodinamikaviy parametrlarini hisoblash amalda mumkin emas. Chunki bunday hisoblashlar natijalari ω tebranish chastotalarining qattiq jismning tebranish spektri bo'yicha aniq taqsimotiga, ya'ni tebranish holatlarining zichligi $g(\omega)$ ga bog'liq bo'ladi. Sodda uchun uzunligi chekli L va tebranishlar chastotasi $[\omega, d\omega]$ oraliqda bo'lgan atomlarning chiziqli zanjirini qaraymiz. Atomlar orasidagi masofa (panjara doimiysi) a bo'lgan atomlarning bunday zanjirida vujudga kelishi mumkin bo'lgan normal turg'un tebranishlarning to'liq uzunliklari quyidagicha aniqlanadi:

$$\lambda_n = 2L/n, \quad (5.36)$$

bunda $n = 1, 2, 3, \dots, N$, N - qatordagi atomlar soni.

Endi chastotalari $[\omega, \Delta\omega]$ oraliqda bo'lgan turg'un to'liqlar sonini aniqlaymiz. To'liq uzunligi λ_n ga teng yoki undan katta bo'lgan normal tebranishlar soni

$$z = 2L/\lambda_n \quad (5.37)$$

bo'ladi. Ushbu mulohazalarga ko'ra, qirralari L bo'lgan uch o'lchovli kub kristallidagi to'liq uzunligi ixtiyoriy λ ga teng yoki undan katta turg'un to'liqlar soni, tabiiyki,

$$n = (z)^3 = (2L/\lambda)^3 = 8L^3/\lambda^3 = 8V/\lambda^3, \quad (5.38)$$

bo'ladi. Biz bu yerda hisoblashlarni juda soddalashtirdik. Agar hisoblashlarda yetarlicha aniqlik bilan ixtiyoriy singoniyaga ega bo'lgan kristallning shar sferasining ixtiyoriy hajmidagi to'liqlar sonini topmoqchi bo'lsak, oxirgi ifodadagi 8 sonini 4π ga almashtirishimiz kerak bo'ladi, ya'ni:

$$n = 4\pi V/\lambda^3. \quad (5.39)$$

To'liq uzunligini siklik chastota ω orqali ifodalaymiz:

$$\lambda = 2\pi v/\omega, \quad (5.40)$$

bunda v tebranishning kristalldagi tarqalish (akustik to'liq) tezligi. To'liq uzunlikning bu qiymatini (5.39) ifodaga qo'ysak,

$$n(\omega) = \frac{V}{2\pi^2 v^3} \omega^3, \quad (5.41)$$

ifodani olamiz. ω dan $\omega + \Delta\omega$ intervaldagi chastotalar ega bo'lgan to'liqlar sonini topish uchun oxirgi (5.41) ifodaning differentsialini (orttirmasini) olish kerak:

$$dn(\omega) = g(\omega)d\omega = \frac{3V}{2\pi^2 v^3} \omega^2 d\omega. \quad (5.42)$$

Normal tebranishlar spektrining ixtiyoriy $d\omega$ qismidagi normal tebranishlar zichligi quyidagicha aniqlanadi:

$$g(\omega) = \frac{dn(\omega)}{d\omega} = (3V/2\pi^2 v^3) \omega^2. \quad (5.43)$$

$g(\omega)$ - kristalldagi normal tebranishlarning chastotalar bo'yicha **taqsimot funksiyasi** deyiladi.

Debay taklif etgan nazariyaga ko'ra, qattiq jismdagi turg'un to'liqlar sistemasining energiyasi ichki issiqlik energiyasiga teng bo'ladi:

$$U = \int E_{o.r.} dn(\omega), \quad (5.44)$$

bunda $E_{o.r.}$ - bitta turg'un to'liqlarning o'rtacha energiyasi bo'lib, integral qattiq jismdagi mavjud bo'lgan barcha turg'un to'liqlarning hamma chastotalari bo'yicha olinadi.

(5.44) ifodadagi integralning quyi chegarasi sifatida $T=0$ K temperaturada ham to'htamaydigan **nolinchi tebranishlar** chastotasini olish kerak. Ammo bu chastotaning qiymati ma'lum bo'lmaganligi uchun va hisoblashlarni soddalashtirish uchun tebranishlar chastotasining quyi chegarasini nol deb olamiz. Ammo integralning yuqori chegarasini cheksiz katta qilib olish, ya'ni qattiq jismda cheksiz katta chastotali to'liqlar tarqala oladi degan shart qo'yish mumkin emas. Chunki biz yuqorida ko'rib o'tgandek, kristallda paydo bo'ladigan normal tebranishlarning eng kichik to'liq uzunligi atomlar tekisliklari orasidagi eng qisqa masofaning ikkilanganligidan kichkina bo'la olmaydi: $\lambda_{min} = 2a$. Mos holda minimal to'liq uzunligiga tebranishlarning maksimal chastotasi - ω_{maks} to'g'ri keladi. Bu chastotani **Debaying xarakteristik chastotasi**

deyiladi: $\omega_{maks} = \omega_D$. U holda qattiq jismning turg'un elastik to'qlinlarining to'la energiyasi uchun quyidagi tenglama to'g'ri bo'ladi:

$$U = \int_0^{\omega_D} E_{or.} dn(\omega). \quad (5.45)$$

Debay kristalldagi hamma qo'zg'algan $3N$ normal tebranishlar (modalar) uchun chiziqli dispersiya qonuni o'rinli va tebranish holatlarining zichligi (5.43) ifoda bilan aniqlanadi deb faraz qildi. Ammo aslida bunday faraz faqat kichik chastotalar uchungina to'g'ri bo'ladi. Kristalldagi normal tebranishlarning $g(\omega)$ taqsimot funksiyasining 0 dan Debayning ω_D chastotasigacha olingan integrali kristalldagi normal tebranishlar sonini beradi. Ikkinchi tomondan, biz bilamizki, bu normal tebranishlarning to'la soni $3N$ ga teng. Shuning uchun

$$\int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega = \int_0^{\omega_D} \frac{3V}{2\pi^2 v^3} \omega^2 d\omega = 3N, \quad (5.46)$$

tenglik bajarilishi kerak. Integral hisoblab chiqilsa,

$$\frac{V\omega_D^3}{2\pi^2 v^3} = 3N \quad (5.47)$$

tenglik kelib chiqadi. Bundan Debayning xarakteristik chastotasini topamiz:

$$\omega_D = v \left(6\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3} = v (6\pi^2 N_0)^{1/3}, \quad (5.48)$$

bunda N_0 – hajm birligidagi atomlar soni. Bu chastotaga mos keluvchi quyidagi

$$\theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B} = \frac{\hbar v_D}{k_B} \quad (5.49)$$

kattalikning o'lchov birligi temperaturaning o'lchov birligi bilan bir xil bo'lganligi uchun **Debaying xarakteristik temperaturasi** deyiladi. Agar (5.48) tenglikni e'tiborga olsak, Debay temperaturasi uchun quyidagi tenglikni olamiz:

$$\theta_D = \frac{\hbar v}{k_B} (6\pi^2 N_0)^{1/3}. \quad (5.50)$$

Debay temperaturasi teng temperaturada kristalda normal tebranishlarning hamma spektrlari, shu jumladan maksimal ω_D chastotali tebranishlar ham qo'zg'aladi. Shuning uchun Debay temperaturasidan katta temperaturalarda yangi normal tebranishlar vujudga kelmaydi. Bu temperaturalar faqat normal tebranishlarning o'rtacha energiyasining o'suviga olib keluvchi mavjud tebranishlarning **issiqlikdan uyg'onish** (qo'zg'alish) darajasini ortishiga olib keladi. Debay temperaturasi kristall panjaradagi atomlararo kuchlar tabiatiga va panjara dinamikasiga bog'liq bo'lgan kattalik bo'lib, undan kristallarning bir qator (issiqlik sig'imi, elektr o'tkazuvchanlik, issiqlik o'tkazuvchanlik, erish temperaturasi va shu kabi) xarakteristikalarini aniqlashda foydalaniladi. U kristall panjaraning tebranishlarini klassik nazariya bilan o'rganish mumkin bo'lgan yuqori temperaturalar ($T \geq \theta_D$) va klassik mexanika tasavvurlari ishlamay, kvant mexanikaviy effektlar yaqqol namoyon bo'ladigan past ($T < \theta_D$) temperaturalar sohalarini ajratib turuvchi chegaraviy kattalikdir. (5.50) tenglikdan ko'rinib turibdiki, u temperaturaga bog'liq emas. Tajribalarning ko'rsatishicha, qattiq jismlar o'lchamining (hajmining) ortishi erish temperaturasigacha atigi $\approx 10\%$ dan oshmasligini ko'rsatadi. Shuning uchun Debay temperaturasi ham temperaturaga zaif bog'lanishda bo'lishi kerak edi. Ammo keyingi yillardagi tajribalarning ko'rsatishicha $\theta_D < 300$ K temperaturalardan past temperaturalarda θ_D o'zgaruvchan kattalik ekan. Chunonchi, neytronografik tadqiqotlarga ko'ra, TiC_x titan karbidida $T = 300$ K da $\theta = 860$ K bo'lsa, 80 K temperaturada 520 K ($\sim 40\%$) gacha kamayar ekan. Past temperaturalarda kuzatiladigan bunday anomalionalarni ushbu temperaturalarda kristall panjarada kvant effektlari paydo bo'lishi va Debayning kristall atomlarining tebranishlarini mustaqil deb qilgan farazlari o'rinli bo'lmasligi bilan tushuntiriladi. Shuningdek, kristallning erish temperaturasi yaqin $T \rightarrow \theta$ temperaturalarida issiqlik tebranishlarining amplitudasining temperaturaga chiziqli bog'lanishidan chetlanishi (angormanizmi) tufayli ham θ_D o'zgarishga uchraydi. Ammo Debay temperaturasi uchun kuzatiladigan bunday anomaliyaga qaramay, ushbu temperaturadan foydalanib, qattiq jismlarning ko'pgina xossalari yaxshi tushuntirish mumkin. Yuqoridagi mulohazalarg ko'ra, Debay temperaturasini aniqlash uchun mos keluvchi temperaturani to'g'ri tanlay bilish kerak. Tajribalar odatda $T \approx \theta_D/2$ temperatura atrofiga aniqlangan θ_D temperaturasidan foydalanib kristallarning boshqa te-

gishli xarakteristikalarini aniqlashda tajribaga mos keladigan qiymatlarini olish mumkinligini ko'rsatadi.

5.6. Debay nazariyasi bo'yicha qattiq jismlarning issiqlik sig'imi

Issiqlik sig'imining Debay nazariyasiga ko'ra, qattiq jism atomlari, yuqorida aytib o'tganimizdek, chekli chastotalar oralig'ida (0 dan Debay chastotasi $\omega_D = \omega_{mak.}$ gacha) tebranuvchi izotrop elastik muhit deb qaraladi. Bu holda qattiq jismning hajm birligidagi turg'un to'lqinlari sistemasining energiyasi uning ichki issiqlik energiyasiga teng deb qaraladi va (5.45) integral bilan aniqlanadi. (5.42) ifodaga ko'ra kristallning hajm birligidagi normal tebranishlar soni quyidagicha bo'ladi:

$$dn = \frac{3\omega^2 d\omega}{2\pi^2 v^3}. \quad (5.51)$$

Oxirgi ifodadagi to'lqin tezligi v ni (5.48) ifodaga ko'ra Debay chastotasi orqali ifodalaymiz:

$$v^3 = \frac{\omega_D^3}{6\pi^2 N_0}. \quad (5.52)$$

U holda hajm birligidagi normal tebranishlar soni uchun (5.51) ifodaga ko'ra, quyidagi tenglikni olamiz:

$$dn = \frac{9N_0 \omega^2 d\omega}{\omega_D^3}. \quad (5.53)$$

Debay o'z nazariyasida kristaldagi qo'zg'algan normal tebranishlarning o'rtacha energiyasi uchun Debay klassik nazariyasidagi $k_B T$ kattalikni emas, balki chiziqli ossillyator uchun Eynshteyn taklif qilgan (5.30) ifoda bilan aniqlanuvchi o'rtacha energiyani oldi. (5.30), (5.45) va (5.53) ifodalarga ko'ra, kristallning hajm birligidagi 0 dan ω_D gacha bo'lgan chastotalar oralig'idagi turg'un elastik to'lqinlar (normal tebranishlar) spektri hosil qilgan kristallning ichki energiyasi uchun quyidagi tenglikni hosil qilamiz:

$$U = \frac{9N_0}{\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} \left(\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} \right) \omega^2 d\omega = \frac{9N_0}{8} \hbar\omega_D + \frac{9N_0 \hbar}{\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^3 d\omega}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}, \quad (5.54)$$

bunda

$$U_0 = \frac{9N_0}{8} \times \hbar \omega_D$$

ayni kristall uchun o'zgaras kattalik. Oxirgi ifodani 1 mol modda miqdori uchun olamiz ($N_0 = N_A$) va (5.50) tenglikdan foydalanib, kristallning 1 moli uchun U_0 kattalikning Debay temperaturasi orqali ifodalaymiz:

$$U_0 = \frac{9N_A \hbar}{8} \times \frac{k_B \theta_D}{\hbar} = \frac{9N_A k_B}{8} \theta_D = \frac{9}{8} R \theta_D. \quad (5.55)$$

Endi (5.54) integralni hisoblashni soddalashtirish uchun $x_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_B T} = \theta_D / T$, $x = \frac{\hbar \omega}{k_B T}$ va $N_0 = N_A$ belgilashlarni kiritamiz. U holda integral (5.54) quyidagi ko'rinishga keladi:

$$U = U_0 + 9RT \left(\frac{T}{\theta} \right)^3 \int_0^{\frac{\theta}{T}} \frac{x^3}{e^x - 1} dx. \quad (5.56)$$

Ushbu integralni hisoblash uchun integral ostidagi ifodani qatorga yoyish kerak. Bu amalni temperaturaning ikki xil sohasi uchun hisoblaymiz.

1. $T \ll \theta$ shart bajariladigan past temperaturalar sohasi uchun. 2. $T \gg \theta$ shart bajariladigan yuqori temperaturalar sohasi uchun.

Past temperaturalar sohasida issiqlik sig'imi. Bu sohada $T \ll \theta$ bo'lganligi uchun energiyani (5.56) ifodasidagi integralni yuqori chegarasini cheksizlik bilan almashtirish mumkin. U holda $\int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}$

bo'lganligi uchun past temperaturalarda energiya quyidagicha aniqlanadi:

$$U = 9RT \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \times \frac{\pi^4}{15}.$$

Ushbu ifodadan

$$C_V = \frac{dU}{dT} \approx 233.8 \times R \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \quad (5.57)$$

ekanligi kelib chiqadi. Demak, past temperaturalarda kristallarning issiqlik sig'imi temperaturaning kubiga proporsional bog'lanishda bo'lar ekan. Bu qonun issiqlik sig'imi uchun **Debayning kub qonuni** nomini

olgan. Tajribalarda oddiy kristallar uchun haqiqatdan ham ushbu qonuniyat kuzatiladi.

Yuqori temperaturalar sohasida issiqlik sigʻimi. $T \gg \theta$ boʻlganda kristallning ichki energiyasini aniqlovchi (5.56) formuladagi ℓ^x ifodani qatorga yoyib chiqib, $x = \frac{\hbar\omega_D}{kT} = \frac{\theta}{T} \ll 1$ boʻlganligi uchun dastlabki uchta hadi bilan cheklanamiz. U holda kristallning ichki energiyasining (5.56) ifodasi quyidagi koʻrinishni oladi:

$$U = U_0 + 3RT - \frac{3}{8}R\theta_D + \frac{3}{20}R\frac{\theta_D^2}{T} + \dots$$

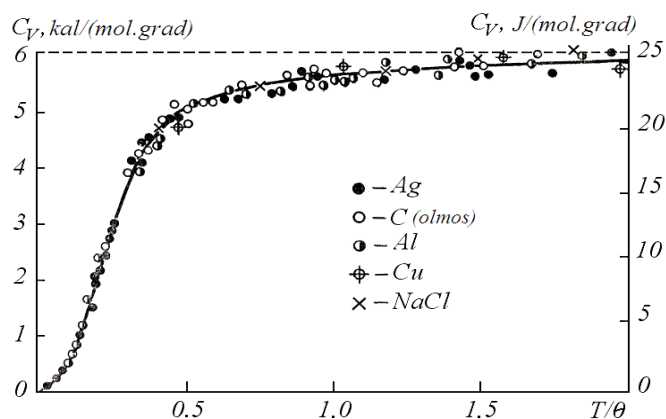
Ushbu ifodadan esa issiqlik sigʻimi uchun quyidagi formulani olamiz:

$$C_V = 3R + \frac{3}{20}R\frac{\theta_D}{T} + \dots = 3R\left(1 - \frac{1}{20}\left(\frac{\theta_D}{T}\right)^2\right). \quad (5.58)$$

Soʻngi (5.58) ifodaga koʻra, yetarlicha yuqori temperaturalarda issiqlik sigʻimi $C_V = 3R \approx 25$ joul/mol $\times$ grad boʻlib, temperatura ortishi bilan juda sekinlik bilan oʻsib, xona temperaturasidan uncha yuqori boʻlmagan temperaturalarda amalda oʻzgarmas boʻlib qoladi, yaʼni Dyulong-Pti qonuni oʻrinli boʻladi. 5.5-rasmda Debay nazariyasi boʻyicha hisoblashlar asosida baʼzi moddalarning issiqlik sigʻimining temperaturaga bogʻliqligi tutash chiziq bilan koʻrsatilgan. Faqat bu rasmda absissa oʻqiga temperatura emas, balki temperaturaning har bir modda uchun xarakterli boʻlgan θ_D Debay temperaturasiga nisbati berilgan. Oʻzgarmas hajmdagi molyar issiqlik sigʻimining temperaturaga bogʻliqlik grafigi $C_\mu = f(T/\theta)$ turli sodda kristallar uchun bir xil ekanligi tajribalarda tasdiqlanagan. 5.5 - rasmda turli shakldagi nuqtalar kumush, olmos, alyuminiy, mis va osh tuzi uchun tajribalarda aniqlangan. Bu rasmdan koʻrinib turibdiki, nazariy hisoblashlar natijalari faqat sifat jihatdangina emas, miqdoriy jihatdan ham tajriba natijalari bilan mos tushgan. Debayning (5.57) qonuni $0 \leq \frac{T}{\theta_D} \leq 0.1$ temperaturalar oraligʻida, (5.58) qonuniyat esa

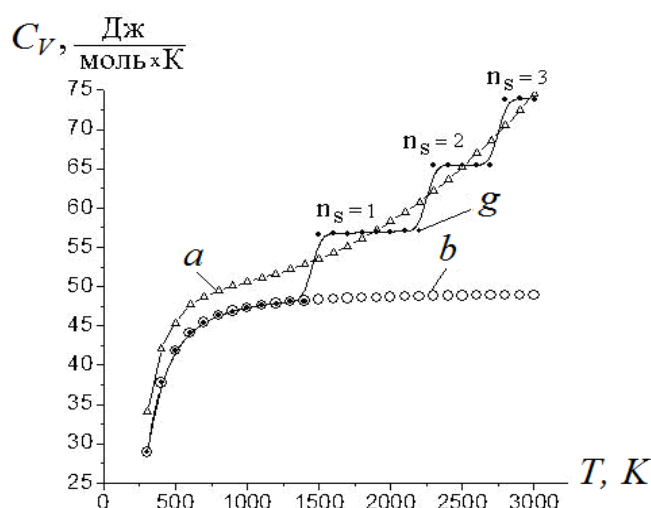
$0.1 < \frac{T}{\theta_D} \leq 0.5$ temperaturalar oraligʻida ishlaydi. Aniqroq qilib aytsak,

Dyulong-Pti qonuni xona temperaturasidan uncha yuqori boʻlmagan temperaturalardagina bir muncha yaxshi bajariladi. Ammo juda koʻp



5.5–rasm. Turli moddalar uchun nazariy va tajribalarda aniqlangan molyar issiqlik sig‘imining temperaturaga bog‘lanish grafigi.

so‘nggi tajribalar natijalariga ko‘ra, birikmalarning va hatto kub strukturali sodda kristallar bo‘lgan Ta va Mo kabi qiyin eruvchi metallar uchun ham issiqlik sig‘imining $T \geq 1400$ K temperaturalarda Debay yaqinlashuvidan jiddiy chetlanishi kuzatiladi. 5.6, *a*- rasmda tajriba asosida TiC titan karbidining issiqlik sig‘imining erish temperaturasiga qadar temperaturaga bog‘liqlik grafigi keltirilgan. Ushbu rasmdan ko‘rinib turibdiki, bu bog‘lanish (5.58) formula bo‘yicha hisoblangan issiqlik sig‘imining temperaturaga bog‘lanishini ifodalovchi 5.6-rasmning *b* egri chizig‘idan ~ 1400 K temperaturadan boshlab keskin farq qiladi va



5.6-rasm. TiC titan karbidi issiqlik sig‘imining temperaturaga bog‘liqlik grafigi.

a - tajriba natijalari, *b* – Debay nazariyasi bo‘yicha (5.58) formula bo‘yicha hisoblashlarga ko‘ra, *g* – issiqlik uyg‘onishi darajasini muallif tomonidan taklif qilingan takomillashtirilgan (5.61) formula bo‘yicha hisobga olish natijalariga ko‘ra.

bu farq erish temperaturasiigacha ortib boraveradi. Karbid titandan boshqa qiyin eruvchi materiallar (masalan, ZrC, HfC, Ta va W kabilar) uchun ham shunday qonuniyat kuzatiladi.

Endi past va yuqori temperaturalarda kristallning issiqlik sig'iminin temperaturaga turlicha bog'lanishda bo'lishining fizikaviy sabablari haqida mulohaza yuritamiz.

$T \ll \theta$ temperaturalar sohasida asosan energiya kvantlari $\hbar\omega < k_B T$ tengsizlikni qanoatlantiruvchi past chastotali normal tebranishlar **uyg'onadi (qo'zg'aladi)**. U holda qo'zg'algan normal tebranishning o'rtacha energiyasini ifodalovchi (5.30) formulada nolinchi energiyadan boshqa qismini qatorga yoyib, uncha katta bo'lmagan xatolik bilan qatorning ikkinchi hadi bilangiga cheklanish mumkin:

$$\varepsilon_{o'r.}(T) = \hbar\omega(e^{\hbar\omega/kT} - 1)^{-1} \approx \hbar\omega \left(1 + \frac{\hbar\omega}{kT} + \dots - 1\right)^{-1} \approx kT. \quad (5.59)$$

So'nggi ifodadan kelib chiqadiki, past temperaturalar sohasida temperatura ortishi bilan kristalldagi har bir normal tebranishlar energiyasi temperaturaga proporsional ravishda ortadi. Bunga sabab shuki, temperatura ortishi bilan normal tebranishlar qo'zg'alish darajasi ortadi. Bu esa normal tebranish energiyasining o'sishiga sabab bo'ladi. Bundan tashqari past temperaturalar sohasida temperaturaning o'sishi ancha yuqori chastotali yangi normal tebranishlarni vujudga kelishiga sabab bo'ladi. Bu uyg'ongan yangi normal tebranishlarning sonini (5.42) ifoda bo'yicha hisoblashimiz mumkin. $\omega \approx k_B T / \hbar$ chastotagacha bo'lgan barcha normal tebranishlar uyg'onadi deb faraz qilamiz. U holda bu chastotagacha qo'zg'algan barcha normal tebranishlar (fononlar) soni (5.42) ifodaga ko'ra, quyidagicha bo'ladi:

$$n_f = \int_0^{k_B T / \hbar} g(\omega) d\omega \sim \int_0^{k_B T / \hbar} \omega^2 d\omega \sim T^3, \quad (5.60)$$

ya'ni, past temperaturalar sohasida uyg'ongan normal tebranishlar soni temperaturaning kubiga proporsional o'sar ekan. Shu bilan birga (5.59) ifodaga ko'ra, temperatura o'shganda har bir normal tebranishning o'rtacha energiyasi temperaturaning birinchi darajasiga proporsional o'sadi. Bu ikki omil tufayli umumiy holda kristallning ichki energiyasi temperaturaning to'rtinchi darajasiga proporsional bo'ladi: $\bar{E} \sim T^4$. Bino-
barin, issiqlik sig'imi temperaturaning uchinchi darajasiga proporsional

bo‘ladi va past temperaturalar uchun Debay qonunini ifodalaydi:

$$C_V = \left(\frac{dU}{dT} \right)_V \sim T^3.$$

Yuqorida qayd etganimizdek, Debay temperaturasida kristallda barcha normal tebranishlar uyg‘ongan bo‘ladi. Fononlarning energiyasi esa temperaturaga bog‘liq bo‘lmagan $\hbar\omega \approx k\theta_D$ chegaraviy qiymatga erishadi. Shuning uchun temperaturaning $T > \theta$ bo‘lgan yuqori qiymatlarida normal tebranishlar sonini o‘shishi mumkin emas. Bu holda faqat fononlar energiyasining o‘shishiga olib keluvchi normal tebranishlarning qo‘zg‘alish darajasi n_s o‘sadi. Vaholanki, yuqori temperaturalarda normal tebranishlarning o‘rtacha energiyasi temperaturaga to‘g‘ri proporsional ekan, kristallning ichki energiyasi ham temperaturaga to‘g‘ri proporsional bo‘ladi. Shuningdek, bu holda uyg‘ongan fonon gazining konsentratsiyasi ham temperaturaga proporsional bo‘lib qoladi: $n_f \sim T$. Issiqlik sig‘imi esa xona temperaturasidan boshlab, ma’lum bir temperaturagacha deyarli o‘zgarmas kattalik bo‘lib qoladi ($C \approx 3R$). Shunday qilib, Debay nazariyasidan kelib chiqib, Dyulong-Pti qonunini ham tushuntirish mumkin bo‘ladi. Taxminan $1400^\circ K$ temperaturalardan yuqori temperaturalarda erish temperaturasi gacha issiqlik sig‘imining Dyulong-Pti qonuniga bo‘ysunmay o‘sib borishini uzil-kesil tushuntirib beruvchi nazariya hozircha yo‘q. Ammo uni quyidagicha tushuntirish mumkin. Tabiiyki, yuqori temperaturalar kristall panjaradagi atomlarning tebranish amplitudasining o‘shishiga olib keladi. Natijada **fonon-fonon (fononlarning fononlarda) sochilishi** sodir bo‘lib, to‘qnashgan fononlar orasida energiya almashuvi sodir bo‘ladi va chastotasi Debay chastotasidan katta bo‘lgan tebranishlar vujudga keladi. Ammo panjara energiyasi fonon-fonon sochilishida temperaturaga proporsional bog‘lanishda o‘smaydi. Chunki fonon-fonon sochilishi faqat ularning sochilish effektiv kesimlari σ_f kesishgandagina sodir bo‘ladi. Agar fononni r_f radiusli sharcha deb qarasak, uning effektiv kesimi $\sigma_f = \pi r_f^2$ bo‘ladi. Fonon-fonon sochilishining ehtimoliyati har qanday sochilish jarayonining ehtimoliyati kabi sochilishning effektiv kesimi σ_f orqali aniqlanadi. Bundan fonon-fonon sochilishi tufayli panjara tebranishlarining olgan energiyasi panjaraning erish temperaturasi gacha panjaraning kristall strukturasi ga bog‘liq bo‘lmagan holda faqat ma’lum bir temperaturalardagina energiyaning ma’lum bir qiymatlariga ega bo‘la oladi. Binobarin, fonon-fonon sochi-

lishida ham panjaraning har bir ossillyatori energiyasining ortishi kvantlangan bo'ladi: $\varepsilon_s = n_s kT$, bunda n_s - fonon-fonon sochilishdagi panjaraning issiqlikdan uyg'onish darajasi bo'lib, faqat uzlukli qiymatlarigina qabul qila oladi, ya'ni u kvantlangan sonidir: $n_s = 1, 2, 3, \dots$. Ushbu nuqtai nazardan chiqib, issiqlik sig'imining yuqori temperaturalarda aniqlanuvchi (5.58) formulasiga muallif tomonidan quyidagicha tuzatma kiritish taklif qilindi:

$$C_V = 3R \left(1 - \frac{1}{20} \left(\frac{\theta_D}{T} \right)^2 \right) + n_s R. \quad (5.61)$$

Ushbu formula bilan hisoblangan titan kabitining issiqlik sig'imi (5.6-rasm, g siniq chizig'i) to erish temperaturasigacha eksperiment natijalariga o'rtacha 3 % chetlanish bilan mos keladi. Bu hisoblashlarda issiqlik uyg'onishi darajasi ma'lum bir temperaturalardan keyingina uzlukli qiymatlar qabul qiladi. Issiqlik uyg'onish darajasi kvantlangan bo'lgani uchun issiqlik sig'imining yuqori temperaturadagi grafigi sakrab o'suvchi siniq chiziqdan iboratdir (5.6-rasm, g egri chizig'i). Tajribada esa bu bog'laish silliq chiziqdan iborat. Bu hol shunday tushuntiriladiki, ma'lum bir temperaturadan keyingina ma'lum bir issiqlik uyg'onish darajasi paydo bo'lib, bu uyg'onish darajasiga kristalldagi barcha atomlarning tebranishlar modasi darhol birdaniga erisha olmay, birin-ketin asta-sekinlik bilan erishadi. Natijada tajribada yuqori temperaturalarda issiqlik sig'imining o'zgarishi (5.61) formula bo'yicha aniqlanuvchi qiymatidan ortda qoladi va uning tajribada aniqlangan grafigi silliq chiziqdan iborat bo'ladi. 5.6-rasmdan ko'rinishicha, jism temperaturasi qanchalik yuqori bo'lsa, tajribada aniqlangan issiqlik sig'imining (5.61) formula bo'yicha aniqlangan qiymatidan ortda qolishi shuncha kamdir. Bu shuni ko'rsatadiki, temperatura qancha yuqori bo'lsa, issiqlik uyg'onishlarining butun kristall bo'ylab termodinamik muvozanatga kelishi shuncha tez sodir bo'ladi.

Yuqori va past temperaturalar sohaslarining orasidagi o'rtacha temperaturalar sohasida issiqlik sig'imining Debayning kub qonunidan asta-sekin Dyulong-Pti qonuniga o'tishi kuzatiladi. Turli kristallarning issiqlik sig'imini aniqlash bo'yicha olib borilgan tajribalarning ko'rsatishicha, Debayning issiqlik sig'imi uchun T^3 kub qonuni hamma kristallar uchun o'rinli emas ekan. Chunki qattiq jism atomlarining tebranishlarini Debay nazariyasida qattiq jism izotrop elastik muhit sifatida qara-

lib, kristall ichki energiyasini turg'un to'liqlar energiyasiga teng deb hisoblanishi, tebranishlardagi fluktuatsiyalar, panjaradagi atomlar yoki ionlarning buralma tebranishlari, molekulalar ichidagi atomlarning tebranishlari hisobga olinmagani uchun barcha xil kristallarning issiqlik sig'imini tushuntirib bera olmaydi. Bu qonun panjara tugunlaridagi atomlar fazoning uch yo'nalishida taxminan bir xil yoki bir-biriga yaqin kuchlar bilan bog'langan sodda srukturali kristallar uchun bajariladi. Masalan, grafit tipidagi qatlamli strukturaga ega kristallarda qatlamdagi atomlar orasidagi kuchlar qatlamlararo atomlar orasidagi kuchdan ancha katta va past temperaturalarda grafitning issiqlik sig'imi temperaturaning kvadratiga proporsional o'zgaradi. Ipsimon yoki zanjirli strukturaga ega bo'lgan kristallar uchun esa past temperaturalarda issiqlik sig'imi temperaturaga proporsional o'zgarishi aniqlangan. Shuni aytib o'tish kerakki, agar kristall o'rganilayotgan temperaturalar sohasida 2-tur strukturaviy faza o'zgarishi sodir bo'lgudek bo'lsa, issiqlik sig'imining monoton o'zgarishida keskin sakrash kuzatiladi. Shu sababdan issiqlik sig'imining temperaturaga bog'liqligi orqali 2-tur faza o'tishlarini o'rganish mumkin.

5.7. Kristall atomlarining nolinci tebranishlari va mutlaq nol temperaturadagi Debay temperaturasi

Qattiq jism fizikasi bo'yicha mavjud an'anaviy darsliklarda Debay temperaturasi θ_D ushbu temperaturadan kichik ($T < \theta_D$) temperaturalarda to'liq nolgacha 10 % dan ortiq o'zgarishga uchramaydi deb hisoblanadi. Ammo hozirgi vaqtdagi ilmiy adabiyotlardagi tajriba natijalariga, jumladan, neytronografiya ma'lumotlariga ko'ra, bunday emas. Chunonchi, neytronlar difraksiyasi ma'lumotlariga ko'ra, TiC titan karbidining Debay temperaturasi xona temperaturasida 860 ± 40 K bo'lsa, 78 K temperaturada 520 ± 28 K ekanligi ko'rsatilgan. Zamonaviy ilmiy adabiyotlardagi eksperimental ishlarda 300 – 0 K temperaturalar oraligida Debay temperaturasi 22 % dan 40 % gacha kamayishi mumkinligi ko'rsatilgan (5.1- jadvalga qarang). Yuqori $T > \theta$ temperaturalarda issiqlik tebranishlarining amplitudasining temperaturaga chiziqli bo'lmagan, angarmonik bog'lanishi kuzatiladi va Debay temperaturasining qabul qilingan ma'nosi buziladi. Ammo mo'tadil temperaturadagi Debay temperaturasi bilan mutlaq nol temperaturadagi Debay temperaturasi orasidagi bog'lanishni aniqlash mumkin.

Kristall panjara atomlarining tebranishlar nazariyasiga ko'ra, panjara atomlarining normal tebranishlarining energiyasi massasi tebranayotgan

atomning massasiga, chastotasi esa ularning tebranishlari chastotasiga teng bo'lgan kvant ossilyatorining energiyasiga teng deb hisoblanadi. Kvant ossilyatorining, ya'ni fononning energiyasi kvantlangan bo'ladi va u (5.1) ifoda bo'yicha aniqlanadi. $n = 0$ kvant soniga to'g'ri keluvchi nolinci tebranishlar energiyasi (5.1) ifodaga ko'ra, quyidagicha bo'ladi:

$$\varepsilon_0 = \frac{1}{2} h \nu_0. \quad (5.62)$$

Bu tebranishlar mutlaq nol temperaturada ham to'xtamaydigan va energiyasi temperaturaga bog'liq bo'lmagan nolinci tebranishlardir. Ular issiqlik elitmaydi ham, uzatmaydi ham. Demak, nolinci tebranishlar issiqlik tebranishlari emas. Ushbu tebranishlarning mavjudligi kvant mexanikasidagi noaniqlik munosabati bilan bog'liq. Bu munosabatga ko'ra, kvant ob'ektlar (zarralar) uchun

$$\Delta x \times \Delta p_x \geq \hbar \quad (5.63)$$

tengsizlik o'rinlidir. Ushbu tengsizlikning ma'nosi shundan iboratki, fazoda tebranayotgan atomning koordinatasini va impulsini (tezligini) bir vaqtda aniqlash mumkin emas. Agar uning koordinatasini aniq aniqlasak, ya'ni $x \rightarrow 0$ (tinch turibdi) deb qarasak, uning impulsi (5.63) tengsizlikka ko'ra, cheksiz katta bo'lib ketadi. Aksincha, tezligi (impulsi) $v = 0$ deb qaralsa, uning koordinatasi noaniq $x \rightarrow \infty$ bo'lib qoladi. Demak nolinci tebranishlar energiyasi - bu atom ega bo'lishi mumkin bo'lgan eng kichik energiya miqdoridir. Shunday qilib, kristalldagi atomlar $T = 0$ K temperaturada nolinci tebranishlar energiyasiga mos keluvchi eng kichik chastota bilan tebranadi. Ma'lumki, issiqlik tebranishlarining Debay nazariyasiga ko'ra, Debay temperaturasida kristallda chastotasi ν dan minimal $\lambda_{\min} = 2a$ (a – panjara doimiysi) to'liq uzunlikka mos keluvchi $\nu_D = \nu_{\max}$ chastotagacha ega bo'lgan barcha normal tebranishlar uyg'onadi. $\nu_{\max}$ chastotaga ega bo'lgan tebranishlar energiyasining kvanti quyidagicha aniqlanadi:

$$\varepsilon_{\max} = h \nu_{\max}. \quad (5.64)$$

$\nu < \nu_{\max}$ chastotalarda turg'un to'liqlar vujudga kela olmaydi. Ular zaif uyg'ongan bo'lib, darhol so'nadi. To'liq uzunligi $\lambda > \lambda_{\min} = 2a$ shartni qanoatlantiruvchi to'liqlar $\nu_{\max}$ chastota uyg'ongandan keyingina turg'unlashadi. Binobarin, $T = \theta_D$ temperaturada $\nu = \nu_{\max}$ chastotali fonon-

ning energiyasi kvantlanishning birinchi $n = 1$ energetik sathiga to'g'ri keladi va uning energiyasi (5.62) va (5.64) ifodalarga ko'ra, quydagicha aniqlanadi:

$$\varepsilon_{max} = h\nu_{max} = (1+1/2)h\nu_0 = \frac{3}{2} \times h\nu_0. \quad (5.65)$$

(5.49) ifodaga ko'ra, Debay temperaturasi bilan Дебай частотаси $\nu_D = \nu_{max}$ orasida quyidagicha munosabatni olamiz:

$$\theta_D k_B = h\nu_{max} \text{ yoki } \nu_{max} = \frac{k_B}{h} \times \theta_D. \quad (5.66)$$

Agar kristalda $T < \theta_D$ temperaturalarda faza o'tishlari bo'lmasa mutlaq nol temperaturadagi nolinchii tebranishlarning chastotasi ν_0 uchun ham (5.66) tenglikka o'xshash tenglikni yozish mumkin:

$$\nu_0 = \frac{k_B}{h} \times \theta_0, \quad (5.67)$$

bunda θ_0 – nolinchii tebranishlar chastotasiga mos keluvchi Debay temperaturasi. (5.66) va (5.67) ifodalardan

$$\theta_0 = \frac{2}{3} \theta_D \quad (5.68)$$

ekanligi kelib chiqadi. Haqiqatdan ham bunday bog'lanishni keyingi yillardagi ilmiy adabiyotlardagi eksperiment natijalari tasdiqlaydi. 5.1-jadvalda xona va kriogen T_1 va T_2 temperaturalarda ($T_1 = 0 \text{ K}$, $T_2 = 78 \text{ K}$; T_1 va T_2 temperaturalar yaqin bo'lganligi uchun $\theta_0(T_1) \approx \theta_0(T_2)$ deb hisoblash mumkin) turli sinflarga mansub birikmalar (yarimo'tkazgichlar, binar va ko'p tarkibli qiyin eruvchi) va qalayi uchun (5.68) formula bo'yicha hisoblangan Debay temperaturalari va ilmiy adabiyotlardagi tajriba natijalari taqqoslangan. Ushbu 5.1-jadvaldan ko'rinib turibdiki, turli sinf kristallari uchun (5.68) formula bo'yicha aniqlangan va ilmiy adabiyotlarda keltirilgan tajribalardan olingan kriogen temperaturadagi Debay temperaturalari 2 % dan 13 % gacha farq bilan mos tushmoqda. Mutlaq nol temperaturada Debay temperaturasi Debay funksiga (tebra - 5.1-jadval

Xona va kriogen temperaturalaridagi Debaya temperaturalari. θ_D – xona temperaturasi, θ_0 – kriogen temperaturada; θ_{0e} - va θ_{0h} – mos holda eksperiment va hisob ma'lumotlari.

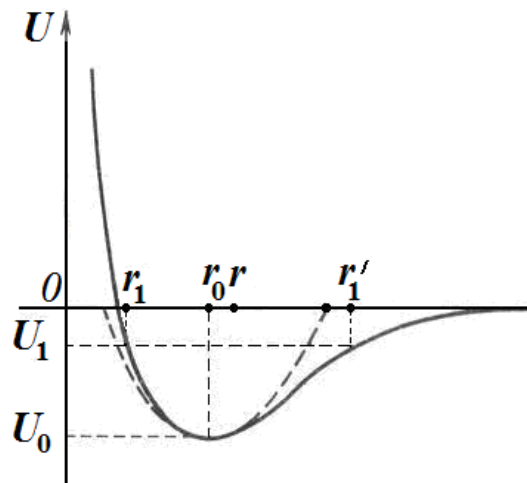
№	Modda	θ_D, K T= 300 K	θ_{0e}, K		θ_{0h}, K	$\Delta\theta_0$, K	$\Delta\theta_0/\theta_{0h}$, %
			T = 0 K	T = 78 K			
1	GaS	454 [*]	263 [*]		302	39	12.9
2	GaTe	267 [*]	165 [*]		177	12	6.7
	TiC _{0.97}	860 ^{**}		520 ^{**}	573	53	9.2
4	TiC _{0.88}	700 ^{**}		480 ^{**}	467	13	2.8
5	TiC _{0.70}	590 ^{**}		440 ^{**}	393	47	11.9
6	Zr _z Nb _{1-z} C _x N _y	710 [*]	462 [*]		473	11	2.3
7	α -Sn (kul rang)	230 ^{***}	148 ^{***}		153	5	3.3

Eslatma. Debay temperaturasi aniqlangan metodlar: ^{*}- issiqlik sig'imi bo'yicha ^{**} - neytronlar difraksiyasi bo'yicha, ^{***} - Myossbauer spektrining issiqlik faktori bo'yicha.

nishlar chastotalarining spektriga) bog'liq bo'lmay, faqat nolinchi tebranishlar qilayotgan atomning massasiga va nolinchi tebranishlar amplitudasiga bog'liq bo'lishini ko'rsatish mumkin.

5.8. Qattiq jismlarning issiqlikdan kengayishi

Qattiq jismlarning issiqlikdan chiziqli kengayishi juda yaxshi ma'lum hodisadir. Ammo bu qonuniyatni bizga yaxshi ma'lum bo'lgan kristall panjaradagi atomlarning chiziqli garmonik ossillyator deb qarashga asoslangan Debay nazariyasi bilan tushuntirish mumkin emas. Bunday tebranish qilayotgan atomlar potensial chuqurchasida qandaydir muvozanat vaziyatiga nisbatan simmetrik bo'lgan vaziyatlarda bo'ladi. Ularning o'rtacha koordinatalari esa o'zgarmas bo'lib chiqadi. Bunday harakat qilayotgan atomning potensial chuqurchasi atomning muvozanat vaziyatiga nisbatan simmetrik bo'lgan parabola bo'lib, (u 5.7 – rasmda shtrix chiziq bilan belgilangan), mos holda panjara doimiysi o'zgarmay qoladi va panjaraning issiqlikdan kengayishi kuzatilmasligi kerak. Demak, kristall panjaradagi atomlarning tebranishlarini garmonik tebranishlar deb qarash kristallning issiqlikdan kengayish qonuniyatini tushuntirib bera olmaydi. Haqiqatdan ham real holda kristall panjarasidagi atomning potensial chuqurchasi atomning panjaradagi muvozanat



5.7-rasm. Potensial chuqurlikda issiqlik tebranma harakat qilayotgan atom.

vaziyatiga to'g'ri keluvchi r_0 koordinatasiga nisbatan asimmetrikdir. Bu potensial 5.7-rasmda tutash chiziq bilan tasvirlangan. Potensial chuqurlikning asimmetrikligi qattiq jism zarrasining tebranishi angarmonik ekanligini bildiradi. Temperatura ortishi bilan potentsial chuqurlikdagi atomning kinetik energiyasi ortib, aytaylik T_1 temperaturaga mos keluvchi $U_1 > U_0$ energiyaga ega bo'lib, avvalgi r_0 muvozanat vaziyatiga nisbatan kattaroq bo'lgan $r > r_0$ yangi muvozanat vaziyati atrofida tebranma harakat qila boshlaydi. Agar kristallning temperaturasi oshirib borsak, uning ichki energiyasi ham ortib borib, mos holda kristall atomining tebranishi muvozanat vaziyatining koordinatasi ham ortib boradi. Bu esa atomlar orasidagi masofani (panjara doimiysini) ortib borishiga, bino-barin, qattiq jismning chiziqli o'lchamlarining kattalashuviga olib keladi. 5.7 - rasmdan ko'rinib turibdiki, jismning temperaturasi mos holdagi energiyasi qancha kichik bo'lsa atomning potensial chuqurligi shunchalik simmetrik bo'lgan potensial chuqurlik bilan mos tushadi va atomning muvozanat vaziyatidan chetlashuvi shuncha kichkina bo'ladi. Demak, jismning issiqlikdan kengayish koeffitsienti uning temperaturasi mutlaq nolga yaqinlashishi bilan nolga intiladi.

Endi jismning issiqlikdan kengayish qonuniyatini miqdoriy jihatdan ko'rib chiqamiz. Agar 5.7-rasmda shtrix bilan tasvirlangan simmetrik potensial chuqurlikda atom yoki zarra garmonik tebranishlar qilganida edi, u holda, ma'lumki, atom muvozanat vaziyatidan x masofaga siljiganda hosil bo'ladigan kvazielastik kuch bu siljishga proporsional bo'lar edi. Bu holda atom koordinatasi o'zgarishi bilan $U(x)$ - potensial energi-

yaning o'zgarishi siljish (x) ga nisbatan quyidagi parabola tenglamasi bo'yicha o'zgaradi:

$$U(x) = gx^2, \quad (5.69)$$

bunda g – kvazielastiklik koeffitsiyenti. Bu parabola r_0 nuqtadan o'tuvchi U energiya (ordinta) o'qiga simmetrik bo'lgan bo'lar edi. Shu sababdan atomning muvozanat vaziyatidan chap va o'ng tomonga siljish kattaliklari o'zaro teng va tebranish markazi atomning muvozanat vaziyati r_0 ga to'g'ri kelar edi. Tabiiyki, bu holda jismni qizdirish faqat uning atomlarining tebranish amplitudalarining o'sishiga olib kelar, ular orasidagi o'rtacha masofa esa o'zgarmasdan qolar edi. Ammo biz hozirgina ko'rib o'tdikki, kristalldagi atomning potensial chuqurligi muvozanat vaziyatiga nisbatan asimmetrikdir. Tebranayotgan atomning potensial chuqurligining asimmetrik holatini e'tiborga olish uchun (5.69) ifodaga asimmetriklikni ifodalovchi tuzatma kiritish kerak:

$$U(x) = gx^2 - \gamma x^3, \quad (5.70)$$

bunda γ -angarmoniklik koeffitsiyenti bo'lib, x^3 atomlarning o'zaro itarilishining asimmetrikligini ifodalaydi. Kvazielastik va atomlarning o'zaro itarilish kuchlar ta'sirida tebranayotgan atomning o'nga siljishida ($r > r_0$ bo'lgan hol) uning (5.70) ifoda bilan aniqlanuvchi natijaviy potensial energiyasi γx^3 hadga kamayadi, aksincha chapga siljiganda ($r < r_0$ bo'lgan hol) γx^3 hadga ortadi va shu tariqa tebranayotgan zarraning potensial chuqurlikning asimmetrikligi ta'minlanadi. Tebranish markazi

$$r = r_0 + \bar{x} \quad (5.71)$$

tenglik bilan aniqlanib, bunda $\bar{x}$ atomning muvozanat vaziyatidan o'rtacha chetlanishi. $\bar{x}$ kattalikni hisoblash uchun bu kattalikning takrorlanish ehtimoliyatini bilishimiz kerak. Buning uchun biz qandaydir fizikaviy kattalikning (bizning ko'rayotgan masalada bu kattalik $\bar{x}$) mumkin bo'lgan qiymatlarining o'rtachasini topish uchun ularning termodinamikaviy ehtimoliyatlariga asosan aniqlovchi Bolsman taqsimot funksiyasidan foydalanamiz:

$$\bar{x} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-U(x)/k_B T} dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-U(x)/k_B T} dx}. \quad (5.72)$$

Biz qarayotgan masalada atomning muvozanat vaziyatidan chetlanishi juda kichkina kattalikdir. Angarmonizmni hisobga oluvchi ikkinchi had esa yana ham kichkina bo'lganligi uchun integrallar ostidagi eksponensial funktsiyani potentsal energiyaning (5.70) ifodasidan foydalanib, qatorga yoyishimiz mumkin:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(gx^2 - \gamma x^3)/k_B T} dx \approx \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-gx^2/k_B T} (1 + \gamma \frac{x^3}{k_B T}) dx. \quad (5.73)$$

Bu tenglikdan foydalanib, (5.72) integrallar nisbatining surat va maxraji uchun quyidagi ifodalarni hosil qilamiz:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-(gx^2 - \gamma x^3)/k_B T} dx \approx \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-gx^2/k_B T} (x + \gamma \frac{x^4}{k_B T}) dx = \frac{3\gamma}{4} \sqrt{\frac{\pi(k_B T)^3}{g^5}}, \quad (5.74)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(gx^2 - \gamma x^3)/k_B T} dx \approx \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-gx^2/k_B T} (1 + \gamma \frac{x^3}{k_B T}) dx = \sqrt{\frac{\pi k_B T}{g}}. \quad (5.75)$$

Bu hisoblashlarda toq funktsiyaning integrali nol ekanligidan foydalandik. (5.74) va (5.75) ifodalarga ko'ra, tebranishning o'rtacha siljishi uchun (5.72) tenglikdan quyidagi ifodani olamiz:

$$\bar{x} = \frac{3}{4} \frac{\gamma k_B T}{g^2}. \quad (5.76)$$

Qattiq jismning issiqlikdan kengayish koeffitsiyentini topish uchun (5.76) munosabatdan va bizga yaxshi ma'lum bo'lgan quyidagi termodinamikaviy munosabatdan foydalanamiz:

$$\alpha = \frac{r - r_0}{r_0} \frac{1}{T} = \frac{3}{4} \frac{k_B \gamma}{r_0 g^2}. \quad (5.77)$$

So'nggi ifodadan ko'rinib turibdiki, jismning chiziqli kengayish koeffitsiyenti temperaturaga bog'liq bo'lmay, faqat jismning kvazielastikligini va tebranishning angarmonizmini ifodalovchi kattaliklarga bog'liqdir. Bu natija atomlarning tebranishining o'rtacha energiyasini klassik nazariyada foydalanilgan $k_B T$ kattalik bilan ifodalanishi bilan bog'liq. Agar (5.76) ifodadagi $k_B T$ kattalikni kvant ossillyatorning energiyasini

aniqlovchi (5.30) ifoda orqali undagi nolinchi tebranishlar energiyasini e'tiborga olmay belgilasak, tajribalarda kuzatiladigandek, bu holda ham $T \rightarrow 0$ shart bajarilganda jismning issiqlikdan kengayishi ham nolga intiladi. Atomning potensial energiyasi muvozanat vaziyatiga nisbatan simmetrik bo'lganda, ya'ni $\gamma = 0$ bo'lganda jismning issiqlikdan kengayish koeffitsiyenti ham nolga aylanadi. Metallarning tipik vakillari uchun $\alpha \sim (10-50) \times 10^{-6} \frac{1}{K}$. Turli qattiq jismlar uchun $\alpha \approx (10^{-4} \div 10^{-6}) \frac{1}{K}$ oraliqda yotadi. Yuqori temperaturalarda klassik nazariyaga asoslanib topilgan jismning issiqlikdan chiziqli kengayish koeffitsienti tajriba natijalariga mos tushadi. Ammo amalda temperatura pasayishi bilan metallarda u temperaturaga chiziqli bog'liq holda kamayadi: $\alpha \sim T$, dielektriklar uchun esa $\alpha \sim T^3$ qonuniyat kuzatiladi. α ni nazariy aniqlashga jiddiy yondoshuv jismning fonon spektrining temperatura va hajmga real bog'lanishiga asoslangan bo'lishi kerak. Kub strukturali kristallar uchun $r_0 = a$ deb olish mumkin (a - kristall panjara doimiysi). Murakkab strukturali yoki atomlar orasidagi ta'sirlashuv kuchlari izotrop bo'lmagan kristallar uchun, tabiiyki, issiqlikdan kengayish koeffitsiyenti turli yo'nalishlarda turlicha bo'ladi.

(5.77) ifodadan muayyan qattiq jism uchun issiqlikdan kengayish koeffitsiyentining chiziqli tebranayotgan bitta zarraga to'g'ri keluvchi issiqlik sig'imi $C_0 = k_B$ ga nisbati temperaturaga bog'liq bo'lmagan o'zgarmas kattalik ekanligini isbot qilish mumkin:

$$\chi = \frac{\alpha}{C_0} = \frac{3}{4} \frac{\gamma}{g^2 r_0}, \quad (5.78)$$

bu ifodadagi ayni modda uchun doimiy bo'lgan kattalik χ - **Gryunayzen doimiysi** deb ataladi. Bu kattalik turli metallar uchun 1.5 bilan 2 oralig'ida yotadi. Oxirgi ifodadan jismning (molyar) issiqlik sig'imi issiqlikdan kengayish koeffitsiyentiga proporsional ekanligi kelib chiqadi.

5.9. Qattiq jismlarning issiqlik o'tkazuvchanligi

Bu masalani abbal dielektriklar uchun ko'rib chiqamiz. Gazlarda va suyuqliklarda issiqlik uzatilishi ularning tashkil etgan zarralarining ko'chishi bilan (konveksiya tufayli) sodir bo'ladi. Qattiq jismlarda esa issiqlik uzatilishining mexanizmi ularni tashkil etgan zarralarining ko'chishi bilan emas, balki ularning tebranma harakati tufayli issiqlik

energiyasini uzatilishi bilan bog‘liq. Agar kristall panjaraning biror tugunidagi atomga boshqa atomlarga nisbatan yuqoriroq temperatura berilsa, bu atom boshqa tugundagi atomlarga nisbatan kattaroq amplituda bilan tebrana boshlaydi va qo‘shni atomlar bilan bog‘langan bo‘lganligi uchun ularni ham kattaroq amplituda bilan tebranishga majbur qiladi. Shu tariqa issiqlik tebranishlari kristall panjaraning bir atomidan boshqa atomlariga to‘lqin jarayoni sifatida tarqaladi. Agar ma’lum bir L uzunlikdagi sterjenning bir uchini qizdirsak, ushbu qizdirilayotgan tomondan qizdirilmayotgan tomonga yo‘nalgan uzluksiz turg‘un issiqlik oqimi paydo bo‘ladi. Agar kristall atomlarining tebranishlari garmonik bo‘lib, o‘zaro ta’sirlashmaydigan elastik to‘lqinlar sifatida tarqalganida edi, issiqlik oqimi hech qanday qarshilikka uchramagan holda tovush tezligida tarqalib, kristallning issiqlik o‘tkazuvchanligi cheksiz katta bo‘lar edi. Vaholanki, real kristallarda atomlarning normal tebranishlari bir-biridan mustaqil emas. Tebranishlar uchrashganda o‘zaro ta’sirlashib, energiya almashadi va yo‘nalishlarini o‘zgartiradi. Natijada ma’lum bir chastotali tebranish energiyasi boshqa xil chastotali tebranishlarga uzatiladi va kristall bo‘ylab issiqlik muvozanati tiklanadi. Molekulyar kinetik nazariyaga va tajriba natijalariga ko‘ra biror dt vaqt ichida dS yuzadan o‘tayotgan issiqlik miqdori quyidaicha aniqlanadi:

$$dQ = - \lambda \frac{dT}{dx} dS \times dt, \quad (5.79)$$

bunda λ - issiqlik o‘tkazuvchanlik koeffitsiyenti, $\frac{dT}{dx}$ – temperatura gradi-
enti. λ - miqdor jihatdan bir birlik temperatura gradiyenti mavjud bo‘lganda vaqt birligida issiqlikning tarqalish yo‘nalishiga ko‘ndalang bo‘lgan birlik ko‘ndalang yuzadan o‘tayotgan issiqlik miqdoridir.

Kristallardagi issiqlik o‘tkazuvchanlikni panjaradagi garmonik bo‘lmagan normal tebranma harakat kvantini tashuvchi fononlar yordamida tushuntirish qulay. Bu holda issiqlik uyg‘onishi ro‘y berayotgan kristallni o‘zaro to‘qnashuvchi va ta’sirlashuvchi fononlar bilan to‘lgan parallepiped sifatida qaraladi. Fononlar o‘zaro ta’sirlashganda bir fonon bir necha fononga yoki aksincha ikkita fonon bitta fononga aylanishi mumkin. Boshqacha aytganda, fononlarning fononlarda (fonon-fonon) sochilish jarayoni sodir bo‘ladi. Fonon-fonon sochilishining ehtimoliyati sochilishning **effektiv kesimi** deb ataluvchi σ_{ef} fizik kattalik bilan xarakterlanadi. Agar o‘zaro ta’sirlashayotgan fononlarni r_{ef} effektiv radi-

usli shar shaklida qaralsa, u holda sochilishning effektiv kesim yuzasi quyidagicha aniqlanadi:

$$\sigma_{ef} = \pi r_{ef}^2. \quad (5.80)$$

Fonon-fonon sochilishi faqat ularning sochilish effektiv kesimlari kesishgandagina sodir bo'lishi mumkin. Sochilish jarayoni atomlar tebranishlarining angarmonizmi tufayli sodir bo'lganligi uchun fononlarning effektiv radiusi normal tebranishlarining angarmonizmini xarakterlovchi (5.70) ifodadagi angarmoniklik koeffitsienti γ ga, effektiv kesim esa uning kvadratiga proporsional bo'ladi: $\sigma_{ef} \sim \gamma^2$. Hisoblashlar ketma-ket ikki to'qnashuv orasidagi fononlarning o'rtacha erkin yugurish masofasi quyidagicha aniqlanishi mumkinligini ko'rsatadi:

$$\lambda_f = \frac{1}{n_{ef}\sigma_{ef}} \sim \frac{1}{n_f g^2}, \quad (5.81)$$

bunda n_f – fononlar konsentratsiyasi. Vaholanki, kristallarda issiqlik energiyasini uzatuvchilar fononlar ekan, ma'lum bir temperaturalar oralig'ida kristallardagi fonon gazini ideal gazga o'xshatish mumkin bo'ladi. (Kriogen temperaturalarda issiqlik to'liqini kvant xarakterga ega bo'ladi). U holda (5.79) ifodadagi qattiq jismning issiqlik o'tkazuvchanlik koeffitsientini ideal gazlardagi issiqlik o'tkazuvchanlik koeffitsiyenti kabi olish mumkin:

$$K_{gaz} = \lambda \nu c_V / 3, \quad (5.82)$$

bunda ν – fononning (tovush) tezligi, λ – gaz molekulasining erkin yugirish yo'li, c_V – kristallning hajm birligidagi issiqlik sig'imi. Agar fononning erkin yugurish yo'lining (5.81) ifodasidan foydalansak, kristallning issiqlik o'tkazish koeffitsiyenti uchun (5.82) ifodaga o'xshash quyidagi tenglikni hosil qilamiz:

$$K \sim \frac{c_V \nu}{3 n_f g^2}. \quad (5.83)$$

Endi issiqlik o'tkazuvchanlik koeffitsiyentining ifodasini issiqlik sig'imi uchun ko'rganimizdek temperaturaning ikkita (past va yuqori) chegaraviy sohalari uchun tahlil qilamiz.

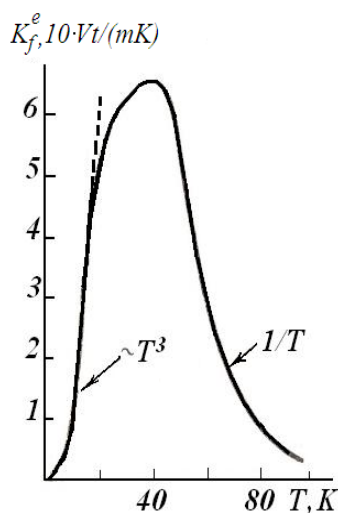
Yuqori temperaturalar sohasida ($T > \theta$) kristall panjaraning energiyasi temperaturaga to'g'ri proporsional bog'lanishda bo'ladi. Bu holda yuqorida aytib o'tganimizdek, fononning energiyasi temperaturaga bog'liq bo'lmagan chegaraviy $\hbar\omega_D \sim k_B\theta_D$ qiymatiga erishib, fonon gazining konsentratsiyasi esa temperaturaga proporsional ravishda o'sadi: $n_f \sim T$. Ushbu munosabatni hisobga olsak, yuqori temperaturalar sohasida issiqlik o'tkazuvchanlik koeffitsiyenti K_f uchun (5.83) ifodadan quyidagi munosabatni olamiz:

$$K_f \sim \frac{c_V v}{3Tg^2}. \quad (5.84)$$

Vaholanki, $300 \leq T < \theta$ temperaturalarda issiqlik sig'imi c_V temperaturaga bog'liq bo'lmaganligi uchun (Dyulong-Pti qonuniga ko'ra) oxirgi formuladan kelib chiqadiki, ko'rsatilgan temperaturalar oralig'ida issiqlik o'tkazuvchanlik koeffitsiyenti temperaturaga teskari proporsionaldir. Bu qonuniyat haqiqatdan ham tajriba natijalariga mos keladi. Issiqlik o'tkazuvchanlik koeffitsiyentining miqdoriy jihatdan ifodalovchi (5.84) formulaga temperaturadan tashqari fonon (tovush) tezligi va angarmoliklik koeffitsiyenti ham kiradi. Bu kattaliklar qattiq jismning o'zaro ta'sirlashuvchi zarralarining orasidagi bog'lanish kuchlariga kuchli bog'liqdir. Bu kuchlar kamayishi fonon tezligining kamayishiga, tebranish amplitudasining esa kattalashuviga olib keladi. Oxirgi omil tufayli esa normal tebranishlarning angarmolikligi, ya'ni angarmoliklik koeffitsiyenti ortadi. Hozirgina tilga olgan har ikkala omil tufayli panjara zarralari orasidagi bog'lanish kuchlarining kamayishi bilan issiqlik o'tkazuvchanlikning koeffitsiyenti kamayadi. Bu qonuniyat ham ko'plab tajribalarda o'z tasdig'ini topgan. Masalan, bog'lanish energiyasi kamayib boruvchi olmos, kremniy va germaniy elementlarining qatorida issiqlik o'tkazuvchanlik koeffitsiyentining keskin kamayib borishi ($550 \rightarrow 54$) $\frac{Vt}{m \times K}$ kuzatiladi. K tebranuvchi zarraning (atomning) massasiga teskari proporsional holda kuchli bog'liq ekanligi aniqlangan. Shuning uchun elementlar Davriy sistemasining dastlabki qatoridagi elementlarning issiqlik o'tkazuvchanligi jadvalning pastki qismidagi elementlarnikiga nisbatan bir necha tartibgacha kam bo'lishi kuzatiladi. Binobarin, fononlar sochilishida izotop effekti (turli izotoplarda turli darajada sochilish) kuzatiladi.

Past temperaturalar ($T < \theta$) sohasida temperatura pasayishi bilan fononlar konsentratsiyasi (normal tebranishlar g'alayonlanishi) keskin

kamayib, shunga mos holda ularning erkin yugurish yo‘llari λ_f ham (5.81) ifodaga ko‘ra, keskin ortadi. $T \leq \theta/20$ temperaturalarda λ_f kristallning o‘lchamiga yaqinlashib boradi. Temperaturani bundan keyingi pasayishida λ_f o‘zgarmay qoladi. Chunki u kristall o‘lchamidan katta bo‘lishi mumkin emas. Past temperaturalar sohasida qattiq jismning issiqlik sig‘imi temperaturaning uchinchi darajasiga proporsional bo‘lganligi uchun ((5.57) ifodaga qarang) (5.83) ifodaga muvofiq issiqlik o‘tkazuvchanlik koeffitsienti ham temperaturaga $K \sim T^3$ qonuniyat bilan bog‘lanishda bo‘ladi. Past temperaturalar sohasida issiqlik o‘tkazuvchanlik koeffitsientini aniqlash bo‘yicha o‘tkazilgan tajribalar bu bog‘lanishni tasdiqlaydi. Past temperaturalar sohasida temperatura ortishi bilan fononlar konsentratsiyasi ortadi. Bu hol K kattalikni ortishiga olib kelishi kerak edi. Ammo amalda bu narsa kuzatilmaydi. Bu shu bilan tushuntiriladiki, temperatura ortishi bilan fononlar soni ortishi bilan bir vaqtda fonon-fonon sochilishi kuchayadi va fononlarning erkin yugurish yo‘li kamayadi. Bu omillar issiqlik uzatish koeffitsiyentini past temperaturalarda o‘ziga xos holda o‘zgarishga olib keladi. Uncha yuqori bo‘lmagan temperaturalarda birinchi omil, ya’ni fononlar sonining (konsentratsiyasining) o‘sishi ustunlik qiladi, bu esa K kattalikning o‘sishiga sabab bo‘ladi. Fononlar konsentratsiyasining ma’lum bir miqdoridan keyin ikkinchi omil, ya’ni fonon-fonon sochilish ustunlik qiladi, natijada past temperaturalar sohasida temperatura ortishi bilan K avval o‘sib qandaydir maksimum qiymatga erishadi va keyin kamayadi. 5.8-rasmida sun’iy sapfirning past temperaturalar sohasida issiqlik o‘tkazuvchanlik koeffitsientining temperaturaga bog‘lanish grafiqi berilgan. Yetarlicha yuqori temperaturalarda fononning erkin yugurish yo‘li temperaturaga teskari proporsional bog‘lanishda bo‘ladi va mos holda bu temperaturalarda K



5.8- rasm. Sun’iy sapfirning issiqlik o‘tkazuvchanlik koeffitsientining temperaturaga bog‘liqlik grafiqi.

kattalik ham temperaturaga teskari proportsional bo‘ladi. Sof kristallarda mutlaq nol temperaturada fononlar konsentratsiyasi uncha ko‘p bo‘lmaydi va fonon - fonon sochilish ehtimoliyati ham kichkina bo‘ladi. Natijada fononning erkin yugurish yo‘li nuqsonsiz kristallda uning d o‘lchamiga (diametriga) bog‘liq bo‘lib qoladi. Bu holda $\lambda_f \approx d$ deb olish mumkin. Kristallardagi bog‘lanish kuchlari anizotrop bo‘lganligi uchun issiqlik o‘tkazuvchanlik koeffitsienti ham monokristallarda yo‘nalishga bog‘liq bo‘ladi.

Metallarda issiqlik o‘tkazuvchanlik. Biz yuqorida qilgan barcha mulohazalar dielektrik kristallar uchungina tegishli bo‘lib, metallarda issiqlik uzatishda kollektivlashtirilgan (erkin) elektronlar ham qatnashadi. Chunonchi, sof metallarda asosiy issiqlik o‘tkazuvchilar fononlar emas, balki valent elektronlardir. Masalan, yetarlicha yuqori temperaturalarda issiqlik o‘tkazuvchanlikning fonon tashkil etuvchisi elektron tashkil etuvchisining 1-2 % ni tashkil etadi. Shuning uchun metallar dielektrik moddalarga nisbatan yuqori darajadagi issiqlik o‘tkazuvchanlikka ega bo‘ladi. O‘tkazgich kristallarda, chunonchi, metallarda issiqlik o‘tkazuvchanlik koeffitsienti fonon va elektron tashkil etuvchilaridan iborat bo‘ladi: $K = K_f + K_e$ Elektron gazining issiqlik o‘tkazuvchanligini fonon gazining issiqlik o‘tkazuvchanligi kabi aniqlashimiz mumkin. Issiqlik o‘tkazuvchanlikning fonon gazi uchun chiqargan (5.82) ifodasidagi fononga tegishli kattaliklarni (5.81) ifodani hisobga olgan holda elektronlarga tegishli bo‘lgan kattaliklar bilan almashtiramiz:

$$K_e = \frac{\lambda_e v_e c_e}{3}, \quad (5.85)$$

bunda c_e -, v_F - va λ_e – mos holda Fermi sathi atrofidagi elektronlarning issiqlik sig‘imi, elektronlarning tezligi va o‘rtacha erkin yugurish yo‘li. Hisoblashlarning ko‘rsatishicha, ushbu (5.85) ifodaga issiqlik sig‘imining elektron tashkil etuvchisining tegishli qiymatini aniqlovchi (5.28) ifodani qo‘ysak, issiqlik o‘tkazuvchanligining elektron tashkil etuvchisi uchun quyidagi ifodani olamiz:

$$K_e = \frac{\pi^3}{3} \frac{N_e k_A^2}{m_e n_F} \lambda_e T, \quad (5.86)$$

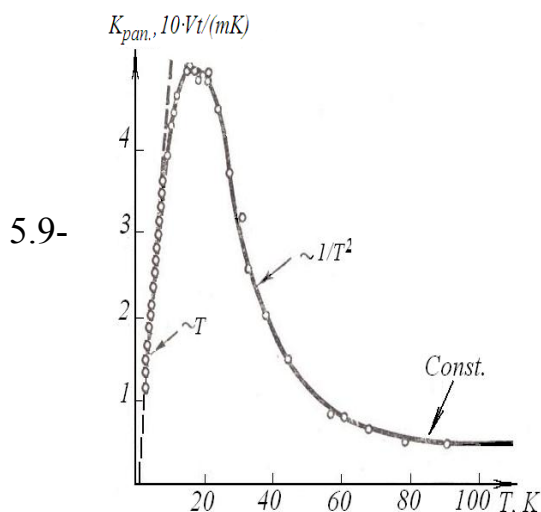
bunda n_F – Fermi sathi atrofidagi valent elektronlar soni. Yetarlicha sof bo‘lmagan metallarda va tartiblanmagan qotishmalarda fononlar bilan

valent elektronlarning erkin yugurish yo'llari deyarli bir xil bo'lganligi uchun fononlar va elektronlarning issiqlik o'tkazuvchanlikdagi ulushlari ham bir xil bo'ladi. Shuni aytib o'tish lozimki, kristallarning o'tao'tkazuvchanlik (qarshiliksiz tok o'tkazish) holatida elektronlar issiqlik o'tkazuvchanlikda qatnashmaydi. Shuning uchun o'tao'tkazuvchanlik holatida kristallarning issiqlik o'tkazuvchanligini faqat fonon tashkil etuvchilari tashkil qiladi. Issiqlik o'tkazuvchanlikning elektron tashkil etuvchisini turli temperaturalar sohasi uchun tahlil qilamiz.

Yuqori temperaturalar ($T > \theta$) sohasida K_e uchun aniqlangan (5.86) ifodaning o'ng tomonidagi kattaliklardan amalda faqat λ_e temperaturaga bog'liq. Uncha past bo'lmagan temperaturalarda λ_e elektronlarni fononlarda sochilishi bilan aniqlanadi va fonon konsentratsiyasiga teskari proporsionaldir:

$$\lambda_e \sim 1/n_f. \quad (5.87)$$

Yuqori temperaturalarda issiqlik energiyasini yutib qo'zg'algan (uyg'ongan) fononlar soni temperaturaga to'g'ri proporsionaldir: $n_f \approx T$. Shuning uchun (5.87) ifodani e'tiborga olsak, (5.86) ifoda o'zgaras kattalik ekanligi kelib chiqadi: $K_e = \text{konst.}$ Shunday qilib, yuqori temperaturalar sohasida sof metallarning issiqlik o'tkazuvchanligi temperaturaga bog'liq emasligi kelib chiqadi. Haqiqatdan ham tajribalardan metallarda issiqlik o'tkazuvchanlik koeffitsienti 80-100 K temperaturalaridan yuqorida deyarli temperaturaga bog'liq bo'lmasligi tasdiqlangan (5.9-rasm).



rasm. Misning issiqlik o'tkazuvchanlik koeffitsientining temperaturaga bog'liqlik grafigi.

Past temperaturalar sohasida ($T < \theta$) (5.60) ifodaga ko'ra, fononlar konsentratsiyasi temperaturaning uchinchi darajasiga proporsional: $n_f \sim$

T^3 va (5.87) ifodaga ko'ra, $\lambda_e \sim 1/T^3$. Ushbu qiymatlarni (5.86) ifodaga qo'ysak,

$$K_e \sim 1/T^2 \quad (5.88)$$

ekanligi, ya'ni past temperaturalarda metallarning issiqlik o'tkazuvchanligi temperaturaning kvadratiga teskari proporsional ekanligi kelib chiqadi.

Juda past temperaturalarda - mutlaq nol temperatura yaqinida fononlar konsentratsiyasi juda kam bo'lganligi uchun elektronlarning sochilishiga metallarda doim uchrab turadigan kirishma atomlar sabab bo'ladi. Bunday hollarda elektronlarning erkin yugurish yo'li λ_e kirishma atomlar konsentratsiyasiga teskari proporsional bo'lib qoladi: $\lambda_e \sim 1/N_{kr}$ va (5.86) ifodaga ko'ra, issiqlik o'tkazuvchanlik koeffitsiyenti temperaturaga to'g'ri proporsional bo'lib qoladi: $K_e \sim T$. Bu qonuniyat ham tajribalarda tasdiqlangan.

Metall qotishmalarida issiqlik tashuvchi elektronlarning kirishma atomlardagi sochilishi boshqa sochilishlardan ustunlik qiladi va kirishmalar miqdorining yuqori qiymatlarida elektronlarning erkin yugurish yo'li fononlarning erkin yugurish yo'liga deyarli teng bo'ladi: $\lambda_e \sim \lambda_f$. Bu holda $K_e \approx K_f$ tenglik bajariladi. Bunday natija ham tajribalarda tasdiqlanadi.

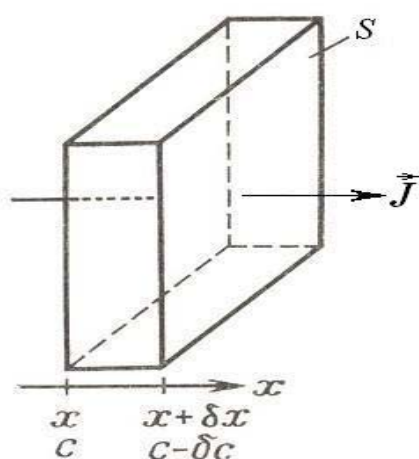
5.10. Qattiq jismlarda diffuziya hodisasi

Qattiq jismlardagi atomlar asosan muvozanat vaziyatlari atrofida kristall panjara doimiysidan katta bo'lmagan amplitudalar bilan tebranadi. Ammo etarlicha yuqori temperaturalarda qattiq jism atomlarining panjara doimiysi tartibidagi ilgarilama harakati sezilarli bo'lib qoladi. Atomlarning bunday siljishlari ko'p marta takrorlanib, ularni jism hajmi bo'ylab tartibsiz harakat qilishiga olib keladi. Bu hodisaga **diffuziya** deyiladi. Diffuziya deyarli hamma vaqt asta sekinlik bilan amalga oshadi. Bunda diffuziyanayotgan atomlarning "siljish qadami" bir atom diametri tartibida bo'ladi. Demak, bu masofa bir necha angstrom bo'ladi. Atomlar panjarada bir joydan boshqa joyga alohida sakrashlar bilan o'tadi. Bu elementar sakrashlar majmuasi atomlarning katta masofalarga ko'chishini ta'minlaydi. Diffuziyaning bir necha mumkin bo'lgan quyidagi sxemalari mavjud; vakansiyalar harakati, kirishma atomlar harakati va atomlarning kristall panjarada o'zaro joy almashuvi. Real kristallarda diffuziyaning bu 3 xili ham turli darajada amalga oshadi. Yuqorida tilga

olingan diffuziyaning uch mexanizmlarining har biri sodir bo'lishi uchun zarur bo'ladigan energiyalarni nazariy hisoblarning ko'rsatishicha, sof metallarda va o'rin almashuvchi qotishmalarda vakansiyalar harakati hisobiga bo'ladigan diffuziya ko'proq uchraydi. Bu xulosani o'tkazilgan ko'p tajribalar ham tasdiqlaydi. Ammo ma'lum bir guruh qotishmalarda (suqilma qattiq eritmalar) kristall panjaraning tugunlari orasidagi kichik o'lchamli atomlarning diffuziyasi ko'proq uchraydi. Hajmidagi barcha elementlari bir xil fizikaviy sharoitda bo'lgan bir jinsli jismda diffuziya faqat atomlarning tartibsiz ko'chishiga olib keladi. Agar jismda qandaydir bir jinsli bo'lmagan sohalar bo'lsa, masalan, qandaydir atomlar konsentratsiyasining gradiyenti mavjud bo'lsa, yoki jismning turli qismlari uchun turlicha temperatura yoki turlicha ichki elastik kuchlanish hosil qilinsa, bunday jismda atomlarning yo'nalgan diffuziaviy oqimi hosil bo'ladi.

5.11. Fik qonunlari. Diffuziya koeffitsiyenti

Jismdagi atomlarning tartibsiz issiqlik harakati ularning 3 turli yo'nalishlar bo'yicha butunlay tartibsiz, muayyan yo'nalishga ega bo'lmagan holda ko'chishlariga olib keladi. Jismning parallelopiped shaklidagi olingan qismining ko'ndalang kesim yuzasi S bo'lsin (5.10-rasm). Bu jismning ko'ndalang kesim yuzasidan diffuziya bo'lib o'tayotgan atomlarning miqdori uning hajmiy konsentratsiyasiga to'g'ri proporsional bo'ladi. Agar jismning V hajmidagi diffuziyalanayotgan atomlar



5.10-rasm. Hajmning S ko'ndalang yuzasi va δx qalinligi orqali o'tayotgan zarralar oqimi $\vec{J}$.

soni N bo'lsa, uning hajmiy konsentratsiyasi

$$c = N / V \quad (5.89)$$

bo‘ladi. Agar qarayotgan yuza sohasi zarralar konsentratsiyasi har xil bo‘lgan qismlarga bo‘linsa, qarayotgan paralellipipedning ikki tomoniga vaqt birligida turli sondagi zarralar kelib tushadi. Bu holda zarralarining kuzatiladigan makroskopik natijaviy oqimi quyidagicha bo‘ladi:

$$N/dt = -SD dc/dx, \quad (5.90)$$

bunda x – koordinata, D – qarayotgan modda uchun diffuziyaning musbat proporsionallik koeffitsiyenti. Tajribalarning ko‘rsatishicha, vaqt birligida yuza birligidan unga perpendikulyar yo‘nalishda o‘tayotgan zarralar oqimining diffuziyaviy zichligi quyidagicha aniqlanadi:

$$\vec{j} = -D \text{grad}c. \quad (5.91)$$

Diffuziya koeffitsienti D ikkinchi darajali (rang) tenzor kattalikdir. U faqat kub simmetriyali kristallarda va polikristall moddalarda izotropdir. Simmetriyali kristallarda D ning qiymati kristall yo‘nalishlariga kuchli bog‘langan. (5.91) formula bilan ifodalanuvchi qonun **diffuziyaning birinchi Fik qonuni** deyiladi. Bu qonunning mohiyati shundan iboratki, biror yo‘nalishga perpendikulyar bo‘lgan birlik yuzadan vaqt birligida diffuziyalanayotgan modda oqimining zichligi moddaning konsentratsiyasiga proporsional bo‘lib, konsentratsiya gradiyenti va oqim qarama - qarshi yo‘nalishlarga egadir, ya’ni diffuziyaviy oqim modda konsentratsiyasi kamayishi yo‘nalishida sodir bo‘ladi.

Diffuziya qonuni amaliy masalalarni yechishda qo‘llash uchun bir muncha qulay bo‘lgan diffuziyaning ikkinchi Fik qonunini keltirib chiqaramiz. Berk va vaqt o‘tishi bilan o‘zgarmaydigan S yuza bilan chegaralangan ixtiyoriy V hajm olamiz. Bu hajmdagi diffuziyalanayotgan moddaning M massasini olamiz:

$$M = \int_V cdV. \quad (5.92)$$

Agar S yuza bo‘yicha diffuziyaviy oqim o‘tayotgan bo‘lsa, bu oqim quyidagicha aniqlanadi:

$$I = \oint_S J_n dS, \quad (5.93)$$

bunda $\vec{n}$ - S yuzaga o‘tkazilgan tashqi birlik normal, J_n - diffuziyaviy oqimning $\vec{n}$ normal bo‘yicha tashkil etuvchisi. Demak, I oqim S yuzadan vaqt birligida o‘tayotgan oqim massasiga teng ekan. Endi moddaning

saqlanish qonunini yozamiz. Bu qonunga ko'ra V hajmdagi moddaning vaqt birligidagi o'zgarishi shu vaqt ichida S yuza bo'yicha o'tayotgan massaga teng:

$$\frac{\partial M}{\partial t} = -I = -\oint_S J_n dS. \quad (5.94)$$

Oxirgi ifodadagi minus V hajmdan chiqayotgan musbat oqim M mas-saning kamayishiga mos keladi. (5.92) ifodani (5.94) ifodaning chap tomoniga qo'yamiz va S yuza vaqt bo'yicha o'zgarmas ekanligini hisobga olamiz, u holda

$$\frac{\partial}{\partial t} \cdot \int_V c dV = \int_V \frac{\partial c}{\partial t} dV = -\oint_S J_n dS \quad (5.95)$$

bo'ladi. Berk yuza bo'yicha olingan biror kattalikning integrali uning divergensiya-sidan hajm bo'yicha olingan integraliga tengligini e'tiborga olamiz, ya'ni yozish mumkinki,

$$\oint_S J_n dS = \int_V \operatorname{div} \vec{J} dV. \quad (5.96)$$

Hajm V ixtiyoriy tanlangani uchun oxirgi tenglikdan jismning har bir nuqtasi uchun (5.95) va (5.96) tenglamalardan

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\operatorname{div} \vec{J} \quad (5.97)$$

munosabat kelib chiqadi. (5.91) ifodani oxirgi tenglikka qo'ysak, diffuziyalanuvchi zarra konsentratsiyasini x, y, z koordinatalarga va t vaqtga bog'liqligini ifodalovchi tenglamani olamiz:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \operatorname{div}(D \operatorname{grad} c). \quad (5.98)$$

Bir o'lchamli hol uchun $c = c(x, t)$ bo'ladi va (5.91) va (5.98) tenglamalar mos holda quyidagi ko'rinishlarni oladi:

$$J = -D \frac{\partial c}{\partial x}, \quad (5.99)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial c}{\partial x} \right). \quad (5.100)$$

Diffuziya koeffitsiyenti D konsentratsiyaga va kordinatalarga bog‘liq bo‘lmaganligi uchun (5.98) formula quyidagi ko‘rinishni oladi:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \Delta c \quad (5.101)$$

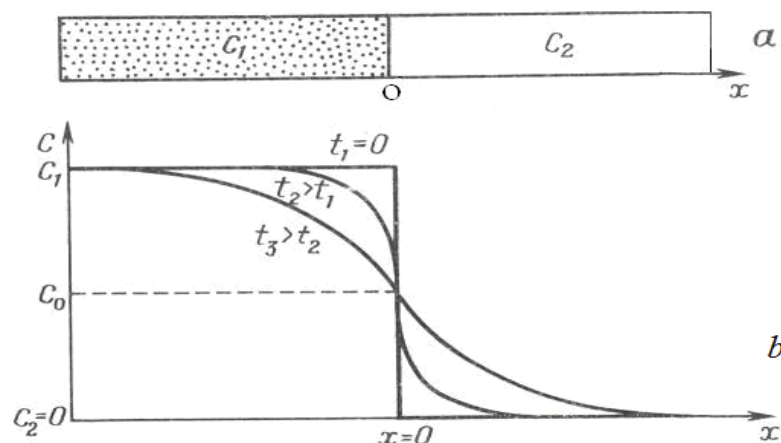
bunda Δ - Laplas operatori. Bir o‘lchamli hol uchun oxirgi ifoda quyidagicha bo‘ladi:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}. \quad (5.102)$$

Uch o‘lchovli fazo uchun esa bu tenglama quyidagi ko‘rinishni oladi:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \nabla^2 c. \quad (5.103)$$

(5.102) va (5.103) ifodalar diffuziya uchun **Fikning ikkinchi qonunini** ifodalaydi. Anizotrop muhit uchun diffuziya jarayoni faqat birgina diffuziya koeffitsiyenti bilan xarakterlana olmaydi. Bunday muhitda bir nechta diffuziya koeffitsiyenti kiritish kerak. Chunki bunday muhitda diffuziya koeffitsienti skalyar kattalik bo‘lmay, balki ikkinchi darajali (rangli) tenzor kattalikdir. Bu holda (5.100) ifodadagi diffuziya koeffitsienti D differensiallash operatori ostida qolishi kerak. $D = \text{const}$ bo‘lgan hol uchun (5.102) tenglamaning xususiy yechimini oson amalga oshirish mumkin bo‘lgan soddaga chegaraviy shart uchun ko‘ramiz. Uzun silindr shaklidagi sterjen bo‘ylab o‘tgan o‘qni x o‘qi deb olamiz. Sterjen bir xil atomlardan tashkil topgan bo‘lib, koordinata boshi deb sterjenning o‘rtasini olamiz (5.11 - rasm). Boshlang‘ich momentda sterjenning x yo‘nalishining manfiy qiymatlari sohasida boshqa xil atomlarning konsentratsiyasi c_1 bo‘lib, musbat qiymatlari yo‘nalishida c_2 bo‘lsin. Sterjen uzunligini shunday tanlash kerakki, tajriba davomida sterjen uchlaridagi c_1 va c_2 konsentratsiyalar o‘zgarmas bo‘lib qolishi kerak. Ayni paytda koordinata boshida konsentratsiyaning sezilarli o‘zgarishi sodir bo‘lishi kerak. Bunday shartlar bajarilganda (5.102) tenglama quyidagi echimga ega bo‘ladi:



5.11-rasm. Uzun sterjenda diffuziyalanuvchi atomlarning dastlabki taqsimlanish sxemasi (a) va mos holdagi bir o'lchamli diffuziya tenglamasining echimlari (b).

$$c = \frac{c_1 + c_2}{2} - \frac{c_1 - c_2}{2} F\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right), \quad (5.104)$$

bunda F - xatoliklarning Gauss funksiyasi bo'lib, quyidagicha aniqlanadi:

$$F = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\frac{x}{2\sqrt{Dt}}} e^{-\xi^2} d\xi, \quad (5.105)$$

bunda ξ - elementar siljish. (5.104) ifodaga ko'ra, sterjenning $x = 0$ bo'lgan kesimi uchun $t > 0$ bo'lgan istalgan vaqt uchun quyidagi

$$c_0 = \frac{c_1 + c_2}{2} \quad (5.106)$$

munosabat to'g'ri bo'lganligi uchun (5.105) ifodani quyidagicha yozish mumkin:

$$\frac{c - c_0}{c_1 - c_2} = -\frac{1}{2} F. \quad (5.107)$$

$s_2 = 0$, bo'lgan xususiy hol uchun

$$\frac{c}{c_0} = 1 - F \text{ yoki } \frac{c}{c_1} = \frac{1 - F}{2}. \quad (5.108)$$

Bu xususiy hol uchun (5.104) yechimning turli t vaqtlar uchun turli qiy-

matlari 5.11-rasmda grafik ravishda tasvirlangan. Agar

$$c = \frac{x}{\sqrt{t}} = \text{const} \quad (5.109)$$

shart bajarilsa, (5.104) tenglamadan c konsentratsiyaning vaqt o'tishi bilan doimiyligi kelib chiqadi. Konsentratsiyaning vaqtga parabolik bog'lanishini ifodalovchi (5.109) tenglama qaralayotgan jarayonda haqiqatdan ham anomal bo'lmagan diffuziya sodir bo'layotganini aniqlash uchun foydalaniladi.

Diffuziya koeffitsientini aniqlash uchun amalda ko'p hollarda quyidagi munosabatdan foydalanadilar:

$$D = \frac{\overline{x^2}}{2t}, \quad (5.110)$$

bunda $\overline{x}$ - zarraning t vaqt ichidagi o'rtacha kirib borish chuqurligidir.

Diffuziyaning ikkinchi Fik qonunini ifodalovchi (5.102) tenglamasining echimini ifodalovchi (5.104) yechim kelib chiqadigan chegaraviy shartlar ta'minlansa, u vaqtda diffuziyanuvchi zarraning c konsentratsiyaning t vaqtda x nuqtadagi qiymatini bilgan holda (5.110) ifoda bo'yicha D diffuziya koeffitsientini hisoblab chiqish mumkin. Diffuziya koeffitsientini tajribada aniqlash uchun biror atomning konsentratsiyasini koordinata va vaqt funksiyasi sifatida aniqlash kerak. Bunday masalani hal qilishning bevosita usuli diffuziya o'rganilayotgan sterjen ma'lum vaqtlarda sterjenni x yo'nalishga perpendikulyar ravishda uncha katta bo'lmagan disklarga bo'lish va ularning ximiyaviy tarkibini aniqlash kerak. Bu usul murakkab bo'lishi bilan birga diffuziya o'rganilayotgan jismning keyingi maqsadlarda ishlatish uchun yaroqsiz holga olib keladi. Moddaga radioaktiv izotop kiritib, uning nurlanishini kuzatish yo'li bilan uning moddadagi joyini va diffuziya tezligini aniqlash mumkin. Bunday usul bilan o'zdiffuziyani o'rganish mumkin. **O'zdiffuziya** deganda kristallni tashkil qilgan atomlarning issiqlik energiyasining fluktuatsiyasi tufayli mazkur kristalldagi diffuziyasi tushuniladi. Masalan, mis atomining mis kristallidagi diffuziyasi. Polimorf holat o'zgarishlarda, qayta kristallanish, poroshoklarni qovushtirishda (spekaniyasida) muhim rol o'ynaydigan o'zdiffuziyani faqat radioaktiv izotoplar orqali o'rganish mumkin. Diffuziya hodisasini o'rganish pirovardda diffuziya koeffitsientini aniqlash bilan yakunlanadi. Bu masala yetarlicha murakkabdir. Gap

shundaki, diffuziya hodisasini o'rganish diffuziya koeffitsientini aniqlash natijasiga kristall panjaradagi mavjud bo'lgan barcha nuqsonlar ta'sir qiladi. Ammo diffuziya koeffitsientining temperaturaga bog'liqligini aniqlash nisbatan ishonchliroqdir. Diffuziya koeffitsienti temperaturaga eksponensial bog'lanishda bo'ladi:

$$D = D_0 e^{-Q/RT}, \quad (5.111)$$

bunda D_0 – chastotaviy faktor deb ataluvchi ayni modda (kristall) uchun o'zgarmas kattalik, Q - **aktivatsiya energiyasi** deyilib, u panjara tugunlari orasidagi potensial to'siqni yengish uchun kerak bo'lgan energiya E_t bilan vakansiya hosil bo'lishi uchun kerak bo'lgan energiya E_v yig'indisiga teng: $Q = E_t + E_v$.

Ko'plab tajribalarni ko'rsatishicha, haqiqatdan ham aksariyat qattiq jismlar uchun diffuziya koeffitsiyenti temperaturaga (5.111) ifoda bilan aniqlanuvchi bog'lanishda bo'ladi. Atom kristall panjarasidagi o'z o'ri bilan qanchalik qattiq bog'langan bo'lsa, diffuziya jarayonini xarakterlovchi D_0 va Q kattaliklar shuncha katta bo'ladi. Binobarin, diffuziyaning aktivatsiya energiyasi bilan erish temperaturasi orasida bog'lanish mavjud. Shuni ham aytib o'tish kerakki, kristallning sublimatsiyasi va elastiklik moduli orasida ham hal qiluvchi bog'lanish mavjud. D_0 kattalik har xil moddalar uchun 10^{-5} dan $10^{-7} \text{ m}^2/\text{sek}$ oraliqda bo'ladi. Biroq ko'pgina metallar va yarimo'tkazgichlar uchun $10^{-5} \text{ m}^2/\text{sek}$ dan birmuncha kattadir. Amalda ishlatiladigan ayrim materiallar uchun aktivatsiya energiyasi bitta atomga 1 dan 4 eV gacha bo'ladi.

Savollar va masalalar

1. Kristallarda qanday to'liqlar tarqaladi?
2. Kristallardagi qanday to'liqlarga akustikaviy va optikaviy to'liqlar deyiladi?
3. Kristalldagi atomlarning nolinch tebranishlari nima?
4. Kristallardagi tebranishlar uchun dispersiya qonuni qanday qonun?
5. Dyulong-Pti qonuni nima va u qanday kristallar uchun bajariladi?
6. Kristallar issiqlik sig'imi uchun Debay nazariyasining mohiyati nimadan iborat?
7. Debay temperaturasi qanday temperatura va u kristallning qanday xarakteristikalariga bog'liq?
8. Debay nazariyasi bo'yicha kristallarning issiqlik sig'imi kristallning qanday parametrlariga bog'liq?
9. Debay nazariyasi bo'yicha kristallning issiqlik sig'imi past ($T \ll \theta_D$) va yuqori ($T \gg \theta_D$) temperaturalarda qanday aniqlanadi?
10. Debayning kub qonuni deb nimaga aytiladi?
11. Qattiq jismlarning issiqlik sig'imiga elektronlarining ulushi qanday?
12. Qattiq jismlarning issiqlikdan kengayish koeffitsienti qanday kattaliklarga bog'liq?
13. Qattiq jismlarning issiqlik o'tkazuvchanligining mexanizmi qanday va u qanday kattaliklarga bog'liq?
14. Diffuziya hodisasidagi birinchi va ikkinchi Fik qonunlarini ayting.
15. Diffuziya koeffitsiyenti qanday kattalik va o'lchov birligi nima?
16. Qiyin eruvchi ($T_{er.}=3200\text{ K}$) titan karbidining neytronografiya ma'lumotlari asosida topilgan Debay temperaturasi 860 K. Uning xona temperaturasidagi ($T = 300\text{ K}$) va $T = 1000\text{ K}$ temperaturadagi molyar issiqlik sig'imlarini toping.

$$\text{Javob: } \approx 29.40 \frac{J}{\text{mol} \times K}; \approx 48.04 \frac{J}{\text{mol} \times K}.$$

7. 16-masaladagi Debay temperaturasidan foydalanib, titan karbidining suyuq azot temperaturasidagi ($T = 80\text{ K}$ deb oling) C_V molyar issiqlik sig'imini toping.

$$\text{Javob: } 3.08 \frac{J}{\text{mol} \times K}.$$

18. Agar kumushning $T=100\text{ K}$ temperaturadagi issiqlik sig'imi $240 \frac{J}{mol \times K}$ bo'lsa, uning Debay temperaturasi aniqlang.

Javob: 213.4 K .

19. Biror moddaning Debay temperaturasi 700 K bo'lsa, uning atomlarining nolinchi tebranishlari chastotasini va nolinchi tebranishlar energiyasini aniqlang.

Javob: $3.29 \times 10^{13} \text{ sek}^{-1}$; $1.09 \times 10^{-20} \text{ J}$.

20. Kumushning issiqlik o'tkazuvchanlik koeffitsiyenti $418 \text{ vt}/(\text{m} \times \text{K})$, undagi tovush tarqalish tezligi $v = 3760 \text{ m/s}$. Kumush kristallidagi fononning erkin yugurish yo'lini hisoblang.

Javob: $1.47 \times 10^{-7} \text{ m}$.

21. Dielektrik moddada fononlarning erkin yugurish yo'li $\lambda_f = 3 \times 10^{-8} \text{ m}$, tovush tarqalish tezligi $v_f = 10^3 \text{ m/s}$, $C_V \approx 3R$. Bir valentli metallarda erkin elektronning erkin yugurish yo'li $\lambda_e = 3 \times 10^{-7} \text{ m}$, tezligi $v_e = 10^6 \text{ m/s}$, $C_V = 0.1R$. Metallning elektronlari tashkil etgan va dielektrik moddaning issiqlik o'tkazuvchanlik koeffitsientlarini va ularning nisbatini aniqlang.

Javob: $K_f \approx 0.3R$; $K_e \approx 30 \times R$; $K_e/K_f \approx 10^2$.

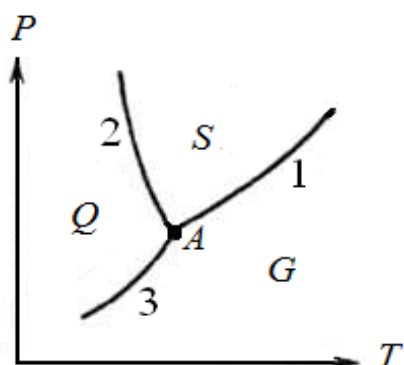
22. Kuzatishlarning ko'rsatishicha $160\text{ }^\circ\text{C}$ temperaturada oltin qo'rg'oshinda diffuziyalanib, 25 kunda 4.5 sm chuqurlikka kirib borar ekan. Diffuziya koeffitsientini aniqlang.

Javob: $9.4 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{sek}$.

VI. MODDANING FAZAVIY (HOLAT) O'ZGARISHLARI

6.1. Gomogen va geterogen sistemalar. Termodinamikaviy faza tushunchasi. Kristallarda termodinamikaviy muvozanat

O'zaro ta'sirlashuvchi bir necha (n ta) elementlardan tashkil topgan moddani - **sistemani** olib qaraylik. Bu sistemaning istalgan har bir kichik sohalari elementlar konsentratsiyalari, temperatura va bosim kabi kattaliklar bilan, binobarin, xossalari bilan xarakterlanadi. Agar qaralayotgan alohida olingan sohalar tarkibi va xossalari bilan bir - biridan farq qilmasa bunday sistema **birjinsli** deyiladi. Fizikaviy nuqtai nazardan bir jinsli bo'lgan sistemalar gomogen sistemalarning ideal bo'lgan xususiy holidir. **Gomogen sistemalarda** qaralayotgan sistemaning bir nuqtasidan boshqa nuqtasiga o'tganda sistemaning xossalari uzluksiz o'zgaradi. Agar sistema bir necha gomogen sohalardan tashkil topib, uning bir sohasidan boshqa sohasiga o'tishda ularning xossalari uzlikli o'zgarsa bunday sistema **geterogen sistema** deyiladi. Tabiiyki, geterogen sistemada gomogen sohalar aniq chegaralarga ega bo'ladi. Geterogen sistemaning boshqa sohalaridan aniq chegara bilan chegaralangan gomogen sohasi termodinamikaviy **faza** yoki **termodinamikaviy holat** deyiladi. Soddaroq qilib aytsak, **faza** deb muayyan termodinamik parametrlarda (shart-sharoitlarda, aytaylik muayyan temperaturada va bosimda) muayyan ximiyaviy tarkibga va fizikaviy hamda ximiyaviy xossalarga ega bo'lib, boshqa sistemadan yoki sistemalardan chegaralar sirti bilan ajralgan moddaga aytiladi. Bu ta'rifdan kelib chiqadiki, gomogen sistema bir fazali bo'lib, geterogen sistema ko'p fazalidir. Ayrim hollarda sistema bir tarkibli, ya'ni ximiyaviy bir jinsli moddadan tashkil topgan bo'lsa, faza tushunchasi moddaning agregat holati tushunchasiga mos kelib, bu modda suyuq, qattiq va gaz fazalarida (holatlarida) bo'lishi mumkin. Masalan, turli temperaturalarda suv suyuq, kristall (muz) va gaz (bug') holatlarida (fazalarida) bo'ladi. Elementar fizika kursidan yaxshi ma'lum bo'lgan moddaning temperaturaga va bosimga bog'liqlik agregat holatlarining termodinamikaviy muvozanatini umumiy holda ifodalovchi diagrammasini ko'z oldimizga keltiraylik (6.1- rasm). Bu diagrammada **uchlanma nuqta** mavjud bo'lib (A nuqta), bu nuqtada moddaning xossalari bilan bir-biridan tubdan farq qiluvchi bug' (gaz), suyuq (suv) va qattiq (muz-kristall) fazalari (holatlari) birgalikda mavjud bo'ladi. Demak, moddaning p va T parametrlarga bog'liq bo'lgan agregat holatlarini ifodalovchi diagrammasidagi uchlik nuqtada sistema geterogen hisoblanadi. Modda-



6.1 - rasm. Moddaning temperaturaga va bosimga bog‘liqlik holat diagrammasidagi uchlanma nuqta.

ning uchlik nuqtasidan turli tomonga chiqib, moddaning gaz, suyuq va kristall (qattiq) fazalarini chegaralovchi 1, 2 va 3 chiziqlarga mos kelgan holatlari ham bu chiziqlarning ikki tomoniga mos keluvchi ikki fazaviy holatlarda bo‘lib, modda geterogen (ikki fazali) hisoblanadi.

Agregat holat diagrammasining uchlik nuqtasida kesishuvchi chiziqlar bilan chegaralangan sohalarida modda mos holda bir fazali (gomogen) holatda, ya’ni yo gaz, yo suyuq yoki kristall holatda bo‘ladi. Geterogen sistemaning fazalari turli agregat holatlarda (masalan, gaz, qattiq va suyuq holatlarda) bo‘lishi mumkin yoki ximiyaviy tarkibi bilan yoki kristall strukturasi bilan farq qiladigan holatlarda ham bo‘lishi mumkin. Masalan, A va B elementlardan tashkil topgan birikmaning qattiq holatida yo A elementning B elementdagi qattiq eritmasi (yoki aksincha), yo A_nB_m ximiyaviy birikma holatida bo‘lishi mumkin. Oxirgi birikmaning ximiyaviy formulasidagi n va m sonlari butun sonlar (1, 2, 3, ...) bo‘lishi mumkin yoki butun sonlardan katta yoki kichkina ham bo‘lishi mumkin. Agar n va m sonlari butun sonlar bo‘lsa **stexiometriyaviy**, butun sonlardan kichik bo‘lsa **nostexiometriyaviy** birikma, katta bo‘lsa **sverxstexiometriyaviy** birikma deb ataladi. Agar sof A va B elementlar biri boshqasining kristall panjarasida erib, yagona qattiq aralashma hosil qilmasa va ularning alohida kristallarining mexanikaviy aralashmasidan tashkil topsa yoki qisman qattiq eritma hosil qilsa, bunday sistema **geterogen** sistema bo‘ladi. Metallar va turli birikmalar uch agregat fazalaridan tashqari qattiq holatida ham bir necha kristall tuzilishga ega bo‘lgan holatlarda bo‘lishi mumkin. Masalan, bizga yaxshi tanish bo‘lgan temir Fe uch agregat holatlaridan biri bo‘lgan kristall (qattiq) holatida odatdagi bosimda temperaturaga bog‘liq holda uning kristall panjarasining elementar yacheykasi tomonlari markazlashgan kub yoki hajmi markazi markazlashgan kub shakllarida bo‘lishi mumkin. Titan va sirkoniy metallari esa odatdagi bosimda 882 °C dan yuqorida hajmi markazlashgan kub kristall panjarali fazaga, bu temperaturadan

past temperaturalarda geksagonal kristall panjarali fazaga ega bo‘ladi. Moddalarning turlicha kristall panjaraga ega bo‘lgan turli fazalari **kristall modifikatsiyalari** deb ham ataladi. Moddaning turlicha kristall tuzilishga (modifikatsiyalarga) ega bo‘lishi **polimorfizm** (ko‘p shakllilik) deyiladi. Polimorfizmning xususiy holi **allotropiyadir**. Allotropiya bu sof elementlarning odatdagi bosimda temperaturaga bog‘liq holda turli kristall tuzilishga (modifikatsiyaga) ega bo‘lishidir. Masalan, hozirgina tilga olgan Fe, Ti va Zr metallarining odatdagi bosimda temperaturaga bog‘liq holda har xil modifikatsiyalarda bo‘lishi **allotropiyadir**. Moddalarning fazaviy holatlarini, fazaviy muvozanat shartlarini va ulardagi faza (holat) o‘tishlarini o‘rganish bevosita amaliy ahamiyatga egadir. Chunki, moddalarning fizikaviy va ximiyaviy xossalarini ularning fazaviy holatlari belgilaydi. Masalan, uglerodning kub strukturali olmos fazasining (holatining) fizikaviy va ximiyaviy xossalari uning geksagonal strukturali grafit fazasidan tubdan farq qiladi. Ma’lumki, olmos shaffof, o‘ta qattiq va dielektrikdir. Grafit esa shaffof emas (qora), yumshoq va yaxshi elektr o‘tkazgichdir. XX asrning oxiri va XXI asrning boshida kashf etilgan uglerodning fulleren va grafen kabi fazalari esa butunlay boshqa xossalarga ega. Bunday misollarni ko‘plab keltirish mumkin. Sistemaning termodinamikaviy holati (fazasi) uning ximiyaviy tarkibi, qanday bosim va temperaturada turganligi bilan aniqlanadi. Bu kattaliklardan tashqari sistemaning hajmini ham e’tiborga olish mumkin. Bunda biz magnit maydoni yoki shunga o‘xshash tashqi kuchlar ta’sirini hisobga olmaymiz. Agar sistemaning fizikaviy va ximiyaviy xossalari (tashkil etuvchilar konsentratsiyasi) muayyan temperatura, bosim va hajmda vaqt o‘tishi bilan o‘zgarmasa, bunday sistema **termodinamikaviy muvozanatda** hisoblanadi. Sistemaning bunday holati esa **turg‘un holat** hisoblanadi. Moddalarning odatdagi atmosfera bosimida temperaturaga bog‘liq bo‘lgan fazaviy holatlarini va ularning muvozanatini moddalar fazalarining termodinamikaviy **muvozanat diagrammasi** aks ettiradi.

6.2. Termodinamikaviy potentsiallar va sistema muvozanatining umumiy shartlari

Sistemaning termodinamikaviy muvozanat holati termodinamika kursidan yaxshi ma’lum bo‘lgan **termodinamikaviy potentsiallar** deb ataluvchi ichki energiya – U , entalpiya – H , erkin energiya – F , Gibbs potentsiali – G kabi termodinamik funksiyalari bilan xarakterlanadi. Sistemaning holatini belgilovchi bu termodinamikaviy funksiyalarni **xa-**

rakteristik funksiyalar deb ataydilar. Bosim, temperatura, hajm kabi barcha termodinamikaviy parametrlar termodinamikaviy potentsiallarning xususiy hosilasi sifatida aniqlanadi. Bunga termodinamikaning birinchi qonunidan foydalanib, ishonch hosil qilish mumkin:

$$dU = TdS - pdV, \quad (6.1)$$

bunda S – entropiya, U – ichki energiya. Oxirgi tenglikdan temperatura T o‘zgarmas hajmda ichki energiyadan entropiya bo‘yicha, bosim p esa ichki energiyadan o‘zgarmas entropiyada hajm bo‘yicha olingan xususiy hosilalar ekanligi kelib chiqadi:

$$T = \left(\frac{\partial U}{\partial S} \right)_V, p = - \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_S. \quad (6.2)$$

Demak, S va V erkin o‘zgaruvchilar uchun ichki energiya U **xarakteristik funksiya**, ya’ni **termodinamikaviy potentsialdir**.

Boshqa erkin o‘zgaruvchilar uchun ichki energiya termodinamikaviy potentsial bo‘la olmaydi. Biroq ular uchun boshqa termodinamikaviy funksiyalar termodinamikaviy potentsial bo‘la oladi. T va V erkin o‘zgaruvchilar uchun erkin energiya F termodinamik potentsial bo‘ladi:

$$F = U - TS,$$

$$dF = dU - TdS - SdT. \quad (6.3)$$

(6.1) ifodani e’tiborga olsak, (6.3) ifoda quyidagi ko‘rinishga ega bo‘ladi:

$$dF = -SdT - pdV, \quad (6.4)$$

Bu tenglamadan esa erkin energiya F erkin o‘zgaruvchilar V va T jufti uchun termodinamikaviy potentsiallar ekanligi kelib chiqadi:

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V, p = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T. \quad (6.5)$$

T va p erkin o‘zgaruvchilar jufti uchun esa Gibbsning termodinamik potentsiali G xarakteristik funksiya bo‘ladi:

$$G = U - TS + pV,$$

$$dG = dU - TdS - SdT = -SdT + Vdp,$$

bundan esa

$$S = - \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_p, \quad V = \left(\frac{\partial G}{\partial p} \right)_T \quad (6.6)$$

ekanligi kelib chiqadi.

Shunday qilib, termodinamikaning birinchi qonunini ifodalovchi (6.1) tenglama sistemaning termodinamikaviy holatini belgilovchi beshta fizik kattaliklarni o'zaro bog'laydi. Yuqorida ko'rib o'tgan termodinamikaviy potentsiallardan tashqari entalpiya ($H(S, p) = U + pV$), sistemaning entropiyasi va hajmi ham termodinamikaviy potentsiallar bo'lishi mumkin. Bu funksiyalarning ichida amalda foydalanish uchun eng qulayi erkin energiya F va Gibbs potentsiali G hisoblanadi. Chunki, ular orqali termodinamik parametrlarni aniqlashda ishlatiladigan erkin o'zgaruvchilar (V, T) va (p, T) juftlarini bevosita tajribalardan aniqlash mumkin.

Ko'p hollarda qaralayotgan sistemaning tashkil etgan zarralarining (atomlarning yoki molekulalarning) soni (konsentratsiyasi) o'zgaruvchan bo'lishi mumkin. Bunday sistemaning ichki energiyasi tashkil etuvchilarining ham funksiyasi bo'lib qoladi, ya'ni ichki energiya tashkil etuvchilarining istalgan bittasining konsentratsiyasi o'zgarishi bilan o'zgaradi. Bunday sistemalar uchun qandaydir i xil (sort) zarraning konsentratsiyasi dN_i miqdorga o'zgarishida termodinamikaning birinchi qonuni quyidagicha ifodalanadi:

$$dQ = TdS = dU + pdV - \sum_{i=1}^n \mu_i dN_i,$$

yoki

$$dU = TdS - pdV + \sum_{i=1}^n \mu_i dN_i, \quad (6.7)$$

bunda n - sistemani tashkil etgan i xil zarralarning soni, bu son istalgancha bo'lishi mumkin. Sistemaning boshqa termodinamikaviy parametrlariga nisbatan ichki energiyadan biror i xil zarra konsentratsiyasi bo'yicha olingan xususiy hosilasi i xil zarraning **ximiyaviy potentsiali** deyilib, bitta zarraga to'g'ri keluvchi energiyani ifodalaydi:

$$\mu_i = \left(\frac{\partial U}{\partial N_i} \right)_{V, S, N_1, N_2, \dots, N_{i-1}, N_{i+1}, \dots, N_n}. \quad (6.8)$$

O‘zgaruvchi sonli zarralardan tashkil topgan sistemalar uchun erkin energiyaning va Gibbs potensialining differensialini aniqlashda ham (6.8) ifodadagi zarralar sonining o‘zgarishini hisobga oluvchi qo‘shimcha had qo‘shiladi. Demak, μ_i ximiyaviy potensialni erkin energiyadan tashqari istalgan boshqa termodinamikaviy potensiallardan ham zarralar soni bo‘yicha xususiy hosila sifatida aniqlash mumkin. Chunonchi,

$$\mu_i = \left(\frac{\partial F}{\partial N_i} \right)_{V, S, N_{k \neq i}} = \left(\frac{\partial G}{\partial N_i} \right)_{p, T, N_{k \neq i}} . \quad (6.9)$$

Moddaning miqdoriga proporsional bo‘lgan kattaliklar: hajm V , massa m , ichki energiya U , entalpiya H , entropiya S **ekstensiv** (additivlikka bo‘ysunuvchi) **kattaliklar** deyiladi. Moddaning miqdoriga bog‘liq bo‘lmagan, masalan, zichlik, temperatura **intensiv kattaliklar** deyiladi. Ikkita ekstensiv kattaliklarning bo‘linmasi (masalan, massaning hajmga nisbati zichlik $\rho = m/V$) ham intensiv kattalikdir.

Umumiy holda sistemaning termodinamikaviy muvozanat shartlarini termodinamikaning birinchi va ikkinchi qonunlari asosida keltirib chiqarish mumkin. Termodinamikaning ikkinchi qonunidan kelib chiqadiki, ixtiyoriy elementar jarayon uchun quyidagi qonuniyat o‘rinli bo‘ladi:

$$dS \geq dQ/T, \quad (6.10)$$

bunda dQ – sistemaga $T > 0$ temperaturali jismdan berilgan issiqlik miqdori, tenglik va tengsizlik belgilari mos holda qaytar va qaytmaz jarayonlar uchun ishlatiladi. (6.10) ifodaga ko‘ra, tashqi muhitdan ajratilgan (izolyatsiyalangan) muvozanatdagi sistemaning entropiyasining differensial musbat. Buning ma‘nosi shuki, izolyatsiyalangan barcha sistemalarda o‘z-o‘zidan kechuvchi jarayonlar entropiyaning ortishi bilan sodir bo‘ladi. Masalan, yakkalangan sistemlardagi atomlar diffuziyasi yoki ximiyaviy reaksiyalar ularning entropiyasi ortishi bilan sodir bo‘ladi. Ammo sistema muvozanat holatiga kelishi uchun holat (termodinamikaviy) funksiyalaridan birortasi ekstremal qiymatga ega bo‘lishi yetarli emas. Ekstremallik prinsipi faqat sistemaning taqqoslanayotgan holatlariga ma‘lum bir cheklashlar qo‘yilgandagina to‘g‘ri bo‘ladi. Chunonchi, ko‘rilayotgan holatlarda sistema yakkalangan bo‘lishi kerak yoki bir xil bosimda va temperaturada bo‘lishi kerak. Bunday cheklash bilan biz

sistemaning muvozanat holatiga mos keluvchi shartlarni topishimiz mumkin. Amalda ko‘pincha bunday shartlar bajariladi. Masalan, metall va ularning birikmalarining fazaviy holatlarini o‘rganish yoki ularga ishlov berish o‘zgarmas atmosfera bosimida biror temperaturada amalga oshiriladi. Sistemaning muvozanat shartlarini keltirib chiqarish uchun termodinamikaning birinchi va ikkinchi qonunlarini birlashtiruvchi asosiy tengsizlikni yozamiz:

$$dU + pdV = dQ \leq TdS. \quad (6.11)$$

(6.3) ifodadan foydalanib, (6.11) ifodaga ko‘ra, quyidagi tengsizlikni hosil qilamiz:

$$dF \leq -pdV - SdT. \quad (6.12)$$

O‘zgarmas hajmda sodir bo‘layotgan izotermik jarayon uchun $dV = dT = 0$ bo‘lganligi uchun (6.12) ifodadan

$$(dF)_{V, T} \leq 0 \quad (6.13)$$

shart kelib chiqadi. Bu ifodada V va T indekslar sistema o‘zgarmas hajm va temperaturada turganligini bildiradi. (6.13) ifodadan **sistema muvozanatining sharti** kelib chiqadi:

$$F \rightarrow \min \quad (6.14).$$

Bu termodinamikaviy shartning ma’nosi shundan iboratki, berilgan miqdordagi moddaga ega bo‘lgan muayyan hajmdagi sistema muayyan temperaturada (Gelmgoles) erkin energiyasining minimal qiymatida termodinamik muvozanatda bo‘ladi, ya’ni (6.14) shart o‘zgarmaganda sistema istalgan uzoq vaqt davomida fizikaviy va ximiyaviy xossalari o‘zgarmaydigan turg‘un holatda bo‘ladi.

O‘zgarmas hajm va temperaturadagi sistemaning muvozanat shartini keltirib chiqargandagi kabi mulohazalar qilib, o‘zgarmas bosim va temperaturadagi sistemaning muvozanat shartini keltirib chiqarish mumkin:

$$dG \leq Vdp - SdT. \quad (6.15)$$

Qaralayotgan shartda $dp = dT = 0$ (p va T o‘zgarmas) bo‘lganligi uchun

oxirgi tengsizlikdan

$$(dG)_{T, V} \leq 0 \quad (6.16)$$

tengsizlikni olamiz. Bu shartdan o'zgaras temperatura va hajmda termodinamikaviy muvozanat erkin energiyaning minimal qiymatida amalga oshishi kelib chiqadi:

$$G \rightarrow \min. \quad (6.17)$$

Yuqorida ko'rib o'tgan misollardan kelib chiqadiki, qaralayotgan sistema turgan shart-sharoitlardan kelib chiqib, sistemaning muvozanat shartini sodda ko'rinishda olish uchun turli termodinamik potentsiallardan foydalanish kerak.

6. 3. Fazaviy (ichki) muvozanat shartlari

Biz yuqorida ko'rib chiqqan sistemaning termodinamikaviy muvozanat shartlari sistemaning boshqa holatlaridan muvozanat holatini aniq-lab olishga imkon beradi. Ammo u shartlar sistemaning tashkil etuvchilari orasidagi muvozanatni aniqlovchi mumkin bo'lgan ichki shartlar haqi-da ma'lumot bermaydi. Masalan, ma'lumki, moddaning qattiq va suyuq holati tashqi bosimga bog'liq bo'lgan erish temperaturasida muvozanatda bo'ladi. Chunonchi, odatdagi bosimda 0°C da suvning suyuq va kristall (muz) holatlari, 100°C da esa suyuq va bug' holatlari muvozanatda bo'ladi. Moddaning ikki turli, umumiy holda mavjud bo'lish ehtimoli bo'lgan turli ximiyaviy tarkibli fazalari muvozanatda bo'lishi uchun qanday ichki shartlar bajarilishi kerak? Mana shu masalani, ya'ni siste-maning ikki fazasi muvozanatda bo'lishining ichki shartini ko'rib chi-qamiz. Temperatura va bosim o'zgaras deb olamiz. U holda fazalarini shartli ravishda α va β deb belgilab olgan sistemaning ikki fazasining o'zaro muvozanatda bo'lishining termodinamikaviy muvozanat sharti (6.17) ifodaga ko'ra quyidagicha bo'ladi:

$$dG = dG_{\alpha} + dG_{\beta} = 0. \quad (6.18)$$

Temperatura va bosim bilan birgalikda sistemadagi modda miqdori ham o'zgaras deb qaraymiz. U holda o'zgarish faqat α va β fazalarga nisbatangina sodir bo'lishi mumkin, ya'ni sistemaning k tashkil etuvchi-sining qandaydir miqdori α fazadan β fazaga o'tishi mumkin yoki aksin-cha. Bunda sistemaning k tashkil etuvchisining α va β fazalardagi mos

holdagi N_k^α va N_k^β molda olingan son miqdorlarining o'zgarishlari uchun quyidagi tenglik to'g'ri bo'ladi: $dN_k^\alpha = -dN_k^\beta$. Ushbu tenglikka va (6.18) hamda (6.9) ifodalarga ko'ra quyidagi tenglik to'g'ri bo'ladi:

$$dG = \sum_{i=1}^k \left(\frac{\partial G^\alpha}{\partial N_i^\alpha} - \frac{\partial G^\beta}{\partial N_i^\beta} \right) dN_i^\alpha = \sum_i (\mu_i^\alpha - \mu_i^\beta) dN_i^\alpha = 0. \quad (6.19)$$

Ushbu munosabat sistemaning ichki muvozanatida istalgan k tashkil etuvchisiga va uning har qanday elementar $dN_k^{\alpha,\beta}$ o'zgarishi uchun bajariladi. U holda (6.19) munosabatdan

$$\mu_i^\alpha = \mu_i^\beta \quad (6.20)$$

tenglik kelib chiqadi. Demak, ikki (ko'p) fazali (geterogen) sistemaning muvozanat holatida ularning har birida mavjud bo'lgan tashkil etuvchilari har ikki (hamma) fazalarida bir xil kattalikdagi ximiyaviy potensialga ega bo'lishi kerak ekan. Bunday muvozanatni **ximiyaviy muvozanat** ham deyiladi. Agar fazalar chegarasida issiqlik almashinmaydigan bo'lsa, bu holda muvozanat holatida har ikki fazalardagi bosim teng bo'ladi:

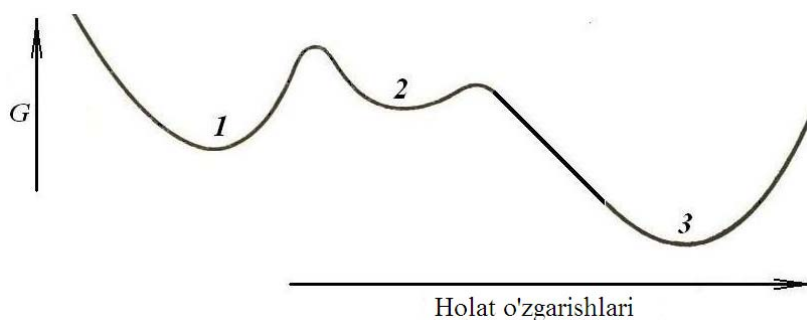
$$p_\alpha = p_\beta.$$

Agar fazalar orasida issiqlik almashinuvi sodir bo'lsa, bu holda sistemaning muvozanatida barcha fazalarning temperaturallari teng bo'ladi:

$$T_\alpha = T_\beta.$$

Sistemaning termodinamik funksiyalari (U , F , H) va fazalar soni (i) ularga mos keluvchi berilgan ikki termodinamikaviy holatning parametrlarida (masalan, i uchun berilgan (o'zgarmas) bosim va temperaturada, yoki F uchun berilgan (o'zgarmas) hajm va temperaturada va shu kabilarda) bir necha minimumlarga, entropiya S esa mos holda bir necha maksimumlarga ega bo'lishlari mumkin. Sistemada U va V kattaliklarning berilgan (o'zgarmas) qiymatlariga mos keluvchi p va T kattaliklarda F funksiyaning absolyut (mutlaq) minimumi mos keluvchi entropiyaning absolyut maksimumiga to'g'ri keluvchi holati **turg'un holat** bo'ladi. Turg'un holat sistemaning **haqiqiy muvozanat holati** hisoblanadi. S entropiyaning nisbiy maksimumiga i va, F , H , U termodinamikaviy

potensiallarning nisbiy minimumlari to'g'ri kelgan holat sistemaning **noturg'un** yoki **metastabil holati** deyiladi. 6.2 - rasmda o'zgarmas p bosim va T temperaturada Gibbsning termodinamik potensialini bir nechta muvozanat holatlarga mos keluvchi minimumlarga ega bo'lishi tasvirlangan. 6.2 - rasmdan ko'rinishicha, sistema 1-, 2- va 3- holatlarda minimumlarga ega. Demak, sistema ushbu minimumlarga mos keluvchi uchta termodinamik muvozanatlarda bo'lishi mumkin. Ammo G funksiya eng kichik 3-minimumida sistema mutlaq haqiqiy muvozanatda bo'ladi.



6.2-rasm. Sistemaning turg'un va noturg'un holatlariga mos keluvchi termodinamikaviy potensiallar.

Funksiyaning 1- va 2- minimumlarida sistema metastabil holatda bo'ladi. 1- va 2- minimumlar **lokal minimumlar** deyiladi. Demak, sistema mutlaq muvozanatga kelguncha bir necha lokal minimumlarga mos keluvchi metastabil holatlarda bo'lishi mumkin ekan. Metastabil holat, ayniqsa past temperaturalarda, istalgancha uzoq vaqt davomida saqlanib tura oladi. Amalda noturg'un (metastabil) holat tabiatda ko'p uchraydi. Odatda ekstremal shart-sharoitlarda hosil qilinib, keskin sovutish natijasida metastabil holatlar hosil bo'ladi. Masalan, uglerodning olmos fazasi (kristallining hajmi markazlashgan modifikatsiyasi) taxminan 350 000 atmosfera bosimi va 2500 °C temperaturada Yer planetasining shakllanishi jarayonida hosil bo'lib, tabiatda noturg'un holatda uchraydi. Olmos odatdagi atmosfera sharoitida 1500 °C temperaturalarda uglerod kristallining turg'un geksagonal strukturali grafit holatiga (modifikatsiyasiga) o'tadi. Metastabil holatga o'ta qizdirilgan suyuqlik va o'ta to'yingan bug' yoki o'ta to'yingan qattiq eritmaları misol qilib keltirish mumkin. Metastabil holat o'z-o'zidan (spontan) yoki tashqi ta'sir ostida termodinamikaviy potentsiali kichik bo'lgan haqiqiy muvozanat holatiga o'tishi mumkin. Ammo bu jarayon istalgancha uzoq vaqt davomida sodir

bo'lishi, hatto odatdagi sharoitda "muzlab" qolishi mumkin. Bunga uglerodning olmos modifikatsiyasi misol bo'la oladi.

6.4. Ko'p fazalar muvozanatining shartlari soni va muvozanat holatlari diagrammasi

Aytaylik, fazalar soni ikkitadan ko'p, masalan, i ta bo'lgan va tashkil etuvchilari n ta bo'lgan hamda fazalari o'zaro fizika-ximiyaviy ta'sirlashayotgan sistemadagi umumiy muvozanat shartlarini ko'raylik. Bu holda butun sistema muvozanatda bo'lishi uchun barcha i ta fazalarning ximiyaviy potentsiallari, temperaturalar va bosimlari uchun muvozanat shartlari bajarilishi kerak, ya'ni:

$$\begin{aligned} p' &= p'' = \dots = p^i, \\ T' &= T'' = \dots = T^i, \\ \mu'_1 &= \mu''_1 = \dots = \mu^i_1, \\ \mu'_2 &= \mu''_2 = \dots = \mu^i_2, \\ &\dots\dots\dots, \\ &\dots\dots\dots, \\ \mu'_n &= \mu''_n = \dots = \mu^i_n. \end{aligned} \tag{6.21}$$

Umumiy holda (6.21) tenglamalar soni erkin o'zgaruvchi termodinamik kattaliklar sonidan kam bo'lishi kerak. O'zgaruvchilarning ayrimlari sistema muvozanat holatida bo'lganda ham erkin o'zgarishi mumkin. O'zgaruvchi termodinamikaviy kattaliklar soni termodinamik muvozanatni belgilovchi tenglamalar soniga teng bo'lganda muvozanatda bo'lgan fazalarning maksimal soni kuzatiladi. Termodinamikaviy muvozanatni belgilovchi erkin o'zgaruvchilar soni sistemaning **erkinlik darajasi** (f) deb ataladi va Gibbsning fazalar qoidasi orqali aniqlanadi. Turli i ta fazalarda turli n ta tashkil etuvchilardan tashkil topgan sistemaning muvozanat holatidagi erkinlik darajasini hisoblaymiz. Buning uchun i ta fazalardagi tashkil etuvchilar konsentratsiyasi n , temperatura va bosim berilgan bo'lishi kerak. i ta fazalardan istalgan berilgan bittasi uchun erkin tashkil etuvchilar konsentratsiyasi $(n-1)$ ta bo'ladi. Barcha i ta fazalar uchun ularning soni $i(n-1)$ ta bo'ladi. Berilgan bosim p va T temperaturani e'tiborga olsak, hamma o'zgaruvchilar soni $i(n-1) + 2$ bo'ladi. Bu sondan (6.21) tenglamalar sonini ayirib tashlasak, sistemaning muvozanat holatining erkinlik darajasini topamiz. (6.21) tenglamalar sistemasining har bir qatori $(i-1)$ ta erkin tenglamalarni hosil qila-

di, mos holda butun tenglamalar sistemasi $n(i-1)$ ta bo‘ladi. Muvozanat holatining erkinlik darajasi quyidagicha bo‘ladi:

$$f = i(n-1) + 2 - n(i-1) = n - i + 2. \quad (6.22)$$

Bu munosabat **Gibbsning fazalar muvozanati qoidasini** umumiy holda ifodalaydi. Erkinlik darajasi noldan kichik bo‘lishi mumkin emas: $f \geq 0$. Shunga ko‘ra, (6.22) ifoda quyidagi ko‘rinishni oladi: $f = n - i + 2 \geq 0$. Bundan esa

$$i \leq n + 2 \quad (6.23)$$

tengsizlik kelib chiqadi. Bu ifodaga (qonuniyatga) ko‘ra n ta tashkil etuvchilarga ega muvozanatda bo‘lgan sistemada fazalar soni i ($n+2$) dan ortiq bo‘lishi mumkin emas. Masalan, sof (tashkil etuvchisi $n = 1$ bo‘lgan) modda uchun termodinamik muvozanatda fazalar soni $i \leq 3$ bo‘ladi. Bunday sistemada bitta yoki ikkita, yoki uchta faza muvozanatda bo‘lishi mumkin. Bunga sof moddaning (masalan, suvning, metallarning) agregat holatlari diagrammasi (6.1-rasm) misol bo‘la oladi. Bu moddalarning agregat holatlari diagrammasiga ko‘ra, ularning «uchlanma nuqta»sida moddaning uchta - qattiq, suyuq va gaz holatlari muvozanatda bo‘ladi. Bu nuqtada muvozanat holatining erkinlik darajasi (6.22) tenglamaga ko‘ra, nolga teng: $f = 0$. Buning ma‘nosi shuki, bu nuqtada modda p bosim va T temperaturaning faqat birgina aniq qiymatlarida muvozanatda bo‘la oladi. Shuning uchun ham bu holat diagrammada nuqta bilan belgilanadi. Ikkita faza (holat) muvozanatda bo‘lganda erkinlik darajasi 1 ga teng bo‘ladi. Bunday muvozanatlar 6.1- rasmda “uchlanma nuqta”dan boshlanib, uch chiziq bo‘ylab sodir bo‘ladi. Bu chiziqlar bo‘ylab p yoki T kattaliklardan biri erkin o‘zgarishi mumkin, boshqasi esa

$$\mu_{\alpha}(p, T) = \mu_{\beta}(p, T)$$

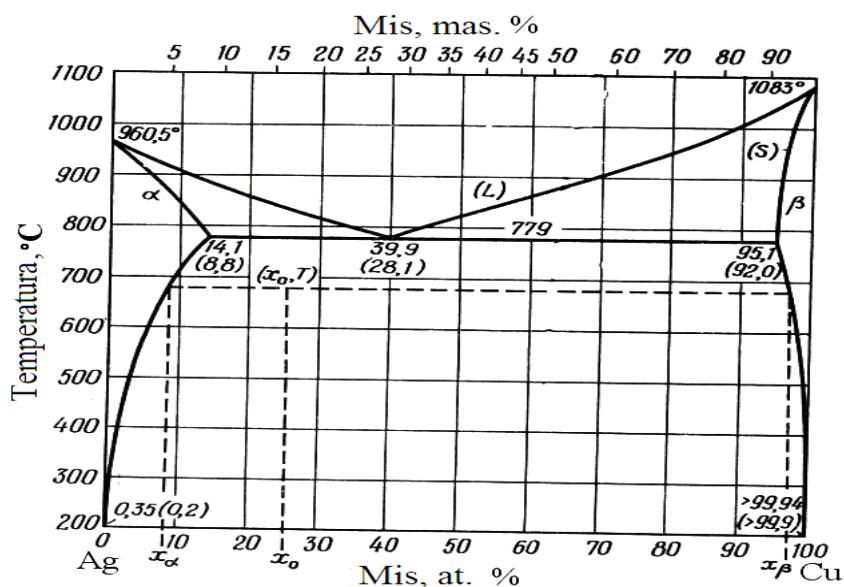
tenglama bo‘yicha o‘zgaradi. Eslatib o‘tamiz, bu tenglamada μ_{α} - va μ_{β} -fazalarning ximiyaviy potentsiallari. «Uchlanma nuqta»dan chiqib, uch tomonga ketgan 1, 2 va 3 sonlar bilan belgilangan chiziqlar bilan chegaralangan sohalarda moddada faqat bir fazali (yo qattiq, yo suyuq, yoki gaz) holat muvozanatda bo‘ladi. Bu sohalar uchun muvozanatning erkinlik darajasi $f = 2$ bo‘lib, bosim va temperatura ma‘lum bir sohalarda erkin o‘zgaradi. $f = 0$ bo‘lsa **invariant**, $f = 1$ bo‘lsa **monovariant**, $f = 2$

bo'lsa **bivariant**, $f \geq 3$ bo'lsa **polivariant sistemalar** deb ataladi. Gibbsning fazalar muvozanati qoidasi yetarlicha katta o'lchamli moddalar uchun ularning butun hajmidagi fazalar bir jinsli bo'lgan, sirtiy effektlar ta'sir qilmaydigan hollardagina bajariladi. Agar sistemaga tashqi kuchlar (masalan, elektr yoki magnit maydonlari) ta'sir qilsa, (6.22) va (6.23) formulalardagi 2 soni sistemaga ta'sir qilayotgan tashqi kuchlar soniga ortadi.

Metallar va ularning qotishmalarining muvozanat holatlarini o'rganganda ularning kondensatsiyalangan (qattiq va suyuq) holatlari bilan cheklanish mumkin. Chunki bunday sistemalarda ko'p hollarda metall bug'larining bosimi nihoyatda kam bo'ladi. Binobarin, bosim o'zgarmas deb qaraladi va (5.22) tenglama bilan aniqlanadigan muvozanatning erkinlik darajasi bittaga kamayadi:

$$f = n - i + 1. \quad (6.24)$$

Bu holda binar (ikki tashkil etuvchiga ega) sistema uchun muvozanat shartini temperatura T va konsentratsiya x o'qlarida grafik ravishda tasvirlash mumkin. Misol tariqasida 6.3-rasmda ancha sodda ko'rinishga ega bo'lgan kumush va mis binar sistemasining holat diagrammasi keltirilgan. Agar erish temperaturasi $960,5^\circ\text{C}$ bo'lgan toza (Ag) kumushga



6.3 - rasm. Ag-Cu sistemasining holat diagrammasi.

mis (Cu) qo'shib borsak, avval misning ma'lum miqdorigacha misning kumushdagi o'rin almashuvchi qattiq eritmasi (α -faza) hosil bo'ladi. Bu fazaning mavjudlik sohasi temperaturaga bog'liq bo'lib, 780°C da ku-

mush kristall panjarasidagi misning miqdori 14 at.% ga teng bo‘ladi. Xuddi shuningdek, sof mis bir muncha kamroq kumush bilan o‘rin almashuvchi qattiq eritma - β - faza hosil qiladi. Har ikkala α - va β - fazalarning to‘yinish konsentratsiyalaridan boshqa konsentratsiyalarida α - va β - fazalarning mexanik aralashmasini olamiz (6.3-rasm). Bu mexanikaviy aralashma berilgan temperaturalarda to‘yingan x_α va x_β miqdorlardagi qattiq eritmalardan iborat bo‘ladi. α - fazaning umumiy fazalarga nisbatan ulushi x_0 quyidagicha aniqlanadi:

$$x_0 = \frac{N_\alpha}{N_\alpha + N_\beta} = \frac{N_\alpha x_\alpha + N_\beta x_\beta}{N_\alpha + N_\beta}, \quad (6.25)$$

bunda N_α - va N_β - mos holda α - va β - fazalarning miqdorlari. (6.25) ifodadan ikki fazaning miqdorlarini nisbatini aniqlashga imkon beruvchi **richag qoidasi** kelib chiqadi:

$$\frac{N_\alpha}{N_\beta} = \frac{x_\beta - x_0}{x_0 - x_\alpha}. \quad (6.26)$$

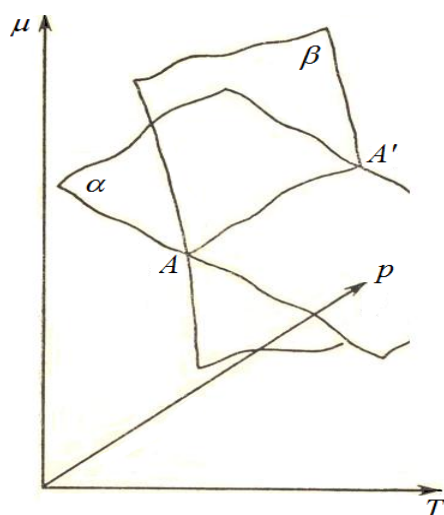
6.3-rasmdan ko‘rinib turibdiki, sof metallardan farqli holda, ularning o‘rin almashuvchi qattiq eritmaları yoki birikmalari aniq erish temperaturasiga ega bo‘lmay, balki ularning tarkibiga bog‘liq holda, erish jarayoni ma’lum bir temperaturalar oralig‘ida sodir bo‘ladi. 6.3 - rasmda kumush-mis qattiq eritmasining bir fazali suyuq holati **Likvidus** (L) chizig‘idan yuqorida yotadi.

Turli binar (ikki tarkibli) birkmaning qattiq (kristall) holatlari **Solidus** (solid-qattiq) chiziqlari (S) orqali aniqlanadi. Binar sistemalarining muvozanat holat diagrammalarining shakli turlicha bo‘ladi. Yuqorida biz holat o‘zgarishida p bosim ishtirok etmagandagi, ya’ni bosim o‘zgarmas bo‘lgan holdagi holat diagrammasini ko‘rib chiqdik. Ammo bosimga juda sezgir moddalar borki, bunday moddalar uchun (p - T) holat diagrammasini tuzish zarurati tug‘iladi.

6.5. Faza o‘zgarishlarining turlari

Biror moddaning tashqi shart-sharoitlar o‘zgarishi natijasida bir termodinamikaviy holatdan (fazadan) boshqasiga o‘tish hodisasi **faza o‘zgarishlari** yoki **faza o‘tishlari** deyiladi. Agar biror sistemaning holat

diagrammasi bo'yicha olib qarasak, uning termodinamikaviy (temperatura, bosim va boshqa) parametrlari o'zgarishi bilan sistema ikki turli fazalarga mos keluvchi parametrlar sohalarini ajratuvchi chegarani kesib o'tishida faza o'tishi sodir bo'ladi. Vaholanki, turli termodinamikaviy fazalar turli holat tenglamalari bilan xarakterlanar ekan, hamma vaqt shunday termodinamikaviy parametrlarni topish mumkinki, faza o'tishida u sakrab o'zgaradi. Faraz qilaylik, muayyan tarkibli sistema termodinamikaviy muvozanatda turibdi. Temperatura yoki bosim o'zgarishi bilan bu muvozanat buziladi. Aytaylik, bitta α fazadan tashkil topgan sistema boshqa bir β fazaga o'tdi, ya'ni faza o'tishi sodir bo'ldi. Ushbu fazalarning mos holdagi μ_α va μ_β ximiyaviy potentsiallarining temperatura va bosimga bog'liq holda o'zgarishini T , p va μ fazosida aks ettiramiz (6.4-rasm). Berilgan termodinamik T va p kattaliklarning muayyan qiymatlarida eng kichik ximiyaviy potentsialga ega bo'lgan faza eng katta turg'unlikka ega bo'ladi, ya'ni termodinamikaviy muvozanatda bo'ladi. $\mu = \mu_\alpha(p, T)$ va $\mu = \mu_\beta(p, T)$ sirtlari kesishgan AA' chiziq α va β fazalarning mavjudlik sohalarini ajratuvchi chiziqdir. p va T parametrlarni o'zgartirib, sistemani bir sohadan boshqa sohaga o'tkazish mumkin, bunda sohalarini kesuvchi AA' chiziq bo'ylab faza o'tishi sodir bo'ladi. Shuni aytib o'tish kerakki, har qanday faza o'tishida moddaning



6.4-rasm. α va β fazalarning ximiyaviy potentsiallarining bosim va temperaturaga bog'liq holda o'zgarishi.

agregat holatining o'zgarishi mutlaqo shart emas. Ammo moddaning agregat holatining har qanday o'zgarishi faza o'tishidir. Ko'p hollarda amalda o'zgarmas bosimda (odatda 1 atmosfera bosimida) temperatura o'zgarishi bilan sodir bo'ladigan faza o'tishlari o'rganiladi. Shuning

uchun ham ko'p hollarda faza o'tishi nuqtasi (chizig'i emas), **erish temperaturasi** terminlari ishlatiladi. Tabiiyki, faza o'tishi o'zgarmas temperaturada bosim o'zgarishi bilan ham, ayni paytda temperatura va bosim o'zgarishi bilan ham, p va T o'zgarmas bo'lganda moddaning tashkil etuvchilarining konsentratsiyasi o'zgarishi natijasida ham sodir bo'lishi mumkin.

Hozirgi zamon fizikasi faza o'tishlarini uchinchi va hatto undan yuqori tur faza o'tishlariga ajratayotgan bo'lsalar ham, Erenfest tomonidan taklif qilingan faza o'tishlarini birinchi va ikkinchi turlarga bo'lish amalda ko'p ishlatiladi.

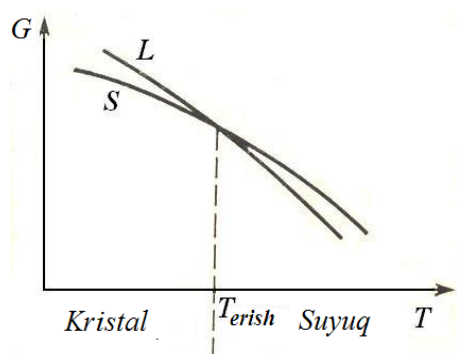
Birinchi tur faza o'zgarishlari. Birinchi tur faza o'zgarishlari deb shunday faza o'zgarishlariga aytiladiki, bunda o'zaro aylangan α va β fazalarning ximiyaviy potentsiallaridan temperatura va bosim bo'yicha olingan birinchi tartibli xususiy hosilalari o'zaro teng bo'lmaydi:

$$\frac{\partial \mu_{\alpha}}{\partial T} \neq \frac{\partial \mu_{\beta}}{\partial T}; \quad \frac{\partial \mu_{\alpha}}{\partial p} \neq \frac{\partial \mu_{\beta}}{\partial p}. \quad (6.27)$$

Bu oxirgi (6.27) va (6.20) shartlardan kelib chiqadiki, o'tish nuqtasida Gibbsning termodinamik potentsialidan temperatura va bosim bo'yicha olingan birinchi tartibli xususiy hosilalari orqali aniqlanuvchi entropiya, hajm va ichki energiya kabi quyidagi ekstensiv kattaliklar

$$S = - \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_p; \quad V = \left(\frac{\partial G}{\partial p} \right)_T, \quad (6.28)$$

sakrab (keskin) o'zgaradi. Muvozanatda bo'lgan har ikki faza uchun ham termodinamik potentsial G bir xil bo'lganligi uchun faza o'tishida u uzliksiz o'zgaradi. 6.5- rasmda ayni moddaning kristall va suyuq holatlaridagi Gibbs potentsialining temperaturaga bog'liq holda o'zgarishi



6.5-rasm. Ayni moddaning kristall va suyuq holatlari uchun Gibbs potentsialining temperaturaga bog'lanish grafigi.

ko'rsatilgan. Erish temperaturasida qattiq va suyuq fazalar muvozanatda bo'ladi va bu nuqtada qattiq va suyuq fazalarning mos holdagi Gibbsning termodinamikaviy potentsiallari o'zaro teng bo'ladi: $G_Q(T) = G_S(T)$.

Qattiq va suyuq fazalarning mos holdagi $G_Q(T)$ va $G_S(T)$ egri chiziqlari temperatura ortishi bilan bir tekisda kamayib T_{erish} erish temperaturasida kesishib (teng bo'lib), erish temperaturasining ikki tomonida ham mavjud.

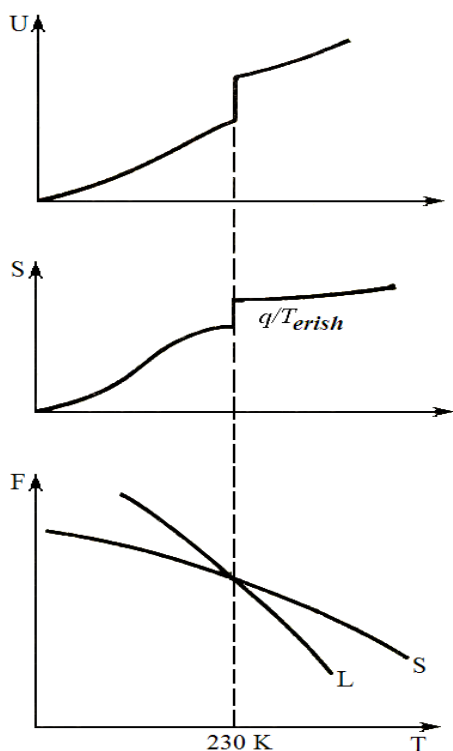
Termodinamik potentsiali qanchalik kichkina bo'lsa, faza shunchalik turg'un bo'lganligi uchun T_{erish} temperaturasidan katta temperaturalarda suyuq faza muvozanatda (turg'un) bo'ladi, qattiq faza esa noturg'un (metastabil) holatda bo'ladi, ammo suyuq faza bilan raqobatlasha olmaydi. T_{erish} temperaturasidan past temperaturalarda esa qattiq faza muvozanatda (turg'un), suyuq faza esa metastabil holatda bo'ladi. Metastabil holatlarga o'ta qizdirilgan kristall yoki o'ta sovutilgan suyuq fazalar mos keladi.

Sistemaning entropiyasining sakrab o'zgarishi bilan bog'liq bo'lgan fazaviy o'tish issiqligi

$$Q = T\Delta S$$

musbat bo'lishi ham mumkin, manfiy bo'lishi ham mumkin, ya'ni birinchi tur fazaviy o'tishda issiqlik ajralishi ham, yutilishi ham mumkin.

6.6-rasm. Simob ichki energiyasining, entropiyasining va erkin energiyasining temperaturaga bog'liq holda o'zgarish grafigi keltirilgan.



6.6-rasm. Simob ichki energiyasining, entropiyasining va erkin energiyasining temperaturaga bog'liq holda o'zgarishi.

Simobning erish temperaturasi 230 K da ichki energiya va entropiyaning sakrab o'zgarishi kuzatiladi, erkin energiya va Gibbsning termodinamik potentsiali uzluksiz o'zgaradi. Birinchi tur fazaviy o'tishlarga moddalarning agregat holatlarining o'zgarishlari: erish va kristallanish, bug'lanish va kondensatsiyalanish, sublimatsiya va desublimatsiya hodisalari, elementlarning agregat holatlaridan qat'iy nazar allotropiyaviy o'tishlari (masalan: O₂ - kislorod va O₃ - ozon; orto - va paravodorod; uglerodning ko'plab modifikatsiyalari: grafit, fulleren, karbin, grafen, uglerod nanonaylari, va boshqalar), polimorfizm (bir ximiyaviy tarkibli qattiq jismning tashqi kuchlar o'zgarishi bilan turli kristall tuzilishga ega bo'lishi), kristallardagi atomlarning tartiblanishi va tartibsizlanishi, tashqi magnit maydonida ayrim moddalarni o'tao'tkazuvchanlik holatiga o'tishi misol bo'ladi.

Ikkinchi tur faza o'zgarishlari. Ikkinchi tur faza o'zgarishlarida ikki fazaning ximiyaviy potentsiallari μ_α , μ_β va ularning temperatura va bosim orqali olingan birinchi tartibli xususiy hosilalari o'zaro teng bo'lib, ularning ikkinchi tartibli hosilalari teng bo'lmaydi:

$$\mu_\alpha = \mu_\beta, \quad \frac{\partial \mu_\alpha}{\partial T} = \frac{\partial \mu_\beta}{\partial T}, \quad \frac{\partial \mu_\alpha}{\partial p_\alpha} = \frac{\partial \mu_\beta}{\partial p_\beta};$$

$$\frac{\partial^2 \mu_\alpha}{\partial T^2} \neq \frac{\partial^2 \mu_\beta}{\partial T^2}, \quad \frac{\partial^2 \mu_\alpha}{\partial p^2} \neq \frac{\partial^2 \mu_\beta}{\partial p^2}, \quad \frac{\partial^2 \mu_\alpha}{\partial T \partial p} \neq \frac{\partial^2 \mu_\beta}{\partial T \partial p}. \quad (6.30)$$

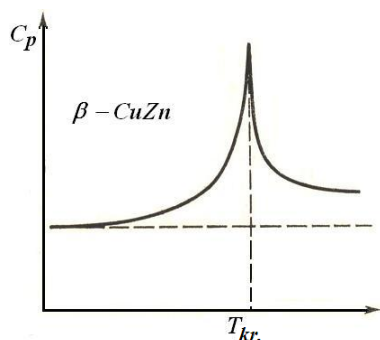
Ikkinchi tur faza o'zgarishida fazalarning faqat termodinamikaviy potentsiallarigina emas, balki ularning temperatura va bosim bo'yicha birinchi tartibli hosilalari (entropiyasi va hajmi) ham uzluksiz o'zgaradi, ikkinchi tartibli hosilalari esa sakrab o'zgaradi, ya'ni fazaviy o'tish nuqtasida ular teng bo'lmaydi. Demak, termodinamik potentsiallarning ikkinchi tartibli hosilasi orqali aniqlanuvchi o'zgarmas bosimdagi issiqlik sig'imi C_P , hajmiy kengayish koeffitsiyenti α va siqiluvchanligi β ham sakrab o'zgaradi:

$$C_P = T \frac{\partial S}{\partial T} = -T \frac{\partial^2 G}{\partial T^2},$$

$$\alpha = \frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial T} = \frac{1}{V} \frac{\partial^2 G}{\partial T \partial P},$$

$$\beta = -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial P} = -\frac{1}{V} \frac{\partial^2 G}{\partial P^2}. \quad (6.31)$$

6.7 - rasmda $T_{kr.} = 425^\circ\text{C}$ kritik temperaturada $\beta\text{-CuZn} \rightarrow \beta'\text{-CuZn}$ (atomlari tartiblanmagan hajmi markazlashgan kub $\rightarrow$ atomlari tartiblangan hajmi markazlashgan kub) faza o'tishida issiqlik sig'imining o'zgarishi ko'rsatilgan. Bu faza o'tishida sig'im o'tish temperaturasida sakrab o'zgargani uchun bu o'tish ikkinchi tur faza o'tishi hisoblanadi.



6.7-rasm. O'rinalmashuvchi $\beta\text{-CuZn}$ qattiq eritmadagi «tartibsizlik – tartiblanish» 2- tur faza o'tishida issiqlik sig'imining sakrab o'zgarishi.

Shuni aytib o'tish lozimki, yuqorida tilga olgan kattaliklar birinchi tur fazaviy o'zgarishda ham sakrab o'zgarishi mumkin. Ammo birinchi tur fazaviy o'tishdan farqli holda ikkinchi tur fazaviy o'tishda entropiya $S = -\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_p$ uzluksiz o'zgarganligi uchun bunda issiqlik ajralmaydi ham, yutilmaydi ham. Ikkinchi tur fazaviy o'zgarishining o'ziga xos asosiy xususiyatlaridan yana biri fazalarning mavjudligining qat'iy temperaturalar sohasi bo'lib, o'ta qizishi ham, o'ta sovushi ham mumkin emas va faza o'tishi muayyan temperaturada sodir bo'ladi. Ikkinchi tur faza o'tishlariga mis bilan rux birikmasi – latun tipidagi qotishmalardagi atomlarning tartiblanishi, metall yoki qotishmalarning (jumladan yuqori temperaturali o'tao'tkazgich keramikalarining, masalan, $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ birikmasining) tashqi magnit maydonisiz o'ta o'tkazuvchanlikka o'tishi, suyuq geliyning o'ta oquvchanlikka o'tishi, amorf materiallarni shishasimon holatga o'tishi, metallarni ferromagnit holatdan paramagnit holatga o'tishi misol bo'ladi.

Keyingi vaqtlarda kvant faza o'tishi hodisasi keng o'rganilmoqda. Bunday o'tishlar mutlaq nol temperaturalarda Nernst teoremasiga ko'ra, 0 K da entropiya $S \rightarrow 0$ bo'lganligi uchun) atomlarning klassik issiqlik fluktuatsiyalari hisobiga emas, kvant effektlar hisobiga sodir bo'ladi. Temperatura va bosim o'zgarishi bilan faza o'tishi sodir bo'ganda

moddaning u yoki bu xossalari sakrab o'zgarishini ko'rib o'tdik. Temperatura yoki bosimni o'zgarishi moddaning hajmi va ichki energiyasining o'zgarishiga olib keladi. Bu kattaliklarning o'zgarishi moddaning ma'lum bir qismlarida chekli tezlik bilan sodir bo'ladi. Butun hajmda bu kattaliklar bir xil qiymatlarga erishuvi, ya'ni faza o'tishi butun hajmda yakunlanishi uchun ma'lum bir vaqt talab qilinadi. Bu vaqt davomida faza o'tishi butun hajmda bir zumda sodir bo'lmay balki asta sekin sodir bo'ladi. Demak, faza o'tishi to'la amalga oshishi uchun ma'lum bir vaqt davomida uzluksiz issiqlik berib (yoki olib) turish kerak. Sodda qilib aytganda, tashqi kuchlar ta'sirida har qanday sistemada termodinamik muvozanat sodir bo'lishi uchun vaqt talab qilinadi.

6.6. Faza o'zgarishlarining xususiyatlari

Qattiq holatdagi faza o'zgarishlarning o'ziga xos tomonlari bo'lganligi uchun bu haqda to'xtalib o'tishni lozim topdik. Ko'p hollarda qattiq holatdagi strukturaviy faza o'zgarishlari sistemaning simmetriya elementlari o'zgarishi bilan sodir bo'ladi. Bunda agar birinchi tur faza o'tishi sodir bo'lsa, kristall panjaraning keskin o'zgarishi sodir bo'lib, simmetriya elementlarining o'zgarishi hech qanday cheklashga bo'ysinmaydi - ikkala fazaning ham simmetriya guruhi tubdan farq qilishi mumkin. Ikkinchi tur strukturaviy faza o'zgarishida esa nisbatan past temperatura-dagi fazaning simmetriya guruhi yuqori temperaturadagi faza guruhining guruhchasiga mansub bo'ladi. Yuqori temperaturali faza past temperaturali fazaga qaraganda yuqori simmetriyali bo'ladi. Tashqi magnit maydonisiz temperatura o'zgarishi (pasayishi) bilan o'tkazgichni o'tao'tkazuvchanlik holatiga o'tishi kristall panjaraning va mikrostrukturaning o'zgarishsiz sodir bo'lib, bu o'tish moddaning elektron strukturasi-ning o'zgarishi bilan bog'liqdir.

Moddaning qattiq holatidagi barcha fazaviy o'zgarishlari quyidagi tiplarga bo'linadi: rekonstruksiyaviy, deformatsiyaviy, tartibsizlanish – tartiblanish, ximiyaviy bog'lanish turining o'zgarishi bilan sodir bo'ladigan o'zgarishlar va moddaning kristall panjarasining o'zgarishsiz elektron strukturasi-ning o'zgarishi bilan sodir bo'ladigan faza o'zgarishlari. Bu o'zgarishlar haqida bir muncha to'laroq to'xtalib o'tamiz.

1. **Rekonstruksiyaviy o'zgarish** ko'p miqdordagi atomlararo bog'lanishlarni va yangi bog'lanishlarni tiklanishi bilan sodir bo'lib, sistemani qayta tashkil bo'lishi yuz beradi. Bunday o'tishlar yuqori aktivatsiyaviy energiyaga ega bo'lib, sekin sodir bo'ladi va shuning uchun ham

«sekin oʻtishlar» deb ataladi. Rekonstruktiv faza kinetikaviy qiyinchilik (kichik tezligi) tufayli real vaqt oraligʻida amalga oshmasligi ham mumkin. Rekonstruktiv oʻtishda oʻtish nuqtasining ikki tomonidagi kristallar simmetriyasi va fazoviy guruhi bilan bir-biridan tubdan farq qiladi. Bu oʻtishda kristall panjaraning koordinatsiyaviy soni oʻzgaradi. Masalan, koordinatsiya soni $K = 4$ boʻlgan olmosning hajmi markazlashgan kub kristall panjarasi rekonstruktiv oʻzgarish tufayli koordinatsiya soni $K = 3$ boʻlgan kristall panjarasi geksagonal boʻlgan grafitga aylanadi.

2. **Deformatsiyaviy oʻtishlarda** moddadagi ximiyaviy bogʻlanish buzilmay kristall panjaraning uncha katta boʻlmagan buzilishi (deformatsiyasi) tufayli sodir boʻladi. Bunday oʻzgarishlarning aktivatsiyaviy energiyasi oz boʻlganligi uchun ular tez sodir boʻladi. Shuning uchun deformatsiyaviy oʻzgarishlarni “tez oʻtishlar” deyiladi. Deformatsiyaviy oʻtishga misol qilib geksagonal strukturali β -kvarsning $573\text{ }^{\circ}\text{C}$ temperaturada trigonal strukturali α -kvarsiga ($\beta\text{-SiO}_2 \xrightarrow{573\text{K}} \alpha\text{-SiO}_2$) oʻtishini keltirish mumkin. Yuqori simmetriyali kristallarning deformatsiyaviy oʻtishlarida past simmetriyali kristallar hosil boʻladi.

3. **Tartibsizlanish - tartiblanish** tipidagi faza oʻzgarishlari ikki xil boʻladi. a). Atomlarning oʻrin almashuvi (masalan, latundagi $\beta\text{-CuZn} \rightarrow \beta'\text{-CuZn}$ oʻtish) va oʻrin almashuvchi qattiq eritmalaridagi shu kabi oʻtishlar, metall hamda (N, C, N, O) metallmaslarning ayrim metallar bilan hosil qilgan suqilma fazalaridagi kristall panjarasining tugun oraligʻida metallmaslarning tartibsiz va tartibli joylashuvi bilan bogʻliq oʻtishlar (masalan, IV-V oraliq metallarining metallmaslar bilan hosil qilgan suqilma fazalari: karbidlar, nitridlar, oksidlar va gidridlardagi oʻtishlar). Bu oʻtishlar atomlarning diffuziyasi bilan bogʻliq boʻlganligi uchun sekin sodir boʻlib, baʼzan tartiblangan fazalarda termodinamik muvozanat hosil boʻlishi uchun sistemani maʼlum bir temperaturada bir necha sutkalar davomida ushlab kerak boʻladi.

b). **Oriyentatsiyaviy** (aylanma, tezkor) **oʻtishlar**. Bunday oʻtishga $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$ birikmasining segnetoelektrik holatidan paraelektrik holatiga oʻtishi misol boʻladi. Bu oʻtishda O-N-O zanjiridagi tetraedrlarning oriyentatsiyasi oʻzgarishi sodir boʻladi. Past temperaturadagi segnetoelektrik fazasida tetraedrlar bir xil oriyentatsiyaga ega boʻlib, yuqori temperaturali paraelektrik fazasida tetraedrlar tartibsiz oriyentatsiyalangan boʻlib qoladi.

4. **Kristall atomlari orasidagi ximiyaviy bogʻlanish kuchlarining oʻzgarishi bilan sodir boʻladigan oʻzgarishlar**. Bunday fazaviy oʻzga-

rishlar odatdagi sharoitda tetragonal kristall tuzilishga ega bo'lgan oq qalayining (Sn) 13.2 °C da kub kristall panjarali kulrang qalayiga o'tishi misol bo'ladi. Bu o'tishda qalayi atomlari orasidagi bog'lanish kuchlari ion bog'lanishdan metall bog'lanishga o'zgaradi. Rekonstruktiv faza o'zgarishida ham ximiyaviy bog'lanish kuchlari o'zgarishi mumkin. Masalan, uglerodning olmos va grafit fazalarining kristall simmetriyalari tubdan farq qilishi bilan birga ulardagi ximiyaviy bog'lanish kuchlari turlicha, mos holda kovalent va aralash bog'lanish kuchlariga egadirlar.

5. O'tkazuvchi elektronlarining (o'tao'tkazuvchanlikda) yoki atomlarining (o'taoquvchanlikda) kvant holati va o'zaro ta'sirlashuvi tabiatining o'zgarishi bilan bog'liq faza o'tishlar. Bunday o'tishlarda moddadagi atomlarning o'zaro joylashuvi va moddaning mikrostrukturasi (suyuq yoki kristall holatlari) o'zgarishsiz qoladi. Bunday faza o'tishlariga suyuq geliyning o'tao'tkazuvchanlik holatiga o'tishi va ayrim kristall holatdagi o'tkazgich metall va birikmalarni o'tao'tkazuvchanlik holatiga o'tishlari misol bo'ladi.

6. Magnit o'zgarishlari. Ba'zi paramagnit (magnit singdiruvchanligi $\mu \geq 1$) bo'lgan materiallar (masalan, ko'pgina metallar va ularning qotishmalari) yetarlicha past temperaturalarda magnitlanib, ularning magnit singdiruvchanligi paramagnit holatidagidan ancha yuqori bo'lib qoladi. Moddalarning magnit holati birinchi marta (Fe) temirda kuzatilgan va ferromagnetizm nomini olgan. Moddalarning paramagnit holatidan ferromagnit holatiga o'tishi II tartibli faza o'tishi bo'lib, o'tish temperaturasi **Kyuri nuqtasi** deyiladi. Temperatura pastdan yuqoriga ortishi bilan moddaning ferromagnit xossasi asta-sekin kamayib Kyuri temperaturasida (nuqtasida) butunlay yo'qoladi. Masalan, temir uchun bunday temperatura 768 °C. Bu temperaturadan yuqori temperaturalarda metallar paramagnitlik bo'lib qoladi. Magnit o'tishlarda moddaning kristall panjarasi va mikrostrukturasi o'zgarmagan holda, elektron spinlari momentlari oriyentatsiyalarining Kyuri temperaturasidan pastda tartiblanishi va undan yuqori temperaturalarda tartibsizlanishi sodir bo'ladi, ya'ni ushbu holat o'zgarishi elektronlarning o'zaro ta'sirlashuv xarakteri o'zgarishi bilan bog'liq.

Umuman aytganda, kristallardagi faza o'zgarishlari (yoki faza o'tishlari) tabiatning juda muhim, qiziq va murakkab hodisalaridan hisoblanadi.

6.7. Qattiq eritmalar kristall panjarasidagi atomlarning tartiblanishi va tartibsizlanishi

6.7.1. Qattiq eritmalarining turlari va oraliq fazalar

Yagona kristall panjara hosil qilgan ikki yoki undan ortiq turli elementlardan tashkil topgan o'zgaruvchi tarkibli birikmalar **qattiq eritmalar** deyiladi. Qattiq eritmaning biror fazasining o'zgaruvchan tarkibining diapazoni uning **gomogenlik (mavjudlik) sohasi** deyiladi. Ayrim hollarda mavjudlik sohasi tor konsentratsiyalar oralig'ida cheklangan bo'ladi. Qattiq eritmalar **o'rin almashuvchi qattiq eritmalarga, chegirmali qattiq eritmalarga, suqilma qattiq eritmalarga** va **suqilma qotishmalarga** bo'linadi.

O'rin almashuvchi qattiq eritmalarda yagona kristall panjara hosil qilgan tashkil etuvchilar panjara tugunlarida joylashadi va bir-birlarining o'rinlarini almashtira oladi. Masalan, Cu-Au , Cu-Zn , Ti-Zr , GaAs-GaP kabi sistemalar keng gomogenlik sohasida uzluksiz almashuvchi qattiq eritmalar hosil qila oladi. O'rin almashuvchi qattiq eritmalar keng gomogenlik sohasiga ega bo'lishi uchun Yum-Rozerning uchta empirik sharti bajarilishi kerak:

- eritmaning tashkil etuvchilari mustaqil holatda bir xil tipdagi kristall panjaraga ega bo'lishi kerak;
- tashkil etuvchilar atomlarining o'lchamlari bir-birlaridan farqi 10-15 % dan katta bo'lmasligi kerak;
- tashkil etuvchilar orasida ma'lum bir ximiyaviy yaqinlik bo'lishi kerak.

Bu shartlarning bittasi bajarilmay ikkitasi bajarilsa ham o'rin almashuvchi qattiq eritmalar hosil bo'lishi mumkin. Yarimo'tkazgichlarning va dielektriklarning kristall panjarasi ancha g'ovak bo'lganligi uchun ular atomlarining radiuslari ancha farq qilsa ham ular asosida o'rin almashuvchi eritmalar hosil bo'laverishi mumkin.

Ximiyaviy birikma asosida **chegirmali qattiq eritma hosil bo'ladi**. Bunday kristallarning tugunlarining ma'lum bir qismida atom bo'lmaydi-vakansiya bo'ladi. Co-Al , Ni-Al sistemalarida chegirmali qattiq eritmalar kuzatiladi. Masalan, NiAl fazasi alyuminiyning 40 -55 at. foizigacha CsCl tipidagi hajmi markazlashgan kub strukturasini hosil qiladi. Alyuminiyning 50 at. foizigacha bu faza odatdagi o'rin almashuvchi qattiq eritma hisoblanadi. Alyuminiyning 50 at. % idan yuqori konsentratsiyasida NiAl kristall panjarasida Ni band qilishi kerak bo'lgan tugunlar bo'sh qolib, 50 foizdan ortiqcha Al atomlari Ni atomlari bilan

o‘rin almashinib aralashib ketmay, balki o‘zining sverxstexiometriyaviy panjara tugunlarini tashkil qiladi. Natijada Ni ning panjara tugunlaridagi joylarining bir qismi vakansiya bo‘lib, bo‘sh qoladi va butun kristall panjara bo‘ylab statistik taqsimlanib ketadi. Bunday eritma hosil bo‘lishiga sabab fazaning tashkil etuvchilarining turlicha miqdordagi valent elektronlariga ega bo‘lib, ularning alohida atomlar bo‘yicha emas, balki elementar yacheyka bo‘yicha taqsimlanishidir. Qaralayotgan eritmada Al valent elektronlari 3, Ni atominiki esa 0. NiAl eritmasida elementar yacheyka mukammal (vakansiyalarsiz-stexiometriyaviy) bo‘lsa ham, unda Ni atomi Al atomidan kam bo‘lsa ham elementar yacheykadagi valent elektronlar 3 ta bo‘lib qolaveradi. Bu omil chegirmali qattiq eritma hosil bo‘lishiga olib keladi.

Agar qattiq eritmaning tashkil etuvchilarining atomlari o‘lchamlari yoki elektron strukturalari bilan bir-biridan keskin farq qilsa, kichik atomli element katta atomli element kristall panjarasini o‘zgartirmay ularning oktaedr yoki tetraedr deb ataluvchi tugunlararo bo‘shliqlariga (p. 1.3.9) suqilib kirib joylashadi. Shuning uchun bunday qattiq eritmalar **suqilma qattiq eritmalar** deb ataladi. Bunday qattiq eritmalar bor (B), vodorod (H), kislorod (O), azot (N), va uglerod (C) metallaslarining metall kristall panjaralari tugunlari orasiga kirishi natijasida hosil bo‘ladi. Biz yuqorida ko‘rib o‘tdikki (p. 1.3.9), elementlar Davriy sistemasining IV-V guruh oraliq metallari uch xil: tomonlari markazlashgan kub, hajmi markazlashgan kub va zich taxlangan geksagonal kristall panjaralaridan birini hosil qiladi. Bu kristall panjaralarda ikki xil tugunlararo bo‘shliqlar - oktaedrlar va tetraedrlar mavjud. Bu tugunlararo bo‘shliqlarga **Xegning empirik qoidasiga** ko‘ra $R_X/R_{Me} \leq 0.59$ shartni qanoatlantiruvchi H, C, O, va N yengil elementlarning atomlari kirib joylashuvi mumkin, bunda R_X - va R_{Me} - mos holda yengil element va metall atomlarining radiuslari. Azot atomlarining IV guruh oraliq metallarining geksagonal kristall panjarasi tugunlari orasiga kirishi uglerod atomlarinikiga qaraganda ancha yuqori. Bu jihatdan azot atomlari IV guruh oraliq metallarining kristall panjarasining tugunlari orasiga bir necha atom foizigacha suqilib kira oladigan kislorod atomlariga o‘xshaydi. Vodorod atomining o‘lchami uglerod va azot atomlarining o‘lchamlaridan kichik bo‘lishiga qaramasdan, uning metallarning geksagonal panjarasi orasida erishi 8 atom foizidan yuqori emas. Suqilma qattiq eritmalarga IV-V guruh metallarining (Me) zich taxlangan geksagonal (α -Me) va hajmi markazlashgan kub (β -Me), shuningdek, α -Fe ning

hajmi markazlashgan kub panjaralari tugun oraliqlariga metallmaslarning (uglerod, azot, kislorod yoki vodorod atomlarining) birortasini kiritilishi natijasida hosil bo'lgan eritmalar misol bo'ladi. Suqilma qattiq eritmalarda garchi metallmas atomlari panjara tugun oraliqlarida joylashgan bo'lsa ham metallar o'ziga tegishli bo'lgan dastlabki kristall panjarasini saqlab qoladi. Ammo odatda suqilma qattiq eritmalarda metallmasslar kristall panjaraning hamma tugunlararo bo'shliqlarini to'la band qila olmaydi. Metallarning geksagonal va hajmi markazlashgan kub panjaralari tugunlari orasidagi metallmaslarning konsentratsiyasi ortishi bilan dastlabki panjaralar tomonlari markazlashgan kub panjarasiga aylanib, metallmaslar endi bu yangi tomonlari hajmi markazlashgan kub panjara tugunlari orasida joylashadi. Bu birikmalarni, dastlabki panjara tugunlari orasidagi bo'shliqlarda metallmaslar erib hosil qilgan suqilma qattiq eritmalaridan farqli holda, **suqilma faza** deyiladi. Suqilma fazalarga elementlarning Davriy sistemasining IV-V guruh metallarining gidridlari MeH_x , qiyin eruvchi va yuqori mustahkamlikka ega bo'lgan karbidlari MeC_x , nitridlari MeN_x va oksidlari MeO_x misol bo'ladi, bu yerda x -metallmas atomlar miqdori. Uglarod atomlari gamma-temir ($\gamma\text{-Fe}$) austinitning tomonlari markazlashgan kub panjarasida tugunlar orasida joylashib, suqilma qattiq eritma hosil qiladi. Umuman, suqilma qattiq eritmalariga ko'plab misollar keltirish mumkin. Suqilma fazalarning ximiyaviy formulalaridan ko'rinib turibdiki, ular **o'zgaruvchan tarkibli birikmalardir**. Ularning gomogenlik sohasi nihoyatda keng bo'lishi mumkin. Masalan, keyingi vaqtlarda olib borilgan neytronografiyaviy tadqiqot natijalariga ko'ra, TiC_x tomonlari markazlashgan titan karbidining mavjudlik sohasi 1200°C temperaturada uglarodning $0.33 \leq x \leq 1.00$ konsentratsiyalari oralig'ida yotadi. Demak, TiC_x tomonlari markazlashgan kub titan karbidining kristall panjarasi 67 foizgacha tugunlararo oktaedr bo'shliqlar bo'lsa ham o'z turg'unligini saqlab qolar ekan. Shu bilan birga 1200°C dan toblash yo'li bilan mazkur fazani xona temperaturasida olsak, u 450°C gacha yetarlicha turg'un bo'lishi ko'rsatildi. Demak, bu fazadan past temperaturalarda amalda foydalanish mumkin. Suqilma fazalarning keng mavjudlik sohasiga ega bo'lishi ularning amaliyot uchun foydali xossalarini maqsadga muvofiq holda katta diapazonda o'zgartirish imkoniyatini beradi. Suqilma fazalar suqilma qattiq eritmalaridan nihoyatda yuqori erish temperaturasi (3200°C dan yuqori), mustahkamligi, (olmosdek) mikroqattiqligi bilan farq qilsa ham kristalloximiyaviy nuqtai nazardan ularni ham konsentratsiyaviy poli-

morf faza o'tishi natijasida hosil bo'lgan hosilaviy kristall panjarasi tugunlari orasida metallmaslarning erishi natijasida hosil bo'lgan suqilma qattiq eritma deb qarash mumkin. Suqilma fazalar ham suqilma qattiq eritmalar singari ikkita - metall va metallmas panjarachalariga ega va keng gomogenlik sohasiga ega bo'ladi. Bir qator o'xshashliklar tufayli suqilma qattiq eritmalar va suqilma fazalar umumiy nom bilan **suqilma qotishma** deb ham ataydilar. Atomlarni qattiq sharlar deb qarasak, oddiy geometrik tasavvurlardan kelib chiqib, suqilma qotishmalar uchun ko'rsatish mumkinki, agar $0.41 \leq R_X/R_M \leq 0.75$ shart bajarilsa, kiritma atomlarga (metallmaslarga) oktaedr tugunlararo bo'shliqlarda joylashish qulay, agar $0.22 \leq R_X/R_M \leq 0.41$ shart bajarilsa, tetraedr tugunlararo bo'shliqlarda joylashish qulay. Haqiqatdan ham azot yoki uglerod atomlari bilan oraliq metallari uchun birinchi shart bajariladi va yengil elementlar oktaedrlarga kirib suqilma qotishmalarni hosil qiladi. Ular uchun suqilma qotishmalarda Xegg qoidasi istisnosiz kuzatiladi. Vodorod atomlari uchun ikkinchi $0.22 \leq R_X/R_M \leq 0.41$ shart bajariladi. Bundan kelib chiqadiki, vodorod metall panjaralarining tetraedr tugunlararo bo'shliqlarida joylashgan suqilma qattiq eritmalarini yoki suqilma qotishmalarni tashkil qiladi. Ba'zan bu qoidadan chetlanishlar kuzatiladi. Masalan, Ni, Mn, Pd kristall panjaralarida vodorod atomlari oktaedr tugunlararo bo'shliqlarni ishga'ol qiladi. Ammo titan karbogidridlari TiC_xH_y ustida olib borilgan keyingi vaqtlardagi neytronografiyaviy tadqiqot natijalari shuni ko'rsatadiki, vodorod atomlarining oktaedr yoki tetraedr tugunlari orasida joylashuvi faqat metall va metallmas atomlarining o'lchamlarigagina bog'liq bo'lmay, balki temperaturaga ham bog'liq bo'ladi. Ular ayni panjarada temperaturaga bog'liq holda har ikkala turdagi tugunlararo bo'shliqlarni ham ishga'ol qilishi mumkin.

Tabiiy minerallar ko'p hollarda qattiq eritmalar shaklida uchraydi. Elementlarni va birikmalarni legirlaganda hosil bo'ladigan qattiq eritmalar yarimo'tkazgichlar, keramik materiallar va ferritlar qotishmalari ishlab chiqarishda katta ahamiyatga ega. Qattiq eritmalar hamma muhim ahamiyatga ega bo'lgan yuqori mustahkamlikka ega konstruksiyaviy, zanglamas po'lat, bronza latun, alyuminiy va magniy qotishmalarini ishlab chiqishning asosida yotadi. Qattiq eritmalarining xossalarini ularning tarkibini o'zgartirish yo'li bilan, termik va termomexanik ishlov berish yo'llari bilan boshqarish mumkin. Hozirgi qattiq jisimli elektronikaning asosi hisoblangan legirlangan yarimo'tkazgichlar va ko'pgina segnetoelektriklar ham qattiq eritmalar hisoblanadi. Yuqori erish tempe-

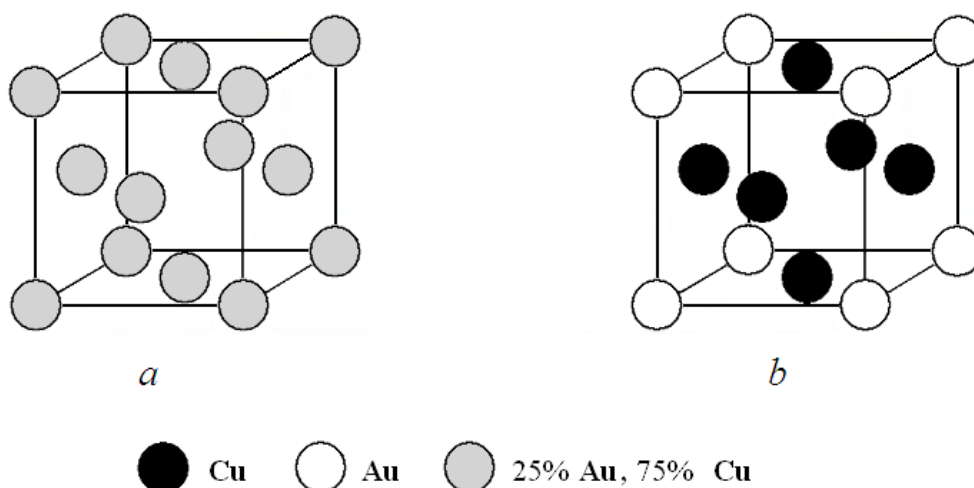
raturasiga, mustahkamlikka, agressiv muhitdagi korroziyaga chidamli metallarning karbidlari va nitridlari esa faqat zamonaviy texnika va sanoatda, emas balki meditsinada ham keng qo'llanilmoqda. Yana shunday qattiq eritmalar borki, ularning kristall panjarasida o'rin almashuvchi ikki xil metall atomlarining tugunlarining oktaedraviy oraliklarida metallmaslar atomlari joylashgan bo'ladi. Bunday qattiq eritmalar **murakkab matritsali yoki ikki matritsali suqilma qattiq eritmalar** deyiladi. Bunday qattiq eritmalar kub strukturali $Ti_xMo_{1-x}C$, $Ti_xMo_{1-x}N$ tarkibli birikmalar misol bo'ladi. Ular noyob mexanikaviy va fizikaviy xossalarga ega.

Qattiq eritmalarlan tashqari oraliq fazalar deb ataluvchi birikmalar ham bor. **Oraliq fazalar** deb tashkil etuvchilarining chegaraviy qattiq eritmaları orasidagi konsentrasiyalari oraliq'ida hosil bo'ladigan barcha qattiq eritmalariga aytiladi. Oraliq fazalar holat diagrammalarida ularni tashkil etgan elementlarining chegaraviy qattiq eritmalarlari va boshqa oraliq fazalar bilan ikki fazali sohalar bilan ajralgan bo'ladi. Oraliq fazalarning kristall panjarasi ularni tashkil etgan elementlarining kristal panjarasidan farq qiladi. Oraliq fazalar o'zgaras tarkibli ham, o'zgaruvchan tarkibli ham bo'lishi mumkin. Metallar hosil qilgan oraliq fazalar **intermetallidlar** deb ataladi. Oraliq fazalar ikki (binar) va ko'p tashkil etuvchilarga ega bo'lishi mumkin. Tashkil etuvchi elementlarining tabiatiga qarab oraliq fazalardagi atomlarning boglanish kuchlarining tiplari istalgan bog'lanish tipiga mansub bo'lishi mumkin. Bu fazalarning tipik turlari: NaCl, CaF_2 , Laves fazalari AB_2 formula ko'rinishidagi $MgCu_2$, $MgZn_2$ qotishmalar, σ -fazalar (FeCr, FeV), MoNiCr, MoCrCo, Mo_6Co_7 , $Re_{24}Ti_5$ va boshqalar. Oraliq fazalar texnika va sanoatning turli sohalarida qo'llanadi.

6.7.2. Qattiq eritmalar da atomlarning tartiblanishi

Yuqori temperaturalarda o'rin almashuvchi qattiq eritmalarining kristall panjarasida turli xil atomlar panjara tugunlarini bir xil ehtimoliyat bilan band qiladi. Buning ma'nosi shuki, turli xil atomlar panjara tugunlarida statistik joylashishadi, ya'ni har bir xil atomning panjarada o'zigagina tegishli tuguni bo'lmaydi. Aytaylik A va B xil atomlardan tashkil topgan o'rin almashuvchi AB qattiq eritma bo'lsin. Nisbatan yuqori (qattiq eritma parchalanish temperaturasidan past) temperaturalarda A va B atomlar panjaraning barcha tugunlarida bir xil ehtimoliyat bilan statistik taqsimlanadi. Bu hol qattiq eritma atomlarining **tartibsiz-**

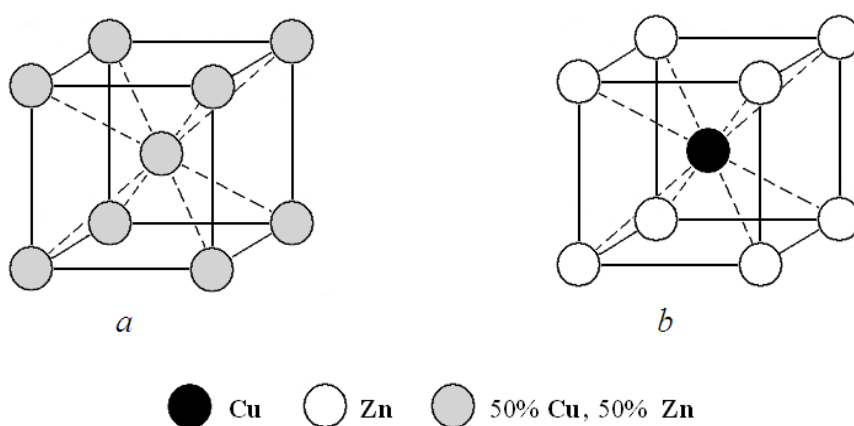
lanishi deyiladi. Atomlari panjara tugunlarida tartibsiz joylashgan AB qotishmada A yoki B atomlarning qaysi biri panjara tugunlarining qaysi birida joylashgan bo'lishining ahamiyati yo'q. A va B atomlarning panjara tugunlaridagi o'rinlarini bemalol almashtirish mumkin. Shuning uchun ham ular **o'rin almashuvchi qattiq eritmalar** deb ataladi. Ammo temperatura pasayishi bilan turli xil element atomlarining panjaraning barcha tugunlarida statistik taqsimlanishi barham topadi. Endi ularning har biri panjaraning o'z muayyan tugunlarini band qiladi, ya'ni turli xil atomlarning kristall panjarada **tartibli joylashuvi** kuzatiladi. Eritmaning atomlari tartiblashganda panjarada har bir hildagi atomning o'z o'ri (joyi) bo'ladi, birining o'rnini boshqasi band qila olmaydi. Misol uchun Cu_3Au (mis-oltin) o'rin almashuvchi qattiq eritmani (qotishmasini) olib qaraylik. Bu qotishmaning tashkil etuvchilarining elementar yacheykalari alohida olganda tomonlari markazlashgan kub bo'lib, kristallarning $\text{Fm}\bar{3}\text{m}$ fazoviy guruhiga mansub. Ularning Cu_3Au aralashuvchi qattiq eritmasi ham tomonlari markazlashgan kub kristall panjarasini hosil qilib, yuqori temperaturali fazasida Cu va Au atomlari tartibsiz holda tomonlari markazlashgan kub kristall panjaraning hamma tugunlarida bir xil ehtimoliyat bilan statistik aralash-quralash bo'lib joylashadi (6.8, *a* - rasm). Ularning elementar yacheykadagi koordinalari bir xil bo'ladi: $0,0,0; 0, 1/2, 1/2; 1/2, 0, 1/2; 1/2, 1/2, 0$.



6.8-rasm. Tartiblanmagan (*a*) va tartiblangan (*b*) Cu_3Au o'rin almashuvchi qattiq eritmasi kristallining elementar yacheykalari.

Agar qotishmani $\sim 390^\circ\text{C}$ temperaturadan pastda qizdirsak, mis va oltin atomlarining panjaradagi joylashuvda tartiblanish kuzatiladi, to'la tartiblanishda oltin atomlari kub panjaraning burchaklarida joylashadi,

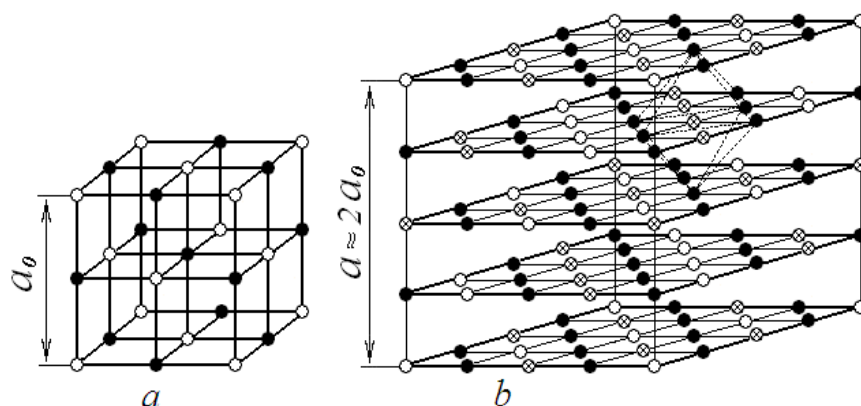
mis atomlari esa kub elementar yacheykaning tomonlarining markazida joylashadi (6.8, *b*-rasm). Natijada ularning elementar yacheykadagi koordinatalari har xil bo‘lib qoladi: oltin atomlarining koordinatalari 0, 0, 0 bo‘lib, faqat kub qirralarining uchlarida joylashsa, mis atomlariniki esa 0, 1/2, 1/2; 1/2, 0, 1/2 va 1/2, 1/2, 0 bo‘lib, faqat kub tomonlarining markazlarida joylashadi. Garchi tomonlari markazlashgan kub struktura saqlansa ham endi u boshqa - $Pm\bar{3}m$ fazoviy guruhga mansub bo‘lib qoladi. Shunga o‘xshash CuZn o‘rin almashuvchi qattiq aralashmada ham atomlari tartibsiz va tartibli joylashgan hajmi markazlashgan kub kristall panjaralari kuzatiladi (6.9-rasm).



6.9-rasm. CuZn aralashuvchi qattiq eritmasining atomlari tartiblanmagan (*a*) va tartiblangan (*b*) kristall panjarasining elementar yacheykalari.

Suqilma fazalarning mavjudlik sohasida nostexiometriya kuzatilganda, ya'ni metallmas konsentratsiyasi metallmas joylashuvi mumkin bo‘lgan muayyan turdagi tugun oraliklarining konsentratsiyasidan kam bo‘lganda metallmas atomlarining matritsa-metallarning tugunlari orasida tartibsiz va tartibli joylashuvi kuzatiladi. Suqilma eritmalarida bo‘sh qolgan tugunlar oraliklari (vakansiyalar) va suqilma metallmas atomlari o‘zlarini o‘zaro aralashuvchi qattiq eritmadek tutadi. Ular qayd qilingan (qo‘zg‘almas) metall atomlari (matritsalar) tugunlari orasida tartibsizlanadi yoki tartiblanadi. Oraliq metallarning gidridlari, karbidlari va nitridlari kabi suqilma eritmalarida shunday hollar kuzatiladi. Masalan, nostexiometriyaviy $TiC_{0.60}$ titan karbidi $T \geq 1000$ °C temperaturalarda NaCl tipidagi tomonlari markazlashgan kub kristall panjarasiga ega. Bu kristallda Ti atomlari $Fm\bar{3}m$ fazoviy guruhining 4(*a*) pozitsiyasida joylashib, tomonlari markazlashgan kub panjarasini hosil qiladi. Uglerod atomlari esa 4(*b*) oktaedr tugun oraliqlarida tartibsiz statistik taqsimlan-

gan bo‘ladi (6.10, *a* -rasm). Titan va uglerod atomlari joylashgan pozitsiyalarining karraligi 4. Pozitsiyalarning karraligining tengligidan ko‘rinib

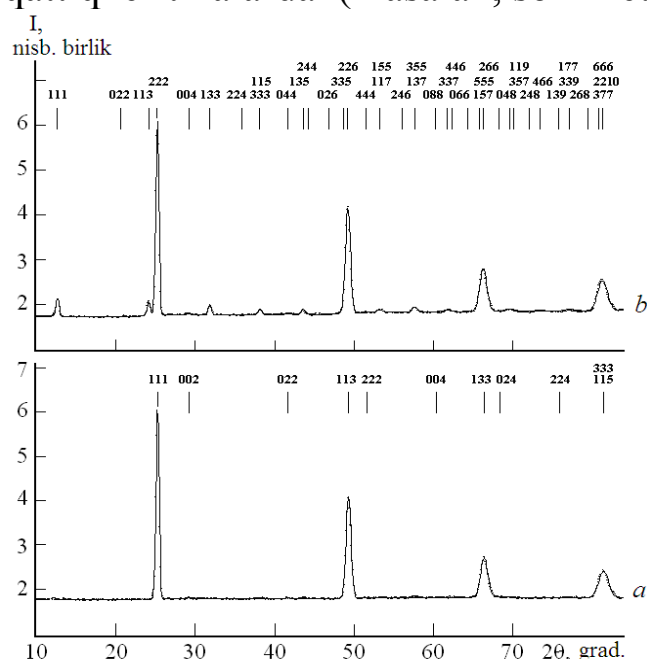


6.10-rasm. Tartiblanmagan (*a*) va tartiblangan $\text{TiC}_{0.50}$ titan karbidining elementar yacheykalari.

turibdiki, titan karbidining stexiometriyaviy tarkibi TiC bo‘ladi. Nostexiometriyaviy $\text{TiC}_{0.50}$ tarkibli titan karbidida esa uglerod soni oktaedrlar sonidan 50 % kam. Shuning uchun ham uglerod atomlari yuqori temperaturalarda barcha oktaedrlar bo‘yicha statistik tartibsiz joylashadi. Taxminan 600°C temperatura atrofida $\text{TiC}_{0.50}$ karbidining kristall panjarasida to‘la tartiblanish sodir bo‘lganda uglerod atomlarining barcha oktaedr tugun oraliqlarining faqat 50 foizini band qilib, 50 foizini bo‘sh qoldirishi kuzatilib, kristall Ti_2C stexiometriyaga mos bo‘lib qoladi. Buning natijasida agar avval panjara doimiysi a_0 bo‘lgan bo‘lsa, endi tartiblangan panjaraning doimiysi $a \approx 2a_0$, ya’ni ikki barobar kattalashadi (6.10, *b* - rasm). Endi bu tartiblangan fazaning kristall panjarasi avvalgidan boshqa $\text{Fd}\bar{3}\text{m}$ fazoviy guruhga mansub bo‘ladi.

Umuman, o‘rin almashuvchi va suqilma fazalarda kristall panjaradagi atomlarning tartiblanishi natijasida albatta fazoviy guruh o‘zgarishi bilan birga panjara doimiysining kattalashuvi kuzatiladi. Buning natijasida kristall difraktogrammasida (rentgenogrammasida yoki neytronogrammasida) qo‘shimcha difraksiyaviy maksimumlar paydo bo‘ladi. 6.11-rasmda tartiblangan va tartiblanmagan titan karbidining neytronogrammalari keltirilgan. Tartiblanish natijasida difraktogrammalarda asosiy maksimumlardan tashqari paydo bo‘ladigan qo‘shimcha maksimumlar **sverxstrukturalar** deyiladi. Ularning intensivligi asosiy strukturaviy maksimumlar intensivligiga nisbatan kam bo‘ladi. Atomlari tartiblangan past temperaturali kristall va yuqori temperaturali atomlari tartiblanma-

gan kristall panjaralarining doimiylari orasida ma'lum bog'lanish bo'ladi. Suqilma qattiq eritmalarda (masalan, sof metallarning kristall



6.11-rasm. Tartiblanmagan (*a*) va tartiblangan (*b*) $\text{TiC}_{0.50}$ titan karbidining neytronogrammalari. Difraksiyaviy maksimumlar tepasida mos holda $\text{Fm}\bar{3}\text{m}$ (*a*) va $\text{Fd}\bar{3}\text{m}$ (*b*) fazoviy guruhlar doirasidagi qaytaruvchi tekisliklar (Miller) indeksleri qo'yilgan.

panjaralarida metallmaslar “erigan” hollarda) strukturaviy maksimumlar intensivligiga nisbatan kam bo'ladi. Atomlari tartiblangan past temperaturali kristall va yuqori temperaturali atomlari tartiblanmagan kristall panjaralarining doimiylari orasida ma'lum bog'lanish bo'ladi. Suqilma qattiq eritmalarda (masalan, sof metallarning kristall panjaralarida metallmaslar “erigan” hollarda) tartiblanish natijasida panjara doimiysi dastlabki qiymatidan sezilarli farq qilmasligi ham mumkin. Ammo bu holda ham albatta sverxstrukturalar paydo bo'ladi va eritmaning kristall panjarasining fazoviy guruhi o'zgaradi. Suqilma qotishmalarda metallmasning suqilma atomlari yuqori temperaturalarda panjaradagi hamma tugun oraliqlarini statistik - bir xil ehtimoliyat bilan ishg'ol qiladi va barcha tugun oraliqlari ekvivalent (teng kuchli) hisoblanadi. Temperatura pasayishi bilan metallmaslar tartiblanganda tugun oraliqlarining ekvivalentligi buziladi. Endi metallmas atomlari ularning bir qismini band qiladi, ikkinchi qismi esa bo'sh qoladi. Agar suqilma atomning miqdori hosil bo'lgan sverxstrukturaga mos kelsa, tartiblanish jarayoni tugagan bo'lar edi. Ammo nostexiometriyaviy sistemalarda tartiblanuvchi metall-

maslar soni band bo'lishi mumkin bo'lgan tugunlar oraliqlari sonidan kam bo'lgani uchun tugunlar oraliqlarini statistik ishg'ol qilgan suqilma atomlar saqlanadi. Shuning uchun

temperaturani keyingi pasayishida sistema termodinamikaviy muvozanatga intilib, tartiblanish jarayonining keyingi etapi davom etadi. Tartiblanish jarayonining har bir keyingi etapida suqilma atomlar oldingi etapda statistik band qilgan tugun oraliqlarining yarmini band qiladi. Bu jarayon paydo bo'ladigan sverxstruktura kristalldagi metallmasning konsentratsiyasiga mos kelmaguncha yoki kristall tegishli turli fazalarga parchalanguncha davom etadi. Tartiblanishning bunday ketma-ketligi quyidagi bir qator suqilma qotishmalarda kuzatilgan, masalan: Nb_4D_3 , Ta_4D_3 , V_4C_3 . B hodisa ayniqsa $TiC_{0.50} H_y$ suqilma fazasida yaqqol namoyon bo'ladi.

Suqilma qotishmalrdagi tartibsizlik - tartiblanish faza o'tishining o'ziga xos xususiyati shundan iboratki, tartiblanish jarayoni faqat metallmaslar (suqilma atomlar) panjarachasida sodir bo'lib, metall atomlari-ning (matritsaning) hamma tugunlari qayd etilgan o'z vaziyatlarini o'zgartirmaydi. Boshqacha aytsak, bu qotishmalarda tartibsizlik-tartiblanish metall matritsasining tugunlari orasidagi suqilma atomlar va vakan-siyalar bilan sodir bo'ladi.

Atomlarning tartiblanish jarayonida ularning qayta taqsimlanishi atomlararo masofalar masshtabi doirasida sodir bo'ladi va tartiblangan faza hosil bo'ladi. Bu fazada atomlarning pozitsiyalari turli xil atomlar uchun ekvivalent bo'lmay qoladi. Tartiblanmagan kristall panjarasi ma'lum bir xildagi atomning konsentratsiyasi qotishma bo'yicha o'rtacha konsentratsiyadan ko'p yoki kam bo'lgan bir qancha sohalarga ajraydi. Natijada kristall panjara simmetriyasi o'zgaradi, uning elementar yacheykasining kattalashuvi kuzatiladi. Bunday turli konsentratsiyaga ega bo'lgan tartiblangan sohalar **antifazaviy domenlar** deyiladi. Antifazaviy fazalar hosil bo'lishiga sabab shuki, yuqori temperaturalarda qotishmada atomlarning taqsimlanishi tartibsiz (xaotik), temperatura pasayishi bilan u yoki bu tipdagi domenlarning paydo bo'lishi har bir lokal (mahalliy) sohada taqsimotning boshlang'ich issiqlik fluktuatsiyasi har xil - tasodifiy bo'lishi bilan bog'liq. Antifazaviy domenlar ham temperaturaga bog'liq holda butun kristall panjara bo'yicha tartibsiz yoki tartib bilan joylashgan bo'lishi mumkin. Yaqin vaqtlargacha antifazaviy domenlarning tartiblanishi o'rin almashuvchi qattiq eritmalardagina kuzatilgan edi. Keyingi vaqtlarda antifazaviy domenlarning tartiblanishi

Ti-C va Ti-C-H sistemalarining suqilma qotishmalarida ham sodir bo'lishi neytronografiyaviy tadqiqotlar natijasida tasdiqlandi. Antifazaviy domenlar **antifazaviy domenlar chegaralari** bilan xarakterlanadi. Antifazaviy chegaralarning bo'lishi termodinamika nuqtai nazaridan qulay emas, bunda sistema to'la muvozanatda bo'lmaydi. Shuning uchun qizdirish davomida pirovard oqibatda kichik o'lchamli domenlarning katta o'lchamli domenlarga qo'shilib ketishi natijasida antifazaviy domenlar chegaralari yo'qolib ketishi va butun kristallda **monodomen** hosil bo'lishi kerak. Haqiqatda esa real kristallarda bunday hol juda kam kuzatiladi. Katta o'lchamli domenlarning chegaralarining sekin siljishi va ularning kristall nuqsonlarida tormozlanishi oqibatida monodomen hosil bo'lishi qiyinlashadi.

Atomlari tartiblanuvchi birikmalar antifazali domenli (blokli) strukturaga ega bo'lganligi uchun ulardan hosil bo'lgan sverxstrukturalar maksimumlarining yarim kengligi asosiy strukturaviy maksimumlarning yarim kengligidan katta bo'ladi. Antifazali domenlarning o'lchamlari 2-300 nm oralig'ida bo'lsa, ularning o'rtacha o'lchamini sverxstrukturaviy maksimumlarning yarim kengligi orqali quyidagi Selyakov – Sherrer formulasiga ko'ra aniqlash mumkin:

$$D = k\lambda/\beta\cos\theta, \quad (6.31)$$

bunda λ – difraksiyalanuvchi rentgen nurining yoki neytronning to'lqin uzunligi, β - sverxstruktura maksimumining instrumental kengayishga tuzatma kiritgandan keyingi radianda olgan yarim kengligi, θ – Bregg burchagi, k -namunadagi kogerent soha o'lchamiga bog'liq bo'lgan konstanta, bir xil o'lchamli sferik domenlar (yoki kristallitlar) uchun $k = 0.94$. β kattalik quyidagicha aniqlanadi:

$$\beta = \frac{1}{2} \times (B - b + \sqrt{B(B-b)}), \quad (6.32)$$

bunda B - sverxstruktura maksimumining (fizikaviy) yarim kengligi, b - struktura maksimumlarining yarim kengligini sverxstrukturaning Bregg burchagiga ekstropolyatsiya qilish yo'li bilan topilgan instrumental kengligi. (6.32) formula orqali ayni bitta moddaning difraksiyaviy maksimumining instrumental va fizikaviy kengligini bilgan holda undagi donachalarning (bloklarning) va mikrokuchlanichlarning o'lchamlarini

ham baholash mumkin. Termoishlov orqali o‘rin almashuvchi qotishmaning domenli tuzilishini o‘zgartirib, uning mustahkamligini va plastikligini keskin oshirib **superqotishma** hosil qilish mumkin.

6.8. Tartiblanishning sodda nazariyasi

Qattiq eritma kristall panjarasidagi atomlarning tartiblanish jarayoni ancha murakkab jarayonlardan hisoblanadi. Tartiblanish natijasida hosil bo‘ladigan sverxstrukturani muayyan turini oldindan aytib berish har doim ham mumkin bo‘lavermaydi. Shunday hollar borki, temperatura pasayishi bilan turli temperaturalarga mos keluvchi turli tartiblangan fazalar ketma-ketligi kuzatiladi. Gap shundaki, termodinamika qonunlariga ko‘ra, temperatura pasayganda, ya‘ni sistemaning ichki energiyasi kamayganda eng katta hosil bo‘lish ehtimolyatiga erkin energiyaning eng kam qiymatiga mos keluvchi tartiblangan faza emas, balki hosil bo‘lishi uchun eng past energiyaviy to‘siqni yengadigan faza to‘g‘ri keladi. Shuning uchun tartiblanishda eng kam qiymatli erkin energiyaga o‘tish darhol sodir bo‘lmay, balki bir nechta kichikroq potensial to‘siqli bir muncha kattaroq qiymatga ega bo‘lgan erkin energiyali holatlar orqali ketma-ket o‘tib sodir bo‘ladi (6.2-rasm). Bunday faza o‘tishiga **Ostvaldning bosqichli faza o‘tishi** deyiladi. Bundan tashqari real kristallarda atomlar orasidagi ta’sir kuchlari murakkab tabiatga ega: atomlarning uzoq masofalarga uzatuvchi ta’sir kuchlari, elastik kuchlanish ta’siri kabi faktorlarning hammasini ham hisobga olish murakkab masaladir. Tartibsizlik va tartiblanish tipidagi faza o‘tishlarining turli nazariyalari bor. Quyida biz tartiblanishning eng sodda nazariyasi bilan tanishib chiqamiz. Bu nazariyani Bregg va Vilyams ishlab chiqqanlar. **AB** o‘rin almashuvchi qattiq eritmaning bog‘lanish energiyasini hisoblab chiqamiz. Hisobni soddalashtirish uchun faqat eng yaqin qo‘shni atomlar orasidagi ta’sir kuchlarini hisobga olamiz. Aytaylik, eritma to‘la tartiblanganda panjara-ning hamma qismida α tuguni **A** xil atom bilan, β tuguni **B** xil atom bilan band bo‘lishi kerak bo‘lsin. Bu holda panjarada **to‘la uzoq tartib** mavjud deb qaraladi va **uzoq tartib darajasi** $\eta = 1$ bo‘ladi. Tabiiyki, to‘la tartibsizlik bilan to‘la tartiblanish orasida uzoq tartiblanish darajasi $\eta < 1$ bo‘lgan holat bo‘ladi. Uzoq tartiblanish darajasini xarakterlovchi formulani keltirib chiqaramiz. Tartiblanishning muayyan qiymatida **A** atomning α tip tugunda joylashgan ulushini p_A^α orqali belgilaymiz:

$$p_A^\alpha = N_A/N_\alpha, \quad (6.33)$$

bunda N_α - α tipdagi tugunlar soni, N_A - α tipdagi tugunlardagi **A** xil atomlar soni. **A** atomning β tugunda qolgan ulushi $1 - p_A^\alpha$ bo'ladi. **A** atomni o'ziga tegishli bo'lgan α tugunda uchratish ehtimoliyati butun kristalldagi tartiblanishni bir qiymatli aniqlaydi. To'la tartiblanganda bu ehtimoliyat birga teng bo'lsa, to'la tartibsizlikda u $1/2$ ga teng, chunki xuddi shu ehtimoliyat bilan u β tugunda ham bo'la oladi. **AB** eritma uchun 1:1 stexiometriya bo'lganda to'la tartibsizlikda 0, to'la tartiblanishda esa 1 bo'ladigan quyidagi tartiblanish parametridan ham foydalanish mumkin:

$$\eta = 2 p_A^\alpha - 1. \quad (6.34)$$

Agar stexiometriyaviy munosabat 1:1 bo'lmay, balki **A** va **B** atomlarning ixtiyoriy molyar qiymatlari $x_A : x_B$ ($x_A + x_B = 1$) munosabatni tashkil etsa, uzoq tartiblanish darajasi quyidagi formuladan foydalanilib topiladi:

$$\eta = \frac{p_A^\alpha - x_A}{1 - x_A}. \quad (6.35)$$

Ko'pincha uzoq tartiblanish darajasi quyidagi formuladan topiladi:

$$\eta = \frac{p_A^\alpha - x_A}{1 - \nu}, \quad (6.36)$$

bunda $\nu = N^\alpha/N$ - α tipdagi tugunlarning umumiy tugunlarga nisbatan ulushi. Tartiblanishning sodda nazariyasida sistemaning ichki energiyasi U uzoq tartiblanish darajasining η o'zgarishi bilan o'zgargani uchun ichki energiyaning tartiblanish darajasiga bog'liq bo'lmagan qismi qaralmaydi. Demak, ichki energiyaning atomlarning fazoda joylashuvi bilan bog'liq bo'lgan qismigina olib qaraladi. Ichki energiyaning bu qismi **konfiguratsiyaviy energiya** deyiladi. Binar **AB** eritmaning konfiguratsiyaviy energiyasini hisoblashda bir-birlariga eng yaqin joylashgan atomlarningina o'zaro ta'sirini hisobga olish bilan cheklanamiz. Kristalldagi eng yaqin atomlar (bog'lanishlar) juftliklarining sonini mos holda N_{AA} , N_{BB} va N_{AB} ko'rinishda belgilaymiz. Bu bog'lanishlar energiyasini esa mos holda U_{AA} , U_{VB} va U_{AB} deb olamiz. Shuningdek, bu energiyalarga boshqa atrofdagi atomlar ta'sir qilmaydi deb qaraymiz. U

holda kristallning to'la konfiguratsiyaviy energiyasi quyidagicha aniqlanadi:

$$E = N_{AA}U_{AA} + N_{BB}U_{BB} + N_{AB}U_{AB}. \quad (6.37)$$

Aytaylik, qarayotgan kristallda hammasi bo'lib N atomlar bo'lsin. Agar **A** xil atomlar soni n_A , **B** xil atomlar soni n_B bo'lsin. Har bir **A** xil atomning eng yaqin qo'shnilarining soni (koordinatsiyaviy soni) z bo'lsin. Mos holda barcha **A** atomlarning barcha yaqin **A** qo'shni atomlarining umumiy soni zn_A bo'ladi. Shunday qilib, o'zaro qo'shni **A** atomlar uchun 2 ta zn_A pozitsiya to'g'ri keladi. Ulardan N_{AB} ta pozitsiya **B** atomlar ulushini tashkil qiladi. Agar boshqa qo'shni **A** atomning ham eng yaqin qo'shni atomlari ham **A** atomlar bo'lgani uchun bu ikkinchi **A** atomning ham barcha qo'shnilarining soni birinchi **A** atomniki singari zn_{AB} bo'ladi. Chunki ikkinchi **A** atomning qo'shnisi birinchi **A** atom bo'ladi. Umuman, **A** xil atom uchun $zn_A = 2N_{AA} + N_{AB}$ munosabat bajari-ladi. Shu kabi mulahozalarga ko'ra, **B** xil atom uchun $zn_B = 2N_{BB} + N_{AB}$ munosabat o'rinli bo'ladi. (6.37) ifodadagi N_{AA} va N_{BB} miqdorlarni N_{AB} orqali ifodalaymiz va ularni (6.37) ifodaga qo'ysak, to'la konfiguratsiyaviy energiya uchun quyidagi tenglikni hosil qilamiz:

$$E = \frac{n_A z - N_{AB}}{2} U_{AA} + \frac{n_B z - N_{AB}}{2} U_{BB} + N_{AB} U_{AB} = \quad (6.38)$$

$$N_{AB} \left(U_{AB} - \frac{U_{AA} + U_{BB}}{2} \right) + \left(\frac{n_A z}{2} U_{AA} + \frac{n_B z}{2} U_{BB} \right).$$

So'nggi (6.38) ifodadan ko'rinib turibdiki, qotishma kristallidagi atomlarning o'zaro ta'sir energiyasi ikkita tashkil etuvchilardan iborat. Ikkinchi tashkil etuvchisi faqat **A** va **B** atomlarning soniga bog'liq bo'lib, ularning o'zaro joylashuviga bog'liq emas. Aksincha, tenglamaning birinchi hadi esa atomlarning joylashuviga bog'liq, chunki atomlarning panjarada taqsimlanishi N_{AB} songa kuchli ta'sir qiladi. E energiyani quyidagi ko'rinishda yozamiz:

$$E = E_0 + N_{AB} U_{tar.},$$

bunda E_0 bilan tenglamaning **A** va **B** atomlarning o'zaro ixtiyoriy joylashuvida ham o'zgarmas bo'lib qolaveradigan ikkinchi hadini belgi-

ladik, atomlarning o‘zaro joylashuviga bog‘liq qismini esa $U_{tar.}$ bilan belgiladik:

$$U_{tar.} = U_{AB} - \frac{U_{AA} + U_{BB}}{2}. \quad (6.39)$$

Oxirgi ifoda **tartiblanish energiyasi** yoki **siljish energiyasi** deyiladi Oxirgi (6.39) tenglamani tahlil qilamiz.

1. $U_{tar.} < 0$ bo‘lgan holni ko‘ramiz. Bu holda (6.39) ifodadan

$$U_{AB} < \frac{U_{AA} + U_{BB}}{2}$$

ekanligi kelib chiqadi. U_{AA} , U_{BB} va U_{AB} energiyalarning qiymatlari manfiy (noldan kichkina) bo‘lganligi uchun turli ismli atomlar orasidagi tortishuv energiyasi bir xil ismli atomlar orasidagi o‘rtacha tortishuv energiyasidan katta ekanligi kelib chiqadi. Bunda temperatura pasayishi bilan bir xil ismli atomlar orasidagi N_{AA} va N_{BB} korrelyatsiya kamayib boradi, turli ismli atomlarning panjarada joylashishidagi N_{AB} korrelyatsiya kuchayib boradi. Bu holda qattiq eritma atomlarida temperatura pasayishi bilan tartiblanish tendensiyasi kuzatiladi.

2. Faraz qilamiz $U_{tar.} > 0$. Bu holda (6.39) ifodaga ko‘ra,

$$U_{AB} > \frac{U_{AA} + U_{BB}}{2}$$

ekanligi kelib chiqadi, ya’ni turli ismli atomlarning o‘rtacha o‘zaro ta’sir energiyasi bir xil ismli atomlarning o‘rtacha o‘zaro ta’sir energiyasidan kichik. Bu qattiq eritmaning bir xil ismli atomlari orasidagi tortishuv kuchlari turli ismli atomlar orasidagi tortishish kuchlaridan katta bo‘lgan holga to‘g‘ri keladi. Temperatura pasayishi bilan N_{AB} bog‘lanish (korrelyatsiya) kamayib, N_{AA} va N_{BB} korrelyatsiya ortib boradi. Nihoyat termodinamikaviy muvozanatda qattiq eritmaning geterogen fazalarga parchalanishi yoki eritmaning tashkil etuvchilariga ajralib ketishi kuzatiladi.

3. $U_{tar.} = 0$ bo‘lgan hol. Bunda istalgan temperaturada atomlarning panjarada joylashuvida tartiblanish, hatto yaqin tartiblanish ham kuzatilmaydi. Bunday qattiq eritmalar **ideal qattiq eritmalar** deyiladi. Bunday shart elementar yacheykalari bir xil, atom radiuslari va fizikaviy-ximiyaviy xossalari bir-biriga yaqin bo‘lgan elementlarning qattiq eritmalarida bajariladi. Chunki, bunda $U_{AB} = U_{AA} = U_{BB}$ tenglik o‘rinli

bo‘ladi va tartiblanish energiyasi ham (6.39) ifodaga ko‘ra $U_{tar.} = 0$ bo‘ladi. Bu holda qattiq eritmaning siljish energiyasi ichki atomlarning qanday taqsimlanishiga butunlay bog‘liq bo‘lmaydi. Bunday ideal qattiq eritmalarga, masalan, NdPr kabi o‘rin almashuvchi qattiq eritmalar misol bo‘ladi.

Biror T temperaturadagi muvozanat holatiga to‘g‘ri keladigan uzoq tartib darajasi F erkin energiyadan uzoq tartib darajasi bo‘yicha olingan hosila nol bo‘lgan shartga to‘g‘ri keladi:

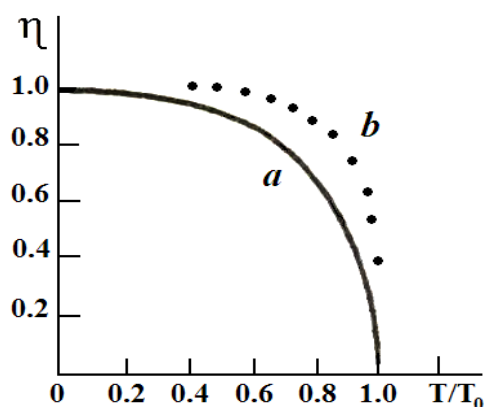
$$\frac{dF}{d\eta} = \frac{d(U - TS)}{d\eta} = 0.$$

Bu holda differensial tahlil qonunlariga ko‘ra, erkin energiya minimum qiymatga erishadi, fizika nuqtai nazardan esa sistema muvozanatda bo‘ladi

Qattiq eritma atomlarining tartiblanishi **kooperativ jarayon** hisoblanadi, ya‘ni tartiblanish atomlarning o‘zaro ta’sirlashuvi va birgalikdagi diffuziyaviy harakati asosida sodir bo‘ladi. Atomlarning issiqlik harakati tufayli eritmada ularning qancha ko‘p qismi begona tugunlarda bo‘lsa, (6.39) ifoda bilan aniqlanuvchi energiyalar orasidagi farq shuncha kam farq qiladi va qotishma atomlarining panjara tugunlarida tartibsiz joylashuv holatiga o‘tishi osonlashadi. Eritma uchun temperaturaning shunday bir kritik qiymati T_0 mavjud bo‘ladiki, bu temperaturada turli ismli atomlarning tugunlaridagi farq butunlay yo‘qoladi, ya‘ni atomlarning tugunlarda joylashuvida to‘la tartibsizlik kuzatiladi. Bu temperatura **tartibsizlik-tartiblanish o‘tish temperaturasi** deyiladi. Bu temperaturada uzoq tartiblanish darajasi $\eta = 0$ bo‘ladi.

Differensial tenglama qonunlariga ko‘ra biror funksiyaning (bizning masalada F erkin energiyaning) ikkinchi tartibli hosilasi musbat bo‘lganda u minimum qiymatga ega bo‘ladi. Bu shartlar bajarilganda sistemaning muvozanat holatiga to‘la tartibsizlik mos keladi. Bu shartga mos keluvchi temperatura **tartibsizlik – tartiblanish o‘tish temperaturasi** hisoblanadi. Haqiqatdan ham, tajribalar atomlari tartiblanuvchi sistemalarda tartibsizlik-tartiblanish o‘tish temperaturasi T_0 mavjud bo‘lib, bu temperaturalardan boshlab yuqori temperaturalarda uzoq tartiblanish darajasi nol bo‘lishini ko‘rsatadi. T_0 temperaturadan past temperaturada sistema atomlarining kristall panjara tugunlarida tartibli joylashuvi kuzatiladi va sverxstrukturalar hosil bo‘ladi. Uzoq tartib darajasi qancha katta bo‘lsa difraktogrammalardagi sverxstruktura maksimumlari intensivligi

shuncha kuchli bo‘ladi. Bregg-Vilyams nazariyasi asosida nazariy hisoblashlar orqali va neytronografiyaviy eksperimentdan rux (CuZn) o‘rin almashuvchi qattiq eritma uchun uzoq tartib darajasini aniqlash natijalari 6.12-rasmda keltirilgan. Ushbu rasmdan ko‘rinib turibdiki, uzoq tartib darajasining tajribada aniqlangan temperaturaga bog‘lanish grafigi Bregg-Vilyams nazariyasi bo‘yicha hisob natijasi bilan mos kelishi yomon emas. Shuni nazarda tutish lozimki, sistema temperaturasi T_0 o‘tish temperaturasidan quyi temperaturaga qarab siljib borishi bilan sistemaning tashkil etuvchilarining diffuziyaviy harakatchanligi kamayib

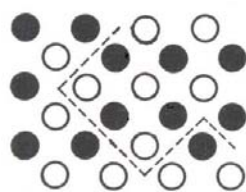


6.12-rasm. CuZn eritmasidagi uzoq tartib darajasining temperatura bo‘yicha o‘zgarishi. *a* – nazariya, *b*- tajriba natijalari.

boradi. Shu tufayli bu temperaturalarda uning termodinamik muvozanatiga to‘g‘ri keluvchi η uzoq tartib darajasiga erishuvi uchun uzoqroq vaqt zarur bo‘ladi. Sistemaning tashkil etuvchilarining diffuziyaviy harakatchanligi cheklangan yetarlicha past temperaturalarda esa umuman tartibsizlik-tartiblanish o‘tishi sodir bo‘lmaydi. Bunda sistema $T \geq T_0$ temperaturalardan keskin sovutilsa yuqori temperaturaga mos keluvchi strukturada metastabil holatda qoladi.

6.9. Yaqin tartib

Tartibsizlik-tartiblanish o‘tish temperaturasidan past temperaturalarda kristall atomlarining tartiblanishi birdaniga butun kristall bo‘ylab sodir bo‘lmaydi. Avval kristallda bir necha (2-3) panjara doimiysi atro-fida bir nechta ma‘lum bir uncha katta bo‘lmagan tartiblangan sohalar paydo bo‘ladi. So‘ngra ular asta-sekin kattalasha boshlaydi va butun kristallni egallaydi. Biroq shunda ham ma‘lum ma’noda butun kristall bo‘ylab uzoq tartib darajasi $\eta = 1$ deb ayta olmaymiz. 6.13-rasmda har bir tashkil etuvchisi 12 ta bo‘lgan **AB** tarkibli kristallning ikkita tartiblangan sohalari - antifazali domenlari ko‘rsatilgan. Har bir domenda to‘la



Uzoq tartib = 0

Yaqin tartib $\neq 0$

6.13-rasm. Ikkita antifazali domenlardan tashkil topgan kristall sxemasi.

tartiblanish kuzatiladi. Ammo shtrix chiziq bilan belgilangan antifazali domenlar chegarasida uzoq tartib darajasi $\eta=0$. Haqiqatdan ham 12 ta **A** atomdan 6 donasi tartib bilan to'g'ri pozitsiyalarda joylashgan. Xuddi shuningdek, **B** atom haqida butun kristallga tegishli bo'lib kristalldagi atomlar orasidagi ixtiyoriy katta masofani qamrab oladi. Shuning uchun Bete tomonidan uzoq tartiblanish tushunchasi bilan bir qatorda biror atomning yaqin atrofidagi bir necha (2-3) panjara doimiysiga teng bo'lgan masofaga (1-2 koordinatsiyaviy sferaga) tegishli bo'lgan **yaqin tartiblanish** tushunchasi ham kiritildi. Ammo bu cheklanish eng sodda hollarda o'rinli bo'lib, amalda esa yaqin tartiblanish bir muncha katta masofalarda ham kuzatilishi mumkin. Bir xil ismli va har xil ismli atomlar orasidagi o'zaro ta'sir energiyalari orasidagi farq shunday bo'lishi mumkinki, hatto kristall bo'yicha xech qanday uzoq tartiblanish bo'lmasa ham biror atom o'z yaqin atrofida boshqa toifa atom bilan qo'shni bo'lishi mumkin. Yaqin tartibni miqdor jihatdan xarakterlash uchun **yaqin tartib parametri** degan kattalik kiritilgan. Agar bir necha panjara doimiysi doirasidagi boshqa atomning o'rtacha ulushini q deb olsak, u vaqtda uzoq tartib darajasiga o'xshash holda yaqin tartib darajasi σ quyidagicha aniqlanadi:

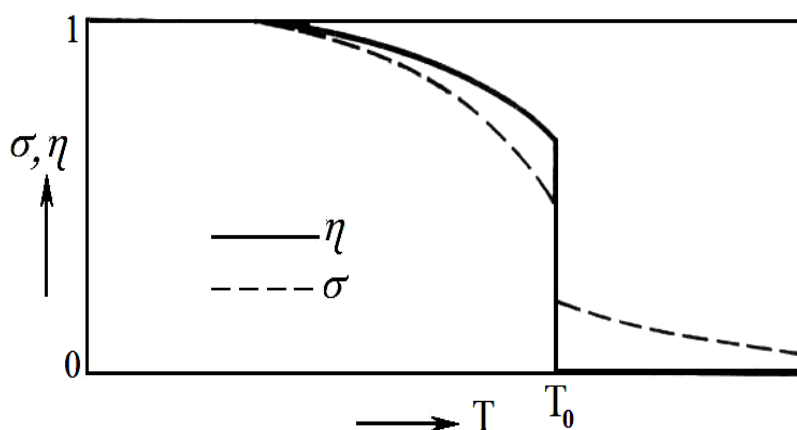
$$\sigma = 2q - 1. \quad (6.40)$$

Agar **A** toifa atom konsentratsiyasi $x_A \neq 0.5$ bo'lsa, bu formulani umumiyroq holda quyidagicha yozish mumkin:

$$\sigma = \frac{q - q_b}{q_t - q_b}, \quad (6.41)$$

bunda q_b - to'la tartiblanmagan holga, q_t - to'la tartiblangan holga tegishli. σ kattalik to'la tartibda birga teng. σ kattalikni temperaturaga bog'lanishini o'rganish shuni ko'rsatadiki, bu holda ham uzoq tartiblanishdagi kabi o'tish temperaturasi T_0 mavjud. 6.14-rasmda yaqin tartib darajasining temperaturaga bog'lanish grafigi keltirilgan. Temperatura

pasayishi bilan u kamayib borib, T_0 o'tish temperaturasi yaqin tartib parametri keskin kamayadi, biroq $T > T_0$ temperaturalarda ham nol bo'lmaydi, balki uncha katta bo'lmagan qandaydir chekli qiymatga ega bo'lib qoladi. 6.14 - rasmda taqqoslash uchun uzoq tartib darajasining temperaturaga bog'lanishi ham aks ettirilgan. Yaqin tartib parametridan farqli holda uzoq tartib darajasi T_0 o'tish temperaturasidan boshlab kes-



6.14-rasm. Uzoq tartib η va yaqin tartib σ darajasining temperaturaga bog'liqligi.

kin nol bo'lib qoladi. Demak, o'tish temperaturasidan yuqori temperaturalarda uzoq tartiblanish kuzatilmaydi, ammo yaqin tartib saqlanib qolishi mumkin.

Ko'pincha qandaydir i – koordinatsiyaviy sfera uchun yaqin tartib parametrining quyidagi Kauli taklif qilgan boshqacha ifodasi ishlatiladi:

$$\alpha_i = 1 - \frac{N_i^{AB}}{Nx_Ax_Bx_i} = 1 - \frac{p_i^{AB}}{x_B}, \quad (6.42)$$

bunda N_i^{AB} - bir-biridan r_i masofada joylashgan **A** va **B** atomlar juftlarining soni, N - atomlarning umumiy soni, x_A - , x_B - mos holda **A** va **B** ismli atomlar konsentratsiyasi, x_i - i - koordinatsiyaviy sferadagi panjara tugunlarining soni, $Nx_Ax_Bx_i$ - atomlar panjara tugunlarida to'la tartibsiz taqsimlanganda r_i masofadagi **A** va **B** atomlar juftlarining soni, p_i^{AB} - i - koordinatsiyaviy sferada **B** atomning **A** atom atrofida joylashish ehtimoliyati. To'la ehtimolyat haqidagi va N_i^{AB} kattalikning boshlang'ich atomning tanlanishiga bog'liq emaslik teoremlariga ko'ra (6.42) ifodadan quyidagi tenglamalarni hosil qilamiz:

$$\begin{aligned} p_i^{AB} &= x_B(1 - \alpha_i), & p_i^{AA} &= x_A + x_B\alpha_i, \\ p_i^{BA} &= x_A(1 - \alpha_i), & p_i^{BB} &= x_B + x_A\alpha_i. \end{aligned} \quad (6.43)$$

Bu ifodalardan kelib chiqadiki, agar birinchi koordinatsiyaviy sferada $\alpha_i < 0$ bo'lsa, yaqin qo'shni atomlar har xil ismli atomlar bo'ladi. Agar $\alpha_i > 0$ bo'lsa, yaqin qo'shnilar bir xil ismli atomlar bo'ladi. Birinchi holda sistema termodinamik muvozanatda (temperatura pasayishi bilan) uzoq tartiblanishga o'tishi mumkin. Ikkinchi holda temperatura pasayishi bilan sistema turli fazalarga (yoki tashkil etuvchi elementlar kristall panjara-lariga) parchalanib ketish tendensiyasi kuzatiladi. Ammo bu jarayonlar elementlarning diffuziyaviy harakatchanligi o'tish temperaturasida yetar-li bo'lmasa istalgan uzoq vaqt davomida ham poyoniga yetmasligi va yaqin tartiblanish saqlanib qolishi ham mumkin. α_i birinchidan keyingi koordinatsiyaviy sferalar atomlarining tartibli joylashuviga murakkab bog'lanishda bo'ladi.

Agar kristalldagi uzoq tartiblanish rentgenogrammalarda, elektronogrammalarda yoki neytronogrammalarda kuzatilgan difraksiyaviy mak-simumlarga qo'shimcha ravishda sverxstruktura maksimumlari hosil bo'lishiga sabab bo'lsa (6.11-rasm), yaqin tartiblanishda difraktogram-malarda ma'lum bir Vulf-Bregg burchaklari intervalida duffuz (tarqoq) maksimumlar kuzatiladi. Yaqin tartibni o'rganishda (6.42) ifoda bilan aniqlanuvchi yaqin tartib parametridan foydalanishning afzalligi shundan iboratki, bu kattalikni bevosita difraktogrammadagi diffuz maksimum intensivligi orqali aniqlash va u orqali i – koordinatsiyaviy sferadagi biror atomning boshqa ismli atomlar bilan o'zaro ta'sirlashish energiya-sini hisoblash, ma'lum bir yaqinlashish bilan sistemaning erkin energiya-sini aniqlash mumkin.

Savollar va masalalar

1. Qanday sistemalarga gomogen va geterogen sistemalar deyiladi?
2. Termodinamikaviy faza deb nimaga aytiladi?
3. Qanday sistema bir jinsli hisoblanadi?
4. Qanday termodinamikaviy holatlar haqiqiy muvozanatda yoki metastabil holatda deb hisoblanadi?
5. Termodinamikaviy sistemaning muvozanat shartlari qanday?
6. Moddaning termodinamikaviy holatining uchlanma nuqtasining fizikaviy interpretatsiyasini aytib bering.
7. Sistemaning erkinlik darajasi deb nimaga aytiladi va u qanday aniqlanadi?
8. Qanday sistemalar invariant, monovariant, bivariant, polivariant sistemalar deb ataladi?
9. Qotishmalarning holat diagrammasi nimani aks ettiradi?
10. Necha tur faza o'tishlari bor va ular qanday xarakteristikalar bilan farq qilinadi?
11. Qattiq holatdagi qanday faza o'zgarishlarini bilasiz?
12. Qattiq eritmalarining qanday turlarini bilasiz?
13. Qattiq eritmalarining tartiblanishining yoki fazalarga parchalanishining shartlari qanday?
14. Moddaning qattiq holatidagi fazaviy o'zgarishlari qanday turlarga bo'linadi?
15. Tartibsizlik – tartiblanish tipidagi faza o'tishi qanday o'tish?
16. Kristallardagi uzoq va yaqin tartiblar nima?
17. Uzoq tartiblanish darajasi qanday aniqlanadi? Yaqin tartiblanish darajasi-chi?
18. Ikki tarkibli qotishmada ko'pi bilan nechta faza muvozanatda bo'la oladi? Uch tarkibli qotishmadachi?
Javob: 4 ta va 5 ta.
19. Uchta va ikkita faza muvozanatda bo'lgan sistemaning ekinlik darajasini hisoblang.
Javob: 0 va 1.
20. Tartiblanmagan kristall strukturasi $Fm\bar{3}m$ fazoviy guruhga mansub bo'lgan $TiC_{0.60}$ titan karbidini $600\text{ }^{\circ}C$ temperaturada qizdirish natijasida uglerod atomlari oktaedr tugun oraliklarida tartiblanib $Fd\bar{3}m$ guruhga o'tdi. Bu fazoviy guruhda elementar yacheykadagi $32e$ pozitsiyadagi 32 ta titan atomlariga to'g'ri kelgan 19 ta uglerod atomlarining 76 foizi asosan $16c$ tipdagi oktaedrlarni band qilib, 24 foizi $16d$ oktaedrlarda

qoldi. Uzoq tartib darajasini hisoblang. Agar 16c pozitsiya uglerod atomlari bilan to'la band bo'lganda maksimal uzoq tartib darajasi qancha bo'lgan bo'lar edi?

Javob: $\eta = 0.61$; $\eta_{\text{maks.}} = 0.80$.

VII BOB. KRISTALLARDAGI ELEKTRONLARNING ENERGIYA ZONALARI

7.1. Yakkalangan vodorodsimon atomdagi elektronning energiya sathlari

Juda ko'p (1 sm^3 hajmda $10^{23} - 10^{24}$ ta) atomlardan tashkil topgan kristallarning atomlaridan ham ko'p bo'lgan holda o'zaro va atom yadrolari bilan ta'sirlashuvchi elektronlarning harakat qonuniyatlarini o'rganish oddiy masala emas. Kristallardagi ko'p jism masalasini ko'rishdan oldin alohida olingan (yakkalangan) atomdagi elektronlarning energiya sathlari bilan tanishib chiqish maqsadga muvofiq bo'ladi. Hozirgi kungacha ko'plab tajriba natijalari bilan tasdiqlangan atomlar tuzilishining kvant nazariyasiga ko'ra, istalgan ximiyaviy element atomi tarkibidagi elektronlar ham barcha kvant zarralari kabi dualistik (ham zarra ham to'liq) xossasiga ega. Ularning atom tarkibidagi statsionar (vaqtga bog'liq bo'lmagan turg'un) holatlarini o'rganish uchun Shredingerning vaqtga bog'liq bo'lmagan empirik differentsial tenglamasidan foydalaniladi. Bu tenglamaning yechimini ko'p elektronli atom uchun topish murakkab masala bo'lib, turli yaqinlashishlar qilib hal qilinadi. Ammo bu tenglamaning yechimi vodorodsimon ion yoki vodorod atomi (bir elektronli atomlar) uchun oson topiladi. **Vodorodsimon atom** deganda valent elektronidan boshqa barcha ichki qavatdagi elektronlari yadro bilan qo'zg'almas o'zak hosil qilgan atom tushuniladi. Kvant nazariyasiga ko'ra, vodorodsimon atomning yagona elektronining statsionar holati uchun Shredinger tenglamasi quyidagi ko'rinishda bo'ladi:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m_e}{h^2} [E - U(x, y, z)] \Psi = 0, \quad (7.1)$$

bunda h – Plank doimiysi, m_e – elektron massasi, E – elektronning to'la (**kinetik va potensial**) energiyasi, $U(x, y, z)$ – **elektronning potensial** energiyasi, Ψ (psi) - **elektronning to'liq funksiyasi** bo'lib, kompleks kattalikdir. Vaholanki, elektronning atomdagi statsionar holatlari qarayotgan ekan, (7.1) tenglamaning yechimi elektronning $\vec{k}$ -to'liq soni va $\vec{r}$ radius vektoriga bog'liq bo'lgan yassi to'liq funksiyasi bo'ladi

$$\Psi = \Psi_0 e^{i\vec{k}\vec{r}}. \quad (7.2)$$

Bu funksiyadan qarayotgan hajm bo'yicha olingan integrali elektron

ning (yoki qavat zarrasining) ushbu hajmda mavjud bo'lish ehtimolini beradi. Vaholanki, qaralayotgan elektronning berilgan atom hajmida mavjudligi muqarrar ekan, Ψ funksiya uchun quyidagi **normallash sharti** bajariladi:

$$\int_V |\Psi(x, y, z)|^2 dx dy dz = 1,$$

ya'ni qaralayotgan hajmda elektronning bo'lish ehtimoli birga teng bo'ladi. (7.1) Shredinger tenglamasining bu shartni qanoatlantiruvchi yechimi **normallashgan xususiy to'liq funksiya** deyiladi. Normallash shartidan Ψ to'liq funksiyasining o'lchamliligi $L^{-3/2}$ ekanligi kelib chiqadi, bunda L – uzunlik o'lchamliligi. Elektronni kichik ΔV hajmda topish ehtimolini quyidagicha yozish mumkin:

$$|\Psi(x, y, z)|^2 \Delta V \leq 1.$$

So'nggi tengsizlikdan kelib chiqadiki, $|\Psi(x, y, z)|^2$ ifoda ehtimoliyatning hajmiy zichligini, ya'ni elektronning (zarraning) birlik hajmda topish ehtimolini ifodalaydi. Agar elektron zaryadini e bilan belgilasak, $e|\Psi|^2$ ifoda elektronning qaralayotgan fazodagi zichligini aniqlaydi. Vodorodsimon atomning elektroni markazlashgan simmetrik maydonning ta'sirida bo'ladi, ya'ni elektronning potensial energiyasi faqat yadroning markazigacha bo'lgan r masofaning funksiyasidir:

$$U(r) = - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (7.3)$$

bunda ϵ_0 – elektr doimiysi, Z – yadroning (ionning) zaryadi. Bu holda Shredinger tenglamasining yechimini Dekart (x, y, z) koordinatalar sistemasida emas, balki sferik koordinatalar sistemasidan foydalanib izlash qulay bo'ladi. Shuning uchun quyidagi Dekart koordinatalar sistemasidan sferik koordinatalar sistemasiga o'tish uchun quyidagi almashtirishlarni bajaramiz:

$$x = r \cdot \sin \vartheta \cdot \cos \varphi, y = r \cdot \sin \vartheta \cdot \sin \varphi, z = r \cdot \cos \vartheta, \quad (7.4)$$

bunda ϑ - va φ -mos holda zenit va azimutal burchaklar. (7.1) tenglamaga (7.4) almashtirishlarni qo'ysak, vodorodsimon atom elektronining

harakati uchun Shredinger tenglamasining sferik koordinatalar sistemasidagi ifodasini olamiz:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \Psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \Psi = 0. \quad (7.5)$$

Endi oxirgi tenglamaning yechimi koordinatalarga bog‘liq bo‘lgan radial $R(r)$ va burchaklarga bog‘liq bo‘lgan $Y(\vartheta, \varphi)$ burchak funksiyalarining ko‘paytmasi ko‘rinishida izlanadi:

$$\Psi(r) = \Psi(x, y, z) \rightarrow \Psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) \cdot Y(\vartheta, \varphi). \quad (7.6)$$

Ushbu yechimni (7.5) tenglamaga qo‘yib, quyidagi tenglamani hosil qilamiz:

$$\left\{ \left[\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{8\pi^2 m_e r^2}{h^2} \left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \right] + \left[\frac{1}{Y \sin \vartheta} \times \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial Y}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{Y \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} \right] \right\} = 0. \quad (7.7)$$

Oxirgi tenglama kvadrat qavsga olingan ikki qismdan iborat. Birinchisi faqat o‘zgaruvchi r ga, ya’ni elektrondan yadro markazigacha bo‘lgan masofaga bog‘liq. Ikkinchisi esa faqat ϑ va φ burchaklarga bog‘liq. Ikki qismdan iborat bo‘lgan (7.7) tenglama nolga teng bo‘lishi uchun uning har bir qismi qarama-qarshi ishoraga ega bo‘lgan aynan bir xil doimiy kattalikka teng bo‘lishi kerak. Aytaylik bu kattalik λ bo‘lsin. U holda (7.7) tenglamani ikki mustaqil tenglamaga ajratish mumkin:

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{8\pi^2 m_e r^2}{h^2} \left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = \lambda, \quad (7.8)$$

$$\frac{1}{Y \sin \vartheta} \times \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial Y}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{Y \sin^2 \vartheta} \times \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} = -\lambda. \quad (7.9)$$

Differensial tenglamalar nazariyasiga ko‘ra, (7.8) va (7.9) tenglamalar ularning tarkibiga kiruvchi E va λ kattaliklarning ma’lum bir aniq qiymatlaridagina chekli, bir qiymatli, uzluksiz yechimlarga ega bo‘ladi. Elektronning to‘la energiyasi E va potensial energiyasi $U(r)$ faqat (7.8) radial tenglama tarkibiga kiradi. Bu tenglamani yechib, vodorodsimon yoki vodorod atomidagi elektronning ega bo‘lishi mumkin bo‘lgan

energiyalarini topish mumkin. Bunday tenglamani esa faqat undagi potensial energiya $U(r)$ oshkor ko‘rinishda va markazlashgan simmetrik maydon uchun (7.3) ko‘rinishida bo‘lsagina yechish mumkin. $U(r)$ funksiyaning markazlashgan simmetrik bo‘lmagan boshqa oshkor ko‘rinishlarida (vodorodsimon bo‘lmagan atomlar uchun) Shredinger tenglamasini analitik usullar bilan yechib bo‘lmaydi. Bunday hollarda tenglamani yechish turlicha yondoshuvlar orqali taqribiy yo‘llar bilan hal qilinadi. (7.8) tenglama to‘la E energiyaning faqat quyidagi shartlarni bajaruvchi qiymatlaridagina yechimga ega bo‘ladi:

1) $E > 0$ bo‘lganda, ya’ni E ning istalgan uzluksiz musbat qiymatlarida;

2) E ning faqat quyidagi uzlukli (diskret) manfiy qiymatlarida:

$$E_n = -\frac{m_e e^4 Z^2}{8h^2 \varepsilon_0^2 n^2}, \quad (7.10)$$

bunda ε_0 – elektr doimiysi, n – butun musbat sonlar ($n = 1, 2, 3, 4, \dots$) bo‘lib, **bosh kvant soni** deb ataladi. n ning har bir qiymatlariga mos keluvchi holatlar **elektron qobiqlari** (bazan **qatlamlari**) deb ataladi va $n = 1, 2, 3, 4, \dots$ qiymatlarga mos keluvchi qobiqlar mos holda tartib bilan $K, L, M, N, \dots$ bosh harflar bilan belgilanadi. $E > 0$ bo‘lgan hol Ze miqdordagi elektr zaryadiga ega bo‘lgan yadro maydoni yaqinidan o‘tib undan uzoqlashib ketayotgan erkin elektron harakatining energiyalariga mos keladi. $n = 1$ bo‘lgan $E_1 = E_{\min.}$ energiyaga mos keluvchi elektron holati sistemaning asosiy yoki normal holati hisoblanadi. $E_{maks.} = 0$ bo‘lgan hol vodorodsimon atomning ionizatsiyasiga (elektronning atomdan uzib olinishiga) mos keladi. Ionizatsiya energiyasining son miqdori elektronning atomdagi bog‘lanish energiyasiga teng bo‘lgan kattalikdir. Yechimning (7.10) ifoda bilan aniqlanuvchi manfiy ($E_n < 0$) qiymatlari elektronning atom ichida uning yadrosi bilan mumkin bo‘lgan bog‘lanish energiyasining qiymatlaridir. (7.10) yechim ifodasidan ko‘rinib turibdiki, u kvantlangan, ya’ni n ga bog‘liq holda uzlukli qiymatlargina qabul qila oladi.

Differensial tenglamalar nazariyasiga ko‘ra (7.9) tenglamaning yechimi l - tartibli shar funksiya bo‘lib, bunda λ ketma-ket ikkita musbat sonlarning ko‘paytmasiga teng bo‘lishi kerak: $\lambda = l(l+1)$. Bunda l quyidagi butun sonlar qatorini qabul qila oladi:

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots, (n-1),$$

ya'ni berilgan n uchun jami n ta qiymatga ega bo'ladi.

l soni **orbital kvant soni** deyilib, u radial tenglama tarkibiga ham kiradi. Shuning uchun (7.8) tenglamaning (7.10) yechimini E_{nl} ko'rinishda yozish to'g'ri bo'ladi. Orbital kvant soni l elektronning harakat miqdorining orbital momenti $\vec{p}_l$ ni xarakterlaydi:

$$p_l = \frac{h}{2\pi} \sqrt{l(l+1)}. \quad (11)$$

(7.9) tenglamaning yechimi bo'lgan l -tartibli shar funksiyasiga $m_l = (2l+1)$ ta bir-biriga bog'liq bo'lmagan chiziqli funksiyalar to'g'ri keladi. Demak, $Y(\vartheta, \varphi)$ yechimni l va m_l butun sonlar belgilaydi: $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$. m_l tegishli orbital kvant soni l uchun quyidagi diskret sonlar qatorini qabul qila oladi: $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l$, ya'ni berilgan l uchun jami $(2l+1)$ ta qiymat qabul qiladi.

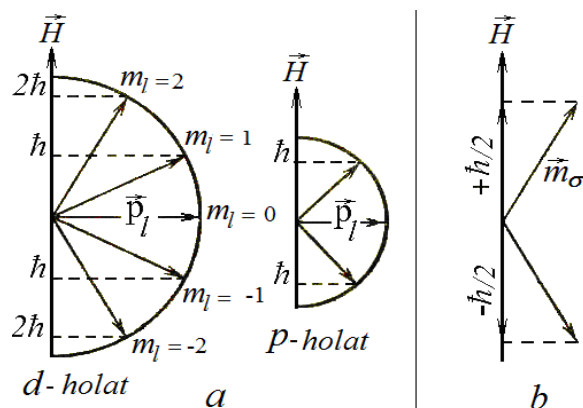
m_l **magnit kvant soni** deyilib, uning fizikaviy ma'nosi shundaki, u elektron harakati miqdorining orbital momenti $\vec{p}_l$ ning biror tanlangan yo'nalishga proyeksiyasini aniqlaydi. Gap shundaki, $\vec{p}_l$ vektor kattalik biror tashqi $\vec{H}$ magnit maydoni yo'nalishiga nisbatan turlicha oriyentatsiyada bo'lishi mumkin bo'lib, uning bu yo'nalishga proyeksiyasi ixtiyoriy kattalik bo'lmay, balki kvantlangan bo'lib $h/2\pi$ miqdorga karrali bo'ladi:

$$p_{lH} = m_l \frac{h}{2\pi} = m_l \hbar.$$

7.1-a rasmda $\vec{p}_l$ vektorning mumkin bo'lgan oriyentatsiyalari elektronning p - va d -holatlari uchun, ya'ni $l=1$ va $l=2$ bo'lgan hollar uchun tasvirlangan. Nihoyat elektronning holati yana bir **spin soni** (m_σ) deb ataluvchi kvant soni bilan ham xarakterlanadi. Spin soni Shredinger tenglamasiga oshkor holda kirmaydi. Biroq u (x, y, z) koordinatalar yoki (r, ϑ, φ) kattaliklar singari ψ to'liq funksiyasining argumentidir. **Spin** elektronning xususiy harakat miqdorining tanlangan $\vec{H}$ yo'nalishga nisbatan oriyentatsiyasini belgilaydi (7.1,b rasm). Elektronning xususiy harakat miqdorining tanlangan $\vec{H}$ yo'nalishga nisbatan proyeksiyasi quyidagicha aniqlanadi:

$$m_{\sigma H} = \sigma \cdot \hbar,$$

bunda σ **elektron spini** deyiladi. U faqat ikkita qiymat qabul qila oladi:



7.1-rasm. m_l magnit kvant sonining d - va p -elektronlar uchun tasviri (a) va elektronning qarama-qarshi ishorali spin sonlari (b).

$1/2$ va $-1/2$. Elektronlar ham protonlar, neytronlar kabi elementar zarralardek **Pauli prinsipiga** bo'ysinadi: istalgan kvant sistemada 4 ta kvant sonlari to'plami bilan aniqlanadigan elektronning bitta turg'un holatida bir xil spinli ikkita elektron bo'lishi mumkin emas. Lekin ikkita qarama-qarshi spinli elektron bo'lishi mumkin.

Shunday qilib, elektronning har bir energetik holati quyidagi 4 ta kvant sonlari bilan xarakterlanar ekan: n , l , m va σ . Bu kvant sonlari diskret aniq muayyan qiymatlargina qabul qilganligi uchun elektronning atomdagi energiyaviy spektri ham diskret bo'ladi. Bu spektr energiya-ning taqiqlangan qiymatlari sohalari bilan ajralgan qator ruxsat etilgan $E(n, l)$ energiya sathlaridan iborat bo'ladi. Elektronning $n=0$ holatidan tashqari har bir bosh kvant soni n ga to'g'ri keladigan E_n energiyasiga l va m_l kvant sonlari bilan farq qiladigan bir nechta holatlar (to'liq funktsiya Ψ_{nlm_l}) to'g'ri kelar ekan. Buning ma'nosi shuki, vodorodsimon atomdagi elektron aynan bir xil energiyaga ega bo'lgan bir nechta holatlarda bo'la olar ekan. Bu holatlar, ya'ni bir xil energiyaga ega bo'lgan bir nechta holatlar **aynigan holatlar** deb ataladi. Muayyan bosh kvant soni n ga to'g'ri keladigan aynigan holatlar soni esa **aynish karraligi** deb ataladi. Yuqorida ko'rsatib o'ttikki, l kvant sonining n ta qiymatining har biriga m kvant sonining $(2l + 1)$ ta qiymati to'g'ri keladi. Shuning uchun n bosh kvant sonining muayyan bir qiymatiga to'g'ri keladigan **aynigan (turli) holatlar soni** quyidagicha topiladi:

$$g = \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2. \quad (7.12)$$

Demak, vodorodsimon atomdagi elektronning har bir energiyaviy sathi n^2 karrali aynishga, ya'ni n^2 karrali holatga ega. Atomdagi muayyan bosh

kvant soni n va unga mos keluvchi l orbital kvant soni bilan aniqlanuvchi holatlardagi elektronlarning maksimal soni

$$z(n, l) = 2(2l+1) \quad (7.13)$$

bo'ladi. Ammo bu elektronlar magnit kvant soni m_l va spinining orientatsiyasi bilan farq qiladi. Orbital kvant soni l atomlardagi va molekullardagi elektronlar holatlarini sistematikasi uchun foydalaniladi. l ning turli qiymatlari uchun quyidagi belgilashlar qabul qilingan: $l = 0$ bo'lsa s -holat (s -sharp-keskin so'zidan), $l = 1$ bo'lsa p -holat (p -principal – bosh so'zidan), $l = 2$ bo'lsa d – holat (d -diffuse –tarqoq so'zidan), $l = 3$ bo'lsa f –holat (f - fundamental-asosiy so'zidan) deb belgilanib, shu tariqa lotin alfaviti tartibida davom etadi. Bu holatlardagi elektronlar mos holda **s -, p -, d -, f - va hakoza elektronlar** deb ataladi.

Istalgan bosh kvant soni n ga to'g'ri kelgan **s – holat aynimagan**, ya'ni ularga (7.12) tenglamaga ko'ra, elektronning birgina holati to'g'ri keladi. Pauli prinsipiga ko'ra, bu holatda bir xil spinli birgina elektron bo'la oladi. Qarama-qarshi ($\pm 1/2$) spinlarga ega bo'lishsa, ikki dona elektron bo'lishi mumkin. **p -sathlar ($l=1$) 3 karrali aynigan** bo'lib (7.13 formulaga qarang) ularning har biriga bir-birlaridan m_l magnit kvant soni bilan farq qiluvchi 3 ta holat to'g'ri keladi. Ushbu $l=1$ sathda m_l quyidagi 3 ta qiymat olishi mumkin: $m_l : -1, 0, +1$. Bu sathda har bir holatda qarama-qarshi spinli 2 tadan jami 6 ta elektron bo'lishi mumkin.

$l = 2$ bo'lgan **d – holat 5 karrali aynishga ega bo'lib**, m_l magnit kvant soni 5 ta qiymatga ega bo'ladi: $m_l : -2, -1, 0, +1, +2$. Ushbu sathda maksimum 10 elektron bo'lishi mumkin va hakoza. Bosh kvant sonining ortishi tartibida elektron sathlar va u sathlarda joylashishi mumkin bo'lgan elektronlar soni quyidagicha belgilanadi:

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 \dots,$$

bunda sath ifodalarining oldida turgan raqam n –bosh kvant soni, o'ng tomonining tepasida turgan son tegishli sathda joylashishi mumkin bo'lgan elektronlar soni. Vodorod atomida elektron bu sathlardan birida bo'lishi mumkin. Asosiy holatda elektron eng kichik energiyali $1s^1$ – holatda bo'ladi. Yuqori energiyali sathlar bo'sh bo'ladi. Shu bilan birga bir xil bosh kvant soni n , turli orbital kvant soni l ga ega bo'lgan sathlar (ya'ni aynigan sathlar) energiyalari bo'yicha quyidagi tengsizliklar qatori o'rinli bo'ladi:

$$1s^2 < 2s^2 = 2p^6 < 3s^2 = 3p^6 = 3d^{10} < 4s^2 = 4p^6 = 4d^{10} = 4f^{14} < 5s^2 = 5p^6 \dots$$

Atom g'alayonlanganda (tashqaridan energiya olganda) elektron bu sathlarning birortasiga o'tishi mumkin yoki atomning (yadroning) ta'sir doirasidan butunlay chiqib ketishi mumkin. 7.2-rasmda $n=3$ gacha bo'lgan energiyaviy sathlarning joylashuvi erkin masshtabda tasvirlangan. Yakkalangan atomni kuchli tashqi maydonga joylashtirilsa energiyaviy sathlarning aynishi zaiflashadi.

n	m_l
$3d$	+
	+
	0
	-
	-
$3p$	+
	0
	-
$3s$	0
$2p$	+
	0
	-
$2s$	0
$1s$	0

7.2-rasm. $n = 3$ gacha bo'lgan energiyaviy sathlarning joylashuv sxemasi.

Ularning har biri $(2l+1)$ ta yaqin joylashgan sathlarga ajraladi. Bunda yadro bilan kuchli ta'sirlashuvchi ichki elektron sathlari shunchalik zaif ayniydiki, buni hisobga olmasa ham bo'ladi. Elektron yadrodan qanchalik uzoq joylashsa, uning yadro bilan ta'sirlashuvi shuncha kuchsiz va tashqi maydonda aynigan sathlarga bo'linishi shuncha kuchli bo'ladi.

7.2. Elektron zichligininng yakkalangan vodorod atomining turli holatlari uchun taqsimlanishi

Yuqorida aytilganlardan kelib chiqadiki, kvant mexanikasida Bor nazariyasiga ko'ra, elektronning yadro atrofida turg'un orbitalar bo'yicha harakati ma'noga ega emas. Turg'un orbitalar o'rniga elektronning yadro atrofidagi fazoda mavjud bo'lish ehtimoliyatining zichligi haqida gapirish kerak bo'ladi. Shu ma'noda turg'un orbita tushunchasi kvant mexanikasida turg'un holatlar 4 ta kvant sonlari bilan xarakterlanuvchi $\Psi_{n/m\sigma}(r, \vartheta, \varphi, \sigma)$ to'liq funksiyasi bilan almashtiriladi. (7.6) formulaga ko'ra, bu funksiya radial va burchakli qismlardan iborat. Uning radial qismi $R(r)$ faqat n va l kvant sonlariga bog'liq bo'lib, elektronning tayinli holatidagi energiyasini aniqlaydi. To'liq funksiyaning burchakka bog'liq qismi $Y(\vartheta, \varphi)$ esa l va m_l kvant sonlariga bog'liq bo'lib, turli

elektron holatlarining geometrik shaklini belgilaydi. Bu aytganlarga ko'ra, (7.6) formulani quyidagicha yozish mumkin:

$$\begin{aligned}\Psi_{nlm_l}(x, y, z) &= R_{nl}(r) \cdot Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi) \quad \text{yoki} \\ \Psi_{nlm_l}(x, y, z) &= R_{nl}(r) \cdot Y_{lm_l}(\vartheta) \cdot F_{m_l}(\varphi).\end{aligned}\quad (7.14)$$

Ψ qo'shma funksiya bo'lganligi uchun r, ϑ, φ koordinatalarga va n, l, m_l qiymatlarga ega bo'lgan va r, ϑ, φ koordinatali nuqta atrofidagi $dv = r^2 dr \cdot \sin \vartheta \cdot d\vartheta \cdot d\varphi$ elementar hajmda elektronning joylashuv ehtimoliyati quyidagicha aniqlanadi:

$$w_{nlm_l}^2(r, \vartheta, \varphi) dv = \Psi_{nlm_l} \cdot \Psi_{nlm_l}^* dv = R_{nl}^2(r) Y_{lm_l}^2(\vartheta) dv. \quad (7.15)$$

Bunda $F_{m_l}(\varphi) F_{m_l}^*(\varphi) = 1$ bo'lganligi uchun (7.15) ifoda burchak φ ga bog'liq bo'lmaydi. Elektron zichligining taqsimoti Z o'qi atrofida aylanayotgan jism simmetriyasiga ega bo'lib, bu o'qqa nisbatan harakat miqdori momentining proyeksiyasi kvantlangan bo'ladi.

(7.15) ifodani r bo'yicha 0 dan ∞ gacha integrallab, elektronning $d\Omega$ fazoviy burchak oralig'ida bo'lish ehtimolini olamiz:

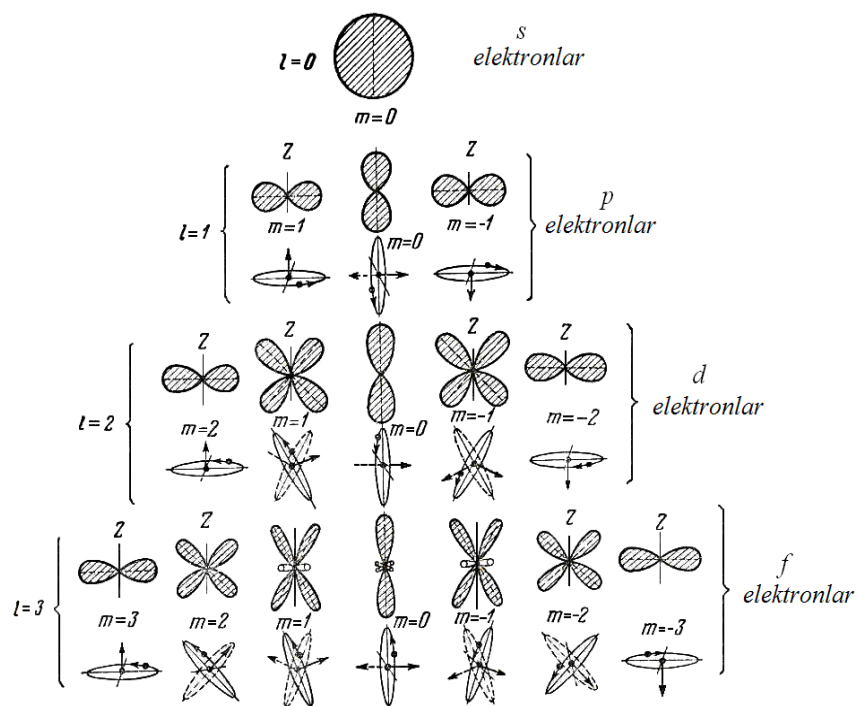
$$w_{lm_l}(\vartheta) d\Omega = Y_{lm_l}(\vartheta) \cdot \sin \vartheta \cdot d\vartheta \cdot d\varphi. \quad (7.16)$$

7.3 - rasmda turli l va m_l kvant holatlari uchun vodorod yadrosi atrofida elektron zichligining taqsimlanishi aks ettirilgan. Elektronning radius vektorlari w_{lm_l} ehtimoliyatning mos qiymatlariga proporsional bo'ladi. Bu grafiklar atomdagi elektronning s -holati sferik simmetriyaga ega ekanligini ko'rsatadi. p, d, f va boshqa holatlarning elektron zichligi konsentrat-siyalarining ayrim yo'nalishlar va tekisliklar bo'yicha yaqqol namoyon bo'lishi bilan xarakterlanadi. 7.3-rasmda taqqoslash uchun Bor nazariyasi bo'yicha aniqlanadigan elektron orbitalarining trayektoriyalari ham berilgan. Elektron zichligining maksimumi Bor orbitalari yo'nalishlariga to'g'ri kelishligi e'tiborni jalb qiladi. (7.15) ifodani to'la burchak bo'yicha interallab elektronning r var $+dr$ radiuslar oralig'idagi qatlamda bo'lish ehtimolini olamiz:

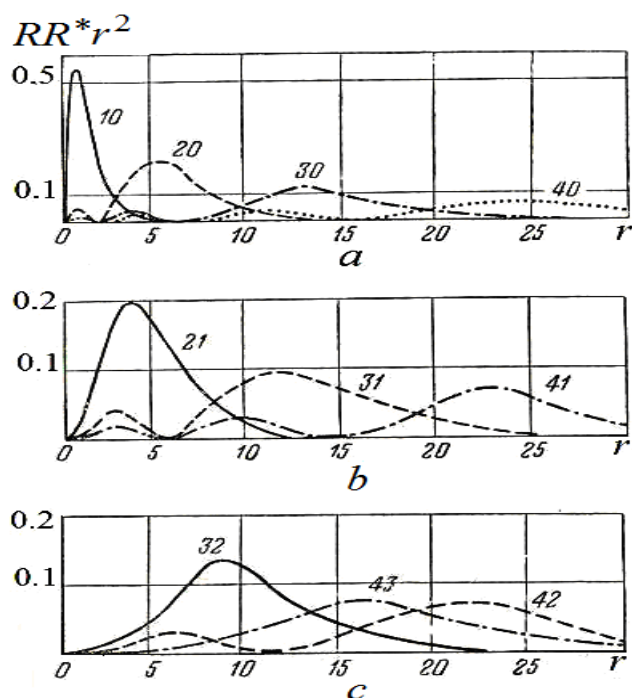
$$w_{nl}(r) dr = R_{nl}^2(r) r^2 dr.$$

7.4 – rasmda bu ehtimoliyat turli l va m_l kvant sonlari uchun keltirilgan.

Bir muncha yuqori kvant holatlari uchun elektron zichligining konsentrik o'zgarishi kuzatiladi.



7.3-rasm. Vodorod atomida turli l va m kvant sonlari uchun elektron zichligining burchak bo'yicha taqsimlanishi.



7.4-rasm. Vodorod atomida l va m_l kvant sonlarining turli qiymatlari uchun elektron zichligining radial taqsimlanishi:
 a – s -holat ($l=0$), b – p -holat ($l=1$), c – d – holat ($l=2$) va $4f$ - holat ($l=3$).

7.3. Kristallardagi elektronlarning energiyaviy zonalari nazariyasining asosiy prinsiplari

Ma'lumki, metallardagi erkin elektronlar haqidagi tasavvurlar metallarning elektr va magnit xossalarini yaxshi tushuntira oladi. Ammo qattiq jismlarning yana shunday xossalari borki, ularni erkin elektronlar nazariyasi bilan aslo tushuntirib bo'lmaydi. Masalan, nima uchun ayrim kristallar yaxshi o'tkazgich bo'ladi-yu boshqa biri esa yarimo'tkazgich yoki izolyator bo'ladi? Nima uchun o'tkazgichlar bilan yarimo'tkazgichlarning qarshiliklari temperaturaga turlicha bog'lanishda bo'ladi? Yarimo'tkazgichlardagi elektron va tirqish o'tkazuvchanlikni qanday tushuntirish mumkin? Past temperaturadagi o'tao'tkazuvchanlik hodisasiga sabab nima? Kristallarning xossalarini tushuntirish uchun uni tashkil etgan barcha zarralarining (yadrolarning va elektronlarning) o'zaro ta'sirlashuv tabiatini bilish kerak deb o'ylash tabiiydir. Ammo bu masala yuqorida aytib o'tganimizdek, ko'p jism masalasi bo'lib, uning aniq yechimini topish amalda mumkin emas. Bu o'zgaruvchilarining soni sistemani tashkil etgan zarralarning barcha erkinlik darajalarining yig'indisiga teng bo'lgan Shredingerning differensial tenglamasining yechimini topish bo'lib, matematika nuqtai nazardan o'ta murakkab masala ekanligini tasavvur qilish qiyin emas. Masala yana shu bilan murakkablashadiki, bunda har bitta elektron faqat yadrolar bilangina emas, balki boshqa elektronlar bilan ham ta'sirlashadi. Bundan tashqari elektronning yadro bilan ta'sirlashuvi boshqa elektronlar tomonidan ekranlanadi. Ammo quyidagi uch postulatdan foydalanib, Shredinger tenglamasini kristall panjarasidagi davriy potensial maydonida harakatlanaётgan elektronlar sistemasi uchun tatbiq qilishimiz mumkin. Bu postulatlar kristallardagi elektronlar harakatining eng muhim xususiyatlarini hisobga olishga asoslangan bo'lib, ular quyidagilardir.

1. Kristalldagi elektronlar harakatini o'rganishda atom yadrolarining massasi elektronlar massasiga qaraganda juda katta bo'lganligi uchun ularning elektronlarga ta'sir qiluvchi kuch maydonlarining qo'zg'almas manbalari deb qarash kerak. Elektronlarning harakati yadrolarning inertligi tufayli ularni harakatga keltira olmaydi va yadrolarning kinetik energiyasi nol deb qaraladi. Demak, kristall panjaradagi yadrolarning radius-vektorlari, ya'ni panjara tugunlarining koordinatalari o'zgarmas kattaliklar deb qaraladi. Yadrolarning o'zaro ta'sirlashish potensial energiyasi ham o'zgarmas deb qaraladi. Bunday qarash **adiabatik yaqinlashish yoki Born-Oppengeymer yaqinlashishi** deyiladi.

2. Kristalldagi atomlar yadrolari kristall panjaraning tugunlarida qat'iy ravishda davriy joylashgan. Bunda kristallning davriy potensial energiyasi $U(\vec{r})$ quyidagi tenglikni qanoatlantirishi kerak:

$$U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{n}), \quad (7.17)$$

bunda $\vec{r}$ – elektronning radius-vektori, $\vec{n}$ – kristall panjaraning translyatsiyasi vektori:

$$\vec{n} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c},$$

bunda n_1 -, n_2 -, va n_3 - bir biriga bog'liq bo'lmagan butun sonlar, $\vec{a}$ -, $\vec{b}$ -, $\vec{c}$ - x , y , z o'qlar bo'yicha panjara doimiylari. (6.17) tenglamaga ko'ra, kristall panjaraning potensial energiyasi davri panjara doimiysiga teng bo'lgan davriy kattalik ekan. Bu postulat **davriy potensial yaqinlashish** deyiladi.

3. Elektronlarning o'zaro va atom yadrolari bilan ta'sirlashuvi qandaydir effektiv tashqi maydon bilan almashtiriladi, ya'ni qandaydir berilgan maydonda harakatlanayotgan bir-birlariga bog'liq bo'lmagan elektronlar sistemasi bor deb qaraladi. Shu tariqa ko'p elektronli sistema uchun tuziladigan Shredinger tenglamasi bir elektronli tenglamalar sistemasi bilan almashtiriladi. Aniqroq aytadigan bo'lsak, kristalldagi elektronlarning va yadrolarning o'zaro ta'sirlashuv potensial energiyasi

$$U_{el-yad} = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} k \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

quyidagi ko'rinishdagi qandaydir effektiv maydonda harakat qilayotgan mustaqil i – elektronning potensial energiyasi $\bar{U}_i$ bilan almashtiriladi:

$$U_{el-yad} \rightarrow \sum_i \bar{U}_i(r_i) . \quad (7.18)$$

Keyin esa elektronlarning yadrolar bilan ta'sirlashish potensial energiyasi va elektronlarning o'zaro ta'sirlashish energiyalari kristallning qandaydir berilgan yagona $U(\vec{r})$ potensial energiyasi bilan almashtiriladi:

$U(\mathbf{r}) = U_{yad.} + U_{el-el.}$ Bu potensial energiya esa (7.17) ifodadagi davriylik shartini bajarishi kerak. Bunday qarash **bir elektronli yaqinlashish**, yoki **Xartri-Fok** usuli deb ataladi.

7.4. Kristallning davriy potensial maydonida harakat qilayotgan elektronning harakat tenglamasi

Kvant mexanikasidan ma'lumki, potensial maydonda harakat qilayotgan elektronning to'liq funksiyasi va energiyaviy sathlari quyidagi umumiy ko'rinishdagi Shredinger tenglamasini yechimlaridan topiladi:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi, \quad (7.19)$$

bunda E –elektronning to'la energiyasi, $\hat{H}$ -hamiltonian bo'lib, u kvant zarrasining (bizning masalada elektronning) kinetik va potensial energiyalari bilan bog'liq bo'lgan hadlardan tashkil topgan:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} + U(\vec{r}), \quad (7.20)$$

bunda m_e – elektron massasi, $\hat{p}$ - uch o'lchovli fazoda impuls operatori:

$$p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}. \quad (7.21)$$

(6.21) ifodani (7.20) qo'ysak, (7.1) tenglamaga teng kuchli quyidagi tenglamani olamiz:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 \Psi(\vec{r}) + U(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}), \quad (7.22)$$

bunda ∇ - nabla operatori. $\Psi(\vec{r})$ to'liq funksiyasining ma'nosi yuqorida (p. 7.1) berilgan bo'lib, u normallashtirish shartini bajaradi.

Metallardagi erkin elektronlar tasavvuriga ko'ra metall atomlarining valent elektronlari qaralayotgan namuna bo'ylab erkin harakat qiladi. Metallardagi elektr o'tkazuvchanlik aynan valent elektronlar hosil qilganligi uchun ularni **elektr o'tkazuvchanlik elektronlari** ham deyiladi. Aytaylik, elektron kristallning davriy potensial maydonida erkin harakat qilayotgan bo'lsin. Sodda uchun uning potensial energiyasi $U(\vec{r}) = 0$ deb olamiz. U holda bunday erkin elektron uchun (7.22) Shredinger tenglamasi quyidagicha bo'ladi:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}). \quad (7.23)$$

Bu tenglamaning yechimi de Broyl to‘lqini funksiyasi sifatida ma’lum:

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}, \quad (7.24)$$

bunda $\vec{k}$ – de Broyl (erkin elektron) to‘lqini vektori. Uning moduli **to‘lqin soni** deyilib, 2π davrga to‘g‘ri keluvchi λ to‘lqin uzunliklar sonini bildiradi:

$$|\vec{k}| = k = 2\pi/\lambda. \quad (7.25)$$

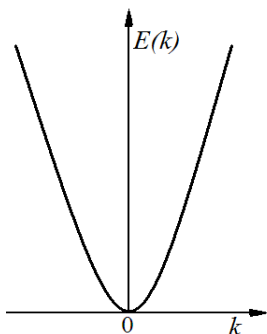
$\vec{k}$ to‘lqin vektori elektron impulsi bilan quyidagicha bog‘lanishda bo‘ladi:

$$\vec{p} = m_e \vec{v} = \hbar \vec{k}, \quad (7.26)$$

bunda m_e – elektron massasi. De Broyl to‘lqinining impulsi (shuningdek, to‘lqin vektori) fazodagi elektronlar sistemasi vektorining istalgan siljishiga nisbatan invariant bo‘lgandagi erkin elektronning harakatini xarakterlaydi, ya’ni erkin elektron uchun fazoning istalgan bir nuqtasi ekvivalentdir. Erkin elektronning energiyasi impuls orqali quyidagicha aniqlanadi:

$$E(k) = \frac{p^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}. \quad (7.27)$$

Bu tenglama parabola tenglamasidir, ya’ni erkin elektronning energiyasi to‘lqin vektoriga kvadratik bog‘lanishda va $k^2 > 0$ bo‘lganligi uchun k ning istalgan qiymatlarida (7.23) tenglama yechimga ega bo‘ladi. Buning ma’nosi shuki, erkin **elektronning energiyaviy spektri uzluksiz** va energiya E istalgan qiymatlarni kabul qilishi mumkin. 7.5-rasmda erkin elektron energiyasining to‘lqin soniga bog‘lanish grafigi berilgan. Bunda (7.23) tenglamaning yechimi (7.24) qaralayotgan hajmda normallashtirilgan bo‘ladi: $\int \Psi \Psi^* dv = 1$, ya’ni qaralayotgan hajmning istalgan nuqtasida elektronning bo‘lish ehtimoli birga teng.



7.5-rasm. $E(k)$ erkin elektron energiyasining k to‘lqin vektorining qiymatiga bog‘lanish grafigi.

7.5. Davriy potensial maydondagi erkin bo'lmagan elektron harakati. Blox funksiyasi va uning xossalari

Kristallning davriy potensial maydonida harakat qilayotgan erkin bo'lmagan elektron uchun (7.22) tenglamani davriy potensial yaqinlashuv shartiga ko'ra quyidagicha yozamiz:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2\Psi(\vec{r}+\vec{n})+U(\vec{r})\Psi(\vec{r}+\vec{n})=E\Psi(\vec{r}+\vec{n}). \quad (7.28)$$

$\Psi(\vec{r}+\vec{n})$ funksiya Shredinger tenglamasining yechimi bo'la olishi uchun bu tenglamada ham E energiya $\Psi(\vec{r})$ funksiyaga to'g'ri kelgan qiymatlarni qabul qilishi kerak va $\Psi(\vec{r}+\vec{n})$ funksiya $\Psi(\vec{r})$ funksiyadan qandaydir o'zgarma ko'effitsiyentga farq qilishi kerak:

$$\Psi(\vec{r}+\vec{n})=C_n\Psi(\vec{r}) \quad (7.29)$$

Buning uchun $\Psi(\vec{r}+\vec{n})$ funksiya ham normallashtirish shartini bajarishi kerak. U holda normallashtirish shartidan va (7.24) tenglikdan

$$|C_n|^2=1 \text{ va } |\Psi(\vec{r}+\vec{n})|^2=|\Psi(\vec{r})|^2 \quad (7.30)$$

tenglik kelib chiqadi. Bu oxirgi tenglikning fizikaviy ma'nosi shundan iboratki, biz qarayotgan davriy potensial maydonda $\vec{r}$ radius vektorli nuqta atrofidagi elementar dV hajmda ham, bu nuqtaga ekvivalent $\vec{r}+\vec{n}$ radius vektorli nuqta atrofidagi o'xshash hajmda ham elektron bir xil ehtimoliyat bilan mavjud bo'lishi mumkin. Boshqacha qilib aytsak, elektron zichligi davriy potensial maydonda fazoviy davriylikka egadir. Davriy kristall panjarasi doimiysiga teng bo'lgan kristall ichida davriy potensial maydonda harakatlanayotgan bitta elektron harakati uchun tuzilgan Shredinger tenglamasining yechimining davriyligi panjara davriyligiga teng bo'lgan modulyatsiyalangan yassi to'lqinni ifodalovchi funksiya bo'lishi kerak. Boshqacha aytsak, kristall ichidagi davriy potensial maydonda harakatlanayotgan elektronning to'lqin funksiyasi modulyatsiyalangan yassi to'lqin funksiyasidan iborat bo'ladi. U erkin elektronning to'lqin funksiyasi bilan kristalda davriy o'zgaruvchi amplitudaning ko'paytmasiga teng:

$$\Psi_k(\vec{r})=U_k(\vec{r})\cdot e^{i\vec{k}\vec{r}}, \quad (7.31)$$

bunda $\vec{k}$ – kristalldagi elektron holatini xarakterlovchi **kvazito‘lqin vektori**. (7.31) ifoda **Blox funksiyasi** deb ataladi. Kvazito‘lqin vektori, (shuningdek, unga mos kelgan kvaziimpuls ham) kristallning istalgan nuqtasiga nisbatan invariant bo‘lgan erkin elektronning to‘lqin vektoridan farq qiladi. U kristall ichidagi elektronlar sistemasi panjara translyatsiyasi vektori $\vec{n}$ ga nisbatan invariant bo‘lganda davriy potensial maydondagi elektron harakatini xarakterlaydi. Blox funksiyasi uchun ham davriylik sharti bajariladi:

$$U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{n}) \text{ va } \psi_k(\vec{r} + \vec{n}) = U(\vec{r} + \vec{n}) e^{i\vec{k}(\vec{r} + \vec{n})} = U(\vec{r}) e^{i\vec{k}(\vec{r} + \vec{n})} =$$

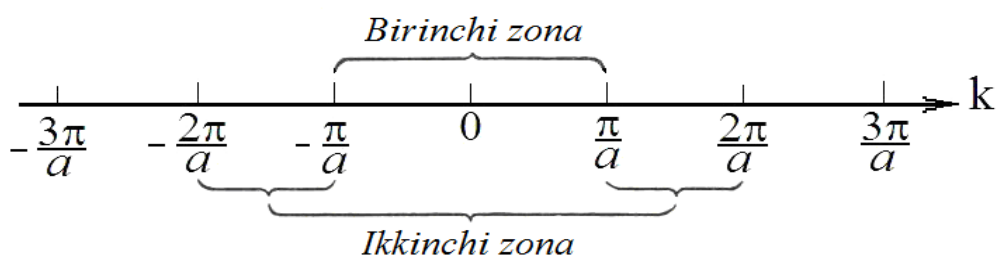
$$U(\vec{r}) \cdot e^{i\vec{k}\vec{n}} e^{i\vec{k}\vec{r}} = U(\vec{r}) \cdot e^{i\vec{k}\vec{r}},$$

bunda davriylik sharti bajarilishi uchun $e^{i\vec{k}\vec{n}}=1$ bo‘lganligi uchun $\vec{k}\vec{n}=2\pi$ ekanligi kelib chiqadi, ya’ni $\vec{k}\vec{n}$ kattalik eng kichik 2π davr bilan o‘zgarar ekan. U vaqtda $\vec{k}\vec{n}$ kattalikning qabul qilishi mumkin bo‘lgan barcha qiy-matlari to‘plami $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$ o‘qlar bo‘yicha $\pm\pi$ oraliqda yotadi:

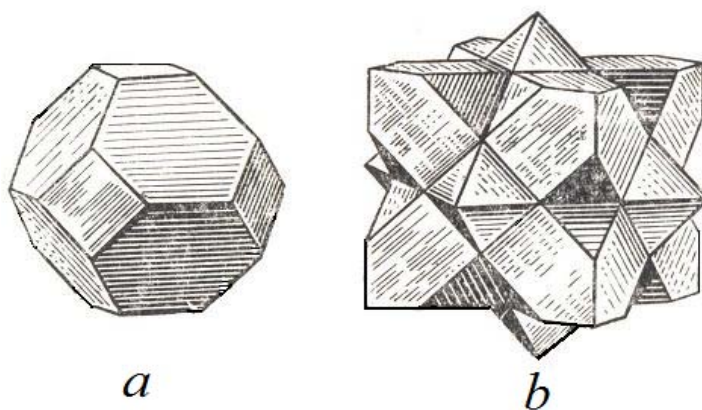
$$\begin{aligned} -\pi/\vec{a} &\leq \vec{k}_1 \leq \pi/\vec{a}, \\ -\pi/\vec{b} &\leq \vec{k}_2 \leq \pi/\vec{b} \\ -\pi/\vec{c} &\leq \vec{k}_3 \leq \pi/\vec{c} \end{aligned} \quad (7.32)$$

(7.32) tengsizlik $\vec{k}$ -fazodagi ko‘p yoqli hajmni tasvirlaydi va **birinchi Brilliyen zonasi** deb ataladi. U $\vec{k}$ -fazodagi koordinata boshida elektronning mumkin bo‘lgan barcha holatlarini (to‘lqin vektorlarini) qamrab olgan minimal hajmdagi ko‘pyoqdir. Agar shunday mulohazalar bilan teskari panjaraning keyingi boshqa vektorlari va tugunlari uchun ham birinchi Brilliyen zonasiga o‘xshagan ko‘p yoqni tuzib, undan birinchi Brilliyen zonasiga mos keluvchi ko‘p yoqni ayirib tashlasak ikkinchi, uchunchi va boshqa Brilliyen zonalarining hajmini aniqlash mumkin. Ikkinchi Brilliyen zonasi ikkita segmentdan tashkil topgan bo‘ladi, masalan, $\vec{a}$ o‘q uchun ikkinchi Brilyuen zonasi ikkita $\pi/\vec{a} \leq \vec{k}_1 \leq 2\pi/\vec{a}$ va $2\pi/\vec{a} \leq \vec{k}_1 \leq -\pi/\vec{a}$ oraliqlarda yotadi va hakoza. $\vec{b}$ va $\vec{c}$ o‘qlar bo‘yicha ketgan segmentlar uchun ham shunday shartlar bajariladi. Yuqori tartibli Brilliyen zonolari birinchisidan farqli holda bir nechta mustaqil sohalardan iborat bo‘ladi. 7.6- rasmda bir xil atomlardan tashkil topgan panjara doimiysi a bo‘lgan bir o‘lchamli kristall panjaraning Brilliyen

zonalarining $\vec{k}$ o'qda joylashuv ketma-ketligi tasvirlangan. Brilliyuen zonasining shakli kristall strukturasi tipiga bog'liq. Misol uchun, 7.7-rasmda uch o'lchamli Cu (mis) strukturasi tipidagi (tomonlari markazlashgan kub, $Fm\bar{3}m$ fazoviy guruh) uchun birinchi va ikkinchi Brilliyuen zonalari tasvirlangan. Teskari panjara vektori yordamida $\vec{k}$ fazoning istalgan nuqtasini birinchi Brilliyuen zonasiga ko'chirish mumkin. Binobarin, turli tartibli Brilliyuen zonasidagi fizikaviy holatlar ekvivalent bo'lganligi uchun elektronning $\vec{k}$ -fazodagi harakat trayektoriyasini faqat birinchi Brilliyuen zonasida o'rganish mumkin bo'ladi.



7.6-rasm. a panjara doimiysiga ega bo'lgan bir xil atomlardan tuzilgan bir o'lchamli kristall panjara uchun Brilliyuen zonalari.



7.7-rasm. Misning tomonlari markazlashgan kristall strukturasi uchun birinchi (a) va ikkinchi (b) Brilliyuen zonalari.

Demak, kristalldagi elektronning hamma energiyaviy holatlarini o'rganish uchun $\vec{k}$ vektorining faqat birinchi Brilliyuen zonasiga tegishli bo'lgan qiymatlari sohasini qarash kifoya. Kristalldagi elektronning kvazito'lqin vektori (davriy maydonda bo'lganligi uchun) erkin elektronning to'lqin vektoridek bir qiymatli emas. Bu natija kristallning davriy potensial maydonidagi elektronning to'lqin funksiyasi uchun translyatsiya shartidan kelib chiqadi:

$$e^{i(\vec{k}+2\pi\vec{b})\vec{n}} = e^{i\vec{k}\vec{n}}. \quad (7.33)$$

(7.33) tenglamaning ma'nosi shundan iboratki, kristalldagi elektronning $\vec{k}$ kvazito'lqin vektorini $\vec{k} = \vec{k} + 2\pi\vec{b}$ vektor bilan almashtirsak, avvalgisiga teng kuchli to'lqin funksiyasi hosil bo'ladi. Bunda $\vec{b}$ – teskari panjara doimiysi. Boshqacha aytsak, elektronning $\vec{k}$ kvazito'lqinli vektori bilan aniqlanadigan holati $\vec{k} + 2\pi\vec{b}$ vektor bilan aniqlanadigan holatlari fizikaviy teng kuchlidir (ekvivalentdir). Binobarin, ushbu holatlarning energiyalari ham bir xil, ya'ni tengdir:

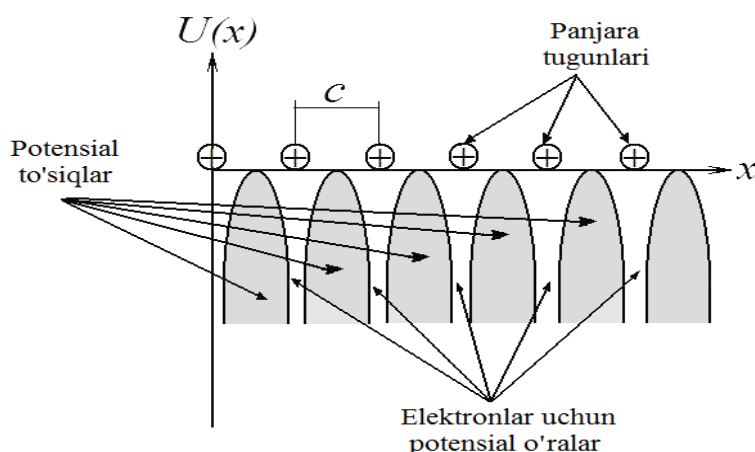
$$E(\vec{k}) = E(\vec{k} + 2\pi\vec{b}) \text{ yoki } E(\vec{p}) = E(\vec{p} + 2\pi\vec{p}). \quad (7.34)$$

Shunday qilib, quyidagi muhim xulosa kelib chiqadi: kristallning davriy maydonidagi elektronning to'lqin funksiyasi va energiyasi $2\pi\vec{b}$ davrga ega bo'lgan $\vec{k}$ to'lqin vektorining davriy funksiyasidir. $\vec{k}$ vektorning $2\pi\vec{b}$ miqdorga farq qiluvchi istalgan ikkita qiymatlarida barcha to'lqin funksiyalari va energiyaviy sathlari bir xil, ya'ni o'zaro ekvivalent bo'ladi. Shuning uchun energiyaviy sathlarni belgilovchi $\vec{n}$ vektorga tegishli n indekslarda Shredinger tenglamasining xususiy funksiyalari va xususiy qiymatlari teskari panjaradagi $\vec{k}$ vektorning davriy funksiyalari bo'ladi. Istalgan real kristall cheklangan davriylikka ega. Shuning uchun to'lqin vektori $\vec{k}$ faqat uzlukli qiymatlar qatoriga ega bo'ladi. $\vec{k}$ vektorning qabul qilishi mumkin bo'lgan qiymatlari chegaraviy va sikliylik shartlardan topiladi. Shunday qilib, Shredinger tenglamasini qanoatlantiradigan elektronning to'la energiyasi $\vec{k}$ vektorga va n indeksga bog'liq bo'ladi: $E_n(\vec{k})$. $E_n(\vec{k})$ ning aniq ko'rinishi Shredinger tenglamasining yechimlarini topganda aniqlanadi. Shredinger tenglamasini yechimini qanoatlantiruvchi $E_n(\vec{k})$ energiyaning diskret qiymatlari elektronning qattiq jismdagi mumkin bo'lgan **energiyaviy zonalari** hisoblanadi. Elektronning kristalldagi energiyaviy spektrini topish uchun bir elektronli yaqinlashishning jami taqribilari bilan Shredinger tenglamasining yechimi kerak. Buning uchun esa kristall $U(\vec{r})$ davriy potensialining aniq ko'rinishi ma'lum bo'lishi kerak. Izlanayotgan to'lqin funksiyasi $\psi_k(\vec{r})$ va $E_n(\vec{r})$ ning qiymatlari ham bu potensialga bog'liq bo'ladi. Biroq kristallardagi $U(\vec{r})$ davriy potensialning aniq ko'rinishini aniqlash mumkin emas. Shuning uchun $U(\vec{r})$ potensialning ko'rinishini turli farazlar qilib, taqriban aniqlaydilar. Keyingi mavzularda biz ana shunday taqribiy yondoshuvlar qilib Shredinger tenglamasining yechimlarini topamiz. Shuni ham aytib o'tish kerakki, bu nazariya kristalldagi ximiyaviy bog'lanish turlarini hisobga olmaydi. Qattiq jismdagi elektronlarning energi-

yaviy zonalar nazariyasi adiabatik va bir elektronli taqribiy yaqinlashishlarga asoslangan bo'lishiga qaramasdan taraqqiy etishi davomida ko'p tajriba natijalarini muvaffaqiyat bilan tushuntira oldi.

7.6. Bir o'lchamli davriy potensial maydondagi elektronlarning energiyaviy spektri

Kristallning davriy potensial maydonidagi elektron harakatining (energiyaviy spektrining) o'ziga xos xususiyatlari haqida tasavvur hosil qilish uchun eng sodda bir o'lchamli davriy potensial maydondagi elektron harakatini o'rganamiz. Bu modelga ko'ra, kristall panjaraning musbat zaryadli o'zaklari elektronlar uchun bir yo'nalishda joylashgan davriy potensial barerlar (to'siqlar) hosil qiladi deb faraz qilinadi. Har bir ion cheksiz chuqur potensial to'siq hosil qiladi. Atom elektronlari esa ushbu potensial chuqurliklarda ma'lum bir energiyaviy sathlar bo'yicha joylashadi. 7.8-rasmda bir o'lchamli kristalda davriy joylashgan bir xil musbat ionlarning (atomlar o'zaklarining) potensial energiyasi tasvirlangan. Kristall hosil bo'lishida atomlar bir yoki bir nechta valent elek -

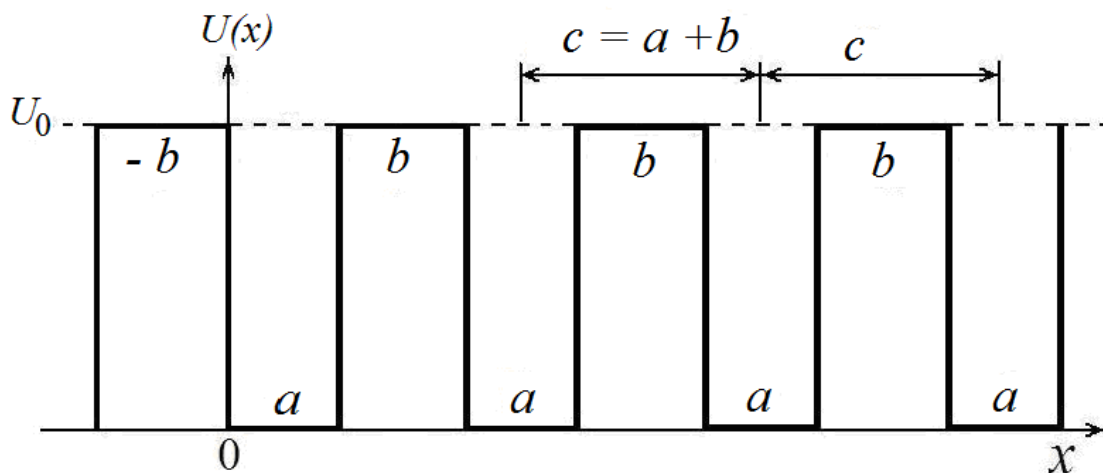


7.8-rasm. Panjara doimiysi c bo'lgan bir o'lchamli kristalldagi elektronlar uchun davriy potensial maydon.

tronlarini yo'qotgani uchun atomlarning o'zaklari musbat zaryadga ega bo'lib qoladi. Valent elektronlar esa bir atomning potensial maydoni ta'siridan qo'shni atom potensial maydoni ta'siriga atom o'zaklari (musbat ionlari) orasidagi potensial to'siqlardan "tunnel o'tish" qilib parron o'tadi va bu jarayon butun kristall bo'ylab davom etadi. Nazariy hisoblashlarning ko'rsatishicha, elektronning bir atom potensial maydonidan qo'shni atom potensial maydoniga potensial to'siq orqali "tunnel o'tish" qilishi uchun bir atomning potensial maydonidagi "yashash

vaqtiga” qaraganda 10^7 barobar kam vaqt ketar ekan. Demak, valent elektronlar butun kristall bo‘ylab harakatda bo‘ladi. Shuning uchun 7.8-rasmda ko‘rsatilgan qatorda valent elektronlarni qandaydir bitta atomga tegishli deb qarash mumkin emas. Bu holda valent elektronlar “umumlashgan” bo‘ladi va elektronlar gazini hosil qiladi. Bu manzarani tasavvur qilish uchun alohida atomlarning potensial chuqurliklarini $U = 0$ qiymatdan kichik bo‘lgan yuqori qismlari orqali birlashtirish kerak. Ushbu relefni yana ham soddalashtirish uchun potensial chuqurliklarni chekli chuqurlikka ega bo‘lgan to‘g‘ri burchakli shakllarga almashtiramiz (7.9-rasm). Bu tasavvur **Kronig-Penni modeli** deb ataladi. Mazkur modelda potensial chuqurlikning (a) kengligining va (b) potensial to‘siq qalinligining yig‘indisi panjara doimiysi (c) ga teng: $c = a + b$. $U(x)$ potensialni koordinata x ga bog‘lanishini quyidagi tengsizliklar orqali ifodalash mumkin:

$$\begin{aligned} nc < x < nc + a \text{ oraliqda } U(x) &= 0, \\ nc + a < x < (n+1)c \text{ oraliqda } U(x) &= U_0. \end{aligned}$$



7.9 – rasm. To‘g‘ri burchakli bir o‘lchamli potensial to‘siqlar sistemasi (Kronig-Penni modeli): a – potensial chuqurlik kengligi, b – potensial to‘siq qalinligi.

Biz qarayotgan davriy potensial maydonda harakatlanayotgan bitta elektron uchun Shredinger tenglamasi (7.22) tenglamaga ko‘ra quyidagicha bo‘ladi:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + U_0\right)\Psi = E\Psi. \quad (7.35)$$

$nc < x < nc + a$ oraliqda $U(x) = 0$ bo‘lganligi uchun (7.35) tenglama (7.23) ko‘rinishini oladi. Bu holda tenglama erkin elektron harakatini ifodalaydi.

Biz bu holni 7.3-mavzuda ko‘rib o‘tdik. $nc+a < x < (n+1)c$ oraliq uchun (7.35) tenglamada quyidagi belgilashlarni kiritamiz:

$$\alpha = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_e E} \quad \text{va} \quad \beta = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_e (U_0 - E)}. \quad (7.36)$$

va yechimini Blo‘x funksiyasi ko‘rinishida izlaymiz:

$$\psi(x) = U(x)e^{ikx}, \quad (7.37)$$

bunda $U(x)$ – potensial maydonning davri panjara davriga teng bo‘lgan potensial energiyasi: $U(x) = U(x+c) = U(x+2c)$. (7.36) va (7.37) ifodalarga ko‘ra, (7.35) tenglamani yechib, quyidagi tenglamalar sistemasini olamiz:

$0 < x < a$ oraliqda, ya’ni potensial chuqurlik ichida

$$\frac{d^2 U}{dx^2} + 2ik \frac{dU}{dx} + (\alpha^2 + k^2) = 0, \quad (7.38)$$

tenglama o‘rinli bo‘ladi. $a < x < a+b$ oraliqda, ya’ni potensial o‘ralar orasidagi to‘siqda esa

$$\frac{d^2 U}{dx^2} + 2ik \frac{dU}{dx} + (\beta^2 + k^2) = 0. \quad (7.39)$$

bo‘ladi. (7.38) va (7.39) tenglamalarning yechimlari mos holda quyidagicha bo‘ladi:

$$U_1 = Ae^{i(\alpha-k)x} + Be^{-i(\alpha+k)x}, \quad U(0) = A + B$$

$$U_2 = Ce^{(\beta-ik)x} + De^{-(\beta+ik)x}. \quad (7.40)$$

A, B, C va D ixtiyoriy kattaliklar U_1 va U_2 funksiyalarning davriylik va uzluksizlik shartlaridan foydalanib topiladi. Uzluksizlik shartiga ko‘ra,

$$U_1(0) = U_2(0) \quad \text{va} \quad \frac{dU_1}{dx} = \frac{dU_2}{dx}, \quad (7.41)$$

davriylik shartiga ko‘ra esa

$$U_1(a) = U_2(-b) \quad \text{va} \quad \frac{dU_1(a)}{dx} = \frac{dU_2(-b)}{dx}. \quad (7.42)$$

(7.40) shartlarga ko'ra, (7.41) dan

$$A + B = C + D \quad (7.43)$$

$$\alpha(A - B) = \beta(C - D) \quad (7.44)$$

tengliklarni hosil qilamiz. (7.42) davriylik shartidan esa quyidagi tenglamalarni hosil qilamiz:

$$Ae^{i(\alpha-k)a} + Be^{-i(\alpha+k)a} = Ce^{-(\beta-ik)b} + De^{(\beta+ik)b}, \quad (7.45)$$

$$i(\alpha-k) Ae^{i(\alpha-k)a} - i(\alpha+k) Be^{-i(\alpha+k)a} = (\beta-ik) Ce^{-(\beta-ik)b}. \quad (7.46)$$

(7.43) – (7.46) tenglamalar A , B , C va D ko'effitsiyentlar bo'yicha chiziqli va bir jinsli bo'lib, ko'effitsiyentlardan tuzilgan determinant nolga teng bo'lgandagina yechimga ega bo'lishi mumkin. Bu shartdan quyidagi transsendent (algebraviy bo'lmagan) tenglama kelib chiqadi:

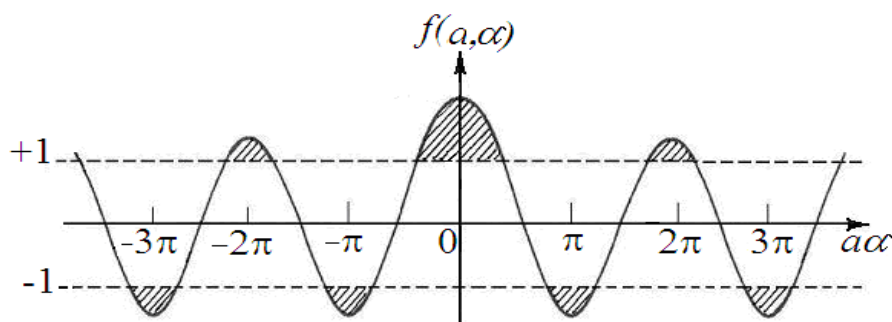
$$\frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} sh(b\beta) \sin(a\alpha) + ch(b\beta) \cos(a\alpha) = \cos[k(a+b)], \quad (7.47)$$

bunda $shx = (e^{-x} - e^x)^{1/2}$ -giperbolik sinus. Bu tenglamaga (7.36) belgilashlarni qo'ysak, elektron energiyasini to'liq soni k ga bog'lovchi dispersi-yaviy tenglamani olamiz. Ammo (7.47) tenglamani bir muncha soddalashtirish mumkin. Buning uchun qaralayotgan masaladagi U potensialni to'g'ri burchakli yashik ko'rinishidan panjara tugunlaridagi δ -funktsiya ko'rinishiga o'tamiz. Buning uchun quyidagi taqribiy shartlarni qo'yamiz. 7.9-rasmdagi potensial to'siqning yuzasi (U_0b) chekli bo'lib qolgan holda ($U_0b = \text{const.}$) potensial to'siqning kengligi b nolga, U_0 esa cheksizlikka intilishi kerak: $b \rightarrow 0$ va $U_0 \rightarrow \infty$. Bu hol uchun (7.36) belgilashlardan $\beta \gg \alpha$, $\beta a \ll 1$ ekanligi kelib chiqadi va (7.47) tenglama quyidagi ko'rinishni oladi:

$$f(a\alpha) = P \frac{\sin a\alpha}{a\alpha} + \cos a\alpha = \cos ak, \quad (7.48)$$

bunda o'lchamsiz kattalik bo'lgan $P = \lim_{\substack{b \rightarrow 0 \\ U_0 \rightarrow \infty}} \left(\frac{m_e ab U_0}{\hbar^2} \right)$ kristalldagi energiya -

viy barerning (to'siqning) effektiv yuzasini ifodalovchi kattalik bo'lib, **barerning shaffoflik darajasi** deyiladi. (7.48) tenglama ham transsendent tenglama bo'lib, k to'lqin sonining Shredinger tenglamasining yechimi bo'ladigan $E(\alpha)$ energiyaning qiymatlariga mos keluvchi qiymatlarini aniqlaydi. (6.48) tenglama α kattalikning ((6.36) belgilashga ko'ra) E energiyaning hamma qiymatlarida ham yechimga ega bo'lavermaydi. Misol uchun, 7.10- rasmda $R = 3\pi/2$ bo'lgan xususiy hol uchun $f(a\alpha)$ funsiyaning $a\alpha$ argumentga bog'liqlik grafigi keltirilgan. Ushbu rasmdan ko'rinib turibdiki, $(a\alpha)$ argumentning shunday sohalari mavjudki, ularda $|f(a\alpha)| = |\cos a\alpha| > 1$ shart bajariladi. Kosinus esa birdan katta bo'lishi mumkin emas. Demak, (7.48) tenglama bu sohalarda ma'noga ega emas. Bu sohalar 7.10- rasmda shtrixlangan. Shu bilan birga, shunday sohalar



7.10- rasm. Kronig-Penni modelida elektron energiyasi uchun yechimlar sohalari.

borki, kristallning davriy potensial maydonida tenglama (7.48) yechimga, elektron esa bu yechimlarga to'g'ri kelgan $E_n(k)$ energiyalarga ega bo'ladi. A , B , C va D koeffitsiyentlarning bu energiyaga mos keluvchi, ayni paytda (7.38) va (7.39) tenglamalarni qanoatlantiruvchi qiymatlarini topish mumkin. Demak bunday $(|\cos a\alpha| \leq 1)$ sohalar uchun (7.35) Shredinger tenglamasi yechimga ega bo'ladi. $f(a\alpha)$ davriy funksiya bo'lib (7.10-rasm), uning uchun quyidagi shart bajariladi:

$$f(n\pi) = (-1)^n, f'(n\pi) = (-1)^n \frac{P}{n\pi}, \quad (7.49)$$

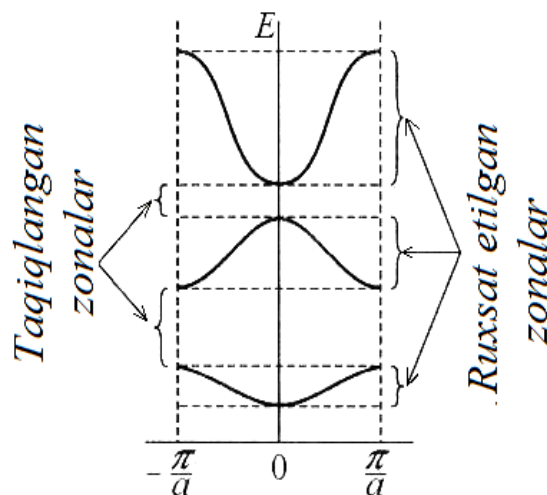
bunda $n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ Bu shartga ko'ra,

$$a\alpha = n\pi \quad (7.50)$$

nuqtalarda energiyaning ruxsat etilgan qiymatlari sohasi tugaydi va taqiqlangan qiymatlar sohasi boshlanadi. Shunday qilib, davriy potensial maydondagi elektronning energiyaviy spektri energiyaning ketma-ket keluvchi **ruxsat etilgan** va **taqiqlangan qiymatlari zonalaridan** iborat ekan. Energiyaning ruxsat etilgan zonalaridagi qiymatlarida Shredinger tenglamasi yechimga ega bo'ladi. Energiyaning taqiqlangan zonalariga mos keluvchi qiymatlarida esa Shredinger tenglamasi yechimga ega bo'lmaydi. Shu bilan birga, P parametr (barerning shaffoflik darajasi) qancha kichik bo'lsa ruxsat etilgan zonalar kengligi shunchalik katta bo'ladi. Zonalar kengligi, shuningdek, $(a\alpha)$ argument o'sishi bilan ham kattalashadi. Elektronning energiyasi $\vec{k}$ vektorga nisbatan juft funksiya bo'ladi: $E(\vec{k}) = E(-\vec{k})$.

7.7. Bir o'lchamli kristallning davriy potensial maydonidagi elektronning energiyaviy spektrining xossalari

(7.48) munosabatdan har bir to'lqin soniga mos keladigan energiyani aniqlash mumkin. 7.10 - rasmdan ko'rinib turibdiki, har bir keltirilgan to'lqin soniga, ya'ni $\cos(ak)$ ning har bir qiymatiga turli zonada o'zining musbat va manfiy qimmatli α , shu bilan birga bu qiymatlarga (7.36) va (7.40) ifodalarning birinchi qismlariga ko'ra, bitta energiya mos keladi (7.11-rasm). Kosinus davriy funksiya bo'lganligi uchun (7.50) tenglikda-



7.11-rasm. Elektron energiyasining bir o'lchamli va monoatomli zanjir uchun Kronig-Penni modelida keltirilgan to'lqin soniga bog'lanish grafigi. $gi(a\alpha)$ argument 2π oraliqda cheklangan bo'ladi:

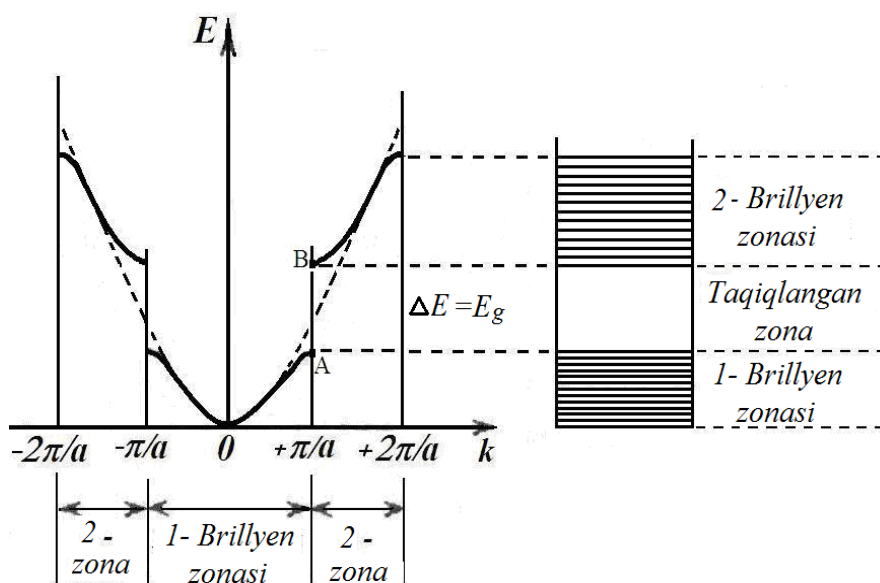
$$-\pi/a \geq \alpha \leq \pi/a. \quad (7.51)$$

Energiyaning keltirilgan to‘lqin soniga bog‘lanish grafigi **keltirilgan zonalar sxemasi** deyiladi. 7.11-rasmdan ko‘rinishicha, energiyaviy zonalar tartib nomeri ortishi bilan ruxsat etilgan zonalar kengligi ΔE ortib boradi, taqiqlangan zonalar kengligi esa kamayib boradi. Hatto ruxsat etilgan zonalar tartib nomeri ortishi bilan ruxsat etilgan zonalar kengligi esa kamayib boradi. Hatto ruxsat etilgan zonalar tartib nomeri ortishi bilan ruxsat etilgan zonalar kengligi esa kamayib boradi.

Energiyaviy zonalar tartib soni ortib borishi bilan kvaziuzluksiz energiyaviy sathlar zichligi kamayib boradi. Bunga sabab elektronning o‘z atomining musbat o‘zagidan uzoqlashib borishi bilan uning bog‘lanish energiyasi kamayib borishi va boshqa atom ionlarining kuchliroq ta’sir doirasiga tushib qolishidir. Garchi keltirilgan zonalar sxemasi energiyani ruxsat etilgan va taqiqlangan zonalar ajralishini aks ettirsa ham, 2π oraliqda cheklangan bo‘lib, energiyani erkin to‘lqin soniga davriy bog‘lanishini yaqqol tasavvur qilishga imkon bermaydi. Agar energiyani

$$k = n\pi/a \quad (n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots) \quad (7.52)$$

erkin to‘lqin soniga bog‘lanish grafigini chizsak (ya’ni energiyani erkin to‘lqin soni $k = n\pi/a$ bo‘yicha “yoysak”), elektron energiyasining va ruxsat etilgan hamda taqiqlangan zonalar tartib nomeri Kronig-Penni potensial maydonida davriy o‘zgarishini yaqqol aks ettiradigan chizmani hosil qilamiz (7.12-rasm). Ushbu sxema, ya’ni davriy potensial maydondagi elektron energiyasining erkin to‘lqin soniga bog‘lanish grafigi **kengaytirilgan zonalar sxemasi** deyiladi. Erkin to‘lqin sonidan foydalanganda

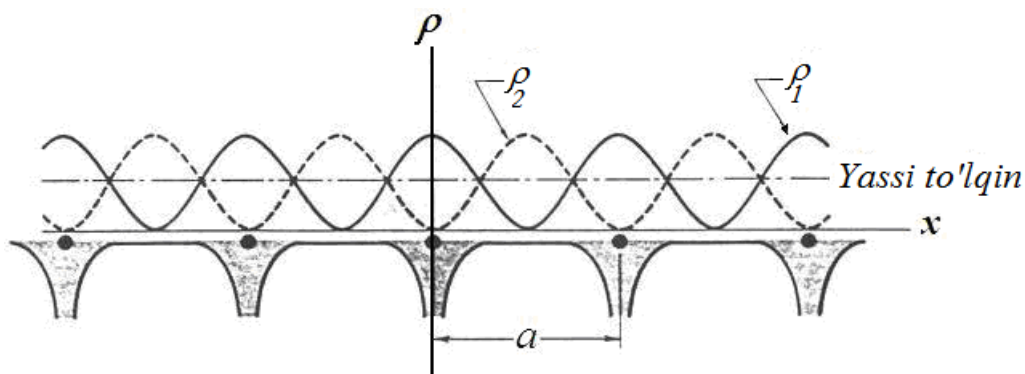


7.12-rasm. Bir o‘lchamli kristalldagi elektronning kengaytirilgan energiyaviy zonalar sxemasi.

energiyaning har bir $n\pi/a$ uzilish nuqtalariga energiyaning ikkita qiymati mos kelib, bu qiymatlar orasida energiyaning **taqiqlangan qiymatlari sohasi** yotadi. Uzilish nuqtalariga energiyaning ikkita qiymati to'g'ri kelishiga sabab quyi zonaning kichik qiymatli energiyaga ega bo'lgan yuqori chegarasiga mos keluvchi to'lqin funksiyasi (to'lqin tenglamasi-ning yechimi) bilan navbatdagi yuqori zonaning katta qiymatli energiyaga ega bo'lgan quyi chegarasiga mos keluvchi to'lqin funksiyasining (to'lqin tenglamasi yechimining) bir xil bo'lishidir. Fizikaviy sababi esa kristall panjaraning davriy joylashgan tekisliklaridan elektronning (1.12) formula bo'yicha (I Bob) Vulf-Bregg qonuni asosida qaytib kristallda turg'un to'lqin hosil qilishidir. Haqiqatdan ham (7.52) tenglama $n=1$ bo'lganda $k = \pi/\lambda$ bo'lganligi uchun Vulf-Bregg qonunini ifodalovchi (1.12) formulaning bir o'lchamli kristall uchun ifodasidir. Elektronning kristall tekisliklaridan (7.52) tenglama bo'yicha birinchi tartibli ($n=1$) qaytishi bilan cheklanib, elektronning to'lqin funksiyasining ko'rinishini tahlil qilamiz. Elektronning kristall tekisliklarining $k = \pm \pi/a$ nuqtalaridan qaytib bir-biriga qarama-qarshi yo'nalishida harakat qilayotgan $\psi^+ \sim e^{ikx}$ va $\psi^- \sim e^{-ikx}$ yuguruvchi to'lqinlar difraksiyalanishi natijasida kristallda turg'un to'lqin hosil bo'ladi (7.13-rasm). Biz bu yerda ifodalarni soddalashtirish uchun to'lqin funksiyalarining koeffitsiyentlarini tushirib qoldirdik. Shuning uchun to'lqin funksiyalarini yozishda tenglik o'rniga proporsionallik belgisidan foydalandik. ψ^+ va ψ^- yuguruvchi to'lqinlar qo'shilib, ikkita teng kuchli turg'un to'lqin hosil qiladi:

$$\psi_1 \sim e^{ikx} + e^{-ikx} \text{ va } \psi_2 \sim e^{ikx} - e^{-ikx}. \quad (7.53)$$

Eyler formulasiga ko'ra bu tenglamalarni quyidagicha yozish mumkin:



7.13-rasm. Bir o'lchamli davriy potensial maydondagi elektronning x o'q bo'yicha taqsimlanish ehtimoliyatining zichligi. ●-atomning musbat o'zagi.

$$\psi_1 \sim 2\cos\pi x/a \text{ va } \psi_2 \sim 2\sin\pi x/a. \quad (7.54)$$

Turg'un to'liqlarning har birining maksimumlari $\lambda/2$ masofada joylashgan bo'lib, bu to'liqlarning maksimumlari bir-biriga nisbatan $\lambda/4$ masofada joylashgan. Bu to'liqlarga mos keluvchi elektronning x koordinata bo'yicha taqsimlanish ehtimoliyatining zichligini (7.54) funksiyalarning kvadrati aniqlaydi:

$$\rho_1 = |\psi_1|^2 \sim \cos^2 \pi x/a \text{ va } \rho_2 = |\psi_2|^2 \sim \sin^2 \pi x/a. \quad (7.55)$$

So'nggi munosabatlardan ko'rinib turibdiki, chiziqli kristalda elektronning bo'lish ehtimoliyatining zichligining maksimal qiymatlari ψ_1 funksiyali to'liq uchun kristallning potensial energiyasi minimal bo'lgan $x=0, a, 2a, \dots$ nuqtalarga, ya'ni kristallning musbat o'zaklariga (ionlariga) to'g'ri kelsa, ψ_2 funksiyali to'liq uchun u kattalik nuqtalarning (ionlarning) o'rtasiga to'g'ri keladi (7.13-rasm). 7.13-rasmda taqqoslash uchun yassi yuguruvchi to'liq ham tasvirlangan. Bunday to'liqda elektron zaryadining zanjir bo'yicha bir jinsli taqsimlanishi kuzatiladi. 7.13-rasmdan ko'rinib turibdiki, ψ_1 turg'un to'liq panjara tugunlarida elektron zaryadining zichligining maksimumini berib, uning potensial energiyasining o'rtacha qiymatiga (yassi to'liq potensial energiyasiga) nisbatan kamaytiradi. Ikkinchi turg'un to'liq ψ_2 uchun esa aksincha teskari hol kuzatiladi. Shu tariqa bitta nuqtaga elektronning ρ_1 va ρ_2 holatlariga potensial energiyaning ikkita farqli qiymatlari to'g'ri keladi. Shuning uchun garchi ular bir xil kattalikdagi kinetik energiyaga ega bo'lishsa ham ularning to'la energiyasi ikki xil qiymatga ega bo'ladi. Natijada ρ_1 va ρ_2 funksiyalar uchun to'la energiya ma'lum bir qiymatga farq qiladi. Bu farq zonalar sxemasida taqiqlangan zonalar kengligi ΔE sifatida namoyon bo'ladi. Adabiyotlarda taqiqlangan zonalar kengligi odatda E_g bilan belgilanadi. Zonalar sxemasida (7.12-rasm) A nuqtaga ψ_2 to'liq funksiyasining energiyasi, B nuqtaga esa ψ_1 to'liqning energiyasi mos keladi.

Har bir ruxsat etilgan zona bir-birlariga yaqin joylashgan kvaziuzluksiz diskret energiyaviy sathlardan tashkil topgan. Bu kvaziuzluksiz sathlarning soni kristallning o'lchamiga bog'liq bo'lmaydi. Ular kristaldagi atomlar soniga teng bo'ladi. $E(k)$ bog'lanishning muayyan ko'rinishi kristall simmetriyasi va kristallni tashkil etgan atomlar orasidagi

bogʻlanish kuchlariga bogʻliq boʻladi. Ayrim kristallarda ruxsat etilgan zonalar kesishuvi mumkin.

Kristalldagi elektron energiyasi kvaziuzluksiz oʻzgaradigan k -fazodagi zonalar (sohalar) (7.32) tengsizliklarga koʻra, Brillyuen zonalariga mos keladi. Bundan kelib chiqib, Brillyuen zonasiga yana quyidagicha taʼrif berish mumkin: kristalldagi k toʻlqin sonining uning davriy funksiyasi boʻlgan elektronlar $E(k)$ energiyasining bir toʻla siklga oʻzgaradigan qiymatlari sohaları **Brillyuen zonaları** deyiladi. 7.12-rasmda Brillyuen zonalariga mos keluvchi intervallar bir oʻlchamli kristallar uchun berilgan. Eslatib oʻtish joizki, uch oʻlchamli kristallar uchun Brillyuen zonaları sirti berk boʻlgan murakkab koʻp burchaklardan iborat boʻladi (7.7-rasm). Binobarin, uch oʻlchamli kristallarda elektronlarning energiyaviy zonaları ham murakkab boʻladi. Kristallning anizotroplik xossasi (uch oʻlchamli fazoda yoʻnalishlar boʻyicha turli panjara doimiysiga va atomlarining turlicha bogʻlanish kuchlariga ega boʻlganligi) $E(k)$ bogʻlanishning kristallografiyaviy yoʻnalishlarga turlicha bogʻlanishda boʻlishiga (anizotropiyasiga) sabab boʻladi.

Kronig-Penni modelini turli chegaraviy shartlar uchun tatbiq etish mumkin. Masalan, elektron erkin boʻlgan holdagi energiyasining spektrini sifat jihatdan toʻgʻri tavsiflaydi. Faraz qilaylik elektron erkin yoki deyarli erkin. Bu hol **zaif bogʻlanishli yaqinlashish** deyiladi. Bu holda $U_0 = 0$ boʻlganligi uchun barerning shaffoflik darajasi $P = 0$ boʻlib, (7.48) va (7.36) ifodalarga koʻra, $\cos(a\alpha) = \cos(ak)$, bundan esa $\alpha = k$ ekanligi va

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \quad (7.56)$$

ekanligi kelib chiqadi. Oxirgi ifoda erkin elektron uchun energiyaning toʻlqin soniga kvaziuzluksiz parabolaviy bogʻlanishini ifodalovchi (7.27) ifodaning aynan oʻzidir (7.5-rasm). 7.12-rasmda esa bunday bogʻlanish shtrix chiziq bilan tasvirlangan paraboldan iborat boʻlib, u ruxsat etilgan va taqiqlangan zonalarini approksimatsiyalaydi. Har holda bu hol uchun $E = f(k)$ grafik uzlukli nuqtalardan iborat. Lekin bu nuqtalar shu qadar zich joylashgan boʻladiki, kuzatuvchiga u tutash egri chiziq boʻlib koʻrinadi. Zaif bogʻlanish yaqinlashuvida avval (valent) elektronlar oʻzlariga tegishli boʻlgan atomlarining potensial oʻralarida deb faraz qilinadi. Kristall hosil boʻlganda atomlarning oʻzaro yaqinlashuvi va taʼsirlashuvi natijasida potensial oʻralarning balandliklarining va poten-

sial to'siqlarning kengligining kamayishi sodir bo'ladi. Natijada potensial o'ralar valent elektronlarning parron (tunnel) o'tishlari uchun shaffof bo'lib qoladi va bu elektronlar endi birgina o'z atomlarigagina bog'langan bo'lmay balki, bir atomdan boshqa atomga o'tib kollektivlashtirilgan bo'lib qolishadi. Bunday model metallardagi o'tkazuvchanlikni yaxshi tushuntiradi.

Endi elektron o'ziga tegishli atomga kuchli bog'langan, ya'ni u atomning cheksiz potensial o'rasining ichida deb faraz qilamiz: $U_0 \rightarrow \infty$ va $a \neq 0$, demak, barerning shaffoflik darajasi $P \rightarrow \infty$ va $k=0$. Bu holda (6.48) ifodaga ko'ra, $f(a\alpha) = \cos ak = 1$ bo'lib, bu argumentning faqat $ak = 2n\pi$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) qiymatlariga to'g'ri keladi, ya'ni bu hol uchun Shredinger tenglamasi energiyaning uzlukli qiymatlarida yechimga ega bo'ladi. Bu holda yakkalangan atomdagidek elektronlarning diskret (uzlukli) energiyaviy sathlarini olamiz.

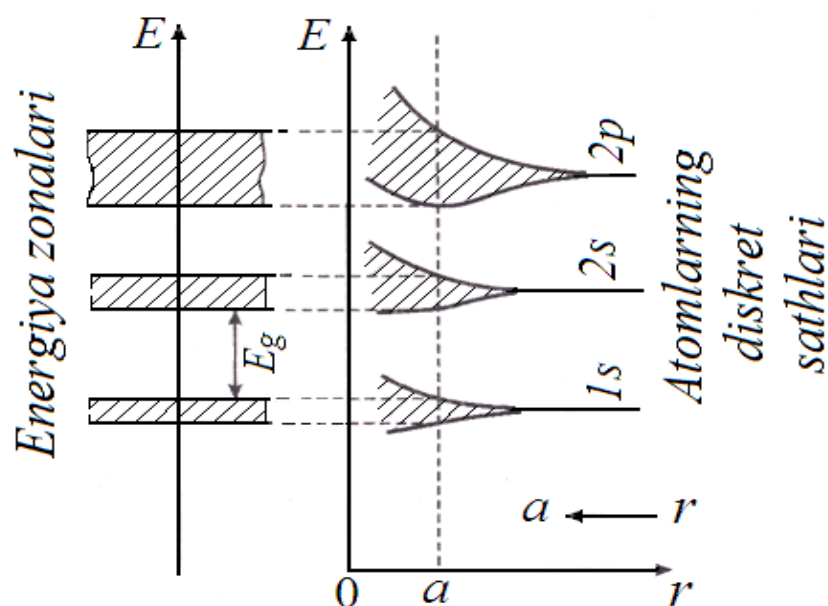
7.8. Kristalldagi elektronlar energiya spektrining zonalarga bo'linishining fizikaviy interpretatsiyasi

Biz yuqorida bir o'lchamli bir jinsli kristallning davriy potensial maydonida elektronning harakatini Shredinger tenglamasi (7.35) va uning yechimi bo'lgan Blox funksiyasi (7.37) yordamida o'rgandik. Bunday elektronning kristalldagi energiyaviy spektri yakkalangan atomdagi elektronning energiyaviy spektridan farq qilib, ruxsat etilgan va taqiqlangan zonalarga bo'linishini ko'rdik. Bunday xulosaga oddiy fizikaviy mulohazalar yordamida ham kelish mumkin. Kristalldagi elektronlar yadro bilan yetarli darajada kuchli bog'langan bo'lsa, ularning potensial energiyasi quyidagicha aniqlanadi:

$$U = U_{yak} - \delta U, \quad (7.57)$$

bunda U_{yak} – elektronning yakkalangan atomdagi potensial energiyasi, δU – elektronga qo'shni atomlar ta'sir qilishi tufayli hosil bo'ladigan tuzatma. Elektron kristalda bir atomdan ikkinchi atomga o'tganda uning energiyasi takrorlanadi (7.8-rasm). Binobarin, kristall panjara uchun U_{yak} kattalik davri panjara doimiysga teng bo'lgan (7.17) shartni qanoatlantiruchi davriy funksiya bo'ladi. Agar masalaga (7.57) ifodadagi tuzatmani hisobga olmasdan, ya'ni nolinchi yaqinlashish bilan yondoshsak elektronning to'lqin funksiyasi va energiyasi uchun mos holda yakkalangan atomdagi elektronning ψ_{yak} to'lqin funksiyasini va $E_{yak}(n, l)$

energiyasini olish mumkin, bunda n – bosh kvant soni, l -orbital kvant soni (7.1-mavzuga qarang). Yakkalangan atomda har bir mos n va l kvant sonlari juftiga birgina uzlukli energiyaviy $E_{nl}(n, l)$ sath to‘g‘ri keladi (7.2-rasm). Ammo N ta atomdan kristall hosil bo‘lishida Pauli prinsipiga ko‘ra, N ta atomning har birining bir xil spinli elektronlari birgina mos sathlarda joylashuvi mumkin, xolos. (Agar qarama-qarshi spinli bo‘lsa bitta sathda ikkita elektron joylashuvi mumkinligini eslatib o‘tamiz). Shuning uchun kristallda N ta atomning elektronlarini joylash-tirish uchun yakkalangan atomga mos keluvchi har bir sath N ta bir-biriga yaqin joylashgan kvaziuzluksiz sathlarga ajraladi. Bu jarayon alohida olingan atomlar orasidagi ixtiyoriy r masofa hosil bo‘lajak kristallning a panjara doimiysiga yaqinlashuvi bilan sodir bo‘ladi. Kristalldagi atomlar orasidagi masofa (panjara doimiysi) qancha kichkina bo‘lsa, zonalar shuncha kengayib boradi. 7.14-rasmda alohida atomlar elektronlarining diskret energiyaviy sathlaridan zonalar hosil bo‘lishi tasvirlangan. Kvaziuzluksiz sathlar majmuasi elektronlarning **ruxsat etilgan energiyaviy zonalarini** tashkil qiladi. Ushbu zonalar o‘zaro elektronlar bo‘lishi mumkin bo‘lmagan taqiqlangan zonalar bilan ajralgan bo‘ladi. Bu masalani chuqurroq tahlil qilamiz. Aytaylik, N ta atomdan tashkil topgan kristallda sathlar yakkalangan atomdagidek saqlan-sin. U holda Pauli prinsipiga ko‘ra, har bir energiyaviy sathda faqat



7.14-rasm. Alohida atomlardagi elektronlarning diskret energiyaviy sathlaridan kristalldagi zonalarining hosil bo‘lishi.

$2(2l+1)$ dona elektron joylashuvi mumkin ((7.13) ifodaga ko'ra). Bu yerda $(2l+1)$ berilgan l orbital kvant soniga to'g'ri kelgan m_l magnit kvant sonining turli qiymatlarining soni, 2 soni esa elektronning ikkita qarama-qarshi ishorali spiniga mos keluvchi son. Vaholanki, kristallda bir elektronli yaqinlashishning o'zidayoq N dona elektron mavjud bo'ladi va ularning barchasini joylashtirish uchun N ta sath kerak bo'ladi. Elektronlarning o'zaro ta'sirlashuvi tufayli N ta sathning har biri qarama-qarshi spinli ikkita elektron joylashuvi mumkin bo'lgan $(2l+1)$ alohida sathlarga bo'linadi. Bu N ta sathga $N \cdot 2(2l+1)$ ta (har bir sathga $2(2l+1)$ dona) elektron joylashuvi mumkin. Masalan, yakkaqatlangan atomdagi s sath ($l = 0$) N ta atomdan tashkil topgan kristallda $2N$ ta elektron joylashuvi mumkin bo'lgan $N(2l+1)$ ta kvaziuzlukli sathlarga ajralgan s zonaga aylanadi. Xuddi shuningdek, yakkaqatlangan atomdagi p sath ($l=1$) $6N$ ta elektron joylashuvi mumkin bo'lgan $3N$ ta kvaziuzlukli sathlarga ajralgan p zonaga aylanadi va hakoza. Agar kristall s -holatdagi N ta bir valentli atomlardan tashkil topgan bo'lsa $2N$ ta ruxsat etilgan sathlardan tashkil topgan s -zona hosil bo'ladi. Bu zonada qarama-qarshi spinga ega bo'lgan N ta atomning barcha N ta valent elektronlari joylashuvi mumkin. U holda s -zonaning ruxsat etilgan sathlarining yarmi bo'sh qoladi. Endi misol uchun $1s^2 2s^2 2p^6$ elektron strukturasiga ega bo'lgan N ta atomdan tashkil topgan kristalldagi zonalarini elektronlar qanday band qilishini ko'raylik. Bunday kristallda bitta $1s$ -zona, bitta $2s$ -zona, uchta $2p$ -zona hosil bo'lib, ularning har birida $2N$ tadan ruxsat etilgan energiyaviy sathlar bo'ladi. Bu holda barcha sathlar elektronlar bilan band bo'ladi. Zonalar kengligi kristall o'lchamiga bog'liq bo'lmaydi va kengligi bir necha eV tartibida bo'ladi. Ammo zonadagi sathlar zichligi kristall o'lchamiga bog'liq bo'ladi. Kristall o'lchami qancha katta bo'lsa, zonalar ichidagi sathlar zichligi shuncha katta bo'ladi. Odatdagi o'lchamli kristallarda kvaziuzlukli sathlar orasidagi masofa nihoyatda kichkina bo'ladi. Masalan, 1 m^3 hajmli kristallda 10^{28} ta atom bo'lib, ruxsat etilgan energiyaviy zonaning kengligi 1 eV bo'lganda bu zonadagi sathlar orasidagi masofa $\approx 10^{-23} \text{ eV}$ ni tashkil qiladi. Shuning uchun ham zonalar ichidagi sathlarni **kvaziuzluksiz sathlar** deb hisoblash mumkin. Ammo zonadagi sathlar soni chekli bo'lganligi uchun ular elektronlarning energiyaviy holatlar bo'yicha taqsimlanishida belgilovchi rol o'ynaydi. Alohida atomlardan kristall hosil bo'lganda kristallning potensial maydoni tashqi valent elektronlariga eng kuchli ta'sir qiladi. Shuning uchun kristallda bu elektronlarning energiyaviy holatlari ichki elektron-

larnikiga qaraganda eng ko'p o'zgaradi. Mos holda bu tashqi elektronlarning hosil qilgan ruxsat etilgan zonalarining kengligi kattalashib boradi. Aksincha taqiqlangan zonalar kengligi E_g kichiklashib borishi, hatto ayrim hollarda qo'shilib ketishi kuzatiladi. Umuman, zonalarining tartib nomeri ortishi bilan taqiqlangan zonalar uchun quyidagi tengsizliklar ketma-ketligi kuzatiladi: $E_{g1} > E_{g2} > E_{g3} > \dots$. Atomlarning ichki qavatidagi elektronlar yadrolari bilan kuchli bog'langanligi uchun kristallning potensial maydonining (qo'shni atomlarning) ta'siriga kam uchraydi. Shuning uchun ularning kristalldagi energiyaviy sathlari orasi (zichligi) yakkalangan atomlarnikidek bo'lib qolaveradi.

Kristallardagi elektronlarning energiyaviy zonalarining hosil bo'lishi haqidagi xulosaga kvant mexanikasining energiya-vaqt orasidagi quyidagi

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar \quad (7.58)$$

noaniqlik munosabatini tahlil qilish bilan ham kelish mumkin. Bu munosabatda Δt elektronning (E , $E + \Delta E$) oraliqdagi energiyaviy holatda bo'lish vaqti. Agar bu vaqt ma'lum bo'lsa, ΔE bu vaqt ichidagi energiyaviy sathning kengligini aniqlaydi. Yakkalangan atomda elektronning g'alayonlanish vaqti $\tau \approx 10^{-8}$ sek. U holda (7.58) ifodaga ko'ra energetik sathning kengligi $\Delta E \approx 10^{-7} \text{ eV}$ ekanligi kelib chiqadi. Kristallda valent elektronlar tunnel effekt tufayli atomdan atomga o'tib harakatlanadi. Hisoblashlarning ko'rsatishicha, kristalldagi elektronning tezligi taxminan $v \approx 10^5 \text{ m/s}$, biror atomning ta'sirida bo'lish vaqti taxminan $\tau \approx 10^{-15}$ sek. Agar bu vaqtni Δt deb olsak, (7.58) munosabatdan $\Delta E \approx 1 \text{ eV}$ ekanligi kelib chiqadi. Demak, yakkalangan atomdagi elektronning tabiiy energiyaviy kengligi o'rniga kristallda energiyaning 1 eV tartibidagi ruxsat etilgan zonasi vujudga keladi. Kristallda elektronning ruxsat etilgan energiyaviy sathlar zonolari taqiqlangan energiyaviy sathlar zonolari bilan almashinib kelishiga sabab kristallning davriy potensial maydonida elektronlarning turli fazali ikkita turg'un to'lqin hosil bo'lishi ekanligini biz yuqorida aytib o'tdik.

7.9. O'tkazgichlar, yarimo'tkazgichlar va dielektriklar.

Elektronlarning energiyaviy sathlar bo'yicha statistikasi

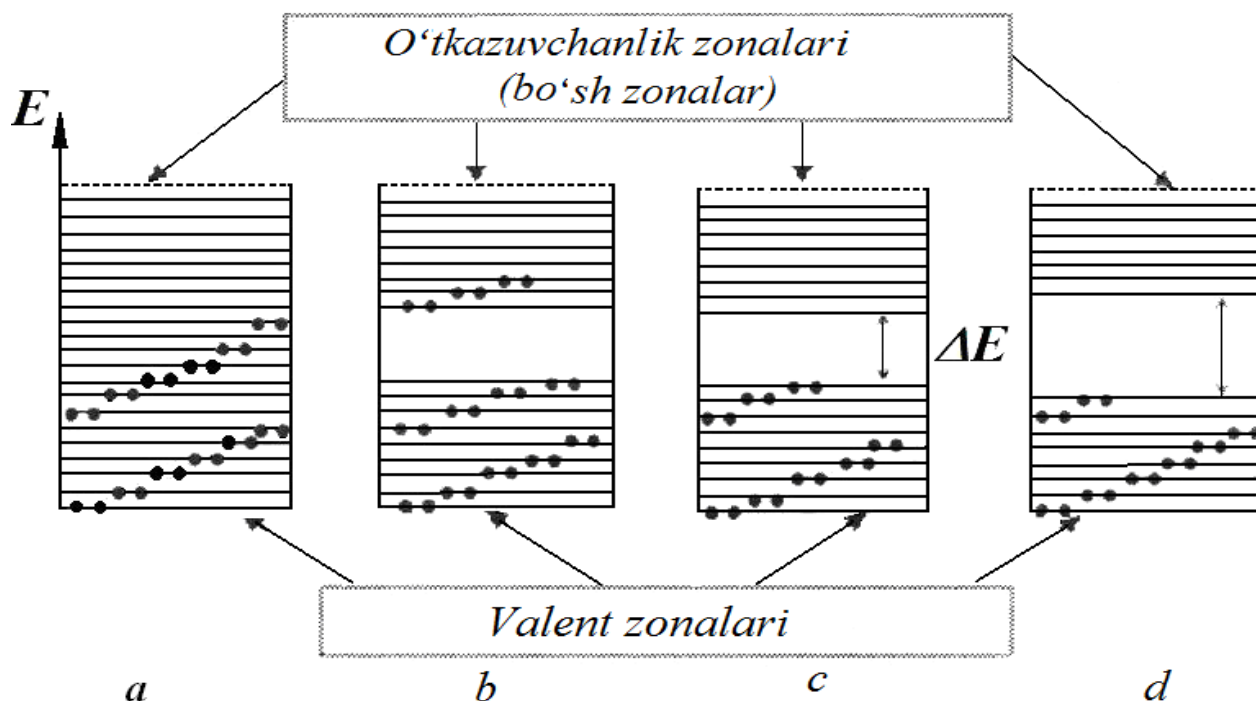
Qattiq jismlarning zonaviy nazariyasining asosiy qoidalaridan foydalanib, nima uchun qattiq jismlar o'tkazgichlar, yarimo'tkazgichlar va dielektriklarga bo'linish sabablarini ko'rib chiqamiz.

Yuqorida ko‘rib o‘tdikki, N ta atomdan tashkil topgan kristalldagi har bir ruxsat etilgan energiyaviy zona tarkibida N ta kvaziuzlukli energiyaviy sathlar bo‘ladi. Bu sathlarda Pauli prinsipiga ko‘ra qarama-qarshi spinli jami $2N$ ta elektron joylashishi mumkin. Kristalldagi elektronlarning cheklangan sonida **energiyaning minimallik prinsipiga** ko‘ra elektronlar bilan avval atomlar yadrolariga eng yaqin quyi zonalar to‘ldiriladi. Yuqori zonalar butunlay yoki qisman bo‘sh qoladi. Sathlari alohida atomlaridagi valent elektronlar bilan butunlay yoki qisman to‘ldirilgan eng yuqorigi zona **valent zonasi** hisoblanadi. Valent zonadan keyingi qisman to‘ldirilgan yoki butunlay bo‘sh qolgan zona **o‘tkazuvchanlik zonasi yoki bo‘sh zona** deyiladi. Valent zonasining yuqorigi so‘nggi sathi bilan bo‘sh zonaning pastki eng quyi sathi orasidagi energiya farqi **taqiqlangan zona** hisoblanadi, ya’ni elektronlar bu oraliqdagi energiyalarga ega bo‘la olmaydi. Temperatura ortishi bilan taqiqlangan zonaning kengligining bir muncha kamayishi kuzatiladi. Buning sababi temperaturaning ortishi bilan panjara doimiysining kattalashishib, kristallning potensial energiyasining kamayishidir. O‘z navbatida buning natijasida taqiqlangan zonaning kengligi kamayadi. Valent zonasining elektronlar bilan to‘ldirilish darajasi va bu zona bilan o‘tkazuvchanlik zonasining orasidagi taqiqlangan zonaning kengligiga qarab, qattiq jismlar o‘tkazgichlarga, yarimo‘tkazgichlarga va dielektriklarga bo‘linadi. Umuman, zonalarining elektronlar bilan to‘ldirilishining 7.15-rasmda tasvirlangandek, har xil variantlari bo‘lishi mumkin.

1. Valent zona bilan o‘tkazuvchanlik zonasi qo‘shilib, gibrid zona hosil qiladi (7.15 - *a* rasm). Bu gibrid zonaning quyi sathlarida elektronlar bo‘lib, yuqorigi sathlar bo‘sh bo‘ladi. Bunday zona tuzilishiga ega bo‘lgan qattiq jismlar elektr tokini yaxshi o‘tkazadi va **o‘tkazgichlar** hisoblanadi.

O‘tkazgich materiallarning tok o‘tkazishi quyidagicha tushuntiriladi. Yakkalangan atomdagi elektronlar bir energiyaviy sathdan boshqasiga o‘tgani kabi kristalldagi elektronlar ham bundan mustasno emas va hatto bir energiyaviy zonadan boshqasiga o‘tishi ham mumkin.

Elektronning quyi sathdan yuqori sathga o‘tishi ikkita shart bo‘lishini taqazo etadi: zonaning yuqori qismida bo‘sh energiyaviy sath bo‘lishi va elektronlarga taqiqlangan sath kengligiga teng yoki katta bo‘lgan qo‘shimcha energiya berilishi kerak. O‘tkazgich materiallarning o‘tkazuvchanlik zonasining yuqori qismlarida bo‘sh sathlar bo‘lishini aytib o‘tdik. Agar kristallni tok manbaiga ulasak, o‘tkazuvchanlik zonasining



7.15-rasm. O'tkazgich (*a* va *b*), yarimo'tkazgich (*c*) va dielektrik (*d*) elektronlarining energiyaviy zonalari diagrammasi.

quyi sathlaridagi elektronlar tok manbasining ishi tufayli energiyalari ortib yuqoriroq sathlarga o'tadi. Shu tariqa elektronlarning tartibli harakati vujudga keladi, ya'ni elektr toki vujudga keladi. O'tkazuvchanlikning ushbu turi ishqoriy metallarda kuzatiladi.

2. Valent va o'tkazuvchanlik zonalari orasida taqiqlangan zona ΔE saqlanib qolgan bo'ladi. Ammo kristallda oxirgi o'tkazuvchanlik zonasining quyi sathlarida elektronlar bo'lib, yuqori sathlari bo'sh qolgan (7.15- *b* rasm). Albatta energiyaviy zonalari bunday tuzilishga ega bo'lgan materiallar ham hozirgina qilgan mulohazalarga ko'ra, elektr tokini yaxshi o'tkazadi va o'tkazgichlar hisoblanadi. Elektr o'tkazuvchanlikning bu tipiga ega bo'lgan materiallarga Mendeleyev davriy sistemasining I guruh metallari misol bo'ladi. Ba'zi kristalllarda esa o'tkazuvchanlik zonasida butunlay elektronlar bo'lmasdan valent zonasining quyi sathlarida elektronlar bo'lib, yuqori sathlari bo'sh bo'ladi. Albatta bunday kristallar ham o'tkazgich bo'ladi. Chunki valent zonasining quyi sathlaridagi elektronlar elektr maydoni ta'sirida yuqori sathlarga o'tishi sodir bo'ladi. Ko'pgina metallarda elektr o'tkazuvchanlik mana shunday mexanizm orqali sodir bo'ladi. O'tkazgichlarda erkin (o'tkazuvchanlik) elektronlarining zichligi juda katta hajm birligida kamida (bir valentli

atomlardan tuzilgan o'tkazgich materiallarda) kristallni tashkil qilgan hajm birligidagi atomlar soniga teng bo'ladi (1 sm^3 hajmda 10^{23} ta) va temperaturalari ortishi bilan sezilarli o'zgarmaydi. Ammo temperatura ortishi kristall panjaradagi atomlarning issiqlik tebranishlarining amplitudasini ortishiga olib keladi. Bu esa tebranayotgan atomlarda erkin elektronlarning kuchliroq sochilishiga, binobarin, o'tkazgich materiallarda temperatura ortishi bilan elektr qarshiligi ortadi.

3. Agar kristalldagi valent zona sathlari elektronlar bilan to'lgan bo'lib, yuqorigi bo'sh zonagacha bo'lgan taqiqlangan zona kengligi 2 eV atrofida bo'lsa (7.15- rasm, c), tashqi elektr maydoni ta'sirida quyi (valent) zonadagi elektronlar navbatdagi bo'sh zonaga o'ta olmaydi va tok hosil bo'lmaydi. Ammo kristall temperaturasi $T > 0$ bo'lgan hollarda issiqlik energiyasi tufayli valent zonadan bir muncha kam miqdordagi elektronlar yuqorigi bo'sh zonaga o'tib zaif o'tkazuvchanlikni hosil qiladi. Bu holda bo'sh zona o'tkazuvchanlik zonasiga aylanadi. Bunday materiallar **yarimo'tkazgichlar** hisoblanib, odatda **xususiy yarimo'tkazgichlar** deb ataladi. Yarimo'tkazgichlarning tipik vakili bo'lgan kremniy (Si) va germaniy (Ge) kristallarida taqiqlangan zonaning kengligi mos holda 0.7 va 1.15 eV . Yarimo'tkazgichning valent zonasidan elektronni bo'sh zonaga o'tishi uchun kerak bo'lgan energiya kamida taqiqlangan zona kengligiga teng bo'lishi kerak. Bu energiya **yarimo'tkazgichning xususiy o'tkazuvchanligining aktivatsiya energiyasi** deb ataladi. Yarimo'tkazgichlarning ρ solishtirma qarshiligi T temperaturoga eksponensial bog'lanishda bo'lishi aniqlangan:

$$\rho = \rho_0 \ell^{-\Delta W_0 / 2k_B T},$$

bunda ΔW_0 - aktivatsiya energiyasi, k_B – Bolsman doimiysi. Bu bog'lanishdan ko'rinib turibdiki, temperatura ortishi bilan yarimo'tkazgichning elektr qarshiligi kamayadi, sababi temperatura ortishi bilan valent zonasidan o'tkazuvchanlik zonasiga o'tadigan elektronlar soni ortadi. Elektronlarning bunday o'tishi faqat temperatura ta'siridagina emas, balki biror tashqi ta'sir, masalan, yorug'lik nurlari, radiatsiya ta'siri, deformatsiya tufayli ham yarimo'tkazgichlarning valent zonasidan bo'sh zonaga o'tgan elektronlar soni ortib boradi. Shuning uchun ham yarimo'tkazgichlarning elektr qarshiligi temperatura ortishi bilan yoki sanab o'tilgan tashqi ta'sirlar ta'sirida kamayib boradi. Yarimo'tkazgich materiallarga C (olmos), Te, Se, Si, Ge, GaAs, CdTe kabi materiallarni misol

qilib keltirish mumkin.

Temperatura ta'sirida valent zonasining elektronlardan bo'shagan yuqorigi sathlarida bo'sh joylar “kovak” lar qoladi. Agar tashqi elektr maydon ta'sir qilmasa kovaklar saqlanadi. Bu kovaklarga elektr maydon ta'sirida valent zonasining quyi sathlaridan elektronlar kelib joylashadi va o'z navbatida ularning o'rnida kovaklar qoladi. Shu tariqa elektr maydon ta'sirida elektronlar va kovaklarning qarama qarshi yo'nalishdagi tartibli harakati - elektr toki hosil bo'ladi. Kovaklarning harakati miqdori elektron zaryadiga teng bo'lgan musbat zaryadlarning harakatiga ekvivalent bo'ladi. Yarimo'tkazgichlarning solishtirma elektr o'tkazuvchanligi elektronlar va “kovak”lar o'tkazuvchanliklarining yig'indisidan iborat bo'ladi:

$$\gamma = en_e u_e + en_k u_k,$$

bunda e - tok taishuvchilarning birlik zaryadlarining (elektron va “kovak”larning) absolyut qiymatlari, n_e - va n_k - mos holda elektronlarning va “kovak”larning teng miqdordagi konsentrsiyalari, u_e - va u_k – mos holda elektronlar va kvaklarning effektiv massalari tufayli turlicha bo'lgan harakatchanliklari.

4. Agar kristalldagi valent zona sathlari elektronlar bilan to'lgan bo'lib, yuqorigi bo'sh zonagacha bo'lgan taqiqlangan zona kengligi 2 – 3 eV dan katta bo'lsa (7.15-rasm, d) na faqat tashqi elektr maydoni ta'sirida balki yuqori temperaturalarda ham quyi (valent) zonadagi elektronlar navbatdagi bo'sh zonaga o'ta olmaydi va tok hosil bo'lmaydi. Bunday materiallar **dielektriklar** deyiladi. NaCl, olmos, forfor, shisha, kvars, rezina, polimerlar, turli gazlar dielektrik materiallardir. Dielektrik materiallarning yaqqol vakili hisoblangan olmosning $T = 0\ K$ temperaturadagi taqiqlangan zonasining kengligi 5.4 eV ni tashkil qiladi. Shuni ham aytib o'tish kerakki, temperatura ortishi bilan dielektriklarning valentlik zonasidan bo'sh zonasiga o'tgan erkin elektronlar soni ortib boradi. Masalan, xona temperaturasida olmosda erkin elektronlar soni $10^4\ m^{-3}$ va solishtirma qarshiligi $\rho \approx 10^8\ Om \cdot m$ bo'lsa, $T = 600\ K$ temperaturada erkin elektronlar soni bir necha tartibga ortib, solishtirma qarshiligi yarimo'tkazgich germaniyning xona haroratidagi solishtirma qarshiligiga ($\rho \approx 0.48\ Om \cdot m$) tenglashib qoladi. Bu misoldan ko'rinib turibdiki, jismlarni yarimo'tkazgich va dielektriklarga bo'lish bir muncha shartlidir. Shunday qilib, dielektrik va yarimo'tkazgich materiallarning zonaviy tuzilishidagi farq valent va o'tkazuvchanlik zonolari orasidagi

taqiqlangan zonaning (energiyaviy tirqish) kengligi tufayli paydo bo'lar ekan. Umuman, energiyaviy zonalarning elektronlar bilan to'ldirilish xarakteri moddaning elektr xossasini belgilaydi. Energiyaviy zonalarning elektronlar bilan to'ldirilish xarakteri esa qattiq jismni tashkil etgan atomlarning elektron strukturasiga, shuningdek, kristallning kristall pan-jarasiga va ximiyaviy bog'lanish xarakteriga bog'liq bo'ladi. Masalan, uglerodning grafit (geksagonal) modifikatsiyasi juda yaxshi o'tkazgich bo'lsa, uning olmos (kub) modifikatsiyasi yaxshi dielektrikdir. Bu modifikatsiyalardagi ximiyaviy bog'lanish kuchlari ham har xildir (III Bob).

Endi kristalldagi elektronning biror T temperaturaga mos keluvchi E energiyali sathni to'ldirish ehtimolini ko'ramiz. Elektronlar yarim spinli ($\pm 1/2$) kvant zarralari bo'lganligi uchun issiqlik muvozanat holatida Fermi-Dirak statistikasiga bo'ysunadi. Shunga ko'ra kristalldagi elektronning T temperaturada E energiyali sathni band qilish ehtimoli quyidagicha bo'ladi:

$$f_e(E, T) = \frac{1}{1 + \exp \frac{E - F}{k_B T}}, \quad (7.59)$$

bunda T -temperatura, E –elektronning T temperaturaga mos keluvchi sathdagi energiyasi, **F - Fermi sathi, u sistemaning η elektroximiyaviy potentsialiga** teng bo'lgan energiya: $F = \eta$. Bu kattalik sistemaga izobar-izotermik sharoitda elektron qo'shilgandagi sistemaning erkin energiyasining ortishiga teng bo'lgan kattalikdir. Metallarda $T = 0$ K temperaturada to'ldirilgan sathlardagi barcha elektronlar Fermi-Dirak statistikasiga bo'ysunadi. To'ldirilgan sathlarning eng yuqorisidan keyingi sathlarda elektronlar bo'lmaydi. Demak, **metallarda Fermi sathi** mutlaq nol temperaturada elektronlar ega bo'lgan maksimal energiyadir.

Yarimo'tkazgichlarda o'tkazuvchanlik zonasidagi sathlarda elektronlar bo'lmaganligi (kovaklar bo'lganligi) uchun sathlarda elektronlarning bo'lmaslik (sathlarning kovaklar bilan band bo'lish) ehtimoli quyidagicha aniqlanadi:

$$f_k(E, T) = \frac{1}{1 + \exp \frac{F - E}{k_B T}}.$$

Ushbu ifodadan ko'rinib turibdiki, kovaklarning energiyaviy sathlar bo'yicha temperaturaga bog'liq holda taqsimlanishi elektronlarnikidek ekan. Ammo energiyani hisoblash valent zonasining eng ustidagi sathdan boshlanadi. Yarimo'tkazgichlarda odatda ximiyaviy potensial $\eta < 0$ bo'la-

di. Shuning uchun ularda Fermi sathi, metallardagidan farqli holda, taqiqlangan sonaning o'rtasida joylashgan bo'ladi.

7.10. Kristalldagi elektronlarning tashqi elektr maydonidagi harakati

Kristallning qisman to'ldirilgan sathli zonasidagi elektronlar tashqi elektr maydoni bo'lmaganda tartibsiz harakatda bo'ladi. Agar kristall tashqi magnit maydoniga joylashtirilsa har bir elektronga maydon yo'nalishiga teskari yo'nalgan quyidagi tenglik bilan aniqlanadigan elektr kuchi F ta'sir qiladi:

$$F = -e\xi, \quad (7.60)$$

bunda e -elektron zaryadi, ξ - tashqi elektr maydon kuchlanganligi. Bu kuch ta'sirida elektron olgan tezlanishni hisoblaymiz. De Broyl formula-siga ko'ra λ to'lqin uzunlikka ega bo'lgan erkin elektronning impulsi p_e uning to'qin soni k bilan quyidagicha bog'lanishda bo'ladi:

$$p_e = h/\lambda = \frac{\hbar}{\lambda/2\pi} = \hbar k. \quad (7.61)$$

Bu tenglamaga ko'ra, elektronning ilgarilama harakat tezligi

$$v = p_e/m_e = \frac{\hbar}{m_e} k \quad (7.62)$$

bo'ladi, bunda m_e - elektronning massasi. Elektron energiyasi E bilan impulsi p_e orasidagi bog'lanish

$$E = \frac{p_e^2}{2m_e} \quad (7.63)$$

ekanligi ma'lum. (7.61)-(7.63) ifodalardan foydalansak, energiya uchun

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_e} k^2 \quad (7.64)$$

ekanligi kelib chiqadi. Ushbu oxirgi tenglikning k bo'yicha differensialini olsak, quyidagi tenglamani hosil qilamiz:

$$k = \frac{m_e}{\hbar^2} \frac{dE}{dk}.$$

Bu ifodani (7.61) va (7.62) tengliklarga qo‘ysak, mos holda quyidagi tengliklarni olamiz:

$$p_e = \frac{m_e}{\hbar} \frac{dE}{dk}, \quad v = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} dt. \quad (7.65)$$

Elektronning elektr maydon ta’sirida olgan tezlanishi

$$dv/dt = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \left(\frac{dE}{dk} \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{dk}{dt} \quad (7.66)$$

bo‘ladi. Biror dt vaqt ichida elektr maydonining elektronni ko‘chirishdagi bajargan ishi (7.65) ifodaga ko‘ra, elektron energiyasining E qugidagi miqdorga ortishiga olib keladi:

$$dA = F v dt = \frac{F}{\hbar} \frac{dE}{dk} dt = dE. \quad (7.67)$$

Bu ifodadan

$$\frac{dk}{dt} = \frac{F}{\hbar} \quad (7.68)$$

ekanligi kelib chiqadi. So‘nggi (7.68) ifodani tezlanishning (7.66) ifodasiga qo‘yib, quyidagi tenglikni olamiz:

$$dv/dt = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{F}{\hbar}. \quad (7.69)$$

(7.59) ifodani quyidagi ko‘rinishda yozamiz:

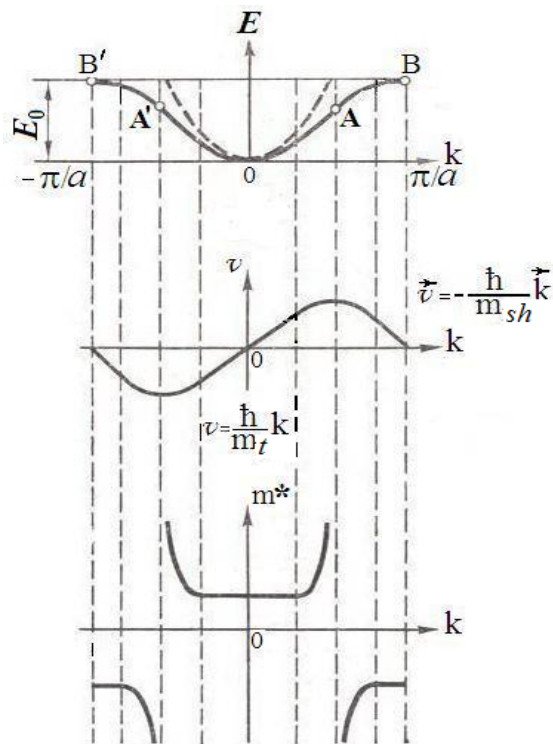
$$F = \left(\frac{\hbar^2}{d^2 E / dk^2} \right) dv/dt. \quad (7.70)$$

Tabiiyki, bu ifoda qaralayotgan masala uchun Nyutonning ikkinchi qonunini ifodalaydi. (7.70) formulani klassik mexanikadagi Nyutonning ikkinchi qonunining $F = m \cdot dv/dt$ ifodasi bilan taqqoslasak, qavs ichidagi ifoda massa rolini bajaryotganini ko‘ramiz. Ammo bu massa elektronning haqiqiy m_e massasdan butunlay farq qilishi ma’lum bo‘ldi. Shuning uchun va (7.70) tenglamadagi massa rolini bajaruvchi qavs

ichidagi ifoda massa birligiga ega bo'lganligi uchun **effektiv massa** deb ataldi:

$$m^* = \left(\frac{\hbar^2}{d^2 E / dk^2} \right). \quad (7.71)$$

Effektiv massa tashqi elektr maydonida harakat qilayotgan kvazizarraga (elektronlarga va kovaklarga) kristall panjaraning davriy potensial maydonining ta'sirini ifodalaydi. Bundan kelib chiqadiki, kristalldagi elektronlar va kovaklar tashqi elektr maydon ta'sirida m^* massali erkin elektron kabi harakatlanadi. Aniqroq qilib aytsak, **effektiv massa** elektronning kristall panjaradagi harakat tenglamasida elektron (yoki kovak) bilan kristall panjaraning ta'sirlashish darajasini va xarakterini aks ettiruvchi kattalikdir. Umuman, elektronning effektiv massasi to'liq vektorining turli yo'nalishida turlicha qiymatga ega bo'lgan anizotrop kattalik bo'lib, $\vec{k}$ vektorning hosilasi orqali hisoblanadigan ikkinchi darajali tenzor kattalikdir. U elektronning gravitatsiyaviy va inersiyaviy xossalari belgilamaydi. m^* elektronning odatdagi (tinch holatdagi) m_e massasidan katta ham, kichkina ham bo'lishi mumkin, hatto manfiy bo'lishi ham mumkin. 6.16-rasmda kristallning davriy potensial maydonidagi harakatlanayotgan elektronning $E(k)$ - to'la energiyasining, $v_e(k)$ - ilgari harakati tezligining va $m^*(k)$ - effektiv massasining birinchi Brilluyen zonasi sohasida $\vec{k}$ to'liq vektorining 0 dan $\pm \pi/a$ oraliqdagi o'zgarishiga bog'lanish grafigi berilgan. Energiyaviy zonaning tagida $E(k)$ bog'lanish erkin elektron uchun bog'lanishdan kam farq qiladi. Mos holda elektronning effektiv massasi kristallning energiyaviy zonasining tagida noldan katta ($m^* = m_t > 0$), ya'ni musbat qiymatga ega va erkin elektronning massasiga yaqin. So'ngra $\pi/2a$ (A) nuqttagacha qiymati ortib borib, zonaning o'rtasida $\pi/2a$ nuqtada uzilishga uchraydi va qiymati noaniq ($m^* \rightarrow \infty$) bo'lib qoladi. Bunga sabab bu nuqtada ikkinchi tartibli hosila $\frac{d^2 E}{dk^2} = 0$ ekanligidir. Bu holda (7.71) ifodaga ko'ra, m^* cheksizlikka aylanadi. Bundan elektron $\pi/2a$ A nuqtaga mos keluvchi energetik sathda (zonaning o'rtasida) bo'lganda tashqi maydon unga tezlanish bera olmasligi kelib chiqadi. Effektiv massa $\pi/2a$ nuqtadan keyin ishorasini o'zgartirib, zonaning oxirgi sathidagi B nuqtada (shipida) chekli manfiy qiymatga ega bo'ladi: $m^* = m_{sh}$. Uning manfiy qiyma -



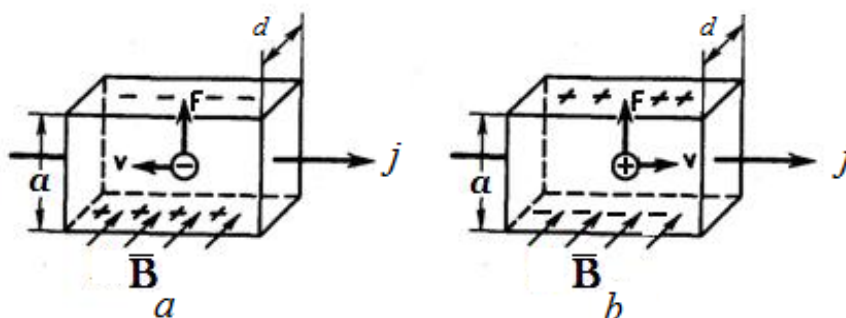
7.16. Birinchi Brillyuen zonasidagi elektronning $E(k)$ to'la energiyasining, v tezligining va m^* effektiv massasining to'la soniga bog'lanish grafigi.

tiga ega bo'lib qolishi valent zonasining yuqorigi sathlaridagi elektronlar tashqi elektr maydon kuchi ta'sirida bu kuch yo'nalishiga teskari yo'nalgan tezlanish olishini (tezlikning kamayishini) bildiradi. Bir qarashda bu g'ayri tabiiydek ko'rinadi. Ammo buni 7.8 - bandda aytib o'tganimizdek, temperatura ta'sirida valent zonasining yuqorigi sathlaridan elektron o'tkazuvchanlik zonasiga o'tib ketishini, o'rni esa kovak bo'lib qolishi va tashqi elektr maydon ta'sirida bu kovaklar o'rniga valent zonaning pastki qismidagi elektron o'tishi bilan tushuntirish mumkin. Elektron ustki kovak o'rniga o'tib, endi uning o'rni kovak bo'lib qoladi. Tashqi elektr maydonida bu jarayon davomli jarayondir. Ketma-ket hosil bo'ladigan kovaklarning o'rniga pastki sathlardagi elektronlar navbat bilan o'tib, kovaklarni pastki sathlarga siljishi davom etadi. Kovakni pastki sathlarga o'tishi zaryadi elektron zaryadiga teng, lekin qarama-qarshi **musbat ishorali va manfiy massali** (tezlanish yo'nalishi elektr maydon kuchi yo'nalishiga teskari) kvazizarraning harakatiga teng kuchlidir. Shu tariqa kristalda tok faqat o'tkazuvchanlik zonasidagi elektronlarning harakati bilangina emas, balki valent zonasidagi kovaklar harakati tufayli ham hosil bo'ladi. Ayrim yarimo'tkazgichlardagi kovaklarning effektiv massasi elektronlarning effektiv massasiga nisbatan katta bo'lganligi

uchun elektr tokini asosan elektronlar oqimi hosil qiladi. Bunday yarimo'tkazgichlarni **elektron o'tkazuvchanli yarimo'tkazgichlar** yoki **n tipdagi yarimo'tkazgichlar** deyiladi (n -negativ (manfiy) so'zidan olingan). Ayrim hollarda aksincha elektr o'tkazuvchanlikdagi zaryad tashuvchilarni asosan kovaklar hosil qiladi. Bunday yarimo'tkazgichlarni **kovak o'tkazuvchanli yarimo'tkazgichlar** yoki **p tipdagi yarimo'tkazgichlar** deb ataladi (p - pozitiv (musbat) so'zidan olingan). Ko'proq yarimo'tkazgichli materiallarga xos bo'lgan kovakli o'tkazuvchanlik katta amaliy ahamiyatga ega. Yarimo'tkazgichli diodlarning va triodlarning ishlashi ularda bir vaqtda kovakli va elektron o'tkazuvchanlik mavjudligi bilan bevosita bog'liqdir.

7.11. Kovaklarning musbat zaryadga va manfiy massaga ega ekanligini tajribalarda tasdiqlanishi

Kovaklarning birlik musbat zaryadga va manfiy effektiv massaga ega ekanligi tajribalarda tasdiqlangan. Kovaklarning musbat zaryadga ega ekanligi yarimo'tkazgichlarda Xoll effektini o'rganishda yaqqol namoyon bo'ladi. Tok o'tayotgan o'tkazgich yoki elektron (n –tipdagi) yarimo'kazgich plastinkani magnit maydon induksiya vektori $\vec{B}$ bo'lgan magnit maydoniga joylashtirilsa, Lorens kuchi ta'sirida v tezlik bilan harakatlanayotgan elektronlarning ma'lum bir tomonga og'ishi kuzatiladi. Plastinkani qarama-qarshi tomonida musbat zaryadlar to'planib, potentsiallar farqi hosil bo'ladi (7.17 - rasm, a). Bu hodisa **Xoll effekti** nomini olgan. Kovakli o'tkazuvchanlikka ega bo'lgan yarimo'tkazgichda plastinka tomonlarida to'plangan zaryadlar o'tkazgich plastinkadan farqli holda qarama-qarshi ishoraga ega bo'ladi (7.17-rasm, b). Namuna sirtida zaryadlar ularning hosil qilgan elektr maydoni magnit maydonining ta'sirini muvozanatlash uchun yetarli bo'lguncha to'planadi. Magnit va elektr maydonlari kuchlarining muvozanat shartidan namuna sirtida hosil bo'l-



7.17-rasm. Xoll effektini elektron o'tkazgichli (a) va kovak o'tkazgichli yarimo'tkazgichli (b) materiallarda namoyon bo'lishi.

gan potentsiallar farqini aniqlash mumkin:

$$U = \varphi_1 - \varphi_2 = R \frac{BI}{d}, \quad (7.72)$$

bunda B -magnit maydon induksiya, I – tok kuchi, d – namunaning magnit induksiya vektori $\vec{B}$ yo‘nalishidagi chiziqli o‘lchami, R - proporsionallik koeffitsiyenti bo‘lib, turli materiallar uchun turlicha qiymatga ega. U **Xoll doimiysi** deb ataladi. Xoll doimiysi

$$R = \frac{1}{nq}, \quad (7.73)$$

tenglik orqali aniqlanadi, bunda n – tok elituvchi zaryadlarning konsentratsiyasi (hajm birligidagi miqdori), q – zaryad miqdori. Xoll doimiysining ishorasiga qarab yarimo‘tkazgich yoki o‘tkazgich materialning o‘tkazuvchanligi qanday tipga (elektron yoki kovakli o‘tkazuvchanlikka) mansubligi haqida xulosa qilish mumkin. Elektron o‘tkazuvchanlikda $q = -e$ bo‘ladi (e - elektron zaryadi) va Xoll doimiysi noldan kichik bo‘ladi: $R < 0$. Kovak o‘tkazuvchanlikda kovak zaryadi musbat bo‘ladi ($q = e$) va Xoll doimiysi ham musbat kattalik bo‘ladi: $R > 0$. Xoll doimiysi orqali tok elituvchi zaryadlar konsentratsiyasini aniqlash mumkin.

Elektr o‘tkazuvchanlikda qatnashuvchi elektronlar va kovaklarning effektiv massasi **siklotron rezonansi** metodi orqali aniqlanadi. Buning uchun o‘rganilayotgan kristall ma’lum bir yo‘nalishdagi magnit induksiya ega bo‘lgan magnit maydoniga joylashtiriladi. Namunadagi v tezlikka ega bo‘lgan zaryad tashuvchilar Lorens kuchi $F = qvB$ ta’siri ostida magnit induksiya yo‘nalishiga perpendikulyar tekislikda r radiusli aylana bo‘yicha harakatlanadi. Bu yerda B magnit maydonining o‘rganilayotgan kristalldagi magnit induksiya. Lorens kuchi markazga intil - ma kuch bo‘lganligi uchun quyidagi tenglik bajariladi:

$$qvB = m_q v^2 / r,$$

bunda m_q - zaryad tashuvchining massasi. Bundan foydalanib, burchak tezlik topiladi:

$$\omega_{sik} = qB / m_q. \quad (7.74)$$

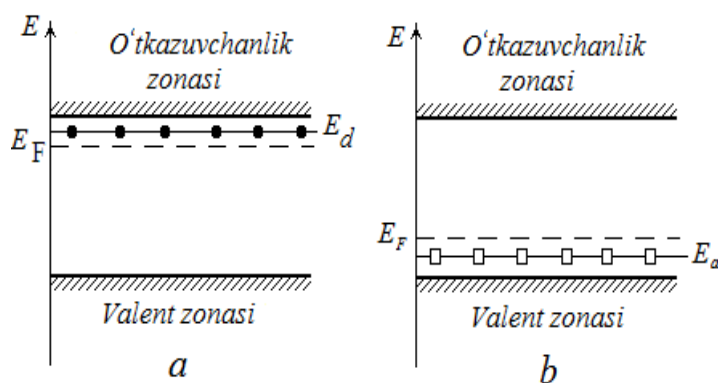
Bu burchak tezlik **siklotron chastota** deb ham ataladi. (7.74) tenglikka ko‘ra, siklotron chastota elektron tezligiga bog‘liq emasligi kelib chiqadi.

Agar magnit maydonidagi zaryad tashuvchiga ω_E chastotali bir tashqi jinsli davriy E elektr maydoni ham ta'sir ettirilsa, zaryad tashuvchi yutadigan elektromagnit maydon energiyasi chastotalar farqiga teng bo'lgan $\Delta\omega = \omega_{sik} - \omega_E$ chastota bilan yutiladigan vaqtning davriy funksiyasi bo'ladi. $\omega_{sik} \approx \omega_E = \omega_{rez}$. shart bajarilganda energiyaning zaryad tashuvchi tomonidan yutilishining keskin ortishi, ya'ni **siklotron rezonansi** sodir bo'ladi. Zaryad tashuvchining energiyasining ortishi uning trayektoriyasining diametrini ortishiga va n_q miqdordagi zaryad tashuvchilarning qo'shimcha v tezlik olishiga sabab bo'ladi. Bu esa o'z navbatida $n_q q v / E$ ifodaga proporsional bo'lgan elektr o'tkazuvchanlikning ortishiga olib keladi. Magnit induksiyasini va rezonans chastotani bilgan holda (7.74) tenglamadan foydalanib, elektron yoki kovakning effektiv massasini topish mumkin: $m_q = m^*$.

7.12. Kristallardagi kirishma atomlarning energiya sathlari

Biz shu vaqtgacha elektronlar energiyasining zonaviy tuzilish manzarasini ideal tuzilishdagi kristallar uchun ularda kirishmalar va nuqsonlar bo'lmagan hol uchun ko'rdik. Agar kristallda kirishma atomlar yoki boshqa nuqsonlar bo'lsa, ular kristallning energiyaviy spektrini o'zgartirishi mumkin. Faqat ideal (mukammal) kristallarning taqiqlangan zonasida energiyaviy sathlar bo'lmaydi. Real kristallar panjarasida har doim nuqson bo'ladi. Ammo nuqsonlar miqdori kristallning bog'lanish kuchlarini (tuzilishini) o'zgartirib yuboradigan darajada ko'p bo'lishi kerak emas. Agar kristalldagi nuqsonlar (yoki kirishma atomlar) miqdori uncha ko'p bo'lmasa ular bir-birlaridan anchagina uzoq masofada joylashadi. Shuning uchun faqat kristallning nuqson sohasidagi elektronlarning energiyaviy holati o'zgaradi. Bu hol ideal kristallga to'g'ri kelgan zonalar strukturasiga qo'shimcha ravishda lokallashgan (o'troqlashgan) energiyaviy holatlarning paydo bo'lishiga olib keladi. Bunday qo'shimcha energiyaviy holatlarning soni nuqsonlar soniga teng bo'lishi ham mumkin, agar nuqsonlar bilan bir qancha qo'shimcha energiyaviy holatlar (sathlar) bog'liq bo'lsa, ko'p bo'lishi ham mumkin. Lokal (o'troq) energiyaviy sathlar nuqson yaqinidagi sohalar bilan cheklangan bo'ladi. Bu energiyaviy sathlardagi elektronlar nuqsonlarga bog'langan bo'ladi. Shuning uchun ular elektr o'tkazuvchanlikda qatnasha olmaydi. Demak, nuqsonlar hosil qilgan energiyaviy sathlar kristallning taqiqlangan zonasida joylashgan bo'ladi. Qo'shimcha sathlarning paydo bo'lish mexanizmini birmuncha batafsilroq ko'rib chiqamiz.

Kristallda kirishma atom yoki strukturadagi nuqson bo'lishi kristall panjarasining $U(r)$ potensial energiyasiga qo'shimcha ravishda markazi kirishma atom yoki nuqsonda bo'lgan kichik hajmda yetarlicha kuchli qo'zg'alish potensial energiyasini vujudga keltiradi. Bu hol Shredinger tenglamasining yechimini qanoatlantiruvchi E energiyaning ruxsat etilgan zonaga to'g'ri keladigan energiyaviy sathlariga qo'shimcha ravishda valent va bo'sh zona orasidagi taqiqlangan zonaga mos keluvchi diskret sathlarni ajrab chiqishiga sabab bo'ladi. Agar kirishma atomining valentligi yarimo'tkazgich materialni tashkil qilgan asosiy element atomining valentligidan bitta katta bo'lsa, kristallning valent zonasida bu kirishmaning ortiqcha valent elektroniga joy bo'lmaydi. Shu bilan birga kristallning bo'sh zonasiga o'tishi uchun bu ortiqcha elektronning energiyasi yetarli bo'lmaydi va u yarimo'tkazgich materialning o'tkazuvchanlik zonasining tagidan atigi elektron-voltning bir necha yuzdan bir ulushiga to'g'ri keladigan masofada joylashib, o'z sathini hosil qiladi (7.18-rasm, *a*). Kristallda kirishma elektronlari hosil qilgan bunday sathlari **donor sathlar** deb ataladi. Donor sathlar hosil qiluvchi kirishma atom **donor atom** deb ataladi. Donor sathlardagi elektronlarni o'tkazuvchanlikning bo'sh zonasiga o'tkazish uchun uncha katta bo'lmagan ΔE_d energiya yetarli bo'ladi. Masalan, kremniyga arsenid (As) kirishmasi kiritilsa, $\Delta E_d = 0.054 \text{ eV}$ bo'lib, tashqi elektr maydonida bu elektronlar o'tkazuvchanlik zonasiga o'tib, yarimo'tkazgichda **kirishmali elektron o'tkazuvchanlik tokini** hosil qiladi. Mazkur material *n*- tipdagi yarimo'tkazgich hisoblanadi. Bunday tipdagi o'tkazuvchanlik to'rt valentlik germaniyga besh valentlik fosfor, arsenid yoki surma kabi kirishmalar kiritilganda ham kuzatiladi. Agar yarimo'tkazgich materialga asosiy atomining valent elektronidan valentligi bittaga kam bo'lgan kirishma atom kiritilsa, u holda kirishma atomning valent elektronlari qo'shni



7.18-rasm. Yarimo'tkazgich materiallarda donor (E_d) (*a*), akseptor (E_a) (*b*) va Fermi (E_F) sathlarining joylashuvi.

atomlarning to'rtta valent elektronlari bilan tugal kovalent bog'lanish hosil qilish uchun yetarli bo'lmaydi. Bu holda kirishma atom bog'lanish uchun yetmagan bitta elektronni kristallning asosiy atomining valent zonasidan yulib oladi. Shu tariqa kirishma atom yaqinida ortiqcha elektron hosil bo'ladi. Lekin bu elektron kirishma atom bilan bog'langan bo'lgani uchun elektr toki hosil bo'lishida ishtirok eta olmaydi. Endi kristallning asosiy atomining valent zonasining shipida musbat zaryadli kovak qoladi. Uning energiyaviy sathi valent zonasining shipiga juda yaqin joyda bo'ladi (7.18-rasm, *b*). Bunday sathlar **akseptor sathlar yoki yopishgan sathlar** deyiladi. Akseptor sath bilan valent zonasining shipi orasidagi energiya farqi juda kichkina. Masalan, kremniyning kristall panjarasiga bor kirishmasi kiritilsa, bu farq atigi $\Delta E_a = 0.08 \text{ eV}$ ekanligi aniqlangan. Shuning uchun tashqi elektr maydoni ta'sirida kovakka valent zonasining pastki sathidan elektron o'tadi va shu tariqa kovakning valent zonasining pastki sathlariga qarab siljishlari sodir bo'ladi va tok hosil qiladi. Bunday tok o'tkazuvchanlik **kirishmali kovak o'tkazuvchanlik** deyiladi. Kovak o'tkazuvchanlikka ega bo'lgan yarimo'tkazgich **kovak o'tkazuvchan yoki *p*-tipdagi yarimo'tkazgich** deyiladi (*p*-pozitiv, musbat so'zini ifodalaydi). Masalan, bunday hol to'rt valentli germaniy kristallida germaniy atomi uch valentli bor, alyuminiy yoki indiyning kirishma atomlari bilan almashganda kuzatiladi. Kristallning asosiy atomining valentligidan valentligi bitta kam bo'lgan bunday kirishma atomlar **akseptor atomlar** deb ataladi. Yarimo'tkazgich materiallarga bir vaqtda ham donor, ham akseptor atomlar kirishmasi kiritilsa o'tkazuvchanlik xarakterini konsentratsiyasi ko'proq bo'lgan kirishma aniqlaydi. Agar yarimo'tkazgichga donor va akseptor atomlari kiritilsa, yarimo'tkazgich **kirishmali aralash o'tkazuvchanlikka** ega bo'lib qoladi. Qanday o'tkazuvchanlik bo'lmasin yarimo'tkazgichlarning elektr o'tkazuvchanligi metallarning (o'tkazgichlarning) o'tkazuvchanligidan ko'p marta kichik bo'ladi.

Odatdagi temperaturada *n*-tipdagi yarimo'tkazgichlarda Fermi sathi taqiqlangan zonaning ustki tomonida donor sathidan pastroqda, *p*-tipdagi esa taqiqlangan zonaning pastki tomonida akseptor sathidan yuqoriroqda joylashgan bo'ladi (7.18-rasm). Temperatura ortishi bilan Fermi sathi har ikkala tipdagi yarimo'tkazgichda ham taqiqlangan zonaning o'rtasiga siljiydi. Temperatura ortishi bilan tokning kirishmali tashuvchilari tezda to'yinishga erishadi. **To'yinishda** donor sathdagi barcha elektronlar o'tkazuvchanlik zonasiga o'tib bo'ladi. Akseptor sathdagi

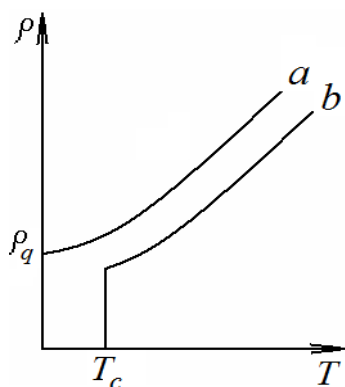
barcha kovaklar esa valent zonasidan o'tgan elektronlar bilan to'ladi. Temperaturaning undan keyingi ko'tarilishida yarimo'tkazgichning xususiy o'tkazuvchanligi ustun kela boshlaydi. Bunga sabab elektronlarni valent zonadan bevosita o'tkazuvchanlik zonasiga o'tishidir. Shunday qilib, past temperaturalarda yarimo'tkazgichlarda kirishmali o'tkazuvchanlik ustun bo'lsa, yuqori temperaturalarda kirishmali va xususiy o'tkazuvchanlik birgalikda mavjud bo'ladi.

7.13. O'tao'tkazuvchanlik

O'tkazgich materiallarning o'tkazuvchanligi ularning **solishtirma qarshiligi** ρ yoki **o'tkazuvchanligi** σ bilan xarakterlanadi. Bu kattaliklar materialning ximiyaviy tarkibiga va uni qanday sharoitda turishiga, chunki temperaturasiga bog'liq bo'ladi. Ko'p metallar uchun ρ temperatura ortishi bilan quyidagicha deyarli chiziqli ortadi:

$$\rho = \rho_0(1 + \alpha t), \quad (7.75)$$

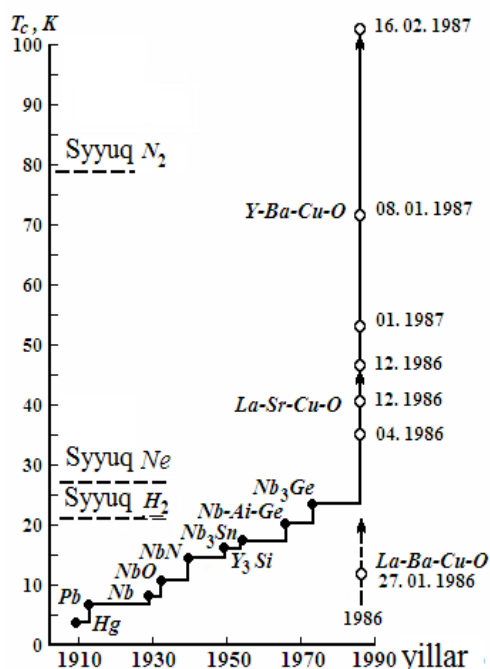
bunda $\rho_0 - 0^\circ\text{C}$ temperaturadagi solishtirma qarshilik, α - elektr qarshilikning temperaturaviy koeffitsiyenti. U metallar va qotishmalar uchun $\alpha = (3.3 \div 6.2) \times 10^{-3} \text{ grad.}^{-1}$ oraliqda o'zgaradi. Sof metallar uchun u taxminan $(1/273) \text{ grad.}^{-1}$ ga teng bo'lib, elektrolitlar uchun $\alpha < 0$. Past temperaturalarda ρ ning temperaturaga chiziqli bog'lanishidan chetlanish kuzatiladi (6.19-rasm). Ko'p hollarda $\rho(T)$ bog'lanish 7.19-rasmdagi *a* egri chiziq bo'yicha o'zgaradi. Absolyut nol temperaturadagi **qoldiq qarshilik** ρ_q materialning sofligiga va undagi turli nuqsonlarga, temperaturaga kuchli bog'liqligini elektr o'tkazuvchanlikning klassik nazariyasi doirasida tushuntirish mumkin emas. Metallar elektr o'tkazuvchanligining kvant nazariyasiga ko'ra, mutlaq nol temperaturadan boshqa hamma temperaturalarda erkin elektronlar kristall panjaraning tugunlaridagi



7.19-rasm. Oddiy (*a*) va o'tao'tkazgich (*b*) materiallarda solishtirma qarshilikning temperaturaga bog'liqligi.

atomlar bilan shunday ta'sirlashadiki, o'rtacha temperaturalarda ularning o'rtacha erkin yugurish yo'li temperaturaga teskari proporsional ($\bar{\lambda} \sim 1/T$) bo'lib, solishtirma qarshilik esa temperaturaga to'g'ri proporsionaldir ($\rho \sim T$). 1911 yili golland olimi Kemmerling-Onnes metallarning mutlaq nol temperaturadagi qoldiq solishtirma qarshiligini ularning sofligiga bog'liqlik darajasini o'rgana turib, qalayining solishtirma qarshiligi mutlaq nol temperaturaga yetmasdan 4.15 K temperaturada nolga aylanishini, qoldiq solishtirma qarshiligi bo'lmasligini kashf qildi. Bu hodisa **o'tao'tkazuvchanlik** deb nom oldi. Bu kashfiyoti uchun u 1913 yili Nobel muofotini oldi. Ushbu kashfiyotdan keyingi yillarda ketma-ket bir qator metallarda, keyinroq esa ayrim qotishmalarda 30 K temperaturadan past temperaturalarda o'tao'tkazuvchanlik hodisasi kuzatildi. Har bir o'tao'tkazuvchanlikka ega bo'lgan materialning o'zining o'tao'tkazuvchanlikka o'tish **kritik temperaturasi** mavjud bo'lib, u odatda T_k bilan belgilanadi. Shunday qilib, o'tao'tkazuvchanlikda shunday kritik temperatura mavjud bo'ladiki, bu temperaturada materialning solishtirma qarshiligi keskin sakrab nolga teng bo'lib qoladi va undan keyingi past temperaturalarda ham bu holat saqlanadi (7.19-rasmda b egri chiziq). 1986 yilgacha o'tao'tkazuvchanlik ayrim o'ta sof metall yoki qotishmalardagina kuzatiladi deb hisoblanar va o'tao'tkazuvchanlikning kritik temperaturasini oshirish uchun o'ta sof material olishning murakkab usullari qo'llanilar edi. 1986 yili hozirda Nobel mukofoti lauretlari Bednors (Germaniya) va Myuller (Shvetsariya) keramik (sopol) hisoblangan $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ oksid materiali 30-35 K temperaturada o'tao'tkazuvchanlik holatiga o'tishini kashf qildilar. Shundan keyin keramik oksid materiallarida o'tao'tkazuvchanlik hodisasini o'rganish avj olib ketdi. Bugungi kunda o'tao'tkazuvchanlikning kritik temperaturasi 35 K dan ortiq bo'lgan ko'plab keramik materiallar topildi va kritik temperaturasi 35 K dan yuqori bo'lgan **yuqori temperaturali o'tao'tkazgichlarni** olish va o'rganish davri boshlandi. Qisqa davr ichida (1986-1990 yillarda) kritik temperaturasi 35 K dan 100 K temperaturagacha bo'lgan yuqori temperaturali o'tao'tkazgichlarning katta sinfi aniqlandi. 7.20-rasmda o'tao'tkazuvchanlikka ega bo'lgan materiallarning kritik temperaturasining oshib borishini kashf qilishning 1990 yilgacha bo'lgan xronologiyasi keltirilgan. Hozirgi kunlarda esa kritik temperaturasi xona temperatursiga teng bo'lgan yuqori temperaturali o'tao'tkazgichlar olish ustida tadqiqotlar olib borilmoqda. 7.1-jadvalda hozirda ma'lum bo'lgan yuqori temperaturali o'tao'tkazgich keramikalarining o'tao'tkazgich hola-

tiga o'tish temperaturasi keltirilgan. Materiallar o'tao'tkazuvchanlik holatiga o'tganda uning qarshiligi nol bo'lganligi uchun Joul-Lens qonuni-



7.20-rasm. 1990 yilgacha o'tao'tkazgich materiallarning kashf qilinish xronologiyasi.

7.1 -jadval

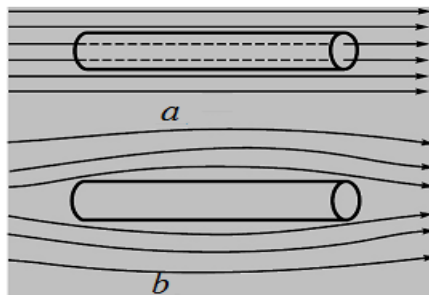
Ayrim yuqori temperaturali o'tao'tkazgich keramik moddalarning kritik temperaturasi.

Birikma	T_s, K
$La_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$	40
$YBa_2Cu_3O_7$	95
$Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$	95
$Bi_2Sr_2Ca_2Cu_3O_{10}$	115
$Tl_2Ba_2Ca_3Cu_3O_{10}$	122
$HgBa_2Ca_2Cu_3O_8$	134

ga ko'ra, ulardan elektr toki o'tganda ajralib chiqadigan issiqlik issiqlik miqdari ham nolga teng bo'ladi. Bu esa o'tao'tkazgichdan o'tayotgan elektr energiyasidan o'tkazgichning qizishi uchun sarf bo'ladigan isrofsiz foydalanish imkoniyatini beradiki, buning amaliy ahamiyatini tushunish qiyin emas. O'tao'tkazgich materialdan yasalgan konturda bir marta elektr toki hosil qilinib, so'ngra tok manbasidan uzib qo'yilsa, undan million yillar davomida ham tok so'nmasdan o'tib turishi mumkin. Haqiqatdan ham 1959 yilda Kollinz o'tao'tkazgich halqada hosil qilingan tok 2.5 yil davomida ham so'nmagani kuzatgan.

Materiallarning o'tao'tkazgich holatida solishtirma qarshilik nol bo'lishidan tashqari yana bir muhim xossasi bor. Bu xossa shundan ibo-

ratki, o'tao'tazgich holatidagi namunaning ichiga magnit maydoni kirmaydi. Bu hodisaga **Meysner effekti** deyiladi. Aytaylik, biror sterjen o'tao'tkazgich holatida bo'lmasin. Bu holda uning ichiga magnit oqimi bemalol kiradi (7.21-*a* rasm). Agar bu sterjen o'tao'tkazgich holatiga o'tgunicha sovitilsa, uning ichiga magnit oqimi kirmaydi (7.21- *b* rasm).

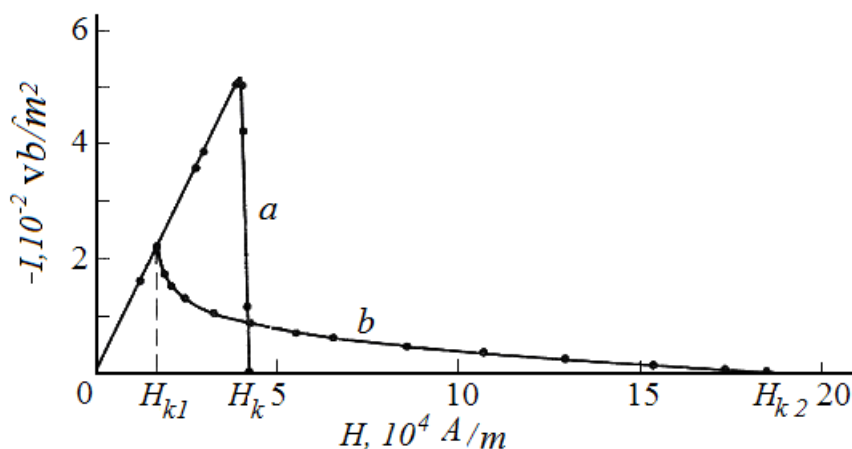


7.21-rasm. Magnit oqimining oddiy holatdagi sterjen ichiga kirib borishi (*a*) va o'tao'tkazgich holatidagi sterjen ichidan siqib chiqarilishi (*b*).

Meysner effektini namoyish qilish juda oson. Buning uchun o'tao'tkazgich materialdan yasalgan tarelkacha o'tao'tkazgich holatiga o'tguncha sovutilib, o'tao'tkazgich holatiga o'tkazilsa, uning ustiga joylashgan itaruvchi Meysner kuchi tutib tura oladigan massali o'zgarmas magnit modda uning ustida havoda muallaq turadi. Bunda o'tao'tkazgich holatidagi tarelka sirtida magnit maydoni doimiy magnitning magnit maydonini itarib chiqaruvchi Fuko toklari paydo bo'ladi va ularning induksiya yuvchi magnit maydoni doimiy magnitni tepaga ko'tarib, agar uning og'irligini muvozanatlay olsa, uni havoda muallaq ushlab turadi.

Umuman materialning o'tao'tkazuvchanlikka ega ekanligi haqida xulosa qilish uchun har ikkala shart, solishtirma qarshilikning muayyan temperaturada nolga aylanishi va Meysner effekti kuzatilishi shart. Aks holda tajriba xatoligi tufayli ham (masalan, qisqa tutashuvda) solishtirma qarshilik nolga teng bo'lib qolishi mumkin. Vaholanki, o'tao'tkazgich ichiga magnit maydoni kirmas ekan, uning magnit singdiruvchanligi $\mu = 0$ bo'ladi. Magnit singdiruvchanligi $\mu < 1$ bo'lgan moddalar dielektrik hisoblanadi. Demak, o'tao'tkazuvchanlikka ega bo'lgan materiallar dielektriklardir. Ammo yetarlicha kuchli tashqi magnit maydonida o'tao'tkazuvchanlik holati barham topadi. Magnit maydonining bunday qiymati **kritik maydon** (B_k) deb ataladi. Kritik maydon kuchlanganligining katta qiymatlarida o'tao'tkazgich material oddiy o'tkazgich holatiga o'tadi. Kritik magnit maydon o'tao'tkazgichning materialiga va uning metallofizikaviy holatiga qarab, odatda bir necha o'n gaussdan bir

necha yuz ming gauss oralig'ida yotadi. Kritik maydonning qiymati temperaturaga bog'liq bo'lib, kritik temperatura (T_k) da uning qiymati nol bo'lib, absolyut nol temperaturada maksimal qiymatga erishadi. O'tao'tkazuvchanlikning termodinamikaviy nazariyasiga ko'ra, moddalarning o'tao'tkazuvchanlik va odatdagi (oddiy o'tkazuvchanlik) holatlari ularning termodinamikaviy holatlarini belgilovchi temperatura va magnit maydoni kuchlanganliklarining ma'lum bir qiymatlarida biridan ikkinchisiga o'tuvchi ikki xil fazaviy holatlaridir. Bu fazalar orasidagi o'tishlar birinchi tur faza o'tishlari yoki ikkinchi tur faza o'tishlari bo'lishi mumkin. Agar modda o'tao'tkazuvchanlik holatidan oddiy o'tkazgich holatiga tashqi magnit maydoni ta'sirida kritik T_k temperaturasidan past ($T < T_k$) temperaturalarda o'tsa, bu o'tish birinchi tur faza o'tishi hisoblanadi. Tashqi magnit maydoni bo'lmaganda o'tao'tkazgichning normal o'tkazgich holatiga o'tishi ikkinchi tur faza o'tishi hisoblanadi. Ta'sir qilayotgan magnit maydonining kuchayib borishi bilan o'tao'tkazgich holatdan normal holatga o'tish xarakteri I va II tur o'tao'tkazgichlar uchun turlicha bo'ladi. I tur o'tao'tkazgichlarda magnitlanganlik tashqi magnit maydon ortishi bilan ma'lum bir magnit maydon kuchlanganligining kritik qiymatida keskin nolga teng bo'lib qoladi (7.22-rasm, *a*). II tur o'tao'tkazgichlarda esa magnitlanganlik asta-sekin, tashqi magnit maydonining ma'lum bir qiymatlari oralig'ida nolga intiladi (6.22-rasm, *b*). I tur o'tao'tkazgichlarga Ti, Zn, Sn (oq ranglisi), V, La, Pb Tc kabi metallar misol bo'ladi. II tur o'tao'tkazgichlarga Mo_2N , PbTl, NbB, NbZr, NbSn va boshqa qotishmalar hamda keramik yuqori temperaturali o'tao'tkazgichlar misol bo'ladi.



7.22-rasm. I tur o'tao'tkazgich (qo'rg'oshinning) (*a*) va II tur o'tao'tkazgich (85 foiz qo'rg'oshin va 25 % indiy qotishmasining) (*b*) magnitlanganligining magnit maydonning kuchlanganligiga bog'lanish grafigi.

Agar umumiy tok tarmog'iga ulangan o'tao'tkazgich materialdan o'tayotgan tokning qiymatini oshira borsak, tokning ma'lum bir qiymatidan keyin materialning o'tao'tkazuvchanlik xossasi yo'qoladi. Tokning bunday qiymati kritik tok deb ataladi. Demak, **kritik tok** o'tao'tkazgich material o'tao'tkazuvchanlik xossasini yo'qotmay tok o'tkaza oladigan maksimal tok qiymati ekan. Bu hodisaga sabab o'tao'tkazgichga tokning magnit maydoni ta'sir qilishidir. Kritik maydon kabi kritik tok ham temperaturaga kuchli bog'liq bo'lib, temperatura ortishi bilan kamayadi.

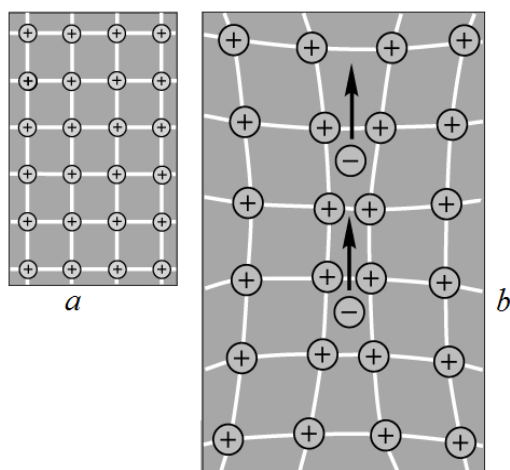
O'tao'tkazgich materiallar magnit maydonining **ichiga kirib borish chuqurligi** bilan ham xarakterlanadi. Kirib borish chuqurligi ham temperatura funksiyasi bo'lib, turli materiallar uchun 10^{-8} dan 10^{-7} m tartibgacha bo'ladi. Kirib borish chuqurligi - bu tashqi magnit maydonining o'tao'tkazgichning sirtida nolgacha kamayib boradigan qatlam qalinligidir. Massiv o'tao'tkazgich materialning ichida magnit maydoni nol ekanligini va bunga sabab magnit maydoni tashqi magnit maydonini butunlay ekranlovchi o'tao'tkazgich sirtida paydo bo'ladigan o'tao'tkazgichdagi Fuko toklari ekanligini yuqorida aytib o'tdik (Meysner effekti) (7.21-rasm). Odatda temperatura pasayishi bilan moddaning issiqlik sig'imi kamayadi. Ammo o'tao'tkazgich materialning ikkinchi tur faza o'tishida bu kattalik o'tish (kritik) temperaturasida keskin sakrab 2.5- 3 barobar ortib ketadi.

7.14. O'tao'tkazuvchanlikning fizikaviy tabiati

1957 yilgacha o'tao'tkazuvchanlik bo'yicha olingan eksperiment natijalarini nazariy tushuntirish sun'iy farazlarga yoki mavjud nazariyalarni bir muncha takomillashuviga asoslangan bo'lib, asosiy maqsad qanday qilib bo'lsa ham tajriba natijalarini tushuntirish edi. O'tao'tkazuvchanlik nazariyasi 1957 yilda J. **Bardin**, L. **Kuper** va J. **Shrifferlar** tomonidan e'lon qilindi. Keyinchalik ular Nobel mukofoti lauretlari bo'ldilar (1972 y.). Bu nazariya mualliflarining familiyalari qisqartirilgan holda **BKSh nazariyasi** nomi bilan fanga kirdi. O'tao'tkazgich materialning kritik temperaturasi T_c ayni materialning tarkibiga kirgan izotopining m massasiga bog'liqligi-**izotop effekti** aniqlangan. Bu bog'lanish $T_c \sim m^{-n}$ darajali ko'rinishda bo'lib, n ko'p hollarda taxminan $\frac{1}{2}$ ga teng. Shunisi qiziqki, tajribalardan moddaning θ_D Debay temperaturasi ham massasining kvadrat ildiziga teskari proporsional bo'lib, T_c/θ_D nisbat o'zgarmas kattalik ekanligi kelib chiqadi. O'tao'tkazgichning kritik temperaturasi bilan Debay temperaturasi orasidagi bunday bog'liqlik

o'tao'tkazuvchanlik hodisasi faqat elektronlarning harakati bilangina bog'liq bo'lmay, balki kristall panjaraning tebranish spektri bilan ham bog'liqligini ko'rsatadi. O'tao'tkazgichning BKSh nazariyasining asosida mana shu prinsip yotadi deyish mumkin. Mazkur nazariyaga ko'ra, kristalldagi elektronlar o'zaro Kulon itarish kuchlaridan tashqari o'ziga xos tortishish kuchlari bilan ham ta'sirlashadilar. Kristall o'tao'tkazgich holatiga o'tganda elektronlar orasidagi tortishish kuchlari Kulon itarilish kuchlaridan ustun keladi. Natijada kristall panjarada harakatlanuvchi o'zaro bog'langan elektron juftlari hosil bo'ladi. Juft hosil qilgan elektronlar qarama-qarshi impulslarga va ($1/2$ va $-1/2$) spinlarga ega bo'lib, juftning spini nol, zaryad miqdori esa $q = -2e$ bo'ladi. Spini nolga teng bo'lgan elementar zarralar **bozonlar** deb atalishini eslatib o'tamiz. Elektronlarning bunday juftlari **Kuper juftlari** deb ataladi. Kuper juftlari tashkil qilgan elektronlar orasidagi masofa taxminan $\xi_0 = 10^{-4}$ sm atrofida bo'ladi. Kristall panjara doimiylari 10^{-8} sm tartibida bo'lganligi uchun juftlikdagi elektronlar orasidagi masofa panjara doimiysidan to'rt tartibga katta ekanligi kelib chiqadi. Elektronlarning kuper juftlari hosil bo'lishining sababi elektron-fonon, ya'ni elektronlarning kristall panjarasidagi atomlar bilan ta'sirlashuvidir. Kristall panjarada harakat qilayotgan elektron juftlari panjarani buzilishiga olib keladi. Bunga sabab manfiy zaryadli elektronlar bilan kristall panjara tugunlaridagi musbat zaryadli atomlar o'zaklarining o'zaro (elektron - fonon) ta'sirlashuvidir. Panjarada harakat qilayotgan elektron uning atomlarining musbat zaryadli o'zaklari bilan tortilishib, ularni yaqinlashtirib, quyuqlashgan musbat zaryadlar sohasini hosil qiladi (7.23-rasm). Endi kuper juftining ikkinchi elektroni musbat zaryadli sohaga energiya sarf qilmasdan shiddat bilan "tortiladi".

Shunday qilib, elektronlarning kuper juftlari butun kristall panjara bo'ylab uning atomlarining musbat zaryadli o'zaklari orqali o'zaro energiya almashinishib, lekin bunda energiyalarini to'laligicha yo'qotmay harakatlanadi. Ana shu tariqa kristall o'tao'tkazuvchanlik holatiga o'tadi. Kuper juftlari hosil qilgan elektronlar bir xil zaryadli bo'lganligi uchun ular bir-biridan itarilishi kerak. Ammo bu itarilish kuchlari elektronlar bir-birlariga yetarli darajada yaqinlashganda hal qiluvchi rol o'ynaydi va o'zaro uzoqlashganda keskin kamayadi. Ular kristall panjara bilan ta'sirlashganda yoki boshqacha aytsak, elektron-fonon ta'sirlashuv kuper juftlaridagi elektronlar bir-biridan itarilishmaydigan darajada uzoqlashgan bo'ladi. Hisoblashlarning ko'rsatishicha bu masofa $5 \times 10^{-9} \div 10^{-6}$ m



7.23-rasm. Manfiy zaryadli elektronlarning kuper juftining kristall panjara atomlarining musbat o'zaklari orasidan harakatlanish sxemasi. *a* – odatdagi o'tkazgichning kristall panjarasi, *b* – o'tao'tkazgich holatidagi kristallning kristall panjarasi.

tartibida bo'ladi. Bunday masofalarda elektronlarning itarilish kuchlari elektron-fonon ta'sirlashuv kuchlariga nisbatan kichik bo'ladi. Natijada elektronlar bir-biriga samarali tortilib juft hosil qiladi. 1 sm^3 hajmda taxminan 1020 ta kuper juftlari bo'lishi mumkinligi hisoblab chiqilgan. Bitta kuper jufti hosil qilgan kristall panjara boshqa sohalarga uzatilishini tasavvur qilish qiyin emas. Ushbu nazariyaga ko'ra, barcha kuper juftlari aynan bir impulsli kogerent holatda bo'ladi. Boshqacha aytganda, barcha kogerent elektronlar yagona kvant holatida bo'ladi. Ular panjara tugunlaridagi issiqlik tebranishida bo'lgan atomlarning musbat zaryadli o'zaklarida sochilmaydi va kvant yoki o'taoquvchan "suyuqlik" hosil qiladi. Elektronlarning bu kogerentligi kvant mexanikasi prinsiplarining makroskopik masshtabda namoyon bo'lishidir. BKSh nazariyasi o'tao'tkazgichlarning ko'pgina xossalarini tushuntirib bera oladi. O'tao'tkazgichdagi elektronlar kollektivlashgan holatga shunday o'tadiki, ularning potensial energiyasi minimal bo'ladi. Elektron-fonon ta'sirlashuv tufayli bir-birlariga tortilib birgalikda harakat qilayotgan elektronlar sistemasining (kuper juftining) potensial energiyasi bir-birlariga tortilmay harakat qilayotgan ikkita elektron sistemasining potensial energiyasidan kichkina bo'ladi. Elektronlari bunday kollektivlashgan kogerent holatda bo'lgan o'tao'tkazgich tokning yoki magnit maydonining ortib boruvchi energiyasiga bardosh berish potensial imkoniyati katta bo'ladi. Ushbu sababdan kritik tok va magnit maydonning kritik kuchlanganligining temperaturaga bog'liqligi kelib

chiqadi. T_c kritik temperaturadan yuqori temperaturalarda elektronlar haddan tashqari issiqlik energiyasiga ega bo'lib, "qo'zg'aladi" va bir muncha past energiyali o'tao'tkazgich holatidan ancha yuqori energiyali normal, oddiy o'tkazgich holatiga o'tadi. BKSh nazariyasi nima uchun oddiy sharoitdagi mis va oltin kabi oddiy yaxshi o'tkazgichlar o'tao'tkazgich holatiga o'tmasligini ham tushuntira oladi. Bu moddalarning o'tkazuvchanlik zonasidagi elektronlari kristall panjara atomlari orasidan ular bilan deyarli ta'sirlashmasdan harakat qila oladi. Bu hol bunday materiallarni yaxshi elektr o'tkazgich qiladi. Chunki, ularda erkin elektronlarning kristall panjarasidagi atomlarda sochilishi uchun kam energiya sarf bo'ladi. Moddaning o'tao'tkazgich holatiga o'tishi uchun esa elektronlar bilan kristall panjara orasida kuchli ta'sirlashuv bo'lishi kerak. Ana shunday ta'sirlashuv bo'lmaganligi uchun ham yaxshi elektr o'tkazuvchi moddalar o'tao'tkazgich bo'la olmaydilar.

BKSh nazariyasi **Djozefson effekti**ni ham tushuntira oladi. Bu effekt shundan iboratki, agar ikkita o'tao'tkazgichni bir-biriga bir necha Å masofagacha yaqinlashtirilsa, hech qanday kuchlanish berilmasdan "tunnel effekt" tufayli kuper juftlari bir o'tao'tkazgichdan ikkinchisiga o'tadi. Bu holda ikki hodisa sodir bo'ladi. Birinchidan, kontakt orqali so'nmas o'tao'tkazuvchanlik toki o'ta boshlaydi. Bu tokning kritik qiymati tashqi magnit maydon kuchlanganligiga bog'liq. Ikkinchidan, agar kontakt orqali o'tayotgan tok kritik tokdan ortiq bo'lsa, kontaktda vaqtga davriy bog'lanishda bo'lgan o'zgaruvchan U kuchlanish paydo bo'ladi va kontakt yuqori chastotali elektromagnit nurlanishning manbasi bo'lib qoladi. Kuchlanishning tebranish chastotasi kontakt orqali o'tayotgan tok kritik tokdan qancha ortiq bo'lishiga bog'liq. Bu effektlarning birinchisi **Djozefsonning statsionar effekti**, ikkinchisi esa **Djozefsonning nostatsionar effekti** deb yuritiladi. Ikkita o'tao'tkazgichni bir-biriga bir necha Å masofagacha yaqinlashtirish mumkin emas. Shuning uchun biror dielektrik taglikda o'tao'tkazgich materialning, masalan, alyuminiyning yupqa qatlami purkaladi va bir necha Å chuqurligida u oksidlanadi. Oksidlangan alyuminiy ustiga yana yupqa bir qatlam toza alyuminiy purkaladi. Alyuminiy oksidi dielektrik bo'lganligi uchun mazkur sistema "**o'tao'tkazgich-dielektrik-o'tao'tkazgich**" sistemasini (**sendvich**) hosil qiladi. Bu sendvich bir-birlaridan bir necha Å masofada joylashgan ikki parallel o'tao'tkazgich sistemasiga ekvivalentdir. Djozefson effekti o'tao'tkazgich holatidagi elektronlarning fazaviy munosabatlari bilan aniqlanadi. BKSh nazariyasiga ko'ra, o'tao'tkazuv-

chanlik kuper juftlarining kristall panjara orqali kogerent harakati tufayli vujudga keladi, ya'ni o'tao'tkazuvchanlikda elektronlar jufti o'zaro mos fazalarda harakatlanadi. Dielektrik qatlam bilan ajratilgan ikkita o'tao'tkazgich qatlamlardagi kuper juftlari o'zaro mos bo'lmagan fazalarda harakatlanadi. Tunnel o'tish qilgan kuper juftining fazasi o'zgaradi. Bu faza ikkinchi o'tao'tkazgich qatlamdagi kuper juftlarining fazalari bilan mos tushsagina tunnel effekt sodir bo'ladi. Bu hol Djozefsonning statsionar effektiga to'g'ri keladi. Tunnel o'tish qilgan juftlarning hosil qilgan fazalar farqi magnit maydonining kattaligi bilan aniqlanadi. Kontakt orqali o'tayotgan tok qiymati Djozefson statsionar effektini hosil qiluvchi kritik tok qiymatidan ortib ketsa, Djozefsonning nostatsionar effekti sodir bo'ladi. Bu holda ikki o'tao'tkazgich orasida o'zgaruvchan kuchlanish paydo bo'lib, har ikkala o'tao'tkazgichdagi kuper juftlarini fazalarini vaqt bo'yicha o'zgarishiga majbur qiladi. Bu hol o'z navbatida "tunnel" tokining ikki o'tao'tkazgichdagi fazalar farqining o'zgarishiga monand holda o'zgarishiga olib keladi.

BKSh nazariyasining muhim natijalaridan biri o'tao'tkazgichning kritik temperaturasini aniqlovchi quyidagi formuladir:

$$T_k = \theta \exp\left(-\frac{1}{\lambda_{eff}}\right), \quad (7.76)$$

bunda $\theta = \frac{\hbar\omega_c}{k_B}$ - o'tkazuvchanlik elektronlari (to'g'rirog'i mos kvazizarralar) tortilishib, kuper juftlari hosil qilib, o'tao'tkazgich holatini ta'minlovchi E_F Fermi energiyasi yaqinidagi $\hbar\omega_c$ energiyalar sohasiga to'g'ri keluvchi temperatura, k_B -Bolsman doimiysi, λ_{eff} – elektron-fonon o'zaro ta'sirlashuvining effektiv o'lchamsiz bog'lanish doimiysi, u oddiy holda quyidagicha aniqlanadi: $\lambda_{eff} = \lambda = N(0) \times V$, bunda $N(0)$ – normal holatdagi Fermi sathi yaqinidagi energiyaviy sathlar zichligi, V - o'zaro tortilish energiyasini belgilovchi o'rtacha matritsa elementi. BKSh nazariyasida λ birdan juda kichkina deb qaraladi: $\lambda \ll 1$. Bunday yondoshish "zaif bog'lanish" deb ataladi. Mazkur nazariyadan tajribalarda tasdiqlanuvchi bir qator natijalar kelib chiqadi. Jumladan nazariyadan kelib chiqqan quyidagi

$$\frac{2\Delta(0)}{k_B T_k} = 3.52 \quad (7.77)$$

munosabat ko'pgina I tur o'tao'tkazgichlar uchun o'z isbotini topdi, bu ifodada $\Delta(0)$ – mutlaq nol ($T = 0$ K) temperaturada bitta kvazizarraga to'g'ri keluvchi **o'tao'tkazuvchanlikning energiyaviy tirqishi**. O'tkazuvchanlikning energiyaviy tirqishining paydo bo'lishi quyidagicha tushuntiriladi. Kuper juftlarining hosil bo'lishi kristallning energiyaviy spektrini o'zgarishga olib keladi. O'tao'tkazuvchanlik holatida turgan sistemaning elektronlar sistemasining g'alayonlanishi uchun hech bo'lmaganda bitta kuper juftini buzish kerak. Buning uchun juftlikdagi elektronlarning E_{bog} bog'lanish energiyasiga teng bo'lgan energiya sarf qilish kerak. Bu energiya o'tao'tkazgich elektronlar sistemasi qabul qilishi mumkin bo'lgan energiyaning $E_{bog} = \Delta E$ minimal qiymatidir. Tabiiyki, o'tao'tkazgich holatida turgan elektronlarning energiyaviy spektrida Fermi energiyaviy sathining sohasida kuper juftining bog'lanish energiyasiga teng bo'lgan **taqiqlangan energiya sohasi – energiyaviy tirqish** bor. O'tao'tkazgichlarda bunday “energiyaviy tirqish” – taqiqlangan energiyaviy sohacha borligi tajribalarda tasdiqlangan. Shunday qilib, o'tao'tkazgich holatida turgan elektron sistemasi normal holatda turgan elektron sistemasidan $\Delta E = E_{bog}$ energiyaviy tirqish bilan ajralgan. Demak, bu sistemalar orasidagi kvant o'tishlari har doim ham mumkin bo'lavermaydi. Elektronlar sistemasi harakatining tokning kritik qiymatlaridan kichik qiymatlariga mos keluvchi tezliklarida g'alayonlanmaydi va elektronlar jufti panjara bo'ylab qarshiliksiz harakatlanadi. Energiyaviy tirqish temperatura ortishi bilan T_c kritik temperaturada nolga aylanadi. Bu holda hamma kuper juftlari barbod bo'lib, modda normal o'tkazgich holatiga o'tadi.

Elektron-fonon ta'sirlashuvida (7.76) formuladagi θ temperatura kristallning (metallning) θ_D Debay temperaturasiqararayib teng bo'ladi:

$$\theta \sim \theta_D. \quad (7.78)$$

(7.78) shart shu bilan tushuntiriladiki, bu shartda elektron jufti maksimal falayonlangan fononlar bilan tasirlashadi va o'zaro fononlar bilan almashinishadi. Fononning maksimal g'alayonlanish temperaturasi $k_B \theta_D$ bo'lganligi uchun bu energiya BKSh nazariyasida va (7.76) formulada rol o'ynaydigan energiyadir.

Ko'pgina metallar uchun tajriba va hisoblashlarning ko'rsatishicha $\theta_D \leq 500$ K va $\lambda_{ef} \leq 1/3$ bo'lganligi uchun (7.76) formulaga ko'ra, $T_k \leq 25$

K ekanligi kelib chiqadi. Umuman, nazariy hisoblashlarning ko'rsatishicha, fonon-fonon mexanizmi uchun o'tish temperaturasi $T_k \leq 30-40$ K bo'lishi mumkinligi kelib chiqadi. BKSh nazariyasida "zaif bog'lanish" ($\lambda \leq 1$) sharti bilan kritik temperaturasi $T_k > 40$ K bo'lgan yuqori temperaturali o'tao'tkazgich keramik materiallardagi o'tao'tkazuvchanlik mexanizmini tushuntirib bo'lmas edi. BKSh nazariyasida elektron-fonon bog'lanish zaif bo'lib, kritik temperatura fononlarning xarakterli chastotalariga nisbatan kichkina bo'ladi ($k_B T_k \ll \hbar \omega_D$). Ammo keramikaviy materiallarning yuqori kritik temperaturasi $\lambda > 1$ bo'lgan "kuchli bog'lanish" sharti bilan tushuntirsa bo'ladi. Yuqori temperaturali o'tao'tkazgich keramik materiallarda Debay temperaturasi metallarnikiga qaraganda katta ($\theta_D \geq 600$ K). Agar elektron-fonon bog'lanish kuchli ($\lambda > 1$) deb qaralsa, ularning kritik temperaturasi taxminan 200 K bo'lishi mumkin. Masalan, $\theta_D = 1000$ K, $\lambda = 2 > 1$ bo'lgan hol uchun $T_k \approx 200$ K bo'ladi. Kuchli bog'lanishga asoslangan BKSh nazariyasiga asoslanib elektron-fonon mexanizmida (7.76) tenglamadagi θ temperaturani Debay temperaturasi bilan almashtirish bilan, elektron-eksiton mexanizmida $\theta \sim \theta_{ex}$ almashtirish bilan yuqori kritik temperaturani olish uchun urinishlar bo'ldi. Shuningdek, (7.76) formuladagi λ_{eff} kattalikni kuchli bog'lanish modeliga asosan kattalashtirish yo'li bilan ham kritik temperaturani oshirishmoqchi bo'ldilar. Ammo o'tao'tkazuvchanlikni tushuntirish uchun faqat yuqori kritik temperatura olish mumkinligini ko'rsatish yetarli emas va bu keramik materiallardagi yuqori temperaturali o'tao'tkazuvchanlikning mexanizmi elektron-fonon mexanizm deb aytishga yetarli asos bo'lmaydi. Chunki kritik temperatura T_k o'tao'tkazuvchanlikni xarakterlovchi kattaliklardan faqat bittasi xolos. Keramik materiallarning o'tao'tkazgich holatida $\frac{2\Delta(0)}{kT_c}$ nisbatning kattaligi ulardagi o'tao'tkazuvchanlik mexanizmi sof elektron-fonon mexanizmidan iborat deb aytishga yo'l qo'ymaydi. O'tao'tkazuvchan keramik materiallarning o'tao'tkazuvchanlik holatidagi qator xossalarini BKSh nazariyasi asosida tushuntirish mumkin. Shu bilan birga, keramik materiallarni o'rganish o'tao'tkazuvchanlikning BKSh nazariyasidan boshqa nazariyalarini ham izlashni taqozo qiladi.

Umuman aytganda, real moddaning o'tao'tkazuvchan holatida elektron-fonon ta'sirlashuvdan tashqari spinli va elektron-elektron (elektron-eksitonli) ta'sirlashuvlar bir vaqtda mavjud bo'lishi mumkin. Chamasi bu ta'sirlashuvlarning faqat bittasi bilan cheklanish ma'lum bir chegaraviy

shart-sharoitlardagina mumkin bo'lsa kerak. Hozirgi kunda yuqori temperaturali o'tao'tkazgich materiallarning mukammal nazariyasi yaratish ustida jadal izlanishlar olib borilmoqda.

7.15. O'tao'tkazgichlarning fanda va amaliyotda qo'llanilishi

Yuqori temperaturali o'tao'tkazuvchanlik fizikaning nisbatan yangi sohasi bo'lganligi uchun undan fanda va sanoatda foydalanish imkoniyatlari va istiqbollari haqida to'xtalib o'tish lozim topildi.

Kritik temperaturasi 90 K va undan yuqori bo'lgan yuqori temperaturali o'tao'tkazgichlarning kashf qilinishigacha moddalarning o'tao'tkazuvchanlik xossasidan foydalanish faqat laboratoriyalar doirasidagi eksperimentlar bilangina cheklangan edi. Chunki bunday o'tao'tkazgichlardan foydalanish uchun past temperaturalar hosil qilish uchun olinishi qiyin (qaynash temperaturasi 4 K) bo'lgan suyuq geliy kerak bo'lar edi. Yuqori temperaturali o'tao'tkazgichlarning kashf qilinishi bilan ularni o'rganish va amalda qo'llash uchun katta imkoniyat paydo bo'ldi. Yuqori temperaturali o'tao'tkazuvchan materiallarning o'tao'tkazgich holatiga o'tkazish uchun suyuq azot temperaturasi (77 K) kifoya bo'ladi. Havodan suyuq azot olish suyuq geliy olishga nisbatan juda oson va arzon edi.

Aytish mumkinki, 1960 yillarning o'rtalarida o'tao'tkazgichli magnitning 100 kGs magnit maydonini olish amaliyot uchun birinchi qadam bo'lgan edi. Ilgari bunday magnit maydonini olish uchun kerak bo'ladigan elektr cho'lg'amlari uchun juda katta elektr energiyasi va ularni sovutish uchun ko'p miqdordagi suv kerak bo'lar edi. Yuqori temperaturali o'tao'tkazgich materiallarning kashf qilinishi magnit maydoni hosil qilish texnologiyasini soddalashtirishda katta qadam bo'ldi. O'tao'tkazuvchanlikdan foydalanishning keyingi qadami sezgirligi katta bo'lgan elektron asboblarning eksperimental namunalari 10-15 Vt tartibidagi quvvatga ega bo'lgan kuchlanishlarni aniqlay olishlari mumkin. Magnitometrlar esa 10^{-9} Gs tartibidagi magnit maydonlarni aniqlay oladi va magnit materiallarni o'rganishda, shuningdek, meditsinada magnetokardiograflarda foydalaniladi. Og'irlik kuchini o'zgarishlariga o'ta sezgir o'tao'tkazgichli detektorlar geofizikaning turli sohalarida ishlatiladi. O'tao'tkazgich texnikasi, ayniqsa Djozefson kontaktlari metrologiyaning rivojlanishida ahamiyatga ega. O'tao'tkazgichli texnika tok komparatorlarida radiochastotali quvvatlarni va yutilish koeffitsiyent-

larini, shuningdek chastotani o'lchash uchun ishlatiladi. O'tao'tkazuvchanlik fundamental tadqiqotlarda, masalan, atom zarralarining kasrli zaryadlarini o'lchashda va nisbiylik nazariyasini tekshirishda ham ishlatiladi. O'tao'tkazuvchanlik kelajakda kompyuter texnologiyasida keng qo'llaniladi. Bunda o'tao'tkazgichli elementlar ulash va qayta ulashlar vaqtini juda qisqartiradi, ularning yupqa plenkali elementlaridan foydalanilganda quvvat isrofini va sxemalar montajining hajmiy zichligini keskin kamaytiradi.

Sanoatda o'tao'tkazgichdan foydalanish elektroenergiyasini ishlab chiqarish, uzatish va undan foydalanish bilan bog'liq. Masalan, diametri bir necha diyum bo'lgan o'tao'tkazgich kabel orqali juda ulkan elektr uzatish tarmog'i orqali uzatilganchalik elektr energiyasini uzatish mumkin. Bunda elektr energiyasining issiqlik energiyasiga aylanib isrof bo'lishi nihoyatda kam yoki butunlay kuzatilmaydi ($\rho=0$ bo'lganligi uchun). O'tao'tkazgich kabelning izolyatsiyasi uchun ketgan sarfharajat elektr energiyasini uzatish effektivligi bilan oqlanadi. O'tao'tkazgichlardan foydalanishning yana bir imkoniyati ulardan katta quvvatli tok generatorlari va kichik o'lchamli elektrodvigatellar yasashda foydalanishdir. O'tao'tkazgich materiallardan yasalgan cho'lg'amlar generatorlarda va elektrodvigatellarda juda kuchli magnit maydoni hosil qilgan bo'lardi. Natijada ularning quvvati odatdagilarinikidan ko'plab marta katta bo'lar edi. Bunday generatorlarning va elektrodvigatellarning tajribaviy namunalari allaqachon yaratilgan. Bu maqsadda keramikaviy o'tao'tkazgichlardan foydalanish ularni yasashni yetarli darajada tejamli qiladi. O'tao'tkazgichli magnitlardan magnit gidrodinamikasida elektroenergiyani to'plash va termoyadro energiyasini ishlab chiqish uchun foydalanish imkoniyatlari o'rganilmoqda. Injenerlar o'tao'tkazgichlar yordamida hosil qilinadigan kuchli magnit maydonidan qanday qilib ustida tez yurar "magnit yostiq"larga o'rnatilgan muallaq poyezdlar yaratish ustida bosh qotirmoqdalar. Bunda elektr toki o'tayotgan o'tao'tkazgichdan yasalgan "rels"dan o'tayotgan tokning magnit maydoni bilan poyezning "magnit yostiqlari" ta'sirida poyezd relsdan 2-3 sm ko'tariladi va shovqinsiz hamda relsga ishqalanishsiz katta tezlik bilan harakatlanadi. Hozir bunday poyezdlarning Yaponiyada va Germaniyada yaratilgan tajribaviy namunalari 300 km/soat tezlikka yaqin tezlik bilan harakatlanmoqda.

Savollar va masalalar

1. Atomdagi elektronning normallashtirilgan xususiy to'ldiruvchi funksiyasining mohiyati nimadan iborat?
2. Atomdagi elektronlarning harakatini xarakterlovchi kvant sonlari to'ldiruvchi nechta va ular nimalarni xarakterlaydi?
3. Elektronlarning aynigan holatlari qanday holatlar va aynish karraligi deb nimaga aytiladi?
4. Atomdagi muayyan bosh kvant soni n va unga mos keluvchi l orbital kvant soni bilan aniqlanuvchi holatlardagi elektronlarning maksimal soni qanday aniqlanadi?
5. Kristallning davriy potensial maydonida harakat qilayotgan elektronning harakat tenglamasi qanday bo'ladi?
6. Blox funksiyasi qanday funksiya?
7. Brilluyen zonasi nima?
8. Kristallardagi elektronlar energiya spektrining zonalarga bo'linishining fizikaviy ma'nosi qanday tushuntiriladi?
9. Moddalarning o'tkazgichlar, yarimo'tkazgichlar va dielektrlarga bo'linishining fizikaviy mohiyati qanday tushuntiriladi?
10. Kristalldagi "kovak" nima va u qanday zaryadga va massaga ega?
11. Siklotron rezonans va siklotron chastota nima?
12. Kristallardagi kirishma atomlarning qanday energiya sathlari bor?
13. O'tao'tkazuvchanlik hodisasi nima?
14. O'tao'tkazuvchanlikning BKSh nazariyasi bo'yicha o'tao'tkazuvchanlikning mexanizmi qanday tushuntiriladi?
15. Meysner effekti qanday effekt?
16. Birinchi tur va ikkinchi tur o'tao'tkazuvchanliklar qanday farqlanadi?
17. Djozefsenning statsionar va nostatsionar effektlari deb qanday hodisalarga aytiladi?
18. O'tao'tkazuvchanlikni xarakterlovchi qanday kattaliklar bor?
19. Orbital soni $l = 3$ bo'lgan elektronning energiya sathining aynish karraligi qancha? Bu sath qanday belgilanadi va bu sathda jami nechta elektron bo'lishi mumkin?
Javob: $g = 7; f; n_f = 14$.
20. Davri a bo'lgan bir o'lchamli potensial maydonda harakatlana-yotgan erkin elektron qanday energiya sathlarida bo'la oladi?

Javob: $E_n = n \times \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e a^2}, n = 1, 2, 3, \dots$

21. BKSh nazariyasiga ko‘ra, o‘tao‘tkazgichning T_k kritik temperaturasi kristall panjarasidagi izotoplarning m_1 va m_2 massasiga qanday bog‘lanishda bo‘lishini ko‘rsating.

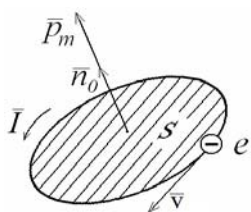
Javob: $\frac{T_c^1}{T_c^2} = \sqrt{\frac{m_2}{m_1}}.$

VIII BOB. QATTIQ JISMLARNING MAGNIT XOSSALARI

8.1. Moddalarning magnit xossalari hosil bo'lish mexanizmlari va ularni xarakterlovchi fizikaviy kattaliklar

Hamma moddalar ham ma'lum bir magnit xossalarga ega. Fizika-ning elektr qismidan ma'lumki, magnit maydonini harakatdagi elektr zaryadlari hosil qiladi. Shuning uchun ham moddalarning magnit xossalari ularning atomlarining tarkibiga kirgan elementar zarralar harakati tufayli sodir bo'ladi deb faraz qilish tabiiydir. Istalgan modda atomlarining tarkibiga kiruvchi elementar zarralar elektronlar, protonlar va neytronlardir. Tadqiqot natijalariga ko'ra, proton va neytronning magnit momentlari elektronning magnit momentiga qaraganda minglab marta kichikdir. Shuning uchun ham proton va neytrondan tashkil topgan yadroning magnit momentini hisobga olmaslik va atomning magnit xossalari butunlay yadro atrofida harakatda bo'lgan elektronlar belgilaydi deb hisoblash mumkin. Ushbu fundamental postulat magnetizmning elektron nazariyasining asosini tashkil qiladi. Atom yadrosining atrofida harakatda bo'lgan elektron o'zining harakatiga qarama-qarshi yo'nalgan elektron toki hosil qiladi. 8.1-rasmda elektron tezligining vektori $\vec{v}$, elektron orbitasi bo'ylab o'tayotgan tok yo'nalishi va uning hosil qilgan kontur yuzasiga tik bo'lgan magnit momenti p_m ko'rsatilgan. Elektronning hosil qilgan elementar tokining qiymati quyidagicha aniqlanadi:

$$i = e/T = ev, \quad (8.1)$$



8.1-rasm. Atomdagi elektron toki. $\vec{n}_0$ birlik vektor.

bunda e - elektron zaryadining absolyut qiymati, T va v mos holda elektronning orbita bo'ylab harakatlanish davri va chastotasi. Fizikaning elektr qismidan ma'lumki, elektronning orbita bo'ylab harakatlanishi natijasida paydo bo'lgan i elektr tokining quyidagi ifoda bilan aniqlanuvchi orbital **magnit momenti** hosil bo'ladi:

$$\vec{p}^{orb.} = \mu_0 i \times S \times \vec{n}_0, \quad (8.2)$$

bunda μ_0 -magnit doimiysi, S – elektron orbitasining yuzasi, $\vec{n}_0$ – magnit momenti ($\vec{p}_m$) vektorining yo‘nalishini aniqlovchi birlik normal vektor, bunda $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ Gn/m}$ – **magnit doimiysi**, u vakuumdagi magnit oqimi zichligini ifodalaydi. Shunday qilib, moddaning tarkibidagi atomlar elektronlarining ma’lum bir orbita bo‘ylab harakatlanishi natijasida molekulyar tok hosil qilayotgan elektronlar **orbital magnit momentiga** ega bo‘lar ekan. 7.1 - punktdan ma’lumki, atomda harakatlanayotgan elektron magnit momentining spini bilan ham harakterlanadi. Ma’lum bir soddalik bilan magnit momenti spini elektronning o‘z o‘qi atrofida aylanishi tufayli, orbital magnit momenti esa yadro atrofida harakatlanishi tufayli sodir bo‘ladi deb qarash mumkin. Elektron spinining muhim xossalaridan biri shundan iboratki, uning $\vec{B}$ magnit maydon kuchlanganligi yo‘nalishidagi proyeksiyasi faqat ikkita qiymatga ega bo‘lishi mumkin: $s = \pm 1/2$. Agar elektronlarning qandaydir sistemasida (bu sistema atom yoki kristall bo‘lishi mumkin) elektronlar soni juft bo‘lsa, qarama-qarshi tomonlarga yo‘nalgan har bir elektronlar juftining spini nol bo‘ladi. Bunday sistema **spin bo‘yicha muvozanatlashgan** sistema deyiladi. Elektronlar soni toq bo‘lganda sistema noldan farqli **muvozanatlashmagan** spinga ega bo‘ladi. **Atomning to‘la magnit momenti** o‘z elektronlarining orbital va spin magnit momentlarining vektor yig‘indisidan iborat bo‘ladi:

$$\vec{P}_{at} = \sum_1^Z \vec{p}_i^{orb} + \sum_1^Z \vec{p}_i^{sp}, \quad (8.3)$$

bunda Z - elementlarning Davriy sistemasidagi tartib nomeri, ya’ni elektronlar soni. Agar modda molekulalardan tashkil topgan bo‘lsa, molekulaning magnit momenti ular atomlarining magnit momentlarining vektor yig‘indisiga teng bo‘ladi. Magnit momentiga ega bo‘lgan har qanday atomni yoki molekulani qandaydir S yuzani chegaralovchi berk kontur bo‘yicha harakatlanayotgan tokka qiyoslash (o‘xshatish) mumkin. Bunday tok **atomiy** yoki **molekulyar tok** deyiladi. Bunday toklar har qanday berk konturdagi toklar kabi magnit momentiga ega bo‘ladi va magnit maydoni hosil qiladi. Amper faraziga ko‘ra, moddalarning magnit xossalari atomiy yoki molekulyar toklar tufayli paydo bo‘ladi.

Endi moddaning ichidagi magnit momentlarining tashqi magnit maydoni bilan ta’sirlashuvi tufayli namoyon bo‘ladigan va moddaning magnit xossalarini aniqlovchi makroskopiaviy xarakteristikallari bilan

tanishib chiqamiz. Magnit maydoniga olib kirilgan har qanday moddada alohida zarralar (atomlar yoki molekulalar) bilan bog‘liq bo‘lgan to‘la natijaviy magnit momenti hosil bo‘ladi:

$$\vec{P} = \sum_{j=1}^N \vec{P}_{at}, \quad (8.4)$$

bunda N – moddada atomlar yoki molekulalar soni. Magnit momenti-ning Xalqaro birliklar (SI) sistemasidagi o‘lchov birligi - $Volt \times sek \times m$ yoki $Veber \cdot metr [Vb \cdot m]$.

Magnetiklarning yana bir asosiy xarakteristikalaridan biri magnitlanganlikdir:

$$\vec{j}_m = \vec{P} / V [Vb/m^2], \quad (8.5)$$

bunda V - moddaning hajmi. Demak, **magnitlanganlik** - bu moduli moddaning hajm birligiga to‘g‘ri keluvchi magnit momentining son miqdoriga teng bo‘lgan vektor kattalikdir. j_m magnitlanganlikning magnit maydonining B induksiyasiga nisbati **magnit qabulchanlik** deyiladi:

$$\chi = \frac{j_m}{B} = \frac{j_m}{\mu_0 H} \quad (8.6)$$

Bu o‘lchov birligi bo‘lmagan kattalik qaralayotgan moddaning $\vec{H}$ **kuchlanganlikka ega bo‘lgan** magnit maydoni ta’sirida magnitlanish qobilyatini ifodalaydi. Vakuumdagi magnit maydoni induksiyasi bilan magnit maydon kuchlanganligi orasida

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{H} \quad (8.7)$$

bog‘lanish borligini eslatib o‘tamiz, bunda μ_0 -magnit doimiysi.

Endi moddaning magnit singdiruvchanligi μ bilan magnit qabulchanligi orasidagi bog‘lanishni topamiz. Tashqi magnit maydonidagi moddaning natijaviy magnit induksiyasi vektori $\vec{B}$ tashqi magnit maydon $\vec{H}$ kuchlanganligi va $\vec{j}_m$ ichki magnitlanganlik vektorlarining vektor yig‘indisiga proporsional bo‘ladi:

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{H} + \vec{j}_m. \quad (8.8)$$

Ushbu ifodani (8.6) ifodaga ko‘ra, quyidagicha yozish mumkin:

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{H} (1 + \chi) = \mu_0 \mu \vec{H}, \quad (8.9)$$

bunda

$$\mu = (1 + \chi) \quad (8.10)$$

belgilash kiritdik. Bu kattalik magnetik moddaning **nisbiy magnit kirituvchanligi** deb atalib, qaralayotgan muhitdagi magnit maydon induktsiyasi vakuumdagiga nisbatan qancha ko'p yoki kamligini ko'rsatuvchi kattalikdir. Demak, vakuum uchun u birga teng bo'ladi: $\mu_v = 1$.

8.2. Atomlarning magnit xossalari

Yuqorida aytib o'tdikki, atomlarning magnit momentlari ularning elektronlarining o'z o'qi atrofida va orbitalari bo'ylab aylanma harakatlari tufayli paydo bo'ladi (8.1-rasm). Binobarin, atomning mexanikaviy va magnit xarakteristikalari orasida qat'iy bog'lanish bo'lishi kerak. Bu bog'lanishni **giromagnit munosabat** belgilaydi. Bu munosabatni keltirib chiqarish uchun atomning Bor modelidan foydalanamiz. Ko'p magnit hodisalarini tushuntirish uchun yetarlicha aniqlik bilan atomda elektronlar ruxsat etilgan ma'lum bir orbitalar bo'ylab harakatlanadi degan Bor nazariyasidan foydalanish mumkin. Atom yadrosi atrofida r radiusli Bor orbitalaridan biri bo'ylab v chastota bilan aylanayotgan elektronning magnit momenti ushbu elektron hosil qilgan magnit momentiga teng kuchlidir. (8.1) va (8.2) ifodalarga ko'ra, bu tokning orbital magnit momenti miqdor jihatdan quyidagicha aniqlanadi:

$$p_{\text{orb.}} = \mu_0 i S = \mu_0 e v S. \quad (8.11)$$

Borning birinchi postulatiga ko'ra, elektronning biror n -orbita bo'ylab qilgan harakati miqorining momenti $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ kattalikka karralidir:

$$M_{\text{orb.}} = m_e v r = n \frac{h}{2\pi}, \quad (8.12)$$

bunda m_e – elektron massasi, r – orbita radiusi, v – elektronning orbita bo'ylab harakati tezligi, n – orbitaning tartib soni ($n = 1, 2, 3, \dots$). Mexanikadan yaxshi ma'lum bo'lgan $v = \omega r$; $\omega = 2\pi\nu$ (ω -elektron harakatining burchak tezligi) munosabatlaridan foydalanib, (8.12) ifodani quyidagicha yozish mumkin:

$$M_{\text{orb.}} = m_e v r = m_e \omega r^2 = 2\pi m_e \nu r^2 = 2m_e \nu S. \quad (8.13)$$

(8.12) va (8.13) ifodalardan

$$S = n \frac{h}{4\pi m_e v} \quad (8.14)$$

ekanligi kelib chiqadi. S yuzaning bu ifodasini (8.11) tenglikka qo‘ysak, elektronning orbital magnit momenti kelib chiqadi:

$$p_{orb.} = n \frac{\mu_o e}{2m_e} \hbar. \quad (8.15)$$

Birinchi $n = 1$ orbita bo‘ylab harakatlanayotgan bir elektronli atomning elementar magnit momentini ifodalovchi

$$\mu_B = \frac{\mu_o e \hbar}{2m_e} = 9.2732 \times 10^{-24} [J \times T^{-1}]$$

kattalik **Bor magnetoni** deyiladi. Bu kattalik magnit momentining «kvant»i sifatida qaraladi va atomlar sistemasining magnit momentlarini o‘lchashning o‘lchov birligi hisoblanadi.

Elektronning $p_{orb.}$ orbital magnit momentining (8.15 ifodasini $M_{orb.}$ orbital mexanik momentiga (8.12 ifodaga) nisbati **atomning orbital giromagnit munosabati** deyiladi:

$$\frac{p_{orb.}}{M_{orb.}} = - \frac{\mu_o e}{2m_e}. \quad (8.16)$$

(8.16) ifodadan ko‘rinib turibdiki, orbital giromagnit munosabat elektronning orbitasining tartib soniga bog‘liq emas. Binobarin, u elektronning istalgan orbitasi uchun bir xil qiymatga ega bo‘ladi. Biz ushbu munosabatni elektronning aylanma orbitasi uchun chiqardik. Shu bilan birga, bu munosabat istalgan elliptik orbita uchun ham o‘rinli ekanligini isbot qilish mumkin.

Ko‘p elektronli atomlarning natijaviy orbital magnit momentlari alohida olingan elektronlarning fazoviy kvantlanish qoidalarini hisobga olgan holdagi yig‘indisidan iborat. To‘ldirilgan elektron qobiqlar uchun natijaviy orbital magnit maydoni noldir. Shuning uchun faqat elektron qobiqlari qisman to‘ldirilgan atomlarga noldan farqli natijaviy orbital magnit momentiga ega bo‘ladi. Biroq bu holda ham agar qisman

to'ldirilgan elektron qavatlar tashqi qavatga yaqin bo'lib, qattiq jismning atomlari orasidagi ta'sirlashish kuchli bo'lsa, chala to'ldirilgan elektron qobiqlarning magnit momentlarining oriyentatsiyalari shunchalik chigallashgan bo'ladiki, natijada ular jismning magnitlanishiga olib kela olmaydi. Bunday holga Fe (temir) guruhidagi elementlarning to'ldirilmagan $3d$ qobig'ining elektronlari misol bo'ladi.

Atomning spin magnit momenti. Ma'lumki, elektronning M_{orb} orbital harakat miqdori momentidan tashqari xususiy M_σ mexanik momentiga ham ega bo'ladi (7.1-punkt). Kvant mexanikasidan ma'lumki, u quyidagi

$$M_\sigma = \sqrt{3} \times \frac{\hbar}{2} \quad (8.17)$$

ko'rinishda aniqlanib, uning $\vec{H}$ magnit maydon yo'nalishidagi tashkil etuvchisi faqat quyidagi ikki xil qiymatlarni qabul qilishi mumkin:

$$M_{\sigma H} = \pm \frac{\hbar}{2}. \quad (8.18)$$

Elektronning ushbu $M_{\sigma H}$ xususiy harakat miqdori momenti bilan uning xususiy magnit momenti orasida ham **spin giromagnit munosabat** bor. Elektronning p_σ xususiy magnit momentini birinchi bo'lib tajribada Shtern va Gerlax aniqlaganlar. Ularning tajribalarining ko'rsatishicha, p_σ miqdor jihatdan Bor magnetoniga teng ekan:

$$p_{\sigma H} = \pm \mu_B = \pm \frac{\mu_0 e \hbar}{2m_e} = \pm \frac{\mu_0 e}{m_e} M_{\sigma H}. \quad (8.19)$$

(8.19) ifodadan elektronning xususiy mexanik va magnit momentlari uchun quyidagi **spin giromagnit munosabat** kelib chiqadi:

$$G_\sigma = p_{\sigma H} / M_{\sigma H} = \pm \frac{\mu_0 e}{m_e}. \quad (8.20)$$

Ushbu oxirgi ifodadan va (8.16) ifodadan ko'rinib turibdiki, elektronning xususiy magnit va mexanik momentlarining nisbati (spin giromagnit munosabati) orbital giromagnit munosabatga nisbatan 2 marta katta ekan.

8.3 Magnetiklarning turlari

Tashqi magnit maydonida o'zining xususiy ichki magnit maydonini hosil qiluvchi tabiatda mavjud bo'lgan barcha moddalar **magnetiklar** deb ataladi. Hozirgi zamon tasavvurlariga ko'ra, magnetiklar magnit xossalari qarang olti turga bo'linadi: **diamagnetiklar, paramagnetiklar, ferromagnetiklar, ferrimagnetiklar, antiferromagnetiklar** yoki **ferritlar** va **o'tadiamagnetiklar**. Ularning bunday turlarga bo'linishini μ nisbiy magnit singdiruvchanliklarining qiymatlariga qarab aniqlash mumkin. Ularning magnit qabulchanliklari ham turli diapazonda yotadi. 8.1- jadvalda magnetiklarning nisbiy magnit singdiruvchanliklari (μ) va magnit qabulchanliklari (χ) diapazonlari keltirilgan. Endi magnetiklarning har birining asosiy xarakteristikallari bilan qisqacha tanishib chiqamiz.

Jadval 8.1

Magnetiklarning turlari.

№	Magnetik turi	Nisbiy magnit singdiruvchanlik, μ	Magnit qabulchanlik, χ
1	Diamagnetik	$\mu \leq 1$	$-(10^{-9} \div 10^{-4})$
2	Paramagnetik	$\mu \geq 1$	$10^{-6} \div 10^{-3}$
3	Ferromagnetik	$\mu \gg 1$	$10^3 \div 10^5$
4	Ferrimagnetik	$\mu \gg 1$	$10^1 \div 10^3$
5	Antiferromagnetik	$\mu > 1$	$10^4 \div 10^6$
6	O'tadiamagnetik	$\mu = 0$	-1

Tashqi magnit maydoni bo'lmaganda atomlari yoki molekulalari xususiy magnit momentiga ega bo'lmagan moddalar **diamagnetiklar** hisoblanadi. Diamagnetiklarning magnit qabul qiluvchanligi manfiydir (8.1-jadval). Buning natijasida ularda magnitlanganlik vektori $\vec{j}$ tashqi magnitlovchi maydonning $\vec{H}$ kuchlanganlik vektoriga qarama-qarshi yo'nalgan bo'ladi: $\vec{j} \uparrow \downarrow \vec{H}$.

Diamagnetiklarda magnit qabulchanlik $\chi < 0$ bo'lganligi uchun **magnit singdiruvchanlik** $\mu = (1 + \chi) < 1$ bo'ladi. Ushbu ifodadan kelib chiqadiki, diamagnetiklar uchun χ juda kichkina bo'lganligi uchun $\mu \approx 1$ deb qarash mumkin. Diamagnetik moddalarga inert gazlar, ko'pgina metallar: kumush, oltin, rux, mis, vismut, suv, shisha, marmar va bir qancha organik moddalar kiradi. Bu moddalarning nisbiy magnit singdiruvchanligi temperaturaga bog'liq bo'lmaydi.

Paramagnetiklar ham diamagnetiklar singari **zaif magnetiklar** hisoblanadi. Lekin ularning magnit qabulchanligi musbat qiymatga ega: $\chi > 0$. Ularning magnit qabulchanligi vektori tashqi magnit maydoni kuchlanganligi vektori yo'nalishi bilan parallel va bir xil yo'nalishda bo'ladi: $\vec{j} \uparrow \uparrow H$. Diamagnetiklar singari paramagnetiklarning ham magnit qabulchanligi juda kichkina bo'lganligi uchun magnit singdiruvchanligi birdan uncha katta farq qilmaydi. Shuning uchun bu holda ham ularning magnit singdiruvchanligini taqriban birga teng deb qarash mumkin: $\mu \approx 1$. Paramagnetiklarda ham nisbiy magnit singdiruvchanlik temperaturaga bog'liq bo'lmaydi.

Kislorod gazi O_2 , azot oksidi NO va boshqa gazlar, platina, palladiy alyuminiy, kobalt va nikel tuzlari, ayrim noyob yer metallari, ishqoriy metallar va boshqa ayrim moddalar paramagnetiklar hisoblanadi. Paramagnetik moddalarning magnit qabulchanligi χ diamagnetiklardan farqli holda temperaturaga bog'liq bo'ladi.

Ferromagnetiklar kuchli magnetik moddalar hisoblanadi. Ular boshqa magnetiklardan quyidagi bir qator o'ziga xos bo'lan xossalari bilan farq qiladi:

- tashqi magnit maydoni bo'lmaganda ham ichki xususiy tartiblangan magnit momentlariga ega, binobarin, ichki magnit maydoniga ega bo'ladi;

- χ magnit qabulchanligi diamagnetiklarga va paramagnetiklarga qaraganda nihoyatda katta qiymatga ega bo'ladi (8.1-jadval);

- μ magnit singdiruvchanligi tashqi magnit maydon kuchlanganligiga bog'liq, buning natijasida magnit maydon induksiyasi $\vec{B}$ magnit maydonning $\vec{H}$ kuchlanganligiga chiziqli bo'lmagan bog'lanishda bo'ladi;

- magnitlanganlikning tashqi maydon kuchlanganligiga bog'liqlik egri chizig'ida gisterezis hodisasi kuzatiladi;

- ma'lum bir **Kyuri temperaturasi** deb ataluvchi temperaturadan yuqori temperaturada ferromagnetiklar oddiy paramagnetiklarga aylanadi.

Sof metallardan temir, nikel, kobalt, gadoliniy va bu metallarning qotishmalari va birikmalari, marganets va xromning ferromagnit bo'lmagan elementlar bilan birikmalari (masalan, MnAlCu, CrTe va boshqalar) ferromagnetik moddalardir.

Ferrimagnetiklar (ferritlar) shunday moddalarki, ularning kristall panjarasidagi atomlarining magnit momentlari bir-birlariga qarab yo'nal-

gan bir nechta sohalar (domenlar) hosil qilgan bo‘ladi. Ferritlarning magnit qabulchanligi ferromagnetiklarnikidan kichkina bo‘lishidan boshqa barcha xossalari ferromagnetiklarning xossalari singari bo‘ladi.

Ferrimagnit moddalarga misollar: alfa temir (α -Fe), temir oksidining boshqa metallar oksidlari bilan birikmalari. Masalan, shpinellar (MnFe_2O_4), granatlar ($\text{SdFe}_5\text{O}_{12}$), geksaferritlar ($\text{PbFe}_{12}\text{O}_{19}$), RbNiF_3 tipidagi ftoridlar, RFe_2 tipidagi birikmalar (R – noyob yer elementlari).

Antiferromagnetiklar ferrimagnetiklarning xususiy holi bo‘lib, sohalarining qarama-qarshi yo‘nalgan magnit momentlari bir-birlarini to‘la muvozanatlaydi. Shuning uchun ular **muvozanatlashgan ferrimagnetiklar** deb ataladi. Antiferromagnetik xossalarga ega bo‘lgan moddalarga misollar: noyob yer elementlaridan Er, Dy, Ho, ayrim metallarning diftoridlari: FeO , MnO , CoF_2 , NiF_2 , ko‘mir va oltingugurt kislotalari (MnCO_3 , NiSO_4) va boshqalar.

Magnit singdiruvchanligi $\mu = 0$ bo‘lgan moddalar **o‘tadiamagnetik** moddalar deb ataladi. O‘tadiamagnetik moddalar **ideal diamagnetiklar** deb ham yuritiladi. Ularning ichiga tashqi magnit maydon kira olmaydi. Shu tufayli o‘tadiamagnetiklar hajmidan magnit maydonning to‘la siqib chiqarish hodisasi kuzatiladi ($\vec{B} = 0$). Bu hodisaga Meysner effekti misol bo‘ladi. Kriogen yoki yuqori temperaturalarda o‘tao‘tkazuvchanlik holatida bo‘lgan moddalar **o‘tadiamagnetik moddalardir**. Hozirgi kunda o‘tao‘tkazuvchanlik holatida bo‘lmasdan o‘tadiamagnetiklik xossasini namoyon qiladigan yagona modda ma’lum. Bu modda 1986 yilda kashf qilingan mis xlorididir: *CuCl*.

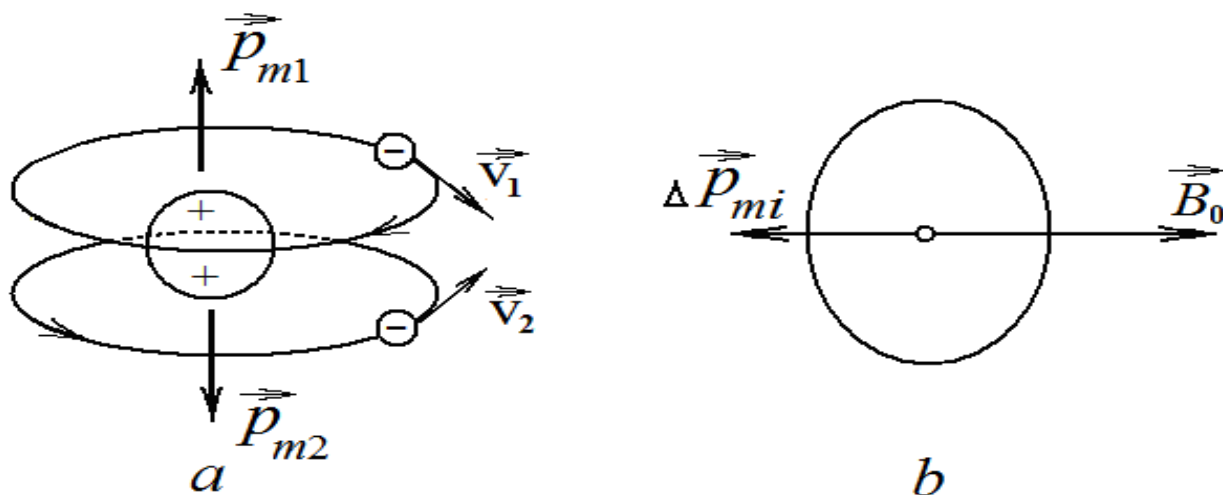
Ayrim kristallarda magnit induksiya vektori $\vec{B}$ tashqi magnit maydonining kuchlanganlik vektori $\vec{H}$ bilan mos kelmaydi. Bunday hollarda moddaning magnit singdiruvchanligi tenzor kattalik bo‘ladi va kristall ichidagi turli yo‘nalishlarda turlicha qiymatga ega bo‘ladi. Bunday moddalar **anizotrop magnit moddalar** deyiladi. Biz **izotrop magnit moddalarni**, ya’ni magnit singdiruvchanligi μ hamma yo‘nalishda bir xil – oddiy son bo‘lgan holarni ko‘ramiz.

8.4. Diamagnetizm

8.4.1. Tashqi magnit maydonning atomdagi elektron orbitasiga ta’siri

Tashqi magnit maydon ta’sirida atomlarning elektron qavatlarida qo‘shimcha magnit momenti hosil bo‘lish hodisasiga **diamagnetizm** deyiladi. Bunday moddalarning atomlari **diamagnit atomlar** deyiladi.

Misol sifatida geliy atomini ko'rib chiqamiz. Geliy atomining yadrosi- ning zaryadi $q = +2e$ (e -elektron zaryadining mutlaq qiymati). Faraz qilamiz geliy atomining har ikki elektroni ham ikkita bir xil orbitalarda, lekin qarama-qarshi yo'nalishlarda harakat qilmoqda (8.2 - rasm, *a*). U holda elektronlarning orbital magnet momentlari modul jihatdan o'zaro



8.2 –rasm. Geliy atomidagi elektronlar toklarining trayektoriyalari.

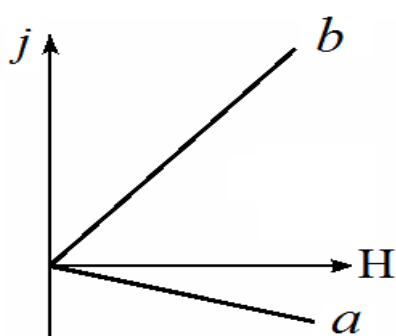
teng, ammo qarama-qarshi ishoralarga ega bo'ladi. Demak, geliy atomi- ning natijaviy magnet momenti nolga teng bo'ladi: $\vec{p}_i = \vec{p}_{m1} + \vec{p}_{m2} = 0$. Di- amagnet moddani magnet maydoniga kiritilganda $\Delta\vec{p}_i$ magnet momentiga ega bo'lgan qandaydir qo'shimcha atomiy yoki molekulyar tok induk- siyalanadi (hosil bo'ladi). Faradeyning elektromagnet induksiyasi qonuniga ko'ra $\Delta\vec{p}_{mi}$ vektor va induksiya toki shunday yo'nalgan bo'lishi kerakki, induksiyalangan tokning hosil qilgan magnet maydoni magnet- lovchi tashqi magnet maydonining induksiya vektori ($\vec{B}_0$)ga qarama- qarshi yo'nalgan bo'ladi (8.2- rasm, *b*).

Diamagnetik moddaning ichidagi xususiy natijaviy magnet maydoni barcha atomlardagi molekulyar toklar natijaviy xususiy magnet maydon- larining yig'indisiga teng bo'ladi. Ichki maydonning magnet induksiyasi magnetlanishga majbur qilayotgan tashqi magnet maydon induksiya vektoriga qarama-qarshi yo'nalgan bo'ladi. Ana shu tariqa diamagnet moddalar magnetlanadi.

Agar magnetlovchi tashqi magnet maydon ta'siri to'xtatilsa (olib tashlansa), induksiyalangan molekulyar toklar yo'qoladi va moddaning diamagnetlik xususiyati ham barham topadi. Bu hodisaga **diamagnetning**

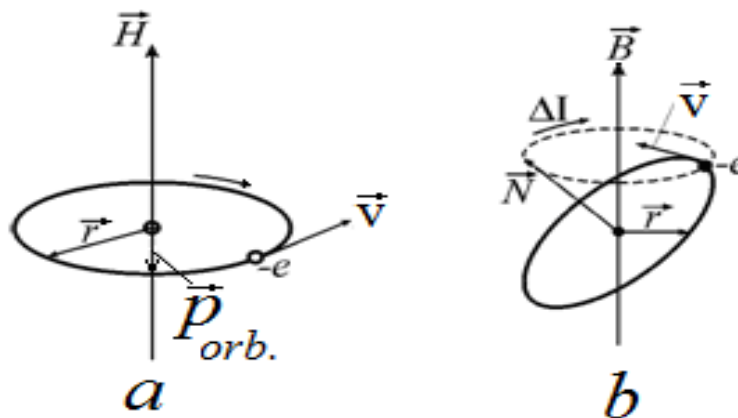
magnitsizlanishi deyiladi. Atomlarda yoki molekulalarda tashqi magnet maydoni ta'sirida molekulyar toklar hosil bo'lishiga ularning tartibsiz issiqlik harakati ta'sir qilmaydi. Binobarin, diamagnetizm temperaturaga bog'liq bo'lmaydi.

Diamagnetiklarning magnitlanganligi tashqi magnet maydon kuchlanganligiga chiziqli (proporsional) bog'liq holda mutlaq qiymati ortib boradi (8.3- *a* rasm). Bunday bog'lanishdan diamagnetiklarning χ magnet qabulchanligining (8.6) ifodaga ko'ra, tashqi magnet maydon kuchlanganligiga bog'liq ekanligi kelib chiqadi. Tashqi magnet maydoni bo'lmaganda magnitlanganlik nol bo'ladi.



8.3 - rasm. Diamagnetik (*a*) va paramagnetik (*b*) moddalarning magnitlanganligining tashqi magnet maydon kuchlanganligiga bog'lanish grafiqi.

Tekisligi tashqi magnet maydon kuchlanganligiga perpendikulyar bo'lgan r radiusli aylana (orbita) bo'ylab (8.4 - *a* rasm) harakatlana-yotgan elektronning harakat qonunlarini ko'rib chiqamiz. Elektron o'z harakatida $\vec{r}$ radius-vektori bilan S yuzani chizib chiqadi. Aylanish davri T , aylanish chastotasi esa ν bo'lsin. Bu holda orbital magnet momenti elementar aylanma tokning magnet momentiga teng bo'ladi: $p_{orb.} = p_m$. Bu shartdan (8.11) ifodaga ko'ra,



8.4-rasm. Elektronning magnet maydonidagi aylanma orbitalari.

$$p_{orb.} = p_m = \mu_0 e v \times S = \mu_0 e \frac{\omega}{2\pi} S, \quad (8.21)$$

ekanligi kelib chiqadi. Bunda elektronning chiziqli chastotasini siklik chastotasi bilan almashtirdik: $v = \omega/2\pi$. Tashqi magnit maydon ta'sirida $p_{orb.}$ orbital magnit momentining qandaydir $\Delta p_{orb.}$ miqdorga o'zgarishi burchak tezlikning $\Delta\omega$ miqdorga o'zgarishiga olib keladi. Bu holda quyidagi tenglik o'rinli bo'ladi:

$$\Delta p_{orb.} = \mu_0 \frac{eS}{2\pi} \Delta\omega. \quad (8.22)$$

Endi tashqi maydon ta'sirida ushbu $\Delta\omega$ chastotaning o'zgarishini qanday kattaliklarga bog'liqligini keltirib chiqaramiz. Tashqi magnit maydon bo'lmaganda ($B = 0$) elektronga yadroning Kulon kuchini muvozanatlovchi quyidagi markazdan qochma kuch ta'sir qiladi:

$$\vec{F}_0 = m_e \omega_0^2 \frac{v_0^2}{2} \vec{r} = m_e \omega_0^2 \vec{r}, \quad (8.23)$$

bunda m_e - elektron massasi, v_0 va ω_0 - magnit maydon bo'lmagandagi elektronning chiziqli va burchak tezligi. Atom elektronining yassi orbitasi tekisligiga $\vec{B}$ magnit induksiyasi perpendikulyar bo'lgan magnit maydoniga joylashtirilganda elektronga qo'shimcha quyidagi Lorens kuchi ta'sir qiladi:

$$\vec{F}_L = e \vec{v}_0 \times \vec{B}. \quad (8.24)$$

Bu holda elektronga ta'sir etuvchi kuchlarning teng ta'sir etuvchisi quyidagicha bo'ladi:

$$\vec{F} = \vec{F}_0 + \vec{F}_L = m_e \omega_1^2 \vec{r}, \quad (8.25)$$

bunda ω_1 teng ta'sir etuvchi kuch ta'sirida elektron ega bo'lgan burchak tezlik. (8.23) - (8.25) tenglamalarga ko'ra, quyidagi tenglamani yozish mumkin:

$$m_e \omega_1^2 r = m_e \omega_0^2 r + e v_0 B. \quad (8.26)$$

Oxirgi tenglamaning quyidagi ko'rinishda o'zgartirib yozamiz:

$$m_e (\omega_1^2 - \omega_0^2) r = m_e r (\omega_1 - \omega_0)(\omega_1 + \omega_0) = e v_0 B = e \omega_0 r B. \quad (8.27)$$

Tashqi magnit maydon ta'sirida elektronning burchak tezligi zaif o'zgaradi deb faraz qilamiz: $\omega \approx \omega_0$. U holda (8.27) tenglamani taqriban quyidagicha yozish mumkin bo'ladi:

$$m_e r \Delta\omega 2\omega_0 = e \omega_0 r B.$$

Oxirgi tenglamadan

$$\Delta\omega = \omega_L = \frac{eB}{2m_e} \quad (8.28)$$

yoki (8.7) tenglikka ko'ra,

$$\omega_L = \Delta\omega = \mu_0 \frac{eH}{2m_e}$$

ekanligi kelib chiqadi. (8.28) formulaga ko'ra, quyidagicha xulosa qilish mumkin: agar atomdagi elektron orbitasi tekisligi tashqi magnit maydonining $\vec{B}$ induksiya vektoriga perpendikulyar bo'lsa, magnit maydoni elektronning orbita bo'ylab harakati burchak tezligining magnit maydon induktsiyasiga prorsional holda o'zgarishiga olib keladi. $\Delta\omega$ kattalik **Lormor chastotasi** ω_L deb ataladi. (8.28) formuladan ko'rinib turibdiki, tezlikning bu o'zgarishi elektron orbitasining radiusiga ham, uning orbitadagi tezligiga ham bog'liq emas va atom tarkibiga kiruvchi barcha elektronlar uchun bir xildir.

Agar elektron aylanma harakati yo'nalishi shunday bo'lsaki, bunda $\vec{p}_{orb.}$ orbital magnit momentining yo'nalishi tashqi magnit momentining induktsiyasi vektori $\vec{B}$ yo'nalishi bilan bir xil bo'lsa, tashqi magnit momenti elektronning tezligini (8.28) formula bo'yicha aniqlanuvchi $\Delta\omega$ kattalikka kamayishiga olib keladi. Agar elektron orbitasi magnit maydon induktsiyasi vektori bilan biror burchak hosil qilgan bo'lsa, orbita pretsessiyaga ega bo'ladi (rasm 8.4, *b*). Orbita tekisligiga o'tkazilgan $\vec{N}$ normal magnit induksiya vektori $\vec{B}$ atrofida (8.28) formula bo'yicha aniqlanuvchi doimiy $\Delta\omega$ pretsessiya tezligi bilan konus chizadi.

8.4.2. Atomning orttirilgan magnit momenti.

Diamagnetiklarning magnit qabulchanligi

Biz yuqorida ko‘rib o‘tdikki, elektron orbitasining pretsessiyasi uning orbital harakatiga qo‘shimcha $\vec{B}$ maydon induksiyasi atrofida ham harakat qilishiga olib keladi (8.4-rasm, b). Bu qo‘shimcha harakat magnit ta’siri bo‘yicha berk konturdagi tokka teng kuchlidir. Bu tok quyidagicha aniqlanadi:

$$\Delta i = -e\Delta v_L = -e \frac{\Delta \omega_L}{2\pi}, \quad (8.29)$$

bunda v_L - va ω_L – mos holda pretsessiyaning chiziqli va siklik chastotalari, minus ishora esa elektron zaryadini ifodalaydi. Pretsessiya chastotasi uchun (8.28) ifodani e’tiborga olib, (8.29) ifodani quyidagicha yozamiz:

$$\Delta i = - \frac{e^2}{4\pi m_e} B. \quad (8.30)$$

Ushbu elementar berk tokning hosil qilgan qo‘shimcha orbital magnit momenti quyidagicha aniqlanadi:

$$\Delta p_{orb} = \mu_0 \Delta i \times S = - \frac{\mu_0 e^2 S}{4\pi m_e} B, \quad (8.31)$$

bunda S - elektron B induksiyali maydon atrofidagi pretsessiyasi tufayli hosil qilgan kontur yuzasi. Hisoblarning ko‘rsatishicha, kontur yuzasi $S = 2\pi \overline{r^2}/3$ ekanligi kelib chiqadi, $\overline{r^2}$ - elektrondan yadro markazigacha bo‘lgan masofaning o‘rtacha kvadrati. Kontur yuzasining bu ifodasini e’tiborga olsak, (8.31) ifoda quyidagi ko‘rinishni oladi:

$$\Delta p_{orb} = - \frac{\mu_0 e^2 \overline{r^2} B}{6m_e}. \quad (8.32)$$

(8.32) formuladan ko‘rinib turibdiki, magnit maydonida har bir elektron $\vec{B}$ maydon induksiyasiga qarama-qarshi yo‘nalgan qo‘shimcha **orttirilgan (induksiyalangan) magnit momentiga** ega bo‘lar ekan. Xuddi mana shu orttirilgan magnit momenti diamagnetik jismning magnit maydoniga qarama-qarshi yo‘nalishda magnitlanishiga va tashqi magnit maydoni qutblaridan itarilishiga sabab bo‘ladi. Soni Z bo‘lgan elektronlardan tashkil topgan atomning umumiy orttirilgan magnit momenti

alohida olingan barcha elektronlarning magnit momentlari yig'indisiga teng bo'ladi:

$$\Delta P = \sum_{i=1}^Z \Delta p_{orb} = \frac{\mu_0 e^2 B}{6m_e} \sum_{i=1}^Z \overline{r_i^2}. \quad (8.33)$$

Ushbu ifodadagi yig'indini $\sum_{i=1}^Z \overline{r_i^2} = Z \overline{a^2}$ deb olish mumkin, $\overline{a^2}$ - elektronlardan yadro markazigacha bo'lgan o'rtacha kvadratik masofa. (8.33) ifodani hajm birligidagi atomlar soni (n) ga ko'paytirib, jismning magnitlanganligini topamiz:

$$j = n \Delta P = - \frac{\mu_0 Z e^2 n \overline{a^2}}{6m_e} B. \quad (8.34)$$

Diamagnitning magnit qabulchanligi (8.6) va (8.34) ifodalarga ko'ra, quyidagicha aniqlanadi:

$$\chi = j_m / B = - \frac{\mu_0 Z e^2 n \overline{a^2}}{6m_e}. \quad (8.35)$$

(8.35) formula bo'yicha diamagnit materiallarning magnit qabulchanligini hisoblaylik. Bunday materiallar uchun masofa $a \approx 10^{-10} m$, $n \approx 5 \times 10^{28}$, elektronning zaryadi va massasi ma'lum. Tegishli hisoblashlardan keyin diamagnetiklarning magnit qabulchanligi uchun $\chi \approx 10^{-6} \times Z$ kattalikni olamiz. Bu kattalik haqiqatdan ham tajriba natijalariga yaxshi mos keladi (8.1 –jadvalga qarang). (8.35) ifodadan kelib chiqadiki, diamagnetiklarning magnit qabulchanligi uning temperaturasiga ham, tashqi magnit maydonining kuchlanganligiga ham bog'liq bo'lmagan holda elementlarning Davriy sistemadagi tartib nomeriga proporsional ortadi.

Umuman aytganda, diamagnetizm hamma moddalarning umumiy xossasidir. Chunki moddalar tashqi magnit maydoniga joylashtirilganda hamma moddalar ichidagi atomlar yoki molekulalar atrofida tashqi magnit maydon ta'sirida induksiyalangan toklar hosil bo'ladi. Ammo diamagnetizm juda ham zaif namoyon bo'ladigan effektdir. Shuning uchun u yagona magnit xossasi diamagnetizm bo'lgan, boshqa magnit xossalari uncha kuchli bo'lmagan moddalarda kuzatiladi.

Diamagnetizm elektron qavatlarini to'la bo'lgan moddalarda kuzatiladi. Bunday moddalarga inert gazlar, Na^+ , Cl^- tipidagi ionlar, Ge, Si, Se kabi yarimo'tkazgichlar misol bo'ladi. Bulardan tashqari elektronlarning

spiralimon aylanma orbitalari bitta emas bir necha atomlarni qamrab olsa, diamagnet qabulchanlik ham katta bo'ladi. Bunday moddalarga **Landau diamagnetiklari** deyiladi. Kristall strukturasi va ximiyaviy bog'lanish kuchlarining anizotropiyasi magnet qabulchanlikning ham anizotropiyasiga sabab bo'ladi. Masalan, grafit kristallidagi grafit to'ri-ning (3.14-rasm) z o'qiga perpendikulyar bo'lgan tekisliklari bo'ylab magnet qabulchanlik $\chi = -6 \times 10^{-10}$ bo'lsa, grafit to'rlariga perpendikulyar o'q bo'yicha magnet qabulchanlik nisbatan juda katta: $\chi = -2 \times 10^{-4}$.

8.5. Paramagnetizm.

8.5.1. Paramagnetizm tabiati

Agar atomlarning xususiy magnet momentlari noldan farqli bo'lsa, ularga **paramagnet atomlar**, bunday atomlardan tashkil topgan moddalarga esa **paramagnetiklar** deyiladi. **Paramagnetizm** esa jismning tashqi magnet maydonida magnet maydoni induksiyasi yo'nalishida magnetlanish xossasidir. Bu ta'rifdan paramagnetiklarning χ magnet qabulchanligi musbat kattalik ekanligi kelib chiqadi (8.1-jadval). Ushbu sababdan paramagnetiklar, diamagnetiklardan farqli holda doimiy magnet qutblariga tortiladi.

Paramagnetik atomlarining yoki molekulalarining (bundan keyin atomlarining) magnet momentlari atomlar yoki molekulalarning tuzilishiga bog'liq bo'lib, tashqi magnet maydoniga bog'liq bo'lmaydi. Agar atom yoki molekulaning to'la magnet momenti noldan farqli bo'lsa, bunday atom (molekula) elementar doimiy magnet sifatida namoyon bo'ladi. Biz yuqorida aytib o'tdikki, atomning to'la magnet momenti uning tarkibiga kirgan barcha elektronlarning orbital va spin momentlarining yig'indisidan tashkil topgan bo'ladi. Ammo juft elektronlarning orbital magnet momentlari bir-birini muvozanatlaydi. Natijada hamma to'ldirilgan elektron qobiqlarning orbital magnet momentlari nol bo'ladi. Binobarin, moddaning paramagnet xossasiga ta'sir qilmaydi. Shuning uchun ham paramagnetizm atomda toq valent elektronlar (o'tkazuvchanlik elektronlar) bo'lgan holdagina kuzatiladi. Spin magnet momentlari kristallning bog'lanish kuchlarining potensial maydoniga zaif bog'lanishda bo'ladi. Shuning uchun ularning qattiq jismlardagi atomlarning magnet momentlariga qo'shgan ulushlari ancha sezilarli bo'ladi.

Quyidagi hollarda jismlar paramagnet xossalari ega bo'ladi.

1. Atomlaridagi elektronlar soni toq bo'lsa, masalan, Na, K kabi ishqoriy metallar, Al, azot oksidi (NO).

2. Erkin organik radikallar, masalan, trifenilmetil $S(S_6N_5)_3$. Bunday moddalar muvozzatlashmagan spin magnit momentiga ega bo'ladi.

3. To'ldirilmagan ichki elektron qavatlariga ega bo'lgan erkin atomlar va ionlar (elementlar Davriy sistemasidagi oraliq metallari, bu elementlarning izoelektron ionlari, nodir yer elementlari va aktinidlar guruhi elementlari). Misol sifatida Mn^{2+} , Cd^{3+} va U^{4+} ionlarni keltiramiz.

4. Toq elektronlar soniga ega bo'lgan ayrim molekulalar (O_2 , S_2), organik biradikallardir. Bularda paramagnetizm ikkita elektronlarining spinlarining muvozzatlanishmagani tufayli sodir bo'ladi.

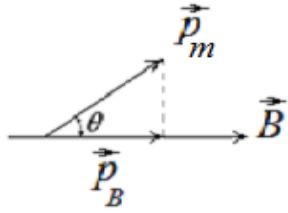
5. Toq sondagi elektronlarga ega bo'lgan kristall panjara nuqsonlari (F-markazlar, vakansiyalar va bivakansiyalar).

6. O'tkazuvchanlik elektronlariga ega bo'lganligi uchun metallar ham paramagnetiklardir.

Qisqacha paramagnetizm nazariyasi bilan tanishib chiqamiz. Paramagnetizm nazariyasi Lanjevan tomonidan ishlab chiqilgan. Hajm birligida N dona atom bo'lgan muhitni ko'raylik. Faraz qilamiz, har bir atom $\vec{P}_i$ magnit momentiga ega, ammo ularning magnit momentlari orasida ta'sirlashish yo'q. Tashqi $\vec{H}$ magnit maydoni bo'lmaganda issiqlik harakati tufayli atomlarning magnit momentlari tartibsiz yo'nalgan bo'ladi. Binobarin, tashqi magnit maydoni bo'lmaganda paramagnetik moddaning atomlarining aylanma toklari hosil qiladigan magnit momentlarining natijaviy tashkil etuvchisi nol bo'ladi. Bu modda magnitlanmagan bo'ladi - uning xususiy (ichki) magnit maydoni bo'lmaydi. Paramagnetikni bir jinsli tashqi magnit maydoniga joylashtirsak, tashqi magnit maydon ta'sirida har bir atomning aylanma toki (molekulyar tok) xususiy magnit momentlari tashqi magnit maydon induksiya vektori $\vec{B}$ yo'nalishiga parallel bo'lgan vaziyatni olishi kerak bo'ladi. Ammo bunday tartiblanishga atomlarning issiqlik harakati to'sqinlik qiladi. Tashqi magnit maydonining va atomlarning issiqlik harakati tufayli paramagnetik modda ichida qandaydir natijaviy ichki magnit momenti $\vec{p}_B$ hosil bo'ladi (8.5-rasm). Demak, paramagnetik moddaning atomlarining o'zaro ta'siri e'tiborga olmaslik darajada zaif bo'lgan doimiy magnit dipoli deb qarash mumkin.

$\vec{B}$ induksiya magnit maydonida magnit dipolining energiyasi quyidagicha aniqlanadi:

$$U_m = -p_m B \cos \theta = -\mu_0 p_m H \cos \theta. \quad (8.36)$$



8.5-rasm. Magnit maydonida atomning magnit momenti.

Agar $\vec{p}_m$ va $\vec{B}$ vektorlar orasidagi burchak $\theta = 0$ bo'lsa, bu energiya minimal qiymatga ega bo'ladi. Shuning uchun hamma dipollar atomlarning issiqlik harakati to'sqinlik qilishiga qaramasdan tashqi magnit maydon induksiyasi yo'nalishi bo'yicha oriyentatsiya olishga harakat qiladi. Moddaning ichki natijaviy magnit momenti alohidagi atomlarning magnit momentlarining va magnit induksiyasi $\vec{B}$ yo'nalishidagi $\vec{p}_B$ tashkil etuvchilarining (8.5-rasm) yig'indisidan iborat bo'ladi. Bu tashkil etuvchilarining proyeksiyalarining har birining qiymati $p_B = p_m \cos \theta$ ifoda bilan aniqlanganligi uchun paramagnetikning magnitlanganligini miqdoriy hisoblash atomlarning xususiy magnit momentlariga tashqi maydonning yo'naltiruvchi va issiqlik harakatining tartibsiz sohib yuboruvchi ta'sirlarining teng ta'sir etuvchisi bo'lgan p_B kattalikning o'rtacha qiymatini hisoblashga keltiriladi. Bu masala P. Lanjevan tomonidan klassik statistika metodlaridan foydalanilib ishlab chiqildi. Magnit dipoli tashqi magnit maydonida $\vec{B}$ induksiya vektoriga nisbatan qandaydir θ va $\theta + d\theta$ burchaklar orasida joylashish ehtimoli Bolsman taqsimot qonuni bilan aniqlanadi:

$$W \approx \exp\left(\frac{U_m}{k_B T}\right) = \exp\left(\frac{\mu_0 p_m H \cos \theta}{k_B T}\right) = \exp\left(\frac{p_m B \cos \theta}{k_B T}\right) = \exp(\beta \cos \theta), \quad (8.37)$$

bunda $\beta = \frac{p_m B}{k_m T}$. Dipolning magnit momentining magnit maydoni yo'nalishiga proeksiyasining o'rtacha qiymati quyidagicha aniqlanadi:

$$\overline{p_B} = \overline{p_i \cos \theta}. \quad (8.38)$$

$\overline{\cos \theta}$ kattalikni integrallar orqali hisoblashlar $\overline{\cos \theta} = \text{cth} \beta - 1/\beta$ ekanligini ko'rsatadi. Buni e'tiborga olsak, (8.38) ifoda quyidagi ko'rinishni oladi:

$$\overline{p_B} = p_m \left(\text{cth} \beta - \frac{1}{\beta} \right) = p_m L(\beta), \quad (8.39)$$

bunda $L(\beta) = \left(\text{cth}\beta - \frac{1}{\beta} \right)$ – **Lanjevan funksiyasi** deyiladi. N ta atomning hosil qilgan natijaviy magnitlanganligi

$$j_m = N \times \overline{p_B} = N \times p_m L(\beta) \quad (8.40)$$

bo'ladi. (8.40) formula **Lanjevan formulasi** deyiladi. Giperbolik kotangensning $\text{cth}\beta$ ifodasini qatorga yoyib chiqamiz:

$$\text{cth}\beta = 1/\beta + \beta/3 - \beta^3/45 + \dots$$

Odatdagi sharoitlarda $\beta \ll 1$ ekanligini isbot qilish mumkin. U holda yuqoridagi qatorni birinchi ikkita hadi bilan cheklanish mumkin va Lanjevan funktsiyasi quyidagicha bo'ladi:

$$L(\beta) \approx \beta/3.$$

Oxirgi ifodani e'tiborga olsak, β ning ifodasini bilgan holda magnitlanganlikning Lanjevan formulasi (8.40) uchun quyidagi ifodani olamiz:

$$j_m = N \times p_m L(\beta) = N \times p_m \beta/3 = N \frac{p_m^2 B}{3}. \quad (8.41)$$

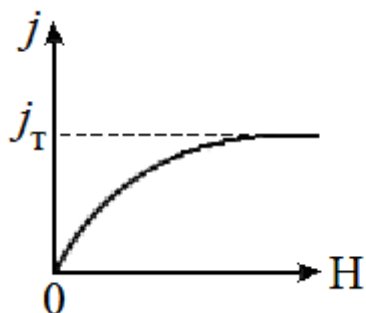
Endi paramagnet magnet qabulchanlikni topamiz:

$$\chi = j_m/H = \frac{\mu_0 j_m}{B} = \frac{N \mu_0 p_m^2}{3 k_B T} = \frac{C}{T}, \quad (8.42)$$

bunda $C = \frac{N \mu_0 p_m^2}{3 k_B}$ – **Kyuri doimiysi**. Demak, paramagnetiklarning magnet qabulchanligi temperaturaga teskari proportsional ravishda o'zgarar ekan. Bu bog'lanish **Kyuri qonuni** deb ataladi. Bir qator paramagnetiklar uchun Kyuri qonuni bajarilmay, magnet qabulchanlikning temperaturaga bir muncha murakkab bog'lanishi kuzatiladi.

Magnitlanganlikning (8.41) va magnet qabulchanlikning (8.42) formulalari $\beta = \frac{p_m B}{kT} \ll 1$ bo'lgan hollar uchun o'rinli bo'ladi. Bu shart zaif magnet maydoniga va uncha past bo'lmagan temperaturalarga mos keladi. Kuchli magnet maydonida va past temperaturalarda paramag-

netikning magnitlanishi j va magnit maydon kuchlanganligi orasidagi proportsionallik buziladi, magnit qabulchanlik **to'yinish qiymatiga** erishadi: $j \rightarrow j_t = Np_m$ (8.6-rasm). Bu shunday holga to'g'ri keladiki, bunda barcha atomlarning xususiy magnit momentlari qat'iy magnit maydoni kuchlanganligi yo'nalishida orientatsiya oladi.



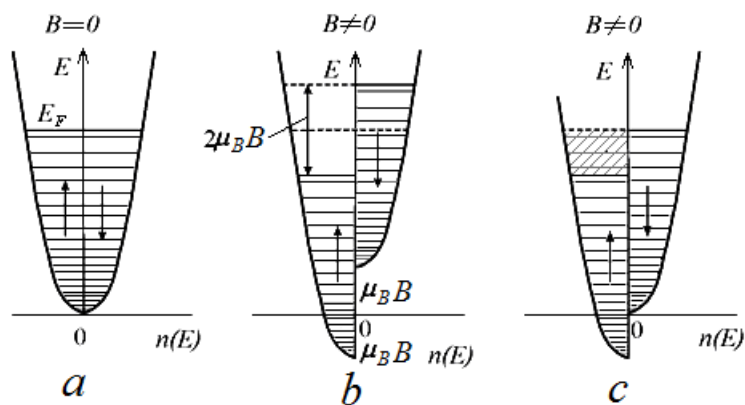
8.6-rasm. Paramagnetik magnitlanishini kuchli magnit maydonlarida va past temperaturalarda to'yinishga chiqishi.

Paramagnetizm tabiatini mukammal tushunish uchun paramagnetizmning kvant nazariyasiga murojat qilish kerak. Kvant nazariyasida atomning magnit momenti tashqi magnit maydoniga nisbatan uzlukli (diskret) yo'nalishlarga ega bo'ladi degan postulatga asoslanadi. Kvant nazariyasida ham paramagnetning magnit qabulchanligi uchun (8.42) ifodaga o'xshagan ifoda hosil qilinadi.

8.5.2. O'tkazuvchanlik elektronlarining paramagnetizmi

Metallarda magnit qabulchanlikka atomlar o'zaklari elektronlaridan tashqari o'tkazuvchanlik erkin elektronlar ham ulush qo'shadi. Bu elektronlarga tashqi magnit maydoni ikki xil ta'sir ko'rsatadi. Bir tomondan erkin elektronlar magnit maydoni ta'sirida spiral trayektoriya bo'ylab harakat qila boshlaydi. Bu trayektoriyaning o'qi magnit maydonining kuchlanganligi yo'nalishiga mos tushadi. Ularning trayektoriyasi bir nechta atomlarni qamrab oladi. Bunday hodisaga **Landau paramagnetizmi** deyiladi. Ikkinchi tomondan har bir elektron o'z spini magnit momentiga ega bo'lganligi uchun magnit maydonining yo'nalish beruvchi ta'siriga duchor bo'lib, paramagnet effektga sabab bo'ladi. Har ikkala effekt ham kvant tabiatiga ega. Nazariyaning ko'rsatishicha, erkin elektronlarning hosil qiladigan diamagnet effekti paramagnet effektiga qaraganda 3 marta kichik bo'ladi. Shuning uchun umuman elektron gazini paramagnet deb qarash mumkin. Tashqi magnit maydon bo'lmaganda mutlaq nol ($T = 0$ K) temperaturada elektron gazining (o'tkazuvchanlik elektronlarining) natijaviy magnit momentlari nol bo'ladi. Bu elektronlar o'tkazgich materialning o'tkazuvchanlik zonasining E_F energiyali Fermi sathigacha bo'lgan barcha sathlarni Pauli prinsipi

asosida band qiladi. Bu prinsipga ko'ra, har bir sathda qarama-qarshi yo'nalishdagi spinga ega bo'lgan ikkita elektron bo'lishi mumkin. Qattiq jismlarning zonalar nazariyasini va zonalardagi elektronlar holatlari haqida VII bobda to'xtalib o'tganmiz. 8.7, *a* – rasmda tashqi magnit maydoni bo'lmagandagi ($B = 0$ bo'lgandagi) o'tkazuvchanlik zonasi elektronlarining spinlari yo'nalishlari bilan farq qiluvchi ikkita yarim zonalardan tashkil topishi sxematik ravishda tasvirlangan. O'tkazgich moddaning spinlarining yo'nalishi magnit maydon yo'nalishiga qarama-qarshi bo'lgan o'ng yarim zonadagi elektronlar $\mu_B B$ kattalikka yuqoriga ko'tariladi (8.7- *b* rasm) va ularning bir qismi turg'un energiyaviy holatda bo'lish uchun minimal energiyali chap yarim zonaga spinlarining yo'nalishini o'zgartirib o'tadi. Buning natijasida sathlar tenglashadi (8.7- rasm, *b*).



8.7-rasm. Tashqi magnit maydonining ikki yarim zonalardagi elektron-larga ta'siri. $n(E)$ - elektron holatlarining zichligi, E – elektronlar energiyasi. Yarim zonalardagi spinlar yo'nalishi strelkalar bilan ko'rsatilgan.

O'tkazuvchanlik elektronlarining paramagnit qabulchanligi elektronlar holatlarining zichligi $N(E)$ funksiyasidan quyidagicha aniqlanishi ko'rsatilgan:

$$\chi_{el} = \frac{3N\mu_0\mu_B^2}{2E_F} \approx \frac{3TN\mu_0\mu_B}{2k_B T_F}, \quad (8.43)$$

bunda N – hajm birligidagi elektronlar soni, T_F – Fermi sathigacha elektronlar to'lishiga mos keluvchi temperatura (yoki elektron gazining aynish temperaturasi). Ma'lumki, har bir energiyaviy sathda qarama-qarshi spinli ikkita elektron bo'ladi. (8.43) ifodada temperaturaga bog'liq bo'lgan birorta kattalik yo'q. Demak, erkin elektronlarning paramagnit qabulchanligi ham temperaturaga bog'liq bo'lmaydi. Qaralayotgan masa-

lada paramagnitlanish effekti juda zaifdir. Masalan, bir valentli metallning elektron holatlarining zichligi 1 *Joul* energiyaga taxminan 10^{47} miqdorga to'g'ri keladi. U holda paramagnit qabulchanlik 10^{-5} atrofida bo'ladi. Paramagnit qabulchanlikning bu qiymati atomlarning ichki to'ldirilgan qavatlaridagi elektronlarining paramagnit qabulchanligidan salgina ko'p, xolos. Bunga sabab magnit momentlari tashqi magnit maydonining yo'nalishiga qarama-qarshi yo'nalgan o'tkazuvchanlik elektronlarining juda oz qismigina tashqi maydon ta'sirida spinlarining yo'nalishini o'zgartiradi. Elektronlarning ozgina qismi Fermi sathi atrofida torgina $\mu_B B$ kenglikdagilari o'z energiyaviy holatlarini o'zgartira oladi (8.7-rasm, *b*). Boshqa elektronlar uchun bunday o'zgarish mumkin emas, Chunki barcha qo'shni energiyaviy sathlar o'z elektronlari bilan band. Shuni aytib o'tish mumkinki, agar barcha valent elektronlari tashqi magnit maydoni ta'siriga tushganda edi, biz ko'rayotgan bir valentli metallning paramagnit qabulchanligi tajribada kuzatilayotgan paramagnit qabulchanlikdan 100, hatto 1000 barobar katta bo'lgan bo'lar edi.

8.5.3. Magnit rezonansi

Paramagnit moddalarda **elektron paramagnit rezonansi (EPR)** va **yadroviy paramagnit rezonansi (YaMR)** kuzatiladi. Biz 7.1-paragrafda ko'rib o'tgan edikki, atomlardagi elektronlar aynigan holatlarda bo'ladi (7.1-rasm), ya'ni bosh kvant soni n ning biror qiymatiga to'g'ri keladigan E_n energiyasining birgina qiymatiga orbital l va m_l magnit kvant sonlarining bir nechta qiymati to'g'ri keladi. Paramagnit modda magnit maydoniga joylashtirilganda bir xil potensial energiyaga, lekin turli kvant sonlariga ega bo'lgan elektronlarning magnit maydoni bilan ta'sirlashish natijalari har xil bo'lib, elektronlarning aynigan holatlari barham topadi. Bunda magnit maydonisiz elektronning bir nechta magnit kvant soniga mos keluvchi birgina energiya sathi tashqi magnit maydonida elektronning turli magnit kvant soniga to'g'ri keluvchi bir nechta energiyaviy sathchalarga ajraladi. Atomning noldan farqli bo'lgan muayyan J natijaviy harakat miqdorining momentiga (ya'ni elektronlar orbital harakat miqdorlari momentlari bilan xususiy (spin) momentlarining bektor yig'indisiga) to'g'ri keluvchi sath m_l magnit kvant soni turlicha bo'lgan $(2J + 1)$ ta (aynigan holatlar soniga teng bo'lgan) sathchalarga ajraladi. Bu hodisaga **Zeyeman effekti** deyiladi. Bu effektning sababi shundaki, tashqi magnit maydoni ta'sirida (turli m_l magnit kvanti soniga ega) bo'l-

gan bir-biridan bir xil masofada joylashgan sathlardagi magnit momentiga to'g'ri keladigan energiya quyidagi ifodaga ko'ra turlicha bo'ladi:

$$E_m = m_J g_L \mu_0 \mu_B H, \quad (8.44)$$

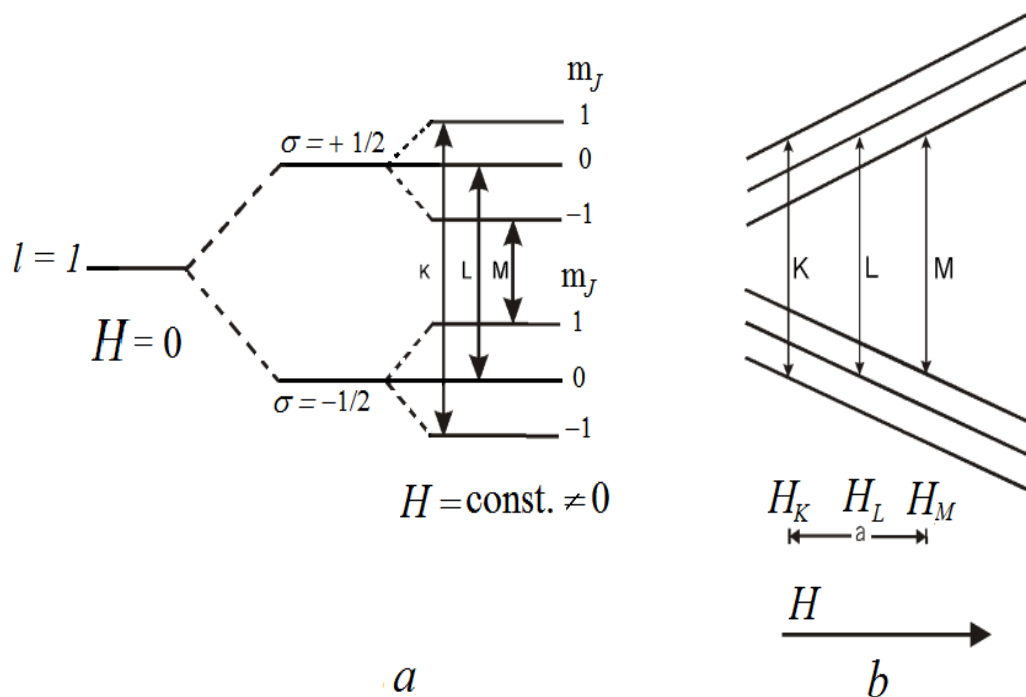
bunda μ_B - Bor magnetoni (p. 8.1), μ_0 - magnit doimiysi, g_L - energiyaviy sathlarning bo'linishining **Lande faktori** deb ataluvchi qaralayotgan energiyaviy sathning kvant sonlariga bog'liq bo'lgan o'lchamsiz kattalik, m_J natijaviy magnit kvant soni qiymatlari $-J \leq m_J \leq +J$ oraliqdagi qiymatlarni qabul qiladi. Lande faktori quyidagicha aniqlanadi:

$$g_L = 1 + \frac{J(J+1) + P_s(P_s+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

bunda P_s - atom elektronlarining ya'ni xususiy (spin) harakatlari miqdorlarining to'la (natijaviy) momenti, L - atom elektronlarining orbital harakat miqdorlarining to'la moment, J - elektronlarning to'la spin momenti. Misol uchun quyidagi holni ko'ramiz. Aytaylik, atomning spin momenti $P_s = 0$ bo'lsin, u holda to'la moment orbital momentga teng bo'ladi: $J = L$, u holda $g = 1$ bo'ladi, agar atomning natijaviy orbital moment $L = 0$ bo'lsa, to'la moment to'la spin momentiga teng bo'ladi ($J = P_s$) va $g = 2$ bo'ladi. Umumiy holda, Lande faktori 1 bilan 2 orasidagi qiymatlarga ega bo'lib, 1 dan kichik (jumladan manfiy) va 2 dan katta qiymatlarni ham qabul qilishi mumkin. Bu atomdagi elektronlar soni juft yoki toq bo'lishiga bog'liq. Yuqoridagi mulohazalar engil atomlar uchun o'rinli bo'lib, og'ir atomlar uchun Zeeman effekti uchun ancha murakkab qonuniyatlar kuzatiladi.

8.8 - a rasmda orbital kvant soni $l = 1$ bo'lgan holat sathlarining magnit maydoni bo'lmagandagi va o'zgarmas magnit maydoni bo'lgandagi bo'linishlari aks ettirilgan. 8.8-b rasmda esa o'zgaruvchan magnit maydoni bo'lgandagi bo'linishlar sxematik aks ettirilgan. Bo'linish natijasida paydo bo'lgan sathchalar orasidagi masofalar o'zaro teng va magnit maydoni kuchlanganligi qiymatiga to'g'ri proporsionaldir.

Shunday qilib, magnit maydonidagi atom elektronlarining energiyaviy zonasida qo'shimcha energiya sathlari paydo bo'lar ekan. Binobarin, energiya zonalarida elektronlarning o'tishi uchun qo'shimcha imkoniyatlar paydo bo'ladi. Shu bilan birga sathlar orasidagi o'tishlar uchun **tanlash qoidasi** mavjud bo'lib, bu qoidaga ko'ra, o'tishlarda magnit



8.8 - rasm. Orbital kvant soni $l = 1$ bo'lgan hol uchun doimiy (a) va o'zgaruvchan (b) magnit maydonlaridagi energiyaviy sathlar va ular orasidagi ruxsat etilgan o'tishlar.

kvant soni m_J o'zgarib bo'lib qolishi kerak yoki bir soniga o'zgarishi mumkin kvant soni m_J o'zgarib bo'lib qolishi kerak yoki bir soniga o'zgarishi mumkin: $\Delta m_J = 0, \pm 1$. Demak, sathlar orasidagi energiyalar farqi (masofa) (4.44) ifodaga ko'ra

$$\Delta E_m = g_L \mu_B \mu_0 H \quad (8.45)$$

bo'ladi. (8.45) ifodadan ko'rinib turibdiki, ΔE_m kattalik tashqi magnit maydonining kuchlanganligiga bog'liq. Agar moddada biz qarayotgan ayni tipdagi atomdan N_0 dona bo'lsa, moddaning biror T temperaturadagi termodinamik muvozanat holatida ularning elektronlari bo'lingan (Zeyeman) sathlar bo'yicha, aytaylik, yuqorigi 1- va pastki 2- sathlar orasida Bolsman qonuni bo'yicha taqsimlanadi:

$$\frac{N_2}{N_1} = e^{-\frac{\Delta E_m}{k_B T}}, \quad (8.46)$$

bunda N_1 - va N_2 - mos holda yuqorigi 1 - va pastki 2- sathlarning bandlik darajasi, k_B –Bolsman doimiysi, $N_1 + N_2 = N_0$. (8.46) ifodaga ko'ra,

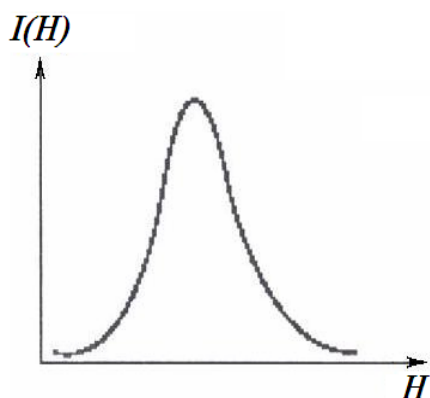
pastki sathning bandlik darajasi yuqorigi sathning bandlik darajasidan katta. Agar magnit maydonida qaralayotgan sistemaga ν chastotali elektromagnit nurlanishi ta'sir ettirilsa,

$$h\nu = \Delta E_m = g_L \mu_B \mu_0 H \quad (8.47)$$

shart bajarilganda elektronlarning E_1 va E_2 qo'shni energiyaviy sathlar orasida majburiy o'tishlari sodir bo'ladi. 1- sathdan 2-sathga va teskari o'tishlar ehtimoliyatlari bir xil. Yuqorigi sathdan pastki sathga o'tish energiya nurlash bilan, pastdan yuqoriga o'tish esa energiya yutish bilan sodir bo'ladi. Bolsmanning (8.46) taqsimot qonuniga ko'ra, "pastki" 1- sathning bandlik darajasi "yuqori"gi 2-sathnikidan katta bo'lganligi uchun elektronlarning $1 \rightarrow 2$ o'tishlari ustun keladi, ya'ni (8.47) shartni qanoatlantruvchi elektromagnit to'lqinlarining chastotasida elektromagnit to'lqinning energiyasini elektron yutib "yuqori"gi sathga o'tadi. EPR hodisasining mohiyati mana shundan iboratdir, ya'ni paramagnit zarralari (atomlari yoki molekulalari) bo'lgan moddaning tashqi magnit maydonida elektromagnit to'lqinlar energiyasining rezonans yutish hodisasiga **elektron paramagnit rezonans** deyiladi. EPR hodisasi elektromagnit to'lqinlarining santimetrli va millimetrli to'lqin uzunliklarida kuzatiladi. Yuqori chastotali elektromagnit nurlanishning paramagnetikda rezonans yutilish chastotasi (8.47) ifodaga ko'ra quyidagicha aniqlanadi:

$$\nu = g_L \mu_B \mu_0 H / h. \quad (8.48)$$

Ushbu ifodadan ko'rinib turibdiki, elektron paramagnit rezonans hodisasini doimiy magnit maydonida elektromagnit nurlanishning ν chastotasi- ning o'zgartirib kuzatish mumkin yoki elektromagnit nurlanishning o'z- garmas qiymatida magnit maydonining H kuchlanganligini o'zgartirib kuzatish mumkin. Texnik jihatdan oson bo'lganligi uchun amalda ko'- pincha ikkinchi usuldan fodalaniladi. Bu usuldan foydalanilgandagi paramagnit rezonans egri chizig'ining umumiy ko'rinishi 8.9 - rasmda aks ettirilgan. Bu rasmda ordinata o'qi bo'yicha namunada elektromagnit nurlanishining energiyasi qo'yilgan. $I(H)$ maksimumining yuzasi **EPR spektrining intensivligi** deyiladi. $I(H)$ funksiya EPR spektrining shaklini belgilaydi va paramagnit zarraning atrofidagi zarralar bilan ta'sirlashuv xarakteriga bog'liq. Ko'p hollarda $I(H)$ funksiya grafigi Gauss funksiyasi shakliga mos keladi. O'tkazuvchanlik elektronlari bo'l-



8.9-rasm. Elektron paramagnit rezonans yutilish spektri.

magan moddalarda EPR rezonansi hodisasiga o'xshagan yadroviy magnit rezonans hodisasi ham kuzatiladi. **Yadro magnit rezonansi** (YaMR) deb magnit maydonidagi moddaning spini nolga teng bo'lmagan yadrosi energiyaviy sathlarining Zeyeman sathlariga ajralishi natijasida elektromagnit nurlanishning rezonans (tanlanib) yutilishiga aytiladi. Bunday moddalarda elektron qavatlarining magnit momentlari muvozanatlashgan bo'ladi, ya'ni ularning natijaviy magnit momentlari nolga teng bo'ladi. Bunday moddalarda magnit momentiga faqat atom yadrosi ega bo'ladi. Yadroning spinlari va atomning N ta elektronlari orasida kuchli ta'sirlashuv bo'lmaganda yadroning magnit qabulchanligi quyidagicha aniqlanadi:

$$\chi_{\text{yad}} = \frac{Np_{\text{yad}}}{2k_B T}, \quad (8.49)$$

bunda p_{yad} - yadroning magnit momenti. Yadroning magnit momenti elektronning magnit momentidan qarayib 1000 marta kichik. Natijada ma'lum bir miqdordagi zarralardan tashkil topgan sistemaning yadroviy paramagnit qabulchanligi aynan shuncha zarralardan tashkil topgan sistemaning elektron paramagnit qabulchanligidan million marta kichik bo'ladi. Yadro paramagnetizmi juda zaif bo'lib ($\chi = 10^{-9} - 10^{-12}$), o'ta past ($T < 0.1$ K) temperaturalarda kuzatiladi. Ammo yadroviy paramagnetizm juda zaif bo'lishiga qaramay, moddaning ayrim xossalarini o'rganishda muhim usul hisoblanadi. Yadro magnit rezonansi atomlar yadrolarining magnit momentlarini o'rganishda asosiy va aniqligi eng katta bo'lgan usul hisoblanadi. Yadro magnit rezonansi usuli bilan suyuqliklarning, dielektrik kristallarning, metallarning, yarimo'tkazgichlarning va polimerlarning tuzilishi haqida juda ko'p ma'lumotlar to'plandi.

EPR moddadagi paramagnit markazlar haqida noyob ma'lumotlar beradi. U kristall panjaradagi turli mikroirishmalarni aniq farqlay oladi.

U yoki bu ion haqida to'la ma'lumot beradi: valentligi, koordinatsiyasi, lokal simmetriyasi, elektronlar gibridlashuvi, elektronlar qanchaligi va strukturaviy joylashuvi, fazoning ion joylashgan yerida kristall magnit maydoni o'qlarining oriyentatsiyasini ko'rsata oladi, ximiyaviy bog'lanish haqida to'la ma'lumot beradi. EPR faqat kristalldagi kirishma ionlar haqidagina ma'lumot beribgina qolmaydi. U kristallning o'zi haqida ham muhim ma'lumotlar bera oladi: kristall elektronlarining taqsimlanishi manzarasini, kristall maydoni, kristallning ionlanish va kovalentlik darajalarini ko'rsata oladi. EPR ximiyaviy reaksiyalarning mexanizmlarini, ionlovchi nurlanishning moddalarga va tirik organizmga ta'sirini o'rganish uchun, metallar, dielektriklar va yarimo'tkazgichlardagi elektron holatlarini o'rganishga, umuman fan va texnikaning turli tarmoqlarida keng ishlatilmoqda.

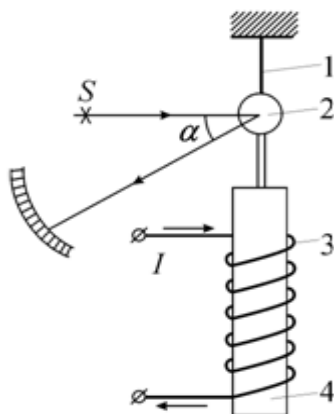
Hozirgi vaqtda moddalarning tuzilishini o'rganishdan tashqari meditsinada keng qo'llanilmoqda. Elektron paramagnit rezonansi hodisasiga asoslangan meditsina asbobi **elektron paramagnit tomograf** yoki qisqa qilib **tomograf** deb ataladi. Elektron paramagnit tomograf odam organizmining turli qismlaridagi kasalliklarni dastlabki bosqichida aniqlashga va to'g'ri tashxiz qo'yishga imkon beradi.

8.6. Ferromagnetizm

8.6.1. Ferromagnetizmni tasdiqlovchi tajribalar

Ferromagnetik moddalar tashqi magnit maydonisiz ham kuchli ichki magnit momentiga, binobarin, ichki magnit maydoniga ega bo'ladi. Ferromagnit moddalarning magnit xossalarning namoyon bo'lish hodisasiga **ferromagnetizm** deyiladi. Ferromagnetizm so'zi lotincha Ferrum - temir so'zidan olingan. Bunga sabab magnit xossalarning kuchli namoyon bo'lishi dastlab temir va temir rudalarida kuzatilgan. Faqat quyidagi to'qqizta ximiyaviy elementlarning kristallari ferromagnetiklar hisoblanadi: Temir (Fe), kobalt (Co), nikel (Ni), gadoliny (Gd), disproziy (Dy), terbiy (Tb), golmiy (Ho), erbiy (Er), tuliy (Tm). Oxirgi beshta noyob yer elementlarining ferromagnit xossalari juda past temperaturalarda sezilarli bo'ladi. Bu elementlardan tashqari juda ko'p qotishma va birikmalar ham ferromagnit xossalarga ega. Bunday qotishmalar sanab o'tgan ferromagnit elementlarning bir-birlari bilan birikmasi yoki ularning ferromagnit bo'lmagan moddalar bilan birikmasi ham bo'lishi mumkin, hatto ferromagnit bo'lmagan elementlar birikmasi ham bo'lishi mumkin. Ferromagnit bo'lmagan elementlarning birikmasidan tashkil topgan

ferromagnetiklar birinchi marta Cu_2MnSn intermetallid qotishmasining magnit xossasini kuzatgan nemis olimi F. Geysler sharafiga **Geysler qotishmalari** deyiladi. Ferromagnit materiallarning tashqi magnit maydonisiz o'zining magnitlangan holatda bo'lishi ulardagi atomlarning xususiy magnit momentlarining yo'nalishlari (oriyentatsiyasi) bir-birlariga nisbatan tartibsiz emas, balki o'zaro parrallel yo'nalishlarda tartiblangan holatda bo'ladi deb xulosa qilishga olib keladi. Hozirgina sanab o'tgan to'qqizta elementlardan uchta birinchisi to'lmagan $3d$ elektron qobiqlarga ega, oxirgi oltitasining esa $4f$ elektron qobiqlari to'lmagan. Ferromagnetizm elektronlarning orbital magnit momentlari bilan emas (ularning magnit xossalariga ta'siri juda ham oz), balki ularning spinlarining magnit momentlari tufayli hosil bo'lishligi isbot etilgan. Bunday faraz Eynshteyn va de Gaaz tajribalarida tasdig'ini topdi. 8.10-rasmda ushbu tajribaning sxemasi keltirilgan. Ular magnit momenti o'zgarganda ferromagnit namunani aylanishini, ya'ni mexanik moment paydo bo'lishini kuzatdilar. Jism magnitlanganda mexanik moment hosil bo'lish hodisasi **magnitomexanik effekt** nomini olgan. Bu effekt magnit g'altak (3) dagi I tokni o'zgartirish yo'li bilan amalga oshiriladi. Bu tok o'zgarganda temir o'zak (4) aylanadi va ko'zgu (2) o'rnatilgan ingichka kvars tola (1) ni aylantiradi. S manbadan chiqqan yorug'lik nuri ko'zgu (2) ga tushib, ipning aylanishiga monand holda turli burchaklar ostida



8.10-rasm. Eynshteyn va de Gaaza tajribasi.

qaytadi. Ipning maksimal burilish burchagiga mos keluvchi elektronlarning M_{el} harakat miqdorlarining to'la momenti aniqlanadi. Temir silindrning magnitlanganligini o'lchab atomlarning natijaviy R_{el} magnit momenti aniqlandi. Bu tajribada topilgan elektronlarning magnit va mexanik momentlarining nisbati $\frac{P_{el}}{M_{el}} = -\frac{\mu_0 e}{m_e}$ ekanligi, ya'ni (8.20) ifoda bilan aniqlanuvchi elektronlarning mexanik va magnit momentlarining

nisbati spin giromagnit munosabat bilan mos tushishi aniqlandi. Bu natija ferromagnetizm elektronlarning orbital momentlari bilan emas, balki spinlarining magnit momentlari tufayli sodir bo'lishini ko'rsatadi. Ushbu natija keyinroq boshqalarning tajribalarida ham tasdiqlandi. Bu tajribalarning mohiyati shundan iborat ediki, kvars tolaga osib qo'yilgan temir sterjen uning magnitlanganligi yo'qoladigan Kyuri temperatura-sigacha tez qizdiriladi. Magnitlangan temir sterjenda elektronlarning magnit momentlari sterjen o'qi bo'ylab tartiblangan yo'nalish olgan bo'ladi. Binobarin, sterjen qandaydir natijaviy $M_{el.}$ harakat miqdori momentiga ega bo'ladi. Kyuri temperaturasi-gacha qizdirish natijasida magnitsizlanganda "elektron pildiroq"lar o'qlarining yo'nalishlarining buzilishlari, ya'ni tartibsizlanishi sodir bo'ladi. Bu holga mos holda natijaviy harakat miqdorining momenti $M_{el.} = 0$ bo'ladi. Buning natija-sida sterjen tajribada aniqlash mumkin bo'lgan aylantiruvchi impuls-ga ega bo'ladi.

Ferromagnetizm hodisasi elektronlarning spin magnit momentlari bilan bog'liq ekanligining yana bir isboti Amerikalik olim S. J. Barnetning mexanomagnit tajribasi bilan tasdiqlangan. Bu tajribada uncha katta bo'lmagan temir sterjen o'z o'qi atrofida sekundiga 100 marta aylanadigan tezlik bilan aylantirilgan. Bu tajribada sterjenning magnitlanishi va sterjenning aylanishi soat strelkasi yo'nalishida sodir bo'lganda bir uchida shimoliy qutb, qarama-qarshi tomonida esa janubiy qutb paydo bo'lishi kuzatilgan. Bu hodisa sodir bo'lishining sababi shundaki, atomlardagi elektronlar xususiy magnit momentiga ega bo'lishi bilan birga ma'lum bir xususiy harakat miqdori momentiga ham ega bo'ladi. Yuqorida aytib o'tganimizdek, bu magnit va mexanik momentlar o'zaro (8.20) spin giromagnit munosabat bilan bog'langan bo'ladi. Shuning uchun silindr aylanganda "elektron pildiroq"lar giroskopga o'xshab shunday vaziyat olishga harakat qiladiki, ularning harakat miqdori momentlari silindr o'qiga parallel bo'ladi. Harakat miqdorlari momenti albatta magnit momentlarining tartiblanishiga va natijada temir o'zakning magnitlanishiga sabab bo'ladi.

8.6.2. Ferromagnetiklarning ichki magnit maydoni va magnit qabulchanligi

Veyss ismli fizik tez aylanayotgan temir sterjenning ichki magnit momentiga ega bo'lishining sababi ferromagnetik moddasi ichida qandaydir B_i induksiyali molekulyar magnit maydoni bo'lsa kerak deb faraz

qildi. Veyss faraziga ko'ra, bu ichki maydon paramagnetiklardagi tashqi magnit maydoni kabi ferromagnetik kristallda tashqi maydon bo'lmagan-da ($B = 0$) atomlarning magnit momentlarini parallel yo'nalish olishlarini ta'minlaydi. $\vec{B}_i$ ichki maydon induksiya vektori $\vec{j}_i$ magnitlanganlikka to'g'ri proporsional bo'ladi:

$$\vec{B}_i = \lambda \mu_0 \vec{j}_m, \quad (8.50)$$

bunda λ – molekulyar magnit maydon doimiysi, μ_0 -magnit doimiysi. U vaqtda ferromagnetikdagi atomga ta'sir qiluvchi effektiv magnit maydoni ichki $\vec{B}_i$ va tashqi $\vec{B}$ magnit maydonlarining yig'indisidan iborat bo'ladi:

$$\vec{B}_{eff.} = \vec{B} + \lambda \mu_0 \vec{j}_m. \quad (8.51)$$

(8.42) ifodadan magnitlanganlik uchun

$$j_m = \frac{N p_m^2 B}{3 k_B T}$$

ifodani olib, bu ifodadagi B o'rniga (8.51) ifodani qo'yib, zaif maydonlar va uncha past bo'lmagan temperaturalarda ferromagnetikning magnitlanganligi uchun quyidagi formulani olamiz:

$$j_m = \frac{N p_m^2}{3 k_B T} (B + \lambda \mu_0 j_m).$$

Ushbu so'nggi ifodadan magnitlanganlik uchun

$$j_m = \frac{N p_m^2 B}{3 k_B \left(T - \frac{N \lambda \mu_0 p_m^2}{3 k_B} \right)} \quad (8.52)$$

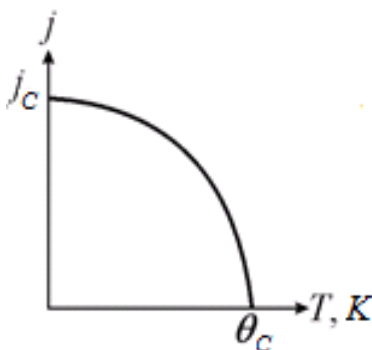
formula kelib chiqadi. (8.42) ifodadagi C Kyuri doimiysi va **Kyuri temperaturasi** (yoki Kyuri nuqtasi) deb ataluvchi $\theta_C = \frac{N \lambda \mu_0 p_m^2}{3 k_B}$ belgilashlardan foydalanib, (8.6) ifodaga ko'ra, ferromagnetik atomining magnit qabulchanligi uchun quyidagi tenglikni olamiz:

$$\chi = \frac{C}{T - \theta_c}. \quad (8.53)$$

(7.53 ifoda **Kyuri-Veyss qonuni** deb nom olgan. Bu qonuniyat magnit qabulchanlikning o'zgarishini paramagnitlik sohasida (Kyuri temperaturasidan yuqorigi nuqtalarda) juda yaxshi ifodalaydi. Bu qonunni sanoq boshi Kyuri nuqtasida bo'lgan Kyuri qonuni sifatida qarash mumkin. Tashqi magnit maydon ta'sirida paramagnitlarning (8.40) Lanjevan formulasi bilan aniqlanadigan magnit momentlarining to'la tartiblanishi faqat mutlaq nol temperaturada kuzatiladi. Ferromagnetiklarda esa magnit momentlarining to'la magnitlanishi Kyuri temperaturasida $T = \theta_K$ da kuzatiladi. N ta atomdan tashkil topgan ferromagnetikning hajm birligidagi natijaviy magnit momenti, yani magnitlanganligi temperatura nolga intilganda quyidagi qiymatga intiladi:

$$j_c = \frac{Ng_L\mu_B}{2}, \quad (8.54)$$

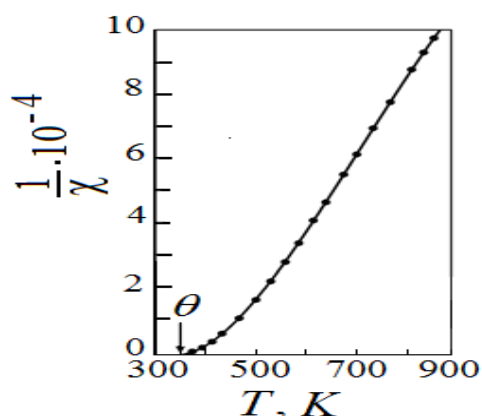
bunda g_L - energiyaviy sathlar bo'linishining **Lande faktori** bo'lib, yuqorida aytib o'tganimizdek, Lande faktorining paydo bo'lishiga magnit maydonida elektronlar energiya sathlarining bo'linishi sabab bo'ladi. Bo'linish kattaligi magnetizm paydo bo'lishida elektronlarning spin magnit momenti tashkil etuvchisi va orbital magnit momenti tashkil etuvchisidan qaysi biri ustunlik qilishiga bog'liq. Sof spin magnetizmi uchun $g_L = 2$, sof orbital magnetizmi uchun esa $g_L = 1$. Past temperaturalarda barcha spinlar bir-birlariga parallel yo'nalish oladi, ya'ni tartiblanadi. Bu hodisaga **ferromagnit tartiblanish** deyiladi. Bu holda to'la (effektiv) magnit maydoni eng katta qiymatga erishadi. Temperatura ortishi bilan ferromagnetikning spontan (o'z-o'zidan) magnitlanishi kamayib boradi va qaralayotgan moddaning Kyuri temperaturasida butunlay yo'qoladi. Bu bog'lanish 8.11-rasmda sxematik aks ettirilgan.



8.11-rasm. Ferromagnitning spontan magnitlanganligining temperaturaga bog'lanish grafigi.

Ushbu rasmdan ko‘rinib turibdiki, magnitlanganlikning kamayishi Kyuri nuqtasidan ancha kichik temperaturalardayoq sezilarli bo‘lib, Kyuri nuqtasi yaqinida ayniqsa keskin kamayishi kuzatiladi.

Ferromagnetiklarning spontan magnitlanganlikka ega bo‘lishi ularning spinlarining tartiblanishiga olib keluvchi qo‘shni atomlar orasidagi ta’sirlashish kuchlaridir. Agar ushbu ta’sirlashuv yetarlicha kuchli bo‘lsa, hamma qo‘shni atomlar spinlari bir-birlariga parallel vaziyatni oladi va materialning magnitlanganligi o‘zining maksimal qiymatiga erishadi, ya’ni maksimal **uzoq magnit tartiblanish** paydo bo‘ladi. Ammo atomlarning issiqlik tebranishlari spinlarning tartiblanishini buzishga intiladi. Bundan kelib chiqadiki, barcha atomlarning spinlarini to‘la tartiblanishini xarakterlovchi maksimal magnitlanganlik mumkin qadar eng past temperaturada, mutlaq nol temperaturada sodir bo‘ladi. Haqiqatda esa kristallning anizotropiyasi, *d*-elektronlarning o‘tkazuvchanlik elektronlari bilan ta’sirlashuvi, kristall panjaradagi nuqsonlar kabi omillar (faktorlar) ferromagnetikning to‘la magnit tartiblanishiga hatto mutlaq temperaturada ham yo‘l qo‘ymasligi mumkin. Ko‘pchilik ferromagnetiklar Kyuri temperaturasidan yuqori temperaturalarda ham yetarli darajada katta magnit qabulchanlikka ega bo‘ladi. Bunday ferromagnetiklarda Kyuri-Veyss qonunidan chetlanish kuzatiladi. Bunga misol qilib (Ni) nikelni keltirish mumkin. Nikelning magnit qabulchanligi Kyuri temperaturasidan bir muncha katta temperaturalarda Kyuri-Veyss qonunidan chetlashish kuzatilib, uning magnit qabulchanligi orta boshlaydi (8.12-rasm). Bunday bog‘lanish shu bilan tushuntiriladiki, garchi yuqori tem -



8.12-rasm. Nikelning magnit qabulchanligining Kyuri temperaturasidan katta temperaturalarda o‘zgarish grafigi.

peraturalarda atomlarning issiqlik harakati tufayli spin magnit momentlarining joylashuvidagi uzoq tartiblanish buzilsa ham, ma’lum bir darajada spin magnit momentlarining joylashuvidagi tartiblanish zaifroqbo‘lsada

saqlanadi. Bu yaqin tartiblanishga o'xshaydi. Ma'lum bir kichik sohalar-dagi atomlarning spinlari bir xil yo'nalishlarini saqlab qoladi. Bu hodisa Kyuri temperaturasidan yuqori temperaturalarda barcha ferromagnetik-larga ham ozmi-ko'pmi xos bo'lsa kerak. 8.2 - jadvalda ayrim ferromag-nit metallardagi va birikmalardagi spontan magnitlanganlik, atom magnit momentining Bor magnetoni orqali ifodalangan o'rtacha qiymati n_{ef} . (Bor magnetonlarining effektiv soni) va Kyuri temperaturalari keltirilgan.

Jadval 8.2

Ayrim ferromagnetiklardagi to'yinish magnitlanganligi, bitta atomga to'g'ri kelgan Bor magnetonlarining effektiv soni va Kyuri temperaturalari.

Magnetik	To'yinish magnitlanganligi, Vb/m^2		n_{ef} ($T=0\text{ K}$)	$\theta_{C, K}$
	$T = 300\text{ K}$ temperaturada	$T = 0\text{ K}$ temperaturada		
Fe	1707	1752	2.221	1043
Co	1400	1446	1.716	1400
Ni	485	510	0.606	631
Gd	1090	1980	7.100	289
Dy	1830(80 K)	-	-	105
MnBi	600	675	3.52	630
Cu_2MnAl	430	580	4.00	603

8.6.3. Ferromagnetizmning vujudga kelishida almashinuvchita'sirlashuvning roli

Ferromagnetiklar ichida molekulyar magnit maydoni bo'lishining sababi ularning atomlarining spinlarining bir xil yo'nalish olishlari, ya'ni tartiblanishi deb faraz qilinsada, buning sababi tushunarsiz edi. Tabiiyki, qanday kuch atomlarning spinlarining tartiblanishiga sabab bo'ladi degan savol turar edi. 1928 yilda Frenkel va Geyzenberg bu kuch o'zaro elektrostatik ta'sirlashuvchi elektronlar sistemasining alohida xossasi deb tushuntirdilar. Pauli prinsipiga ko'ra, elektronlarning spinlari to'la muvo-zanatlangan bo'lsa, elektron gazining erkin energiyasi minimum qiy-matga ega bo'lib, sistema turg'un holatda bo'ladi. Frenkel va Geyzen-berg nazariyasiga ko'ra, agar elektronlar orasida kuchli elektrostatik ta'sirlashuv bo'lsa, ularning spinlarining o'zaro parallel yo'nalishli vazi-yatlari, binobarin magnitlangan holati turg'un bo'ladi. Buning natijasida ta'sirlashishning natijaviy energiyasi Kulon ta'sirlashish energiyasidan tashqari spinlarning o'zaro oriyentatsiyasiga bog'liq bo'lgan qo'shimcha

hadga ham ega bo‘ladi. Bu qo‘shimcha energiya **almashuvchi o‘zaro ta’sir energiyasidir**. Ta’sirlashuvchi i va j khil atomlarning spin momentlari $p_i^{sp.}$ va $p_j^{sp.}$ bo‘lsin. U holda ularning o‘zaro almashinuvchi energiyasi quyidagicha aniqlanadi:

$$E_{alm.} = -2I p_i^{sp.} p_j^{sp.}, \quad (8.55)$$

bunda I – energiya o‘lchov birligiga ega bo‘lgan **almashinuv integrali**.

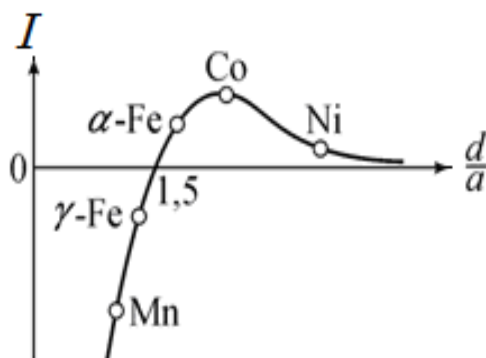
Bu integral elektronlarning almashinuv ehtimolini ifodalaydi. Aniqroq aytsak, elektron 1 ning A atomdan B atomga, elektron 2 ning B atomdan A atomga o‘tish ehtimolini belgilaydi. Almashinuvchi energiya ifodasidagi almashinuv integralining mavjudligi i va j khil atomlarning zaryadlarining taqsimlanish sohalarining tutashuvi bilan bog‘liqdir. Garchi almashinuv energiyasi elektrostatik tabiatga ega bo‘lsa ham uni klassik nuqtai nazardan tushunish mumkin emas. Bu energiya elektronlarning spinlari parallel va antiparallel bo‘lgan hollarda sistemaning kulon ta’sirlashuvdagi energiyalarining farqini xarakterlaydi. Almashinuv energiyasi haqida tasavvur hosil qilish uchun ushbu kattalikni magnit tartiblanishni buzish uchun kerak bo‘ladigan energiya bilan taqqoslaymiz. Masalan, Kyuri temperaturasida temirdagi magnit tartiblanishini buzish uchun bitta atomga to‘g‘ri keladigan issiqlik energisi $k_B\theta$ bo‘lib, u taxminan ≈ 0.1 eV energiyaga teng. Binobarin, bitta atomga to‘g‘ri keluvchi tartiblantiruvchi almashinuvchi ta’sir energiyasi ham mana shu tartibda bo‘ladi. Agar magnit tartiblanish kvant tabiatiga ega emas deb faraz qilsak, masalan, μ_1 magnit momentiga ega bo‘lgan dipolning oriyentatsiyasiga sabab bo‘luvchi μ_2 magnit momentiga ega bo‘lgan ikkinchi bir dipolning magnit maydoni energiyasi quyidagicha aniqlanadi:

$$E \approx \frac{\mu_0 |\mu_1| |\mu_2|}{r^3},$$

bunda r - dipollar orasidagi masofa. Bu energiya bitta Bor magnetoni tartibidagi kattaligidek magnit momentlari uchun qattiq jismdagi muvozanatda bo‘lgan eng yaqin qo‘shni atomlar uchun hisoblansa, taxminan 0.001 eV ekanligi kelib chiqadi. Demak, dipol-dipol ta’sirlashuv effekti tajribada kuzatiladigan almashinuvchi energiyaga nisbatan qariyb yuz marta kichkina ekan. Bu natija ferromagnetizmni vujudga kelishini klassik modellar bilan tushuntirib bo‘lmazligini va bu hodisa zamirida kvant mexanikasi effektlari yotishini ko‘rsatadi.

I almashinuv energiyasining qiymati atomlararo masofa d bilan atomning to‘lmagan ichki $3d$ (yoki $4f$) elektron qavati diametri a ning nisbati - (d/a) ga bog‘liq ekan. Bu bog‘lanish 8.13-rasmida aks ettirilgan.

Ferromagnetizm almashinuv integrali musbat ($I > 0$) bo'lgan, $d/a > 1.5$ shart bajariladigan elementlarda kuzatiladi. Masalan, Fe guruhi elementlaridan faqat alfa-temir (α -Fe), kobalt (Co) va nikel (Ni) elementlarida ferromagnetizm kuzatiladi. Bu guruhdagi γ -Fe va boshqa elementlarda



8.13-rasm. I almashinuv integralining atomlararo masofa bilan to'lmagan elektron qavatining radiusining nisbatiga bog'lanish grafigi.

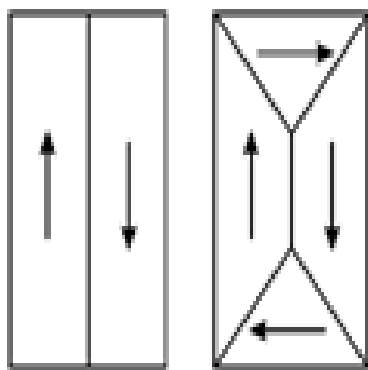
ferromagnetizm kuzatilmaydi. Biroq ba'zi hollarda boshqa elementlar bilan zaif legirlash yordamida biror elementni ferromagnetikka aylantirish mumkin. Masalan, bunday effekt Mn - marganetsni kam miqdordagi azot bilan legirlash natijasida d/a nisbatni 1.5 miqdorga yaqinlashtirish va ferromagnetizmni hosil qilish mumkinligi isbot etilgan.

Bundan tashqari, ferromagnetizm xossasiga ega bo'lgan, ammo tarkibiga ferromagnetik bo'lmagan elementlar kirgan ko'plab ximiyaviy birikmalar va qotishmalar ham bor. Masalan, Mn-Cu-Al qotishmasi, MnSb, MnBi, CrO_2 , MnOFe_2O_3 birikmalari va shular kabilar ferromagnetizm xossasini namoyon qiladi. Bu ma'lumotlar ferromagnetizmning paydo bo'lishida moddalarning kristall tuzilishi hal qiluvchi omillardan biri ekanligidan dalolat beradi.

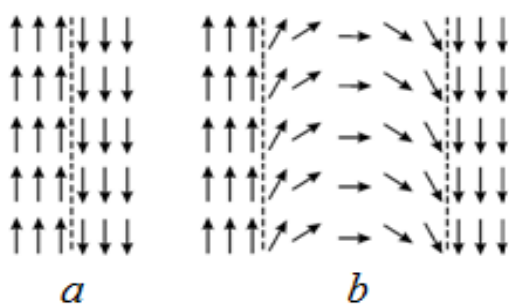
8.6.4. Ferromagnetiklarning domenli tuzilishi

Kyuri temperaturasidan past temperaturalarda ($T < \theta_C$) ferromagnetiklarning to'lmagan d - va f - elektron qobiqlarining spin momentlari o'zaro parallel joylashgan bo'ladi. Bu holda magnitlanganlik to'yinishga intilishi kerak. Biroq tajribalarning ko'rsatishicha ferromagnetik moddalarning magnitlanganligi ko'pincha nol bo'lib, faqat tashqi magnit maydonidagina ularning magnitlanganligi ortadi va ancha zaif maydondayoq to'yinish qiymatiga erishadi. Veyss ferromagnetiklarning bu xossasini ularning makroskopik tuzilishi bilan tushuntirib berdi.

Ferromagnetik namuna magnitlanganligi to‘yinishga yetgan, lekin natijaviy spinlarining yo‘nalishlari bilan farq qiluvchi ko‘plab alohida sohalaridan tashkil topgan bo‘ladi. Bu sohalar **domenlar** deyiladi. Ikki qo‘shni domenlardagi spinlarning yo‘nalishlari bir xil bo‘lsa, ularning bir xil (musbat yoki manfiy) qutblari o‘zaro itarilishib, ularning vaziyatlari turg‘un bo‘la olmaydi. Magnitlanganlik vektorlari qarama-qarshi yo‘nalgan qo‘shni domenlar vaziyatlari turg‘un bo‘ladi. Chunki ular qarama-qarshi qutblarga ega bo‘lib, o‘zaro tortishadi. Magnit domenlarning natijaviy magnitlanganliklarining vektorlari turli yo‘nalishda bo‘lganligi uchun namunaning natijaviy magnitlanganligi nol bo‘ladi (8.14-rasm). Domenlar bir-birlaridan ma‘lum bir oraliq qatlam bilan ajralgan bo‘ladi. Bu oraliq qatlamda bir domenga xos bo‘lgan spinlar oriyentatsiyasining ikkinchi domenga xos bo‘lgan spinlar oriyentatsiyasiga o‘tish kuzatiladi. Bunday oraliq **Blox devorlari** deb ataladi (8.15-rasm). Blox devorlarining qalinligi kristall panjara doimiysidan bir necha yuzlab marta katta bo‘lishi mumkin. Masalan, α -Fe uchun uning qalinligi panjara doimiysidan taxminan 300 marta katta (100 nm). Blox devorchalari paydo bo‘lish sabablarini tahlil qilamiz. Qo‘shni domenlarning spinlari biridan ikkin-



8.14-rasm. Natijaviy magnitlanganligi nol bo‘lgan ferromagnet monokristall namunalar.



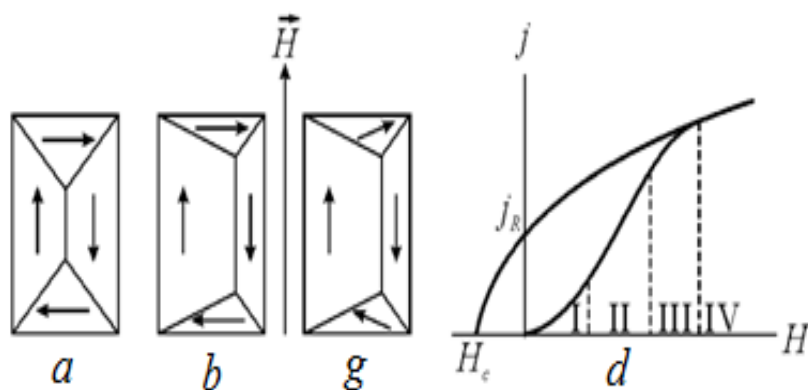
8.15 - rasm. Magnit domenlari chegarasida (Blox devorida) spinlar yo‘nalishlarining o‘zgarishi.

chisiga o‘tganda oriyentatsiyalarini 8.15, *a* –rasmdagidek keskin o‘zgartira olmaydi. Bir domendagi spontan magnitlanganlik vektorlari ikkinchi

qo'shni qarama-qarshi yo'nalishli spinli domenga yo'nalishini bitta atom tekisligida keskin emas, balki bir necha atom tekisliklarida asta-sekin o'zgartirib o'tadi. Buni energiyaviy nuqtai nazardan tushuntirsak, spinlarning keskin o'zgartirishga qaraganda ularni asta-sekin o'zgartirish uchun kamroq almashinuv energiyasi sarf bo'ladi va spin yo'nalishlari-ning asta-sekin o'zgarish ehtimoliyati katta bo'ladi. Sodda qilib aytsak, spinlari qarama-qarshi yo'nalishli ikki qo'shni A va B spontan magnitlanganlik domenlarining orasida shunday soha (Blox devori) bo'ladiki, bu sohaning A domenga yaqin tomonida A domendagi spin yo'nalishlari ko'proq bo'ladi va B tomonga yaqinlashgan sayin B domendagi spin yo'nalishlari ustunlik qila boshlaydi va nihoyat faqat B domendagi barcha spinlarning yo'nalishlari A domendagi spinlarning yo'nalishiga qarama-qarshi bo'lib qoladi (8.15 - b rasm).

Blox dvorlarining qalinligi odatda magnit domenlarning o'lchamidan bir tartibga kichkina bo'ladi. Yupqa magnit plyonkalarida domenlarning hatto alohida domen chegarasi doirasida tartiblangan harakatini tashkil qilish mumkin va shu yo'l bilan magnit maydonini boshqarish mumkin. Silindrik magnit domenlarga ega bo'lgan eslab qoluvchi qurilmalar (SMD ZU) va yorug'lik nurlarini boshqaruvchi qator magnitooptik asboblarda mana shu prinsip asosida ishlaydi.

Domen tuzilishli ferromagnetiklarning magnitlanganligi magnitlovchi tashqi magnit maydonning kattaligiga va yo'nalishiga murakkab boglanishda bo'ladi deyish mumkin. Tashqi magnit ta'sir etmaganda natijaviy magnit momenti nolga teng bo'lgan ferromagnetning magnitlanishi domenlarining shaklining va oriyentatsiyasining o'zgarishi bilan sodir bo'ladi. Tashqi magnit maydon $H = 0$ bo'lganda ma'lum bir yo'nalishda magnitlangan biror hajmga unga qarama-qarshi yo'nalishda magnitlangan shuncha miqdordagi hajm to'g'ri keladi (8.16 - rasm, a). Buning natijasida ferromagnetikning natijaviy magnitlanganligi nol bo'ladi. Maydon kuchlanganligi $H \neq 0$ bo'lgan tashqi magnit maydon ta'sirida bu



8.16 -rasm.
Ferromagnetikning
magnitlanishi.

muvozanat buziladi. Ferromagnetikning magnitlanish jaryonini bir nechta bosqichga bo'lish mumkin.

1. Zaif tashqi magnit maydonda bu maydonga qulay moslashadigan oriyentatsiyali domenlarning hajmi oriyentatsiyasi noqulay bo'lgan domenlarning hajmi kamayishi hisobiga kattalashadi (8.16-rasm, *b*). Agar tashqi maydonni olib tashlasak, domenlarning dastlabki shakli va o'lchamlari qayta tiklanadi. Bu jarayonlar **domenlar chegaralarining qaytar siljishi** deyiladi. 7.16, *d*- rasmdagi magnitlanganlikning tashqi magnit maydoni kuchlanganligiga bog'liqlik grafigida bu jarayonga mos keluvchi oraliq magnitlanganlik egri chizig'ining I qismiga to'g'ri keladi.

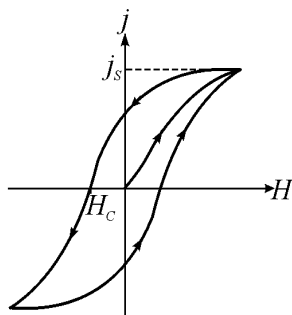
2. Agar tashqi maydonning H kuchlanganligini oshira borsak, kristall strukturasi mavjud nuqsonlar hosil qiladigan to'sqinliklar tufayli qaytmas jarayonlar boshlanadi. Nuqsonlar to'sqinliklarini yengish uchun domenlar chegarasi tashqi maydondan yetarlicha katta energiya olishi kerak. Endi tashqi maydon olib tashlansa, u vaqtda nuqsonlar domenlar chegaralarining avvalgi holatiga qaytishiga xalaqit beradi. Bu bosqichga 7.16, *d*-rasmda grafikning II qismi to'g'ri keladi.

3. Yuqori kuchlanganlikka ega bo'lgan magnit maydonida domenlarning magnitlanganligi vektorlarining tashqi magnit maydoni yo'nalishi bo'yicha aylanishi sodir bo'ladi (8.16, *g*-rasm). Bu holda magnitlanganlik **texnikaviy to'yinishga** erishadi. Bu jarayon **aylanish jarayoni** ham deyiladi. Bu holatga 8.16, *d*- rasmda grafikning III qismi to'g'ri keladi.

4. Ferromagnetikning magnitlanish egri chizig'ining III qismidan keyin magnitlanganlikning sekin o'sishi kuzatiladi. Bunga sabab atomlarning issiqlik harakati bo'lib, bu harakat $T = 0$ K temperaturalardan farqli temperaturalarda spontan magnitlangan domenlarning hammasini bir-birlariga parallel oriyentatsiya olishlariga halaqit beradi. Magnitlanishning to'yinish qismidan keyingi jarayon **parajarayon** deyiladi. Parajarayonga 7.16- *d*- rasmdagi grafikning IV sohasi to'g'ri keladi.

Agar magnitlanganlik to'yinishga yetgandan keyin tashqi magnit maydon olib tashlansa, u vaqtda ferromagnetik to'la magnitsizlanmaydi, balki qandaydir j_q **qoldiq magnitlanganlik** saqlanib qoladi. Bu hodisadan doimiy magnitlar hosil qilishda foydalaniladi. Qoldiq magnitlanganlik yo'q bo'lishi uchun magnitsizlovchi, maydon kuchlanganligi avvalgi magnitlangan magnit maydoninikiga teskari yo'nalishda bo'lgan maydon ta'sir ettirish kerak. Magnitsizlovchi maydon kuchlanganligi N_c **koersitiv kuch** deyiladi. Qayta magnitlashning to'la sikli **gisterezis sirtmog'ini**

hosil qiladi (8.17-rasm). Gisterezis sirtmog'ining o'ziga xos tomoni shundan iboratki, u magnitsizlanish jarayonining avvalgi olgan magnit induksiyasi tufayli tashqi kamayuvchi magnitlovchi maydonning o'zgarishidan orqada qolishini aks ettiradi. Bu orqada qolish shuni ko'rsatadiki, ferromagnetik magnitsizlanishida magnitlanish jaryonida olgan energiyasini hammasini qaytarib bermaydi. Magnitsizlanish jarayoni amalga oshuvida bu energiya bir qismi yo'qoladi. To'la sikl davomi-



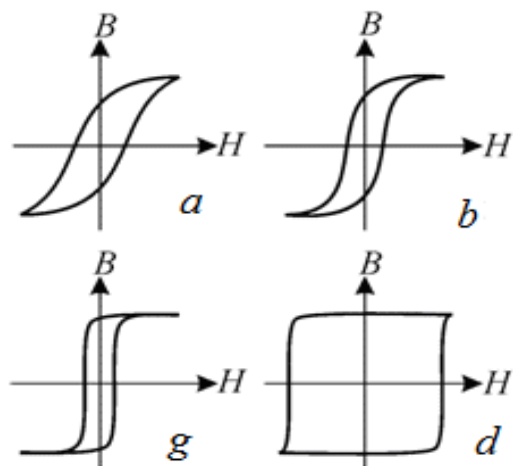
8.17-rasm. Ferromagnetiklardagi gisterezis sirtmog'i.

da yo'qotilgan magnit energiyasining qiymati gisterezis sirtmoqlari qamrab olgan yuzaga proporsional bo'ladi.

Magnitsizlanishda magnit energiyasining yo'qolishi asosan domenlar chegaralarining harakatiga bo'ladigan to'sqinliklarni yengish bilan bog'liq, ya'ni H_C koersitiv kuchning kattaligi bilan bog'liq. Bu kuch kristall strukturasi tuzilishiga nihoyatda sezgir. U kristall donachalarining o'lchamlarining kamayishi, kristall panjaradagi buzilishlar, dislokatsiyalar, begona (kirishma) atomlar va domenlari chegaralarining harakatiga to'sqinlik qiluvchi boshqa faktorlar ko'payishi bilan keskin ortadi. H_C [A/m] koersitiv kuchning kattaligi bir metrga bir necha yuz amperdan bir necha ampergacha bo'lgan oraliqda o'zgarishi mumkin.

Umuman, magnitlanganlikning tashqi magnit maydon kuchlanishiga bog'liqligini ko'rsatuvchi $j(H)$ grafi ferromagnetik materiallarning muhim xarakteristikalaridan biridir. Bu bog'lanish grafi ferromagnetiklar foydalaniladigan qurilmalarning energiyaviy yo'qotishlarni hisoblashga imkon beradi. Gisterezis sirtmog'ining ko'rinishiga qarab ferromagnetiklar ikki guruhga bo'linadi: kichik koersitiv kuchga ($H_C < 4000$ A/m) va tor gisterezis sirtmoqqa ega bo'lgan ferromagnetiklar **yumshoq magnitli materiallar** deyiladi. Katta koersitiv kuchga ($N_s \geq 4000$ A/m) va keng gisterezis sirtmog'iga ega ferromagnetiklar **qattiq magnitli materiallar** deyiladi. Yumshoq magnit ferromagnetiklar transformatorlarning o'zaklarini yasash uchun ishlatiladi. Magnit materiallarning ximiyaviy va

fazalar tarkibiga va tayyorlash texnologiyasiga qarab, ularning gisterezis sirtmoqlari, ya'ni ferromagnit materialning B magnit induksiyasining tashqi magnit maydonning $\pm H_t$ qiymatlari orasidagi o'zgarishi turli ko'rinishda (shaklda) bo'lishi mumkin (8.18-rasm). Bu erda H_t – magnit induksiyasini to'yinishiga to'g'ri keluvchi tashqi magnit maydon kuchlanganligi.



8.18-rasm. a – nishob, b – keskin, g - to'g'ri burchakli va d - kvadrat ko'rinishdagi gisterezis sirtmoqlari.

Gisterezis sirtmog'i to'g'ri burchakli va kvadrat shaklida bo'lgan ferromagnetiklar elektron sxemalarning xotira elementlarida foydalani-ladi.

8.6.5. Ferromagnetizm nazariyasining asosiy xulosalari

Ferromagnetizm nazariyasini birinchi bo'lib Landau va Lifshits ishlab chiqqanlar. Bu nazariyaning asosiy xulosalari haqida qisqacha to'xtalib o'tamiz. Ushbu nazariyaga ko'ra, ferromagnetizmning va ferromagnit domenlarning mavjud bo'lishiga bir qator raqobatlashuvchi omillar sabab bo'ladi. Bular quyidagilar:

- turli atomlar zaryadlarining taqsimlanish sohalarining tutashuvi bilan bog'liq bo'lgan almashinuv energisi $E_{al.}$;
- kristallografiyaviy magnit anizotropiyasi energiyasi;
- magnitostriksiya energiyasi;
- magnit energiyasi;
- magnit elastik energiya.

Tabiiyki, ferromagnetizmga sabab bo'luvchi to'la energiya sanab o'tilgan barcha energiyalarning yig'indisidan iborat bo'ladi. Ushbu ener-giyalarning har biri bilan qisqacha tanishib chiqamiz.

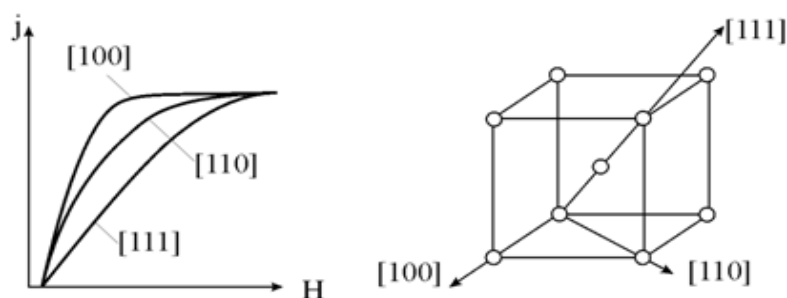
Almashinuv energiyasi. Landau va Lifshits nazariyasiga ko'ra N ta i va j sort atomlardan tashkil topgan ferromagnetikning to'la almashinuv ener-

giyasi (8.55) ifodaga ko‘ra quyidagicha aniqlanadi:

$$E_{at} = -2 \sum_{ij}^N I \left(\vec{p}_i^{sp} \cdot \vec{p}_j^{sp} \right). \quad (7.56)$$

Agar sistema ikkita elektrondan tashkil topgan bo‘lsa almashinuv integrali $I = (E_s - E_t)/2$ bo‘ladi, bunda E_s – va E_t – mos holda elektron larning singlet va triplet holatlaridagi energiyalari. Agar $E_t < E_s$ shart bajarilsa, bir xil oriyentatsiyali spinlar triplet holatda bo‘ladi va almashinuv integrali $I > 0$ (musbat) bo‘lib, bu holda ferromagnetizm kuzatiladi. Agar $E_t > E_s$ bo‘lsa, almashinuv integrali $I < 0$ (manfiy) bo‘lib, qo‘shni magnet domenlar spinlari antiparallel holatda joylashgan bo‘ladi va modda **antiferromagnetik** holatda bo‘ladi. Qo‘shni domenlar birbirlaridan spinlari o‘zgarib boruvchi chegara (Blox devori) bilan ajralgan bo‘ladi (8.15, b - rasm).

2. Kristallografiyaviy magnet anizotropiyasi energiyasi. Ferromagnetik kristallarning magnetlanganligining tashqi magnet maydon kuchlanganligiga bog‘lanish grafigini tahlil qilish shuni ko‘rsatadiki, ferromagnetik monokristallarda **oson** va **qiyin magnetlanish yo‘nalishlar** (o‘qlar) bo‘lar ekan. Masalan, alfa temirning (α -Fe) kub monokristallida $[100]$ va $[110]$ kristallografiyaviy yo‘nalishlari oson magnetlanish yo‘nalishlari bo‘lib, $[111]$ yo‘nalish esa qiyin magnetlanish yo‘nalish ekan. 8.19-rasmda bu yo‘nalishlar bo‘yicha magnetlanish grafiglari keltirilgan. Kristallarda oson va qiyin magnetlanish yo‘nalishlarining mavjud bo‘lishi elektron orbitalarining kesishuvi tufayli sodir bo‘ladi. Spin-orbital bog‘lanish tufayli elektronlarning spin magnet momentlari orbital magnet momentlari bilan ta’sirlashadi. Orbital magnet momentlari esa kristall panjarada mavjud bo‘lgan elektrostatik maydon va qo‘shni atomlar to‘lqin funksiyalari kesishuvi natijasida kristall panja-



8.19 -rasm. α -temir monokristallining magnetlanish grafigining kristallografiyaviy o‘qlarga bog‘liqligi.

ra bilan ta'sirlashadi. Magnit anizotropiyasi Blox devorining qalinligini cheklovchi omildir. Aks holda Blox devori qalinligi cheksiz o'sib ketar edi. Anizotropiya energiyasining ulushi Blox devori qalinligiga proporsional ravishda ortadi. Almashinuv energiyasi va anizotropiya energiyalari orasidagi balans domenlar devorining qalinligini belgilaydi.

3. Magnitostriksiya energiyasi. Magnetikning magnitlanishi tufayli o'z o'lchamlarini o'zgartirishi **magnitostriksiya hodisasi** deyiladi. Masalan, nikel namunasini to'yinishgacha magnitlaganda tashqi magnit maydon yo'nalishida u qisiladi, ko'ndalang yo'nalishda esa cho'ziladi. Temir namuna esa aksincha maydon yo'nalishida uzayadi. Materialning magnitostriksiyaviy xossasining xarakteristikasi uchun materialning magnitlanishi natijasidagi nisbiy uzayishiga teng bo'lgan λ_s – **magnitostriksiya doimiysidan** foydalaniladi: $\lambda_s = \frac{\Delta l}{l}$. Magnitostriksiyaviy anizotropiya energiyasi quyidagicha aniqlanadi:

$$E_\lambda = \frac{G\lambda_s^2}{2}, \quad (8.57)$$

bunda G – elastiklik moduli.

4. Magnitostatik energiya. Bu energiya domenlararo devorlar mavjudligi bilan aniqlanmaydi. Ammo domen strukturaga uning bevosita aloqasi bor. Magnitostatik energiya quyidagi formula bilan aniqlanadi:

$$E_S = \frac{\mu_0 N_P j_m^2}{2}, \quad (8.58)$$

bunda N_P – namunaning shakliga bog'liq bo'lgan va magnitsizlanish faktori deb ataluvchi miqdoriy kattalik. Agar namuna antiparallel domenlarga bo'linsa, magnitostatik energiya E_S kamayadi. Agar domenlar hosil bo'lishi magnit oqimining ferromagnit modda ichida tutashib ketishi bilan shakllansa, E_S nolga intiladi.

5. Magnit energiya – bu ferromagnetikning $\vec{H}$ kuchlanganlikka ega bo'lgan tashqi maydondagi energiyasi. Bu energiya quyidagicha aniqlanadi:

$$E_M = - \mu_0 (\vec{j}_m \cdot \vec{H}). \quad (8.59)$$

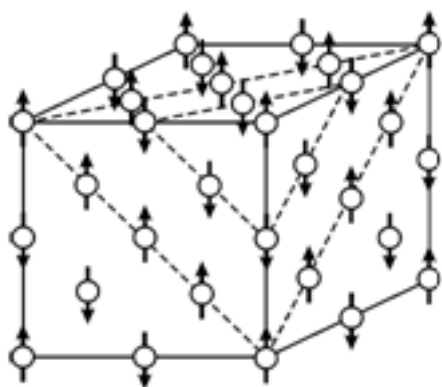
To'la energiyaga ferromagnetikning to'yinmagan konfiguratsiyasi va qandaydir domen strukturasi mos keladi.

6. Ferromagnetizm vujudga kelishida **magnitoelastik effekt** energiyasi ham rol o'ynaydi. Bu effektga **Villari effekti** ham deyiladi. Zarralar orasidagi masofani o'zgarishi bilan ular orasidagi magnit ta'sirlashuv ham o'zgaradi. Bunda o'rtacha magnit momenti, Kyuri temperaturasi va shu kabi xarakteristikalar ham o'zgaradi.

Magnitlanish jarayonida hosil bo'lgan deformatsiya magnit energiyasining ayrim tashkil etuvchilarini o'zgartiradi. Magnit ta'sirlashuv energiyasiga izotrop va anizotrop deformatsiya energiyalari ulush qo'shadi. Anizotrop qism chiziqli magnitostriksiyani o'zgarishiga olib keladi. Bu kristallning simmetriyasining o'zgarishiga olib keladi. Izotrop deforma tsiya energiyasi hajmiy magnitostriksi-yaning o'zgarishiga, mos holda hajmiy kengayish koeffitsiyentining o'zgarishiga olib keladi.

8.7. Antiferromagnetizm. Ferrimagnetizm

Antiferromagnetizm ham ferromagnetizm kabi spinlari muvozanatlashmagan to'lmagan elektron qobiqlarga ega bo'lgan moddalarda kuzatiladi. Antiferromagnetiklar ham domenlardan tashkil topgan bo'lib, har bir magnit domeni ichida elektronlar spinlarining qat'iy tartiblanishi kuzatiladi. Biroq ferromagnetiklardan farqli holda ferrimagnetik domenlaridagi spinlar antiparallel bo'ladi. Bu hol almashinuv integrali manfiy ($I < 0$) bo'lgan moddalarda kuzatiladi. $I < 0$ bo'lganda kristallning qo'shni tugunlarining spinlarining antiparallel joylashuvi energiyaviy jihatdan turg'un bo'ladi. Bu holda spinlarning joylashuvi tartiblangan bo'lishi ham mumkin, lekin spontan magnitlanish paydo bo'lmaydi. Chunki qo'shni tugunlarning qarama-qarshi yo'nalgan spinlari bir-birlarini muvozanatlaydi (8.20-rasm).

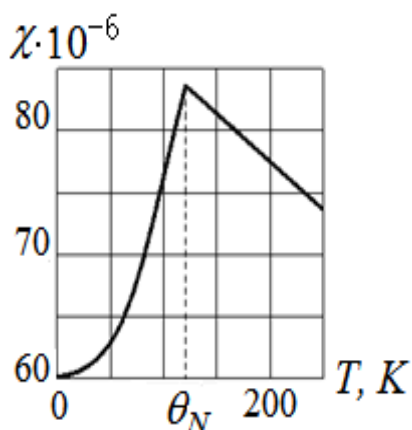


8.20-rasm. MnO marganets oksidining magnit strukturasi (faqat marganets oksidi ko'rsatilgan Mn^{2+}).

Marganets oksidi (MnO), marganets sulfidi (MnS), nikel xromit ($NiCr$), xrom oksidi (Sr_2O_3), vanadiy oksidi (VO_2) va boshqa ko'pgina birikmalar antiferromagnetiklar hisoblanadi. MnO marganets oksidining

magnit strukturasi tahlil qilib ko‘raylik. Bu strukturani bir - biriga qarama-qarshi yo‘nalishda magnitlangan ikkita panjaradan tashkil topgan deb qarash mumkin (8.20-rasm). Margenets ioni ham kislorod ioni ham tomonlari markazlashgan kub panjara hosil qiladi. Bu ikki panjara o‘zaro shunday kombinatsiyadagi, metall ionlarining eng yaqin qo‘shnilari faqat kislorod ionlaridir va aksincha (NaCl tipidagi struktura). Mn^{2+} ionlarining magnit strukturasi shundayki, uning (111) tekislikda joylashgan ionlarining spinlari parallel bo‘lib, yondosh ionlarning spinlari antiparalleldir. Tabiiyki, ionlarning bu ikki qarama-qarshi yo‘nalishdagi magnit momentlari bir-birini muvozanatlaydi va kristallning natijaviy spontan magnitlanganligi nolga teng bo‘ladi.

Antiferromagnetiklarning magnit strukturasi ham atomlarning issiqlik tebranishlari ta‘sir qiladi. Mutlaq nol temperaturada panjaralardagi atomlarning qarama-qarshi yo‘nalishdagi magnit momentlari bir-birini muvozanatlaydi va natijaviy magnit momenti nol bo‘ladi. Temperaturani ko‘tara boshlasak, spinlarning antiparallel joylashuvi asta-sekin buzila boshlaydi va antiferromagnetikning magnitlanganligi orta boshlaydi. Magnitlanganlik **Neyel temperaturasi** (θ_N) deb ataluvchi temperaturada maksimal qiymatiga erishadi (8.21-rasm). Bu temperaturada spinlarning tartibli joylashuvi butunlay yo‘qoladi va ferromagnetik paramagnetikka aylanadi. Temperaturaning undan keyingi ortishida magnitlanganlik paramagnetiklardagi singari kamaya boshlaydi va Kyuri-Veyss qonuniga bo‘ysunadi.



8.21-rasm. MnO antiferromagnetikning magnit qabulchanligining temperaturaga bog‘lanish grafigi.

Antiferromagnetikning magnit qabulchanligining temperaturaga bog‘lanishi quyidagi qonuniyatga bo‘ysunadi:

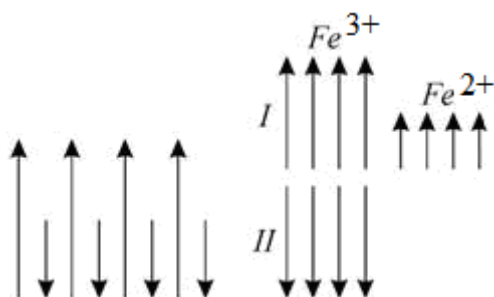
$$\chi = \frac{C}{T + \theta_N}. \quad (8.60)$$

Shunday qilib, antiferromagnetikalarda yondosh panjaralarning magnit momentlari kattaligi bo'yicha teng, lekin qarama-qarshi oriyentatsiyada bo'lganligi uchun mutlaq nol temperaturada ular bir-birlarini muvozanatlaydi va natijaviy magnit momenti nol bo'ladi. Ammo shunday hollar ham bo'ladiki, yondosh panjaralardagi qarama-qarshi oriyentatsiyadagi magnit momentlari miqdor jihatdan teng emas. Bunday hollar yondosh panjaralardagi atomlar soni teng bo'lmaganda yoki ular turli tabiatli bo'lganda sodir bo'ladi. Bu holda moddada magnit momentlari farqi paydo bo'ladi va butun kristallning spontan magnitlanganligi paydo bo'ladi. Bunday magnetiklar **ferritlar** deyilib, bu hodisaga esa **ferri-magnetizm** deyiladi.

Ferritlarning tabiati tashqaridan qaraganda ferromagnetiklarnikiga o'xshaydi, lekin uning magnitlanish tabiati boshqacha bo'lganligi uchun uning spontan magnitlanganligining temperaturaga bog'liqlik xarakteri ham boshqacha bo'ladi. Ferritlarning magnitlanganligi temperatura ortishi bilan bir tekis kamaymaydi, Kyuri temperaturasiga yetmasdan nol orqali o'tadi.

Temir oksidi Fe_2O_3 , bir yoki bir necha metallarning oksidlaridan tashkil topgan qattiq eritmalar ferrit moddalar hisoblanadi. Ferritning tarkibiga litiy (Li), rux (Zn), nikel (Ni), kadmiy (Cd), qo'rg'oshin (Pb), mis (Cu), magniy (Mg), marganets (Mn) va boshqa metallarning oksidlari kiradi. Magnetit $\text{FeO} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$ eng keng tarqalgan materialdir. Bu birikmada kislorodning manfiy ionlari tomonlari markazlashgan kristall panjara hosil qiladi. Har bir $\text{FeO} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$ molekulaga bitta ikki valentlik Fe^{2+} va ikkita uch valentlik Fe^{3+} temir ioni to'g'ri keladi. Ikki valentlik temir ionlari boshqa ikki valentlik Mg, Ni, Co, Mn, Cu kabi metallar bilan almashtirilishi mumkin. Yondosh panjaralardan biri temirning uch valentlik ionlarining yarmisidan, boshqasi esa temirning yoki u bilan almashuvchi boshqa metallarning ikki valentlik ionlaridan tashkil topgan bo'ladi. Yondosh panjaralarning (podreshetkalarining) magnit momentlari antiparallel yo'nalgan bo'ladi (8.22-rasm). Shuning uchun uch valentlik ionlarning magnit momentlari muvozanatlashadi, ikki valentliklariniki esa muvozanatlashmaydi va spontan magnitlanish sodir bo'ladi.

Ferritlar o'zida juda yaxshi magnit xossalarni jamlagan holda koertsitiv kuchi oz, magnit to'yinganlikning yuqori qiymatiga ega va juda yuqori elektr qarshiligiga ega bo'ladi. Elektr qarshiligi kam bo'lgan odatdagi ferromagnetiklarda uyurmali Fuko toklari hosil bo'lishi natijasida juda yuqori darajada energiya isrofi sodir bo'ladi. Shu tufayli ular-



8.22 - rasm. $\text{FeO} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$ ferritida spin magnet momentlarining joylashuvi.

dan yuqori chastotali texnikada foydalanish mumkin bo'lmagaydi. Shuning uchun ferritlar yuqori chastotali texnikada foydalaniladigan raqobat-siz materiallardir.

To'g'ri burchakli gisterezisga (8.18 - g rasm) ega bo'lgan ferritlar magnet xotiralari yacheykalari sifatida keng foydalaniladi. Ferritlardan yasalgan doimiy magnetlar elektromagnetlar bilan muvaffaqiyatli raqobatlasha oladi.

Hozirgi vaqtda ko'pincha ma'lumotlar (informatsiya) to'plash va saqlash uchun ferromagnet materiallardan foydalanilmoqda. Ana shunday qurilmalardan biri qattiq magnet disk yoki kompyuterning vinchesteri hisoblanib, ularsiz birorta zamonaviy kompyuterning ishlashini tasavvur qilish mumkin emas.

Vinchesterning asosiy qismi magnet disklaridir. Ular yupqa qatlamli yuqori sifatli ferromagnetik surkalgan alyuminiydan, shisha yoki keramiklardan tashkil topgan plastinkalardir. Magnet qoplamalarning tarkibi murakkab bo'lib, purkash (napylenie) yoki vakuumda cho'ktirish (osajdeniye) yo'llari bilan hosil qilinadi. Bugungi kunda magnet qoplama sifatida temir va uning oksidlari asosidagi materiallar ishlatilmoqda. Disklarga yozish yoki informatsiya olish magnet diskarning ishchi qatlami yuzasida vaziyatlarini katta aniqlik bilan o'zgartira oladigan magnet boshchalar (golovkalar) orqali amalga oshiriladi.

Magnet qoplamalarning ayrim qismlari ikkita mumkin bo'lgan usullardan biri bilan magnetlanib, 0 va 1 bilan ifodalanadi (ya'ni 1 bayt). Bunday magnetlangan sohalar magnet domenidir. Agar domen magnetlantirilsa ma'lumot yoziladi. Ma'lumot yozilish zichligini domenning o'lchami belgilaydi. Bir bit informatsiya yozish uchun vinchesterning magnet boshchasi ma'lum bir usul bilan biror yo'nalishdagi magnet maydon hosil qiladi. Bu maydonda domenning hamma elementar magnet momentlari asosan bir yo'nalishda oriyentatsiya oladi. Bu oriyentatsiya

magnit boshchani ferromagnetikka ta'siri tugagandan keyin uzoq vaqtgacha saqlanadi.

8.8. Doimiy magnitlar

Magnit materialdan yasalgan doimiy magnit maydonining mustaqil manbasi bo'lgan buyum **doimiy magnit** deyiladi. Eng sodda hollarda doimiy magnitlar maxsus termik ishlov berilgan va qo'shimcha ravishda to'yinishgacha magnitlangan turli shakldagi (sterjen, silindr, shayba va boshqa ko'rinishdagi) jismlardir. Ancha murakkab hollarda doimiy magnitlar magnit maydonini shakllantirish uchun ishlatiladigan sistema-ning tarkibiga kirib, uning kuchlanganligi va konfiguratsiyasi o'zgar- mas bo'lishi ham mumkin, boshqariladigan bo'lishi ham mumkin.

Qattiq doimiy magnitlarning koersitiv kuchi N_c , qoldiq induksiya B_q , tashqi maydonga beradigan maksimal nisbiy magnit energiyasi ε_{max} aso- siy xarakteristikalarini hisoblanadi.

Doimiy **qattiq magnit materiallarning magnit singdiruvchanligi yumshoq magnitli materiallarnikiga** qaraganda ancha kichik. Magnit material qancha "qattiq" bo'lsa, ya'ni uning koersitiv kuchi qancha katta bo'lsa, magnit singdiruvchanligi shuncha kichik bo'ladi.

Doimiy magnitlar uchun ishlatiladigan qattiq magnit materiallarning sifatini baholashda maksimal nisbiy magnit energiyasi ε_{max} muhim para- metr hisoblanadi. U quyidagicha aniqlanadi:

$$\varepsilon_{max} = \frac{(BH)_{max}}{2} [J/m^3], \quad (8.62)$$

bunda B -ferromagnit materialning magnit induksiyasi, H - magnitlovchi tashqi magnit maydon kuchlanganligi, $(BH)_{max}$ – magnitsizlanish egri chizig'i koordinatalarining ko'paytmasining maksimal qiymati yoki maksimal energiyaviy ko'paytma.

Berk magnit shnurda doimiy magnit amalda tashqi fazoga energiya tarqatmaydi. Bunday shnurda amalda hamma magnit chiziqlari shnur ichida tutashadi va shnur tashqarisida magnit maydon bo'lmaydi. Doimiy magnit energiyasidan foydalanish uchun magnit shnurda (magnit o'tkaz- gichda) ma'lum bir o'lchamdagi va konfiguratsiyadagi oraliq qoldiriladi. Bu oraliqdagi magnit maydonidan texnik maqsadlarda foydalaniladi.

Doimiy magnitning magnit oqimi vaqt o'tishi bilan kamayib boradi. Bu hodisaga **magnitning qarishi** (stareniye) deyiladi. Qarish qaytar jara- yon bo'lishi ham mumkin, qaytmas bo'lishi ham mumkin. **Qaytar**

qarishda zarb, temperaturaning tebranishi, tashqi magnit maydonlar ta'sirida doimiy magnitning qoldiq magnit induksiyasi B_q $1\div 3$ % oralig'idagi kamayishi qaytadan magnitlash natijasida qayta tiklanadi. Agar vaqt o'tishi bilan doimiy magnitda strukturaviy o'zgarishlar sodir bo'lsa va qaytadan magnitlash ta'sirida avvalgi qoldiq magnit induksiyasi tiklanmasa, **qaytmas qarish** hisoblanadi.

Ximiyaviy tarkibi va olish usuliga ko'ra qattiq magnit materiallar yaxlit, kukun (poroshok) va boshqa, hatto suyuq holatlarda ham bo'lishi mumkin.

Savollar va masalalar

1. Elektronning orbital magnit momenti qanday hosil bo'ladi?
2. Giromagnit munosabat nima?
3. Magnetiklarning nechta turlari bor va ular nimalari bilan farq qiladi?
4. Atomning orttirilgan magnit momenti nima?
5. Elektron va yadroviy paramagnit rezonanslari qanday hodisalar?
6. Zeyemen effekti deb qanday hodisaga aytiladi?
7. Magnetiklarning Kyuri temperaturasi qanday temperatura?
8. Kyuri-Veyss qonuni qanday qonun?
9. Ferromagnetizmni vujudga kelishidagi almashuvchi ta'sirlashuv qanday amalga oshadi?
10. Ferromagnetiklardagi Blox devorlari nima?
11. Ferromagnetiklardagi gisterezis sirtmog'ining hosil bo'lish sabablarini tushuntiring.
12. Magnitostriksiya hodisasi qanday hodisa?
13. Neyel temperaturasi qanday temperatura?
14. Bir elektronli atomning orbital va spin magnit momentlari uchun giromagnit nisbatlarni aniqlang.

Javob. $8.79 \times 10^{10} \text{ s}^{-1} \times T T^{-1}$; $1.76 \times 10^{11} \text{ s}^{-1} \times T T^{-1}$.

15. Diamagnit modda kristallining atomlari orasidagi o'rtacha masofa $r_{o.r.} = 10^{-10} \text{ m}$, hajm birligidagi atomlar soni $n \approx 10^{28} \text{ m}^{-3}$, elektronlar soni Z bo'lsa, bu moddaning magnit qabulchanligini aniqlang.

Javob. $\approx 3.5 \times 10^{-6} \times Z$.

16. EPR hodisasi qanday hodisa?
17. Doimiy magnit maydon kuchlanganligi $H = 5.6 \times 10^5 \text{ A/m}$ bo'lgan diamagnitda yutiladigan elektromanit nurlanishning rezonans chastotasini va to'lqin uzunligini hisoblang (Lande faktori $g = 2$).

Javob. $\nu_{rez.} \approx 2 \times 10^4 \text{ MHz}$; $\lambda_{rez.} \approx 0.015 \text{ m}$.

18. Oldingi masala sharti bo'yicha yadromagnit rezonansi uchun elektromagnit nurlanishining rezonans chastotasini va to'lqin uzunligini toping.

Javob. $\nu_{rez.} \approx 30 \text{ MHz}$; $\lambda_{rez.} \approx 10 \text{ m}$.

19. Magnit induksiyasi 10^4 Gs bo'lgan magnit maydonining magnit induksiya vektoriga perpendikulyar orbita tekisligida harakatlanayotgan elektronning Lormor chastotasini aniqlang.

Javob. $\approx 9 \times 10^8 \text{ MHz}$.

IX. BOB. NANOSTRUKTURALAR VA NANOMATERIALLAR

9.1. Nanostrukturalar va nanomateriallar haqida umumiy tushunchalar va ularning klassifikatsiyasi

Nanotexnologiya va nanofan (nanofizika, nanoximiya, nanoelektronika) uch o'lovli fazoning hech bo'lmaganda bitta yo'nalishida nano o'lvamga ($1\div 100$ nm) ega bo'lgan kondensatsiyalangan moddalar bilan ish ko'radi. Bunda nanoo'lvamli diametrga ega bo'lgan ayrim holdagi nol o'lvamli zarralar (kvant nuqtalar) ham, bir o'lvamli (masalan, kvant tolalar) yoki ikki o'lvamli nanostrukturalar (masalan, plyonkalar) ham nazarda tutiladi. Garchi nanotexnologiya va nanofanning lug'aviy ma'nosi birmuncha g'alatiroq bo'lsa ham (masalan, nanofanning aynan tarjimasi nano o'lvamdagi fan bo'lib, birmuncha noaniq bo'lsa ham) bu so'zlar iste'molga kirib ketgan bo'lib, nano o'lvamdagi ob'ektlar bilan ish ko'radigan texnologiya va fan deb tushuniladi. Hozirgi vaqtda nanokristallar yoki nanomateriallar xaqidagi bilimlar qattiq jismlar fizikasining alohida yo'nalishi sifatida shakllanib bormoqda. Nanostrukturalarning fizika-ximiyasini alohida olingan (yakkalangan) atomni o'rganuvchi atom fizikasi bilan atomlar soni cheksiz bo'lgan qattiq jismlarning xossalarni o'rganuvchi fizika-ximiya orasidagi ko'priq deb qarash mumkin. Mohiyati bo'yicha nanostruktura – bu qattiq jismning kichik bir bo'lagidir (fragmentidir). Ammo bunday kichik o'lvamlarda nanostrukturalarning xossalari makromasshtabdagi materiallarning xossalardan kuchli darajada farq qiladi. Zarra nanoo'lvamga o'tishi bilan faza tushunchasi bir muncha noaniqroq ma'no kasb etadi: gomogen va geterogen fazalar orasidagi, amorf va kristall holatlari orasidagi chegaralarni aniqlash qiyin bo'ladi. “Tarkib-xossa», «struktura-funksiya» kabi fizika-ximiyaviy tushunchalar “o'lvam”, “o'zini o'zi tashkillash-tirish” (samoorganizatsiya) terminlari bilan boyiydi. Nanokristallar yoki nanosistemalar ilgari makroskopik qattiq jismlarda kuzatilmagan ko'pgina fizikaviy va ximiyaviy xossalarga ega. Nanosistemalarning odatiy bo'lmagan xossalar namoyon qilishining sababi nimada?- degan savol tug'iladi. Qisqa qilib aytadigan bo'lsak, buning quyidagi ikki sababi bo'lishi mumkin. Biri ularning termodinamikaviy holatining klassik holatidan farq qilishi bo'lsa, ikkinchisi struktura elementlarining xarakterli o'lvamlarining kichkinalashuvi bilan vujudga keladigan kvant effektlarining paydo bo'lishidir. Kristall holatdagi nanozarralar tabiatda juda keng tarqalgan. Ko'pincha ular atmosferada nanoaerozollar hosil qi-

ladi. 400 °C temperaturaga yaqin temperaturali gidrotermal eritmalarda ancha miqdordagi nanozarralar bo‘ladi. Ammo eritmaning sovushi jarayonida (sovuq suv bilan qo‘shilishi natijasida) nanozarralar kattalashib, ko‘zga ko‘rinadigan bo‘lib qoladi. Shuningdek, nanozarralar tog‘ jinslarida va Yerning magmasida ham bo‘ladi. Undan tashqari kristall nanozarralar quyosh tumanligida zarba mexanizmini, elektr razryadini, kondensatsiya reaksiyalarini o‘z ichiga oluvchi fizikaviy jarayonlar tufayli kosmosda ham hosil bo‘ladi. 1980 yilning oxirida amerikalik kosmonavtlar o‘z kosmik korablidagi protoplaneta changlarini yig‘ib keltirganlar. Yerdagi laboratoriyalardagi tahlil natijalariga ko‘ra, u changlar $10 \div 150$ nanometr o‘lchamdagi uglerodga boy mineral sharlar (xondralar) ekanligi aniqlandi.

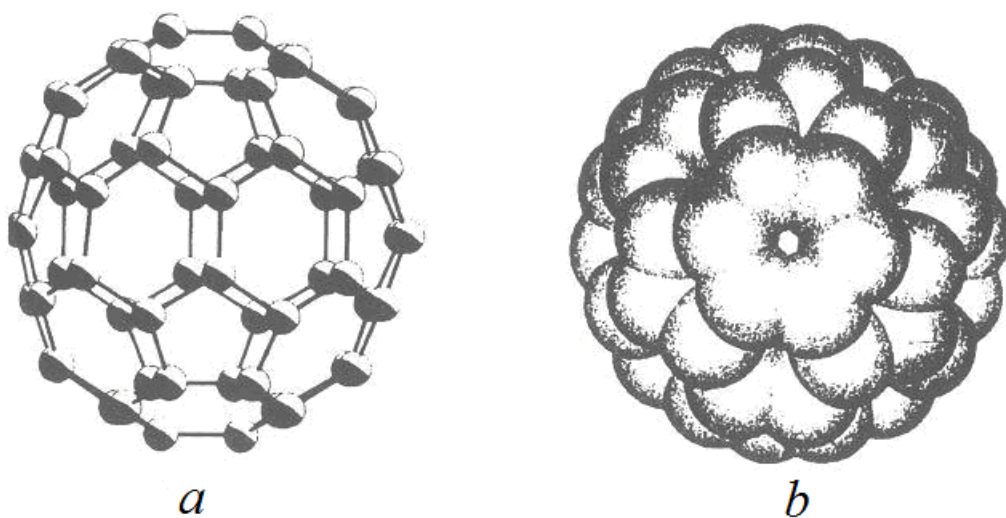
Moddaning turiga qarab 1-5 nm o‘lchamli nanozarrada 1000 donagacha atom, 5-100 nm o‘lchamli nanozarrada esa 10^3 - 10^8 donagacha atom bo‘lishi mumkin. **Nanozarra** yoki **nanokristall** nomlari ularning o‘lchamlari tufayligina emas, balki moddalar 1-100 nm o‘lchamlarda xossalarini makroskopik o‘lchamlaridagi xossalariga nisbatan keskin, g‘ayrioddiy o‘zgartirganligi uchun berilgan.

Nanokristallarning o‘lchamlari olinish texnologiyasiga qarab 1 nm dan 100 nm gacha, ba‘zan undan ham kattaroq bo‘lishi mumkin. Ko‘p hollarda metall va keramika nanokristallari uchun bu o‘lcham 100 nm dan, olmos va grafit uchun 50 nm dan, yarimo‘tkazgich uchun 10 nm dan katta bo‘lmasligi kuzatiladi. Ko‘p hollarda noorganik nanokristallar nanokukun (nanoporoshok) ko‘rinishida olinadi. Kristall holatdagi alohida nanozarralar dispers fazalar rolini bajaruvchi nanosuspenziya tayyorlashda hosil bo‘ladi. Bundan tashqari ular nanokompozit materiallar tarkibiga kirishi mumkin. Bu holda ular **matritsa nanokristallar** deyiladi. Nanomateriallarni quyidagi asosiy turlarga bo‘ladilar: **birikkan nanomateriallar**, **nanoyarimo‘tkazgichlar**, **nanopolimerlar**, **nanobio-materiallar**, **fullerenlar** va **tabulyar** yoki **nanotubulen** (ingl.: nanotube - truba shaklidagi nanosterjenning topologiyaviy shakli), yoki nanonay (nanotruba) nanostrukturalar, katalizatorlar, nanog‘ovakli materiallar va supramolekulyar strukturalar. Nanomateriallarni bunday sinflarga bo‘linishi shartlidir. Masalan, gibrid metallopolymerlar yoki biopolymer nanokompozitlar ham bor. Shu bilan birga nanomateriallar sinflariga keyin (XX asr oxirida) kashf qilingan (masalan, fullerenlar va nanonaylar) ham, ilgari ham ma‘lum bo‘lgan ancha eski materiallar (masalan, katalizatorlar va nanog‘ovakli materiallar) ham kiradi.

Birikkan (konsolidirlangan) nanomateriallarga poroshokli texnologiya, amorf holatdan kristallanishni nazorat qiladigan intensiv plastik deformatsiya va plyonka hamda qoplamalar hosil qilishning turli usullari bilan olingan metallardan, qotishmalardan va birikmalardan tashkil topgan kompakt materiallar, plyonkalar va qoplamalar kiradi. Bu materiallarning nanodonachalari (nanokristallitlari) alohida yakkalangan (ya'ni alohida) tuzilma sifatida yoki zaif bog'lanishda bo'lgan holda emas, balki birlashgan holatda bo'ladi. Birikkan nanomateriallarning donachalari orasidagi qatlamlarning mustahkamligi juda yuqori bo'ladi.

Nanoyarimo'tkazgichlar, nanopolimerlar va nanobiomateriallar yakkalangan holatda ham, shuningdek, gibrid (aralash) materiallar hosil qilib, qisman birikkan holatda ham bo'lishi mumkin.

Fullerenlar Kroto, Kerli va Smoli tomonidan 1985 yilda grafitni geliy oqimida 10 000 °C temperaturada bug'latish yo'li bilan hosil qilgan uglerodning allotrop modifikatsiyasidir. Bu kashfiyot uchun ular Nobel mukofotini (1996 y.) olganlar. Fullerenlar uglerodning, umuman moddaning yangi o'zgacha modifikatsiyasi bo'lganligi uchun ular haqida birmuncha kengroq to'xtab o'tishni lozim topdik. Ko'proq o'rganilgan va formulasi C_{60} bo'lgan fulleren 60 ta uglerod atomidan tashkil topgan bo'lib, futbol to'piga o'xshaydi (shuning uchun dastavval uni futbolen deb ham atashganlar). 9.1-rasmda uglerodning fulleren C_{60} modifikatsiyasining tuzilishi tasvirlangan. **Fullerenning diametric** 0,71 nm. Hozirgi vaqtda quyidagi fullerenlar ma'lum: C_{60} , C_{70} , C_{80} , C_{84} , C_{240} , C_{540} va boshqa shu kabi tarkiblar. Formuladagi indekslar bitta fulleren molekula-



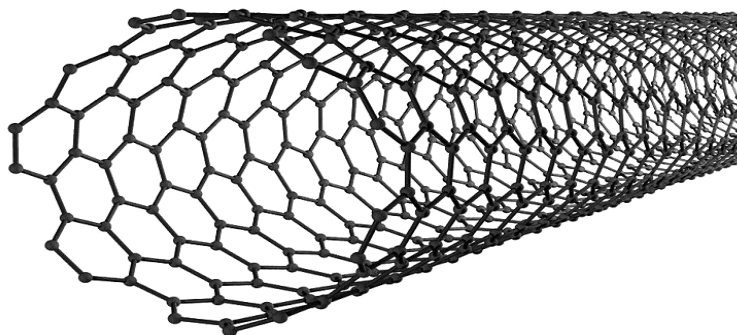
9.1-rasm. C_{60} fullerenining sxemasi: uglerod atomlarining o'zaro bog'langan modeli (*a*), elektron buluti ko'rinishida (*b*).

sidagi uglerod atomlarining soni. Yuqori darajadagi simmetrik C_{240} , C_{540} , C_{690} fullerenlar o'z ichiga ancha mayda C_{60} , C_{70} , C_{80} va boshqa fullerenlarni olgan bo'lib, bir necha qatlamli bo'lishi mumkin.

Tadqiqotlarning ko'rsatishicha, fullerenlarni grafitning bug'lanib, kondensatsiyalangan mahsulotlaridan benzol, toluol yoki ksilol bilan ekstraksiya qilish yo'li bilan olish mumkin. Bundan tashqari, ularni vakuumda 450 - 600 °C temperaturalardagi sublimatsiyasi orqali ham olish mumkin. Fulleren C_{60} ikosaedr (grekcha: eikosi-yigirma, hedra – yoq) simmetriyaga ega. Bu 20 ta uchburchakli tomonlarga, 30 ta qirraga va 12 ta cho'qqilarga ega bo'lgan ko'pyoq. Kvantomexanikaviy hisoblarning ko'rsatishicha, unda elektronlar 8 atom birlik ($1 \text{ a. b.} = 0.0529 \text{ nm}$) qalinlikdagi qobiqda bir muncha bir tekis taqsimlangan. Shu bilan birga, fullerenning markazi elektronlardan holi bo'lgan 2 a. b. radiusli bo'shliqdir. Demak, C_{60} molekulasida o'rtasi bo'shliq bo'lgan futbol to'piga o'xshagan katakdir ("qafas"). Bu katakning markaziga boshqa elementlarning bir yoki bir necha atomlari kirib joylashuvi mumkin va **endoendral kompleks** hosil qiladi. Bunday fullerenlar **endofullerenlar** deyiladi. Endofullerenlarni belgilash uchun $M_m@C_n$ formula ishlatiladi. Bunda M-fulleren ichidagi atom yoki molekula, m - va n - mos holda molekuladagi kiritilgan atomning va uglerod atomining sonini bildiradi. Umuman, fullerenlar atomlar, molekulalar, ionlar, radikallar va boshqa ko'rinishdagi zarralar bilan birikmalar hosil qilishi mumkin. Bunda boshqa zarralar fulleren molekulasiga uning ichki tomonidan birikishi ham mumkin (**endobirikma**), tashqi tomonidan birikishi ham mumkin (**ekzobirikma**).

Kristall holatdagi fullerenlarni **fulleritlar** deb atash qabul qilingan. Xona temperaturasidagi fullerit tomonlari markazlashgan kub elementar yacheykaga ($Fm\bar{3}m$ fazoviy guruhga) ega bo'lib, yacheyka tugunlarida fulleren molekulalari joylashgan. Panjara doimiysi $a = 1.415 \text{ nm}$. Uglerod atomlarining orasidagi eng kichik masofa $\sim 1 \text{ nm}$. Koordinatsiyaviy soni 12. Fulleren molekulasidagi atomlarning orasidagi kovalent bog'lanish bo'lib, molekulalar orasida bog'lanish Van-der-Vaals kuchlari orqali amalga oshadi. Elementar yacheyka tugunlaridagi fulleren molekulalari 10^{12} Hz chastota bilan aylanma harakat qilib turadi. Temperatura pasayishi bilan 260 K temperaturada fulleritning tomonlari markazlashgan kub yacheykasi primitiv (oddiy) kub yacheykasiga o'tadi (fazoviy guruh $Pa\bar{3}$). Fullerenning bu modifikatsiyasida tugunlardagi fulleren molekulalarining o'z o'qlari atrofida aylanishi to'xtaydi.

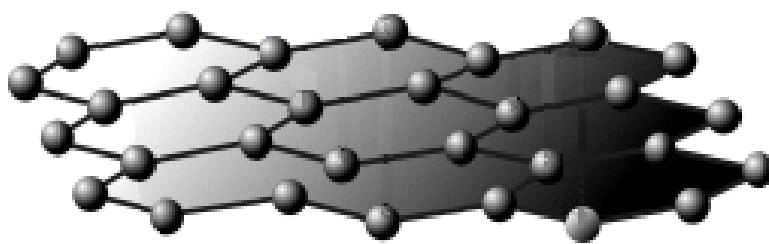
1991 yilda yapon olimi C. Ishima tomonidan grafitning elektr yoyining bug'larida uglerod **nanonaylarining** kashf qilinishi nanokristallar sohasidagi yana bir katta yutuq bo'ldi. Nanonaylar turli shakllarda - bir qatlamli, ko'p qatlamli, to'g'ri yoki spiral ko'rinishida bo'ladi. Atom strukturasiga ko'ra, bir qatlamli nanonaylar silindr shaklidagi to'rdan iborat bo'lib, silindrining yon sirti geksagonal yacheykalardan (bir atom qalinligidagi ikki o'lchamli grafit-grafenlardan) tuzilgan bo'lib, uchlari ochiq yoki fullerenlarning yarim sferalari qalpoqchalari (pentagonal yacheykalar) bilan berkilgan bo'lishi mumkin. Uglerod nanonaylari uglerodning yana bir allotrop modifikatsiyasi (fazasi) bo'lib, uning diametri bir nanometrdan bir necha o'n nanometrgacha yetadi. Uzunligi esa bir necha santimetrgacha yetishi mumkin. 9.2-rasmda bir qatlamli uglerod nanonayi tasvirlangan. Ular yetarlicha juda mustahkam molekul-



9.2-rasm. Bir qavatli uglerod nanonayi.

yar agregatlar hosil qila oladilar. Ular bog'lam, tutam ip, arqon yoki jgut deb atalib, alohida bir qavatli nanonaylarning o'qlari bir-birlariga parallel joylashgan bo'ladi.

Uglerodning ikki o'lchamli modifikatsiyasi bo'lgan **grafendan** tashkil topgan kengligi 10-100 *nm* bo'lgan **nanolenta** favqulodda noyob xossalarga ega. Grafen 2004 yili kashf qilingan. U o'zaro birikib, kristall panjara hosil qilgan uglerod atomlaridan tashkil topgan bir atom qatlami qalinligidagi folgadir. Grafenning har bir yacheykasi asalarining uyasini eslatadi (9.3-rasm). Grafendagi yaqin joylashgan uglerod atomlarining orasidagi masofa ~ 0.14 *nm* atrofida. Grafen elektron xossalari bo'yicha taqiqlangan zonasining kengligi nol bo'lgan ikki o'lchamli yarimo'tkazgichdir. Hozirgi vaqtda grafen olishning usuli grafitning qatlamlarini mexanik yo'l bilan tarashlab ajratib olishdan iborat. Bu yo'l bilan eng toza va sifatli grafen olish mumkin. Ammo bu yo'l bilan grafenni ishlab chiqarish maqsadlari uchun yetarli miqdorda ko'p olish mumkin emas.



9.3- rasm. Grafenning kristall panjarasi.

Ishlab chiqarish uchun bir muncha maqbul bo‘lgan karbid kremniy (SiC) tagligini (podlojkasini) bug‘latish yo‘li bilan olishdir.

Grafen katta mexanikaviy mustahkamlikka va nihoyatda katta issiqlik o‘tkazuvchanlikka (mos holda $\sim 1 \text{ TPa}$ va $\sim 5 \cdot 10^3 \text{ Vt} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$) ega. Ma’lum bo‘lgan barcha materiallardagilardan ham yuksak maksimal zaryad tashuvchanlikka ega bo‘lishi uni turli sohalarda, jumladan, kelajak nanoelektronikasining asosini tashkil qilishi va integral mikrosxemalarda kremniyni o‘rnini bosishi mumkinligi haqida bashorat qilinmoqda. Grafenning noyob xossalarini birinchi bo‘lib ko‘rsatgan A. K. Geym va K. C. Novosyolovga 2010 yili fizika bo‘yicha Nobel mukofoti taqdim etilgan.

Grafenga o‘xshagan bir atom qatlamidagi ikki o‘lchamli kristallar kremniy (silitsen), fosfor (fosforen) va boshqa elementlar uchun ham hosil qilingan.

Nanog‘ovak materiallar g‘ovaklarning o‘lchamlari bilan xarakterlanadi. Qoida bo‘yicha ular 100 nanometrdan kichik bo‘ladi. Katalizatorlar ham allaqachon keng foydalanilib kelinayotgan nanoob’ektlar hisoblanadi. Nihoyat, **supramolekulyar nanostrukturalar** – molekulalari va ularning ansambllari orasida zaif (Van-der-Vaals, vodorod va boshqa) bog‘lanish hosil qiladigan nanostrukturalar bo‘ladi.

Sanab o‘tilgan nanomateriallarning hammasi tayyorlanish texnologiyasi bilan ham, qanday funksiyalarni bajarishlari bilan ham farq qiladi. Ammo ularning hammasiga bitta belgi xos: ularning strukturalarini va xossalarini aniqlovchi zarralarning, donachalarning, naylarning, g‘ovaklarning o‘lchamlari nanomasshtabdadir. Ularning strukturaviy elementlarining minimal o‘lchamlari $(0.1 \div 1.0) \text{ nm}$ bo‘lib, amalda alohida atomlar yoki molekulalar o‘lchami tartibidadir. Nanozarralarning maksimal o‘lchami 100 nm esa shartli ravishda belgilangan.

Ba’zan nanokristall holatining yuqori chegarasi (maksimal o‘lchami) qandaydir xarakterli fizikaviy parametrlari bilan, masalan, tok tashuvchilarining erkin yugurish yo‘li, dislokatsiyaning sirg‘panishi uchun Frank-

Rid sirtmog'i, domenning yoki domen devori, elektronning de Broyl to'liqini uzunligi kabi kattaliklar bilan bog'liq bo'lishi kerak degan fikrlar bildiriladi. Biroq nanokristallarning elektr, magnit, deformatsiyaviy va boshqa shu kabi xarakterli fizikaviy kattaliklarining o'zgarishiga olib keluvchi o'lcham turli nanoob'ektlar uchun juda keng diapazonda (oraliqda) o'zgaradiki, hammasi uchun qandaydir yagona yuqori chegara belgilash amalda mumkin emas.

Shuni aytib o'tish kerakki, "nanozarra" va "nanokukun" (nanoporo-shok) tushunchalari ko'p jihatdan bir-birlariga hamohang. Lekin shuni nazarda tutish kerakki, nanozarra yakkalangan xarakterga ega, nanokukun esa majmua xarakteriga ega (kukun - bu bir-birlariga erkin tegib turgan uncha katta bo'lmagan o'lchamlardagi (0.001 mkm dan 10^3 mkm gacha) individual qattiq zarralardir). Nanokristallning o'lchami kichiklasha borib, 1 nm dan kichkina bo'lishi bilan tarkibida o'ntadan bir necha mingtagacha atomlar bo'lgan **klasterga** aylana boshlaydi. Nanoklasterlar va nanokristallar atomlarning yoki molekulalarning nanoo'lchamdagi komplekslaridir. Ular orasidagi asosiy farq ularni tashkil etgan atomlar yoki molekulalarning joylashuvidadir. Nanokristallardan farqli holda nanoklasterda translyatsiyaviy simmetriya bo'lmaydi. Demak, nanoklasterda hech bir yo'nalishda kristall panjara hosil bo'lmagan bo'ladi.

Ushbu bobda asosiy e'tibor birlashgan **nanomateriallarga** qaratiladi. Chunki, hozirgi vaqtda ushbu ob'ektlar uchun yetarlicha va sistemaga solingan informatsiya olingan. Nanomateriallarning xossalari ko'p jihatdan ularning tarkibidagi nanoo'lchamli kristallitlarning ximiyaviy tarkibi, shakli va taqsimlanish xarakteri bilan aniqlanadi. Shuning uchun nanomateriallarni ushbu belgilari bo'yicha sinflarga bo'lish maqsadga muvofiqdir. Nanomateriallar ularni tashkil etgan kristallitlarning shakli va taqsimlanishi bo'yicha uch xil tipga bo'lish mumkin: qatlamli, tolali, teng o'qli (9.4-rasm). Bunda qatlamning qalinligi, tolaning diametri va donalar o'lchami 100 nanometr tartibida va undan kichik bo'lishi kerak. Kristallitlarning va chegaralarning ximiyaviy tarkibining xususiyatlaridan kelib chiqib, nanomateriallarni to'rtta guruhga bo'ladilar (9.4-rasm). Birinchi guruhga kristallitlarining va ularning chegaralarining ximiyaviy tarkibi bir xil bo'lgan nanomateriallar kiradi. Bunday nanomateriallarga teng o'qli strukturali nanokristall donachalariga ega bo'lgan sof metallar kiradi. Ikkinchi guruhga nanokristallitlarining ximiyaviy tarkibi farq qiladigan, lekin chegaralarining ximiyaviy tarkibi bir xil bo'lgan nanomateriallar kiradi. Kristallitlarining ham, chegaralarining ham ximiyaviy

Taqsimlanish xarakteri	Kristallitli			Matrisali
Ximiyaviy tarkibi	Kristallitlar va chegaralar tarkibi bir xil	Kristallitlar tarkibi bir xil, chegaralarniki har xil	Kristallitlar va chegaralar tarkibi har xil	Kristallitlar boshqa tarkibli matrisada taqsimlangan
Kristallitlar shakli:				
Qatlamli				
Tolali				
Teng o'qli				

9.4-rasm. Nanomateriallarning asosiy strukturaviy tiplari.

tarkibi har xil bo'lgan nanomateriallar uchunchi guruhni tashkil etadi. To'rtinchi guruh nanomateriallarida nanokristallitlari, nanotolasi, nanoqatlamli boshqa ximiyaviy tarkibli matritsada taqsimlangan bo'ladi. Bu guruhga qisman dispers - mustahkamlangan materiallar kiradi.

9.2. Nanostrukturali materiallarning xossalari

9.2.1. Umumiy ma'lumotlar

Nanosistemalarda o'lchamining ma'lum bir qiymatidan boshlab barcha xossalarning o'lchamiga bog'liqligi kuzatila boshlaydi. Nanozaralarning xossalarni makroskopik o'lchamdagidan farq qilishining sababi nanoo'lchamlarda moddanining sirt taranglik kuchlarining uning ichki kuchlaridan ustun kelishi, ularning nanoo'lchami, elektron, eksiton va fononlarning de Broyl to'lqin uzunliklarining bir tartibda bo'lishi bilan tushuntiriladi.

Ma'lum bir materialning muhim xossalarning nanoo'lchamiga bog'liqligini aniqlashda qanday o'lchamda uning xossalari maqsadga eng muvofiq bo'lishini aniqlash muhimdir. Aytib o'tish lozimki, nanomateriallarning xossalari faqat strukturaviy elementlarning o'lchamiga bog'liq

bo‘lib qolmay, balki bu elementlarning qurshoviga (donachalar chegaralarining tuzilishiga, fazalararo ta’sirlashuviga va shu kabi boshqa omillarga) ham bog‘liq. Nanomateriallarda kuzatiladigan ularning o‘lchamlariga bog‘liq ba’zibir xossalari 9.1-javaldan berilgan.

9.1-jadval

Nanomateriallarning fizikaviy xossalarining o‘lchamga bog‘liqligi

Xossalari	Nanoo‘lchamning material xossalariga ta’siri.
Fazaviy o‘tishlar	Fazaviy o‘tish va erish temperaturalarining pasayishi.
Kinetikaviy hodisalar	Diffuziya koeffitsiyentlarining anomal ravishda yuqori bo‘lishi, issiqlik sig‘imining ortishi, issiqlik o‘tkazuvchanlikning kamayishi.
Elektr xossalari	Elektr qarshilikning va dielektrik kirituvchanlikning ortishi.
Magnit xossalari	Koersitiv kuchlarning va magnit qarshilikning ortishi, supermagnitizmning namoyon bo‘lishi.
Mexanik xossalari	Oquvchanlik chegarasining, qattiqlikning, buzilish yopishqoqligining, chidamlilikning ortishi, yuqori temperaturalarda o‘ta plastiklik paydo bo‘lishi.

9.2.2. Elektronlar spektri

Nanoo‘lchamli sistemalarning elektron xossalari o‘sha sistemaning o‘zi yasalgan makroskopik moddaning elektron xossalaridan tubdan farq qiladi. Bu holda makrostrukturadagi valent zonasining uzluksiz elektron strukturasi diskret elektron strukturasi o‘tishi kuzatiladi. Bu kvantome-xanikaviy hodisalarni namoyon bo‘lishi bilan bog‘liq.

Erkin zaryad tashuvchilarning lokallashtirilgan (o‘troqlashgan) sohalari-ning o‘lchami de-Broyl to‘lqin uzunligi bilan yaqinlashganda kvant o‘lcham effektlari nanomaterialning elektron xossalariga ta’sir etib boshlaydi. Bunda de Broyl to‘lqin uzunligi quyidagicha aniqlanadi:

$$\lambda_B = h / \sqrt{2m^* E}, \quad (9.1)$$

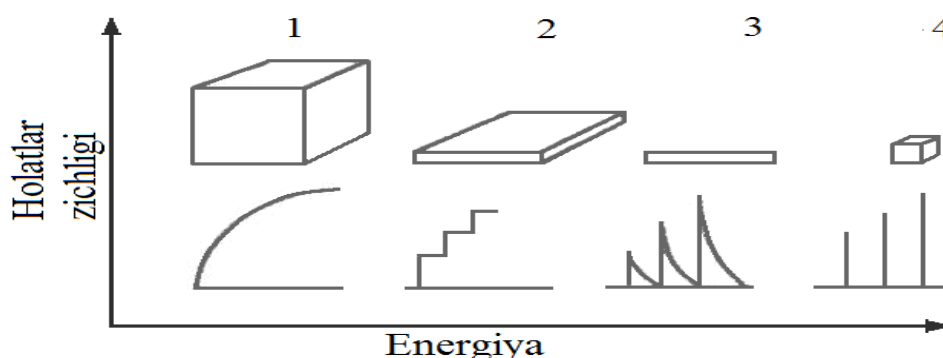
bunda h – Plank doimiysi, m^* - elektronning effektiv massasi, E - zaryad tashuvchining energiyasi. Elektronning effektiv massasi erkin elektronning m_e massasiga yaqin, kinetik energiyasi esa (Fermi energiyasi) bir necha elektronvolt. Metallarda de Broyl to‘lqin uzunligi 0.1 -1.0 nm bo‘lganligi uchun ularning o‘lchami elektron xossasiga ta’siri juda kichik kristallitlarda yoki juda yupqa plyonkalarda namoyon bo‘ladi. Biroq elektronlarining effektiv massasi ($m^* = 0.01 \times m_0$) va zaryad tashuvchi-

sining energiyasi ($E \sim 0.1 \text{ eV}$) juda kichik qiymatga ega bo'lgan yarim-metall (Bi) va yarimo'tkazgichlarda, ayniqsa, tor zonali (InSb) birikmasida vaziyat o'zgaradi. Ular uchun de Broyl to'lqin uzunligi 100 nm atrofida bo'ladi. Binobarin, bunday nanomateriallarda elektron xossalari-ning kvant xarakteri yetarlicha sezilarli bo'ladi.

Nanomateriallar o'lchami eksitonlar, magnonlar, polyaronlar kabi kvazizarralar o'lchami tartibida bo'lganda eksiton va magnonlarning g'alayonlanishi tufayli moddaning optikaviy va magnit xossalarida kvant effektlari kuzatiladi. Atomlararo ta'sir kuchlari katta bo'lgan metallar va yarimo'tkazgichlarga nisbatan bog'lanish kuchlari zaif bo'lgan molekulyar va Van-der-Vaals kuchlar bilan bog'langan kristallarning elektron xossalari zarraning o'lchamiga zaif bog'lanishda bo'ladi.

Makroskopik kristallarning elektron holatlarining zichligi elektronlarning energiyasiga kvadratik bog'lanishda bo'ladi. Shredinger tenglamasining yechimlari elektronlarning lokallashgan (o'troqlashgan) sohalarining o'lchamlarining bir, ikki yoki uch yo'nalishda de-Broyl to'lqini qadar kamayishi Shredinger tenglamasining bunday chegaraviy shartlar uchun yechimlariga ko'ra, elektron holatlarining zichligining energiyaga bog'lanish ($N(E) = f(E)$) xarakterining keskin o'zgarishi sodir bo'ladi.

9.5-rasm. 9.5-rasm. ideallashtirilgan bir zonalik yarimo'tkazgich uchun $N(E)$ bog'lanishning uch o'lchamli nanokristalldan nol o'lchamli to'g'ri chiziqli bog'lanishga o'tishidagi evolyutsiyasi sxematik ravishda aks ettirilgan. Ushbu sxema $N(E)$ bog'lanishning uzluksiz o'zgarishining yakka atirgan atomlarning majmuasi uchun, shuningdek, oraliq o'lchamlar uchun ham xarakterli bo'lgan

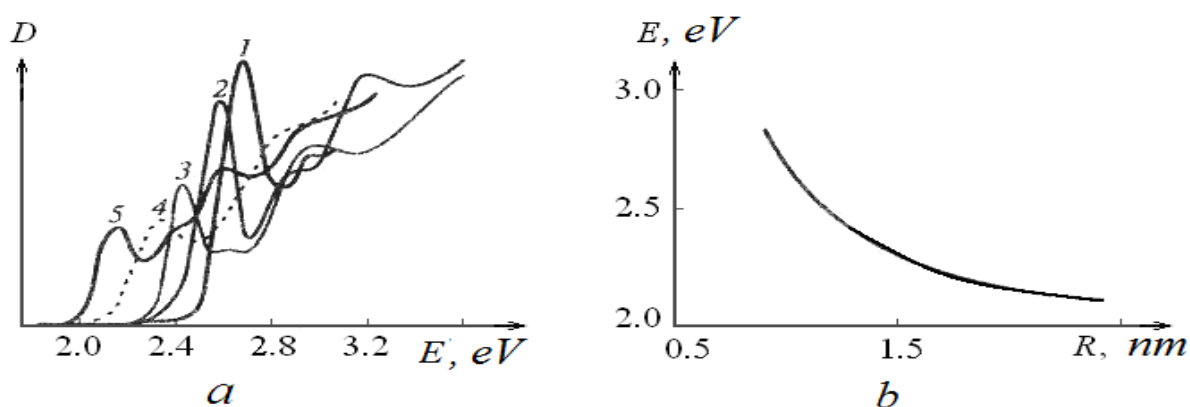


9.5-rasm. Nanokristallning elektron holatlari zichligining uch (1), ikki (2), bir (3) va nol (4) o'lchamli strukturalari uchun elektronlar energiyasiga bog'liqligi.

uzlukli o'zgarishlarini tasvirlaydi. Energiya spektrining mana shunday evolyutsiyasi faqat elektronlar uchungina emas, balki boshqa kvazi-

zarralar uchun ham kuzatiladi. Bir va ikki o'lchamli nanostrukturalar uchun zaryad tashuvchilarning erkin harakati mos holda bir va ikki o'lchamli bo'lib qoladi. Kvant nuqtalarda elektronlarning energiya spektrlari uch yo'nalishda "kvantlanadi" va yakkaqlangan atomlar majmuasini kabi taqiqlangan zonalar bilan ajralgan diskret (uzlukli) sathlardan iborat bo'lib qoladi. Kvant nuqtalarning o'lchami elektron sathlarining orasidagi intervalga va elektronning effektiv massasiga bog'liq holda 4 nm dan 20 nm gacha oraliqda bo'ladi.

Yirik o'lchamli kristalldan nanostrukturali yarimo'tkazgichga o'tish taqiqlangan zonaning kengligining kattalashuvi bilan sodir bo'ladi: o'tkazuvchanlik zonasidagi energiyaning ruxsat etilgan sathining quyi chegarasi ko'tariladi, valent zonasining yuqorigi energiyaviy sathi pasayadi. Masalan, odatdagi yirik donali kadmiy selenidning taqiqlangan zonasining kengligi 1.8 eV bo'lsa, $3.0\text{-}3.5$ va $1.0\text{-}1.2 \text{ nm}$ o'lchamli nanozarrasi uchun bu kenglik mos holda 2.3 va 3.0 eV qiymatgacha kattalashadi. Bu hol uning optikaviy va boshqa xossalarining mos holdagi o'zgarishlarga olib keladi. 9.6-rasmda CdSe nanokristallining nur yutilishlarining va yutilish polosasi maksimumi energiyasining nanokristall o'lchamiga bog'lanish grafigi keltirilgan. Ushbu rasmdan ko'rinib turibdiki, yutilish polosasi maksimumi energiyasi nanokristallning o'lchami kamayishi bilan nazariy hisoblashlardan kelib chiqadigan $E \sim 1/R$ bog'lanish bo'yicha katta energiya tomon siljiydi. Shuningdek, kristallitlarning o'lchami kamayishi bilan lyuminessensiya spektrining qisqa to'lqin sohasiga siljishiga ("havorang siljish"ga) olib keladi. Bu



9.6-rasm. CdSe nanokristallining optikaviy xossalari. a – r radiusi 1.05 (1), 1.15 (2), 1.35 (3), 1.5 (4), 2.0 (5) nm bo'lgan kristallarning yutilish spektrlari, b -yutilish polosasining maksimumi energiyasining nanokristall o'lchamiga bog'lanish grafigi.

hodisa ZnO, CdS, va CdSe birikmalari misolida yakkaqlangan nanozarralari uchun ham, birikkan nanomateriallari uchun ham kuzatilgan.

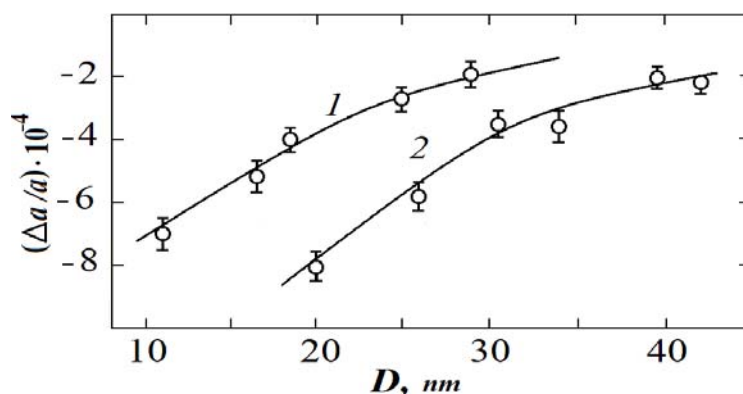
Nanokristallitlarning o'lchamlarining kamayishi bilan ularning elektron tuzilishining o'zgarishiga sohalar sirtlaridagi atomlar ulushi ko'payishi ham sabab bo'lishi mumkin. Nanostruktura o'lchamlari va elektron tuzilishining orasidagi bog'lanishning turli-tumanligi uglerod va boshqa nanonay materiallar uchun ham kuzatiladi. Bir qatlamli uglerod nanonaylar uchun qilingan nazariy hisoblashlarning va eksperimental tadqiqotlarning ko'rsatishicha egri-bugri nanonaylar metall o'tkazuvchanlikka ega bo'lsa, barcha spiralsimon (xiral) naylar yarimo'kazgichlardir. Shu bilan birga, taqiqlangan zonaning kengligi nayning radiusiga bog'liqdir. Tor tirqishli yarimo'kazgichlar uchun bu kattalik o'lchamga $\Delta E_g \sim R^{-2}$ bog'lanishda bo'lsa, keng tirqishlilar uchun $\Delta E_g \sim R^{-1}$ bog'lanishda bo'ladi.

9.2.3. Nanokristallarning fazaviy holatlari va termodinamikasi

Nanozarralar termodinamikasini nazariy va tajribada o'rganish shuni ko'rsatadiki, bunday zarralarning o'lchami boshqa termodinamikaviy o'zgaruvchilar bilan bir qatorda sistemaning holatini va uning reaksiyaviy qobiliyatini belgilovchi faol termodinamikaviy o'zgaruvchisi hisoblanar ekan. Nanozarra o'lchamini o'ziga xos temperatura ekvivalenti deb qarash mumkin. Bunda ular uchun G Gibbs termodinamikaviy potensialining qiymati makrozarralarnikidan farq qiladi. Nanoo'lchamlari tufayli nanozarralarning alohida qismlari yuzalarining umumiy miqdori juda katta qiymatiga ega. Buning natijasida bunday nanoob'ektlar juda yuqori darajadagi fizika-ximiyaviy faollikka ega bo'ladi. O'lchami 10 nm dan kichkina bo'lgan nanozarra ortiqcha ichki energiyaga ega va yuksak ximiyaviy faollikka ega. 1 nm dan kichik zarralar amalda aktivatsiya energiyasiz metallar nanozarralarini hosil bo'lishiga olib keluvchi agregatsiya jarayonida qatnashadi. Shuningdek, boshqa elementlar bilan yangi xossalarga ega bo'ladigan moddalar olishga imkon beradigan reaksiyalarga oson kirishadi. Ta'sirlashuvchi zarralarning ximiyaviy faolligi shu bilan tushuntiriladiki, elementlar atomlarining, atomlar klasterlarining va nanozarralarining individual (o'ziga xos) xossalari ularning makrozarralarinikidan farq qiladi. Atomlardan nanozarralar hosil bo'lishi ikki jarayon orqali amalga oshadi: turli o'lchamli metall yadrolarining tashkil topishi tufayli va ulardan nanostruktura ansambli-ning paydo bo'lishi tufayli amalga oshadi. Bunday sistemalarning ortiqcha energiyasi sirt va sirt oldi atomlararo bog'lanishlarni muvozanatlash-

maganligi (kompensatsiyalanmaganligi) bilan tushuntiriladi. “Sirt” yoki “fazalar chegarasi” deganda modda hajmidagi fazalarni ajratuvchi chekli qalinlikdagi qatlam tushuniladi. Bu qatlam qalinligi odatda atigi bir necha atom qatlamini tashkil etadi. Agar sirtidagi va hajmdagi modda miqdori o‘lchovdosh (yaqin) bo‘lsa, u vaqtda sirtning roli moddaning xossalarini belgilovchi omillarning jiddiy faol tashkil etuvchisi bo‘lib qoladi. Zarralarining o‘lchamlari o‘zgarishiga nanozarralarning yana bir qator termodinamikaviy xossalari bog‘liq. O‘lchami kichiklashuvi bilan nanozarradagi vakansiyalar miqdori ko‘payadi, shu bilan bir vaqtda polimorf o‘tishlar temperaturasi va panjara doimiylari kichiklashadi, siqiluvchanlik ortadi.

Nanokristallarda kristall panjara doimiysining o‘zgarishi kuzatiladi (9.7-rasm). Odatda nanokristallarda bu hodisa faza o‘tishi bilan birgalikda sodir bo‘ladi. Masalan, odatdagi sharoitda ortoromb elementar yacheykaga ega bo‘lgan ittriy oksidi donachalarini 10 nm gacha kamaytirilsa, u kub elementar yacheykasiga ega bo‘lib qoladi. Odatda monoklin elementar yacheykaga ega bo‘lgan sirkoniy dioksidi tetragonal yoki kub



9.7-rasm. Au va Ag nanozarralari panjara doimiysining nisbiy o‘zgarishini nanozarra (D) diametriga bog‘liqligi: 1- Au uchun; 2- Ag uchun.

shaklini oladi; tetragonal bo‘lgan titanat bariy kub fazasiga o‘tadi. Har bir modda uchun zarrasining shunday kritik o‘lchami r bo‘ladiki, bu o‘lchamdan kichik o‘lchamlarda mazkur moddaning boshqa kristall fazasi termodinamikaviy turg‘un bo‘lib qoladi. O‘rtacha atomlararo masofaning $(\Delta a/a)$ nisbiy o‘lchamga bog‘liq bo‘lish ifodasini quyidagicha bo‘lishi aniqlangan:

$$\Delta a/a = (\Delta d - \frac{2\bar{\gamma}k_T}{3})/r; \quad \bar{\gamma} = \sigma + S(\frac{\partial \sigma}{\partial S}), \quad (9.2)$$

bunda r - nanozarraning kritik o'lchami, Δd - kristall panjara tekisliklari orasidagi o'rtacha masofa, $\bar{\gamma}$ - o'rtacha sirt taranglik, σ - sirt erkin energiyasining zichligi, k_T - izotermik siqiluvchanlik, S -sirt yuzasi.

Nanoo'lchamdagi zarraning makroskopik o'lchamdagisiga nisbatan panjara doimiysining kichik bo'lishining sababi modda sirtidagi atomlarning orasidagi bog'lanish kuchlari muvozanatining buzilishi va qisqarishi bo'lsa kerak deb faraz qilish asoslidir. Shu bilan birga, nazariy hisoblashlar nanokristallarning panjara doimiysi nanoo'lchamning o'zgarishi bilan qanday o'zgarishi haqida aniq bir bog'lanishni taklif etmaydi. Ehtimol, bunda panjara doimiysi kamayishi ham mumkin, ortishi ham mumkin.

Nanoqotishmalarning termodinamikaviy xususiyatlarini an'anaviy termodinamikaviy yondoshishuv bilan tahlil qilish shuni ko'rsatadiki, Gibbsning integral erkin energiyasi kristallitlarning o'lchamiga bog'liq holda nomonoton o'zgarishi mumkin. Shu bilan birga Gibbsning erkin energiyasining minimumi nanoo'lchamdagi oraliqqa to'g'ri keladi. Bunday o'zgarishni zarralar chegarasida sirt taranglik kuchlarining o'zgarishi va atomlarning bir muncha chegaraviy segregatsiyasi bilan bog'lashadilar.

Yakkalangan nanozarralarda o'lchamning o'zgarishi bilan termodinamikaviy nuqtai nazardan kam sirt taranglik energiyali fazalarning hosil bo'lishi energiyaviy foydalidir, ya'ni o'lcham kamayishi bilan atomlarning ko'proq zich taxlanishi kuzatiladi. Shuning uchun ham zarralarning o'lchami kamayishi bilan geksagonal, ayniqsa, hajmi markazlashgan strukturalarning ko'proq zichlashgan tomonlari markazlashgan strukturalarga o'tishi kuzatiladi. Tajribalarda haqiqatdan ham qiyin eriydigan Nb, Mo, W va Ta qiyin eriydigan metallarining hajmi markazlashgan kub strukturasini va Gd, Y, Tb, Dy kabi noyob yer elementlarining geksagonal zich taxlangan strukturalarining tomonlari markazlashgan kub strukturasiga o'tishi kuzatilgan.

Nanokristallarning o'lchami o'zgarishi bilan bog'liq faza o'tishlarining turli-tumanligi ZrO_2 sirkoniy dioksidida ham kuzatilgan. Bu birikmaning makromasshtabdagisida temperaturaga bog'liq holda uchta modifikatsiyasi ma'lum: monoklin ($T < 1440$ K), tetragonal ($T = 1440 - 2640$ K) va kub ($T > 2640$ K). Uning nanokristallitida esa o'lchamiga bog'liq holda xona temperaturasida turli fazalar kuzatilishi mumkin. ZrO_2 nanozarrasida bir vaqtning o'zida monoklin va tetragonal fazalarning mavjud bo'lishi aniqlangan. Bunday zarralar **kentavrlar** nomini olgan.

Temir va titanning qator qotishmalaridagi martensit o'tishlarning tadqiqotlarining ko'rsatishicha, kristallitning o'lchamining kamayishi martensit o'tishlarning barham topishiga olib kelar ekan. Masalan, $\text{Ti}_{0.50}\text{Ni}_{0.25}\text{Cu}_{0.25}$ qotishmasidagi martensit o'tish yo'q bo'ladigan kritik o'lcham 15-25 nm ekanligi aniqlangan. Bu hodisaning fizikaviy sababi shundaki, kristallitning o'lchami kamayishi bilan martensit o'tish "kurtagining" kritik o'lchami nanokristall o'lchamidan katta bo'lib qoladi.

Modda holatlarining nanomasshtablarda o'lchamga bog'liqligi nano-o'lchamdagi birikmalarning holat diagrammalarining ko'rinishini ham o'zgartirib yuboradi. Tashkil etuvchilari 2-50 nanometrda bo'lsa qattiq eritmalarning o'tato'yingan holatlari kuzatiladi. Masalan, alyuminiyning kub strukturali (TiN) titan nitrididagi muvozanatli qattiq eritmasi 1000 °C temperaturada atigi 2 foizni tashkil qilsa, nanostrukturali plyonkada hatto xona temperaturasida ham ekvimolekulyar kub (Ti,Al)N fazasi kuzatiladi. Ko'pgina qiyin eruvchi oraliq metallarning karbidlari, nitridlari va baridlarining nanokristallarida ularning fazalarining mavjudlik sohalarining sverxstexiometriya hisobiga ancha kengayishi kuzatiladi. Masalan, yirik kristall holidagi tomonlari markazlashgan kub strukturali TiN_x titan nitridining mavjudlik sohasi $x = 0.70-1.10$, geksagonal strukturali TiB_{2-x} titan baridining mavjudlik sohasi $2-x = 1.89 - 2.00$ oraliqda yotsa, titan nitridining nanostrukturali plyonkalarida mavjudlik sohalarining yuqori chegarasi $x = 1.20$ va titan baridining quyi chegarasi $2-x = 1.50 - 1.60$ bo'lishligi aniqlangan. Vodorodning FeTi nanokristallaridagi qattiq eritmasidagi konsenstratsiyasining ko'payishi kuzatilgan. Bunga sabab nano kristall panjarasidagi nuqsonlar va sohalar chegaralarining sirt yuzasidagi absorbsiyani kuchayishi bo'lsa kerak. Shuningdek, qattiq eritmalarning parchalanish va tartiblanish kritik temperaturalarining pasayishi kuzatiladi.

Umuman, ko'pchilik nanomateriallar (bundan ayrimlari, masalan, supermolekulyar strukturalar istisno) o'z tabiati bilan muvozanatda bo'lmagan holatdagi moddalardir. Ularning muvozanat holatdan uzoq bo'lishi quyidagi sabablarga ko'ra bo'lishi mumkin:

- sirt erkin energiyasining ortiqcha bo'lishini ta'minlovchi kristallitlar sirtlarining ko'pligi;
- kristall tuzilishidagi nuqsonlarning ortiq darajadagi ko'pligi;
- sintez qilish texnologiyasining shart-sharoitlari bilan bog'liq bo'lgan qoldiq kuchlanishlar mavjudligi.

9.2.4. Nanokristallarda issiqlik hodisalari

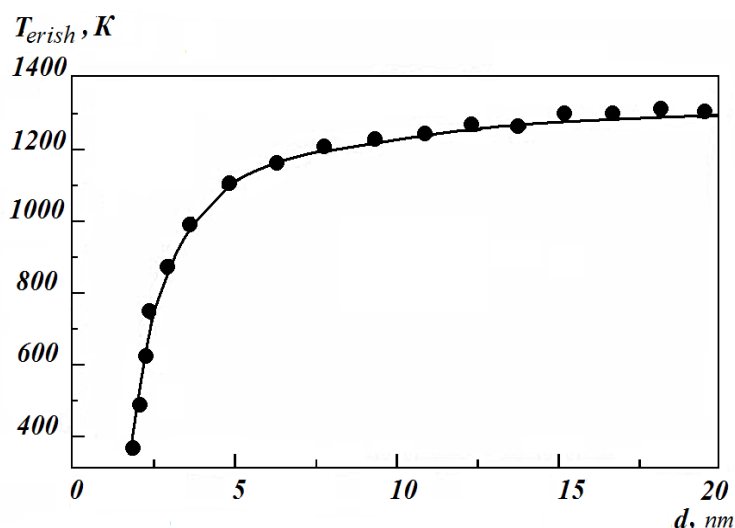
Nanozarraning sirt yuzasidagi ko'p sonli atomlar moddaning fonon spektriga va u bilan bog'liq bo'lgan issiqlik xossalariga: issiqlik sig'imi-ga, issiqlikdan kengayish koeffitsiyentiga, erish temperaturasiga va diffu-ziya koeffitsiyentiga ta'sir ko'rsatadi.

Nanomaterialning issiqlik xarakteristikalarining makromasshtabda-gi namunalarga nisbatan boshqacha bo'lishining asosiy sabablari fonon spektrining chegarasining va ko'rinishining o'zgarishidir. Nanomate-rialda to'lqin uzunlik uning L o'lchamining ikkilangan qiymatidan oshmasligi mumkin. Natijada fonon spektrining past chastotali to'lqinlari $\omega_{min.} = v/2L$ (v -to'lqin tezligi) shart bilan aniqlanuvchi minimal chastota bilan cheklangan bo'ladi. Makromasshtabdagi materiallarda bunday cheklanish bo'lmaydi. Tabiiyki, $\omega_{min.}$ minimal chastotaning kattaligi moddaning xossalariga, shakliga va nanozarraning o'lchamiga bog'liq bo'ladi. Nanozarraning fonon spektrining o'zgarishi moddaning issiqlik sig'imining o'zgarishiga sabab bo'ladi. Tajribalarda kuzatilishicha, nano-materiallarning issiqlik sig'imi makromasshtabdagisiga nisbatan ortadi. Masalan, yirik kristall holatdagi (Pd) palladiyning issiqlik sig'imi 250 K temperaturada $25 \text{ J}/(\text{mol} \times \text{K})$ bo'lsa, xuddi shunday temperaturada $L = 6 \text{ nm}$ o'lchamli Pd nanokristalli uchun $37 \text{ J}/(\text{mol} \times \text{K})$ bo'lishi aniqlangan. Bunday misollarni ko'plab keltirish mumkin. Nanokristallitlarda o'lcham kamayishi bilan issiqlikdan hajmiy kengayish koeffitsiyenti α_v ham ortadi. Bu α_v issiqlikdan kengayish koeffitsiyenti bilan issiqlik sig'imi orasida ($\alpha_v \sim C_v$) bog'lanish borligidan kelib chiqadi. α_v ning o'lcham L bilan bog'lanishi $\alpha_v \sim 1/L$ ko'rinishda bo'ladi. O'lcham kamayishi bilan moddaning Debay temperaturasi ham ortadi. Masalan, selenning (Se) oddiy katta kristalli uchun Debay temperaturasi 136 K bo'lsa, 13 nm o'lchamli nanokristallar uchun u 119 K ekanligi tajribalarda aniqlangan.

Ma'lumki, kristallarning issiqlik o'tkazuvchanligi elektron va fonon tashkil etuvchilaridan tashkil topgan. Metall o'tkazuvchanlikka ega bo'lgan metallsimon moddalar uchun elektron tashkil etuvchilar asosiy rol o'ynasa, yarimo'tkazgichlar va dielektriklar uchun fonon tashkil etuvchilar asosiy rol o'ynaydi. Binobarin, kristallitlar o'lchamining kamayishi elektronlarning kristallitlar chegaralarida sochilishi nanoo'l-chamdagi metallarda issiqlik o'tkazuvchanligining kamayishiga olib keladi. Masalan, o'lchami 20-47 nm bo'lgan kumushning (Ag) tempera-tura o'tkazuvchanligi va unga proporsional bo'lgan issiqlik o'tkazuv-

chanligi makroo'lchamdagisidikiga qaraganda 3.5-4 marta kam bo'lishi aniqlangan.

Shuningdek, nanokristallitning sirt taranglik energiyasining uning o'lchamiga bog'liqligi T_{erish} temperaturasining ham o'lcham kamayishi bilan kamayishiga olib keladi. Bunday qonuniyat bir qator metallar (Al, Ag, Cu, Au va boshqalar) uchun tajribada kuzatilgan. Shunday qilib, zarralarining o'lchamlari kamayishi bilan metallarning erish temperaturalarining kamayishi kuzatiladi. Bunda metallarning erish temperaturalarini bir necha yuz graduslarga kamayishi mumkin. Masalan, makroskopik oltinning erish temperaturasi 1340 K bo'lsa, 2.5 nm o'lchamli zarralarga o'tganda erish temperaturasi 1000 K bo'lib qoladi (9.8-rasm). Nanoo'lchamli zarralarning erish temperaturalarining kamayishi boshqa metallarda (Sn, Pb, Cu, Al, Bi) va ba'zi birikmalarda ham kuzatilgan.



9.8-rasm. Oltin nanozarrasi erish temperaturasining zarraning d diametriga (o'lchamiga) bog'lanish grafigi.

Metall nanozarralarining erish temperaturasining o'lchamlarga bog'liqligini tushuntirishning hozirgi vaqtda ikki xil modeli bor. Birinchi model termodinamikaviy model bo'lsa, ikkinchi modelida atomlarning tebranma harakatlari orqali tushuntiriladi. Termodinamikaviy nuqtai nazardan temperatura ortishi bilan nanozarrani qattiq holatdan suyuq holatiga o'tishi uning sirt taranglik kuchlari kichikligi tufayli yadrosi qattiq holatda qolgan holda sirtida cheksiz kichik suyuq qatlam hosil bo'lishi va o'suvi bilan tushuntiriladi. Ikkinchi modelda qattiq nanozarra sirtida oldindan bug' faza bilan muvozanatda bo'lgan suyuq faza bor deb faraz qilinadi. Sirtiy atomlar o'lcham tufayli hajm ichidagi atomlar bilan

zaif bog‘lanishda bo‘lganligi uchun temperatura ortishi bilan sirtiy atomlar ichkaridagi atomlarga nisbatan kattaroq amplituda bilan tebranib, ertaroq suyulishga olib keladi. Har holda metallarning nanozarralarida ularning o‘lchamlari kamayishi bilan erish temperaturasi kamayishi tajribalarda tasdig‘ini topgan faktdir. $T_{erish}(r)$ erish temperaturasi o‘lchamga bog‘liqligini ifodalovchi quyidagi ifoda taklif etilgan:

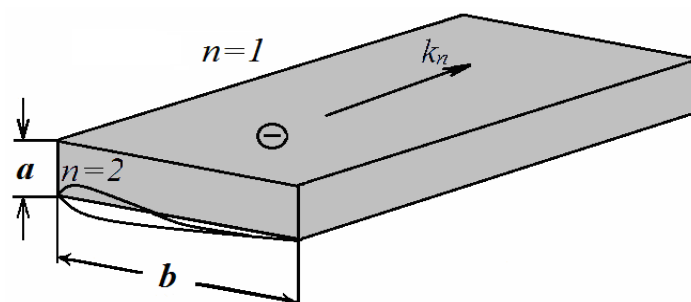
$$T_{erish}(r)=T_0(1-\alpha/r), \quad (9.3)$$

bunda T_0 - makroskopik o‘lchamdagi moddaning erish temperaturasi, r – nanozarraning o‘lchami, α - makroskopik moddaning erish temperatura-siga, zichligiga va uning sirt taranglik energiyasiga bog‘liq bo‘lgan doimiy kattalik.

Moddaning diffuziyaviy harakatchanligi, issiqlik o‘tkazuvchanligi va boshqa kinetik xossalari ham nanokristallarning o‘lchamlariga sezilarli bog‘liq bo‘ladi. Nanomateriallarda chegaraviy diffuziya va o‘zdiffuziya koeffitsientlari uch va undan katta tartibga kattalashuvi tajribalarda kuzatilgan.

9.2.5. Nanokristallarning o‘tkazuvchanlik xossalari

Klassik fizikada boshqa barcha zarralar kabi erkin elektronlar ham Nyutonning tenglamalari bilan aniqlanadigan trayektoriyalar bo‘yicha istalgan yo‘nalishda harakat qilishi mumkin. Nanosistemalarda esa elektronlarning harakati kvant mexanikasi qonunlari asosida butunlay boshqacha sodir bo‘ladi. Nanosistemada hech bo‘lmaganda fazoning bitta yo‘nalishida, aksari hollarda esa barcha yo‘nalishlarida elektronning de-Broyl to‘lqin uzunligi sistemaning o‘lchami qatorida bo‘ladi. Bu hodisaning klassik analogi uchlari mahkamlangan biror L uzunlikka ega bo‘lgan tor bo‘lishi mumkin. Bunday torning tebranishi $\lambda = 2L/n$ ($n = 1, 2, 3, \dots$) shartni qanoatlantiruvchi turg‘un to‘lqin qonuniyatlari asosida sodir bo‘ladi. Bunday hol a va b kesimlari nanoo‘lchamga ega bo‘lgan kvant shnuri misolida tasvirlangan (9.9-rasm). Ushbu shurning a va b yo‘nalishlarida faqat shurning bu geometriyaviy o‘lchamlariga karrali to‘lqin uzunlikdagi elektronlar tarqala olishi mumkin. Shurning nano-o‘lchamli yo‘nalishlarida tarqalayotgan to‘lqin sonlarining qiymatlari $k = 2\pi/\lambda_n = n\pi/L$ munosabatdan aniqlanadi. Bu ifodada L -nanokristallning o‘lchami. 9.9-rasmga ko‘ra, a yoki b bo‘lishi mumkin. Buning ma’nosi shuki, a va b yo‘nalishlarda harakatlanayotgan elektronlar faqat aniq dis

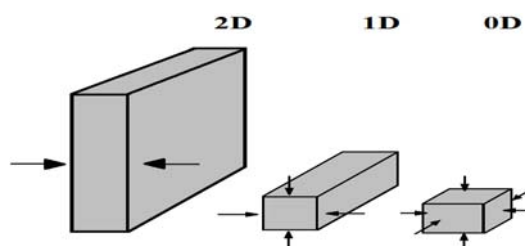


9.9-rasm. Nanoo‘lchamdagi kristallda elektronlarning harakatlanish imkoniyatlari.

kret energiyalarga ega bo‘lishi mumkin. Bu holda sistema o‘lchami cheklangan yo‘nalishda valent elektronlar zonasining uzluksiz strukturasi uzlukli (diskret) struktura bo‘lib qoladi. Elektron energiyasi qat’iy aniq diskret (uzlukli) qiymatlarga ega bo‘ladi. Bu hodisa “kvant cheklanish” nomini olgan. m^* effektiv massali elektron harakatini hech bo‘lmaganda bitta yo‘nalishda cheklab qo‘yish kvant mexanikasidagi noaniqlik prinsipiga ko‘ra, bu elektronning impulsini $\hbar/L$ miqdorga ortishiga olib keladi, bunda $\hbar$ -Plank doimiysi. Bu esa mos holda elektron energiyasining quyidagi

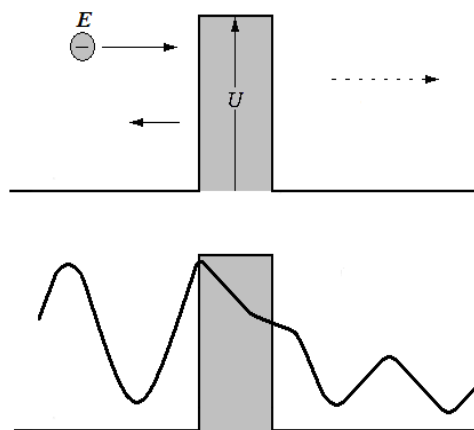
$$\Delta E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \times \frac{\pi^2}{L^2} \quad (9.4)$$

ifoda bilan aniqlanuvchi miqdorga ortishiga sabab bo‘ladi. Shunday qilib, nanozarradagi kvant cheklash hodisasi harakat yo‘li cheklangan elektronning minimal energiyasining ko‘payishiga olib kelar ekan. Tabiiyki, bu nanoo‘lchamli moddaning elektron xossalari bu moddaning odatiy makromasshtabda bo‘lgan o‘lchamdagisidan farq qilishga sabab bo‘ladi. 9.10-rasmda turli nanoo‘lchamli sistemalar tasvirlangan: elektron to‘lqin funksiyasi fazoda bir yo‘nalishda cheklangan ikki o‘lchamli (2D) sistema, ikki yo‘nalishda cheklangan bir o‘lchamli (1D) sistema va hamma uch yo‘nalishda ham cheklangan nol o‘lchamli (0D) sistema.



9.10 - rasm. Ikki, bir va nol o‘lchamli nanosistemalarda elektronlarning to‘lqin funksiyalarini fazoviy cheklanishlari.

Nanoo'lchamdagi strukturalarda elektron to'liqlarning o'zaro ta'sirlashuvida ham, birjinsli bo'lmagan sohalar bilan ta'sirlashuvida ham yorug'lik to'liqlarida kuzatiladigandek interferensiya hodisasi kuzatiladi. Bunday interferensiyaning o'ziga xos tomoni shundan iboratki, fotonlardan farqli holda, elektronlarda elektr zaryadi bo'lganligi uchun ularni lokal (o'troq) elektrostatik va elektromagnit maydoni orqali maqsadga muvofiq boshqarish mumkin va shu tariqa elektron to'liqlarining tarqalishiga ta'sir etish mumkin. Kvant zarralarning shu jumladan elektronlarning noyob xossalaridan biri ularning energiyalari potensial to'siqlarning balandligidan kichik bo'lgan hollarda ham ulardan parron o'ta olishidir. Bu hodisa **“tunnel (parron) o'tish”** deb ataladi. Bu hodisa sxematik ravishda 9.11-rasmda aks ettirilgan. Agar elektron E energiyali klassik zarra bo'lganida edi, $U > E$ energiyali potensial to'siqdan o'ta olmay, undan qaytgan bo'lar edi. Ammo nanosistemalardagi kvant zarralar yoki elektronlar bunday to'siqdan parron o'tib ketadi. Bu holda elektron



9.11-rasm. E energiyali elektronning U balandlikli potensial to'siqdan parron (tunnel) o'tishi.

energiyasining birmucha yo'qolishi kuzatiladi. Potensial to'siqning qalinligi qanchalik yupqa va to'siq balandligi bilan kvant zarra energiyasi orasidagi farq qanchalik kichik bo'lsa “parron o'tish” ehtimoli shunchalik katta bo'ladi. Nanoo'lchamli strukturalarda namoyon bo'ladigan kvant cheklash “tunnel o'tish”ga o'ziga xos ta'sir etadi. Chunonchi, juda yupqa va davriy joylashgan potensial chohlarda (o'ralarda) elektronlarning energetik holatlarining kvantlanishi shunga olib keladiki, ular orqali “parron o'tish” jarayoni rezonans xarakteriga ega bo'ladi, ya'ni bunday sistemadan faqat ma'lum bir aniq energiyaga ega bo'lgan elektronlarga “parron o'tish”i mumkin bo'ladi. Kvant mexanikasining ushbu qonuni-

yatlari amaliyotda katta ahamiyatga ega bo'lgan nanoo'lchamli kvant strukturalar yaratishda foydalaniladi.

Metallarning va ular asosidagi birikmalarning elektr qarshiligi asosan elektronlarning panjara tugunlaridagi atomlarining issiqlik tebranma harakati tufayli sochilishi hamda panjaradagi turli nuqsonlarda va kirishma atomlarda sochilishi tufayli hosil bo'ladi. Nanokristallarning solishtirma qarshiligi ularning yirik parchalariga nisbatan ortishi kuza-tiladi. Bunga albatta panjaraning yuqorida tilga olingan xarakteristikalar ta'sir qiladi. Ammo kristallning nanoo'lchamga o'tishi bilan uning fonon spektrining va elektron tuzilishining o'zgarishlari ham muhim rol o'ynay boshlaydi. Tajribalarning ko'rsatishicha, barcha metall o'tkazuvchanlikka ega bo'lgan materiallarda mutlaq nol temperatura atrofida (1- 10 K) qoldiq solishtirma elektr qarshiligining kattalashuvi va elektr qarshilikning temperaturaviy koeffitsiyentining kamayishi kuzatiladi. Nanomaterialning umumiy solishtirma elektr qarshiligini quyidagi formula bilan hisoblash mumkin:

$$\rho = \rho_0 + \rho_{ucheg} \left(\frac{S}{V} \right), \quad (9.5)$$

bunda ρ_0 - berilgan miqdordagi kirishma atom va nuqsonlarga ega bo'lgan monokristallning solishtirma elektr qarshiligi, ρ_{ucheg} - kristallitlar chegarasidagi solishtirma elektr qarshilik, S - kristallitlar chegaralarining yuzasi, V - nanomaterialning hajmi. (9.5) ifoda orqali va ayni moddaning mono- va nanokristallarining elektr qarshiliklarini o'lchab, quyidagi empirik

$$L = 2.37 \times (V/S)$$

formula orqali kristallitning shaklini tetraedrlardan tashkil topgan dodekaedr deb qarab, uning L o'lchamini aniqlash mumkin. Ammo bunda namunaning g'ovakligini, kirishmalarning bor yoki yo'qligini hisobga olish kerak.

Ko'pgina tadqiqotchilar tomonidan Cu, Pd, Fe, Ni va turli xil qotishmalarning nanokristallarida kristall donachalari o'lchamlarining kamayishi bilan ularning solishtirma qarshiliklarini anchaga ortishi kuzatildi. Nanokristall materialning ρ solishtirma qarshiligining donachalar kattaligi D bilan bog'lovchi tenglamalardan biri quyidagicha:

$$\ln \left(\frac{\rho}{\rho_\infty} \right) = \frac{l_\infty}{D} \ln \frac{1}{q}, \quad (9.6)$$

bunda ρ_{∞} - katta zarrali moddaning solishtirma qarshiligi, l_{∞} - elektronning nuqsonsiz monokristalldagi erkin yugurish uzunligi, q – elektronning moddadagi kristall donachalari chegarasida sochilish koefitsienti. Sochilish koefitsienti $0 < q < 1$ bo‘lganligi uchun 9.6-ifodaga ko‘ra, nanokristalldan tashkil topgan materialning donachalarining o‘lchamlari kamayishi bilan uning elektr qarshiligi o‘sishi kerak. Ammo metallarning nanokristallari elektr qarshiligining o‘sishining asosiy sababi nanodonachalarning ko‘plagan chegaralarida elektronlar sochilishining ko‘payishidir.

Nanomateriallarning elektr xossalarini tahlil qilishda $k = \delta/l$ va L/l nisbatlar muhim rol o‘ynaydi. Bu nisbatlar plyonkaning δ qalinligining va kristallitning L o‘lchamining zaryad tashuvchilarning l erkin yugurish yo‘liga keltirilgan qiymatlaridir. Elektr xossalarni o‘rganishda shuningdek elektronlarning kristallitning tashqi sirtlaridan va donachalar sirtlari orqali tunnel o‘tish qilishini ham e‘tiborga olish kerak.

Umuman, kristallitlar o‘lchamlarining nanomaterialning elektr xossalariga ta’siri juda ko‘p omillarga bog‘liq bo‘lib, ularni aniq hisobga olish hamma vaqt ham to‘g‘ri bo‘lavermaydi. Biroq aniq aytish mumkin-ki, plyonkaning qalinligi va kristallitning o‘lchami zaryad tashuvchilarning erkin yugurish yo‘lidan kichik bo‘lsa, zaryad tashuvchilarning elektron-fonon sochilishlariga nisbatan kristallitlarning sirtlarida sochilishi ancha kuchli bo‘lib, elektr qarshilikning ancha kattalashuviga sabab bo‘ladi. Yirik o‘lchamli o‘tao‘tkazuvchan materiallarga nisbatan ularning nanomateriallarida o‘tish temperaturasini ancha kamayishi aniqlangan. Bu hodisa yuqori temperaturali keramik o‘tao‘tkazgich materiallarda ham kuzatiladi.

9.2. 6. Nanokristallarning magnit xossalari

Xossalarining o‘lchamlarga bog‘liqligi nanomateriallarning magnit xossalari - koersitiv kuchi, qoldiq magnitlanish, magnit qarshiliklari kabi xossalarida ham namoyon bo‘ladi.

Nanoo‘lchamga o‘tish ferromagnetiklarning ko‘p domenlikdan (magnitlanganlikning maksimal qiymatiga ega bo‘lgan sohalardan) monodomenlikka o‘tishga olib keladi. Bunday holatga o‘tishning xarakterli o‘lchami turli ferromagnetiklar uchun $L = 0.23 \div 0.40 \text{ nm}$ oralig‘ida yotadi. Ferro-, ferri- va antiferromagnetiklar nanoo‘lchamga o‘tganda supermagnetizm xossasi namoyon bo‘ladi. **Supermagnetizm** bu ferromagnit va ferrimagnit zarralarda kuzatiladigan magnetizmning shaklidir.

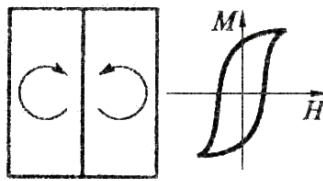
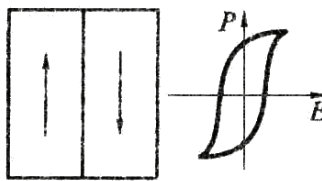
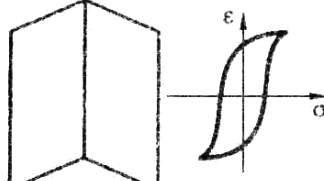
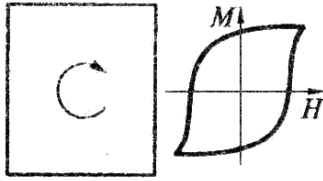
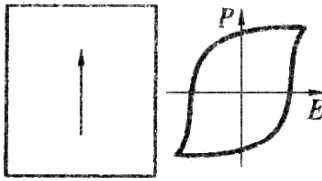
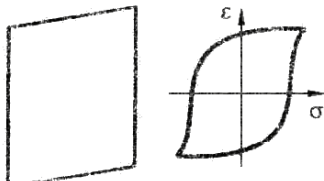
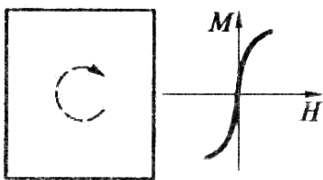
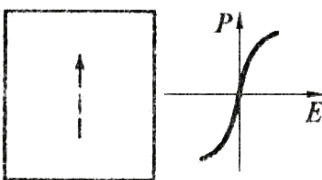
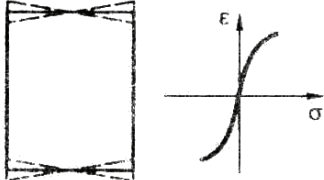
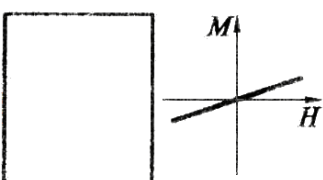
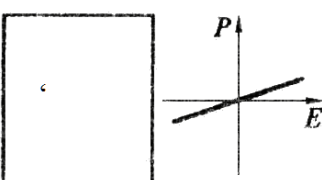
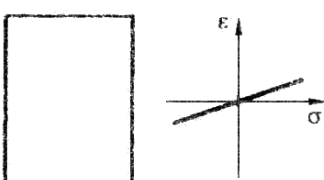
Agar magnit zarralari yetarli darajada kichik bo'lsa, ular bir domenli holatga o'tadi. Bu holatda zarra butun hajmi bo'ylab bir tekis magnitlanib qoladi. Bunday zarraning magnit momentlari temperatura ta'sirida tasodifiy yo'nalishda o'zgarib qolishi mumkin. Supermagnetik nanozarraning magnitlanganligi tashqi magnit maydon bo'lmaganda nolga teng bo'ladi. Tashqi magnit maydonida bunday zarralar hatto Kyuri yoki Neyel nuqtalarida o'zlarini paramagnetiklardek tutadi. Supermagnetiklarning magnit qabulchanligi paramagnetiklarnikiga qaraganda ancha katta. Bunday hol yuz berishi uchun magnetikdagi atomlarning issiqlik tebranishlari fluktuatsiyasi nanokristallitning magnit momentining aylanish energiyasi tartibida bo'lishi kerak. Bunga sabab issiqlik tebranishlari energiyasi magnit tartiblanishini buzadi. Natijada nanozarralarning magnit momentlarining tabiati paramagnit gazning atomlari yoki molekullarinikiga o'xshab qoladi. Masalan, temir uchun supermagnetizm 7 nm o'lcham atrofida kuzatiladi, $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ uchun $30 - 40\text{ nm}$ o'lchamlarda kuzatiladi.

Qattiq jismlarning magnit xossalari ularni tashkil etgan atomlarining orasidagi masofaga bog'liq ekanligini eslatib o'tamiz. Binobarin, nanokristallitlarda odatda atomlar orasidagi masofa kichraygani uchun to'yinish magnitlanganligi, Kyuri temperaturasi va magnit xossalarini xarakterlovchi boshqa xarakteristikalar yirik o'lchamli odatdagi magnetiklarnikiga nisbatan boshqa bo'ladi. Chunonchi, o'lchami 6 nm bo'lgan Fe polikristallining to'yinish magnitlanganligi yirik o'lchamdaginingikiga nisbatan 40 foiz kam ekanligi aniqlangan. Ammo Ni uchun bu ko'rsatgich atigi 5 foizga farq qiladi.

Kristallitning nanoo'lchamining turli magnetiklarning xarakteristikalariga ta'siri 9.12 - rasmda keltirilgan. 9.12 - rasmdan ko'rinib turibdiki, magnetiklarning o'lchamlarining o'zgarishi magnit xossalarning kuchli o'zgarishiga sabab bo'lar ekan.

9.2.7. Nanomateriallarning mexanikaviy xossalari

Nanomateriallarni tadqiqot qilishning muhim yo'nalishlaridan biri – ularning mexanik xossalarini (qattiqligini, mustahkamligini, plastikligini, elastikligini va shu kabilarini) o'lchamiga bog'liqligini o'rganishdir. Nanomateriallarning mexanik xossalarini tajribada o'rganish natijalarining ko'rsatishicha, ko'pgina metallarning (Pd, Cu, Ag, Ni va boshqalarning) nanoo'lchamlaridagi mustahkamlik chegarasi va qattiqligi ushbu moddalarning makroskopik analoglarinikiga qaraganda anchagina katta

Kristallitlar o'lchami, nm	Ferromagnetiklar	Segnetoelektriklar	Segnetoelastiklar
1000	Ko'pdomenli struktura 	Ko'pdomenli struktura 	Ko'pdomenli struktura 
100	Birdomenli struktura 	Birdomenli struktura 	Birdomenli struktura 
10	Superparamagnetik 	Superparaelektrik 	Superparaelastik 
1	Paramagnetik 	Paraelektrik 	Paraelastik 

9.12-rasm. O'lchamning ferromagnetiklarning, segnoelektriklarning va segnetoelastiklarning xarakteristikalariga ta'siri.

ekan. Donachalarining o'lchamlarining kamayishi bilan materiallarning qattiqligining va mustahkamligining ortishi ma'lum bir kritik o'lchamlargacha hamma kristallarga ham xosdir. Bu qonuniyat oquvchanlik chegarasining modda donachalarining $\bar{d}$ o'rtacha o'lchamining kvadrat ildiziga teskari proporsionalligini ifodalovchi Xoll - Petch tenglamasidan kelib chiqadi:

$$\sigma_T = \sigma_T^0 + k' d^{-\frac{1}{2}}, \quad (9.7)$$

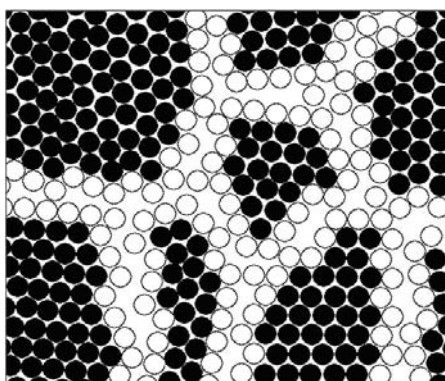
bunda σ_T^0 -monokristallning oquvchanlik chegarasi, k' - qandaydir o'lcham ko'effitsenti. Ushbu (9.7) munosabat $\bar{d}$ ning keng diapazonlarida 1 *mkm*

qiymatigacha yaxshi bajariladi. Ammo σ_T ni $\bar{d} < 100 \text{ nm}$ o'lchamga elektropolyatsiya qilib, topilgan qiymatlari odatdagi materiallarnikiga qaraganda 2-3 barobar kattadir.

Tajribalar natijalariga ko'ra, nanokristallar katta o'lchamli analoglariga qaraganda ancha mustahkamdir. Ultradispers kukunlarini kompaktlash yo'li bilan olingan, donachalarining o'lchamlari 5 nm bo'lgan Cu, Pd, Fe metallar nanofazalarining qattiqligi donachalari odatdagi makroskopik o'lchamda bo'lgan analoglaridan 2-5 marta katta ekan.

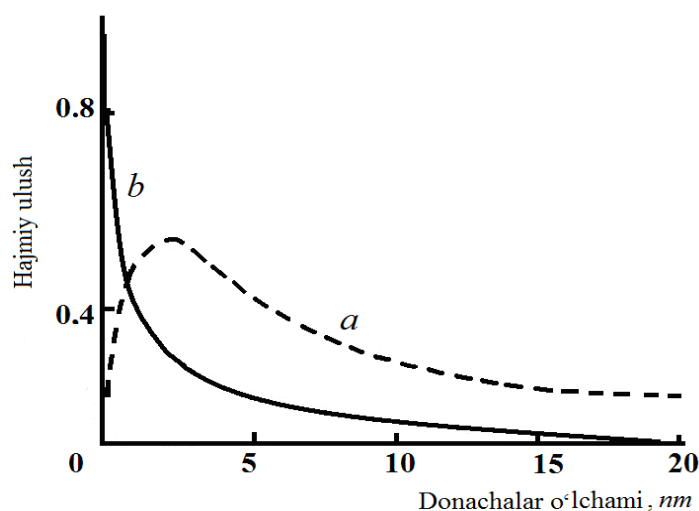
Nanomateriallarda vujudga keladigan mikronuqsonlar va ularning materialning xossalarini shakllanishidagi roli yetarlicha aniqlanmagan. Faraz qilish mumkinki, nanomateriallarning plastik deformatsiyasi hisobga olmaydigan darajada kam bo'ladi. Nanomateriallarda dislokatsiyalar ko'proq qo'zg'almas o'troq konfiguratsiyalar hosil qiladi. Bu hol nanomateriallarni cho'zilishga sinashda namoyon qiladigan juda zaif plastikligiga sabab bo'lsa kerak.

Nanomateriallarning mexanik xossalarining g'ayrioddiy o'zgarishida, aftidan, asosiy rolni donachalarning chegaralari o'ynasa kerak. Oddiy holda bir xil atomdan tashkil topgan nanomaterial strukturalari bilan farq qiladigan ikki komponentdan tashkil topgan bo'ladi: $5\text{-}20 \text{ nm}$ o'lchamli donacha (kristallit) va o'lchami 1.0 nm gacha bo'lgan kristallitlararo chegara. Turli o'lcham va yo'nalishga ega bo'lgan nanokristallit ega bo'lgan nanostrukturaning ikki o'lchamli oddiy modeli 8.13 - rasmda ko'rsatilgan. Har xil usullar bilan aniqlangan nanokristallitlarning (nanosohalarning) chegaralari 0.4 nm dan 1.0 nm gacha ekanligi aniqlangan. Chegaraviy atomlarning joylashuv strukturasi oddiy bo'lmay, balki bir qancha parametrlarga: qo'shni kristallitlarning o'zaro oriyentatsiyalariga,



9.13-rasm. Nanokristall materialning ikki o'lchamli modeli. Turli yo'nalishli nanokristallitlar qora doiralar bilan, ular orasidagi chegara oq doirachalar bilan belgilangan.

atomlararo ta'sirlashuv turlariga va boshqa parametrlarga bog'liq bo'ladi. Fazalararo chegaralarning zichligi nanokristallitlar zichligiga qaraganda 20- 40 % kichik bo'lib, chamasi, bunga turli kristallitlar strukturalarining mos kelmasligi va ularning bir-birlariga nisbatan xaotik (tartibsiz) joylashuvi sabab bo'lsa kerak. Nanomateriallardagi nanokristallitlar chegaralarining hajmiy ulushi kristallitlarning o'lchamlari kamayishi bilan avval ortib boradi, keyin esa kamayib boradi (9.14-rasm *a*-egri chizig'i). Kristallitlarning uchlanma tutash sohalarining ulushi esa doim ortib boradi (9.14 -rasm, *b* egri chizig'i).



9.14-rasm. Nanomateriallarda nanokristallitlar chegaralarining va ularning uchlanma tutash sohalarining hajmiy ulushlarini nanoo'lchamga bog'liqligi (1 nm qalinlikdagi donachada).

Nanomaterialning mexanikaviy xossalarini belgilovchi muhim omillardan biri ichki kuchlanishdir. Ko'p miqdordagi bir - biriga yaqin joylashgan nanodonachalar chegaralari va uchlanma tutash sohalar tufayli nanomateriallarda hamma vaqt ichki kuchlanish bo'ladi. Bundan tashqari nanomateriallar olinish usullarining tabiatiga kristallardagi kuchli ichki kuchlanishlar nanomateriallarning kristall strukturalarini o'zgarishiga olib keladi. Yuqorida aytib o'tganimizdek, nanomateriallarning o'lchamlari o'zgarishi bilan ularning koordinatsiyaviy soni, atomlararo masofalar o'zgarishi kuzatiladi.

Nanomateriallarda chatnashlarning paydo bo'lishining va tarqalishining qonuniyatlarini o'rganish mo'rt nanomateriallarning chatnashga bardosh berishini orttirish uchun muhim ahamiyatga egadir. Ayrim mo'rt bo'lgan intermetallidlar, nanokeramikalar ma'lum bir kritik o'lchamlardan boshlab plastik bo'lib qoladi. Keramik nanomateriallarda past

temperaturalarda yuqori darajadagi plastiklik kuzatilgan. Bundan bu materiallarga sanoatda turli ishlov berishda foydalaniladi. Nanomateriallarning o'taplastikligining temperaturaviy turg'unligi muhim amaliy ahamiyatga ega. Ni_3Al , TiO_2 , ZrO_2 va boshqa sistemalarda o'taplastiklik holatiga o'tish temperaturalarini odatdagi mayda zarrali materiallarga nisbatan 300-400 $^{\circ}\text{C}$ ga kamaytirishga muvaffaq bo'lindi. Nanomateriallar fizikasi XXI asrning eng yosh fani bo'lib, bu sohada hali ko'p izlanishlar olib borish kerak bo'ladi.

9.2.8. Nanozarralarni olish usullari.

Hozirgi vaqtda metallarning nanozarralarini olish usullarini takomillashtirish ustida izlanishlar ketmoqda. Metallarning atomlari ulardan hosil bo'ladigan ko'p sonli atomlardan tashkil topgan dimerlarida, trimerlarida, klasterlarida va nanozarralarida ham saqlanadigan yuqori darajadagi ximiyaviy faollikka ega. Bunday faol zarralarni tadqiq qilish turli stabilizatorlardan foydalanilib amalga oshiriladi. Nanozarralarni metallarning to'yingan bug'laridan olish sinalgan usullardan biridir. Bu metodning asosida paydo bo'layotgan yangi faza (nanozarralar) klasterlarini sferik suyuq tomchi modeli nuqtai nazaridan qarovchi nukleatsiya (faol markazlar) nazariyasi yotadi. Bu modelga ko'ra nanozarra suyuqlik tomchisi bilan qiyoslanadi. Haqiqatdan ham suyuqlik tomchisi bilan nanozarra orasida ko'p o'xshashliklar bor. Ularning asosiy umumiy xossalari shundan iboratki, suyuqlik tomchisi va nanozarralar molekulalari orasidagi o'zaro ta'sir to'yingandir: har bir molekula yoki atom ma'lum bir qat'iy qo'shnilar soniga ega. Tomchidagi molekulalar orasidagi o'zaro ta'sir kuchlari qisqa masofalardagina ta'sirlasha oladi. Nanozarraning hajmi ham tomchinikidek atomlar soniga proporsional ravishda ortadi. Suyuqlik tomchisida sirt taranglik mavjud. Nanozarralar ham ana shunday xossaga ega deyishga yetarli asoslar bor. Sirt taranglik kuchlari tomchini shar shakliga ega bo'lishga majbur etadi. Aytish mumkinki, shuning uchun ham nanozarralar shar shakliga ega. Nanozarralar olinadigan qurilmalarda metallni bug'latishning bir necha variantlari mavjud. Bular quyidagilar: tarkibida metall bo'lgan uchuvchan birikmalarni lazer yordamida, temperaturada, yoy razryad yordamida, plazma holatida, quyosh nurlari ostida bug'latish, lazer fotoliz yordamida olish. Bu usullar bilan olingan nanozarralarning ximiyaviy tarkibi juda toza, kovaklarsiz va morfologik birjinsli bo'ladi.

9.2.9. Nanomateriallarning amaliyotda qo'llanish sohalari

Nanokristallar va nanomateriallar haqidagi fanlar eng yangi fanlar bo'lganligi uchun bu materiallardan amalda foydalanish haqida to'la ma'lumot berishga hali erta. Ammo bu sohadan amaliyotda foydalanish uchun jiddiy ishlar qilishga ulgurildi va istiqboldagi imkoniyatlar haqida gapirish mumkin. Odatdagi o'lchamlardagi donachalardan tashkil topgan materiallarga qaraganda nanostrukturali materiallar statik va dinamik kuchlarga mustahkamligi va qattiqligi bilan farq qiladi. Shuning uchun hozirgi vaqtda ulardan foydalanishning asosiy yo'nalishi yuqori mustahkamlikka ega va eskirishga moyil bo'lmagan materiallar tayyorlashdir. Nanostrukturali materiallarning oquvchanligi odatdagi materiallarga nisbatan 2-3 marta ortiq bo'lgan holda plastikligi yo deyarli o'zgar-maydi, yo bir necha marta ortadi. Bu hol esa ulardan maqsadga muvofiq ravishda foydalanishga imkon beradi. Uglerod nanotolasi kiritilgan armaturalar, kompozitlar dinamik zarba sharoitidagi ishlarda foydalanish uchun istiqbolli material hisoblanmoqda. Ulardan zirh va bronjiletlar tayyorlash mumkin. Uglerod nanonaylari oddiy po'lat simdan bir necha 20 martalab mustahkam. Uglerod nanonayidan yasalgan 1 mm diametrli arqon 20 tonna yuk ko'tara oladi. Uglerod nanonayi o'zining og'irligiga qaraganda 10^2 - 10^9 marotaba og'ir yuk ko'tara oladi. Odamlar uchun suniy qo'l-oyoqlar, turli organlarning to'qimalari, robotlar uchun qo'l va oyoqlar yasaladi. Mikroskopik tarozilar, o'zga sayyoralarga chiqadigan lift uchun arqon (tros) tayyorlash mo'ljallanmoqda. Grafen olmosdan ham qattiq va mustahkam, biroq rezina kabi o'z uzunligiga nisbatan 4 barobar cho'zila oladi. Gaz va suyuqliklarni o'tkazmaydi, issiqlikni va elektr tokini misga nisbatan yaxshi o'tkazadi.

Nanoo'lchamdagi instrumental materiallar odatdagi instrumental materiallarga nisbatan ancha chidamli bo'ladi. Metall karbidlari qo'shilgan metall nanokukunlari yarimo'tkazgichlarga va dielektriklarga ishlov berishning yakunlovchi bosqichida tekislash va silliqlash uchun ishlatiladi.

Nanomateriallardan turli maqsadlarda ishlatish uchun tayyorlanadigan kompozit materiallarning tarkibiga kiruvchi qo'shilma sifatida foydalanish muhim va istiqbollidir. Kukunli (poroshokli) metallurgiya usuli bilan po'lat va qotishmalar tayyorlashda oddiy poroshoklarga nanoporoshoklarni qo'shish ishlab chiqariladigan mahsulotlarning g'ovakligini kamaytiradi, kompleks mexanikaviy xossalarini yaxshilaydi. Alyuminiy va titan qotishmalarining nanostrukturalarida o'taplastiklikning

paydo bo'lishi ulardan murakkab shaklga ega bo'lgan detallar va buyumlar yasash imkonini beradi. Ulardan turli materiallarni qattiq holatda payvandlash uchun biriktiruvchi qatlamlar sifatida foydalanish imkonini beradi. Nanokukunlarning juda katta solishtirma yuzasi ($5 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$ tartibida) ulardan bir qator ximiya sanoatida katalizator sifatida foydalanish imkonini beradi. Polinanokristalli olmos va olmosga o'xshagan qoplamalar, shuningdek, fullerenlar va fulleritlar (masalan, Fe_xC_{60}) asosidagi o'ta qattiq moddalar katta amaliy ahamiyatga ega. Juda yuqori (ultrayuqori) (70 GPa gacha) qattqlikka ega bo'lgan kub strukturali VN, C_3N_4 , TiC, TiN, Ti(Al, N) birikmalar asosidagi murakkab tarkibli ko'p qatlamli plyonkalar sirpanish ishqalanishga juda chidamli ekanligini namoyish etdi. Jumladan ularning ayrim plyonkalari zarbadan to'zishga chidamlidir. Kosmos texnikasi uchun o'z-o'zini moylovchi qoplama sifatida 20 GPa qattqlikka ega bo'lgan TiB-MoS₂ birikmasining ko'p fazali nanostrukturali qoplamasidan foydalanish mumkin. Metall nanokukunlari motor moyiga qo'shish yeyiluvchi yuzalarni tiklaydi.

Nanomateriallar yuqori chastotali elektromagnit to'lqinlarni va rentgen nurlarini yutuvchi sistemalarda ishlatilmoqda. Qo'rg'oshin nanozarralari shimdirilgan rezina yoki boshqa sun'iy materiallardan yasalgan qo'lqoplar, fartuklar va boshqa shu xil radiatsiyadan himoya qiluvchi kiyimlar odatdagi himoya kiyimlari radiatsiyadan bir xil himoya qilish qobiliyatiga ega bo'lgan holatda ulardan 4 marta yengildir. Yadro reaktorlarida UO₂ birikmalarining nanozarralari shimdirilgan yadro yoqilg'isi sterjenlari ancha tejamli va foydalanish effektivligi ancha yuqoridir.

Nanomateriallar elektromagnit va elektron texnikasi sohalariga ham jadal kirib kelmoqda. Ayrim nanomateriallarning (masalan, temirning xalkogenidlar qatlamlari bilan birgalikdagi qotishmasi) ularning juda yaxshi kompleks magnit xossalari tufayli yozib oluvchi va qayta eshittiruvchi qurilmalarda ishlatish imkoniyatini beradi. Yumshoq magnit qotishmalarining nanomateriallaridan yasalgan yassi sirtli va murakkab shaklli plyonkalari magnitofonlarning videoboshchasi uchun ishlatilmoqda. Ularning ishchi xarakteristikalar an'anaviy materiallarnikiga qaraganda juda yaxshi.

Bir qator nanomateriallarning koersitiv kuchining katta qiymatga egaligi ularni doimiy magnit sifatida foydalanish imkonini beradi. Qiyin eruvchi metallarning karbidlari (TaC, NbC, MoC) bilan to'ldirilgan uglerod nanonaylaridan o'tao'tkazgich sifatida foydalanish mumkin. Bir

qator o'taotkazgichlar tarkibiga nanokukunlarni qoshish ularning o'taotkazgich holatiga o'tish temperaturasini va kritik tokining zichligini oshiradi. Fullerenlar va ular asosidagi nanomateriallar yarimo'tkazgichlar, optikaviy va fotoelektr texnikasidagi turli qurilmalar ishlab chiqarish uchun istiqbollidir.

Savollar va masalalar

1. Qanday kristallarga nanokristallar deyiladi? Nanomateriallar nima?
2. Uglerod nanonayi qanday tuzilgan?
3. Fulleren va fullerit nima? Endofullerenchi?
4. Grafen nima?
5. Nanokristallardagi “o‘lcham effekti”ning mohiyati qanday tushuntiriladi?
6. Kvant tola va kvant nuqta nima?
7. “Kvant cheklash” prinsipining mohiyati nimadan iborat?
8. Nanoo‘lchamli effektlarda sirt atomlarining roli qanday?
9. Nanostruktura bilan klasterning farqi nimada?
10. Nanomateriallarning asosiy turlarini tavsiflab bering.
11. Nanostrukturalar elektronlarining energiya sathlari qanday bo‘ladi?
12. 8.9- rasmda keltirilgan nanokristallning a va b tomonlari mos holda 6 nm va 10 nm bo‘lsa, bu tomonlarda harakatlanishi mumkin bo‘lgan elektronlarning to‘lqin uzunliklarini aniqlang.
Javob: $12/n$ nm va $20/n$ nm bo‘lib, $n = 1, 2, 3, \dots$

Ayrim fizikaviy doimiy kattaliklar

Avogadro soni $N_A = 6.02252 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1} = 6.02252 \times 10^{26} \text{ kmol}^{-1}$

Massaning atom birligi $m_u = m(^{12}\text{C})/12 = 1.667 \times 10^{-27} \text{ kg}$

Gaz universal doimiysi $R = 8.3143 \text{ J} \times \text{mol}^{-1} \times \text{K}^{-1}$

Bolsman doimiysi $k_B = R/N_A = 1.38054 \times 10^{-23} \text{ J} \times \text{K}^{-1}$

Plank doimiysi $h = 6.6256 \times 10^{-34} \text{ J} \times \text{s}$

Plankning keltirilgan doimiysi $\hbar = h/2\pi = 1.0557 \times 10^{-34} \text{ J} \times \text{s}$

Elektr doimiysi $\varepsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12} \text{ F/m}$

Magnit doimiysi $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ Gn/m} = 1.257 \times 10^{-6} \text{ Gn/m}$

Yorug'likning vakuumdagi tezligi $c = 2.998 \times 10^8 \text{ m/s}$

Elektron zaryadi $e = 1.6021 \times 10^{-19} \text{ Kl}$

Elektronlarning tinchlikdagi massasi $m_0 = 9.1091 \times 10^{-31} \text{ kg}$

Elektronning nisbiy zaryadi $e/m_e = 1.758796 \times 10^{11} \text{ Kl} \times \text{kg}^{-1}$

Protonning tinchlikdagi massasi $m_p = 1.67252 \times 10^{-27} \text{ kg}$

Bor magnitoni $\mu_B = 9.2732 \times 10^{-24} \text{ J/Tl}$

Bor radiusi $a_0 = 5.2917 \times 10^{-11} \text{ m}$

$1\text{eV} = 1.67 \times 10^{-19} \text{ J}$

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR

1. Kittel Ch. Introduction to solid state physics. 8-th edition, New York: Jhon Wiley, 2005. 704 p.
2. Aschcroft N. W., Mermin N. D. Print book. Solid State Physics. V. 1-2. München (Germany): Oldenbourg, 2007, 1050 p.
- Ashkroft N. V., Mermin N. D. Fizika tverdogo tela. T. 1. M.: Kniga po trebovaniyu. Per. s angl. A. S. Mixaylova. 2013, 459 s.
3. Savelev I. V. Kurs obshey fiziki. T. 3. M.: KnoRus, 2012, 320 s.
4. Yepifanov G.I. Fizika tverdogo tela.-SPb.: Izd. Lan, 2011, 288 s.
5. Kulak A. I. Ximiya tverdogo tela. Minsk: BGU, 2011, 320 s.
6. Vasilevskiy A.S. Fizika tverdogo tela. M.: «Drofa», 2010, 208 s.
7. Matuxin V.L., Yermakov V.L. Fizika tverdogo tela. Sankt-Peterburg.: Lan, 2010, 218 s.
8. Gurtov V. A., Osaulenko P. N. Fizika tverdogo tela dlya injenirov. M.: Texnosfera. 2012, 560 s.
9. Vekilov Yu. X., Chernikov M. A. Kvazikristally //Usp. Fiz. nauk. 2010, t. 180, s. 561-586 .
10. Neutron diffraction. Editor I. Khidirov. Croatia, Rijeka: InTech - Open Access Publisher, 2012. 286 p.
11. Xidirov I. Neytronograficheskoye issledovaniye sistem Ti-C, Ti-N, Ti-C-H i Ti-N-H. Saarbrucken (Germaniya): LAP LAMBERT Academic Publishing, 2014, 184 s.
12. Xidirov I., Rakhmanov S. J. Neytronograficheskoe issledovanie fazovikh prevrashenie v karbogidride titana $TiC_{0.50}H_y$ // Crystallographiya.2018, v. 63, № 7, s. 1147-1152.
13. Xidirov I., Parpiev A. S. Neytronograficheskoye issledovaniye obrazovaniya antifaznix domenov v kubicheskom carbide titana $TiC_{0.60}$. Crystallographiya. 2013, v. 58, № 3, pp. 438–442.
14. Xidirov I., Parpiev A. S., Getmanskiy. Neytronograficheskoye issledovaniye carbide titana $TiC_{0.33}$ //Alternativnaya energetika i ekologiya. 2013, № 2/2 (120), s. 42-44.
15. Xidirov I., Sotvoldiev D. I. Ossilliryushaya vremennaya zavisimost vnutrennogo treniya v γ - obluchennom nestexiometricheskom karbida titana i vliyanie na nee ee vodoroda// Alternativnaya energetika i ekologiya. 2008. № 3, s. 94-100.
16. Xidirov I., Parpiev A. S. Razdelnoe opredelnoe dinamicheskix i staticheskix smescheniy atomov carbida titana metodom difraktsii neytronov// Crystallographiya. 2011, t. 56, № 3, s. 504-508.

17. Dzhumanov S. Theory of conventional and unconventional superconductivity in the high- T_c cuprates and other systems. New York: Nova Science Publishers, 2013, 356 p.
18. Mishenko A. S. Elektron-fononnoye vzaimodeystviye v nedopirovannix vysokotemperaturnix sverxprovodnikax. Uspexi fizicheskix nauk. 2009, t. 179, № 12, s. 1259-1280.
19. Kirillin V.A., Sichev V.V., Sheyndlin A.Ye. Texnicheskaya termodinamika. 5-izd. M.: Izd. MEI, 2008, 497 s.
20. Gusev A. I. Nestexiometriya, besporiyadok, bliyniy i dalniy poriyadok v tverdom tele. M.: Fizmatlit, 2007, 855 s.
21. Baloyan B. M., Kolmakov A. G., Alymov M. I., Krotov A. M. Nanomaterialы. M.: Mejdunar. Universitet prirody, obshestva i cheloveka. 2007, 69 s.
22. Yavorskiy B. M., Detlaf A. A., Lebedev A. K. Spravochnik po fizike. 8-izdaniye. M.: ONIKS, Mir i obrazovaniye, 2006. 1056 s.
23. Emiraliyev A. Spetsialnyye glavy fiziki tverdogo tela. Chast 1. Tashkent: TGTU, 2005, 158 s.
24. Teshaboyev A., Zaynobiddinov S., Musayev E. A. Yarimoʻkazgichlar va yarimoʻtkazgichli asboblar texnologiyasi. Toshkent: Oʻzbekiston, 2005, 392 b.
25. Andriyevskiy R.A., Ragulya A.V. Nanomaterialы. Moskva: Yes-testvennyye nauki, 2005, 245 s.
26. International tables for crystallography space group symmetry. Vol. A. 5th edition/Ed. Hahn Th., Berlin; New York: Springer-Verlag, 2005, 911 p.
27. Vinogradov A. Yu., Angev S. R. Nanocrustalline materials: Fatigue/In Encyclopedia of nanotechnology. New York: Marcel Dekker. 2004. P. 2069-2288.
28. Yunusov M. S., Vlasov S. I., Nazirov D. E., Tolipov D. O. Elektron asboblar. Tashkent.: OʻzMU, 2003, 191 b.
29. Societal Implications of Nanoscience and Nanotechnology. Eds. V. C. Roco W. S. Bainbridge. Dordrecht: Kluver Acad. Public. 2001, 280 p.
30. Teshaboyev A., Zaynobiddinov S., Ermatov Sh. Qattiq jism fizikasi. Toshkent: Moliya, 2001, 324 b.
31. Gleiter. H. Nanostructured materials: basic concepts and microstructure//Acta mater., 2000, v. 48, p.1-29.

32. Optical and electronic properties of fullerenes and fullerene-based materials. Ed. By Shinar V., Vally Vardeny Z., Rafafi Z. New York: Marcel Dekker. 2001, 392 p.
33. Pavlov P. V., Xoxlov A. F. Fizika tvyordogo tela . 3- izd. M.: Vyssh. shk., 2000, 494 s.
34. Ginzburg V. L. Sverxprovodimost: pozavchera, vchera, segodnya, zavtra. Uspexi fizicheskix nauk. 2000, t. 170, № 6, s. 585-630.
35. Shmidt V. V. Vvedeniye v fiziku sverxprovodnikov. 2-izd. M.: MSNMO, 2000, 402 s.
36. Jdanov G. S., Xundjua A. G. Leksii po fizike tverdogo tela. M.: MGU, 1988, 232 s.
37. Shulse G. Metallofizika. M.: Mir, 1971, 505 s.
38. Bednordz j. G., Muller K. F. Possible high T_c superconductivity in the Ba-La-Cu-O system. Z. Phys. B- Condensed matter. 1986. V. 64. P. 189-193.
39. Bokiyy G. B. Kristalloximiya. M.: Nauka. 1971, 400 s.
40. Gorelik S. S., Rastorguyev L. N., Skakov Yu. A. Rentgenografiy cheskiy i elektronoopticheskiy analiz. 3-izd. M.: MISIS. 1994. 328 s.
41. Dj. Blekmor. Fizika tverdogo tela. Perevod s angl. D.T. Andrianova i dr. M.: Mir. 1988. 608 c.
42. Jdanov G.S. Fizika tverdogo tela. - M.: Izd. Moskovskogo Gos. universiteta, 1961, 501 s.
43. Sirota D. I. Fizika tverdogo tela. Sbornik zadach s podrobnymi resheniyami. 2- izd. M.: Libokrom. 2014, 184 b.
44. Nikolayev I. N., Maymistov A. I. Sbornik zadach po kursu «Fizika tverdogo tela». 2 - izd. M.: izd. MIFI. 2009, 60 s.
45. Matrenin S. V. Nanostrukturnye materialy. Tomsk: izd. TGTU, 2009, 186 s.
46. Khidirov I., Rakhmanov S. J., Fazilov M. Debye temperature in crystals at temperature $T = 0$ K//Journal Ceramic Sciences and Engineering 2018, v. 1, № 2, p. 1-3.
47. Xidirov I., Raxmanov S. Dj., Maxmudov Sh. A., Getmanskiy V. V. Kristallicheskaya struktura splava $Ti_{0.70}Mo_{0.30}C$ //Uzb. fiz. j. 2019, t. 21, № 2, s.111-114.
48. Nazirov E. N., Nazirov D. E., Teshabaev A. T. Yarimo'tkazgichlar fizikafsi lug'ati. T.: Universitet, 2008, 310 b.
49. Mallin R. X., Nazirov E. N. Qodirov R. M. Fizikadan ruscha o'zbekcha terminlar lug'ati. Toshkent: O'qituvchi, 1974, 280 b.

MUNDARIJA

Kirish.....	3
I BOB. QATTIQ JISMLARNING TUZILISHI	6
1.1. Moddaning kondensatsiyalangan holatlari haqida umumiy tushunchalar.....	6
1.2. Moddaning kondensatsiyalangan holatlari klassifikatsiyasi.....	7
1.3. Kristallarning tuzilishi.....	14
1.3.1. Kristall panjara.....	14
1.3.2. Kristallarda simmetriya elementlari.....	15
1.3.3. Kristallar singoniyasi va Brave yacheykalari.....	19
1.3.4. Kristallarning fazoviy guruhlari.....	22
1.3.5. Kristall tekisliklari va yoʻnalishlari indekslari.....	23
1.3.6. Kristall panjara tekisliklari orasidagi masofa.....	28
1.3.7. Teskari panjara.....	30
1.3.8. Kristall panjarasi atomlari orasidagi masofani hisoblash.....	32
1.3.9. Sharlarning zich joylashish prinsipi. Metallarning kristall panjarasi turlari va tugunlararo boʻshliqlar.....	33
1.3.10. Kristall panjaradagi difraksiya hodisasi. Bregg qonuni. Kristall panjarasining tuzilishini oʻrganish.....	39
1.3.11. Kristallarning rentgenografiyaviy zichligi.....	47
Savollar va masalalar.....	49
II BOB. REAL KRISTALLAR. KRISTALLARDAGI NUQSONLAR	51
2. 1. Kristallardagi nuqsonlar.....	51
2.2. Kristallardagi nuqtaviy nuqsonlar.....	51
2.2.1. Kristallardagi nuqtaviy nuqsonlarning turlari.....	51
2.2.2. Nuqtaviy nuqsonlarning hosil boʻlish mexanizmlari.....	57
2.3. Chiziqli yoki bir oʻlchovli nuqsonlar.....	60
2.3.1. Chiziqli va vintsimon dislokatsiyalar.....	60
2.3.2. Dislokatsiyalar energiyasi.....	63
2.3.3. Dislokatsiyalarning paydo boʻlishi va harakati.....	69
2.3.4. Dislokatsiyalarning toʻsiqlarni yengib oʻtishi va Frank –Rid manbasi.....	73
2.4. Kristallardagi yassi yoki ikki oʻlchamli nuqsonlar.....	76
2.5. Kristallardagi hajmiy nuqsonlar.....	78
2.6. Kristallarning fizikaviy va ximiyaviy xossalari ularning real tuzilishiga bogʻliqligi.....	79
Savollar va masalalar.....	85

III BOB. KRISTALLARDAGI XIMIYAVIY	
BOG‘LANISHLARNING TURLARI VA ULARNING	
FIZIKAVIY ASOSLARI.....	87
3.1. Kristall panjaralaridagi kuchlar.....	87
3.2. Kristallardagi ximiyaviy bog‘lanishlarning klassifikatsiyasi.....	90
3.3. Ion bog‘lanishli kristallar.....	91
3.4. Metall bog‘lanishli kristallar.....	95
3.5. Kovalent bog‘lanishli kristallar.....	97
3.6. Molekulyar bog‘lanishli kristallar.....	102
3.7. Vodorod bog‘lanishli kristallar.....	108
3.8. Aralash bog‘lanishlar.....	109
Savollar va masalalar.....	112
IV BOB. QATTIQ JISMLARNING MEXANIK	
XOSSALARI.....	113
4.1. Jismga ta’sir qiluvchi tashqi kuchlar va jism deformatsiyasi.....	113
4.2. Ichki mexanik kuchlar va kuchlanish.....	115
4.3. Ichki mexanik kuchlanish tenzori.....	121
4.4. Deformatsiyaning potensial energiyasi.....	123
4.5. Haqiqiy va shartli deformatsiyalar.	
Deformatsiyada superpozitsiya prinsipi.....	125
4.6. Qattiq jismning cho‘zilish diagrammasi.....	127
4.7. Qattiq jismlarda elastik uyg‘onishning tarqalishi. Bir o‘lchamli bir jinsli torning tebranishi.....	129
4.8. Qattiq jismlarda deformatsiyaning temperaturaga bog‘liqligi.....	132
Savollar va masalalar.....	134
V. QATTIQ JISMLARDAGI ISSIQLIK HODISALARI.....	136
5.1. Kristall panjarasi atomlarining issiqlik harakati.....	136
5.2. Qattiq jismlarning issiqlik sig‘imi.....	142
5.3. Metallardagi elektron gazining issiqlik sig‘imi.....	147
5.4. Kristall issiqlik sig‘imining Eynshteyn nazariyasi.....	149
5.5. Debay nazariyasi va Debay temperaturasi.....	151
5.6. Debay nazariyasi bo‘yicha qattiq jismlarning issiqlik sig‘imi.....	156
5.7. Kristall atomlarining nolinchi tebranishlari va mutlaq nol temperaturadagi Debay temperaturasi.....	163
5.8. Qattiq jismlarning issiqlikdan kengayishi.....	166
5.9. Qattiq jismlarning issiqlik o‘tkazuvchanligi.....	170
5.10. Qattiq jismlarda diffuziya hodisasi.....	177
5.11. Fik qonunlari. Diffuziya koeffitsienti.....	178

Savollar va masalalar.....	185
VI. MODDANING FAZAVIY (HOLAT)	
O‘ZGARISHLARI.....	187
6.1. Gomogen va geterogen sistemalar. Termodinamikaviy faza tushunchasi. Kristallarda termodinamikaviy muvozanat.....	187
6.2. Termodinamikaviy potentsiallar va sistema muvozanatining umumiy shartlari.....	189
6.3. Fazaviy (ichki) muvozanat shartlari.....	194
6.4. Ko‘p fazalar muvozanatining shartlari soni va muvozanat holatlari diagrammasi.....	197
6.5. Faza o‘zgarishlarining turlari.....	200
6.6. Faza o‘zgarishlarining xususiyatlari.....	206
6.7. Qattiq eritmalar kristall panjarasidagi atomlarning tartiblanishi va tartibsizlanishi.....	209
6.7.1. Qattiq eritmalarining turlari va oraliq fazalar.....	209
6.7.2. Qattiq eritmalar kristall panjarasidagi atomlarning tartiblanishi.....	213
6.8. Tartiblanishning sodda nazariyasi.....	220
6.9. Yaqin tartib.....	225
Savollar va masalalar.....	229
VII BOB. KRISTALLARDAGI ELEKTRONLARNING ENERGIYA ZONALARI.....	231
7.1. Yakkalangan vodorodsimon atomdagi elektronning energiyaviy sathlari.....	231
7.2. Elektron zichligining yakkalangan vodorod atomining turli holatlari uchun taqsimlanishi.....	238
7.3. Kristallardagi elektronlarning energiyaviy zonalari nazariyasining asosiy prinsiplari.....	241
7.4. Kristallning davriy potentsial maydonida harakat qilayotgan elektronning harakat tenglamasi.....	243
7.5. Davriy potentsial maydondagi erkin bo‘lmagan elektron harakati. Blox funksiyasi va uning xossalari.....	245
7.6. Bir o‘lchamli davriy potentsial maydondagi elektronlarning energiyaviy spektri.....	249
7.7. Bir o‘lchamli kristallning davriy potentsial maydonidagi elektronning energiyaviy spektrining xossalari.....	254
7.8. Kristalldagi elektronlar energiya spektrining zonalarga bo‘linishining fizikaviy interpretatsiyasi.....	259

7.9. O'tkazgichlar, yarimo'tkazgichlar va dielektriklar.	
Elektronlarning energiyaviy sathlar bo'yicha statistikasi.....	262
7.10. Kristalldagi elektronlarning tashqi elektr maydonidagi harakati.....	268
7.11. Kovaklarning musbat zaryadga va manfiy massaga ega ekanligini tajribalarda tasdiqlanishi.....	272
7.12. Kristallardagi kirishma atomlarning energiyaviy sathlari.....	274
7.13. O'tao'tkazuvchanlik.....	277
7.14. O'tao'tkazuvchanlikning fizikaviy tabiati.....	282
7.15. O'tao'tkazgichlarning fanda va amaliyotda qo'llanilishi.....	289
Savollar va masalalar.....	291

VIII BOB. QATTIQ JISMNING MAGNIT XOSSALARI..... 293

8.1. Moddalarning magnit xossalarining hosil bo'lish mexanizmlari va ularni xarakterlovchi fizikaviy kattaliklar.....	293
8.2. Atomlarning magnit xossalari.....	296
8.3. Magnetiklarning turlari.....	299
8.4. Diamagnetizm.....	301
8.4.1. Tashqi magnit maydonining atomdagi elektron orbitasiga ta'siri.....	301
8.4.2. Atomning ortdirilgan magnit momenti	
Diamagnetiklarning magnit qabulchanligi.....	306
8.5. Paramagnetizm.....	308
8.5.1. Paramagnetizm tabiati.....	308
8.5.2. O'tkazuvchanlik elektronlarining paramagnetizmi.....	312
8.5.3. Magnit rezonansi.....	314
8.6. Ferromagnetizm.....	319
8.6.1. Ferromagnetizmni tasdiqlovchi tajribalar.....	319
8.6.2. Ferromagnetiklarning ichki magnit maydoni va magnit qabulchanligi.....	321
8.6.3. Ferromagnetizmning vujudga kelishida almashinuvchi ta'sirlashuvning roli.....	325
8.6.4. Ferromagnetiklarning domenli tuzilishi.....	327
8.6.5. Ferromagnetizm nazariyasining asosiy xulosalari.....	332
8.7. Antiferromagnetizm. Ferrimagnetizm.....	335
8.8. Doimiy magnitlar.....	339
Savollar va masalalar.....	341

IX BOB. NANOSTRUKTURALAR VA

NANOMATERIALLAR.....	342
9.1. Nanostrukturalar va nanomateriallar haqida umumiy tushunchalar va ularning klassifikatsiyasi.....	342
9.2. Nanostrukturali materiallarning xossalari.....	349
9.2.1. Umumiy ma'lumotlar.....	349
9.2.2. Elektronlar spektri.....	350
9.2.3. Nanokristallarning fazaviy holatlari va termodinamikasi.....	353
9.2.4. Nanokristallarda issiqlik hodisalari.....	357
9.2.5. Nanokristallarning o'tkazuvchanlik xossalari.....	359
9.2.6. Nanokristallarning magnit xossalari.....	363
9.2.7. Nanomateriallarning mexanikaviy xossalari.....	364
9.2.8. Nanozarralarni olish usullari.....	368
9.2.9. Nanomateriallarning amaliyotda qo'llanish sohalari.....	369
Savollar va masalalar.....	372
Ayrim fizikaviy doimiy kattaliklar.....	373
Foydalanilgan adabiyotlar.....	374

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение.....	3
ГЛАВА I. СТРОЕНИЕ ТВЕРДЫХ ТЕЛ.....	6
1.1. Общие понятия о конденсированном состоянии вещества.....	6
1.2. Классификация конденсированных состояний вещества.....	7
1.3. Строение кристаллов.....	14
1.3.1. Кристаллическая решетка.....	14
1.3.2. Элементы симметрии в кристаллах.....	15
1.3.3. Сингония кристаллов и элементарные ячейки Бравэ.....	19
1.3.4. Пространственные группы кристаллов.....	22
1.3.5. Индексы плоскостей и направлений в кристаллах.....	23
1.3.6. Расстояние между плоскостями кристаллической решетки.....	28
1.3.7. Обратная решетка.....	30
1.3.8. Вычисление расстояния между плоскостями кристаллической решетки.....	32
1.3.9. Принцип плотной упаковки шаров. Типы кристаллической решетки металлов.....	33
1.3.10. Дифракция в кристаллах. Закон Брэгга. Изучение кристаллической решетки.....	39
1.3.11. Рентгенографическая плотность кристаллов.....	47
Вопросы и задачи.....	49
ГЛАВА II. РЕАЛЬНЫЕ КРИСТАЛЛЫ. ДЕФЕКТЫ КРИСТАЛЛАХ.....	51
2. 1. Дефекты в кристаллах.....	51
2.2. Точечные дефекты в кристаллах.....	51
2.2.1. Виды точечных дефектов в кристаллах.....	51
2.2.2. Механизмы образования точечных дефектов.....	57
2.3. Линейные или одномерные дефекты.....	60
2.3.1. Линейные и винтообразные дислокации.....	60
2.3.2. Энергия дислокаций.....	63
2.3.3. Возникновение и движение дислокаций.....	69
2.3.4. Преодоление препятствий дислокации. Источник Франка-Рида.....	73

2.4. Плоские и двумерные дефекты в кристаллах.....	76
2.5. Объемные дефекты в кристаллах.....	78
2.6. Зависимость физико-химических свойств кристаллов от реальной структуры.....	79
Вопросы и задачи.....	85
ГЛАВА III. ТИПЫ ХИМИЧЕСКИХ СВЯЗЕЙ В КРИСТАЛЛАХ И ИХ ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ.....	87
3.1. Силы в кристаллических решетках.....	87
3.2. Классификация химических связей в кристаллах.....	90
3.3. Ионная связь в кристаллах.....	91
3.4. Металлическая связь в кристаллах.....	95
3.5. Ковалентная связь в кристаллах.....	97
3.6. Молекулярная связь в кристаллах.....	102
3.7. Водородная связь в кристаллах.....	108
3.8. Смещенная связь.....	109
Вопросы и задачи.....	112
ГЛАВА IV. МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТЕРДЫХ ТЕЛ.....	113
4.1. Внешние силы, действующие на тело и деформация.....	113
4.2. Внутренние механические силы и напряжение.....	115
4.3. Тензор внутреннего механического напряжения.....	121
4.4. Потенциальная энергия деформации.....	123
4.5. Абсолютная и условная деформации. Принцип суперпозиция в деформации.....	125
4.6. Диаграмма растяжения твердого тела.....	127
4.7. Распространение эластического возбуждения в твердых телах. Колебание одномерной и однородной струны.....	129
4.8. Зависимость деформации твердого тела от температуры	132
Вопросы и задачи.....	134
ГЛАВА V. ТЕПЛОВЫЕ ЯВЛЕНИЯ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ.....	136
5.1. Тепловые движения атомов в кристаллах.....	136
5.2. Теплоемкость твердых тел	142
5.3. Теплоемкость электронного газа в металлах.....	147
5.4. Теория Эйнштейна теплоемкости твердых тел.....	149
5.5. Теория Дебая и температура Дебая	151

5.6. Теплоемкость твердых тел по теории Дебая.....	156
5.7. Нулевые колебания атомов в кристалле и температура Дебая при температуре абсолютного нуля.....	163
5.8. Тепловое расширение твердых тел	166
5.9. Теплопроводность твердых тел.....	170
5.10. Явление диффузии в твердых телах.....	177
5.11. Законы Фика. Коэффициенты диффузии.....	178
Вопросы и задачи.....	185
ГЛАВА VI. ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В ВЕЩЕСТВАХ.....	187
6.1. Гомогенные и гетерогенные системы. Понятие о термодинамической фазе. Термодинамическое равновесие в кристаллах	187
6.2. Термодинамические потенциалы и общие условия равновесия системы.....	189
6.3. Условия фазового (внутреннего) равновесия.....	194
6.4. Число условий равновесия многих фаз и диаграмма равновесных фаз.....	197
6.5. Типы фазовых превращений.....	200
6.6. Особенности фазовых превращений.....	206
6.7. Упорядочение и разупорядочение атомов в кристаллах твердых растворов.....	209
6.7.1. Типы твердых растворов.....	209
6.7.2. Упорядочение атомов в кристаллической решетке твердых растворов.....	213
6.8. Простая теория упорядочения.....	220
6.9. Ближний порядок.....	225
Вопросы и задачи.....	229
ГЛАВА VII. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ЗОНЫ ЭЛЕКТРОНОВ В КРИСТАЛЛАХ.....	231
7.1. Энергетические уровни электрона изолированного водородоподобного атома.....	231
7.2. Распределение плотности электрона для различных состояний изолированного атома водорода.....	238
7.3. Основные принципы зонной теории электронов в кристаллах.....	241

7.4. Уравнение движения движущего электрона в периодическом потенциальном поле кристалла.....	243
7.5. Движение не свободного электрона в периодическом поле. Функция Блоха и ее свойства.....	245
7.6. Энергетические спектры движущегося электрона в одномерном периодическом потенциальном поле.....	249
7.7. Свойства энергетического спектра движущего электрона в одномерном периодическом потенциальном поле.....	254
7.8. Физическая интерпретация разделения на зоны энергетического спектра электронов в кристаллах.....	259
7.9. Проводники, полупроводники и диэлектрики. Статистика электронов по энергетическим уровням.....	262
7.10. Движение электронов в кристаллах во внешнем электрическом поле.....	268
7.11. Экспериментальное подтверждение положительной и отрицательной массы дырки.....	272
7.12. Энергетические уровни примесных атомов в кристаллах.....	274
7.13.Сверхпроводимость.....	277
7.14. Физическая природа сверхпроводимости.....	282
7.15. Применение сверхпроводимости в науке и на практике.....	289
Вопросы и задачи.....	291
ГЛАВА VIII. МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА	
ТЕРДОГО ТЕЛА.....	293
8.1. Механизмы возникновения магнитных свойств вещества.....	293
8.2. Магнитные свойства атомов.....	296
8.3. Виды магнетиков.....	299
8.4.Диамagnetизм.....	301
8.4.1. Влияние внешнего магнитного поля на орбиту электрона в атоме.....	301
8.4.2. Приобретенный магнитный момент атомов Магнитный восприимчивость диамагнетиков	306
8.5. Парамагнетизм.....	308
8.5.1. Природа парамагнетизма	308
8.5.2. Парамагнетизм электронов проводимости.....	312
8.5.3. Магнитный резонанс.....	314

8.6. Ферромагнетизм.....	319
8.6.1. Эксперименты, подтверждающие ферромагнетизм.....	319
8.6.2. Внутреннее магнитное поле ферромагнетиков и магнитная восприимчивость.....	321
8.6.3. Роль взаимодействия обменных сил в возникновении ферромагнетизма.....	325
8.6.4. Доменное строение ферромагнетиков.....	327
8.6.5. Основные выводы теории ферромагнетизма.....	332
8.7. Антиферромагнетизм. Ферримагнетизм.....	335
8.8. Постоянные магниты.....	339
Вопросы и задачи.....	341
ГЛАВА IX. НАНОСТРУКТУРЫ И НАНОМАТЕРИАЛЫ...	342
9.1. Общие сведения о наноструктурах и наноматериалах и их классификация.....	342
9.2. Свойства наноструктурных материалов.....	349
9.2.1. Общие сведения.....	349
9.2.2. Электронные спектры.....	350
9.2.3. Фазовые состояния и термодинамика нанокристаллов.....	353
9.2.4. Тепловые явления в нанокристаллах.....	357
9.2.5. Проводящие свойства нанокристаллов.....	359
9.2.6. Магнитные свойства нанокристаллов.....	363
9.2.7. Механические свойства наноматериалов.....	364
9.2.8. Способы получения наночастиц.....	368
9.2.9. Области применения наноматериалов на практике.....	369
Вопросы и задачи	372
Некоторые физические постоянные	373
Использованная литература.....	374

IRISALI XIDIROV

QATTIQ JISM FIZIKASI

Nashriyot muharriri: Ilhom Yuldoshev
Musahhiha: Nazokat Sa'dullaeva
Tekhnik mukharrir: Behzod Boltaboev

«MUMTOZ SO‘Z»
masuliyati cheklangan jamiyati
nashriyoti

Manzil: Toshkent, Navoiy ko‘chasi, 69.
Тел.: (998 71) 241-60-33 E-mail: mumtoz_soz@mail.ru

Nashriyot litsenziyasi AI № 103. 15.07.2008
Bosishga rukhsat 14.06.2018
Qog‘oz bichimi 60x84 1/16. Ofset qog‘ozi
Times New Roman garniturasida. Khisob-nashriyot tabog‘i 22.
Shartli bosma tabog‘i 25. Adadi 150.
Bahosi kelishilgan narxda

M. Ulug‘bek nomli O‘zMU
«Universitet» bosmaxonasida chop etildi.
Manzil: Toshkent, Universitet ko‘chasi, 4.
Tel.: 71-227-15-41