

ԵՐԵՎԱՆԻ ՊԵՏԱԿԱՆ
ՆԱԽԱԼՍԱՐԱՆ

Ա. ԿԻՐԱԿՈՍՅԱՆ, Ա. ՎԱՐՊԱՆՅԱՆ, Ա. ԱՄԱՏՐՅԱՆ

ՊԻՆԴ ՄԱՐՄԵՆԻ ՖԻԶԻԿԱՅԻ ԽՆԴԻՐՆԵՐ

ՄԱՍ 1

ԵՐԵՎԱՆԻ ՊԵՏԱԿԱՆ ՀԱՄԱԼՍԱՐԱՆ

Ա. Ա. Կիրակոսյան, Ա. Լ. Վարդանյան, Ա. Լ. Ասատրյան

ՊԻՆԴ ՄԱՐՄՆԻ ՖԻԶԻԿԱՅԻ

ԽՆԴԻՐՆԵՐ

Մաս I

**ԵՐԵՎԱՆ
ԵՊՐ ՀՐԱՏԱՐԱԿՉՈՒԹՅՈՒՆ
2015**

ՀՏԴ 531(07)
ԳՄԴ 22.37 ց7
Կ 530

*Հրատարակության է երաշխավորել
ԵՊՀ ֆիզիկայի ֆակուլտետի գիտխորհուրդը*

Ուսումնամեթոդական աշխատանքների մատենաշար
պրոֆ. Ա. Ա. Կիրակոսյանի ընդհանուր խմբագրությամբ

Գրախոսներ՝ ֆիզիկամաթեմատիկական գիտությունների դոկտոր,
պրոֆեսոր Կ. Գ. Թրունի
ֆիզիկամաթեմատիկական գիտությունների դոկտոր,
պրոֆեսոր Դ. Հ. Բաղայան

Ա. Ա. Կիրակոսյան, Ա. Լ. Վարդանյան, Ա. Լ. Ասատրյան

Կ 530 Պինդ մարմնի ֆիզիկայի խնդիրներ /Ա. Ա. Կիրակոսյան, Ա. Լ. Վարդանյան, Ա. Լ. Ասատրյան/: -Եր., ԵՊՀ հրատ., 2015, **Մաս I** – 154 էջ:

Ձեռնարկում ներկայացված են պինդ մարմնի ֆիզիկայի չորս բաժինների (Բյուրեղագրություն և բյուրեղային կառուցվածքներ, Կապերի տեսակները բյուրեղներում, Բյուրեղային ցանցի դինամիկան, Բյուրեղային ցանցի ջերմային հատկությունները) վերաբերյալ խնդիրներ:

Ձեռնարկը նախատեսված է ԵՊՀ ֆիզիկայի և ռադիոֆիզիկայի ֆակուլտետների ուսանողների, մագիստրոսների և ասպիրանտների համար: Այն կարող են օգտագործել նաև էլեկտրոնիկայի, միկրո- և նանոէլեկտրոնիկայի, ռադիոֆիզիկայի, նյութաբանության և այլ բնագավառներում մասնագիտացող ճարտարագետները և գիտաշխատողները:

ՀՏԴ 531(07)
ԳՄԴ 22.37 ց7

ISBN 978-5-8084-2003-8

© ԵՊՀ հրատ., 2015
© Հեղ. խումբ., 2015

ԲՈՎԱՆԴԱԿՈՒԹՅՈՒՆ

Նախաբան.....	4	
		Խնդիրներ Լուծումներ
Գլուխ I. Բյուրեղագրություն և բյուրեղային Կառուցվածքներ	5	27
Գլուխ II. Կապերի տեսակները բյուրեղներում	15	107
Գլուխ III. Բյուրեղային ցանցի դինամիկան.....	18	116
Գլուխ IV. Բյուրեղային ցանցի ջերմային Հատկությունները.....	21	129
Հավելված. Ֆիզիկական հաստատումների աղյուսակ.....		152
Գրականություն		153

Նախաբան

Համալսարանների և տեխնիկական բուհերի ֆիզիկայի ֆակուլտետների ուսումնական ծրագրերում, որպես կանոն, ընդգրկված է «Պինդ մարմնի ֆիզիկա» դասընթացը: Այսօր էլեկտրոնիկայի, ռադիոֆիզիկայի, միկրո- և նանոէլեկտրոնիկայի, նյութաբանության և այլ մասնագիտական դասընթացներում հաճախ ներառվում են պինդ մարմնի ֆիզիկայի առանձին բաժիններ, որոնք անհրաժեշտ են ժամանակակից տեխնոլոգիաների և տեխնիկայի հիմունքներին ծանոթանալու համար:

Պինդ մարմնի ֆիզիկայի դասընթացում շարադրված նյութը հաջողությամբ յուրացնելը պայմանավորված է նաև ինքնուրույն գործնական աշխատանքով, որի լավագույն ձևը խնդիրների լուծումն է: Սույն խնդրագիրքը կօգնի բակալավրներին, մագիստրոսներին, ասպիրանտներին, ինչպես նաև դասընթացի տարբեր բաժիններն ինքնուրույն ուսումնասիրող ճարտարագետներին և այլ մասնագետների՝ յուրացնելու անհրաժեշտ գիտելիքներ՝ մասնագիտական գրականության հետ ծանոթանալու և դրանք կոնկրետ կիրառելու գործում:

Խնդրագրքում հավաքվել և համակարգվել են պինդ մարմնի ֆիզիկայի տարբեր դասագրքերում, մենագրություններում և խնդրագրքերում հանդիպող մի շարք խնդիրներ, որոնց լուծումներն ուղեկցվել են մանրամասն բացատրություններով:

Ընդգրկված խնդիրները վերաբերում են պինդ մարմնի ֆիզիկայի դասընթացի հետևյալ բաժիններին՝ բյուրեղագրություն և բյուրեղային կառուցվածքներ, կապերի տեսակները բյուրեղներում, բյուրեղային ցանցի դիմամիկան, բյուրեղային ցանցի ջերմային հատկությունները:

Խնդրագրքում, անկասկած, կլինեն տարաբնույթ թերություններ, ուստի հեղինակները շնորհակալությամբ կընդունեն ինչպես խնդիրների ընտրության, այնպես էլ դրանց լուծումների և բացատրությունների բարելավման վերաբերյալ բոլոր դիտողությունները և առաջարկությունները:

Երախտապարտ ենք մեր գործընկերներին՝ Ա. Մանասեյանին, Վ. Մուղնեցյանին, Մ. Երանոսյանին, Մ. Բարսեղյանին՝ աշխատանքի ընթացքում ցուցաբերած օգնության և արժեքավոր խորհուրդների համար:

Հեղինակներ

Խ Ն Դ Ի Ր Ն Ե Ր

Գլուխ I. Բյուրեղագրություն և բյուրեղային կառուցվածքներ

1.1. Հաշվել պարզ, ծավալակենտրոն, նիստակենտրոն խորանարդային ցանցերի տարրական խորանարդներում և վեցանկյուն խիտ դարավածքով ցանցի տարրական բջջում ատոմների թիվը:

1.2. Հաշվել գնդերով լցված տարածության հարաբերական մասը պարզ, ծավալակենտրոն, նիստակենտրոն խորանարդային ցանցերում և արմաստի տիպի ցանցում:

1.3. Յույց տալ, որ վեցանկյուն խիտ դարավածքով ցանցի c և a հաստատունների հարաբերությունը հավասար է $(8/3)^{1/2}$:

1.4. Ծավալակենտրոն, նիստակենտրոն խորանարդային ցանցերի տարրական խորանարդների և վեցանկյուն խիտ դարավածքով ցանցի տարրական բջջի ծավալն արտահայտել ատոմներին փոխարինող հավասարամեծ գնդերի շառավիղով:

1.5. Հավասարամեծ գնդերի խիտ դարավածքի դեպքում հաշվել այն գնդի շառավիղը, որը կարելի է տեղակայել ութանիստային և քառանիստային խոռոչներում:

1.6. a և b ատոմները, որոնք կոշտ գնդեր են, համապատասխանաբար r_a և r_b շառավիղներով, կազմում են բյուրեղ, որն ունի ցեզիումի քլորիդի կառուցվածք: Ապացուցել, որ խորանարդի կենտրոնով անցնող տարածական անկյունագծի վրա տեղադրված ատոմները չեն կարող հպվել միմյանց, եթե r_a/r_b կամ r_b/r_a հարաբերությունը մեծ է 1,37 -ից:

1.7. a և b ատոմները, որոնք կոշտ գնդեր են, համապատասխանաբար r_a և r_b շառավիղներով, կազմում են նատրիումի քլորիդի կառուցվածքով բյու-

րել: Ապացուցել, որ խորանարդի նիստի անկյունագծի վրա տեղադրված ատոմները չեն կարող հավել միմյանց, եթե $r_a/r_b \geq 2,44$:

1.8. ա. Ապացուցել, որ Բրավեի կամայական երկչափ ցանցի Վիգներ-Չեյտցի բջիջը վեցանկյուն կամ ուղղանկյուն է:

բ. Համոզվել, որ վեցանկյուն երկչափ ցանցի Վիգներ-Չեյտցի բջջի մակերեսը հավասար է տարրական բջջի մակերեսին:

1.9. Ապացուցել, որ իդեալական տարածական ցանցը կարող է ունենալ միայն 2-րդ, 3-րդ, 4-րդ և 6-րդ կարգի համաչափության առանցքներ:

1.10. Հաշվել եռաթեք ցանցի ($a_1 \neq a_2 \neq a_3, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$) տարրական բջջի ծավալը: Որոշել միաթեք, վեցանկյուն և եռանկյուն ցանցերի տարրական բջիջների ծավալները:

1.11. Մագնեզիումի բյուրեղային ցանցը խիտ դարսվածքով վեցանկյուն կառուցվածք է, որի պարամետրերն են՝ $a = 3,2 \text{ \AA}$, $c = 5,2 \text{ \AA}$: Որոշել տարրական բջիջների թիվը 1 սմ^3 -ում:

1.12. Նատրիումի քլորիդի կառուցվածքով բյուրեղը կազմված է m_1 և m_2 զանգվածներով իոններից և ունի ρ խտություն: Որոշել դրա ցանցի հաստատունը: Գնահատել այն նատրիումի քլորիդի համար ($\mu_1 = 23 \text{ գ/մոլ}$, $\mu_2 = 35,5 \text{ գ/մոլ}$, $\rho = 2,18 \text{ գ/սմ}^3$):

1.13. Երկաթի բյուրեղն ունի խորանարդային ցանց, որի հաստատունը՝ $a = 2,87 \text{ \AA}$: Որոշել դրա տարրական բջջում ատոմների թիվը: Երկաթի խտությունը $7,8 \text{ գ/սմ}^3$ է, ատոմային զանգվածը՝ $55,84 \text{ գ/մոլ}$:

1.14. Որոշել μ մոլային զանգվածով և ρ խտությամբ նյութի միավոր ծավալում մասնիկների թիվը: Գնահատել այն ալյումինի ($\rho = 2,7 \text{ գ/սմ}^3$, $\mu = 27 \text{ գ/մոլ}$), գերմանիումի ($\rho = 5,36 \text{ գ/սմ}^3$, $\mu = 73 \text{ գ/մոլ}$) և նատրիումի քլորիդի ($\rho = 2,18 \text{ գ/սմ}^3$, $\mu_{Na} = 23 \text{ գ/մոլ}$, $\mu_{Cl} = 35,5 \text{ գ/մոլ}$) համար:

1.15. Հակադարձ ցանցի հիմնական վեկտորներն արտահայտել ուղիղ ցանցի հիմնական վեկտորների միջոցով:

1.16. Հակադարձ ցանցի վեկտորների՝ միմյանց հետ կազմած անկյուններն արտահայտել ուղիղ ցանցի վեկտորների՝ միմյանց հետ կազմած անկյունների միջոցով:

1.17. Ապացուցել, որ ուղիղ և հակադարձ ցանցերի տարրական բջիջների ծավալների արտադրյալը՝ $v_0 \Omega_0 = (2\pi)^3$:

1.18. Ապացուցել, որ պարզ խորանարդային ցանցի հակադարձ ցանցը պարզ խորանարդային ցանց է:

1.19. Ապացուցել, որ վեցանկյուն ցանցի հակադարձ ցանցը վեցանկյուն ցանց է:

1.20. Ապացուցել, որ ծավալակենտրոն խորանարդային ցանցի հակադարձ ցանցը նիստակենտրոն խորանարդային ցանց է:

1.21. Ապացուցել, որ նիստակենտրոն խորանարդային ցանցի հակադարձ ցանցը ծավալակենտրոն խորանարդային ցանց է:

1.22. Որոշել եռանկյուն համակարգին պատկանող կալցիտի (CaCO_3) բյուրեղի հակադարձ ցանցի վեկտորները, եթե $a_1 = 6,36 \text{ \AA}$, $\alpha = 46^\circ 6'$:

1.23. Մագնեզիումի բյուրեղային վեցանկյուն ցանցի պարամետրերն են՝ $a_1 = a_2 = 3,2 \text{ \AA}$, $a_3 = 5,2 \text{ \AA}$: Որոշել հակադարձ ցանցի վեկտորները:

1.24. Ապացուցել հետևյալ առնչությունը.

$$J_{gg'} = \int_0^{L_x} e^{i(g-g')x} dx = L_x \delta_{gg'}, \quad (1)$$

որտեղ $L_x = N_x a$ -ն միաչափ ցանցի երկարությունն է, N_x -ը՝ տարրական բջիջների թիվը, a -ն՝ ցանցի հաստատունը, $g = m g_1$ -ը՝ ցանցի հակադարձ երկարությունների բազմությունը, $g_1 = 2\pi / a$ -ն՝ հակադարձ ցանցի հաստատունը, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm \dots$:

1.25. Ապացուցել, որ եթե $f(\mathbf{r})$ ֆունկցիան պարբերական է ըստ ցանցի պարբերության, ապա

$$\int d\mathbf{r} f(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) = 0,$$

եթե \mathbf{k} -ն հակադարձ ցանցի վեկտոր չէ:

1.26. Ապացուցել հետևյալ առնչությունները.

$$\sum_{\mathbf{g}} \exp(i\mathbf{g}\mathbf{r}) = v_0 \sum_{\mathbf{l}} \delta(\mathbf{r}-\mathbf{l}),$$

$$\sum_{\mathbf{l}} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{l}) = \Omega_0 \sum_{\mathbf{g}} \delta(\mathbf{q}-\mathbf{g}),$$

որտեղ \mathbf{l} -ը (\mathbf{g} -ն) ուղիղ (հակադարձ) ցանցի տեղափոխության վեկտոր է, v_0 -ն (Ω_0 -ն) ուղիղ (հակադարձ) ցանցի տարրական բջջի ծավալը:

1.27. Ապացուցել, որ $1/r$ մեծությունը կարելի է ներկայացնել Ֆուրիեի շարքի տեսքով՝

$$\frac{1}{r} = \frac{4\pi}{V} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{q^2} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}),$$

որտեղ V -ն բյուրեղի ծավալն է, $r = |\mathbf{r}|$:

1.28. Ապացուցել, որ անկախ բյուրեղային ցանցի համաչափությունից,

$$\int_V \exp[i\mathbf{r}(\mathbf{g}-\mathbf{g}')] d\mathbf{r} = V \delta_{\mathbf{g}\mathbf{g}'}, \quad (1)$$

որտեղ V -ն բյուրեղի ծավալն է, \mathbf{g} -ն և \mathbf{g}' -ը հակադարձ ցանցի կամայական վեկտորներ են:

1.29. Որոշել այն հատվածների երկարությունները (արտահայտված ցանցի հիմնական վեկտորների երկարություններով), որոնք հատվում են ցանցի առանցքներից (125) հարթությամբ:

1.30. Որոշել բյուրեղային ցանցի 9, 10, 30 հանգուցային կետերով անցնող հարթության միլերյան ցուցիչները, եթե ցանցի պարամետրերն են՝ $a_1 = 3, a_2 = 5, a_3 = 6$:

1.31. Ապացուցել, որ ցուցիչների Միլեր-Բրավեի hkl համակարգում $h + k + i = 0$:

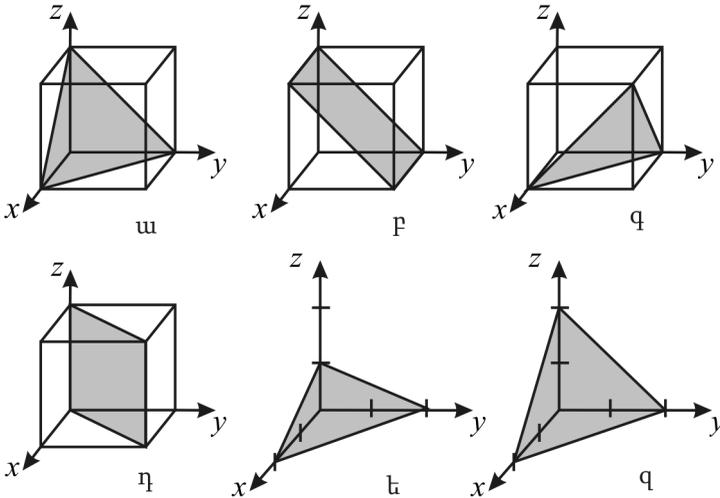
1.32. Գրել պարզ խորանարդային ցանցի $[[100]]$ և $[[001]]$ հանգույցներով անցնող ուղղի ցուցիչները:

1.33. Գրել պարզ խորանարդային ցանցում $[[200]]$, $[[010]]$ և $[[001]]$ հանգույցները պարունակող հարթության միլերյան ցուցիչները:

1.34. Ապացուցել, որ հարթության հավասարման մեջ x , y և z փոփոխականների ամենափոքր ամբողջ գործակիցները միլերյան ցուցիչներն են:

1.35. Գրել $[[111]]$, $[[1\bar{1}2]]$, $[[\bar{1}01]]$ հանգույցները պարունակող հարթության միլերյան ցուցիչները:

1.36. Գրել պարզ խորանարդային ցանցի նկարներում պատկերված հարթությունների միլերյան ցուցիչները:



1.37. Քանի՞ ատոմ է տեղավորվում կապարի նիստակենտրոն ցանցի (100) և (111) հարթությունների 1 մմ^2 մակերեսի վրա: Միջատոմային հեռավորությունը՝ $a = 3,5 \text{ \AA}$:

1.38. Ապացուցել, որ խորանարդային համակարգում կամայական $[hkl]$ ուղղություն ուղղահայաց է միլերյան նույն՝ (hkl) ցուցիչներով նիստին:

1.39. Ապացուցել, որ խորանարդային համակարգում $(h_1k_1l_1)$ և $(h_2k_2l_2)$ միլերյան ցուցիչներով նիստերի նորմալների միջև անկյունը որոշվում է

$$\cos \varphi = \frac{h_1h_2 + k_1k_2 + l_1l_2}{\sqrt{(h_1^2 + k_1^2 + l_1^2)(h_2^2 + k_2^2 + l_2^2)}}$$

բանաձևով:

1.40. Ապացուցել, որ ավաստի ցանցի հանգույցը մոտակա չորս հարևաններին միացնող կապերից (զծերից) կամայական երկուսի միջև անկյունը՝

$$\varphi = \arccos\left(-\frac{1}{3}\right) = 109^\circ 28' :$$

1.41. Որոշել խորանարդային բյուրեղի (100) և (110) հարթությունների կազմած անկյունը:

1.42. Որոշել կամայական բյուրեղային համակարգում $(h_1k_1l_1)$ և $(h_2k_2l_2)$ հարթությունների միջև անկյունը:

1.43. Որոշել, ա. ուղղանկյուն ցանցում (201) և (310) հարթությունների միջև անկյունը, բ. խորանարդային ցանցում (100) և (010) նիստերի միջև անկյունը:

1.44. Որոշել քառանկյուն համակարգին պատկանող գալիումի (Ga) տարածական ցանցում (111) և (102) հարթությունների կազմած անկյունը.

$$a_1 = a_2 = 4,5 \text{ \AA}, \quad a_3 = 7,64 \text{ \AA}:$$

1.45. Յույց տալ, որ հակադարձ ցանցի \mathbf{g}_{hkl} վեկտորն ուղղահայաց է (hkl) հարթությանը:

1.46. Յույց տալ, որ հակադարձ ցանցի $\mathbf{g}_{hkl}/2\pi$ վեկտորի երկարության հակադարձ մեծությունը հավասար է (hkl) հարթությունների ընտանիքի

միջհարթությունային հեռավորությանը: Որոշել պարզ խորանարդային ցանցի (hkl) հարթությունների ընտանիքի միջհարթությունային հեռավորությունը:

1.47. Որոշել եռաթեք համակարգին պատկանող ցանցում (hkl) ընտանիքի հարթությունների միջև հեռավորությունը:

1.48. Որոշել կիանիտի ($Al_2O_3 \cdot SiO_2$) (102) ընտանիքի հարթությունների միջև հեռավորությունը: Կիանիտի պարամետրերն են՝ $a_1 = 7,09 \text{ \AA}$, $a_2 = 7,72 \text{ \AA}$, $a_3 = 5,56 \text{ \AA}$, $\alpha = 90^\circ 55'$, $\beta = 101^\circ 2'$, $\gamma = 105^\circ 44'$:

1.49. Որոշել խորանարդային, քառանկյուն, ուղղանկյուն և վեցանկյուն համակարգերում d_{hkl} միջհարթությունային հեռավորությունը:

1.50. Որոշել եռանկյուն համակարգում ($h_1k_1l_1$) և ($h_2k_2l_2$) հարթությունների ուղղահայացության պայմանը:

1.51. Որոշել $[uvw]$ ուղղությամբ կոորդինատների սկզբնակետից մինչև առաջին ատոմ հեռավորությունը եռաթեք համակարգում:

1.52. Միաթեք, ուղղանկյուն, քառանկյուն և վեցանկյուն համակարգերի բյուրեղների համար գրել կոորդինատների սկզբնակետից մինչև առաջին ատոմ հեռավորության արտահայտությունը:

1.53. Որոշել $[uvw]$ ուղղի և (hkl) հարթության կազմած անկյունը: Օգտվելով ստացված բանաձևից՝ որոշել միաթեք համակարգում կոորդինատների սկզբնակետով անցնող $[100]$ ուղղության և (102) հարթության կազմած անկյունը:

1.54. Օգտվելով խնդիր 1.53-ում ստացված արդյունքից՝ ապացուցել, որ խորանարդային համակարգում կամայական $[hkl]$ ուղղություն ուղղահայաց է (hkl) հարթությանը:

1.55. Հաշվել $[101]$ և $[012]$ ուղղությունների միջև անկյունը պղնձարջասպի ուղղանկյուն ցանցում ($a_1 = 4,88 \text{ \AA}$, $a_2 = 6,66 \text{ \AA}$, $a_3 = 8,32 \text{ \AA}$):

1.56. Որոշել [102] և [210] ուղղությունների միջև անկյունը միաթեք համակարգին պատկանող տրիգլիցինսուլֆատի $((\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH})_3 \cdot \text{H}_2\text{SO}_4)$ բյուրեղում, որի տարրական բջջի պարամետրերն են՝ $a_1 = 9,42 \text{ \AA}$, $a_2 = 12,64 \text{ \AA}$, $a_3 = 5,73 \text{ \AA}$ և $\beta = 110^\circ 23'$:

1.57. Որոշել խորանարդի տարածական անկյունագծի և կողի կազմած անկյունը:

1.58. Ինչպիսի՞ Էներգիաներով պետք է օժտված լինեն բյուրեղային կառուցվածքներն ուսումնասիրելու համար նախատեսված մասնիկների փնջերը:

1.59. Արտածել Բրեգի օրենքը:

1.60. Արտածել Լաուեի պայմանները և դրանք ներկայացնել հակադարձ ցանցի վեկտորների միջոցով:

1.61. Որոշել լիթիումի յոդիտի (**LiI**) ցանցի հաստատունը, եթե հայտնի է, որ $2,1 \text{ \AA}$ ալիքի երկարությամբ ճառագայթման առաջին կարգի բրեգյան անդրադարձումն այդ բյուրեղի նիստից տեղի է ունենում $10^\circ 5'$ սահքի անկյան դեպքում:

1.62. (100) ընտանիքի հարևան հարթությունների միջև հեռավորությունը նատրիումի քլորիդում (**NaCl**) $2,82 \text{ \AA}$ է: Ռենտգենյան ճառագայթների առաջին կարգի բրեգյան անդրադարձում բյուրեղի մակերևույթից դիտվում է $8^\circ 55'$ սահքի անկյան դեպքում: Որոշել ռենտգենյան ճառագայթման ալիքի երկարությունը և բրեգյան երկրորդ կարգի անդրադարձմանը համապատասխանող անկյունը:

1.63. Պղնձե անոդով ռենտգենյան խողովակի ճառագայթման ալիքի երկարությունը $1,537 \text{ \AA}$ է: Ալյումինի բյուրեղի (111) հարթությունների ընտանիքից անդրադառնալիս դիֆրակտային մաքսիմում դիտվում է $19^\circ 12'$ բրեգյան անկյան տակ: Ալյումինն ունի նիստակենտրոն խորանարդային ցանց, նրա խտությունը $2,699 \text{ գ/սմ}^3$ է, ատոմային զանգվածը՝ $26,98 \text{ գ/մոլ}$: Այս տվյալներով հաշվել Ավոգադրոյի հաստատունը:

1.64. Յույց տալ, որ պարզ խորանարդային ցանցում Բրեգի բանաձևը հետևում է Լաուեի պայմաններից:

1.65. Տեսականորեն հաշվարկել [101] և [110] ուղղություններին համապատասխանող անկյունները $a_1 = 11,878 \text{ \AA}$, $a_2 = 14,246 \text{ \AA}$ և $a_3 = 6,218 \text{ \AA}$ հաստատուններով ուղղանկյուն (ռոմբական) ցանցում, որը ճառագայթահարվում է CuK_α ճառագայթմամբ ($\lambda_{\text{K}_\alpha} = 1,84 \text{ \AA}$):

1.66. Առավելագույնը քանի՞ գիծ կարող է ստացվել $\lambda = 1,789 \text{ \AA}$ ալիքի երկարությամբ ճառագայթմամբ ճառագայթահարվող պարզ խորանարդային ցանցից, որի հաստատունը՝ $a = 2,86 \text{ \AA}$ է:

1.67. Յույց տալ, որ պարզ խորանարդային ցանցից տրված ուղղությամբ ընկնող ճառագայթման ինտերֆերենցային մաքսիմումներ կստացվեն միայն որոշակի երկարությամբ ալիքների համար:

1.68. Երկրաչափորեն մեկնաբանել Բրեգի և Լաուեի պայմանները:

1.69. Ռենտգենյան ճառագայթման համար դիֆրակտային ցանց ծառայող մետաղի 1 սմ-ը պարունակում է 2000 գծիկ: Այս ցանցի վրա $2,5 \text{ \AA}$ ալիքի երկարությամբ ռենտգենյան ճառագայթման անկման սահքի անկյունը՝ $\theta_0 \approx 1^\circ$: Ի՞նչ անկյուններ են համապատասխանում դիտվող առաջին կարգի երկու մաքսիմումներին:

1.70. Արծաթի դեբայագիր ստանալիս 18°C ջերմաստիճանում սպեկտրային որոշակի գծին համապատասխանում է $80^\circ 9'$ անկյունը, իսկ 630°C -ում՝ $76^\circ 54'$ անկյունը: Հաշվել արծաթի գծային ընդարձակման ջերմաստիճանային գործակիցը:

1.71. Յույց տալ, որ գծային ընդարձակման ջերմաստիճանային գործակիցը ռենտգենյան եղանակով որոշելիս ճշգրիտ արդյունք կարելի է ստանալ մեծ բրեգյան անկյունների դեպքում չափումներ կատարելիս:

1.72. β -անագի քառանկյուն ցանցի պարամետրերը ճշգրիտ որոշելու համար CuK_α ($\lambda = 1,5405 \text{ \AA}$) ճառագայթումն օգտագործելիս [503] և [271]

գծերի համար ստացվել են հետևյալ անկյունները՝ $\theta_{(503)} = 79^\circ 1'$, $\theta_{(271)} = 82^\circ 33' 50''$: Որոշել ցանցի պարամետրերը:

1.73. Որոշել ծավալակենտրոն խորանարդային ցանցի երկրաչափական կառուցվածքային գործոնը:

1.74. Որոշել նիստակենտրոն խորանարդային ցանցի երկրաչափական կառուցվածքային գործոնը և պարզել, թե ցանցի ռենտգենագրի վրա կստացվեն արդյոք (200) և (101) հարթություններից անդրադարձումների համապատասխանող գծերը:

1.75. Օգտագործելով ռենտգենյան (էլեկտրամագնիսական) ալիքի ցրման լայնույթի

$$A_{\Delta\mathbf{k}} = \int d\mathbf{r} n(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{r}\Delta\mathbf{k}}$$

արտահայտությունը, որտեղ $n(\mathbf{r})$ -ը բյուրեղում էլեկտրոնների լրիվ խտությունն է, $\Delta\mathbf{k} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ -ն՝ ցրման վեկտորը, ստանալ բազիսի կառուցվածքային գործոնի

$$\tilde{S}_{\mathbf{G}} = \sum_{j=1}^s f_j(\mathbf{G}) \exp(-i\boldsymbol{\rho}_j \mathbf{G})$$

արտահայտությունը:

1.76. Որոշել R շառավղով գնդում համասեռ բաշխված Z էլեկտրոնների ատոմային ցրման գործոնը:

1.77. Հետազոտել դիֆրակտային մաքսիմումի լայնությունը որոշող

$$A(\Delta\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{l}} e^{-i\mathbf{l}\Delta\mathbf{k}}$$

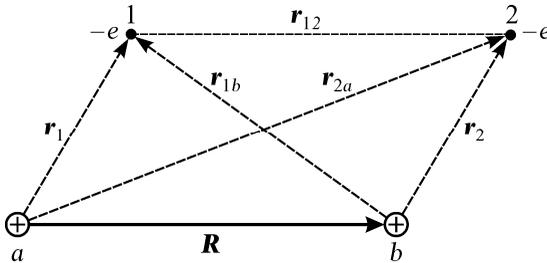
արտահայտության կախումը $\Delta\mathbf{k}$ մեծությունից:

Գլուխ II. Կապերի տեսակները բյուրեղներում

2.1. Յույց տալ, որ իրարից R հեռավորությամբ ջրածնի a և b ատոմների կուլոնյան փոխազդեցության էներգիան կարելի է ներկայացնել

$$\hat{H}' = \frac{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2}{R^3} - \frac{3(\mathbf{p}_1 \mathbf{R})(\mathbf{p}_2 \mathbf{R})}{R^5}$$

արտահայտությամբ, որտեղ $\mathbf{p}_1 = -e\mathbf{r}_1$ և $\mathbf{p}_2 = -e\mathbf{r}_2$ վեկտորները a և b ատոմների երկբևեռային մոմենտներն են, $r_1, r_2 \ll R$ (նկ. 2.1):



Նկ. 2.1

2.2. Յույց տալ, որ միմյանցից r հեռավորությամբ ատոմների փոխազդեցության պոտենցիալ էներգիայի

$$U(r) = -\frac{\alpha}{r^n} + \frac{\beta}{r^m}$$

արտահայտության մեջ, որտեղ α -ն և β -ն դրական հաստատուններ են, m -ը պետք է մեծ լինի n -ից:

2.3. Երկու մասնիկների փոխազդեցության պոտենցիալ էներգիան մասնիկների միջև r հեռավորությունից կախված է

$$U(r) = -\frac{\alpha}{r} + \frac{\beta}{r^8}$$

օրենքով, որտեղ α -ն և β -ն դրական հաստատուններ են:

Յույց տալ, որ կապված վիճակում՝ ա. $r = r_0 = (8\beta/\alpha)^{1/7}$, բ. ձգողության էներգիայի մոդուլն 8 անգամ մեծ է վանողության էներգիայից, գ. միացության լրիվ պոտենցիալ էներգիան՝ $U_0 = -7\alpha/8r_0$, դ. մասնիկների միջև գործող ուժն առավելագույնն է, երբ $r = \sqrt[7]{4,5}r_0$:

2.4. Միմյանցից r հեռավորությամբ ատոմների փոխազդեցության պոտենցիալ էներգիան տրվում է

$$U(r) = -\frac{\alpha}{r^n} + \frac{\beta}{r^m}$$

արտահայտությամբ: Միջատոմային հեռավորությունը 3 \AA է, իսկ մոլեկուլի դիսոցման էներգիան՝ 4 էՎ:

Հաշվել α և β հաստատունները, եթե $n = 2$, $m = 10$: Որոշել միջատոմային հեռավորությունը 10%-ով փոքրացնելիս և նույնքան մեծացնելիս առաջացող ուժերի մոդուլների հարաբերությունը:

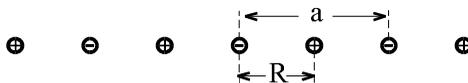
2.5. Նատրիումի քլորիդի կառուցվածքում որևէ իոնի փոխազդեցության էներգիան մնացած իոնների հետ տրվում է Գրյունայզեն-Սիի

$$U(r) = \frac{\lambda B_n}{r^n} - \frac{Ae^2}{r}$$

բանաձևով, որտեղ λ -ն, n -ը և A -ն փորձառական հաստատուններ են, r -ը ցանցի հաստատունն է:

Ենթադրելով, որ $n = 10$, հաշվել B_n հաստատունը:

2.6. Հաշվել միաչափ իոնային ցանցի (նկ. 2.2) Մադելունգի հաստատունի արժեքը:



Նկ. 2.2

2.7. Հաշվել Գրյունայզեն-Միի

$$U(r) = \frac{\lambda B_n}{r^n} - \frac{Ae^2}{r}$$

բանաձևում λ -ի արժեքը **NaCl**-ի բյուրեղի համար, համարելով $n = 10$, $B_{10} = 6,43$, $r = 2,81 \text{ \AA}$, $A = 1,75$:

2.8. Հաշվել 1 մոլ **NaCl**-ի բյուրեղի էներգիան, եթե վանդերվալսյան ուժերի պոտենցիալը բնութագրող հաստատունը՝ $n = 9,4$, ցանցի հաստատունը՝ $r = 2,81 \text{ \AA}$, իսկ Մադելունգի հաստատունը՝ $A = 1,75$:

2.9. Գրյունայզեն-Միի բանաձևում ընդունելով $n = 10$ և համարելով, որ իոնային բյուրեղի դիէլեկտրական հաստատունը՝ $\epsilon = 81$, հաշվել ցանցի հաստատունը: Պարզել, թե ϵ -ի ներածման արդյունքում քանի՞ անգամ է փոխվում ցանցի էներգիան, եթե էկրանավորման անտեսմամբ ցանցի հաստատունը՝ $r_0 = 2,81 \text{ \AA}$:

2.10. Ցույց տալ, որ $T = 0$ Կ ջերմաստիճանում խորանարդային բյուրեղային ցանցի համակողմանի սեղմման մոդուլը՝

$$B_0 = \frac{r_0^2}{9V} \left(\frac{d^2U}{dr^2} \right)_{r=r_0},$$

որտեղ r_0 -ն բյուրեղային ցանցի հաստատունն է, V -ն՝ բյուրեղի ծավալը:

2.11. **NaCl**-ի բյուրեղային ցանցի էներգիայի արտահայտության մեջ վանդոլական պոտենցիալը փոխարինել $C \exp(-r/\rho)$ պոտենցիալով և հաշվել ρ բնութագրական երկարությունը, եթե սեղմման գործակիցը $T = 0$ Կ ջերմաստիճանում՝ $\chi = 3,3 \cdot 10^{-12} \text{ Պա}^{-1}$, ցանցի հաստատունը՝ $r_0 = 2,81 \text{ \AA}$, Մադելունգի հաստատունը՝ $A = 1,75$:

Գլուխ III. Բյուրեղային ցանցի դինամիկան

3.1. Չօգտվելով ամենամոտ հարևանների մոտավորությունից, հաշվել միատոմ գծային շղթայի դինամիկական մատրիցը և որոշել դիսպերսային առնչությունը, համարելով, որ ներդաշնակ մոտավորությամբ փոխազդեցության պոտենցիալ էներգիան՝

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_l \sum_{m>0} \beta_m (u_l - u_{l+m})^2,$$

որտեղ β_m -ն m -րդ ատոմի ուժային հաստատունն է:

3.2. Միատոմ գծային շղթայի դիսպերսային առնչությունն ունի հետևյալ տեսքը՝

$$\omega^2 = \frac{2}{M} \sum_{m>0} \beta_m [1 - \cos(mqa)], \quad (1)$$

որտեղ M -ն ատոմի զանգվածն է, a -ն՝ միջատոմային հեռավորությունը, β_m -ը՝ m -րդ ատոմի ուժային հաստատունը (կոշտության գործակիցը):

Յույց տալ, որ

ա. եթե $\sum_{m>0} m^2 \beta_m$ շարքը զուգամիտում է, ապա երկարալիքային սահմանում տեղի ունի հետևյալ առնչությունը՝

$$\omega^2 = \frac{a^2 q^2}{M} \sum_{m>0} m^2 \beta_m,$$

բ. եթե $\beta_m \sim m^{-p}$ ($1 < p < 3$) և, հետևաբար, շարքը տարամիտում է, ապա երկարալիքային սահմանում

$$\omega \sim q^{(p-1)/2};$$

գ. մասնավոր դեպքում, եթե $p = 3$, ճիշտ է

$$\omega \sim q \sqrt{|\ln aq|}$$

առնչությունը:

3.3. Յույց տալ, որ երկարալիքային սահմանում՝ $\lambda \gg a$, որտեղ a -ն ցանցի հաստատունն է, պարզ գծային շղթայի l հանգույցի շուրջը մասնիկի

$$M \frac{d^2 u_l}{dt^2} = \sum_m \beta_m (u_{l+m} - u_l)$$

շարժման հավասարումը հանգում է միաչափ առաձգական հոծ միջավայրում ալիքային հավասարմանը՝

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = v_s^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$

որտեղ v_s -ը միջավայրում ձայնի տարածման արագությունն է:

3.4. Պարզ գծային ցանցում ամենամոտ հարևանների մոտավորությամբ նորմալ մոդերի դիսպերսային օրենքն ունի

$$\omega(q) = \omega_m \left| \sin \left(\frac{qa}{2} \right) \right|$$

տեսքը, որտեղ ω_m -ն առավելագույն հաճախությունն է:

Յույց տալ, որ ցանցի նորմալ մոդերի խտությունը տրվում է

$$g(\omega) = \frac{2}{\pi a} (\omega_m^2 - \omega^2)^{-1/2}$$

արտահայտությամբ: $\omega = \omega_m$ դեպքում $g(\omega)$ -ի եզակիությունը կոչվում է Վան Հոփի եզակիություն:

3.5. Եռաչափ բյուրեղում Վան Հոփի եզակիությունը (տես խնդիր 3.4) պայմանավորված է ոչ թե նորմալ մոդերի խտության, այլ դրա ածանցյալների տարամիտմամբ:

Յույց տալ, որ $\omega(\mathbf{q})$ -ի մաքսիմումի շրջակայքում նորմալ մոդերի խտության ֆունկցիան ունի $|\omega_c - \omega|^{1/2}$ -ին համեմատական գումարելի:

3.6. Դիտարկել միատոմ եռաչափ բյուրեղ, որի ցանցի տատանումների դիսպերսային առնչություններն ունեն հետևյալ տեսքը՝

$$\omega_i = 2 \left(\frac{\beta_i}{M} \right)^{1/2} \sin \left(\frac{qa}{2} \right) = \omega_{mi} \sin \left(\frac{qa}{2} \right):$$

ա. Յույց տալ, որ վիճակների լրիվ խտության ֆունկցիայի կախումը հաճախությունից տրվում է հետևյալ բանաձևով՝

$$g(\omega) = \frac{2}{\pi^2 a^2} \sum_{i=1}^3 \frac{1}{v_{si}} \left(\arcsin \frac{\omega}{\omega_{mi}} \right)^2 \left(1 - \frac{\omega^2}{\omega_{mi}^2} \right)^{-1/2} :$$

բ. Յույց տալ, որ վիճակների խտության ֆունկցիան ցածրահաճախային տիրույթում ունի հետևյալ տեսքը՝

$$g(\omega) = \frac{\omega^2}{2\pi^2} \sum_{i=1}^3 \left(\frac{M}{a^2 \beta_i} \right)^{3/2} :$$

3.7. Յույց տալ, որ ներդաշնակ մոտավորության շրջանակներում d չափայնությամբ ներդաշնակ բյուրեղում նորմալ մոդերի խտությունը ցածր-հաճախային տիրույթում համեմատական է ω^{d-1} -ին:

3.8. Ապացուցել, որ եռաչափ ցանցի տատանումների $\|D_{ss'}^{kk'}(\mathbf{q})\|$ դինամիկական մատրիցն էրմիտական է:

3.9. Յույց տալ, որ պարզ ցանցում որպես ատոմների տատանումների $A^k(\mathbf{q})$ լայնությունը կարելի է ընտրել իրական մեծություններ:

3.10. Գծային անվերջ շղթան, որի կոշտության գործակիցը β է, բաղկացած է հավասարահեռ, M_0 զանգվածով ատոմներից: Ենթադրելով, որ մի ատոմի զանգվածը տարբերվում է M_0 -ից՝ $M = M_0(1 - \varepsilon)$, որտեղ $|\varepsilon| < 1$, ուսումնասիրել M զանգվածով ատոմի (արատի) ազդեցությունը ձայնային տատանումների սպեկտրի վրա: Զննարկել տեղայնացված տատանումների առաջացման պայմանները:

Գլուխ IV. Բյուրեղային ցանցի ջերմային հատկությունները

4.1. Հաշվել (և հիշել).

ա. T ջերմաստիճանը, որի դեպքում $k_B T = 1$ էՎ,

բ. $k_B T$ -ն սենյակային ջերմաստիճանում՝ արտահայտված էլեկտրոն-վոլտով,

գ. 1 էՎ էներգիաների տարբերությամբ քվանտային անցմանը համապատասխանող ֆոտոնի ալիքի երկարությունը:

4.2. Յույց տալ, որ համակարգի ներքին էներգիայի արտահայտությունը կարելի է ներկայացնել

$$U = k_B T^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial T}$$

բանաձևով, որտեղ Z -ը վիճակագրական ինտեգրալն է:

4.3. Հաշվել դասական միաչափ ներդաշնակ տատանակի միջին էներգիան ջերմային հավասարակշռության վիճակում

$$\langle E \rangle = k_B T^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial T}$$

բանաձևի օգնությամբ, որտեղ Z -ը վիճակագրական ինտեգրալն է:

4.4. Յույց տալ, որ դասական միաչափ ներդաշնակ տատանակի միջին էներգիան կարելի է ներկայացնել երկու գումարելիների գումարի տեսքով, որոնցից յուրաքանչյուրը $k_B T/2$ է: Ընդ որում, առաջին գումարելին համապատասխանում է միջին կինետիկական էներգիային, իսկ երկրորդը՝ միջին պոտենցիալ էներգիային:

4.5. Հաշվել քվանտային միաչափ ներդաշնակ տատանակի միջին էներգիան ջերմային հավասարակշռության վիճակում

$$\langle E \rangle = k_B T^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial T}$$

բանաձևի օգնությամբ, որտեղ Z -ը վիճակագրական գումարն է:

Յույց տալ, որ բարձր ջերմաստիճաններում այն համընկնում է դասական միաչափ ներդաշնակ տատանակի միջին էներգիայի հետ:

4.6. Կախված է արդյոք բյուրեղում տվյալ ջերմաստիճանում գրգռված որոշակի ω_i հաճախությամբ տատանումների միջին թիվը բյուրեղում ատոմների թվից:

4.7. Ինչպե՞ս է կախված բյուրեղային նմուշում տվյալ ջերմաստիճանում $\omega, \omega + d\omega$ միջակայքին պատկանող հաճախություններով տատանումների թիվը նմուշում ատոմների թվից:

4.8. Ինչպե՞ս է կախված բյուրեղային նմուշում տվյալ ջերմաստիճանում բոլոր հաճախություններով գրգռված մոդերի թիվը նմուշում ատոմների թվից:

4.9. Որոշել պարզ միաչափ բյուրեղում Դեբայի ω_D հաճախությունը, երբ ատոմները տատանվում են իրենց տեղակայման գծի երկայնքով: Ատոմների խտությունը՝ $n_a = 5 \cdot 10^9 \text{ մ}^{-3}$, ալիքների արագությունը բյուրեղում՝ $v = 3000 \text{ մ/վ}$: Որոշել տատանումների հաճախության միջին արժեքը:

4.10. Որոշել միատեսակ ատոմներից բաղկացած երկչափ բյուրեղի Դեբայի ω_D հաճախությունը: Ատոմները կարող են տատանվել իրենց տեղակայման հարթության մեջ: Ատոմների հավասարակշռության դիրքերը քառակուսային բյուրեղային բջիջների գազաթներում են: Ատոմների խտությունը՝ $n_a = 2,5 \cdot 10^{19} \text{ մ}^{-3}$, իսկ երկայնական և լայնական ալիքների արագությունները բյուրեղում հավասար են՝ $v_l = v_t = 3000 \text{ մ/վ}$: Որոշել նաև տատանումների հաճախության միջին արժեքը:

4.11. Որոշել ոսկու բյուրեղում սեփական տատանումների առավելագույն ω_{\max} հաճախությունն ըստ Դեբայի տեսության: Բնութագրական ջերմաստիճանը՝ $\theta_D = 180 \text{ Կ}$:

4.12. Որոշել Դեբայի $\theta_D = 300 \text{ Կ}$ ջերմաստիճանով բնութագրվող բյուրեղում գրգռված տատանումների E_m առավելագույն էներգիան: Ալիքի ի՞նչ երկարությամբ ֆոտոնը կունենա այդպիսի էներգիա:

4.13. Որոշել Այնշտայնի և Գեբայի բնութագրական ջերմաստիճանների θ_E/θ_D հարաբերությունը: Յուցում՝ օգտագործել զրոյական էներգիաների արտահայտությունները, հաշվարկված ըստ Այնշտայնի և Գեբայի տեսությունների:

4.14. Ի՞նչ առավելագույն էներգիա կարող է ունենալ $d = 0,3$ նմ պարբերությամբ միաչափ բյուրեղի երկայնքով տարածվող ալիքը: Ընդունել, որ ձայնի տարածման միջինացված արագությունը բյուրեղում՝ $v = 5$ կմ/վ:

4.15. Գնահատել ալիքի միջին իմպուլսը ցածր՝ $T \ll \theta_D$ ջերմաստիճաններում. θ_D -ն Գեբայի ջերմաստիճանն է:

4.16. Իմանալով Ավոգադրոյի N_A հաստատունին հավասար թվով ատոմներ պարունակող միաչափ բյուրեղի հաճախությունների բաշխման ֆունկցիան՝ $g(\omega) = N_A/\omega_D$, որոշել բյուրեղի ներքին էներգիան:

4.17. Իմանալով Ավոգադրոյի N_A հաստատունին հավասար թվով ատոմներ պարունակող երկչափ բյուրեղի հաճախությունների բաշխման ֆունկցիան՝ $g(\omega) = 4N_A\omega/\omega_D^2$, որոշել բյուրեղի ներքին էներգիան:

4.18. Օգտագործելով միաչափ ցանցի մոլային ներքին էներգիայի բանաձևը՝

$$U = RT \frac{T}{\theta_D} \int_0^{\theta_D/T} \frac{x dx}{e^x - 1},$$

արտածել ցանցի մոլային ջերմունակության արտահայտությունը:

4.19. Միաչափ բյուրեղի մոլային ջերմունակությունը (տես խնդիր 4.18)՝

$$C_L = R \left[2 \frac{T}{\theta_D} \int_0^{\theta_D/T} \frac{x dx}{e^x - 1} - \frac{\theta_D/T}{e^{\theta_D/T} - 1} \right]:$$

Որոշել բյուրեղի մոլային ջերմունակության սահմանային արժեքը ցածր՝ $T \ll \theta_D$ և բարձր՝ $T \gg \theta_D$ ջերմաստիճաններում:

4.20. Օգտագործելով երկչափ բյուրեղի մոլային ներքին էներգիայի բանաձևը՝

$$U = 4RT \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^2 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^2 dx}{e^x - 1},$$

արտածել բյուրեղի մոլային ջերմունակության արտահայտությունը:

4.21. Երկչափ բյուրեղի մոլային ջերմունակությունն արտահայտվում է

$$C_S = 4R \left[3 \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^2 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^2 dx}{e^x - 1} - \frac{(\theta_D/T)}{e^{\theta_D/T} - 1} \right]$$

բանաձևով: Որոշել բյուրեղի մոլային ջերմունակության սահմանային արժեքները ցածր՝ $T \ll \theta_D$ և բարձր՝ $T \gg \theta_D$ ջերմաստիճաններում:

4.22. Որոշել Դեբայի ω_D հաճախությունը, եթե հայտնի է, որ արծաթի մոլային ջերմունակությունը $T = 20$ Կ-ում $1,7$ Ջ/մոլ·Կ է:

4.23. Գրաֆիտի ցանցային ջերմունակությունը ցածր ջերմաստիճաններում ջերմաստիճանից կախված փոփոխվում է T^2 օրենքով: Ի՞նչ կարելի է ասել գրաֆիտի կառուցվածքի մասին:

4.24. Այնչափ մոդելի շրջանակներում, որի համաձայն բոլոր մոդերն այլասերված են և ունեն ω_E հաճախություն, որոշել այն ջերմաստիճանը, որի դեպքում համակարգի ջերմային էներգիան հավասար է նրա գրոյական տատանումների էներգիային:

4.25. Յույց տալ, որ Դեբայի մոդելի շրջանակներում θ_D -ից ցածր ջերմաստիճաններում տատանման մոդի ամենահավանական էներգիան՝ $\hbar\omega_p$ -ն որոշվում է

$$\exp\left(\frac{\hbar\omega_p}{k_B T}\right) \left(1 - \frac{\hbar\omega_p}{2k_B T}\right) = 1 \quad (1)$$

հավասարումից, որից հետևում է, որ ամենահավանական մոդին համապատասխանող ալիքի երկարությունը՝ $\lambda_p \sim a\theta_D/T$, որտեղ a -ն ցանցի հաստատունն է :

4.26. Նկատի ունենալով, որ d -չափայնությամբ բյուրեղում նորմալ մոդերի խտությունը համեմատական է ω^{d-1} -ին, ցույց տալ, որ տեսակարար ջերմունակությունը համեմատական է T^d -ին: Ցույց տալ նաև, որ եթե նորմալ մոդերի հաճախությունը, կախված q ալիքային թվից, ձգտում է զրոյի ոչ թե գծային՝ $\omega \sim q$, այլ աստիճանային՝ $\omega \sim q^v$ օրենքով, ապա ցածրջերմաստիճանային ջերմունակությունը համեմատական կլինի $T^{d/v}$ -ին:

4.27. Միաչափ աններդաշնակ տատանակի պոտենցիալ էներգիան՝ $U(x) = bx^2 - gx^3 - fx^4$, որտեղ $g \ll b^{3/2}(k_B T)^{-1/2}$, $f \ll b^2(k_B T)^{-1}$: Ցույց տալ, որ այդ տատանակի ջերմունակությունը նկարագրվում է հետևյալ մոտավոր արտահայտությամբ.

$$C \approx k_B \left[1 + \left(\frac{3f}{2b^2} + \frac{15g^2}{8b^3} \right) k_B T \right]:$$

4.28. Որոշել միաչափ բյուրեղի գծային ընդարձակման ջերմաստիճանային գործակիցը, համարելով, որ դրանում ատոմների փոխազդեցության պոտենցիալ էներգիան՝ $U(x) = bx^2 - gx^3 - fx^4$, որտեղ $g \ll b^{3/2}(k_B T)^{-1/2}$, $f \ll b^2(k_B T)^{-1}$:

4.29. N մոլեկուլից բաղկացած համակարգը կարող է լինել երկու տարբեր էներգիական վիճակներում, որոնց էներգիաները միմյանցից տարբերվում են ΔE -ով: Որոշել այդ համակարգի ջերմունակությունը:

4.30. Ցույց տալ, որ դասական ջերմունակության (Գյուլոնգ-Պտիի օրենքի) բարձրջերմաստիճանային քվանտային ուղղումը կարելի է ներկայացնել

$$\frac{\Delta C_V}{C_V^0} = -\frac{1}{12} \int_0^{\omega_D} g(\omega) \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T} \right)^2 d\omega \bigg/ \int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega$$

տեսքով, որտեղ ω_D -ն Գեբայի հաճախությունն է:

4.31. Բնչպե՞ս կփոխվի Դեբայի ջերմունակության տեսությունը, եթե ցանցային տատանումների մոդերը ենթարկվեն Ֆերմի-Դիրակի վիճակագրությանը: Այդ ենթադրության դեպքում որոշել ջերմունակության ջերմաստիճանային կախումը բարձր՝ $T \gg \theta_D$ և ցածր՝ $T \ll \theta_D$ ջերմաստիճաններում:

4.32. Բնչպե՞ս կփոխվի Դեբայի ջերմունակության տեսությունը, եթե ցանցային տատանումների մոդերի համար դիսպերսային առնչությունն ունենա $\hbar\omega(\mathbf{q}) = \alpha q^2$ տեսքը: Այդ ենթադրության դեպքում որոշել ջերմունակության ջերմաստիճանային կախումը բարձր՝ $T \gg \theta_D$ և ցածր՝ $T \ll \theta_D$ ջերմաստիճաններում:

ԼՈՒՃՈՒՄՆԵՐ ԵՎ ՊԱՏԱՍԽԱՆՆԵՐ

Գլուխ I. Բյուրեղագրություն և բյուրեղային կառուցվածքներ

1.1. ա. Պարզ խորանարդային ցանց (նկ. 1.1ա).

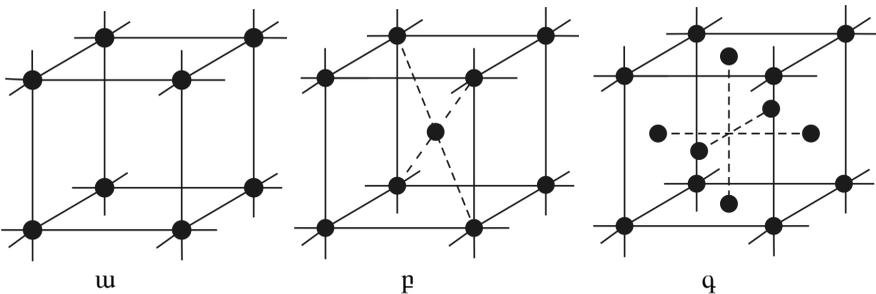
Այս ցանցի յուրաքանչյուր հանգույց (ատոմ) պատկանում է 8 տարրական խորանարդների, ուստի 1 տարրական խորանարդին բաժին է ընկնում $1/8$ հանգույց: Տարրական խորանարդն ունի 8 հանգույց, ուստի մեկ տարրական խորանարդում հանգույցների (ատոմների) թիվը կլինի՝ $8 \times 1/8 = 1$:

բ. Ծավալակենտրոն խորանարդային ցանց (նկ. 1.1բ).

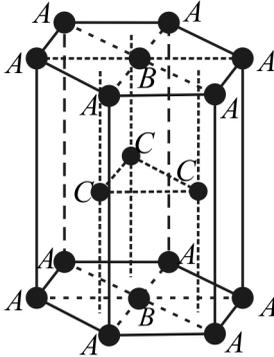
Նկատի ունենալով այն, որ խորանարդի կենտրոնում տեղակայված ատոմը (հանգույցը) պատկանում է միայն այդ խորանարդին, կստանանք՝ $8 \times 1/8$ (գագաթների ներդրումը) + 1 (կենտրոնի ներդրումը) = 2: Այսինքն՝ ծավալակենտրոն խորանարդային ցանցի տարրական խորանարդը պարունակում է 2 ատոմ (հանգույց):

գ. Նիստակենտրոն խորանարդային ցանց (նկ. 1.1գ).

Տարրական խորանարդի գագաթների հանգույցները պատկանում են 8 խորանարդի, նիստերի վրա տեղակայվածները՝ երկու հարևան խորանարդների, ուստի մեկ տարրական խորանարդում հանգույցների թիվը կլինի՝ $8 \times 1/8$ (գագաթների ներդրումը) + $6 \times 1/2$ (նիստերի ներդրումը) = 4:



Նկ. 1.1. ա, բ, գ



Նկ. 1.1. դ

դ. Վեցանկյուն խիտ դարսվածքով ցանց (Նկ. 1.1դ).

Վեցանկյուն խիտ դարսվածքով ցանցի տարրական բջիջը պատկերված է նկարում: Վեցանկյուն հատվածակողմի գագաթների յուրաքանչյուր ատոմ (A-տիպի հանգույց) պատկանում է 6 տարրական բջիջների (3-ը՝ վերին, 3-ը՝ ստորին): Տարրական բջջի 2 հիմքերի կենտրոնական հանգույցը (B-տիպի) պատկանում է 2 տարրական բջիջների, իսկ 3 եռանկյուն հատվածակողմերի կենտրոնական (C-տիպի) հանգույցները պատկանում են միայն տվյալ տարրական բջջին: Այսպիսով՝ տարրական բջջում ատոմների թիվը՝ (A-տիպի հանգույցների ներդրումը) $+2 \times 1/2$ (B-տիպի հանգույցների ներդրումը) $+3 \times 1$ (C-տիպի հանգույցների ներդրումը) $= 6$:

1.2. ա. Պարզ խորանարդային ցանց (Նկ. 1.2 ա).

Գնդի R շառավիղը և խորանարդի a կողը կապված են $a = 2R$ առնչությամբ: Խորանարդի ծավալը՝ $V_0 = a^3 = 8R^3$: Պարզ խորանարդային ցանցում յուրաքանչյուր հանգույցի բաժին է ընկնում հանգույցում տեղադրված գնդի ծավալի $1/8$ մասը, իսկ մեկ խորանարդին՝ $8 \times 1/8 \times V_1 = V_1$, որտեղ

V_1 -ը R շառավիղով գնդի ծավալն է:

Այսպիսով՝ գնդերով զբաղեցված մասը՝

$$k = \frac{V_1}{V_0} = \frac{\frac{4\pi}{3}R^3}{8R^3} = \frac{\pi}{6} \approx 0,523:$$

բ. Ծավալակենտրոն խորանարդային ցանց (նկ. 1.2 բ).

Գնդի R շառավիղը և խորանարդի a կողը կապված են մի առնչությամբ, որը հետևում է այն փաստից, որ խորանարդի տարածական անկյունագծի $a\sqrt{3}$ երկարության վրա տեղավորվում է գնդի չորս շառավիղ՝ $a\sqrt{3} = 4R$:

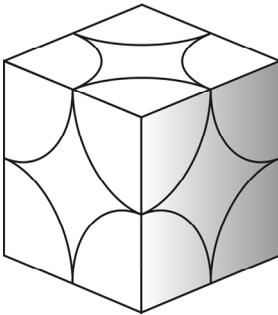
Տարրական խորանարդին բաժին ընկնող գնդերի ծավալը՝

$$V_1 = \frac{4\pi}{3}R^3 + 8 \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3}R^3 = 2 \frac{4\pi}{3}R^3,$$

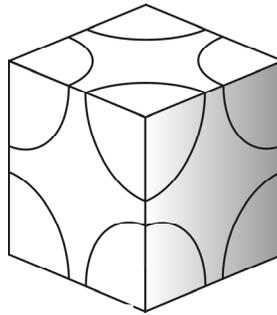
որտեղ առաջին անդամը խորանարդի կենտրոնում տեղադրված գնդի ծավալն է, իսկ երկրորդը՝ խորանարդի 8 գագաթներում դրված գնդերի բաժինը:

Այսպիսով՝ գնդերով զբաղեցված մասը՝

$$k = \frac{V_1}{V_0} = \frac{2 \frac{4\pi}{3}R^3}{\left(\frac{4R}{\sqrt{3}}\right)^3} = 2 \frac{4\pi}{3} \frac{3\sqrt{3}}{64} = \frac{\pi\sqrt{3}}{8} \approx 0,68:$$



ա



բ

Նկ. 1.2. ա, բ

գ. Նիստակենտրոն խորանարդային ցանց (նկ. 1.2 գ).

Գնդի R շառավիղը և խորանարդի a կողի միջև կապը հետևում է այն

փաստից, որ խորանարդի նիստի անկյունագծի վրա տեղավորվում է գնդի չորս շառավիղ՝ $a\sqrt{2} = 4R$:

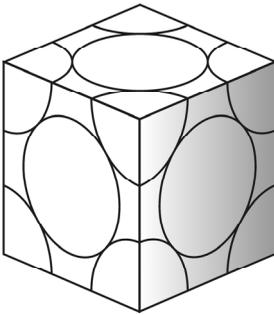
Տարրական խորանարդին բաժին ընկնող գնդերի ծավալը՝

$$V_1 = 8 \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} R^3 + 6 \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{4\pi}{3} R^3 = 4 \frac{4\pi}{3} R^3,$$

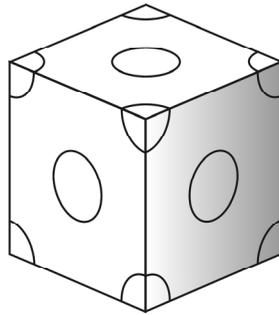
որտեղ առաջին անդամը խորանարդի գագաթներում տեղադրված գնդերի ծավալն է, իսկ երկրորդը՝ խորանարդի նիստերի կենտրոններում դրված գնդերի բաժինը:

Այսպիսով՝ գնդերով զբաղեցված մասը՝

$$k = \frac{V_1}{V_0} = \frac{4 \frac{4\pi}{3} R^3}{\left(\frac{4R}{\sqrt{2}}\right)^3} = 4 \frac{4\pi}{3} \frac{2\sqrt{2}}{64} = \frac{\pi\sqrt{2}}{6} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \approx 0,74:$$



գ



դ

Նկ. 1.2. գ, դ

դ. Ալմաստի տիպի ցանց (նկ. 1.2 դ).

Գնդի R շառավիղի և խորանարդի a կողի միջև կապը հետևում է այն փաստից, որ $a/2$ կողով խորանարդի տարածական անկյունագծի $a\sqrt{3}/2$ երկարության վրա տեղավորվում է գնդի չորս շառավիղ՝ $a\sqrt{3}/2 = 4R$:

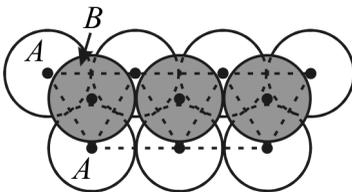
Տարրական (a կողով) խորանարդին բաժին ընկնող գնդերի ծավալը՝

$$V_1 = 8 \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} R^3 + 6 \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{4\pi}{3} R^3 + 4 \cdot \frac{4\pi}{3} R^3 = 8 \frac{4\pi}{3} R^3 :$$

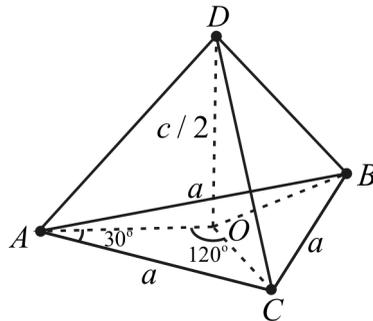
Այսպիսով՝ գնդերով զբաղեցված մասը՝

$$k = \frac{V_1}{V_0} = \frac{8 \frac{4\pi}{3} R^3}{\left(\frac{8R}{\sqrt{3}}\right)^3} = 8 \frac{4\pi}{3} \frac{3\sqrt{3}}{64 \cdot 8} = \frac{\pi\sqrt{3}}{16} \approx 0,34 :$$

1.3. Վեցանկյուն խիտ դարավածքով ցանց ստացվում է, երբ առաջին (A) շերտում ատոմները դասավորվում են հավասարակողմ եռանկյան գագաթներում, իսկ երկրորդ (B) շերտում՝ առաջին շերտի ատոմներով կազմված հավասարակողմ եռանկյունների կենտրոններում: Երրորդ շերտը կրկնում է առաջին շերտում ատոմների դասավորությունը (այսպես կոչված՝ ABAB... դասավորություն) (նկ.1.3ա):



ա



բ

Նկ. 1.3

Այս ցանցում A շերտի երեք ատոմները և B շերտի մեկ ատոմը կազմում են քառանիստ պրիզմա, որի բարձրությունը $c/2$ է (նկ.1.3բ): Գծագրից ակնհայտ է, որ $AO = a/2 \cos 30^\circ = a/\sqrt{3}$, հետևաբար, ΔAOD -ից՝

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

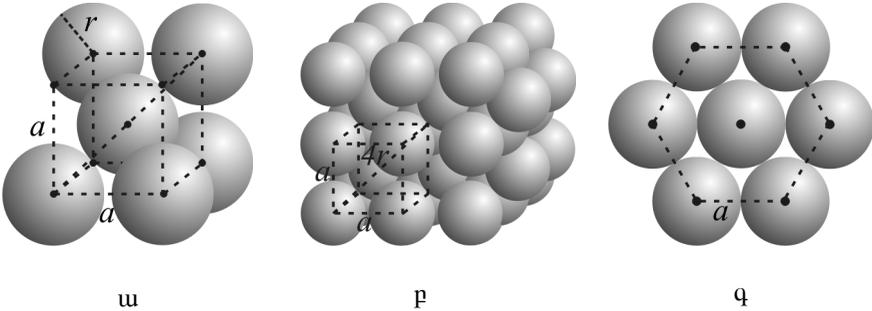
$$c = 2a\sqrt{\frac{2}{3}} \quad \text{և} \quad \frac{c}{a} = 2\sqrt{\frac{2}{3}} = \sqrt{\frac{8}{3}} \approx 1,633 :$$

1.4. 1. Տարրական խորանարդի a կողը գնդի R շառավղի հետ կապված է $a\sqrt{3} = 4R$ կամ $a = 4R/\sqrt{3}$ առնչությամբ (նկ. 1.4ա), ուստի տարրական խորանարդի ծավալը՝

$$V = a^3 = \frac{64R^3}{3\sqrt{3}} :$$

2. Տարրական խորանարդի a կողը գնդի R շառավղի հետ կապված է $a\sqrt{2} = 4R$ կամ $a = 2\sqrt{2}R$ առնչությամբ (նկ. 1.4բ), ուստի տարրական խորանարդի ծավալը՝

$$V = a^3 = 16\sqrt{2}R^3 :$$



Նկ. 1.4

3. Վեցանկյուն խիտ դարսվածքով ցանցի a հաստատունը գնդի R շառավղի հետ կապված է $a = 2R$ առնչությամբ (նկ. 1.4գ): Տարրական բջջի հիմքի (կանոնավոր վեցանկյան) մակերեսը՝

$$S = 6 \cdot \frac{1}{2} a \frac{a\sqrt{3}}{2} = 6\sqrt{3}R^2 :$$

Ինչպես գիտենք (տես խնդիր 1.3), իդեալական վեցանկյուն խիտ դարսվածքի համար $c = a(8/3)^{1/2}$, ուստի տարրական բջջի ծավալը՝

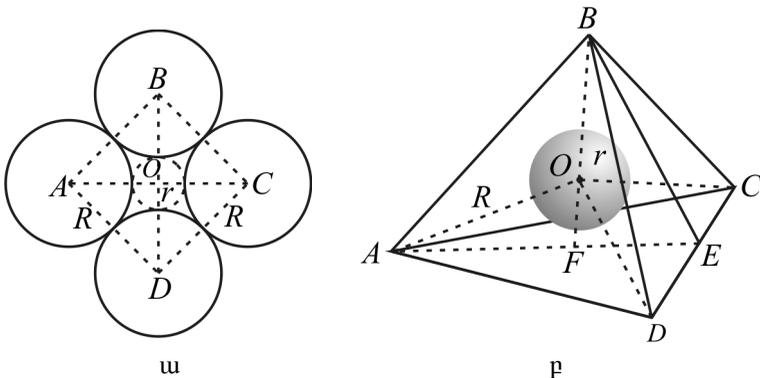
$$V = S c = 6\sqrt{3}R^2 \cdot 2R \cdot 2\sqrt{\frac{2}{3}} = 24\sqrt{2}R^3 :$$

1.5. ա. Ութանիստային խոռոչում տեղադրված առավելագույն շառավղով ատոմը շրջապատված է հիմնական ցանցի 6 ատոմով (նկ. 1.5ա):

Տանենք ութանիստը հատող, հարևան չորս ատոմների (A, B, C, D) և խոռոչում տեղադրված ատոմի (O) կենտրոններով անցնող հարթությունը:

ΔABC -ից՝ $AC^2 = AB^2 + BC^2$ կամ $(2R + 2r)^2 = 2(2R)^2$, որտեղից՝

$$R + r = \pm\sqrt{2}R \quad \text{և} \quad r = R(\sqrt{2} - 1) \approx 0,41R :$$



Նկ.1.5

բ. Քառանիստային խոռոչում տեղակայված r առավելագույն շառավղով ատոմը պետք է շոշափի քառանիստի հանգույցներում տեղադրված R շառավղով ատոմները (նկ. 1.5բ):

Խոռոչում տեղադրված ատոմի և քառանիստի գագաթներում տեղադրված ատոմների շոշափման պայմանը հետևյալ հավասարումն է՝

$$R + r = d, \tag{1}$$

որտեղ d -ն քառանիստի կենտրոնից մինչև գագաթ հեռավորությունն է:

ΔAOF -ից՝

$$(AF)^2 + (BF - d)^2 = (AO)^2 = d^2, \quad (2)$$

քանի որ քառանկիստում $AO = CO = DO = BO = d$: ΔACD -ն հավասարակողմ է՝ $AD = AC = CD = 2R$, ուստի դրա բարձրությունը՝

$$AF = \frac{2}{3} AE = \frac{2}{3} \frac{\sqrt{3}}{2} 2R = \frac{2\sqrt{3}}{3} R : \quad (3)$$

ΔABF -ում

$$BF = \sqrt{(AB)^2 - (AF)^2} = \sqrt{4R^2 - \frac{4}{3} R^2} = 2\sqrt{\frac{2}{3}} R : \quad (4)$$

(3) և (4) արտահայտությունները տեղադրելով (2) արտահայտության մեջ՝ կստանանք.

$$\frac{4R^2}{3} + \left(2R\sqrt{\frac{2}{3}} - d \right)^2 = d^2, \quad \text{կամ} \quad d = R\sqrt{\frac{3}{2}} : \quad (5)$$

(5) և (1) արտահայտություններից կստանանք քառանկիստ խոռոչում տեղադրված գնդի շառավղի արժեքը՝

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

1.6. Յեզիումի քլորիդի կառուցվածքում կենտրոնական ատոմն ունի 8 ամենամոտ հարևաններ: Եթե կենտրոնական ատոմն ունի r_a շառավղի (նկ. 1.6), ապա միմյանց հավելու պայմանը կընդունի հետևյալ տեսքը՝

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

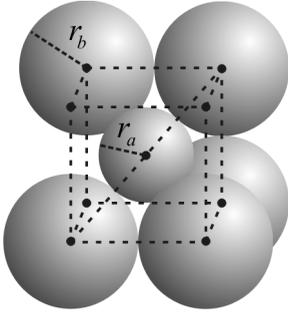
որտեղից՝

$$\frac{r_a}{r_b} = \sqrt{3} - 1 \approx 0,73 :$$

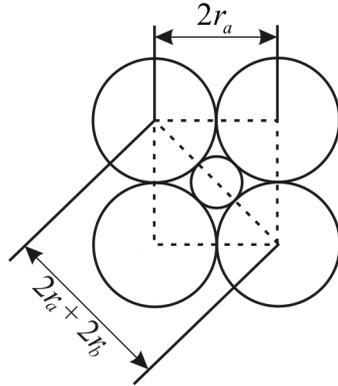
Եթե կենտրոնական ատոմն r_b շառավղով ատոմն է, ապա միմյանց

հասվելու պայմանը $2r_a + 2r_b = 2r_a\sqrt{3}$ առնչությունն է, որտեղից՝

$$\frac{r_a}{r_b} = \frac{1}{\sqrt{3}-1} \approx 1,37:$$



Նկ.1.6

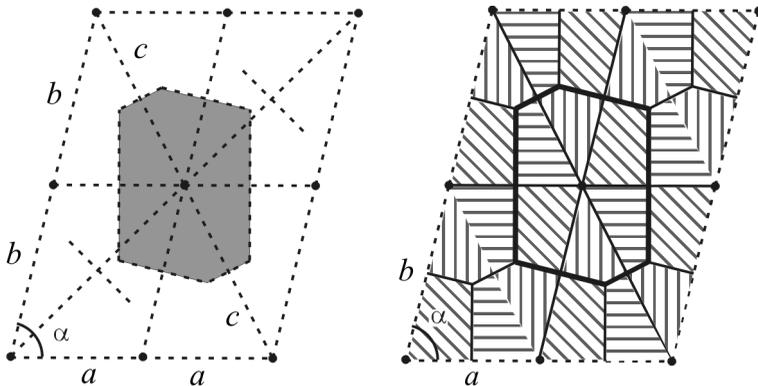


Նկ.1.7

1.7. r_b շառավղով ատոմն ունի r_a շառավղով 6 ամենամոտ հարևաններ, որոնք տեղադրված են ութանիստի գագաթներում: Մեկ հարթությանը պատկանող հանգույցներով անցնող հարթությամբ ութանիստի կտրվածքը պատկերված է նկ. 1.7-ում, որից հետևում է $2r_a + 2r_b = 2r_a\sqrt{2}$ կապը, ուստի

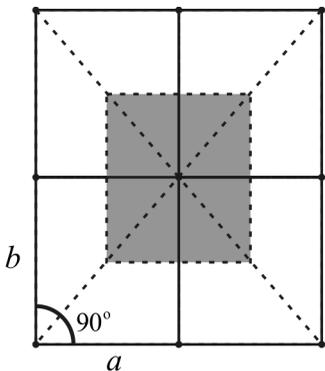
$$\frac{r_a}{r_b} = \frac{1}{\sqrt{2}-1} \approx 2,44:$$

1.8. ա. Եթե երկչափ ցանցի տարրական բջիջը գուգահեռագիծ է ($\alpha < 90^\circ$, նկ.1.8), ապա կամայական ընտրված կենտրոնն ունի 2 ամենամոտ հարևաններ (a հեռավորությամբ), 2 մոտ հարևաններ ($b > a$ հեռավորությամբ), 2 հարևան ($c > b$ հեռավորությամբ) և 2 ամենահեռու հարևաններ, որոնք չեն մասնակցում Վիգներ-Չեյտցի բջջի կառուցմանը: Արդյունքում ստացվում է անկանոն վեցանկյուն:

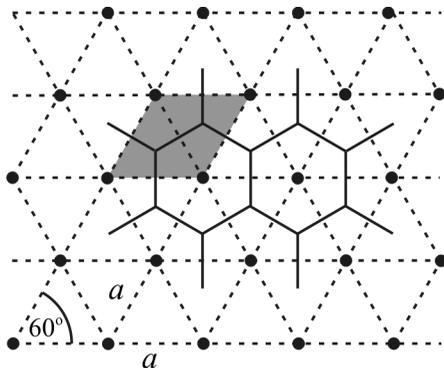


Նկ.1.8

Եթե երկչափ ցանցն ուղղանկյուն է ($\alpha = 90^\circ$, նկ. 1.9), ապա ընտրված կենտրոնն ունի 2 ամենամոտ հարևաններ (a հեռավորությամբ), 2 մոտ հարևաններ ($b > a$ հեռավորությամբ) և 4 ամենահեռու հարևաններ՝ $\sqrt{a^2 + b^2}$ հեռավորությամբ: Վիզներ-Չեյտցի բջիջը կառուցելիս ամենամոտ և մոտ հարևանները միացնող հատվածների միջնուղղահայացները հատվում են անկյունագծերի միջնակետերում, որի արդյունքում ստացվում է ուղղանկյուն:



Նկ.1.9

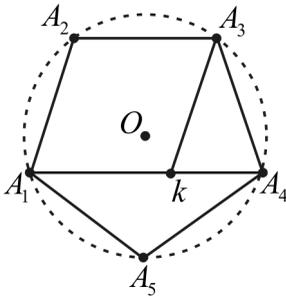


Նկ.1.10

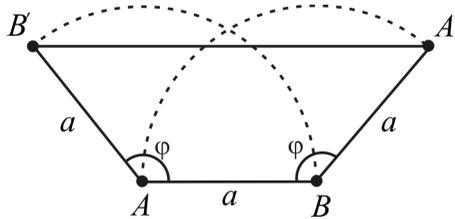
բ. Որպես շեղանկյուն վերցված տարրական բջջի մակերեսը՝ $S = a a \sin 60^\circ = a^2 \sqrt{3}/2$, իսկ Վիգներ-Չեյտցի բջջի մակերեսը (տես նկ. 1.10)՝

$$S = 6 \cdot \frac{1}{2} \frac{a}{2} \frac{a}{2} \frac{a}{2} \operatorname{tg} 30^\circ = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 :$$

1.9. I եղանակ: Ենթադրենք, որ տարածական ցանցն ունի 5-րդ կարգի համաչափության առանցք (նկ. 1.11): Օ առանցքին ամենամոտ A_1, A_2, \dots, A_5 հանգույցներից, օրինակ՝ A_1 -ը $2\pi/5 = 72^\circ$ անկյունով պտտելուց հետո կգրադեցնի հաջորդաբար A_2, A_3, A_4 և A_5 հանգույցները: A_1 հանգույցը միացնելով A_4 -ի հետ՝ կստանանք հնգանկյան A_2A_3 կողին զուգահեռ A_1A_4 ուղիղը: Չուգահեռ շարքերում հանգույցների միջև միևնույն հեռավորություններն են, ուստի A_1A_4 ուղիղի վրա պետք է լինի k հանգույցը, որն ավելի մոտ է համաչափության O առանցքին, քան A_1, \dots, A_5 հանգույցներից յուրաքանչյուրը: Այսպիսով, հանգեցինք հսկասության, քանի որ, ըստ պայմանի, A_1 -ը 5-րդ կարգի համաչափության առանցքին ամենամոտ հանգույցն է: Հետևաբար՝ տարածական ցանցը չի կարող ունենալ 5-րդ կարգի համաչափության առանցք:



Նկ.1.11



Նկ.1.12

II եղանակ: Դիցուք՝ A -ն տարածական ցանցի որևէ հանգույց է (նկ. 1.12), որով, նկարի հարթությանն ուղղահայաց, անցնում է համաչա-

փության առանցք: Եթե B-ն մի այլ հանգույց է, որն A հանգույցից հեռու է տեղափոխական որևէ պարբերության չափով, ապա դրանով անցնում է համաչափության նույնախի առանցք:

Այժմ կատարենք պտույտ $\varphi = 2\pi/n$ (n -ը համաչափության առանցքի կարգն է) անկյունով A հանգույցով անցնող համաչափության առանցքի շուրջ: B հանգույցը դրանով անցնող համաչափության առանցքի հետ կգրավի B' դիրքը: Նույն պտույտը B հանգույցի շուրջն A հանգույցը կտեղափոխի A' դիրք: Քանի որ այս պտույտների արդյունքում տարածական ցանցը համընկնում է ինքն իր հետ, ապա A' և B' կետերը նույնպես տարածական ցանցի հանգույցներ են, ուստի կարող են համատեղվել զուգահեռ տեղափոխության միջոցով: Նշանակում է՝ A'B' հեռավորությունը պետք է հավասար լինի տեղափոխության որևէ վեկտորի մոդուլին: Եթե a -ն ցանցի հաստատունն է տվյալ ուղղությամբ, ապա A'B'-ը պետք է հավասար լինի ap -ի, որտեղ p -ն ամբողջ թիվ է: Նկ. 1.12-ից հետևում է, որ

$$a + 2a \sin\left(\varphi - \frac{\pi}{2}\right) = ap,$$

որտեղից՝

$$\cos \varphi = \frac{1-p}{2}: \tag{1}$$

Քանի որ $|\cos \varphi| \leq 1$, ապա (1) բանաձևից հետևում է, որ p -ն կարող է ընդունել միայն հետևյալ արժեքները՝ 3, 2, 1, 0 և -1: Նշենք, որ $p = -1$ արժեքը համապատասխանում է նույնական ձևափոխության՝ $\varphi = 0$ կամ 2π : Նկատի ունենալով $\varphi = 2\pi/n$ բանաձևը և p -ի հնարավոր արժեքները, կստանանք՝ $n = 2$ (երբ $p = 3$), $n = 3$ (երբ $p = 2$), $n = 4$ (երբ $p = 1$) և $n = 6$ (երբ $p = 0$): Այսպիսով, տարածական ցանցը կարող է ունենալ միայն 2-րդ, 3-րդ, 4-րդ և 6-րդ կարգի համաչափության առանցքներ:

III եղանակ: Կարելի է ելնել նաև այն հանգամանքից, որ կա բացահայտ նույնություն n -ի թույլատրելի արժեքների և այն նույնատիպ կանոնավոր եռանկյունների կարգերի միջև, որոնցով կարելի է ծածկել անվերջ տարածությունը:

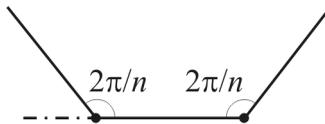
Իրոք, n -անկյուն բազմանկյան արտաքին անկյունը $\pi - 2\pi/n$ է (նկ. 1.13): Եթե մեկ գագաթում հանդիպում են q հատ այդպիսի բազմանկյուններ, ապա

$$\pi - \frac{2\pi}{n} = \frac{2\pi}{q} \quad \text{կամ} \quad 1 - \frac{2}{n} = \frac{2}{q} \quad (2)$$

(2) բանաձևը կարելի է ներկայացնել նաև հետևյալ ձևով՝

$$(n - 2)(q - 2) = 4: \quad (3)$$

Եթե $n = 3$ ($n < 3$ համար (3) հավասարումը տեղի չունի), ապա $q = 6$, եթե $n = 4$, ապա $q = 4$, եթե $n = 6$, ապա $q = 3$: Դժվար չէ նկատել, որ $n = 5$ և $n > 6$ դեպքերում (3) առնչությունից q -ի համար ստացվում են ոչ ամբողջ արժեքներ: Այսպիսով, անվերջ հարթությունը կարելի է ծածկել կանոնավոր եռանկյուններով ($n = 6$), քառակուսիներով ($n = 4$) և կանոնավոր վեցանկյուններով ($q = 6$)՝ առանց բաց տեղեր թողնելու:



Նկ.1.13

1.10. Տարրական բջջի ծավալն արտահայտվում է ցանցի հիմնական վեկտորների վեկտոր-սկալյար արտադրյալով՝

$$\mathbf{v}_0 = (\mathbf{a}_1 [\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]) \equiv \begin{vmatrix} a_{1x} & a_{1y} & a_{1z} \\ a_{2x} & a_{2y} & a_{2z} \\ a_{3x} & a_{3y} & a_{3z} \end{vmatrix}, \quad (1)$$

որտեղ $a_{1x}, a_{2x}, \dots, a_{3z}$ -ը հիմնական վեկտորների պրոյեկցիաներն են ուղղանկյուն կոորդինատային առանցքների վրա:

Գրենք (1) արտահայտության քառակուսին.

$$\begin{aligned}
 v_0^2 &= \begin{vmatrix} a_{1x} & a_{1y} & a_{1z} \\ a_{2x} & a_{2y} & a_{2z} \\ a_{3x} & a_{3y} & a_{3z} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} a_{1x} & a_{1y} & a_{1z} \\ a_{2x} & a_{2y} & a_{2z} \\ a_{3x} & a_{3y} & a_{3z} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_{1x} & a_{1y} & a_{1z} \\ a_{2x} & a_{2y} & a_{2z} \\ a_{3x} & a_{3y} & a_{3z} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} a_{1x} & a_{2x} & a_{3x} \\ a_{1y} & a_{2y} & a_{3y} \\ a_{1z} & a_{2z} & a_{3z} \end{vmatrix} = \\
 &= \begin{vmatrix} a_1^2 + a_1^2 + a_1^2 & a_{1x}a_{2x} + a_{1y}a_{2y} + a_{1z}a_{2z} & a_{1x}a_{3x} + a_{1y}a_{3y} + a_{1z}a_{3z} \\ a_{2x}a_{1x} + a_{2y}a_{1y} + a_{2z}a_{1z} & a_{2x}^2 + a_{2y}^2 + a_{2z}^2 & a_{2x}a_{3x} + a_{2y}a_{3y} + a_{2z}a_{3z} \\ a_{3x}a_{1x} + a_{3y}a_{1y} + a_{3z}a_{1z} & a_{3x}a_{2x} + a_{3y}a_{2y} + a_{3z}a_{2z} & a_{3x}^2 + a_{3y}^2 + a_{3z}^2 \end{vmatrix} = \\
 &= \begin{vmatrix} a_1^2 & (\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2) & (\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_3) \\ (\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_1) & a_2^2 & (\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3) \\ (\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1) & (\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_2) & a_3^2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_1^2 & a_1a_2 \cos \gamma & a_1a_3 \cos \beta \\ a_1a_2 \cos \gamma & a_2^2 & a_2a_3 \cos \alpha \\ a_1a_3 \cos \beta & a_2a_3 \cos \alpha & a_3^2 \end{vmatrix} = \\
 &= a_1^2 a_2^2 a_3^2 \begin{vmatrix} 1 & \cos \gamma & \cos \beta \\ \cos \gamma & 1 & \cos \alpha \\ \cos \beta & \cos \alpha & 1 \end{vmatrix} = \\
 &= (a_1 a_2 a_3)^2 [1 + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma]:
 \end{aligned}$$

Հետևաբար՝ եռաթեք ցանցի տարրական բջի ծավալը՝

$$v_0 = a_1 a_2 a_3 \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}: \quad (1)$$

(1) արտահայտությունից կարելի է ստանալ միաթեք, վեցանկյուն և եռանկյուն համակարգերի ցանցերի տարրական բջիջների ծավալները՝

1. Միաթեք համակարգ՝ $\alpha = \gamma = 90^\circ$,

$$v_0 = a_1 a_2 a_3 \sqrt{1 - \cos^2 \beta} = a_1 a_2 a_3 \sin \beta:$$

2. Վեցանկյուն համակարգ՝ $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$, $a_1 = a_2$,

$$v_0 = a_1^2 a_3 \sqrt{1 - \cos^2 \gamma} = a_1^2 a_3 \sin \gamma = \frac{\sqrt{3}}{2} a_1^2 a_3:$$

3. Եռանկյուն համակարգ՝ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$, $a_1 = a_2 = a_3$,

$$v_0 = a_1^3 \sqrt{1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha} :$$

1.11. Խիտ դարավածքով վեցանկյուն ցանցի տարրական բջջի ծավալը հավասար է պարզագույն տարրական բջջի ծավալի եռապատկին՝

$$V_0 = 3v_0 = 3 \cdot \frac{\sqrt{3}}{2} a_1^2 a_3 ,$$

հետևաբար՝ 1 սմ^3 ծավալում պարունակվող տարրական բջիջների թիվը՝

$$N_1 = \frac{1 \text{ սմ}^3}{V_0} = \frac{2}{3\sqrt{3}} \frac{1}{a_1^2 a_3} \approx 7,2 \cdot 10^{21} :$$

1.12. Երկու ամենամոտ իոնների միջև հեռավորությունը նշանակենք d -ով: d կողով խորանարդի զանգվածը՝

$$M = d^3 \rho : \quad (1)$$

Մյուս կողմից, այդ զանգվածը կարելի է ներկայացնել որպես $d = a/2$ (a -ն ցանցի հաստատունն է) կողով խորանարդում պարունակվող իոնների զանգվածների գումար՝

$$4 \times \frac{1}{8} m_1 + 4 \times \frac{1}{8} m_2 = \frac{1}{2} (m_1 + m_2), \quad (2)$$

որտեղ 4 գործակիցը խորանարդում A^+ -ի և B^- -ի թիվն է (դրանցից յուրաքանչյուրի միայն $1/8$ մասն է պատկանում նշված խորանարդին): (1) և (2) բանաձևերից կստանանք՝

$$\left(\frac{a}{2}\right)^3 \rho = \frac{1}{2} (m_1 + m_2),$$

որտեղից՝

$$a = 2 \left(\frac{m_1 + m_2}{2\rho}\right)^{1/3} : \quad (3)$$

Տվյալ նյութի 1 ատոմի զանգվածը կարելի է արտահայտել նյութի մոլային զանգվածի միջոցով, ուստի

$$m_1 = \frac{\mu_1}{N_A}, \quad m_2 = \frac{\mu_2}{N_A}, \quad (4)$$

որտեղ N_A -ն Ավոգադրոյի հաստատունն է: (3) և (4) բանաձևերից

$$a = 2 \left(\frac{\mu_1 + \mu_2}{2\rho N_A} \right)^{1/3} : \quad (5)$$

Նատրիումի քլորիդի համար (5) բանաձևից կստանանք՝

$$a = 2 \left(\frac{58,5}{2 \cdot 2,18 \cdot 6,02 \cdot 10^{23}} \right)^{1/3} \text{ սմ} \approx 5,64 \cdot 10^{-8} \text{ սմ} = 5,64 \text{ \AA} :$$

1.13. Երկաթի տարրական բջջի զանգվածն արտահայտենք երկաթի խտությամբ՝

$$M = a^3 \rho : \quad (1)$$

Մյուս կողմից, այն կարելի է ներկայացնել որպես դրանում պարունակվող երկաթի N_1 ատոմների զանգվածների գումար՝

$$M = N_1 m_1 = N_1 \frac{\mu}{N_A}, \quad (2)$$

որտեղ μ -ն երկաթի մոլային զանգվածն է, N_A -ն՝ Ավոգադրոյի հաստատունը: (1) և (2) բանաձևերից կստանանք՝

$$\rho a^3 = N_1 \frac{\mu}{N_A},$$

որտեղից՝

$$N_1 = \frac{\rho a^3}{\mu} N_A :$$

Տեղադրելով թվային տվյալները՝ կստանանք.

$$N_1 = \frac{7,8 \cdot (2,87)^3 \cdot 10^{-24}}{55,84} \cdot 6,02 \cdot 10^{23} \approx 1,988,$$

այսինքն՝ $N_1 = 2$:

1.14. Նյութի m զանգվածում մասնիկների թիվը՝

$$N = \nu N_A = \frac{m}{\mu} N_A,$$

որտեղ ν -ն մոլերի թիվն է, N_A -ն՝ Ավոգադրոյի հաստատունը: Միավոր ծավալում մասնիկների թիվը՝

$$n = \frac{N}{V} = \frac{mN_A}{V\mu} = \frac{\rho}{\mu} N_A: \quad (1)$$

Ալյումին. $\rho = 2,7$ գ/սմ³, $\mu = 27$ գ/մոլ, ուստի (1) բանաձևի համաձայն՝

$$n_{Al} = \frac{2,7}{27} \cdot 6,02 \cdot 10^{23} \text{ սմ}^{-3} = 6,02 \cdot 10^{22} \text{ սմ}^{-3}:$$

Գերմանիում. $\rho = 5,36$ գ/սմ³, $\mu = 73$ գ/մոլ, ուստի

$$n_{Ge} = \frac{5,36}{73} \cdot 6,02 \cdot 10^{23} \text{ սմ}^{-3} = 4,42 \cdot 10^{22} \text{ սմ}^{-3}:$$

Նատրիումի քլորիդ. $\rho = 2,18$ գ/սմ³, $\mu = \mu_{Na} + \mu_{Cl} = 58,5$ գ/մոլ, ուստի

$$n_{NaCl} = \frac{2,18}{58,5} \cdot 6,02 \cdot 10^{23} \text{ սմ}^{-3} = 2,24 \cdot 10^{22} \text{ սմ}^{-3}:$$

1.15. Ի եղանակ: Հակադարձ ցանցի կամայական \mathbf{g} վեկտոր բավարարում է հետևյալ հավասարմանը՝

$$\mathbf{gl} = 2\pi M, \quad (1)$$

որտեղ M -ը կամայական ամբողջ թիվ է՝ $M = 0, \pm 1, \pm 2, \pm \dots$: Ներմուծենք նոր վեկտոր՝ $\mathbf{b} = \mathbf{g}/2\pi$, իսկ (1) հավասարման մեջ տեղափոխության \mathbf{l} վեկտորն արտահայտենք ուղիղ ցանցի հիմնական \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 և \mathbf{a}_3 վեկտորներով՝ $\mathbf{l} = l_1\mathbf{a}_1 + l_2\mathbf{a}_2 + l_3\mathbf{a}_3$: (1) հավասարումից կստանանք՝

$$\mathbf{gl} = 2\pi(\mathbf{ba}_1l_1 + \mathbf{ba}_2l_2 + \mathbf{ba}_3l_3) = 2\pi M \quad (2)$$

Քանի որ l_1 -ը, l_2 -ը և l_3 -ը կամայական ամբողջ թվեր են, ապա (2) հավասարումը կբավարարվի, եթե

$$\mathbf{b}\mathbf{a}_1 = m_1, \quad \mathbf{b}\mathbf{a}_2 = m_2, \quad \mathbf{b}\mathbf{a}_3 = m_3, \quad (3)$$

որտեղ m_1 -ը, m_2 -ը և m_3 -ը կամայական ամբողջ թվեր են:

(3) առնչությունները կարելի է դիտել որպես հավասարումների համակարգ երեք՝ b_x, b_y և b_z անհայտ մեծությունների համար՝

$$\left. \begin{aligned} b_x a_{1x} + b_y a_{1y} + b_z a_{1z} &= m_1 \\ b_x a_{2x} + b_y a_{2y} + b_z a_{2z} &= m_2 \\ b_x a_{3x} + b_y a_{3y} + b_z a_{3z} &= m_3 \end{aligned} \right\} : \quad (4)$$

(4) հավասարման լուծումներն են՝

$$\begin{aligned} b_x &= \frac{\begin{vmatrix} m_1 & a_{1y} & a_{1z} \\ m_2 & a_{2y} & a_{2z} \\ m_3 & a_{3y} & a_{3z} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} a_{1x} & a_{1y} & a_{1z} \\ a_{2x} & a_{2y} & a_{2z} \\ a_{3x} & a_{3y} & a_{3z} \end{vmatrix}} = \frac{1}{v_0} \left[m_1 (a_{2y} a_{3z} - a_{2z} a_{3y}) + \right. \\ &+ m_2 (a_{3y} a_{1z} - a_{3z} a_{1y}) + m_3 (a_{1y} a_{2z} - a_{1z} a_{2y}) \left. \right] = \\ &= \frac{1}{v_0} \left\{ m_1 [\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]_x + m_2 [\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1]_x + m_3 [\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2]_x \right\}, \\ b_y &= \frac{1}{v_0} \left\{ m_1 [\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]_y + m_2 [\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1]_y + m_3 [\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2]_y \right\}, \\ b_z &= \frac{1}{v_0} \left\{ m_1 [\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]_z + m_2 [\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1]_z + m_3 [\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2]_z \right\}, \end{aligned} \quad (5)$$

որտեղ $v_0 = (\mathbf{a}_1 [\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3])$ -ը տարրական բջջի ծավալն է:

(5) արտահայտություններից հետևում է, որ կամայական \mathbf{b} վեկտոր կարելի է ներկայացնել հետևյալ կերպ.

$$\mathbf{b} = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 + m_3 \mathbf{b}_3,$$

որտեղ

$$\mathbf{b}_1 = \frac{1}{v_0} [\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3], \quad \mathbf{b}_2 = \frac{1}{v_0} [\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1], \quad \mathbf{b}_3 = \frac{1}{v_0} [\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2]:$$

Այսպիսով, հակադարձ ցանցի կամայական \mathbf{g} վեկտոր կարելի է ներկայացնել

$$\mathbf{g} = m_1 \mathbf{g}_1 + m_2 \mathbf{g}_2 + m_3 \mathbf{g}_3$$

տեսքով, որտեղ

$$\mathbf{g}_1 = 2\pi \frac{[\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]}{(\mathbf{a}_1 [\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3])}, \quad \mathbf{g}_2 = 2\pi \frac{[\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1]}{(\mathbf{a}_1 [\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3])}, \quad \mathbf{g}_3 = 2\pi \frac{[\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2]}{(\mathbf{a}_1 [\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3])}$$

վեկտորները հակադարձ ցանցի հիմնական վեկտորներն են:

II եղանակ: (3) համակարգում անհայտ \mathbf{b} վեկտորը ներկայացնենք երեք անհայտ սկալյար մեծությունների միջոցով (նշենք, որ մեկ վեկտորը համարժեք է երեք սկալյար մեծությունների).

$$\mathbf{b} = \alpha_1 [\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3] + \alpha_2 [\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1] + \alpha_3 [\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2]: \quad (6)$$

(3) և (6) բանաձևերից կստանանք.

$$\mathbf{b} \mathbf{a}_1 = m_1 = \alpha_1 (\mathbf{a}_1 [\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]) + \alpha_2 (\mathbf{a}_1 [\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1]) + \alpha_3 (\mathbf{a}_1 [\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2]): \quad (7)$$

Քանի որ $(\mathbf{a}_1 [\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]) = v_0$, իսկ $(\mathbf{a}_1 [\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1]) = (\mathbf{a}_1 [\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2]) = 0$, ապա (7) առնչությունից հետևում է, որ

$$\alpha_1 = \frac{1}{v_0} m_1: \quad (8)$$

Նույն ձևով կստանանք, որ

$$\alpha_2 = \frac{1}{v_0} m_2, \quad \alpha_3 = \frac{1}{v_0} m_3: \quad (9)$$

Այսպիսով, հակադարձ ցանցի կամայական \mathbf{g} վեկտոր, ըստ (6)–(9) բանաձևերի, կարելի է ներկայացնել հետևյալ տեսքով՝

$$\begin{aligned} \mathbf{g} = 2\pi\mathbf{b} &= 2\pi \cdot \frac{[\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]}{V_0} m_1 + 2\pi \cdot \frac{[\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1]}{V_0} m_2 + 2\pi \cdot \frac{[\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2]}{V_0} m_3 = \\ &= m_1 \mathbf{g}_1 + m_2 \mathbf{g}_2 + m_3 \mathbf{g}_3 : \end{aligned}$$

1.16. Երկու վեկտորների կազմած անկյունը կարելի է արտահայտել այդ վեկտորների սկալյար արտադրյալի միջոցով՝

$$\cos \varphi = \frac{\mathbf{A} \mathbf{B}}{|\mathbf{A}| |\mathbf{B}|} : \quad (1)$$

Նշանակենք ուղիղ ցանցի հիմնական վեկտորների կազմած անկյունները α -ով, β -ով և γ -ով, իսկ հակադարձ ցանցում՝ α^* -ով, β^* -ով և γ^* -ով: Կիրառենք (1) բանաձևը հակադարձ ցանցի հիմնական վեկտորների կազմած անկյունները որոշելու համար: Այսպես, օգտվելով հակադարձ ցանցի և ուղիղ ցանցի հիմնական վեկտորների միջև հայտնի առնչություններից (տես խնդիր 1.15), կստանանք՝

$$\cos \gamma^* = \frac{\mathbf{g}_1 \mathbf{g}_2}{|\mathbf{g}_1| |\mathbf{g}_2|} = \frac{2\pi \frac{[\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]}{V_0} \cdot 2\pi \frac{[\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1]}{V_0}}{2\pi \frac{[\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]}{V_0} \cdot 2\pi \frac{[\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1]}{V_0}} = \frac{[\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3][\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1]}{a_2 a_3 \sin \alpha \cdot a_3 a_1 \sin \beta} : (2)$$

Նկատի ունենալով, որ

$$\begin{aligned} [\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3][\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1] &= \mathbf{a}_1 ([[\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3], \mathbf{a}_3]) = \mathbf{a}_1 ([\mathbf{a}_3, [\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_2]]) = \\ &= \mathbf{a}_1 \{ \mathbf{a}_3 (\mathbf{a}_3 \mathbf{a}_2) - \mathbf{a}_2 (\mathbf{a}_3 \mathbf{a}_3) \} = (\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_3) (\mathbf{a}_3 \mathbf{a}_2) - \mathbf{a}_3^2 (\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2) = \\ &= a_1 a_3 \cos \beta \cdot a_2 a_3 \cos \alpha - a_3^2 a_1 a_2 \cos \gamma = a_1 a_2 a_3^2 (\cos \beta \cos \alpha - \cos \gamma), \end{aligned}$$

(2) բանաձևից կստանանք՝

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

Նույն ձևով մյուս երկու անկյունների համար կստանանք՝

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

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

1.17. Ի եղանակ: Հակադարձ ցանցի բազիսային վեկտորներն արտահայտվում են ուղիղ ցանցի հիմնական \mathbf{a}, \mathbf{b} և \mathbf{c} վեկտորների միջոցով հետևյալ բանաձևերով.

$$\mathbf{g}_1 = \frac{2\pi}{V_0} [\mathbf{b}, \mathbf{c}], \quad \mathbf{g}_2 = \frac{2\pi}{V_0} [\mathbf{c}, \mathbf{a}], \quad \mathbf{g}_3 = \frac{2\pi}{V_0} [\mathbf{a}, \mathbf{b}],$$

որտեղ $V_0 = (\mathbf{a}[\mathbf{b}, \mathbf{c}])$ -ն ուղիղ ցանցի տարրական բջջի ծավալն է: Հակադարձ ցանցի տարրական բջջի ծավալը՝

$$\Omega_0 = (\mathbf{g}_1 [\mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3]): \quad (1)$$

Ձևափոխենք (1) արտահայտությունը, օգտվելով հետևյալ վեկտորական նույնություններից.

$$[\mathbf{A}, [\mathbf{B}, \mathbf{C}]] = \mathbf{B}(\mathbf{A}\mathbf{C}) - \mathbf{C}(\mathbf{A}\mathbf{B}),$$

$$(\mathbf{A}, [\mathbf{B}, \mathbf{C}]) = (\mathbf{C}, [\mathbf{A}, \mathbf{B}]) = (\mathbf{B}, [\mathbf{C}, \mathbf{A}]):$$

$$\begin{aligned} \Omega_0 &= \frac{(2\pi)^3}{V_0^3} ([\mathbf{b}, \mathbf{c}][[\mathbf{c}, \mathbf{a}], [\mathbf{a}, \mathbf{b}]]) = \\ &= \frac{(2\pi)^3}{V_0^3} \{[\mathbf{c}, \mathbf{a}] ([\mathbf{b}, \mathbf{c}][\mathbf{a}, \mathbf{b}]) - [\mathbf{a}, \mathbf{b}] ([\mathbf{b}, \mathbf{c}][\mathbf{c}, \mathbf{a}])\} = \quad (2) \\ &= \frac{(2\pi)^3}{V_0^3} \{[\mathbf{c}, \mathbf{a}] (\mathbf{b}([\mathbf{b}, \mathbf{c}]\mathbf{a})) - [\mathbf{a}, \mathbf{b}] (\mathbf{a}([\mathbf{b}, \mathbf{c}]\mathbf{c}))\}: \end{aligned}$$

(2) արտահայտության II գումարելիում $([\mathbf{b}, \mathbf{c}]\mathbf{c}) = 0$, ուստի կստանանք՝

$$\Omega_0 = \frac{(2\pi)^3}{v_0^3} (\mathbf{a}[\mathbf{b}, \mathbf{c}]) (\mathbf{b}[\mathbf{c}, \mathbf{a}]) = \frac{(2\pi)^3}{v_0}, \text{ կամ } v_0 \Omega_0 = (2\pi)^3 :$$

II եղանակ: Ինչպես հայտնի է, հակադարձ ցանցի տարրական բջիջը Բրիլյուենի I զոնան է կամ Վիգներ-Չեյտցի բջիջը, որի սահմանները որոշվում են $-\pi \leq \mathbf{k}\mathbf{a}_i < \pi$ ($i=1, 2, 3$) անհավասարություններով, որտեղ \mathbf{a}_i -երը ($i=1, 2, 3$) ցանցի հիմնական վեկտորներն են, \mathbf{k} -ն փոփոխվում է հակադարձ տարածության մեջ:

Գրենք հակադարձ ցանցի տարրական բջիջի ծավալը՝

$$\Omega_0 = \int_{\substack{-\pi \leq \mathbf{k}\mathbf{a}_1 < \pi \\ -\pi \leq \mathbf{k}\mathbf{a}_2 < \pi \\ -\pi \leq \mathbf{k}\mathbf{a}_3 < \pi}} dk_x dk_y dk_z : \quad (3)$$

(3) ինտեգրալում անցնենք ինտեգրման նոր փոփոխականների՝

$$\varphi_1 = \mathbf{k}\mathbf{a}_1, \quad \varphi_2 = \mathbf{k}\mathbf{a}_2, \quad \varphi_3 = \mathbf{k}\mathbf{a}_3, \quad (4)$$

որոնք փոփոխվում են $[-\pi, \pi)$ տիրույթում: Նոր փոփոխականներով ծավալի տարրը՝

$$d\varphi_1 d\varphi_2 d\varphi_3 = J \left(\frac{\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3}{k_x, k_y, k_z} \right) dk_x dk_y dk_z, \quad (5)$$

որտեղ $(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3) \rightarrow (k_x, k_y, k_z)$ ձևափոխության յակոբիանը՝

$$J \left(\frac{\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3}{k_x, k_y, k_z} \right) = \begin{vmatrix} \frac{\partial \varphi_1}{\partial k_x} & \frac{\partial \varphi_2}{\partial k_x} & \frac{\partial \varphi_3}{\partial k_x} \\ \frac{\partial \varphi_1}{\partial k_y} & \frac{\partial \varphi_2}{\partial k_y} & \frac{\partial \varphi_3}{\partial k_y} \\ \frac{\partial \varphi_1}{\partial k_z} & \frac{\partial \varphi_2}{\partial k_z} & \frac{\partial \varphi_3}{\partial k_z} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_{1x} & a_{2x} & a_{3x} \\ a_{1y} & a_{2y} & a_{3y} \\ a_{1z} & a_{2z} & a_{3z} \end{vmatrix} = \quad (6)$$

$$= (\mathbf{a}_1 [\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]) \equiv v_0 :$$

(3)–(6) բանաձևերից կստանանք՝

$$\Omega_0 = \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_2 \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_3 \frac{1}{v_0} = \frac{(2\pi)^3}{v_0}, \text{ կամ } v_0 \Omega_0 = (2\pi)^3 :$$

1.18. Պարզ խորանարդային ցանցի հիմնական վեկտորները տրվում են

$$\mathbf{a}_1 = a \mathbf{i}, \quad \mathbf{a}_2 = a \mathbf{j}, \quad \mathbf{a}_3 = a \mathbf{k}$$

արտահայտություններով, որտեղ \mathbf{i} -ն, \mathbf{j} -ն և \mathbf{k} -ն միավոր վեկտորներ են

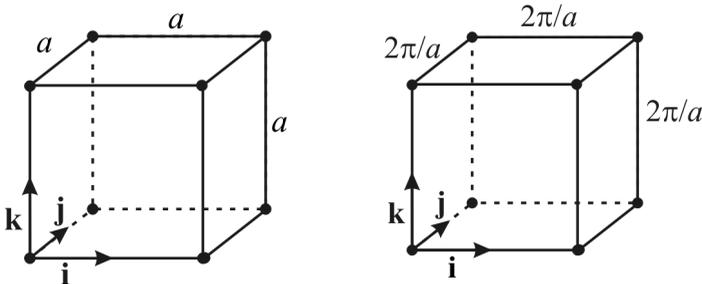
(նկ. 1.14), իսկ տարրական բջջի ծավալը՝ $v_0 = a^3$:

Հակադարձ ցանցի հիմնական վեկտորների սահմանման համաձայն՝

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_1 &= 2\pi \frac{[\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]}{v_0} = \frac{2\pi}{a^3} [a\mathbf{j}, a\mathbf{k}] = \frac{2\pi}{a} [\mathbf{j}, \mathbf{k}] = \frac{2\pi}{a} \mathbf{i}, \\ \mathbf{g}_2 &= 2\pi \frac{[\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1]}{v_0} = \frac{2\pi}{a^3} [a\mathbf{k}, a\mathbf{i}] = \frac{2\pi}{a} [\mathbf{k}, \mathbf{i}] = \frac{2\pi}{a} \mathbf{j}, \\ \mathbf{g}_3 &= 2\pi \frac{[\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2]}{v_0} = \frac{2\pi}{a^3} [a\mathbf{i}, a\mathbf{j}] = \frac{2\pi}{a} [\mathbf{i}, \mathbf{j}] = \frac{2\pi}{a} \mathbf{k} : \end{aligned} \quad (1)$$

(1) բանաձևերից հետևում է, որ հակադարձ ցանցը նույնպես խորանարդային է՝ $|\mathbf{g}_1| = |\mathbf{g}_2| = |\mathbf{g}_3| = 2\pi/a$ ցանցի հաստատունով և տարրական բջջի

$\Omega_0 = (\mathbf{g}_1 [\mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3]) = (2\pi/a)^3 = (2\pi)^3 / v_0$ ծավալով:



Նկ.1.14

1.19. Ուղիղ ցանցի հիմնական վեկտորները տրվում են հետևյալ արտահայտություններով (նկ. 1.15)

$$\mathbf{a}_1 = a\mathbf{i}, \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}\mathbf{i} + \frac{\sqrt{3}a}{2}\mathbf{j}, \quad \mathbf{a}_3 = c\mathbf{k} :$$

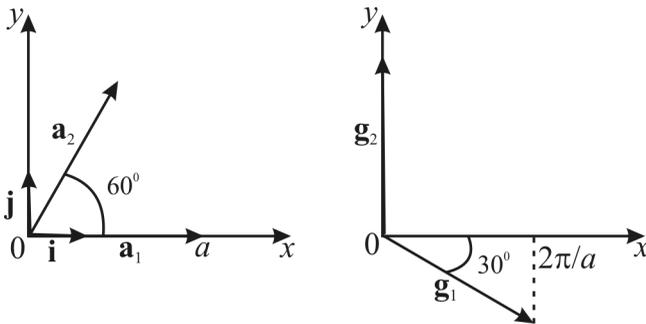
Տարրական բջջի ծավալը՝

$$\begin{aligned} v_0 &= (\mathbf{a}_1 [\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]) = \frac{1}{2} a^2 c \mathbf{i} [(\mathbf{i} + \sqrt{3}\mathbf{j}), \mathbf{k}] = \\ &= \frac{1}{2} a^2 c \{(\mathbf{i}[\mathbf{i}, \mathbf{k}]) + \sqrt{3}(\mathbf{i}[\mathbf{j}, \mathbf{k}])\} = \frac{1}{2} a^2 c \{-(\mathbf{i}\mathbf{j}) + \sqrt{3}(\mathbf{i}\mathbf{i})\} = a^2 c \frac{\sqrt{3}}{2} : \end{aligned}$$

Հակադարձ ցանցի հիմնական վեկտորները՝

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_1 &= 2\pi \frac{[\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]}{v_0} = 2\pi \frac{\frac{a}{2}c [\mathbf{i} + \sqrt{3}\mathbf{j}, \mathbf{k}]}{a^2 c \frac{\sqrt{3}}{2}} = 2\pi \frac{1}{\sqrt{3}a} ([\mathbf{i}, \mathbf{k}] + \sqrt{3}[\mathbf{j}, \mathbf{k}]) = \\ &= \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} (-\mathbf{j} + \sqrt{3}\mathbf{i}) = \frac{2\pi}{a} \left(\mathbf{i} - \frac{1}{\sqrt{3}}\mathbf{j} \right), \end{aligned}$$

$$\mathbf{g}_2 = 2\pi \frac{[\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1]}{v_0} = 2\pi \frac{ac [\mathbf{k}, \mathbf{i}]}{a^2 c \frac{\sqrt{3}}{2}} = \frac{4\pi}{a} \frac{\mathbf{j}}{\sqrt{3}},$$



Նկ.1.15

$$\mathbf{g}_3 = 2\pi \frac{[\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2]}{v_0} = 2\pi \frac{a \frac{a}{2} [\mathbf{i}, \mathbf{i} + \sqrt{3}\mathbf{j}]}{a^2 c \frac{\sqrt{3}}{2}} = \frac{2\pi}{c} [\mathbf{i}, \mathbf{j}] = \frac{2\pi}{c} \mathbf{k} :$$

Դժվար չէ համոզվել, որ $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2|$: Իրոք,

$$\mathbf{a}_2^2 = \frac{a^2}{4} \mathbf{i}^2 + 2 \frac{a^2}{4} \sqrt{3} (\mathbf{i} \mathbf{j}) + \frac{3}{4} a^2 \mathbf{j}^2 = a^2 \equiv \mathbf{a}_1^2 :$$

Նույն կերպ՝

$$\mathbf{g}_2^2 = \left(\frac{2\pi}{a} \cdot 2 \cdot \frac{1}{\sqrt{3}} \right)^2 = \left(\frac{2\pi}{a} \right)^2 \cdot \frac{4}{3},$$

$$\mathbf{g}_1^2 = \left(\frac{2\pi}{a} \right)^2 \left(\mathbf{i} - \frac{1}{\sqrt{3}} \mathbf{j} \right)^2 = \left(\frac{2\pi}{a} \right)^2 \left(\mathbf{i} - 2(\mathbf{i} \mathbf{j}) \frac{1}{\sqrt{3}} + \frac{1}{3} \mathbf{j} \right) = \left(\frac{2\pi}{a} \right)^2 \frac{4}{3},$$

այսինքն՝ $|\mathbf{g}_1| = |\mathbf{g}_2|$:

Այսպիսով՝ վեցամկյուն ցանցի հակադարձ ցանցը նույնպես վեցամկյուն ցանց է, որի \mathbf{g}_1 և \mathbf{g}_2 հիմնական վեկտորները միմյանց հետ կազմում են 120° անկյուն:

1.20. Ծավալակենտրոն խորանարդային ցանցի հիմնական վեկտորները՝

$$\mathbf{c}_1 = \frac{1}{2} (-\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3) = \frac{a}{2} (-\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k}),$$

$$\mathbf{c}_2 = \frac{1}{2} (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3) = \frac{a}{2} (\mathbf{i} - \mathbf{j} + \mathbf{k}),$$

$$\mathbf{c}_3 = \frac{1}{2} (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_3) = \frac{a}{2} (\mathbf{i} + \mathbf{j} - \mathbf{k}),$$

որտեղ \mathbf{a}_1 -ը, \mathbf{a}_2 -ը և \mathbf{a}_3 -ը տարրական խորանարդի հիմնական վեկտորներն են՝ $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = |\mathbf{a}_3| \equiv a$, իսկ $v_0 = (\mathbf{c}_1 [\mathbf{c}_2, \mathbf{c}_3]) = a^3/2$ տարրական բջջի ծավալն է :

Հակադարձ ցանցի հիմնական վեկտորների համար կստանանք՝

$$\begin{aligned}
 \mathbf{g}_1 &= 2\pi \frac{[\mathbf{c}_2, \mathbf{c}_3]}{v_0} = 2\pi \frac{\frac{a^2}{4} [\mathbf{i} - \mathbf{j} + \mathbf{k}, \mathbf{i} + \mathbf{j} - \mathbf{k}]}{\frac{a^3}{2}} = \\
 &= \frac{1}{2} \frac{2\pi}{a} ([\mathbf{i}, \mathbf{i}] + [\mathbf{i}, \mathbf{j}] - [\mathbf{i}, \mathbf{k}] - [\mathbf{j}, \mathbf{i}] - [\mathbf{j}, \mathbf{j}] + [\mathbf{j}, \mathbf{k}] + [\mathbf{k}, \mathbf{i}] + [\mathbf{k}, \mathbf{j}] - [\mathbf{k}, \mathbf{k}]) = \\
 &= \frac{2\pi}{a} \frac{1}{2} (2\mathbf{k} + 2\mathbf{j}) = \frac{2\pi}{a} (\mathbf{j} + \mathbf{k}), \\
 \mathbf{g}_2 &= 2\pi \frac{[\mathbf{c}_3, \mathbf{c}_1]}{v_0} = 2\pi \frac{\frac{a^2}{4} [\mathbf{i} + \mathbf{j} - \mathbf{k}, -\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k}]}{\frac{a^3}{2}} = \\
 &= \frac{1}{2} \frac{2\pi}{a} (-[\mathbf{i}, \mathbf{i}] + [\mathbf{i}, \mathbf{j}] + [\mathbf{i}, \mathbf{k}] - [\mathbf{j}, \mathbf{i}] + [\mathbf{j}, \mathbf{j}] + [\mathbf{j}, \mathbf{k}] + [\mathbf{k}, \mathbf{i}] - [\mathbf{k}, \mathbf{j}] - [\mathbf{k}, \mathbf{k}]) = \\
 &= \frac{2\pi}{a} \frac{1}{2} (2\mathbf{k} + 2\mathbf{i}) = \frac{2\pi}{a} (\mathbf{i} + \mathbf{k}), \\
 \mathbf{g}_3 &= 2\pi \frac{[\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2]}{v_0} = 2\pi \frac{\frac{a^2}{4} [-\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k}, \mathbf{i} - \mathbf{j} + \mathbf{k}]}{\frac{a^3}{2}} = \\
 &= \frac{1}{2} \frac{2\pi}{a} (-[\mathbf{i}, \mathbf{i}] + [\mathbf{i}, \mathbf{j}] - [\mathbf{i}, \mathbf{k}] + [\mathbf{j}, \mathbf{i}] - [\mathbf{j}, \mathbf{j}] + [\mathbf{j}, \mathbf{k}] + [\mathbf{k}, \mathbf{i}] - [\mathbf{k}, \mathbf{j}] + [\mathbf{k}, \mathbf{k}]) = \\
 &= \frac{2\pi}{a} \frac{1}{2} (2\mathbf{j} + 2\mathbf{i}) = \frac{2\pi}{a} (\mathbf{i} + \mathbf{j}),
 \end{aligned}$$

որոնք տեսքով համընկնում են նիստակենտրոն ցանցի հիմնական վեկտորների արտահայտությունների հետ (տես խնդիր 1.21), ընդ որում՝ հակադարձ տարածության մեջ տարրական խորանարդի հիմնական վեկտորների մոդուլները՝ $|\mathbf{g}_1| = |\mathbf{g}_2| = |\mathbf{g}_3| = 2\pi/a$:

1.21. Նիստակենտրոն խորանարդային ցանցի հիմնական վեկտորները՝

$$\mathbf{c}_1 = \frac{1}{2}(\mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3) = \frac{a}{2}(\mathbf{j} + \mathbf{k}),$$

$$\mathbf{c}_2 = \frac{1}{2}(\mathbf{a}_3 + \mathbf{a}_1) = \frac{a}{2}(\mathbf{k} + \mathbf{i}),$$

$$\mathbf{c}_3 = \frac{1}{2}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2) = \frac{a}{2}(\mathbf{i} + \mathbf{j}),$$

որտեղ \mathbf{a}_1 -ը, \mathbf{a}_2 -ը և \mathbf{a}_3 -ը տարրական խորանարդի հիմնական վեկտորներն են՝ $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = |\mathbf{a}_3| \equiv a$:

Հակադարձ ցանցի հիմնական վեկտորների համար կստանանք՝

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_1 &= 2\pi \frac{[\mathbf{c}_2, \mathbf{c}_3]}{(\mathbf{c}_1 [\mathbf{c}_2, \mathbf{c}_3])} = 2\pi \frac{\frac{a^2}{4} [\mathbf{k} + \mathbf{i}, \mathbf{i} + \mathbf{j}]}{\frac{a^3}{4}} = \\ &= \frac{2\pi}{a} ([\mathbf{k}, \mathbf{i}] + [\mathbf{k}, \mathbf{j}] + [\mathbf{i}, \mathbf{i}] + [\mathbf{i}, \mathbf{j}]) = \frac{2\pi}{a} (\mathbf{j} - \mathbf{i} + \mathbf{k}), \\ \mathbf{g}_2 &= 2\pi \frac{[\mathbf{c}_3, \mathbf{c}_1]}{(\mathbf{c}_1 [\mathbf{c}_2, \mathbf{c}_3])} = 2\pi \frac{\frac{a^2}{4} [\mathbf{i} + \mathbf{j}, \mathbf{j} + \mathbf{k}]}{\frac{a^3}{4}} = \\ &= \frac{2\pi}{a} ([\mathbf{i}, \mathbf{j}] + [\mathbf{i}, \mathbf{k}] + [\mathbf{j}, \mathbf{j}] + [\mathbf{j}, \mathbf{k}]) = \frac{2\pi}{a} (\mathbf{k} - \mathbf{j} + \mathbf{i}), \\ \mathbf{g}_3 &= \frac{2\pi}{a} (\mathbf{i} + \mathbf{j} - \mathbf{k}) : \end{aligned} \tag{1}$$

(1) արտահայտություններով տրվող $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3$ վեկտորները տեսքով համընկնում են ծավալակենտրոն խորանարդային ցանցի հիմնական վեկտորների հետ (տես խնդիր 1.20):

Այսպիսով՝ նիստակենտրոն խորանարդային ցանցի հակադարձ ցանցը ծավալակենտրոն խորանարդային ցանց է:

1.22. Եռանկյուն համակարգին պատկանող ցանցում $a_1 = a_2 = a_3$ և $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$: Ուղիղ և հակադարձ ցանցերի հիմնական վեկտորների միջև կապերից (տես խնդիր 1.15) հետևում է, որ

$$|\mathbf{g}_1| = |\mathbf{g}_2| = |\mathbf{g}_3| \quad \text{և} \quad \alpha^* = \beta^* = \gamma^*,$$

որտեղ α^* -ն, β^* -ն և γ^* -ն հակադարձ ցանցի հիմնական վեկտորների միջև անկյուններն են:

Տարրական բջջի ծավալը՝

$$v_0 = a_1^3 \sqrt{1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha} \approx 121 \text{ \AA}^3,$$

հակադարձ ցանցի հիմնական վեկտորի մոդուլը՝

$$|\mathbf{g}_1| = 2\pi \frac{|\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3|}{v_0} = 2\pi \frac{|a_2 a_3 \sin \alpha|}{v_0} = 2\pi \frac{a_1^2 \sin \alpha}{v_0} \approx 1,51 \text{ \AA}^{-1},$$

երկու հիմնական վեկտորների կազմած անկյունը (տես խնդիր 1.16)՝

$$\begin{aligned} \cos \alpha^* &= \frac{\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha}{\sin \beta \sin \gamma} = \frac{\cos^2 \alpha - \cos \alpha}{\sin^2 \alpha} = \frac{\cos \alpha (\cos \alpha - 1)}{(1 - \cos \alpha)(1 + \cos \alpha)} = \\ &= -\frac{\cos \alpha}{1 + \cos \alpha} = -\frac{\cos 46^\circ 6'}{1 + \cos 46^\circ 6'} = -0,409, \quad \alpha^* = 114^\circ 5': \end{aligned}$$

1.23. Հակադարձ ցանցի հիմնական վեկտորների սահմանման համաձայն՝

$$\mathbf{g}_1 = 2\pi \frac{[\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]}{v_0}, \quad \mathbf{g}_2 = 2\pi \frac{[\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1]}{v_0}, \quad \mathbf{g}_3 = 2\pi \frac{[\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2]}{v_0},$$

որտեղ v_0 -ն ցանցի տարրական բջջի ծավալն է.

$$v_0 = (\mathbf{a}_1 [\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]) = a_1^2 a_3 \frac{\sqrt{3}}{2}:$$

Ուղիղ ցանցի վեկտորներն են՝

$$\mathbf{a}_1 = a_1 \mathbf{i}, \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a_1}{2} \mathbf{i} + \frac{\sqrt{3} a_1}{2} \mathbf{j}, \quad \mathbf{a}_3 = a_3 \mathbf{k},$$

որտեղ \mathbf{i} -ն, \mathbf{j} -ն, և \mathbf{k} -ն ուղղանկյուն կոորդինատային առանցքների միավոր վեկտորներն են:

$$\mathbf{g}_1 = 2\pi \frac{2a_3}{a_1^2 a_3 \sqrt{3}} \frac{a_1}{2} [\mathbf{i} + \sqrt{3}\mathbf{j}, \mathbf{k}] = 2\pi \frac{1}{a_1 \sqrt{3}} ([\mathbf{i}, \mathbf{k}] + \sqrt{3}[\mathbf{j}, \mathbf{k}]) = \frac{2\pi}{a_1} \left(\mathbf{i} + \frac{1}{\sqrt{3}} \mathbf{j} \right),$$

$$\mathbf{g}_2 = 2\pi \frac{2a_1 a_3}{a_1^2 a_3 \sqrt{3}} [\mathbf{k}, \mathbf{i}] = \frac{4\pi}{a_1 \sqrt{3}} \mathbf{j},$$

$$\mathbf{g}_3 = 2\pi \frac{2a_1 a_1 [\mathbf{i}, \mathbf{i} + \sqrt{3}\mathbf{j}]}{a_1^2 a_3 \sqrt{3} \cdot 2} = \frac{2\pi}{a_3 \sqrt{3}} ([\mathbf{i}, \mathbf{i}] + \sqrt{3}[\mathbf{i}, \mathbf{j}]) = \frac{2\pi}{a_3} \mathbf{k} :$$

$$|\mathbf{g}_1| = \frac{2\pi}{a_1} \sqrt{\mathbf{i}^2 + 2\mathbf{i} \frac{1}{\sqrt{3}} \mathbf{j} + \frac{1}{3} \mathbf{j}^2} = \frac{4\pi}{a_1 \sqrt{3}} \equiv |\mathbf{g}_2| = \frac{4 \cdot 3,14}{3,2 \cdot 1,73} \text{ \AA}^{-1} \approx 2,27 \text{ \AA}^{-1}$$

$$|\mathbf{g}_3| = \frac{2\pi}{a_3} = \frac{2 \cdot 3,14}{5,2} \text{ \AA}^{-1} \approx 1,21 \text{ \AA}^{-1} :$$

1.24. Հաշվենք (1) ինտեգրալը՝

$$J_{gg'} = \int_0^{L_x} e^{i(g-g')x} dx = \frac{e^{i(g-g')L_x} - 1}{i(g-g')} = \frac{e^{\frac{i2\pi}{a}(m-m')N_x a} - 1}{i \frac{2\pi}{a}(m-m')} = \frac{e^{i2\pi(m-m')N_x} - 1}{i \frac{2\pi}{a}(m-m')} : (2)$$

Եթե $m \neq m'$ (այսինքն՝ $g \neq g'$), ապա (2) արտահայտության համարիչը զրո է, իսկ եթե $m = m'$, ապա այն վերածվում է $0/0$ տիպի անորոշության: Ենթադրելով, որ $m - m' = \alpha \rightarrow 0$, (2) արտահայտությունից կստանանք՝

$$\frac{e^{i2\pi N_x \alpha} - 1}{i \frac{2\pi}{a} \alpha} \approx \frac{1 + i2\pi N_x \alpha + (i2\pi N_x \alpha)^2 + \dots - 1}{i \frac{2\pi}{a} \alpha} = a N_x \equiv L_x :$$

Հետևաբար՝ $m = m'$ ($g = g'$) դեպքում $J_{gg'} = L_x$:

Միավորելով $m \neq m'$ և $m = m'$ դեպքերը՝ կատանանք.

$$J_{gg'} = L_x \delta_{mm'} \equiv L_x \delta_{gg'} :$$

1.25. Ինտեգրալում կատարենք փոփոխականի փոխարինում.

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}' + \mathbf{l},$$

որտեղ \mathbf{l} -ը ցանցի կամայական տեղափոխության վեկտոր է:

$$\int d\mathbf{r} f(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \int d\mathbf{r}' f(\mathbf{r}' + \mathbf{l}) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}'+\mathbf{l})} = \int d\mathbf{r}' f(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}'} e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}}, \quad (1)$$

քանի որ $f(\mathbf{r}' + \mathbf{l}) = f(\mathbf{r}')$:

(1) արտահայտությունն արտագրենք հետևյալ տեսքով՝

$$\int d\mathbf{r} f(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} (e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}} - 1) = 0 :$$

Եթե \mathbf{k} -ն հսկադարձ ցանցի վեկտոր չէ, ապա $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{l}) \neq 1$, հետևաբար՝

$$\int d\mathbf{r} f(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = 0 :$$

1.26. 1. Դիցուք՝ $\rho(\mathbf{r})$ -ը պարբերական ֆունկցիա է և ներկայացնում է կետային զանգվածների բաշխման խտությունը բյուրեղում՝

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{l}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{l}), \quad (1)$$

որտեղ \mathbf{l} -ը ցանցի տեղափոխության վեկտորն է, \mathbf{r} -ը՝ բյուրեղում կամայական կետի շառավիղ-վեկտորը:

$\rho(\mathbf{r})$ -ը պարբերական է ըստ ցանցի հիմնական վեկտորների, ուստի այն կարելի է ներկայացնել

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} \rho_{\mathbf{g}} e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}} \quad (2)$$

եռաչափի ֆուրիե-վերլուծության տեսքով, որտեղ \mathbf{g} -երը հսկադարձ ցանցի բոլոր հնարավոր վեկտորներն են:

$\rho_{\mathbf{g}}$ գործակիցները հաշվելու համար (2) առնչության երկու մասերը բազմապատկենք $e^{-i\mathbf{g}'\mathbf{r}}$ արտադրիչով և ինտեգրենք բյուրեղի V ծավալով՝

$$\int_V \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{g}'\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \sum_{\mathbf{g}} \rho_{\mathbf{g}} \int_V e^{i\mathbf{r}(\mathbf{g}-\mathbf{g}')} d\mathbf{r},$$

Հայտնի է, որ (տես խնդիր 1.28)

$$\int_V e^{i\mathbf{r}(\mathbf{g}-\mathbf{g}')} d\mathbf{r} = V \delta_{\mathbf{g}\mathbf{g}'},$$

հետևաբար՝

$$\int_V \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{g}'\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \sum_{\mathbf{g}} \rho_{\mathbf{g}} V \delta_{\mathbf{g}\mathbf{g}'} = V \rho_{\mathbf{g}'}, \quad \text{և} \quad \rho_{\mathbf{g}} = \frac{1}{V} \int_V \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{g}\mathbf{r}} d\mathbf{r} :$$

(1) առնչությամբ տրվող $\rho(\mathbf{r})$ ֆունկցիայի համար

$$\rho_{\mathbf{g}} = \frac{1}{V} \int_V \sum_{\mathbf{l}} \delta(\mathbf{r}-\mathbf{l}) e^{-i\mathbf{g}\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \frac{1}{V} \int_V \sum_{\mathbf{l}} e^{-i\mathbf{g}\mathbf{l}} : \quad (3)$$

Հակադարձ ցանցի \mathbf{g} վեկտորի հատկության համաձայն՝

$$\mathbf{g}\mathbf{l} = 2\pi \times \text{ամբողջ թիվ},$$

ուստի (3) արտահայտությունից կստանանք՝

$$\rho_{\mathbf{g}} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{l}} 1 = \frac{N}{V} = \frac{1}{v_0} :$$

Այսպիսով՝ (2) շարքը կարելի է ներկայացնել նաև հետևյալ տեսքով՝

$$\sum_{\mathbf{l}} \delta(\mathbf{r}-\mathbf{l}) = \sum_{\mathbf{g}} \frac{1}{v_0} e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}},$$

կամ

$$\sum_{\mathbf{g}} e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}} = v_0 \sum_{\mathbf{l}} \delta(\mathbf{r}-\mathbf{l}) : \quad (4)$$

(4) առնչության ձախ մասում գումարումը կատարվում է ըստ հակադարձ ցանցի բոլոր հանգույցների, իսկ աջ մասում՝ ըստ բյուրեղային ցանցի բոլոր հանգույցների:

2. (2) առնչությունն ապացուցելու համար (4) առնչության երկու մասերը բազմապատկենք $\exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r})$ արտադրիչով, որտեղ \mathbf{q} -ն կամայական ($[q] = \text{սմ}^{-1}$) վեկտոր է, և ինտեգրենք ամբողջ տարածությամբ.

$$\sum_{\mathbf{g}} \int e^{i\mathbf{r}(\mathbf{g}-\mathbf{q})} d\mathbf{r} = v_0 \sum_{\mathbf{l}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{l}} : \quad (5)$$

Հարկ է նկատի ունենալ, որ եթե \mathbf{q} -ն ընդունում է անընդհատ արժեքներ, ապա ամբողջ (անվերջ) տարածությամբ ինտեգրելիս կստանանք՝

$$\int_{(-\infty)} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} d\mathbf{r} = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{q}) : \quad (6)$$

(5) և (6) բանաձևերից հետևում է, որ

$$\sum_{\mathbf{g}} (2\pi)^3 \delta(\mathbf{g}-\mathbf{q}) = v_0 \sum_{\mathbf{l}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{l}} : \quad (7)$$

Նկատի ունենալով ուղիղ և հակադարձ ցանցերի տարրական բջիջների ծավալների միջև կապը՝ $\Omega_0 v_0 = (2\pi)^3$, (7) առնչությունից կստանանք՝

$$\sum_{\mathbf{l}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{l}} = \sum_{\mathbf{l}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{l}} = \Omega_0 \sum_{\mathbf{g}} \delta(\mathbf{g}-\mathbf{q}) \equiv \Omega_0 \sum_{\mathbf{g}} \delta(\mathbf{q}-\mathbf{g}) : \quad (8)$$

Հետաքրքիր է, որ (8) առնչությունը կարելի էր գրել անմիջապես (4) առնչությունն ապացուցելուց հետո, ելնելով ուղիղ և հակադարձ տարածությունների միջև առկա համաչափությունից ($\mathbf{l} \rightarrow \mathbf{g}$, $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{q}$, $v_0 \rightarrow \Omega_0$; $\mathbf{g} \rightarrow \mathbf{l}$, $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{r}$, $\Omega_0 \rightarrow v_0$):

1.27. Գրենք Ֆուրիեի շարքը $1/r$ մեծության համար.

$$\frac{1}{r} = \sum_{\mathbf{q}} A_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}, \quad r = |\mathbf{r}| : \quad (1)$$

Որոշենք ֆուրիե-վերլուծության $A_{\mathbf{q}}$ անհայտ գործակիցները: (1) շարքը բազմապատկենք $\exp(-i\mathbf{q}'\mathbf{r})$ արտադրիչով և ինտեգրենք բյուրեղի V ծավալով.

$$\int_V \frac{1}{r} e^{-i\mathbf{q}'\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \sum_{\mathbf{q}} A_{\mathbf{q}} \int_V e^{i\mathbf{r}(\mathbf{q}-\mathbf{q}')} d\mathbf{r} : \quad (2)$$

Ինչպես գիտենք (տես խնդիր 1.28)

$$\int_V e^{i\mathbf{r}(\mathbf{q}-\mathbf{q}')} d\mathbf{r} = V \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}, \quad (3)$$

որտեղ \mathbf{q} -ն և \mathbf{q}' -ը հակադարձ ցանցի կամայական վեկտորներ են:

Ձևափոխենք (2) հավասարման ձախ մասը.

$$\int_V \frac{1}{r} e^{-i\mathbf{q}'\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \int_0^{R(\rightarrow\infty)} \frac{1}{r} r^2 dr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi e^{-iq'r \cos\theta} \sin\theta d\theta \quad (|\mathbf{q}'| \equiv q'), \quad (4)$$

$$\int_0^\pi e^{-iq'r \cos\theta} \sin\theta d\theta = -\int_{+1}^{-1} e^{-iq'rx} dx = \frac{e^{-iq'r} - e^{iq'r}}{-iq'r} = 2 \frac{\sin(q'r)}{q'r}, \quad (5)$$

(4) և (5) արտահայտություններից հետևում է, որ

$$\int_V \frac{1}{r} e^{-i\mathbf{q}'\mathbf{r}} d\mathbf{r} = 4\pi \int_0^{R\rightarrow\infty} \frac{\sin(q'r)}{q'r} \cdot \frac{r^2 dr}{r} = \frac{4\pi}{q'} \int_0^{R\rightarrow\infty} \sin(q'r) dr: \quad (6)$$

(6) արտահայտության ինտեգրալը վերին սահմանի արժեքից կախված փոփոխվում է և չունի որոշակի արժեք: Այն հաշվենք հետևյալ եղանակով.

$$\int_0^{R\rightarrow\infty} \sin(q'r) dr = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^{R\rightarrow\infty} e^{-\varepsilon r} \sin(q'r) dr = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{q'}{\varepsilon^2 + q'^2} = \frac{1}{q'},$$

հետևաբար՝

$$\int_V \frac{1}{r} e^{-i\mathbf{q}'\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \frac{4\pi}{q'^2}: \quad (7)$$

(7) և (3) արտահայտությունները տեղադրելով (2) հավասարման մեջ՝ կստանանք ֆուրիե-վերլուծության գործակցի արտահայտությունը.

$$A_{\mathbf{q}'} = \frac{4\pi}{Vq'^2},$$

որը տեղադրելով (1) վերլուծության մեջ, կստանանք՝

$$\frac{1}{r} = \sum_{\mathbf{q}} A_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} = \frac{4\pi}{V} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{q^2} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}:$$

1.28. Ուղղանկյուն բյուրեղային ցանցի դեպքում (1) առնչությունը խնդիր 1.24-ի եռաչափ ընդհանրացումն է: Ապացուցենք այն բյուրեղային ցանցի կամայական համաչափության դեպքում:

Երկու՝ $\mathbf{g} = n_1\mathbf{g}_1 + n_2\mathbf{g}_2 + n_3\mathbf{g}_3$ և $\mathbf{g}' = m_1\mathbf{g}_1 + m_2\mathbf{g}_2 + m_3\mathbf{g}_3$ հակադարձ վեկտորների տարբերությունը՝

$$\mathbf{g} - \mathbf{g}' = (n_1 - m_1)\mathbf{g}_1 + (n_2 - m_2)\mathbf{g}_2 + (n_3 - m_3)\mathbf{g}_3 \equiv \mathbf{G} \quad (2)$$

վեկտորը նույնպես հակադարձ ցանցի վեկտոր է ($n_1 - m_1$, $n_2 - m_2$ և $n_3 - m_3$ ամբողջ գործակիցներ՝ բազմապատկած հակադարձ ցանցի \mathbf{g}_1 , \mathbf{g}_2 և \mathbf{g}_3 հիմնական վեկտորներով): $\exp(i\mathbf{G}\mathbf{r})$ ֆունկցիան պարբերական է ըստ \mathbf{r} -ի, ուստի (1) ինտեգրումը բյուրեղի V ծավալով կարելի է փոխարինել ինտեգրումով տարրական բջջի V_0 ծավալով՝ բազմապատկած տարրական բջիջների N թվով.

$$\int_V e^{i(\mathbf{g}-\mathbf{g}')\mathbf{r}} d\mathbf{r} \equiv \int_V e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}} d\mathbf{r} = N \int_{V_0} e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}} d\mathbf{r} : \quad (3)$$

(3) բանաձևում անցնենք ինտեգրման նոր փոփոխականների՝

$$\xi = \frac{1}{2\pi} \mathbf{g}_1 \mathbf{r}, \quad \eta = \frac{1}{2\pi} \mathbf{g}_2 \mathbf{r}, \quad \zeta = \frac{1}{2\pi} \mathbf{g}_3 \mathbf{r} : \quad (4)$$

Նկատի ունենալով ուղիղ և հակադարձ ցանցերի հիմնական վեկտորների միջև կապը՝ $\mathbf{g}_i \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$, հեշտ է տեսնել, որ

$$\mathbf{r} = \xi \mathbf{a}_1 + \eta \mathbf{a}_2 + \zeta \mathbf{a}_3,$$

կամ պրոյեկցիաներով՝

$$\begin{aligned} x &= \xi a_{1x} + \eta a_{2x} + \zeta a_{3x}, \\ y &= \xi a_{1y} + \eta a_{2y} + \zeta a_{3y}, \\ z &= \xi a_{1z} + \eta a_{2z} + \zeta a_{3z}, \end{aligned} \quad (5)$$

հետևաբար, երբ \mathbf{r} -ը փոփոխվում է V_0 ծավալում, (4) առնչություններով սրվող մեծությունները փոփոխվում են (0,1) տիրույթում: Այսպիսով՝

$$J_{\mathbf{g}\mathbf{g}'} = N \int_0^1 d\xi \int_0^1 d\eta \int_0^1 d\zeta e^{i2\pi[(n_1-m_1)\xi + (n_2-m_2)\eta + (n_3-m_3)\zeta]} J \left(\begin{matrix} x, y, z \\ \xi, \eta, \zeta \end{matrix} \right), \quad (6)$$

որտեղ $(x, y, z) \rightarrow (\xi, \eta, \zeta)$ (5) ձևափոխության յակոբյանը՝

$$J\left(\begin{array}{c} x, y, z \\ \xi, \eta, \zeta \end{array}\right) \equiv \left| \begin{array}{ccc} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \eta} \\ \frac{\partial x}{\partial \zeta} & \frac{\partial y}{\partial \zeta} & \frac{\partial z}{\partial \zeta} \end{array} \right| = \left| \begin{array}{ccc} a_{1x} & a_{1y} & a_{1z} \\ a_{2x} & a_{2y} & a_{2z} \\ a_{3x} & a_{3y} & a_{3z} \end{array} \right| = (\mathbf{a}_1 [\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]) \equiv v_0 : (7)$$

(6) և (7) արտահայտություններից հետևում է, որ

$$\begin{aligned} J_{\mathbf{g}\mathbf{g}'} &= N v_0 \int_0^1 d\xi e^{i2\pi(n_1-m_1)\xi} \int_0^1 d\eta e^{i2\pi(n_2-m_2)\eta} \int_0^1 d\zeta e^{i2\pi(n_3-m_3)\zeta} = \\ &= V \delta_{n_1 m_1} \delta_{n_2 m_2} \delta_{n_3 m_3} : \end{aligned} \quad (8)$$

(8) առնչությունը զրոյից տարբեր է միայն այն դեպքում, երբ $n_1 = m_1$, $n_2 = m_2$ և $n_3 = m_3$, այսինքն, երբ $\mathbf{G} = 0$ կամ $\mathbf{g} = \mathbf{g}'$ (տես (2) բանաձևը): Այսպիսով՝

$$J_{\mathbf{g}\mathbf{g}'} = V \delta_{\mathbf{G}0} \equiv V \delta_{\mathbf{g}\mathbf{g}'} :$$

1.29. Միլերյան ցուցիչների սահմանման համաձայն՝

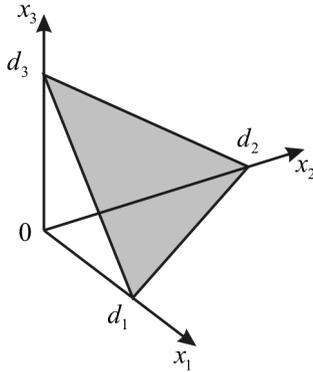
$$\frac{d_1}{a_1} : \frac{d_2}{a_2} : \frac{d_3}{a_3} = \frac{1}{h} : \frac{1}{k} : \frac{1}{l}, \quad (1)$$

որտեղ a_1 -ը, a_2 -ը և a_3 -ը ցանցի հաստատուններն են, իսկ d_1 -ը, d_2 -ը և d_3 -ը համապատասխանաբար x_1 , x_2 և x_3 կոորդինատային առանցքներից (hkl) հարթությամբ հատված երկարությունները (նկ. 1.16):

(1) առնչությունից հետևում է, որ (125) հարթության համար

$$\frac{d_1}{a_1} : \frac{d_2}{a_2} : \frac{d_3}{a_3} = 1 : \frac{1}{2} : \frac{1}{5} \equiv 10 : 5 : 2,$$

հետևաբար՝



Նկ.1.16

$$\frac{d_1}{a_1} = 10, \quad d_1 = 10 \quad (a_1\text{-ով արտահայտված})$$

$$\frac{d_2}{a_2} = 5, \quad d_2 = 5 \quad (a_2\text{-ով արտահայտված})$$

$$\frac{d_3}{a_3} = 2, \quad d_3 = 2 \quad (a_3\text{-ով արտահայտված})$$

1.30. Համաձայն միլերյան ցուցիչների սահմանման՝

$$\frac{d_1}{a_1} : \frac{d_2}{a_2} : \frac{d_3}{a_3} = \frac{1}{h} : \frac{1}{k} : \frac{1}{l} :$$

Ըստ խնդրի տվյալների՝

$$\frac{d_1}{a_1} = \frac{9}{3} = 3, \quad \frac{d_2}{a_2} = \frac{10}{5} = 2, \quad \frac{d_3}{a_3} = \frac{30}{6} = 5,$$

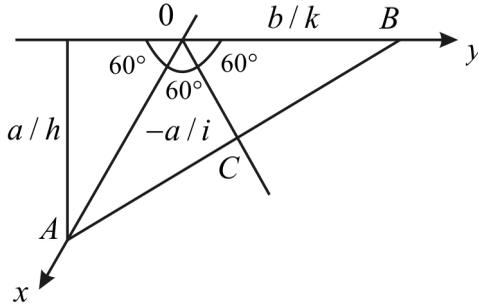
հետևաբար՝

$$\frac{1}{h} : \frac{1}{k} : \frac{1}{l} = 3 : 2 : 5 = \frac{1}{10} : \frac{1}{15} : \frac{1}{6},$$

որտեղից, բաց թողնելով ընդհանուր բազմապատկիչը՝ 30-ը, կստանանք՝

$$h = 10, \quad k = 15, \quad l = 6, \quad \Rightarrow \quad (10, 15, 6):$$

1.31. Վեցանկյուն համակարգում $a = b \neq c$, հետևաբար՝ $OB = b/k \equiv \equiv a/k$, $OA = a/h$, իսկ OAB եռանկյան մակերեսը հավասար է AOC և COB եռանկյունների մակերեսների գումարին (նկ.1.17)



Նկ.1.17

$$S_{OAB} = \frac{1}{2} \frac{a}{h} \frac{a}{k} \sin 60^\circ = -\frac{1}{2} \frac{a}{h} \frac{a}{i} \sin 60^\circ - \frac{1}{2} \frac{a}{k} \frac{a}{i} \sin 60^\circ,$$

կամ

$$\frac{1}{hk} + \frac{1}{hi} + \frac{1}{ki} = 0: \quad (1)$$

(1) առնչությունը բազմապատկելով hkl արտադրյալով՝ կստանանք.

$$h + k + i = 0:$$

1.32. Գրենք տարածության երկու տրված կետերով $[[h_1k_1l_1]]$ և $[[h_2k_2l_2]]$ հանգույցներով անցնող ուղղի հավասարումը՝

$$\frac{x - x_1}{x_2 - x_1} = \frac{y - y_1}{y_2 - y_1} = \frac{z - z_1}{z_2 - z_1}: \quad (1)$$

Հանգույցների $x_1, x_2; y_1, y_2; z_1, z_2$ կոորդինատները համեմատական են դրանց միլերյան $h_1, h_2; k_1, k_2$ և l_1, l_2 ցուցիչներին, ուստի (1) բանաձևերի փոխարեն կստանանք՝

$$\frac{x-h_1}{h_2-h_1} = \frac{y-k_1}{k_2-k_1} = \frac{z-l_1}{l_2-l_1} : \quad (2)$$

(2) բանաձևերում հայտարարներում գրված մեծությունները համեմատական են ուղղի ուղղորդ կոսինուսների: Քանի որ այդ մեծություններն ամբողջ թվեր են, ապա հենց դրանք էլ կլինեն ուղղի ցուցիչները:

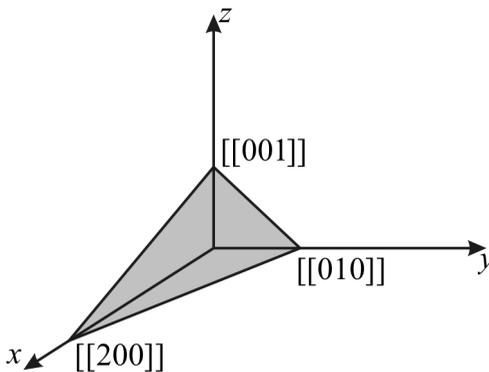
Այսպիսով՝

$$h_2 - h_1 = 0 - 1 = -1; \quad k_2 - k_1 = 0 - 0 = 0; \quad l_2 - l_1 = 1 - 0 = 1,$$

ուստի $[[100]]$ և $[[001]]$ հանգույցներով անցնող ուղղի ցուցիչներն են՝ $[\bar{1}01]$:

1.33. Ի եղանակ: Եթե հարթությանը պատկանող հանգույցները միաժամանակ մաս կտորդինատային առանցքների վրա են, ապա հայտնի են այն հատվածները, որոնք տվյալ հարթությունը հատում է կտորդինատային առանցքներից: Ջննարկվող դեպքում հարթությունը կտորդինատային առանցքներից հատում է $2a$, $1a$ և $1a$ հատվածներ (a -ն ցանցի հաստատունն է, նկ.1.18): Միլերյան ցուցիչների սահմանման համաձայն՝

$$\frac{2a}{a} : \frac{1a}{a} : \frac{1a}{a} = \frac{1}{h} : \frac{1}{k} : \frac{1}{l} \quad \text{կամ} \quad \frac{1}{\frac{1}{2}} : \frac{1}{1} : \frac{1}{1} = \frac{1}{h} : \frac{1}{k} : \frac{1}{l} :$$



Նկ.1.18

Առանձնացնենք ամենափոքր ընդհանուր բաժանարարը՝

$$\frac{1}{\frac{1}{2}} : \frac{1}{\frac{1}{2}} : \frac{1}{\frac{1}{2}} = \frac{1}{h} : \frac{1}{k} : \frac{1}{l},$$

որտեղից՝ $h = 1, k = 2, l = 2$, այսինքն՝ հարթության միլերյան ցուցիչներն են՝ (122) :

II եղանակ: Ընդհանուր դեպքում, երբ հայտնի հանգույցները կոորդինատային առանցքների վրա չեն, օգտվում ենք այն փաստից, որ միլերյան ցուցիչները հավասար են հարթության հավասարման մեջ փոփոխականների ամենափոքր ամբողջ գործակիցներին:

Երեք՝ (x_1, y_1, z_1) , (x_2, y_2, z_2) և (x_3, y_3, z_3) տրված կետերով անցնող հարթության հավասարումը հետևյալն է.

$$\begin{vmatrix} x - x_1 & y - y_1 & z - z_1 \\ x_2 - x_1 & y_2 - y_1 & z_2 - z_1 \\ x_3 - x_1 & y_3 - y_1 & z_3 - z_1 \end{vmatrix} = 0, \quad (1)$$

որտեղ $x_1, y_1, \dots, y_3, z_3$ մեծությունները համեմատական են հանգույցների կոորդինատներին:

Կոորդինատների կոնկրետ արժեքները տեղադրելով (1) որոշիչում՝ կստանանք.

$$\begin{aligned} 0 &= \begin{vmatrix} x-2 & y & z \\ -2 & 1 & 0 \\ -2 & 0 & 1 \end{vmatrix} = (x-2) \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} - y \begin{vmatrix} -2 & 0 \\ -2 & 1 \end{vmatrix} + z \begin{vmatrix} -2 & 1 \\ -2 & 0 \end{vmatrix} = \\ &= (x-2) - y(-2) + z(2) = 0 \end{aligned}$$

կամ

$$x + 2y + 2z = 2,$$

որտեղ x -ի, y -ի և z -ի գործակիցները՝ (122) միլերյան ցուցիչները, նկարագրում են տրված երեք կետերով անցնող հարթությունը:

1.34. Եթե \mathbf{r} -ով նշանակենք հարթության կամայական կետի շառավիղ-վեկտորը, որի սկիզբը կոորդինատների սկզբնակետում է, ապա հարթության հավասարումը կգրվի

$$\mathbf{rn} = d \quad (1)$$

տեսքով, որտեղ \mathbf{n} -ը հարթության (դրական) նորմալն է, իսկ d -ն՝ կոորդինատների սկզբնակետից հարթությանն իջեցված ուղղահայացի երկարությունը: (hkl) հարթությունների ընտանիքի համար $d = d_{hkl} = 2\pi/|\mathbf{g}_{hkl}|$: Նկատի ունենալով, որ

$$\mathbf{r} = \mathbf{ix} + \mathbf{jy} + \mathbf{kz} \quad \text{և} \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{g}_{hkl}}{|\mathbf{g}_{hkl}|},$$

(1) բանաձևից կատանանք՝

$$(\mathbf{ix} + \mathbf{jy} + \mathbf{kz})(h\mathbf{g}_1 + k\mathbf{g}_2 + l\mathbf{g}_3) = 2\pi : \quad (2)$$

$\mathbf{g}_i \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$ պայմանի համաձայն, (2) բանաձևում զրոյից տարբեր կլինեն հետևյալ արտադրյալները (նկատի ունենանք, որ $a_1 = a_2 = a_3$).

$$\mathbf{ig}_1 = \frac{2\pi}{a_1}; \quad \mathbf{jg}_2 = \frac{2\pi}{a_1}; \quad \mathbf{kg}_3 = \frac{2\pi}{a_1}, \quad (3)$$

ուստի (2) և (3) առնչություններից հետևում է, որ

$$xh \frac{2\pi}{a_1} + yk \frac{2\pi}{a_1} + zl \frac{2\pi}{a_1} = 2\pi$$

կամ

$$hx + ky + lz = a_1 :$$

Եթե $y = z = 0$, ապա հարթությունն x առանցքը հատում է $x_1 = a_1/h$ կետում, այսինքն՝ $x_1/a_1 = 1/h$: Եթե $x = y = 0$, ապա $z_1/a_1 = 1/l$ և երբ $x = z = 0$, ապա $y_1/a_1 = 1/k$, հետևաբար՝ h -ը, k -ն և l -ը հարթության միլերյան ցուցիչներն են:

1.35. Գրենք տրված երեք կետերով անցնող հարթության հավասարումը.

$$\begin{aligned}
0 &= \begin{vmatrix} x-x_1 & y-y_1 & z-z_1 \\ x_2-x_1 & y_2-y_1 & z_2-z_1 \\ x_3-x_1 & y_3-y_1 & z_3-z_1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} x-1 & y-1 & z-1 \\ 0 & -2 & 1 \\ -2 & -1 & 0 \end{vmatrix} = \\
&= (x-1) \begin{vmatrix} -2 & 1 \\ -1 & 0 \end{vmatrix} - (y-1) \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ -2 & 0 \end{vmatrix} + (z-1) \begin{vmatrix} 0 & -2 \\ -2 & -1 \end{vmatrix} = \\
&= (x-1) - 2(y-1) - 4(z-1)
\end{aligned}$$

կամ

$$x - 2y - 4z = 5 \Rightarrow -x + 2y + 4z = -5:$$

Որոնելի հարթության միլերյան ցուցիչներն են x -ի, y -ի և z -ի ամենափոքր ամբողջ գործակիցները՝ $(\bar{1}24)$:

1.36. ա. Հարթությունը x , y և z առանցքներից հատում է խորանարդի կողմն հավասար հատվածներ, ուստի

$$\frac{a_1}{a} = \frac{1}{h} \Rightarrow h = 1; \quad \frac{a_2}{a} = \frac{1}{k} \Rightarrow k = 1; \quad \frac{a_3}{a} = \frac{1}{l} \Rightarrow l = 1:$$

(ա) նկարում պատկերված հարթությունը (111)-ն է:

$$\text{բ. } a_1 = \infty \Rightarrow h = 0; \quad a_2 = a \Rightarrow k = 1; \quad a_3 = a \Rightarrow l = 1 \Rightarrow (011)$$

$$\text{գ. } a_1 = a \Rightarrow h = 1; \quad a_2 = a \Rightarrow k = 1; \quad a_3 = -a \Rightarrow l = -1 \Rightarrow (11\bar{1})$$

դ. Գծենք նշված հարթությանը զուգահեռ մի այլ հարթություն, որն անցնում է $x_1 = a$ կետով: Այն հատում է y առանցքը $y_1 = -a$ կետում, ուստի դրա միլերյան ցուցիչներն են՝ $a_1 = a \Rightarrow h = 1$; $a_2 = -a \Rightarrow k = -1$; և $a_3 = \infty \Rightarrow l = 0$, այսինքն՝ $(1\bar{1}0)$:

$$\text{ե. } a_1 = 2a, \quad a_2 = 2a, \quad a_3 = a, \quad \text{որտեղից՝ } \frac{a_1}{a} = 2 = \frac{1}{h}, \quad \frac{a_2}{a} = 2 = \frac{1}{k}$$

$$\text{և } \frac{a_3}{a} = 1 = \frac{1}{l} \Rightarrow h:k:l = \frac{1}{2}:\frac{1}{2}:1 \Rightarrow 1:1:2 \Rightarrow (112):$$

$$q. a_1 = a_2 = a_3 = 2a \Rightarrow h:k:l = \frac{1}{2} : \frac{1}{2} : \frac{1}{2} \Rightarrow 1:1:1 \Rightarrow (111):$$

1.37. Արտածենք ընդհանուր բանաձև (hkl) հարթության միավոր մակերեսին բաժին ընկնող հանգույցների թվի համար: Նշանակենք n_{hkl} -ով այդ մեծությունը, S_{hkl} -ով՝ այդ հարթության մակերեսը, իսկ N_{hkl} -ով՝ այդպիսի հարթությունների թիվը: Բյուրեղի մուշում հանգույցների N թիվը կարելի է ներկայացնել $n_{hkl} S_{hkl} N_{hkl}$ տեսքով՝

$$n_{hkl} S_{hkl} N_{hkl} = N,$$

որտեղից՝

$$n_{hkl} = \frac{N}{S_{hkl} N_{hkl}} = \frac{N d_{hkl}}{S_{hkl} d_{hkl} N_{hkl}} = \frac{N d_{hkl}}{V},$$

որտեղ V -ն մուշի ծավալն է, որը կարելի է ներկայացնել որպես տարրական բջիջների թվի՝ N_0 -ի և մեկ տարրական բջիջի ծավալի՝ v_0 -ի արտադրյալ՝ $V = N_0 v_0$: Այսպիսով՝

$$n_{hkl} = \frac{N d_{hkl}}{v_0 N_0}: \quad (1)$$

Նիստակենտրոն խորանարդային ցանցը պարզ ցանց է, ուստի $N_0 = N$, իսկ $v_0 = a^3 / 4$, որտեղ a -ն տարրական խորանարդի կողմն է: Այսպիսով՝ (1) առնչությունից

$$n_{hkl} = \frac{4d_{hkl}}{a^3} = \frac{4}{a^2 \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}: \quad (2)$$

(100) հարթության համար (2) բանաձևից հետևում է, որ

$$n_{100} = \frac{4}{\left(3,5 \overset{\circ}{\text{Å}}\right)^2} \approx 0,327 \cdot 10^{16} \text{ սմ}^{-2}:$$

$1 \text{ մմ}^2 = 10^{-2} \text{ սմ}^2$ մակերեսի վրա հանգույցների թիվը՝

$$N_{100} = S n_{100} = 0,327 \cdot 10^{16} \cdot 10^{-2} = 3,27 \cdot 10^{13} :$$

Նույն ձևով (111) հարթության համար կստանանք՝

$$N_{111} = S n_{111} = \frac{N_{100}}{\sqrt{3}} = 1,89 \cdot 10^{13} :$$

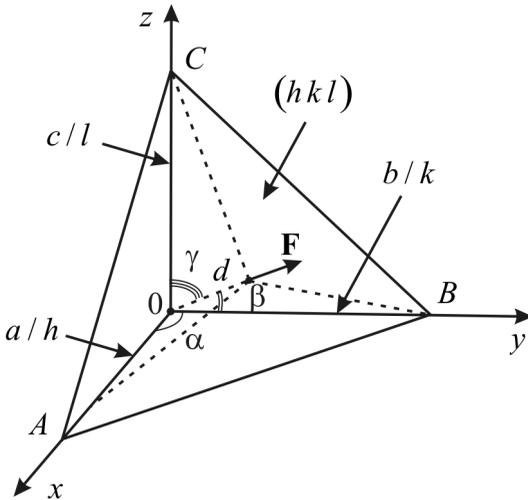
1.38. (hkl) հարթությանն ուղղահայաց միավոր վեկտորը՝

$$\mathbf{F} = \mathbf{i} \cos \alpha + \mathbf{j} \cos \beta + \mathbf{k} \cos \gamma, \quad (1)$$

որտեղ \mathbf{i} -ն, \mathbf{j} -ն, \mathbf{k} -ն կոորդինատային առանցքներով ուղղված միավոր ուղղորդ վեկտորներն են, իսկ α -ն, β -ն, γ -ն՝ \mathbf{F} վեկտորի՝ կոորդինատային առանցքների հետ կազմած անկյունները: Նկ.1.19-ից հետևում է, որ

$$\cos \alpha = \frac{d}{a_1/h} = \frac{hd}{a_1}, \quad \cos \beta = \frac{kd}{a_1}, \quad \cos \gamma = \frac{ld}{a_1}, \quad (2)$$

որտեղ h -ը, k -ն և l -ը ABC հարթության միլիերյան ցուցիչներն են, իսկ d -ն՝ այդ ցուցիչներով հարթությունների ընտանիքում միջհարթությունային հեռավորությունը: (1) և (2) բանաձևերից հետևում է, որ



Նկ.1.19

$$\mathbf{F} = \frac{hd}{a_1} \mathbf{i} + \frac{kd}{a_1} \mathbf{j} + \frac{ld}{a_1} \mathbf{k} = \frac{d}{a_1} (h\mathbf{i} + k\mathbf{j} + l\mathbf{k}):$$

Խորանարդային համակարգում $[hkl]$ ուղղությունը տրվում է $\mathbf{I} = h\mathbf{a}_1 + k\mathbf{a}_2 + l\mathbf{a}_3 = a_1 (h\mathbf{i} + k\mathbf{j} + l\mathbf{k})$ տեղափոխության վեկտորի միջոցով: (hkl) հարթության \mathbf{F} նորմալի և $[hkl]$ ուղղության միջև անկյունը որոշվում է հետևյալ բանաձևից՝

$$\begin{aligned} \cos \varphi &= \frac{\mathbf{I} \mathbf{F}}{|\mathbf{I}| |\mathbf{F}|} = \frac{a_1 (h\mathbf{i} + k\mathbf{j} + l\mathbf{k})}{a_1 \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \frac{d}{a_1} (h\mathbf{i} + k\mathbf{j} + l\mathbf{k}) = \\ &= \frac{d (h\mathbf{i} + k\mathbf{j} + l\mathbf{k})^2}{a_1 \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}: \end{aligned} \quad (3)$$

(2) բանաձևերից և $\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma = 1$ նույնությունից հետևում է, որ

$$d = \frac{a_1}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}: \quad (4)$$

(3) և (4) բանաձևերից հետևում է, որ

$$\cos \varphi = \frac{1}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} (h^2 + k^2 + l^2) = 1, \quad \varphi = 0,$$

այսինքն՝ $[hkl]$ ուղղությունն ուղղահայաց է (hkl) հարթությանը:

1.39. Խնդիր 1.38-ի համաձայն՝ $(h_1 k_1 l_1)$ և $(h_2 k_2 l_2)$ նիստերի նորմալները տրվում են (խորանարդային բյուրեղում $a_1 = a_2 = a_3$)

$$\mathbf{F}_1 = \frac{d_1}{a_1} (h_1 \mathbf{i} + k_1 \mathbf{j} + l_1 \mathbf{k}),$$

$$\mathbf{F}_2 = \frac{d_2}{a_1} (h_2 \mathbf{i} + k_2 \mathbf{j} + l_2 \mathbf{k})$$

բանաձևերով, հետևաբար՝

$$\mathbf{F}_1 \mathbf{F}_2 = \cos \varphi = \frac{d_1 d_2}{a_1^2} (h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2) \quad (1)$$

$$(\mathbf{i}\mathbf{j} = \mathbf{j}\mathbf{k} = \mathbf{k}\mathbf{l} = 0, \quad \mathbf{i}^2 = \mathbf{j}^2 = \mathbf{k}^2 = 1):$$

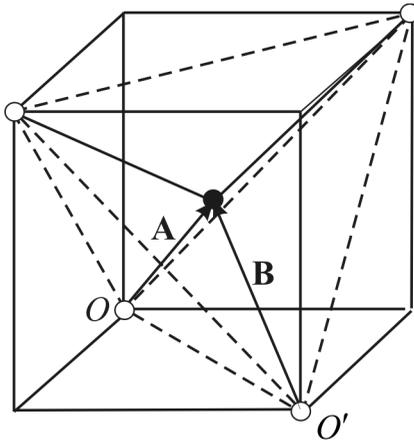
Նկ. 1.19-ից հետևում է, որ ($a_1 = a_2 = a_3$)

$$d^2 = \frac{a_1^2}{h^2} + \frac{a_1^2}{k^2} + \frac{a_1^2}{l^2} = \frac{a_1^2}{h^2 + k^2 + l^2}, \quad (2)$$

ուստի (1) և (2) բանաձևերից կստանանք՝

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

1.40. Օ հանգույցը խորանարդի կենտրոնական հանգույցին միացնող վեկտորը՝ $\mathbf{A}(a/4, a/4, a/4)$, որտեղ a -ն ավաստի տարրական խորանարդի կողմն է: Օ' հանգույցը խորանարդի կենտրոնական հանգույցին միացնող վեկտորը՝ $\mathbf{B}(-a/4, -a/4, a/4)$: Այս վեկտորների սկալյար արտադրյալը՝



Նկ.1.20

$$\mathbf{AB} = |\mathbf{A}| |\mathbf{B}| \cos \varphi = A_x B_x + A_y B_y + A_z B_z,$$

որտեղից՝

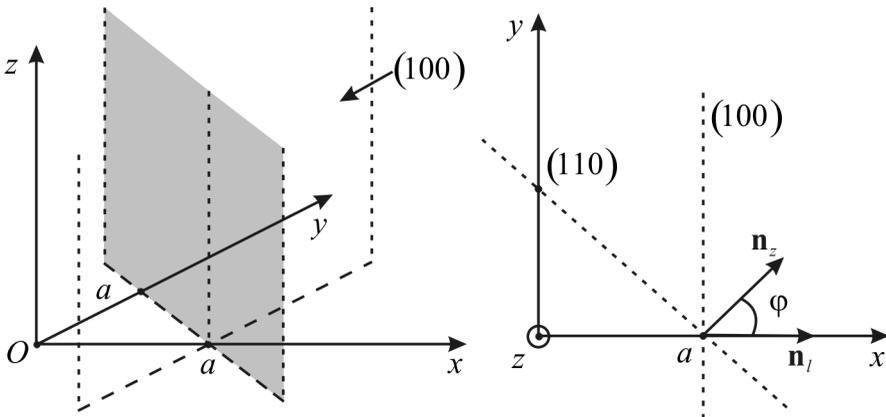
$$\cos \varphi = \frac{(a/4)(-a/4) + (a/4)(-a/4) + (a/4)(a/4)}{\sqrt{3\left(\frac{a}{4}\right)^2} \sqrt{3\left(\frac{a}{4}\right)^2}} = -\frac{1}{3}:$$

Այսպիսով՝

$$\varphi = \arccos\left(-\frac{1}{3}\right) \approx 109^\circ 28':$$

1.41. Խորանարդային բյուրեղում $(h_1 k_1 l_1)$ և $(h_2 k_2 l_2)$ միլերյան ցուցիչներով հարթությունների կազմած անկյունը որոշվում է հետևյալ բանաձևով (տես խնդիր 1.39)՝

$$\cos \varphi = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2} \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}}: \quad (1)$$



Նկ.1.21

Նկատի ունենալով, որ $(h_1k_1l_1) \equiv (100)$ և $(h_2k_2l_2) \equiv (110)$ (նկ. 1.21), (1) բանաձևից կատանանք՝

$$\cos \varphi = \frac{1}{\sqrt{1} \sqrt{1+1}} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \text{և} \quad \varphi = 45^\circ :$$

1.42. $(h_1k_1l_1)$ և $(h_2k_2l_2)$ հարթությունների միջև անկյունն այդ հարթություններին ուղղահայաց $\mathbf{g}_{h_1k_1l_1}$ և $\mathbf{g}_{h_2k_2l_2}$ հակադարձ վեկտորների կազմած անկյունն է, որը որոշվում է

$$\cos \varphi = \frac{(\mathbf{g}_{h_1k_1l_1} \mathbf{g}_{h_2k_2l_2})}{|\mathbf{g}_{h_1k_1l_1}| |\mathbf{g}_{h_2k_2l_2}|} \quad (1)$$

բանաձևով: $\mathbf{g}_{h_1k_1l_1}$ և $\mathbf{g}_{h_2k_2l_2}$ վեկտորներն արտահայտենք հակադարձ ցանցի հիմնական վեկտորների միջոցով.

$$\mathbf{g}_{h_1k_1l_1} = h_1\mathbf{g}_1 + k_1\mathbf{g}_2 + l_1\mathbf{g}_3,$$

$$\mathbf{g}_{h_2k_2l_2} = h_2\mathbf{g}_1 + k_2\mathbf{g}_2 + l_2\mathbf{g}_3,$$

որտեղից՝

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_{h_1k_1l_1} \mathbf{g}_{h_2k_2l_2} &= h_1 [h_2 (\mathbf{g}_1\mathbf{g}_1) + k_2 (\mathbf{g}_1\mathbf{g}_2) + l_2 (\mathbf{g}_1\mathbf{g}_3)] + \\ &+ l_1 [h_2 (\mathbf{g}_2\mathbf{g}_1) + k_2 (\mathbf{g}_2\mathbf{g}_2) + l_2 (\mathbf{g}_2\mathbf{g}_3)] + \\ &+ k_1 [h_2 (\mathbf{g}_3\mathbf{g}_1) + k_2 (\mathbf{g}_3\mathbf{g}_2) + l_2 (\mathbf{g}_3\mathbf{g}_3)]: \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_{hkl}^2 &= (h\mathbf{g}_1 + k\mathbf{g}_2 + l\mathbf{g}_3)^2 = h^2 (\mathbf{g}_1\mathbf{g}_1) + k^2 (\mathbf{g}_2\mathbf{g}_2) + l^2 (\mathbf{g}_3\mathbf{g}_3) + \\ &+ 2hk (\mathbf{g}_1\mathbf{g}_2) + 2hl (\mathbf{g}_1\mathbf{g}_3) + 2kl (\mathbf{g}_2\mathbf{g}_3): \end{aligned}$$

Կատարենք նշանակումներ՝

$$\begin{aligned} \left(\frac{v_0}{2\pi}\right)^2 (\mathbf{g}_1\mathbf{g}_1) &= S_{11}, \quad \left(\frac{v_0}{2\pi}\right)^2 (\mathbf{g}_2\mathbf{g}_2) = S_{22}, \quad \left(\frac{v_0}{2\pi}\right)^2 (\mathbf{g}_3\mathbf{g}_3) = S_{33}, \\ \left(\frac{v_0}{2\pi}\right)^2 (\mathbf{g}_1\mathbf{g}_2) &= S_{12}, \quad \left(\frac{v_0}{2\pi}\right)^2 (\mathbf{g}_1\mathbf{g}_3) = S_{13}, \quad \left(\frac{v_0}{2\pi}\right)^2 (\mathbf{g}_2\mathbf{g}_3) = S_{23}: \end{aligned} \quad (2)$$

Այս նշանակումներից հետո (1) բանաձևը կընդունի հետևյալ տեսքը՝

$$\begin{aligned} \cos \varphi = & \frac{1}{\sqrt{h_1^2 S_{11} + k_1^2 S_{22} + l_1^2 S_{33} + 2h_1 k_1 S_{12} + 2h_1 l_1 S_{13} + 2k_1 l_1 S_{23}}} \times \\ & \times \frac{1}{\sqrt{h_2^2 S_{11} + k_2^2 S_{22} + l_2^2 S_{33} + 2h_2 k_2 S_{12} + 2h_2 l_2 S_{13} + 2k_2 l_2 S_{23}}} \times \\ & \times [h_1 (h_2 S_{11} + k_2 S_{12} + l_2 S_{13}) + k_1 (h_2 S_{12} + k_2 S_{22} + l_2 S_{23}) + \\ & + l_1 (h_2 S_{13} + k_2 S_{23} + l_2 S_{33})] : \end{aligned}$$

(2) բանաձևում տեղադրենք հակադարձ ցանցի հիմնական վեկտորների արտահայտություններն ուղիղ ցանցի \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 և \mathbf{a}_3 վեկտորների միջոցով.

$$\mathbf{g}_1 = 2\pi \frac{[\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]}{V_0}, \quad \mathbf{g}_2 = 2\pi \frac{[\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1]}{V_0}, \quad \mathbf{g}_3 = 2\pi \frac{[\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2]}{V_0} :$$

Կստանանք՝

$$\begin{aligned} S_{11} &= [\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]^2 = a_2^2 a_3^2 \sin^2 \alpha, \\ S_{22} &= [\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1]^2 = a_1^2 a_3^2 \sin^2 \beta, \\ S_{33} &= [\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2]^2 = a_1^2 a_2^2 \sin^2 \gamma, \\ S_{12} &= [\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3][\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1] = \mathbf{a}_2 [\mathbf{a}_3, [\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1]] = \mathbf{a}_2 (\mathbf{a}_3 (\mathbf{a}_3 \mathbf{a}_1) - \mathbf{a}_1 a_3^2) = \\ &= [(\mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3)(\mathbf{a}_3 \mathbf{a}_1) - (\mathbf{a}_2 \mathbf{a}_1) a_3^2] = a_3^2 a_1 a_2 (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma), \\ S_{13} &= [\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3][\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2] = [(\mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3)(\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2) - (\mathbf{a}_3 \mathbf{a}_1) a_2^2] = \\ &= a_2^2 a_1 a_3 (\cos \alpha \cos \gamma - \cos \beta), \\ S_{23} &= [\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1][\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2] = [(\mathbf{a}_3 \mathbf{a}_1)(\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2) - (\mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3) a_1^2] = \\ &= a_1^2 a_2 a_3 (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) : \end{aligned}$$

Այսպիսով, կամայական համաչափությամբ բյուրեղային ցանցում ($h_1 k_1 l_1$) և ($h_2 k_2 l_2$) հարթությունների միջև կազմված անկյունը որոշվում է հետևյալ բանաձևով՝

$$\begin{aligned} \cos \varphi &= [S_{11}h_1h_2 + S_{22}k_1k_2 + S_{33}l_1l_2 + S_{12}(h_1k_2 + h_2k_1) + \\ &+ S_{23}(k_1l_2 + k_2l_1) + S_{13}(l_1h_2 + l_2h_1)] \times \\ &\times (S_{11}h_1^2 + S_{22}k_1^2 + S_{33}l_1^2 + 2S_{12}h_1k_1 + 2S_{23}k_1l_1 + 2S_{13}h_1l_1)^{-1/2} \times \\ &\times (S_{11}h_2^2 + S_{22}k_2^2 + S_{33}l_2^2 + 2S_{12}h_2k_2 + 2S_{23}k_2l_2 + 2S_{13}h_2l_2)^{-1/2} : \end{aligned} \quad (3)$$

1.43. ա. Ուղղանկյուն համակարգում $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, ուստի S_{11} , S_{12}, \dots, S_{33} գործակիցների համար կստանանք (տես խնդիր 1.42)

$$\begin{aligned} S_{11} &= a_2^2 a_3^2, & S_{22} &= a_1^2 a_3^2, & S_{33} &= a_1^2 a_2^2, \\ S_{12} &= S_{13} = S_{23} = 0 : \end{aligned} \quad (1)$$

(1) գործակիցները տեղադրելով $\cos \varphi$ -ի արտահայտության մեջ (խնդիր 1.42, (3)) կունենանք.

$$\begin{aligned} \cos \varphi &= \frac{a_2^2 a_3^2 h_1 h_2 + a_1^2 a_3^2 k_1 k_2 + a_1^2 a_2^2 l_1 l_2}{\sqrt{a_2^2 a_3^2 h_1^2 + a_1^2 a_3^2 k_1^2 + a_1^2 a_2^2 l_1^2} \sqrt{a_2^2 a_3^2 h_2^2 + a_1^2 a_3^2 k_2^2 + a_1^2 a_2^2 l_2^2}} = \\ &= \frac{\frac{h_1 h_2}{a_1^2} + \frac{k_1 k_2}{a_2^2} + \frac{l_1 l_2}{a_3^2}}{\sqrt{\frac{h_1^2}{a_1^2} + \frac{k_1^2}{a_2^2} + \frac{l_1^2}{a_3^2}} \sqrt{\frac{h_2^2}{a_1^2} + \frac{k_2^2}{a_2^2} + \frac{l_2^2}{a_3^2}}} = \\ &= \frac{\frac{2 \cdot 3}{a_1^2} + \frac{0 \cdot 1}{a_2^2} + \frac{1 \cdot 0}{a_3^2}}{\sqrt{\frac{4}{a_1^2} + \frac{0}{a_2^2} + \frac{1}{a_3^2}} \sqrt{\frac{9}{a_1^2} + \frac{1}{a_2^2} + \frac{0}{a_3^2}}} = \frac{\frac{6}{a_1^2}}{\sqrt{\frac{4}{a_1^2} + \frac{1}{a_3^2}} \sqrt{\frac{9}{a_1^2} + \frac{1}{a_2^2}}} : \end{aligned} \quad (2)$$

բ. Խորանարդային համակարգում $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ և $a_1 = a_2 = a_3$, հետևաբար (2) բանաձևից կստանանք՝

$$\cos \varphi = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2} \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}} = 0, \quad \varphi = 90^\circ :$$

1.44. Քառանկյուն համակարգում $a_1 = a_2 \neq a_3$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, ուստի գրոյից տարբեր են միայն S_{11}, S_{22} և S_{33} գործակիցները՝

$$S_{11} = a_2^2 a_3^2, \quad S_{22} = a_1^2 a_3^2, \quad S_{33} = a_1^2 a_2^2,$$

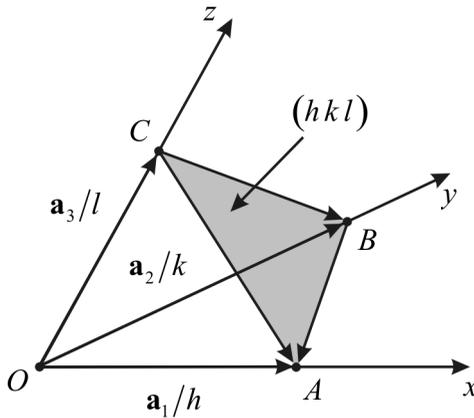
$$S_{12} = S_{13} = S_{23} = 0:$$

Օգտվելով խնդիր 1.42, (3) բանաձևից՝ կստանանք.

$$\cos \varphi = \frac{\frac{h_1 h_2 + k_1 k_2}{a_1^2} + \frac{l_1 l_2}{a_3^2}}{\sqrt{\frac{h_1^2 + k_1^2}{a_1^2} + \frac{l_1^2}{a_3^2}} \sqrt{\frac{h_2^2 + k_2^2}{a_1^2} + \frac{l_2^2}{a_3^2}}} = \frac{\frac{1}{a_1^2} + \frac{2}{a_3^2}}{\sqrt{\frac{2}{a_1^2} + \frac{1}{a_3^2}} \sqrt{\frac{1}{a_1^2} + \frac{4}{a_3^2}}} =$$

$$= \frac{\frac{1}{4,5^2} + \frac{2}{7,64^2}}{\sqrt{\frac{2}{4,5^2} + \frac{1}{7,64^2}} \sqrt{\frac{1}{4,5^2} + \frac{4}{7,64^2}}} \approx 0,7167, \quad \varphi \approx 44^\circ 13':$$

1.45. $|\mathbf{a}_1|/h$ -ը, $|\mathbf{a}_2|/k$ -ն և $|\mathbf{a}_3|/l$ -ն այն հատվածներն են, որոնք (hkl) հարթությունը հատում է x, y, z կոորդինատային առանցքներից (նկ. 1.22):



Նկ. 1.22

Նկարից ակնհայտ է, որ

$$\mathbf{BA} = \frac{\mathbf{a}_1}{h} - \frac{\mathbf{a}_2}{k},$$

$$\mathbf{CA} = \frac{\mathbf{a}_1}{h} - \frac{\mathbf{a}_3}{l}:$$

Եթե \mathbf{g}_{hkl} վեկտորն ուղղահայաց է (hkl) հարթությանը, ապա այն պետք է ուղղահայաց լինի \mathbf{BA} և \mathbf{CA} վեկտորներին, որոնք (hkl) հարթության մեջ իրար զուգահեռ չեն: Հետևաբար՝ \mathbf{g}_{hkl} վեկտորի սկալյար արտադրյալը \mathbf{BA} կամ \mathbf{CA} վեկտորի հետ պետք է լինի զրո: Իրոք՝

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_{hkl} \mathbf{BA} &= \mathbf{g}_{hkl} \left(\frac{\mathbf{a}_1}{h} - \frac{\mathbf{a}_2}{k} \right) = (h\mathbf{g}_1 + k\mathbf{g}_2 + l\mathbf{g}_3) \left(\frac{\mathbf{a}_1}{h} - \frac{\mathbf{a}_2}{k} \right) = \\ &= \mathbf{g}_1 \mathbf{a}_1 - \frac{h}{k} \mathbf{g}_1 \mathbf{a}_2 + \frac{k}{h} \mathbf{g}_2 \mathbf{a}_1 - \mathbf{g}_2 \mathbf{a}_2 + \frac{l}{h} \mathbf{g}_3 \mathbf{a}_1 - \frac{l}{k} \mathbf{g}_3 \mathbf{a}_2: \end{aligned} \quad (1)$$

Նկատի ունենալով ուղիղ և հակադարձ ցանցերի հիմնական վեկտորների միջև հայտնի առնչությունը՝

$$\mathbf{g}_i \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij},$$

(1) բանաձևից կստանանք՝

$$\mathbf{g}_{hkl} \mathbf{BA} = 2\pi - \frac{h}{k} \cdot 0 + \frac{k}{h} \cdot 0 - 2\pi + \frac{l}{h} \cdot 0 - \frac{l}{k} \cdot 0 = 0:$$

Նման ձևով էլ

$$\mathbf{g}_{hkl} \mathbf{CA} = (h\mathbf{g}_1 + k\mathbf{g}_2 + l\mathbf{g}_3) \left(\frac{\mathbf{a}_1}{h} - \frac{\mathbf{a}_3}{l} \right) = 0:$$

Այսպիսով՝ հակադարձ ցանցի \mathbf{g}_{hkl} վեկտորն ուղղահայաց է (hkl) հարթությանը:

1.46. (hkl) հարթությունների ընտանիքի միջհարթությունային հեռավորությունը տրվում է հետևյալ բանաձևով (տես խնդիր 1.38).

$$d_{hkl} = \frac{(\mathbf{na}_1)}{h} = \frac{(\mathbf{na}_2)}{k} = \frac{(\mathbf{na}_3)}{l}, \quad (1)$$

որտեղ \mathbf{a}_1 -ը, \mathbf{a}_2 -ը, \mathbf{a}_3 -ը ցանցի հաստատուններն են, իսկ \mathbf{n} -ը (hkl) հարթության նորմալն է և տրվում է

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{g}_{hkl}}{|\mathbf{g}_{hkl}|} \quad (2)$$

բանաձևով: (1) և (2) բանաձևերից հետևում է, որ

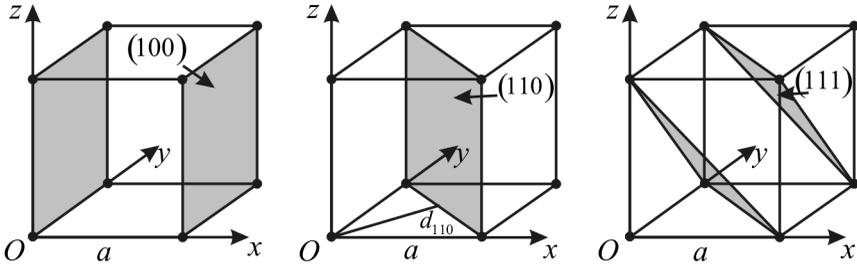
$$d_{hkl} = \frac{\mathbf{g}_{hkl} \cdot \mathbf{a}_1}{h |\mathbf{g}_{hkl}|} :$$

Նկատի ունենալով ուղիղ և հակադարձ ցանցերի հիմնական վեկտորների միջև կապը՝ $\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{a}_k = 2\pi \delta_{ik}$, կստանանք՝

$$\mathbf{g}_{hkl} \cdot \mathbf{a}_1 \equiv (h\mathbf{g}_1 + k\mathbf{g}_2 + l\mathbf{g}_3) \cdot \mathbf{a}_1 = h\mathbf{g}_1 \cdot \mathbf{a}_1 = 2\pi h,$$

հետևաբար՝

$$d_{hkl} = \frac{2\pi h}{h |\mathbf{g}_{hkl}|} = \frac{2\pi}{|\mathbf{g}_{hkl}|} : \quad (3)$$



Նկ.1.23

Պարզ խորանարդային ցանցի դեպքում $|\mathbf{g}_1| = |\mathbf{g}_2| = |\mathbf{g}_3| = 2\pi/a$, ուստի

$$|\mathbf{g}_{hkl}| = \sqrt{h^2 \mathbf{g}_1^2 + k^2 \mathbf{g}_2^2 + l^2 \mathbf{g}_3^2} = \frac{2\pi}{a} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} :$$

(3) բանաձևի համաձայն՝

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\mathbf{g}_{hkl}|} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} : \quad (4)$$

(4) բանաձևից հետևում է, որ մեծ ցուցիչներով հարթությունների միջև հեռավորությունը փոքր է: Օրինակ՝ (100) հարթությունների ընտանիքի միջհարթությունային հեռավորությունը՝ $d_{100} = a$, (110) հարթությունների-
 նը՝ $d_{110} = a/\sqrt{2}$, (111) հարթությունների-
 նը՝ $d_{111} = a/\sqrt{3}$ (նկ.1.23):

1.47. Եռաթեք համակարգում $\alpha \neq \beta \neq \gamma$ և $a_1 \neq a_2 \neq a_3$: Ինչպես գիտենք (տես խնդիր 1.46) (hkl) հարթությունների միջև հեռավորությունը հավասար է հակադարձ տարածության կոորդինատների սկզբնակետը (hkl) հանգույցին միացնող \mathbf{g}_{hkl} վեկտորի մոդուլի հակադարձին՝ բազմապատկած 2π -ով՝

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\mathbf{g}_{hkl}|},$$

որտեղ

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_{hkl}^2 &= (h\mathbf{g}_1 + k\mathbf{g}_2 + l\mathbf{g}_3)^2 = h^2\mathbf{g}_1^2 + k^2\mathbf{g}_2^2 + l^2\mathbf{g}_3^2 + \\ &+ 2hk(\mathbf{g}_1\mathbf{g}_2) + 2hl(\mathbf{g}_1\mathbf{g}_3) + 2kl(\mathbf{g}_2\mathbf{g}_3): \end{aligned}$$

Օգտագործելով խնդիր 1.42-ում կատարված նշանակումները՝

$$\begin{aligned} S_{11} &= \left(\frac{v_0}{2\pi}\right)^2 \mathbf{g}_1^2 = \left[[\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]\right]^2 = a_2^2 a_3^2 \sin^2 \alpha, \\ S_{22} &= \left(\frac{v_0}{2\pi}\right)^2 \mathbf{g}_2^2 = \left[[\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1]\right]^2 = a_1^2 a_3^2 \sin^2 \beta, \\ S_{33} &= \left(\frac{v_0}{2\pi}\right)^2 \mathbf{g}_3^2 = \left[[\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2]\right]^2 = a_1^2 a_2^2 \sin^2 \gamma, \\ S_{12} &= \left(\frac{v_0}{2\pi}\right)^2 \mathbf{g}_1\mathbf{g}_2 = a_3^2 a_1 a_2 (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma), \end{aligned} \quad (1)$$

$$S_{13} = \left(\frac{v_0}{2\pi} \right)^2 \mathbf{g}_1 \mathbf{g}_3 = a_2^2 a_1 a_3 (\cos \alpha \cos \gamma - \cos \beta),$$

$$S_{23} = \left(\frac{v_0}{2\pi} \right)^2 \mathbf{g}_2 \mathbf{g}_3 = a_1^2 a_2 a_3 (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha),$$

կատանանք՝

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{\sqrt{S_{11}h^2 + S_{22}k^2 + S_{33}l^2 + 2S_{12}hk + 2S_{23}kl + 2S_{13}hl}} \frac{v_0}{2\pi} =$$

$$= \frac{v_0}{\sqrt{S_{11}h^2 + S_{22}k^2 + S_{33}l^2 + 2S_{12}hk + 2S_{23}kl + 2S_{13}hl}}, \quad (2)$$

որտեղ $S_{11}, S_{12}, \dots, S_{33}$ գործակիցները տրվում են (1) բանաձևերով, իսկ v_0 -ն տարրական բջջի ծավալն է (տես խնդիր 1.42):

1.48. Օգտվենք խնդիր 1.47-ի (2) բանաձևից: Քանի որ $h=1$, $k=0$, $l=2$, կատանանք՝

$$d_{102} = \frac{v_0}{\sqrt{S_{11} + 4S_{33} + 4S_{13}}}, \quad (1)$$

որտեղ

$$S_{11} = a_2^2 a_3^2 \sin^2 \alpha = 7,72^2 \cdot 5,56^2 \sin^2 89^\circ 5' \approx 1841,63 \text{ \AA}^4,$$

$$S_{33} = a_1^2 a_3^2 \sin^2 \beta = 7,09^2 \cdot 7,72^2 \sin^2 74^\circ 16' \approx 2737,87 \text{ \AA}^4, \quad (2)$$

$$S_{13} = a_2^2 a_1 a_3 (\cos \alpha \cos \gamma - \cos \beta) = 7,09 \cdot 5,56 \cdot (7,72)^2 \times$$

$$\times (\sin 15^\circ 44' \cdot \sin 0^\circ 55' + \sin 11^\circ 2') \approx 459,77 \text{ \AA}^4,$$

$$v_0 = a_1 a_2 a_3 \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma} =$$

$$= 7,09 \cdot 5,56 \cdot 7,72 \cdot (1 - \sin^2 0^\circ 55' - \sin^2 11^\circ 2' - \sin^2 15^\circ 44' -$$

$$- 2 \sin 0^\circ 55' \cdot \sin 11^\circ 2' \cdot \sin 15^\circ 44')^{1/2} \approx 270,24 \text{ \AA}^3: \quad (3)$$

(1)–(3) բանաձևերից կստանանք d_{102} հեռավորության արժեքը՝

$$d_{102} = \frac{270,24}{\sqrt{1841,63 + 4 \cdot 2737,84 + 4 \cdot 459,77}} \text{ \AA} \approx 2,23 \text{ \AA} :$$

1.49. 1. Խորանարդային համակարգ՝ $a_1 = a_2 = a_3$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.

$$S_{11} = S_{22} = S_{33} = a_1^4, \quad S_{12} = S_{13} = S_{23} = 0, \quad v_0 = a_1^3,$$

$$d_{hkl} = \frac{v_0}{\sqrt{S_{11}h^2 + S_{22}k^2 + S_{33}l^2}} = \frac{a_1^3}{a_1^2 \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} = \frac{a_1}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} :$$

2. Քառանկյուն համակարգ՝ $a_1 = a_2 \neq a_3$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.

$$S_{11} = a_2^2 a_3^2, \quad S_{22} = a_1^2 a_3^2, \quad S_{33} = a_1^2 a_2^2 = a_1^4, \quad S_{12} = S_{13} = S_{23} = 0, \\ v_0 = a_1^2 a_3,$$

$$d_{hkl} = \frac{a_1^2 a_3}{\sqrt{a_2^2 a_3^2 h^2 + a_1^2 a_3^2 k^2 + a_1^4 l^2}} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2 + k^2}{a_1^2} + \frac{l^2}{a_3^2}}} :$$

3. Ուղղանկյուն համակարգ՝ $a_1 \neq a_2 \neq a_3$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.

$$S_{11} = a_2^2 a_3^2, \quad S_{22} = a_1^2 a_3^2, \quad S_{33} = a_1^2 a_2^2, \quad S_{12} = S_{13} = S_{23} = 0, \\ v_0 = a_1 a_2 a_3 :$$

$$d_{hkl} = \frac{a_1 a_2 a_3}{\sqrt{a_2^2 a_3^2 h^2 + a_1^2 a_3^2 k^2 + a_1^2 a_2^2 l^2}} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{a_1^2} + \frac{k^2}{a_2^2} + \frac{l^2}{a_3^2}}} :$$

4. Վեցանկյուն համակարգ՝ $a_1 = a_2 \neq a_3$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$.

$$S_{11} = a_2^2 a_3^2 \sin^2 \alpha = a_2^2 a_3^2, \quad S_{22} = a_1^2 a_3^2 \sin^2 \beta = a_1^2 a_3^2,$$

$$S_{33} = a_1^2 a_2^2 \sin^2 \gamma = a_1^2 a_2^2 \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \right)^2 = \frac{3}{4} a_1^4, \quad S_{13} = S_{23} = 0,$$

$$S_{12} = a_3^2 a_1 a_2 (-\cos \gamma) = \frac{1}{2} a_1^2 a_3^2, \quad v_0 = a_1^2 a_3 \sqrt{1 - \cos^2 \gamma} = \frac{\sqrt{3}}{2} a_1^2 a_3,$$

$$\begin{aligned} d_{hkl} &= \frac{\frac{\sqrt{3}}{2} a_1^2 a_3}{\sqrt{a_2^2 a_3^2 h^2 + a_1^2 a_3^2 k^2 + \frac{3}{4} a_1^4 l^2 + 2hk \frac{1}{2} a_1^2 a_3^2}} = \\ &= \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{a_1^2 a_3}{a_1^2 a_3 \sqrt{\frac{h^2}{a_1^2} + \frac{k^2}{a_1^2} + \frac{3l^2}{4a_3^2} + \frac{hk}{a_1^2}}} = \frac{1}{\sqrt{\frac{4}{3} \frac{h^2 + k^2 + hk}{a_1^2} + \frac{l^2}{a_3^2}}}. \end{aligned}$$

1.50. Խնդիր 1.42-ում ստացված արտահայտության համաձայն՝

$$\begin{aligned} \cos \varphi &= \frac{h_1 (h_2 S_{11} + k_2 S_{12} + l_2 S_{13}) + k_1 (h_2 S_{12} + k_2 S_{22} + l_2 S_{23})}{|\mathbf{g}_{h_1 k_1 l_1}| |\mathbf{g}_{h_2 k_2 l_2}|} + \\ &+ \frac{l_1 (h_2 S_{13} + k_2 S_{23} + l_2 S_{33})}{|\mathbf{g}_{h_1 k_1 l_1}| |\mathbf{g}_{h_2 k_2 l_2}|}. \end{aligned} \quad (1)$$

Եթե $(h_1 k_1 l_1)$ և $(h_2 k_2 l_2)$ հարթություններն իրար ուղղահայաց են, ապա $\cos \varphi = 0$, և (1) բանաձևից հետևում է, որ

$$\begin{aligned} S_{11} h_1 h_2 + S_{22} k_1 k_2 + S_{33} l_1 l_2 + S_{12} (h_1 k_2 + k_1 h_2) + \\ + S_{13} (h_1 l_2 + l_1 h_2) + S_{23} (k_1 l_2 + l_1 k_2) = 0: \end{aligned}$$

$S_{11}, S_{12}, \dots, S_{33}$ գործակիցների արտահայտություններից (խնդիր 1.42) եռանկյուն համակարգի ցանցի դեպքում ($\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ, a_1 = a_2 = a_3$) կստանանք՝

$$S_{11} = S_{22} = S_{33} = a_1^4 \sin^2 \alpha, \quad S_{12} = S_{13} = S_{23} = a_1^4 \cos \alpha (\cos \alpha - 1): (2)$$

(2) բանաձևերի օգնությամբ $(h_1 k_1 l_1)$ և $(h_2 k_2 l_2)$ հարթությունների ուղղահայացության պայմանը կընդունի հետևյալ տեսքը՝

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

Մասնավոր դեպքում, երբ $\alpha = 90^\circ$, եռանկյուն համակարգը վերածվում է խորանարդային համակարգի, իսկ $(h_1 k_1 l_1)$ և $(h_2 k_2 l_2)$ հարթությունների ուղղահայացության պայմանն ընդունում է

$$h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2 = 0$$

տեսքը, որը համընկնում է խնդիր 1.39-ում ստացված պայմանի հետ:

1.51. Եթե կոորդինատային առանցքներն ուղղենք $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ և \mathbf{a}_3 հիմնական վեկտորների ուղղությամբ, ապա կոորդինատների սկզբնակետը $u\mathbf{a}_1, v\mathbf{a}_2, w\mathbf{a}_3$ կոորդինատներով կետին միացնող վեկտորը՝

$$\mathbf{l}_{uvw} = u\mathbf{a}_1 + v\mathbf{a}_2 + w\mathbf{a}_3,$$

որի քառակուսին՝

$$\begin{aligned} \mathbf{l}_{uvw}^2 &= u^2 (\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_1) + v^2 (\mathbf{a}_2 \mathbf{a}_2) + w^2 (\mathbf{a}_3 \mathbf{a}_3) + \\ &+ 2uv (\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2) + 2uw (\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_3) + 2vw (\mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3) = \\ &= a_1^2 u^2 + a_2^2 v^2 + a_3^2 w^2 + 2uva_1 a_2 \cos \gamma + \\ &+ 2uwa_1 a_3 \cos \beta + 2vwa_2 a_3 \cos \alpha : \end{aligned}$$

Այսպիսով, $[uvw]$ ուղղությամբ առաջին ատոմի հեռավորությունը կոորդինատների սկզբնակետից՝

$$\begin{aligned} |\mathbf{l}_{uvw}| \equiv l_{uvw} &= (a_1^2 u^2 + a_2^2 v^2 + a_3^2 w^2 + \\ &+ 2uva_1 a_2 \cos \gamma + 2uwa_1 a_3 \cos \beta + 2vwa_2 a_3 \cos \alpha)^{1/2} : \end{aligned} \quad (1)$$

1.52. 1. Միաթեք համակարգ՝ $\alpha = \gamma = 90^\circ$, $a_1 \neq a_2 \neq a_3$: Խնդիր 1.51-ի (1) բանաձևից

$$l_{uvw} = (u^2 a_1^2 + v^2 a_2^2 + w^2 a_3^2 + 2uva_1 a_3 \cos \beta)^{1/2} :$$

2. Ուղղանկյուն համակարգ՝ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, $a_1 \neq a_2 \neq a_3$.

$$l_{uvw} = \left(u^2 a_1^2 + v^2 a_2^2 + w^2 a_3^2 \right)^{1/2} :$$

3. Քառանկյուն համակարգ՝ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, $a_1 = a_2 \neq a_3$.

$$l_{uvw} = \left[a_1^2 (u^2 + v^2) + a_3^2 w^2 \right]^{1/2} :$$

4. Վեցանկյուն համակարգ՝ $a_1 = a_2 \neq a_3$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$.

$$\begin{aligned} l_{uvw} &= \left[a_1^2 (u^2 + v^2) + a_3^2 w^2 + 2uv a_1^2 \cos 120^\circ \right]^{1/2} = \\ &= a_1 \left(u^2 + v^2 + w^2 \frac{a_3^2}{a_1^2} - uv \right)^{1/2} : \end{aligned}$$

1.53. Ուղղի և հարթության միջև անկյունը որոշվում է որպես ուղղի և այդ հարթությանն ուղղահայաց հակադարձ ցանցի \mathbf{g}_{hkl} վեկտորի միջև կազմված անկյուն՝

$$\cos \varphi = \frac{\mathbf{l}_{uvw} \cdot \mathbf{g}_{hkl}}{|\mathbf{l}_{uvw}| |\mathbf{g}_{hkl}|} : \quad (1)$$

Ձևափոխենք (1) բանաձևի համարիչը: Քանի որ $\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$, ապա

$$\mathbf{l}_{uvw} \cdot \mathbf{g}_{hkl} = (u\mathbf{a}_1 + v\mathbf{a}_2 + w\mathbf{a}_3) \cdot (h\mathbf{g}_1 + k\mathbf{g}_2 + l\mathbf{g}_3) = 2\pi (uh + vk + wl) :$$

Նկատի ունենալով $|\mathbf{l}_{uvw}|$ -ի (խնդիր 1.52) և $|\mathbf{g}_{hkl}|$ -ի (խնդիր 1.47) արտահայտությունները՝ կստանանք.

$$\begin{aligned} \cos \varphi &= \frac{v_0}{\sqrt{h^2 S_{11} + k^2 S_{22} + l^2 S_{33} + 2hk S_{12} + 2hl S_{13} + 2kl S_{23}}} \times \\ &\times \frac{uh + vk + wl}{\sqrt{u^2 a_1^2 + v^2 a_2^2 + w^2 a_3^2 + 2uva_1 a_2 \cos \gamma + 2uwa_1 a_3 \cos \beta + 2vwa_2 a_3 \cos \alpha}} : \end{aligned} \quad (2)$$

Միաբեր համակարգին պատկանող ցանցում $\alpha = \gamma = 90^\circ$: Նկատի ունենալով նաև, որ $v = w = 0$ և $k = 0$, (2) բանաձևից կստանանք՝

$$\cos \varphi = \frac{v_0}{a_1 \sqrt{h^2 S_{11} + l^2 S_{33} + 2hl S_{13}}} :$$

Միաթեք համակարգում, խնդիր 1.42-ի (2) բանաձևերի համաձայն՝

$$S_{11} = a_2^2 a_3^2, \quad S_{33} = a_1^2 a_2^2, \quad S_{13} = a_2^2 a_1 a_3 \cos \beta,$$

իսկ տարրական բջջի ծավալը՝

$$v_0 = a_1 a_2 a_3 \sin \beta,$$

ուստի

$$\begin{aligned} \cos \varphi &= \frac{a_1 a_2 a_3 \sin \beta}{a_1 \sqrt{a_2^2 a_3^2 + 4a_1^2 a_2^2 - 4a_2^2 a_1 a_3 \cos \beta}} = \\ &= \frac{a_3 \sin \beta}{\sqrt{a_3^2 + 4a_1^2 - 4a_1 a_3 \cos \beta}} : \end{aligned}$$

Մասնավոր դեպքում, β -սելենի ցանցում $a_1 = 12,85 \text{ \AA}$, $a_2 = 8,07 \text{ \AA}$, $a_3 = 9,31 \text{ \AA}$, $\beta = 93^\circ 8'$.

$$\begin{aligned} \cos \varphi &= \frac{9,31 \cdot \sin 93^\circ 8'}{\sqrt{9,31^2 + 4 \cdot 12,85^2 - 4 \cdot 12,85 \cdot 9,31 \cdot \cos 93^\circ 8'}} \approx 0,5713, \\ \varphi &\approx 55^\circ 10' : \end{aligned}$$

1.54. Խորանարդային համակարգում $a_1 = a_2 = a_3$ և $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, ուստի կանայական $[uvw]$ ուղղության կազմած անկյունը (hkl) հարթության հետ կորոշվի հետևյալ առնչությունից՝

$$\begin{aligned} \cos \varphi &= \frac{(hu + kv + lw) a^3}{a \sqrt{u^2 + v^2 + w^2} a^2 \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} = \\ &= \frac{hu + kv + lw}{\sqrt{u^2 + v^2 + w^2} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} : \end{aligned}$$

$[hkl]$ ուղղության կազմած անկյունը (hkl) հարթության հետ՝

$$\cos \varphi_0 = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} = 1, \quad \varphi_0 = 0:$$

Այսպիսով, (hkl) հարթությունը միշտ ուղղահայաց է միլերյան նույն ցուցիչներով ուղղությանը:

1.55. Նշանակենք առաջին և երկրորդ ուղիղների վրա կորդինատների սկզբնակետին ամենամոտ հանգույցների կորդինատները, համապատասխանաբար, $[u_1 v_1 w_1]$ և $[u_2 v_2 w_2]$: Այդ կետերի շառավիղ-վեկտորները՝

$$\begin{aligned} \mathbf{l}_{u_1 v_1 w_1} &= u_1 \mathbf{a}_1 + v_1 \mathbf{a}_2 + w_1 \mathbf{a}_3, \\ \mathbf{l}_{u_2 v_2 w_2} &= u_2 \mathbf{a}_1 + v_2 \mathbf{a}_2 + w_2 \mathbf{a}_3, \end{aligned} \quad (1)$$

ուստի այդ վեկտորներով կազմված անկյունը կորոշվի

$$\cos \varphi = \frac{(\mathbf{l}_{u_1 v_1 w_1} \cdot \mathbf{l}_{u_2 v_2 w_2})}{|\mathbf{l}_{u_1 v_1 w_1}| |\mathbf{l}_{u_2 v_2 w_2}|} \quad (2)$$

բանաձևով: $\cos \varphi$ -ն ցանցի հիմնական վեկտորների և տրված ուղղությունների ցուցիչների միջոցով արտահայտելու համար (1) արտահայտությունը տեղադրենք (2) բանաձևում.

$$\begin{aligned} \cos \varphi &= [a_1^2 u_1 u_2 + a_2^2 v_1 v_2 + a_3^2 w_1 w_2 + a_2 a_3 (v_1 w_2 + v_2 w_1) \cos \alpha + \\ &+ a_1 a_3 (w_1 u_2 + w_2 u_1) \cos \beta + a_1 a_2 (u_1 v_2 + u_2 v_1) \cos \gamma] \times \\ &\times (a_1^2 u_1^2 + a_2^2 v_1^2 + a_3^2 w_1^2 + 2a_1 a_2 u_1 v_1 \cos \gamma + 2a_2 a_3 v_1 w_1 \cos \alpha + \\ &+ 2a_1 a_3 u_1 w_1 \cos \beta)^{-1/2} \times (a_1^2 u_2^2 + a_2^2 v_2^2 + a_3^2 w_2^2 + \\ &+ 2a_1 a_2 u_2 v_2 \cos \gamma + 2a_2 a_3 v_2 w_2 \cos \alpha + 2a_1 a_3 u_2 w_2 \cos \beta)^{-1/2}: \end{aligned} \quad (3)$$

Ուղղանկյուն համակարգում $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, ուստի (3) արտահայտությունը կընդունի ավելի պարզ տեսք՝

$$\cos \varphi = \frac{a_1^2 u_1 u_2 + a_2^2 v_1 v_2 + a_3^2 w_1 w_2}{\sqrt{a_1^2 u_1^2 + a_2^2 v_1^2 + a_3^2 w_1^2} \sqrt{a_1^2 u_2^2 + a_2^2 v_2^2 + a_3^2 w_2^2}}: \quad (4)$$

(4) բանաձևում տեղադրելով $u_1 = 1, v_1 = 0, w_1 = 1, u_2 = 0, v_2 = 1, w_2 = 2$, կստանանք՝

$$\cos \varphi = \frac{2a_3^2}{\sqrt{a_1^2 + a_3^2} \sqrt{a_2^2 + 4a_3^2}} :$$

Պղնձարջասպի ցանցում

$$\cos \varphi = \frac{8,32^2 \cdot 2}{\sqrt{4,88^2 + 8,32^2} \sqrt{6,66^2 + 4 \cdot 8,32^2}} = 0,81,$$

ուստի որոնելի անկյունը՝

$$\varphi \approx 36^\circ 46' :$$

1.56. Երկու կամայական ուղղությունների կազմած անկյան բանաձևում (խնդիր 1.55) տեղադրելով $\alpha = \gamma = 90^\circ$, կստանանք՝

$$\begin{aligned} \cos \varphi &= \left[a_1^2 u_1 u_2 + a_2^2 v_1 v_2 + a_3^2 w_1 w_2 + a_1 a_3 (w_1 u_2 + w_2 u_1) \cos \beta \right] \times \\ &\times \left(a_1^2 u_1^2 + a_2^2 v_1^2 + a_3^2 w_1^2 + 2a_1 a_3 u_1 w_1 \cos \beta \right)^{-1/2} \times \\ &\times \left(a_1^2 u_2^2 + a_2^2 v_2^2 + a_3^2 w_2^2 + 2a_1 a_3 u_2 w_2 \cos \beta \right)^{-1/2} : \end{aligned} \quad (1)$$

Տրված ուղղությունների համար $u_1 = 1, v_1 = 0, w_1 = 2, u_2 = 2, v_2 = 1, w_2 = 0$, ուստի

$$\cos \varphi = \frac{2a_1^2 + 4a_1 a_3 \cos \beta}{\sqrt{a_1^2 + 4a_3^2} \sqrt{4a_1^2 + a_2^2}} \approx 0,6623, \quad \varphi \approx 48^\circ 30' :$$

1.57. Տարածական անկյունագծերից ընտրենք [111] ուղղությամբ ուղղված անկյունագիծը, իսկ որպես դրա անկյուն կազմող կող [100]-ով ուղղվածը:

Խորանարդային ցանցում խնդիր 1.55-ի (3) բանաձևը կընդունի հետևյալ տեսքը՝

$$\cos \varphi = \frac{u_1 u_2 + v_1 v_2 + w_1 w_2}{\sqrt{u_1^2 + v_1^2 + w_1^2} \sqrt{u_2^2 + v_2^2 + w_2^2}} : \quad (1)$$

(1) բանաձևում տեղադրելով տրված ուղիղների ցուցիչները՝ $u_1 = 1$, $v_1 = 1$, $w_1 = 1$, $u_2 = 1$, $v_2 = 0$, $w_2 = 0$, կստանանք՝

$$\cos \varphi = \frac{1}{\sqrt{3}} = 0,5766, \quad \varphi \approx 54^\circ 48':$$

1.58. Տարբեր տիպի ճառագայթումների համար բյուրեղը ծառայում է որպես դիֆրակտային ցանց, ուստի դիֆրակցիան կարտահայտվի առավել ցայտուն, եթե ճառագայթահարող փնջում մասնիկի Γ -ը Բրոյլի ալիքի λ_B երկարությունը լինի ցանցի d հաստատունի կարգի՝

$$\lambda_B = \frac{h}{p} \sim d (\sim 1 \text{ \AA}), \quad (1)$$

որտեղ p -ն մասնիկի իմպուլսն է, $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$ ՋՎ՝ Պլանկի հաստատունը:

1. Էլեկտրամագնիսական ճառագայթում: Ֆոտոնի p իմպուլսն արտահայտելով նրա էներգիայի միջոցով՝ $p = \varepsilon/c$, (1) բանաձևից կստանանք.

$$\lambda_B = \frac{hc}{\varepsilon} = \frac{12,4}{\varepsilon} \text{ \AA}, \quad (2)$$

որտեղ ε -ն արտահայտված է կիլոէլեկտրոն-վոլտով (կէՎ): (2) բանաձևից հետևում է, որ բյուրեղի կառուցվածքային ուսումնասիրությունների համար օգտագործվող էլեկտրամագնիսական ճառագայթման ալիքի երկարությունը կլինի անգստրեմի կարգի, եթե ֆոտոնի էներգիան լինի տասնյակ կէՎ-ի կարգի, որը համապատասխանում է ռենտգենյան տիրույթին:

2. Ոչ ռելյատիվիստական էլեկտրոններ: Այսպիսի էլեկտրոնի համար $p = (2m\varepsilon)^{1/2}$, որտեղ $m = 9,1 \cdot 10^{-28}$ գ էլեկտրոնի զանգվածն է, ε -ն՝ էլեկտրոնի կինետիկ էներգիան, ուստի (1) բանաձևից կստանանք՝

$$\lambda_B = \frac{h}{\sqrt{2m\varepsilon}} = \frac{12}{\varepsilon^{1/2}} \text{ \AA},$$

որտեղ ε -ն արտահայտված է էլեկտրոն-վոլտով: Եթե $\lambda_B \sim d \sim 164 \text{ \AA}$, ապա $\varepsilon \sim 100 \text{ էՎ}$:

3. Նեյտրոններ: Նեյտրոնի համար $p = (2m_n \varepsilon)^{1/2}$, որտեղ $m_n \approx \approx 1,67 \cdot 10^{-28} \text{ գ}$ նեյտրոնի զանգվածն է, (2) բանաձևից կստացվի՝

$$\lambda_B = \frac{h}{\sqrt{2m_n \varepsilon}} \approx \frac{0,28}{\varepsilon^{1/2}} \text{ \AA}, \quad (3)$$

որտեղ ε -ն արտահայտված է էլեկտրոն-վոլտով: (3) բանաձևի համաձայն՝ $\lambda_B \sim d \sim 1 \text{ \AA}$ երկարություն կունենան $\varepsilon \sim 0,08 \text{ էՎ}$ էներգիայով նեյտրոնները (այսպես կոչված «ջերմային» նեյտրոններ):

1.59. Համաձայն Բրեգի՝ բյուրեղի վրա ընկնող ռենտգենյան ալիքները հայելային ձևով անդրադառնում են իրար զուգահեռ ատոմային հարթություններից: Որևէ ուղղությամբ դիֆրակտված փունջը հնարավոր է դիտել, եթե այդ ուղղությամբ գնացող և տվյալ ատոմային հարթությունների ընտանիքի յուրաքանչյուր հարթությունից անդրադարձած երկրորդային ալիքներն իրար ուժեղացնում են, այսինքն՝ հարևան հարթություններից անդրադարձած ալիքների ընթացքի տարբերությունը հավասար է ամբողջ թվով ալիքի երկարության (նկ. 1.24, d -ն միջհարթությունային հեռավորությունն է): 1 և 2 անդրադարձած ալիքների միջև ընթացքի տարբերությունը՝

$$\Delta = AB + BC - AD = 2AB - AD:$$

ΔAOB -ից՝

$$AB = \frac{d}{\sin \theta}, \quad AO = d \operatorname{ctg} \theta,$$

ΔACD -ից՝

$$AD = AC \cos \theta = 2AO \cos \theta = 2d \cos \theta \operatorname{ctg} \theta,$$

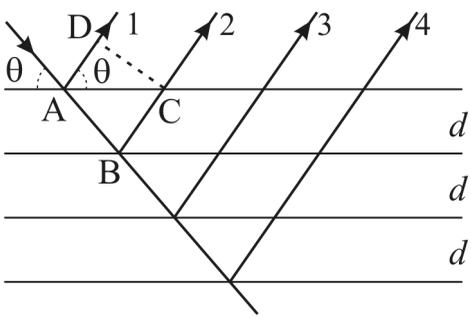
հետևաբար՝

$$\Delta = \frac{2d}{\sin \theta} - 2d \cos \theta \operatorname{ctg} \theta = \frac{2d}{\sin \theta} (1 - \cos^2 \theta) = 2d \sin \theta:$$

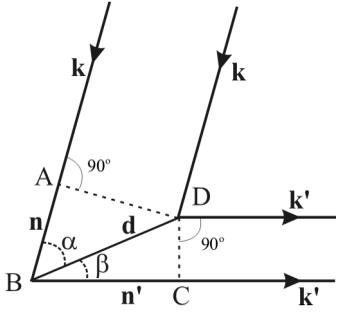
Անդրադարձման ինտերֆերենցային մաքսիմումների անհրաժեշտ պայմանը կրնո՞ւնի

$$2d \sin \theta = n\lambda, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

տեսքը, որն էլ Բրեգի օրենքն է:



Նկ.1.24



Նկ.1.25

1.60. Գիտարկենք երկու ցրող կենտրոններ, որոնք իրար նկատմամբ շեղված են \mathbf{d} վեկտորով (նկ. 1.25): B և D կենտրոնների ցրած ալիքների միջև ընթացքի տարբերությունը՝

$$\Delta = AB + BC = d \cos \alpha + d \cos \beta, \quad (1)$$

կամ, նկատի ունենալով, որ

$$d \cos \alpha = \mathbf{dn}, \quad d \cos \beta = -\mathbf{dn}', \quad (2)$$

որտեղ \mathbf{n} -ը և \mathbf{n}' -ը ընկած և ցրված ալիքների ուղղությունների միավոր վեկտորներն են, կստանանք՝

$$\Delta = \mathbf{d}(\mathbf{n} - \mathbf{n}'): \quad (3)$$

Նկատի ունենալով ցրման առաձգական բնույթը՝ $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'| = 2\pi/\lambda$, որտեղ $\mathbf{k} = 2\pi\mathbf{n}/\lambda$ -ն և $\mathbf{k}' = 2\pi\mathbf{n}'/\lambda$ -ն ընկած և ցրված ալիքների ալիքային վեկտորներն են, λ -ն՝ ալիքի երկարությունը, ինչպես նաև ինտերֆերենցային մաքսիմումի $\Delta = m\lambda$ ($m = \pm 1, \pm 2, \dots$) անհրաժեշտ պայմանը, (1)–(3) բանաձևերից կստանանք՝

$$\Delta = \mathbf{d}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \Delta \frac{2\pi}{\lambda} = 2\pi m, \quad m = \pm 1, \pm 2, \pm \dots : \quad (4)$$

Եթե որպես ցրող կենտրոնների բազմություն հանդես է գալիս բյուրեղի տարածական ցանցը, ապա (4) պայմանը պետք է միաժամանակ տեղի ունենա Բրավեի ցանցի բոլոր \mathbf{l} վեկտորների համար՝

$$\mathbf{l}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = 2\pi m : \quad (5)$$

(5) պայմանը մույնաբար համընկնում է հակադարձ ցանցը որոշող $\mathbf{l}\mathbf{g} = 2\pi n$ հավասարման հետ, հետևաբար՝

$$\mathbf{k} - \mathbf{k}' = \mathbf{g} : \quad (6)$$

(6) հավասարումը հայտնի է որպես Լաուեի պայման, որտեղ \mathbf{g} -ն հակադարձ ցանցի որևէ վեկտոր է:

(6) հավասարումը կարելի է ներկայացնել նաև այլ տեսքով: Իրոք, քանի որ $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$, ապա

$$\mathbf{k} - \mathbf{g} = \mathbf{k}' \quad \text{և} \quad |\mathbf{k} - \mathbf{g}| = |\mathbf{k}| :$$

Լրացում: Եթե (5) պայմանում \mathbf{l} վեկտորն արտահայտենք ուղիղ ցանցի հիմնական վեկտորների միջոցով՝

$$\mathbf{l} = u\mathbf{a}_1 + v\mathbf{a}_2 + w\mathbf{a}_3,$$

կստանանք՝

$$u\mathbf{a}_1(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + v\mathbf{a}_2(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + w\mathbf{a}_3(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = 2\pi m : \quad (7)$$

Քանի որ u, v, w գործակիցները կամայական ամբողջ թվեր են, ապա (7) առնչությունից հետևում է, որ

$$\mathbf{a}_1(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = 2\pi m_1, \quad \mathbf{a}_2(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = 2\pi m_2, \quad \mathbf{a}_3(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = 2\pi m_3 : \quad (8)$$

(8) առնչությունները հայտնի են որպես Լաուեի հավասարումներ դիֆրակցիայի համար:

1.61. Բրեգի բանաձևի համաձայն՝

$$2d \sin \theta = n\lambda, \quad (1)$$

որտեղ d -ն ցանցի հաստատունն է, θ -ն՝ սահքի անկյունը, n -ը՝ անդրադարձման կարգը, λ -ն՝ ճառագայթման ալիքի երկարությունը: (1) բանաձևից ցանցի հաստատունի համար կստանանք՝

$$d = \frac{n\lambda}{2 \sin \theta} = \frac{2,1 \text{ \AA}}{2 \sin 10^\circ 5'} = 6 \text{ \AA} :$$

1.62. Բրեգի բանաձևի համաձայն՝

$$2d \sin \theta = n\lambda, \quad (1)$$

որտեղ d -ն միջհարթությունային հեռավորությունն է (ցանցի հաստատունը), θ -ն՝ սահքի անկյունը, n -ը՝ անդրադարձման կարգը, λ -ն՝ ճառագայթման ալիքի երկարությունը: (1) բանաձևը գրենք $n = 1$ անդրադարձման համար և որոշենք ճառագայթման ալիքի երկարությունը՝

$$\lambda = 2d \sin \theta_1 :$$

$n = 2$ անդրադարձմանը համապատասխանող անկյունը՝

$$\sin \theta_2 = \frac{\lambda}{d} = \frac{2d \sin \theta_1}{d} = 2 \sin \theta_1 \approx 0,2985,$$

այսինքն՝

$$\theta_2 \approx 17^\circ 22' :$$

1.63. (111) հարթությունների ընտանիքից անդրադառնալիս դիֆրակցիայի պայմանը տեղի ունի միայն $n = 1$ դեպքում՝

$$2d_{111} \sin \theta = \lambda : \quad (1)$$

Խորանարդային ցանցում միջհարթությունային հեռավորությունն արտահայտվում է ցանցի a հաստատունի և տվյալ հարթությունների ընտանիքի միլերյան ցուցիչների միջոցով՝

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}, \text{ ուստի } d_{111} = \frac{a}{\sqrt{3}} : \quad (2)$$

(1) և (2) բանաձևերից ցանցի a հաստատունը կարելի է արտահայտել փորձից հայտնի մեծությունների միջոցով՝

$$a = \frac{\sqrt{3}\lambda}{2 \sin \theta} :$$

Հայտնի է, որ միատակենտրոն ցանցի տարրական խորանարդում պարունակվում է 4 ատոմ, ուստի ատոմների թիվը միավոր ծավալում՝

$$n_0 = 4 \frac{1}{a^3} = \frac{32 \sin^3 \theta}{3\sqrt{3}\lambda^3} : \quad (3)$$

Մյուս կողմից, ատոմների թիվը 1 սմ^3 -ում կարելի է ներկայացնել հետևյալ բանաձևով՝

$$n_0 = \frac{N}{V} = \frac{\nu N_A}{V} = \frac{m}{\mu V} N_A = \frac{\rho}{\mu} N_A, \quad (4)$$

որտեղ ρ -ն նյութի խտությունն է, μ -ն՝ մոլային զանգվածը: (3) և (4) բանաձևերից հետևում է, որ

$$N_A = \frac{\mu}{\rho} n_0 = \frac{32}{3\sqrt{3}} \frac{\mu \sin^3 \theta}{\rho \lambda^3} : \quad (5)$$

(5) բանաձևում տեղադրելով ալյումինի պարամետրերը՝ $\rho = 2,699 \text{ գ/սմ}^3$, $\mu = 26,98 \text{ գ/մոլ}$ և $\theta = 19^\circ 12'$, $\lambda = 1,537 \text{ \AA}$, կստանանք՝

$$N_A = \frac{32}{3\sqrt{3}} \frac{26,98}{2,699} \frac{\sin^3 19^\circ 12'}{(1,537)^3 \cdot 10^{-24}} \frac{1}{\text{մոլ}} \approx 6 \cdot 10^{23} \text{ մոլ}^{-1} :$$

1.64. Պարզ խորանարդային ցանցի դեպքում Լաուեի պայմանները կարելի է ներկայացնել

$$\begin{aligned} a(\cos \alpha - \cos \alpha_0) &= n_1 \lambda, \\ a(\cos \beta - \cos \beta_0) &= n_2 \lambda, \quad n_1, n_2, n_3 = \pm 1, \pm 2, \pm \dots \\ a(\cos \gamma - \cos \gamma_0) &= n_3 \lambda \end{aligned} \quad (1)$$

հավասարումներով, որտեղ a -ն ցանցի հաստատունն է, $(\alpha_0, \beta_0, \gamma_0)$ և (α, β, γ) եռյակները որոշում են համապատասխանաբար ընկնող և դիֆրակտված փնջերի ուղղությունները:

Նկատի ունենալով ուղղորդ կոսինուսների միջև կապերը՝

$$\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma = 1, \quad \cos^2 \alpha_0 + \cos^2 \beta_0 + \cos^2 \gamma_0 = 1,$$

(1) հավասարումներից կստանանք՝

$$\begin{aligned}
 & a^2(\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma + \cos^2 \alpha_0 + \cos^2 \beta_0 + \cos^2 \gamma_0) - \\
 & - 2 \cos \alpha \cos \alpha_0 - 2 \cos \beta \cos \beta_0 - 2 \cos \gamma \cos \gamma_0 = \\
 & = 2a^2[1 - (\cos \alpha \cos \alpha_0 + \cos \beta \cos \beta_0 + \cos \gamma \cos \gamma_0)] = \\
 & = (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)\lambda^2 :
 \end{aligned} \tag{2}$$

Ընկնող և դիֆրակտված փնջերի միջև անկյունը նշանակենք 2θ -ով:
Այդ դեպքում

$$\cos \alpha \cos \alpha_0 + \cos \beta \cos \beta_0 + \cos \gamma \cos \gamma_0 = \cos 2\theta, \tag{3}$$

հետևաբար, (2) և (3) բանաձևերից կստանանք՝

$$4a^2 \sin^2 \theta = \lambda^2 (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$$

կամ

$$\frac{2a \sin \theta}{\sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2}} = \lambda : \tag{4}$$

Եթե n_1 -ը, n_2 -ը և n_3 -ն ունեն ընդհանուր բաժանարար՝ $n_1 = hn$, $n_2 = kn$, $n_3 = ln$, որտեղ h -ը, k -ն և l -ը միլերյան ցուցիչներն են, ապա (4) բանաձևից հետևում է, որ

$$2d \sin \theta = n\lambda, \tag{5}$$

որտեղ

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

մեծությունը միջհարթությունային հեռավորությունն է (hkl) ընտանիքի համար: (5) հավասարումը հենց Բրեգի բանաձևն է:

1.65. Բրեգի բանաձևի համաձայն՝

$$2d \sin \theta = n\lambda :$$

Ուղղանկյուն համակարգում (hkl) հարթությունների ընտանիքի միջհարթությունային հեռավորությունը (տես խնդիր 1.49)՝

$$\frac{1}{d} = \sqrt{\frac{h^2}{a_1^2} + \frac{k^2}{a_2^2} + \frac{l^2}{a_3^2}},$$

ուստի

$$\sin^2 \theta = \frac{\lambda^2}{4d^2} = \frac{\lambda^2}{4} \left(\frac{h^2}{a_1^2} + \frac{k^2}{a_2^2} + \frac{l^2}{a_3^2} \right):$$

[101] ուղղության համար

$$\sin^2 \theta_1 = \frac{\lambda^2}{4} \left(\frac{1}{a_1^2} + \frac{1}{a_3^2} \right) \approx 0,0279, \quad \theta_1 \approx 9^\circ 36',$$

[110] ուղղության համար

$$\sin^2 \theta_2 = \frac{\lambda^2}{4} \left(\frac{1}{a_1^2} + \frac{1}{a_3^2} \right) \approx 0,0101, \quad \theta_2 \approx 5^\circ 54':$$

1.66. Բրեգի բանաձևում տեղադրենք միջհարթությունային հեռավորության արտահայտությունը խորանարդային ցանցի համար՝

$$2d \sin \theta = 2 \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \sin \theta = n\lambda,$$

որտեղից՝

$$\sin^2 \theta = \frac{\lambda^2}{4a^2} (h^2 + k^2 + l^2) n^2, \quad n \geq 1: \quad (1)$$

Քանի որ $\sin \theta$ -ի առավելագույն արժեքը 1-ն է, ապա (1) բանաձևից հետևում է, որ

$$(h^2 + k^2 + l^2)_{\max} = \frac{4a^2}{\lambda^2} \approx 10,2, \quad \text{երբ } n = 1:$$

Այսպիսով, ռենտգենագրի վրա կստացվեն այն հարթությունների ընտանիքների գծերը, որոնց միլերյան ցուցիչների քառակուսիների գումարը չի գերազանցում 10-ը (տես աղյուսակը):

(hkl)	(100)	(110)	(111)	(200)	(210)	(211)	(220)	(300)	(310)
$h^2 + k^2 + l^2$	1	2	3	4	5	6	8	9	10

1.67. Գրենք պարզ խորանարդային ցանցի դեպքում ինտերֆերենցային մաքսիմումների Լաուեի պայմանները.

$$\begin{aligned} a(\cos \alpha - \cos \alpha_0) &= n_1 \lambda, \\ a(\cos \beta - \cos \beta_0) &= n_2 \lambda, \\ a(\cos \gamma - \cos \gamma_0) &= n_3 \lambda, \end{aligned} \quad (1)$$

որտեղ a -ն ցանցի հաստատունն է, α_0 -ն, β_0 -ն, γ_0 -ն՝ ընկնող ճառագայթման ուղղությունը որոշող անկյունները, α -ն, β -ն, γ -ն որոշում են ինտերֆերենցային մաքսիմումներին համապատասխանող ուղղությունը, n_1 -ը, n_2 -ը և n_3 -ը՝ սպեկտրի կարգը, λ -ն՝ ալիքի երկարությունը:

Քանի որ

$$\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma = 1, \quad \cos^2 \alpha_0 + \cos^2 \beta_0 + \cos^2 \gamma_0 = 1, \quad (2)$$

սպա (1) և (2) հավասարումներից հետևում է, որ

$$\left(\frac{n_1 \lambda}{a} + \cos \alpha_0 \right)^2 + \left(\frac{n_2 \lambda}{a} + \cos \beta_0 \right)^2 + \left(\frac{n_3 \lambda}{a} + \cos \gamma_0 \right)^2 = 1,$$

որտեղից՝

$$\lambda = -2a \frac{n_1 \cos \alpha_0 + n_2 \cos \beta_0 + n_3 \cos \gamma_0}{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2} :$$

Այսինքն՝ ինտերֆերենցային մաքսիմումներ կդիտվեն միայն որոշակի երկարությամբ ալիքների համար:

1.68. 1. Գրենք Բրեգի պայմանը՝

$$2d \sin \theta = m \lambda : \quad (1)$$

Ներմուծենք $\mathbf{k} = (2\pi/\lambda)\mathbf{n}$ ալիքային վեկտորը, իսկ միջատոմական d հեռավորությունն արտահայտենք տրված հարթությունների ընտանիքին ուղղահայաց հակադարձ ցանցի \mathbf{g}_{\min} ամենավոքոր վեկտորի մոդուլի միջոցով՝ $d = 2\pi/|\mathbf{g}_{\min}|$: Նոր նշանակումներով (1) առնչությունը կընդունի

$$2 \frac{2\pi}{|\mathbf{g}_{\min}|} \sin \theta = m \frac{2\pi}{|\mathbf{k}|} \quad (2)$$

տեսքը: Ներմուծենք նաև \mathbf{g}_{\min} -ին զուգահեռ $\mathbf{g} = m\mathbf{g}_{\min}$ վեկտորը, որից հետո (2) բանաձևից կստանանք՝

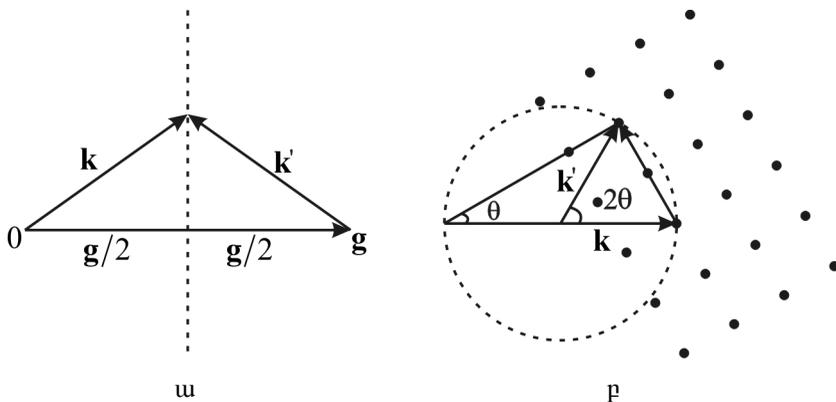
$$2 \sin \theta |\mathbf{k}| = m |\mathbf{g}_{\min}| \equiv |\mathbf{g}|: \quad (3)$$

(3) առնչության աջ և ձախ մասերը բազմապատկելով $|\mathbf{g}|$ -ով և նկատի ունենալով, որ

$$|\mathbf{k}| |\mathbf{g}| \sin \theta = -|\mathbf{k}| |\mathbf{g}| \cos \left(\frac{\pi}{2} + \theta \right) = \mathbf{k} \mathbf{g},$$

որտեղ $\pi/2 + \theta$ -ն \mathbf{k} -ի և \mathbf{g} -ի միջև անկյունն է, կստանանք՝

$$2\mathbf{k}\mathbf{g} + \mathbf{g}^2 = 0 \quad \text{կամ} \quad \mathbf{k}\mathbf{n}_g = \frac{1}{2} \mathbf{g}, \quad (4)$$



Նկ.1.26

որտեղ \mathbf{n}_g -ն \mathbf{g} -ով ուղղված միավոր վեկտոր է: (4) հավասարումը երկրաչափորեն նշանակում է, որ \mathbf{k} վեկտորի ծայրը \mathbf{g} -ին ուղղահայաց և այն կիսող հարթության մեջ է: \mathbf{k} -տարածության մեջ այս հարթությունները կոչվում են բրեգյան (նկ. 1.26ա):

2. Լատեի պայմանը կարելի է ներկայացնել հետևյալ տեսքով (տես խնդիր 1.60).

$$\mathbf{k} - \mathbf{k}' = \mathbf{g} : \quad (5)$$

Հարմար է (5) պայմանում $\mathbf{g} \rightarrow -\mathbf{g}$ (քանի որ այն ճիշտ է կամայական \mathbf{g} -ի համար), որից հետո կատանանք՝

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{g} : \quad (6)$$

Պատկերենք հակադարձ ցանցի մի հատված (նկ. 1.26բ) և (6) առնչությունը ներկայացնենք երկրաչափորեն: Քանի որ $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$, ապա դրանց ծայրերը $|\mathbf{k}|$ շառավղով գնդոլորտի վրա են: Գիֆրակտված ճառագայթն առաջանում է, երբ գնդոլորտն անցնում է հակադարձ ցանցի մեկ այլ հանգույցով և, և այն տարածվում է \mathbf{k}' վեկտորի ուղղությամբ: Այս կառուցումը հայտնի է որպես Էվալդի կառուցում:

1.69. Գրենք Լատեի պայմանը՝

$$d(\cos \theta - \cos \theta_0) = n\lambda ,$$

որտեղ d -ն դիֆրակտային ցանցի հաստատունն է, θ -ն՝ այն անկյունը, որը համապատասխանում է ինտերֆերենցային մաքսիմումին, n -ը՝ մաքսիմումների կարգը:

Առաջին կարգի երկու մաքսիմումներին համապատասխանում են $n = +1$ և $n = -1$ արժեքները: Այսպիսով,

$$\cos \theta = \frac{n\lambda}{d} + \cos \theta_0, \quad \text{որտեղ } d = \frac{1}{2000} \text{ սմ} = 5 \cdot 10^{-4} \text{ սմ},$$

$$\cos \theta_1 = \frac{\lambda}{d} + \cos \theta_0 \approx 0,9998977 \quad \text{և} \quad \theta_1 \approx 49,17'$$

$$\cos \theta_2 = -\frac{\lambda}{d} + \cos \theta_0 \approx 0,9997977 \quad \text{և} \quad \theta_2 \approx 69' :$$

1.70. Նշանակենք d_1 -ով և d_2 -ով տվյալ հարթությունների համակարգի միջհարթությունային հեռավորությունները համապատասխանաբար t_1 և t_2 ջերմաստիճաններում: Բրեգի բանաձևի համաձայն՝

$$2d_1 \sin \theta_1 = \lambda \text{ և } 2d_2 \sin \theta_2 = \lambda$$

Գծային ընդարձակման ջերմաստիճանային գործակիցը՝

$$\alpha = \frac{\Delta d}{d \Delta t} = \frac{d_2 - d_1}{d_1 (t_2 - t_1)} = \frac{\lambda \left(\frac{1}{\sin \theta_2} - \frac{1}{\sin \theta_1} \right)}{\frac{\lambda}{2 \sin \theta_1} (t_2 - t_1)} = \frac{\sin \theta_1 - \sin \theta_2}{\sin \theta_2 (t_2 - t_1)} : \quad (1)$$

(1) բանաձևում տեղադրելով թվային արժեքները՝ կստանանք.

$$\alpha = \frac{\sin 80^\circ 9' - \sin 76^\circ 54'}{612 \sin 76^\circ 54'} \text{ Կ}^{-1} \approx 1,88 \cdot 10^{-5} \text{ Կ}^{-1} :$$

1.71. Սահմանման համաձայն՝ գծային ընդարձակման ջերմաստիճանային գործակիցը՝

$$\alpha = \frac{\Delta l}{l_0 \Delta t} = \frac{\Delta d}{d \Delta t},$$

որտեղ l -ը նմուշի սկզբնական երկարությունն է, Δl -ը՝ բացարձակ երկարացումը: Գրանք արտահայտվում են միջհարթությունային հեռավորության միջոցով՝ $l = Nd$, $\Delta l = N \Delta d$:

Ճշգրիտ արդյունքներ կստացվեն այն դեպքում, եթե ցանցի պարամետրի փոքր Δd փոփոխությանը համապատասխանի ռենտգենյան ճառագայթների անդրադարձման անկյան մեծ փոփոխություն:

Օգտվելով Բրեգի բանաձևից՝

$$2d \sin \theta = n \lambda ,$$

ստանանք տրված λ -ի համար միջհարթությունային d հեռավորության և անկյան փոփոխությունների միջև կապ.

$$d \cos \theta \Delta \theta + 2 \sin \theta \Delta d = 0$$

կամ

$$\Delta \theta = -\operatorname{tg} \theta \frac{\Delta d}{d} : \quad (1)$$

(1) բանաձևից հետևում է, որ տրված Δd -ի համար անկյան $\Delta \theta$ փոփոխությունն առավելագույնը կլինի մեծ անկյունների դեպքում ($\theta \rightarrow 90^\circ$):

1.72. Քառանկյուն ցանցի միջհարթությունային հեռավորությունը որոշվում է հետևյալ բանաձևով (տես խնդիր 1.49)՝

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2 + k^2}{a_1^2} + \frac{l^2}{a_3^2}}}$$

Գրենք Բրեգի բանաձևը տրված գծերի համար՝

$$2d_{h_1k_1l_1} \sin \theta_1 = \lambda \quad \text{և} \quad 2d_{h_2k_2l_2} \sin \theta_2 = \lambda : \quad (1)$$

Չևափոխենք (1) արտահայտությունները՝

$$\frac{1}{d_{h_1k_1l_1}^2} = \frac{h_1^2 + k_1^2}{a_1^2} + \frac{l_1^2}{a_3^2} = \frac{4 \sin^2 \theta_1}{\lambda^2},$$

$$\frac{1}{d_{h_2k_2l_2}^2} = \frac{h_2^2 + k_2^2}{a_1^2} + \frac{l_2^2}{a_3^2} = \frac{4 \sin^2 \theta_2}{\lambda^2} : \quad (2)$$

(2) հավասարումներից արտաքսելով a_3 -ը՝ a_1 -ի համար կստանանք.

$$\frac{(h_2^2 + k_2^2)l_1^2 - (h_1^2 + k_1^2)l_2^2}{a_1^2} = \frac{4}{\lambda^2} (l_1^2 \sin^2 \theta_2 - l_2^2 \sin^2 \theta_1),$$

որտեղից՝

$$a_1 = \frac{\lambda}{2} \sqrt{\frac{(h_2^2 + k_2^2)l_1^2 - (h_1^2 + k_1^2)l_2^2}{l_1^2 \sin^2 \theta_2 - l_2^2 \sin^2 \theta_1}} \approx 5,83158 \text{ \AA} :$$

1.73. Տարրական բջջի ցրած ճառագայթումն առանձին ատոմների ցրած ճառագայթումների վերադրում է, ուստի դրա լայնույթը համեմատական է երկրաչափական կառուցվածքային գործոնին՝

$$S_{\mathbf{K}} = \sum_{j=1}^s e^{i\mathbf{K}\mathbf{d}_j}$$

արտադրիչին, որտեղ $\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ -ն բրեգյան մաքսիմումին համապատասխանող ալիքային վեկտորի փոփոխությունն է, \mathbf{d}_j -ն՝ տարրական բջջում

j -րդ ատոմի դիրքը որոշող վեկտորը, S -ը՝ տարրական բջջում նույնատիպ ատոմների թիվը:

Ծավալակենտրոն խորանարդային ցանցը Բրավեի տիպի ցանց է, ուստի բրեգյան մաքսիմումներ կոլիտվեն այն դեպքում, եթե \mathbf{K} -ն նիստակենտրոն հակադարձ ցանցի վեկտոր է: Սակայն երբեմն հարմար է ծավալակենտրոն խորանարդային ցանցը դիտարկել որպես պարզ խորանարդային ցանց՝ բազիսով, որը բաղկացած է $\mathbf{d}_1 = 0$ և $\mathbf{d}_2 = a(\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k})/2$ կետերից, որտեղ \mathbf{i} -ն, \mathbf{j} -ն, \mathbf{k} -ն միավոր վեկտորներ են: Այս դեպքում հակադարձ ցանցը նույնպես պարզ խորանարդային ցանց է $2\pi/a$ երկարությանը կողով: \mathbf{K} -ով բնորոշվող բրեգյան մաքսիմումին համապատասխանող կառուցվածքային գործոնը՝

$$S_{\mathbf{K}} = \sum_{j=1}^2 e^{i\mathbf{K}\mathbf{d}_j} = e^{i\mathbf{K}\cdot 0} + e^{i\mathbf{K}\frac{a}{2}(\mathbf{i}+\mathbf{j}+\mathbf{k})} = 1 + e^{i\mathbf{K}\frac{a}{2}(\mathbf{i}+\mathbf{j}+\mathbf{k})} : \quad (1)$$

Պարզ խորանարդային հակադարձ ցանցի կամայական \mathbf{K} վեկտոր կարելի է ներկայացնել

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi}{a}(n_1\mathbf{i} + n_2\mathbf{j} + n_3\mathbf{k}) \quad (2)$$

տեսքով, հետևաբար՝ (1) և (2) բանաձևերից կստանանք՝

$$\begin{aligned} S_{\mathbf{K}} &= 1 + e^{i\pi(\mathbf{i}+\mathbf{j}+\mathbf{k})(n_1\mathbf{i}+n_2\mathbf{j}+n_3\mathbf{k})} = 1 + e^{i\pi(n_1+n_2+n_3)} = 1 + (-1)^{n_1+n_2+n_3} = \\ &= \begin{cases} 2, & \text{եթե } n_1 + n_2 + n_3 - \text{ը գույգ թիվ է,} \\ 0, & \text{եթե } n_1 + n_2 + n_3 - \text{ը կենտ թիվ է:} \end{cases} \end{aligned}$$

Այսպիսով, պարզ ցանցի այն հանգույցները, որոնց կոորդինատների գումարը (արտահայտված $2\pi/a$ միավորով) կենտ է, բրեգյան անդրադարձումներ չեն տալիս, այսինքն՝ բազիսով պարզ խորանարդային ցանցը վերածվում է նիստակենտրոն խորանարդային ցանցի, որը կստացվեր, եթե ծավալակենտրոն խորանարդային ուղիղ ցանցը դիտվեր ոչ թե որպես բազիսով ցանց, այլ որպես Բրավեի տիպի ցանց:

1.74. Նիստակենտրոն ցանցը դիտարկենք որպես պարզ խորանարդային ցանց՝ բազիսով, որը կազմող ատոմների կոորդինատներն են՝

$$\mathbf{d}_1 = 0, \mathbf{d}_2 = \frac{a}{2}(\mathbf{i} + \mathbf{j}), \mathbf{d}_3 = \frac{a}{2}(\mathbf{j} + \mathbf{k}), \mathbf{d}_4 = \frac{a}{2}(\mathbf{k} + \mathbf{i}):$$

Այս դեպքում հակադարձ ցանցը նույնպես պարզ խորանարդային ցանց է $2\pi/a$ կողով, ուստի երկրաչափական կառուցվածքային գործոնը՝

$$\begin{aligned} S_{\mathbf{K}} &= \sum_{j=1}^4 e^{i\mathbf{K}\mathbf{d}_j} = 1 + e^{i\mathbf{K}\frac{a}{2}(\mathbf{i}+\mathbf{j})} + e^{i\mathbf{K}\frac{a}{2}(\mathbf{j}+\mathbf{k})} + e^{i\mathbf{K}\frac{a}{2}(\mathbf{k}+\mathbf{i})} = \\ &= 1 + e^{i\frac{a}{2}(\mathbf{i}+\mathbf{j})\frac{2\pi}{a}(n_1\mathbf{i}+n_2\mathbf{j}+n_3\mathbf{k})} + e^{i\frac{a}{2}(\mathbf{j}+\mathbf{k})\frac{2\pi}{a}(n_1\mathbf{i}+n_2\mathbf{j}+n_3\mathbf{k})} + \\ &+ e^{i\frac{a}{2}(\mathbf{k}+\mathbf{i})\frac{2\pi}{a}(n_1\mathbf{i}+n_2\mathbf{j}+n_3\mathbf{k})} = 1 + e^{i\pi(n_1+n_2)} + e^{i\pi(n_2+n_3)} + e^{i\pi(n_3+n_1)} = \\ &= \begin{cases} 4, & \text{եթե } n_1 + n_2 = \text{զույգ}, n_1 + n_3 = \text{զույգ}, n_2 + n_3 = \text{զույգ}, \\ & (\text{այսինքն՝ բոլոր } n_i \text{-երն ունեն նույն զույգությունը)} \\ 0, & \text{եթե որևէ երկու } n_i \text{ զույգ են, իսկ երրորդը՝ կենտ:} \end{cases} \end{aligned}$$

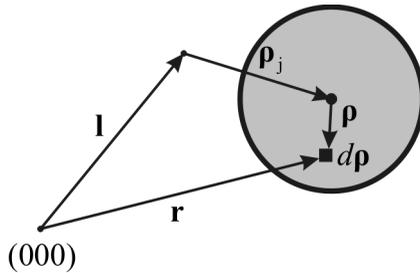
Այսպիսով, պարզ ցանցի այն հանգույցները, որոնց երկու կոորդինատները զույգ են, իսկ երրորդը՝ կենտ, բրեգյան անդրադարձումներ չեն տալիս, այսինքն՝ բազիսով պարզ խորանարդային ցանցը վերածվում է ծավալակենտրոն ցանցի, որը կստացվեր, եթե նիստակենտրոն խորանարդային ուղիղ ցանցը դիտվեր ոչ թե որպես բազիսով ցանց, այլ որպես Բրավեի տիպի ցանց:

(200) հարթությունների ընտանիքի համար $n_1 = h = 2, n_2 = k = 0, n_3 = l = 0$, ուստի $n_1 + n_2 = 2, n_2 + n_3 = 0, n_3 + n_1 = 2$ և $S_{(200)} = 4$, իսկ (101) հարթությունների ընտանիքի համար $n_1 = h = 1, n_2 = k = 0, n_3 = l = 1$, ուստի $n_1 + n_2 = 1, n_2 + n_3 = 1, n_3 + n_1 = 2$, և $S_{(101)} = 0$: Այսինքն՝ նիստակենտրոն ցանցի ռենտգենագրի վրա կստացվի միայն (200) հարթություններից անդրադարձմանը համապատասխանող գիծը:

1.75. Գիցուք՝ ցանցի բազիսը պարունակում է S ատոմ, որոնցից j -րդի միջուկի դիրքը որոշվում է

$$\boldsymbol{\rho}_j = x_j \mathbf{a}_1 + y_j \mathbf{a}_2 + z_j \mathbf{a}_3$$

վեկտորով, որտեղ $0 \leq x_j, y_j, z_j \leq 1$, \mathbf{a}_1 -ը, \mathbf{a}_2 -ը և \mathbf{a}_3 -ն ուղիղ ցանցի հիմնական վեկտորներն են: Որպես կոորդինատների սկզբնակետ ընտրենք (000) հանգույցը (նկ. 1.27): j -րդ ատոմի դիրքը կորոշվի $\mathbf{l} + \boldsymbol{\rho}_j$ վեկտորով, որտեղ \mathbf{l} -ը ցանցի տեղափոխության վեկտոր է:



Նկ.1.27

Էլեկտրոնների բաշխումը բյուրեղում կարելի է նկարագրել որպես առանձին ատոմներում էլեկտրոնների բաշխումների վերադրում: j -րդ ատոմում էլեկտրոնների խտությունը՝

$$c_j(\boldsymbol{\rho}) \equiv c_j(\mathbf{r} - \mathbf{l} - \boldsymbol{\rho}_j),$$

ուստի էլեկտրոնների լրիվ խտությունը՝

$$n(\mathbf{r}) = \sum_1^S \sum_{j=1}^S c_j(\mathbf{r} - \mathbf{l} - \boldsymbol{\rho}_j): \quad (1)$$

$A_{\Delta \mathbf{k}}$ -ի արտահայտությունից և (1) բանաձևից հետևում է, որ

$$\begin{aligned} A_{\Delta \mathbf{k}} &= \sum_1^S \sum_{j=1}^S \int c_j(\mathbf{r} - \mathbf{l} - \boldsymbol{\rho}_j) e^{-i\mathbf{r}\Delta \mathbf{k}} = \sum_1^S \sum_{j=1}^S \int c_j(\mathbf{r}') e^{-i\Delta \mathbf{k}(\mathbf{r}' + \mathbf{l} + \boldsymbol{\rho}_j)} = \\ &= \sum_1^S e^{-i\Delta \mathbf{k}\mathbf{l}} \sum_{j=1}^S e^{-i\Delta \mathbf{k}\boldsymbol{\rho}_j} f_j(\Delta \mathbf{k}), \end{aligned}$$

որտեղ

$$f_j(\Delta \mathbf{k}) \equiv \int c_j(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{r}\Delta \mathbf{k}}$$

մեծությունը կոչվում է ատոմային ցրման գործոն (ֆորմֆակտոր) և իրենից ներկայացնում է էլեկտրոնային բաշխման ֆուրիե-գործակիցը:

Այսպիսով,

$$A_{\Delta \mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{l}} e^{-i\Delta \mathbf{k}\mathbf{l}} \tilde{S}_{\Delta \mathbf{k}},$$

որտեղ

$$\tilde{S}_{\Delta \mathbf{k}} = \sum_{j=1}^s f_j(\Delta \mathbf{k}) e^{-i\Delta \mathbf{k}\rho_j}$$

մեծությունը կոչվում է բազիսի կառուցվածքային գործոն:

Մասնավոր դեպքում, երբ բազիսը կազմված է նույնատիպ ատոմներից, և $\Delta \mathbf{k} = \mathbf{G}$,

$$\tilde{S}_{\mathbf{G}} = f(\mathbf{G}) \sum_{j=1}^s e^{-i\mathbf{G}\rho_j} \equiv f(\mathbf{G}) S_{\mathbf{G}},$$

որտեղ $S_{\mathbf{G}}$ -ն երկրաչափական կառուցվածքային գործոնն է:

1.76. Խնդրի պայմանի համաձայն՝

$$c(\mathbf{r}) = \frac{Z}{\frac{4\pi}{3}R^3} = \frac{3Z}{4\pi R^3} \equiv n, \text{ երբ } r \leq R, \quad c(\mathbf{r}) = 0, \text{ երբ } r > R: \quad (1)$$

Ատոմային ցրման գործոնի սահմանման համաձայն՝

$$\begin{aligned} f(G) &= \int c(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G}\mathbf{r}} d\mathbf{r} = n \int_0^R \int_0^\pi \int_0^{2\pi} e^{-iGr \cos \theta} r^2 \sin \theta d\theta \varphi dr = \\ &= \frac{4\pi n}{G} \int_0^R r \sin(Gr) dr = \frac{4\pi n}{G^3} \int_0^{GR} x \sin x dx = \quad (2) \\ &= \frac{4\pi n}{G^3} \left\{ -x \cos x \Big|_0^{GR} + \int_0^{GR} \cos x dx \right\} = \frac{4\pi n}{G^3} \{ -GR \cos GR + \sin GR \}: \end{aligned}$$

Մասնավոր դեպքում, երբ $G \rightarrow 0$, (2) արտահայտությունից հետևում է, որ

$$f(G \rightarrow 0) = \frac{4\pi n}{G^3} \left\{ -GR \left[1 - \frac{1}{2}(GR)^2 + \frac{1}{4!}(GR)^4 + \dots \right] + \left[GR - \frac{1}{3!}(GR)^3 + \frac{1}{5!}(GR)^5 + \dots \right] \right\} = \frac{4\pi n}{G^3} \left\{ -GR + \frac{1}{2}(GR)^3 + GR - \frac{1}{6}(GR)^3 + 0(GR)^4 \right\} = \frac{4\pi}{3} R^3 n :$$

Նկատի ունենալով նաև (1) պայմանը՝ կստանանք.

$$f(G \rightarrow 0) = \frac{4\pi}{3} R^3 \frac{3Z}{4\pi R^3} = Z :$$

1.77. $A(\Delta \mathbf{k})$ -ի արտահայտությունը ներկայացնենք հետևյալ տեսքով՝

$$A(\Delta \mathbf{k}) = \sum_{n_1 n_2 n_3} e^{-ia_1 \Delta k n_1 - ia_2 \Delta k n_2 - ia_3 \Delta k n_3} \equiv A_1 A_2 A_3, \quad (1)$$

որտեղ

$$A_j(\Delta \mathbf{k}) = \sum_{n_j} e^{-ia_j \Delta k n_j}, \quad j = 1, 2, 3 :$$

Դիցուք՝ j առանցքի երկայնքով բյուրեղը պարունակում է $N_j (\gg 1)$ տարրական բջիջ: Օգտվելով երկրաչափական պրոգրեսիայի գումարի բանաձևից՝ կստանանք.

$$A_j(\Delta \mathbf{k}) = \sum_{n_j=0}^{N_j-1} \left(e^{-ia_j \Delta \mathbf{k}} \right)^{n_j} = \frac{1 - e^{-ia_j \Delta \mathbf{k} N_j}}{1 - e^{-ia_j \Delta \mathbf{k}}} = \frac{e^{-\frac{ia_j \Delta \mathbf{k} N_j}{2}} \sin \left(\frac{N_j \mathbf{a}_j \Delta \mathbf{k}}{2} \right)}{e^{-\frac{ia_j \Delta \mathbf{k}}{2}} \sin \left(\frac{\mathbf{a}_j \Delta \mathbf{k}}{2} \right)} : \quad (2)$$

(2) բանաձևում տեղադրելով $\mathbf{a}_j \Delta \mathbf{k} = 2\pi h + \varepsilon$ արտահայտությունը, որտեղ h -ն ամբողջ թիվ է, կստանանք՝

$$|A_j(\Delta \mathbf{k})| = \left| \frac{\sin\left(N_j \pi h + N_j \frac{\varepsilon}{2}\right)}{\sin\left(\pi h + \frac{\varepsilon}{2}\right)} \right| = \left| \frac{\sin\left(N_j \frac{\varepsilon}{2}\right)}{\sin\left(\frac{\varepsilon}{2}\right)} \right| : \quad (3)$$

Համարիչի երկու հարևան գրոնների (արմատների) միջև հեռավորությունը որոշվում է $N_j \varepsilon = 2\pi$ պայմանից՝ $\varepsilon = 2\pi/N_j$:

(3) բանաձևից հետևում է, որ

$$|A_j(\Delta \mathbf{k})| = \left. \frac{\sin\left(N_j \frac{\varepsilon}{2}\right)}{\sin\left(\frac{\varepsilon}{2}\right)} \right|_{\varepsilon \rightarrow 0} = N_j :$$

Այսպիսով, $A(\Delta \mathbf{k})$ -ն ընդունում է առավելագույն արժեք, (երբ տեղի ունեն Լատեի պայմանները՝ $\mathbf{a}_1 \Delta \mathbf{k} = 2\pi h$, $\mathbf{a}_2 \Delta \mathbf{k} = 2\pi k$, $\mathbf{a}_3 \Delta \mathbf{k} = 2\pi l$, կամ $\Delta \mathbf{k} = \mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{G}$, որտեղ \mathbf{G} -ն հակադարձ ցանցի կամայական վեկտոր է), որը հավասար է

$$|A_{j_{\max}}(\mathbf{G})| = N_1 N_2 N_3 = N,$$

որտեղ N -ը բյուրեղում տարրական բջիջների թիվն է:

Գլուխ II. Կապերի տեսակները բյուրեղներում

2.1. Նկ. 2.1.-ից երևում է, որ $\mathbf{r}_{2a} = \mathbf{R} + \mathbf{r}_2$, $\mathbf{r}_{1b} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{R}$, $\mathbf{r}_{12} = \mathbf{R} + \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$:

Հետևաբար՝

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_{2a}|} = \frac{1}{R} \left[1 + 2 \frac{\mathbf{r}_2 \mathbf{R}}{R^2} + \left(\frac{r_2}{R} \right)^2 \right]^{-1/2}, \quad \frac{1}{|\mathbf{r}_{1b}|} = \frac{1}{R} \left[1 - 2 \frac{\mathbf{r}_1 \mathbf{R}}{R^2} + \left(\frac{r_1}{R} \right)^2 \right]^{-1/2}$$

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_{12}|} = \frac{1}{R} \left[1 - 2 \frac{\mathbf{r}_1 \mathbf{R}}{R^2} + 2 \frac{\mathbf{r}_2 \mathbf{R}}{R^2} - 2 \frac{\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2}{R^2} + \left(\frac{r_1}{R} \right)^2 + \left(\frac{r_2}{R} \right)^2 \right]^{-1/2} :$$

Քանի որ $r_1, r_2 \ll R$, ապա նկատի ունենալով $x \ll 1$ դեպքում

$(1+x)^{-1/2} \approx 1 - \frac{1}{2}x + \frac{3}{8}x^2$ վերլուծությունը՝ կատանանք.

$$\begin{aligned} \frac{1}{r_{2a}} &\approx \frac{1}{R} \left[1 - \frac{\mathbf{r}_2 \mathbf{R}}{R^2} - \frac{1}{2} \left(\frac{r_2}{R} \right)^2 + \frac{3}{8} \left(2 \frac{\mathbf{r}_2 \mathbf{R}}{R^2} + \left(\frac{r_2}{R} \right)^2 \right)^2 \right] \approx \\ &\approx \frac{1}{R} \left[1 - \frac{\mathbf{r}_2 \mathbf{R}}{R^2} - \frac{1}{2} \left(\frac{r_2}{R} \right)^2 + \frac{3}{2} \left(\frac{\mathbf{r}_2 \mathbf{R}}{R^2} \right)^2 \right] : \end{aligned} \quad (1)$$

Համանմանորեն՝

$$\frac{1}{r_{1b}} \approx \frac{1}{R} \left[1 + \frac{\mathbf{r}_1 \mathbf{R}}{R^2} - \frac{1}{2} \left(\frac{r_1}{R} \right)^2 + \frac{3}{2} \left(\frac{\mathbf{r}_1 \mathbf{R}}{R^2} \right)^2 \right], \quad (2)$$

$$\frac{1}{r_{12}} \approx \frac{1}{R} \left[1 + \frac{\mathbf{r}_1 \mathbf{R}}{R^2} - \frac{\mathbf{r}_2 \mathbf{R}}{R^2} + \frac{\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2}{R^2} - \frac{1}{2} \left(\frac{r_1}{R} \right)^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{r_2}{R} \right)^2 + \right.$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{3}{8} \left(-2 \frac{\mathbf{r}_1 \mathbf{R}}{R^2} + 2 \frac{\mathbf{r}_2 \mathbf{R}}{R^2} - 2 \frac{\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2}{R^2} + \left(\frac{r_1}{R} \right)^2 + \left(\frac{r_2}{R} \right)^2 \right)^2 \approx \\
& \approx \frac{1}{R} \left[1 + \frac{\mathbf{r}_1 \mathbf{R}}{R^2} - \frac{\mathbf{r}_2 \mathbf{R}}{R^2} + \frac{\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2}{R^2} - \frac{1}{2} \left(\frac{r_1}{R} \right)^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{r_2}{R} \right)^2 + \right. \\
& \left. + \frac{3}{2} \left(\left(\frac{\mathbf{r}_1 \mathbf{R}}{R^2} \right)^2 + \left(\frac{\mathbf{r}_2 \mathbf{R}}{R^2} \right)^2 - 2 \frac{\mathbf{r}_1 \mathbf{R}}{R^2} \cdot \frac{\mathbf{r}_2 \mathbf{R}}{R^2} \right) \right] : \quad (3)
\end{aligned}$$

(1)–(3) արտահայտությունները տեղադրելով կուլոնյան փոխազդեցության էներգիայի

$$\hat{H}' = \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{2a}} - \frac{e^2}{r_{1b}}$$

արտահայտության մեջ և ընդհանուր հանելով e^2/R արտադրիչը, դժվար չէ նկատել, որ բոլոր անդամները կրճատվում են, բացի (3) արտահայտության չորրորդ՝ $\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 / R^2$ և վերջին՝ $-3(\mathbf{r}_1 \mathbf{R})(\mathbf{r}_2 \mathbf{R}) / R^4$ անդամներից, ուստի կստանանք՝

$$\hat{H}' = \frac{e^2}{R} \left[\frac{\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2}{R^2} - \frac{3(\mathbf{r}_1 \mathbf{R})(\mathbf{r}_2 \mathbf{R})}{R^4} \right] = \frac{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2}{R^3} - \frac{3(\mathbf{p}_1 \mathbf{R})(\mathbf{p}_2 \mathbf{R})}{R^5} :$$

2.2. Հավասարակշռության վիճակում $r = r_0$ հեռավորությամբ ատոմների փոխազդեցության պոտենցիալ էներգիան փոքրագույնն է, ուստի՝

$$\left(\frac{dU}{dr} \right)_{r=r_0} = 0, \quad \left(\frac{d^2U}{dr^2} \right)_{r=r_0} > 0 :$$

Այս պայմաններից հետևում է, որ

$$\left(\frac{dU}{dr} \right)_{r=r_0} = \frac{n\alpha}{r_0^{n+1}} - \frac{m\beta}{r_0^{m+1}} = 0, \quad (1)$$

$$\left(\frac{d^2U}{dr^2}\right)_{r=r_0} = -\frac{n(n+1)\alpha}{r_0^{n+2}} + \frac{m(m+1)\beta}{r_0^{m+2}} > 0: \quad (2)$$

(1) և (2) արտահայտություններից բխում են հետևյալ առնչությունները՝

$$r_0^{m-n} = \frac{m\beta}{n\alpha},$$

$$r_0^{m-n} < \frac{m(m+1)\beta}{n(n+1)\alpha},$$

որոնց համաձայն՝

$$\frac{m\beta}{n\alpha} < \frac{m(m+1)\beta}{n(n+1)\alpha},$$

որից հետևում է՝ $m > n$:

2.3. ա. Կապված վիճակում $(dU/dr)_{r=r_0} = 0$: Հետևաբար՝

$$\frac{\alpha}{r_0^2} - \frac{8\beta}{r_0^9} = 0 \quad \text{և} \quad r_0 = \left(\frac{8\beta}{\alpha}\right)^{1/7} :$$

բ. Կապված վիճակում ձգողության էներգիան՝ $U_{01} = -\alpha/r_0$, իսկ վանողության էներգիան՝ $U_{02} = \beta/r_0^8$: Օգտվենք ա. կետում r_0 -ի համար ստացված արտահայտությունից.

$$U_{02} = \frac{\beta}{r_0^8} = \frac{\beta}{r_0} \frac{\alpha}{8\beta} = \frac{\alpha}{8r_0} = \frac{1}{8}|U_{01}| :$$

գ. Երկու մասնիկների փոխազդեցության լրիվ պոտենցիալ էներգիան՝

$$U_0 \equiv U(r_0) = U_{01} + U_{02} = -\frac{\alpha}{r_0} + \frac{\beta}{r_0^8} = -\frac{\alpha}{r_0} + \frac{\alpha}{8r_0} = -\frac{7\alpha}{8r_0} :$$

դ. Մասնիկների միջև գործող ուժը՝

$$\mathbf{F} = -\mathit{grad}U(\mathbf{r}),$$

որի առավելագույն արժեքին համապատասխանող r_1 հեռավորությունը կարելի է որոշել

$$\left(\frac{dF}{dr}\right)_{r=r_1} = \left(\frac{d^2U}{dr^2}\right)_{r=r_1} = 0$$

պայմանից:

2.4. Ատոմների միջև գործող համագոր ուժը հավասարակշռության վիճակում զրո է՝

$$F(r_0) = \left| -gradU(\mathbf{r}) \right|_{r=r_0} = 0, \quad (1)$$

որտեղ r_0 -ն միջատոմային հեռավորությունն է: (1) արտահայտությունից հետևում է, որ

$$\left(\frac{dU}{dr}\right)_{r=r_0} = 0 \quad \text{և} \quad \frac{n\alpha}{r_0^{n+1}} = \frac{m\beta}{r_0^{m+1}}:$$

Մոլեկուլի դիսոցման էներգիան՝

$$U_{dis} = -U(r_0) = \frac{\alpha}{r_0^n} - \frac{\beta}{r_0^m} = \frac{\beta}{r_0^m} \left(\frac{m}{n} - 1 \right),$$

հետևաբար՝

$$\beta = \frac{nU_{dis}r_0^m}{m-n}, \quad \alpha = \frac{mU_{dis}r_0^n}{m-n}:$$

Ատոմների միջև գործող ուժի մոդուլը՝

$$F = \left| \frac{n\alpha}{r^{n+1}} - \frac{m\beta}{r^{m+1}} \right| = \frac{m\beta}{r^{n+1}} \left| r_0^{n-m} - r^{n-m} \right| = \frac{m\beta}{r^{n+1}} r_0^{n-m} \left| 1 - \left(\frac{r}{r_0} \right)^{n-m} \right|,$$

իսկ ուժերի հարաբերությունը՝

$$\frac{F_1}{F_2} = \left(\frac{r_2}{r_1} \right)^{n+1} \left| \frac{r_0^{n-m} - r_1^{n-m}}{r_0^{n-m} - r_2^{n-m}} \right|,$$

որտեղ $r_1 = 0,9r_0$, $r_2 = 1,1r_0$:

2.5. NaCl իոնային բյուրեղում կամայականորեն ընտրված իոնի և j իոնի փոխազդեցության էներգիան՝

$$U_j = \frac{\lambda}{r_j^n} \pm \frac{e^2}{r_j}, \quad (1)$$

որտեղ r_j -ն ընտրված իոնի հեռավորությունն է j իոնից, (+) նշանը համապատասխանում է նույնամուն, իսկ (-) նշանը՝ տարանուն իոնների փոխազդեցությանը: (1) առնչության առաջին գումարելին նկարագրում է իոնների վանողական փոխազդեցությունը, իսկ երկրորդ գումարելին կուլոնյան փոխազդեցության էներգիան է:

Եթե r_j -ն արտահայտենք ամենամոտ հարևանների միջև r հեռավորությամբ (ցանցի հաստատունով)՝

$$r_j = \alpha_j r$$

և գումարենք ընտրված իոնի՝ մնացած բոլոր իոնների հետ փոխազդեցության էներգիաները, կստանանք՝

$$U(r) = \frac{\lambda B_n}{r^n} - \frac{Ae^2}{r},$$

որտեղ

$$B_n = \sum_j' \alpha_j^{-n} : \quad (2)$$

Անկախ ընտրված իոնի տեսակից, այն ունի 6 ամենամոտ և տարանուն հարևան-իոն (առաջին կոորդինացիոն խումբ՝ $\alpha_I = 1$): $r\sqrt{2}$ հեռավորությամբ կա 12 իոն (երկրորդ կոորդինացիոն խումբ՝ $\alpha_{II} = \sqrt{2}$), $r\sqrt{3}$ հեռավորությամբ՝ 8 իոն (երրորդ կոորդինացիոն խումբ՝ $\alpha_{III} = \sqrt{3}$), $2r$ հեռավորությամբ՝ 6 իոն (չորրորդ կոորդինացիոն խումբ՝ $\alpha_{IV} = 2$) և այլն: Հետևաբար՝ (2) բանաձևից կստանանք՝

$$\begin{aligned} B_{10} &= \frac{6}{1^{10}} + \frac{12}{(\sqrt{2})^{10}} + \frac{8}{(\sqrt{3})^{10}} + \frac{6}{2^{10}} + \dots \approx \\ &\approx 6 + \frac{12}{32} + \frac{8}{243} + \frac{6}{1024} \approx 6,414 : \end{aligned}$$

2.6. Մադելունգի հաստատունը որևէ իոնի՝ մնացած իոնների հետ կուլոնյան փոխազդեցության էներգիայի և երկու հարևան իոնների փոխազդեցության էներգիայի հարաբերությունն է:

Միաչափ իոնային ցանցի որևէ իոնի՝ մնացած իոնների հետ կուլոնյան փոխազդեցության էներգիան՝

$$U(R) = -2\frac{q^2}{R} + 2\frac{q^2}{2R} - 2\frac{q^2}{3R} + 2\frac{q^2}{4R} - \dots = -2\frac{q^2}{R} \left(1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \dots \right),$$

հետևաբար՝ Մադելունգի հաստատունի արժեքը՝

$$A = \frac{U(R)}{-q^2/R} = 2 \left(1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \dots \right):$$

Նկատի ունենալով, որ $\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \dots$, կատանանք՝

$$A = 2 \ln 2:$$

2.7. Հավասարակշռության պայմանից հետևում է, որ

$$\lambda = \frac{Ae^2 r^{n-1}}{nB_n} \approx 4,28 \cdot 10^3 \text{ էՎ} \cdot \text{Å}^{10}:$$

2.8. Գրյունայզեն-Միի

$$U(r) = \frac{\lambda B_n}{r^n} - \frac{Ae^2}{r}$$

բանաձևի համաձայն՝ 1 մոլ **NaCl**-ի բյուրեղի էներգիան՝

$$U_0(r) = N_A U(r) = N_A \left(\frac{\lambda B_n}{r^n} - \frac{Ae^2}{r} \right):$$

Խնդիր 2.7-ից տեղադրելով λ -ի արժեքը՝ կատանանք.

$$U_0(r) = -\frac{Ae^2}{r} N_A \left(1 - \frac{1}{n} \right) \approx -4,82 \cdot 10^{24} \text{ էՎ} \approx -300 \text{ կՋ}:$$

2.9. Կուլոնյան փոխազդեցության մեջ միջավայրի էկրանավորման հաշվառմամբ Գրյունայզեն-Միի բանաձևը կընդունի

$$U(r) = \frac{\lambda B_n}{r^n} - \frac{Ae^2}{\epsilon r}$$

տեսքը: Այս դեպքում հավասարակշռության $(dU/dr)_{r=r_1} = 0$ պայմանից
 ցանցի հաստատունի համար կստանանք՝

$$r_1 = \left(\frac{n\lambda B_n \epsilon}{Ae^2} \right)^{\frac{1}{n-1}} = r_0 \epsilon^{\frac{1}{n-1}} = 2,81 \cdot 81^{\frac{1}{9}} \approx 4,5 \text{ \AA} :$$

ϵ -ի ներածման արդյունքում ցանցի էներգիան՝

$$\begin{aligned} U_1 \equiv NU(r_1) &= N \left(-\frac{Ae^2}{\epsilon r_1} + \frac{\lambda B_n}{r_1^n} \right) = -N \frac{Ae^2}{\epsilon r_1} \left(1 - \frac{1}{n} \right) = \\ &= -N \frac{Ae^2}{\epsilon r_0 \epsilon^{1/(n-1)}} \left(1 - \frac{1}{n} \right) = \frac{U_0}{\epsilon^{n/(n-1)}}, \end{aligned}$$

որտեղ N -ը բյուրեղում տարրական բջիջների թիվն է, U_0 -ն՝ ցանցի էներ-
 գիան՝ էկրանավորման անտեսմամբ: Այսպիսով՝

$$\frac{U_0}{U_1} = \epsilon^{\frac{n}{n-1}} = 81^{\frac{10}{9}} \approx 132 :$$

2.10. Բյուրեղի համակողմանի սեղմման մոդուլը որոշվում է հետևյալ
 արտահայտությամբ՝

$$B_0 = - \left(V \frac{dP}{dV} \right)_{r=r_0}$$

$T = 0$ -ում բյուրեղային ցանցի էնտրոպիան հաստատուն է, հետևաբար՝
 ըստ ջերմադինամիկայի առաջին օրենքի՝

$$dU = TdS - PdV = -PdV,$$

և

$$B_0 = \left(V \frac{d^2U}{dV^2} \right)_{r=r_0} :$$

Քանի որ

$$\frac{d^2U}{dV^2} = \frac{dU}{dr} \frac{d^2r}{dV^2} + \frac{d^2U}{dr^2} \left(\frac{dr}{dV} \right)^2,$$

ապա հավասարակշռության վիճակում ($(dU/dr)_{r=r_0} = 0$)

$$B_0 = \left[V \frac{d^2U}{dr^2} \left(\frac{dr}{dV} \right)^2 \right]_{r=r_0} :$$

N տարրական բջիջ պարունակող խորանարդային բյուրեղի ծավալը՝
 $V = Nr^3$, $dr/dV = 1/3N^{1/3}V^{2/3}$, ուստի $\left[V (dr/dV)^2 \right]_{r=r_0} = r_0^2/9V$:

2.11. Բյուրեղի համակողմանի սեղմման գործակիցը կարելի է ներկայացնել B_0 սեղմման մոդուլի միջոցով՝

$$\chi = \frac{1}{B_0} = \frac{9V}{r_0^2} \left(\frac{d^2U}{dr^2} \right)_{r=r_0}^{-1} :$$

Նկատի ունենալով, որ

$$U(r) = -N \left[\frac{Ae^2}{r} - C \exp\left(-\frac{r}{\rho}\right) \right],$$

որտեղ N -ը տարրական բջիջների թիվն է, հավասարակշռության պայմանից կստանանք՝

$$N \left[\frac{Ae^2}{r_0^2} - \frac{C}{\rho} \exp\left(-\frac{r_0}{\rho}\right) \right] = 0, \quad \text{կամ} \quad C = \frac{Ae^2 \rho}{r_0^2} \exp\left(\frac{r_0}{\rho}\right) :$$

Հետևաբար՝

$$U(r) = -NAe^2 \left[\frac{1}{r} - \frac{\rho}{r_0^2} \exp\left(-\frac{r-r_0}{\rho}\right) \right],$$

$$\frac{d^2U}{dr^2} = -NAe^2 \left[\frac{2}{r^3} - \frac{1}{\rho r_0^2} \exp\left(-\frac{r-r_0}{\rho}\right) \right],$$

$$\left(\frac{d^2U}{dr^2} \right)_{r=r_0} = -N \frac{Ae^2}{r_0^3} \left(2 - \frac{r_0}{\rho} \right),$$

$$\chi = -\frac{9r_0^4}{Ae^2} \left(2 - \frac{r_0}{\rho} \right)^{-1} :$$

Վերջին բանաձևից կարելի է որոշել ρ բնութագրական երկարությունը՝

$$\rho = \frac{r_0}{2} \left(1 + \frac{9r_0^4}{2Ae^2\chi} \right)^{-1} \approx 0,45 \text{ \AA} :$$

Գլուխ III. Բյուրեղային ցանցի դինամիկան

3.1. Միատոմ գծային շղթայի դինամիկական մատրիցը սկալյար մեծությամբ է՝

$$D = \frac{1}{M} \sum_{l'} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial u_l \partial u_{l'}} e^{iqa(l'-l)}, \quad (1)$$

ուստի բնութագրական հավասարումը կունենա $\omega^2 = D$ տեսքը:

Հաշվենք $\frac{\partial^2 \Phi}{\partial u_l \partial u_{l'}}$ ածանցյալները.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi}{\partial u_{l'}} &= \sum_l \sum_{m>0} \beta_m (\delta_{l',l} - \delta_{l',l+m}) (u_l - u_{l+m}) = \\ &= \sum_{m>0} \beta_m (u_{l'} - u_{l'+m} - u_{l'-m} + u_{l'}) = \sum_{m>0} \beta_m (2u_{l'} - u_{l'+m} - u_{l'-m}), \\ \frac{\partial^2 \Phi}{\partial u_l \partial u_{l'}} &= \frac{\partial}{\partial u_l} \frac{\partial \Phi}{\partial u_{l'}} = \frac{\partial}{\partial u_l} \sum_{m>0} \beta_m (2u_{l'} - u_{l'+m} - u_{l'-m}) = \\ &= \sum_{m>0} \beta_m (2\delta_{l,l'} - \delta_{l,l'+m} - \delta_{l,l'-m}): \end{aligned} \quad (2)$$

(1) և (2) բանաձևերից հետևում է, որ

$$\begin{aligned} D &= \frac{1}{M} \sum_{l'} e^{iqa(l'-l)} \sum_{m>0} \beta_m (2\delta_{l,l'} - \delta_{l,l'+m} - \delta_{l,l'-m}) = \\ &= \frac{1}{M} \sum_{m>0} \beta_m \sum_{l'} e^{iqa(l'-l)} (2\delta_{l,l'} - \delta_{l,l'+m} - \delta_{l,l'-m}) = \\ &= \frac{1}{M} \sum_{m>0} \beta_m (2 - e^{iqam} - e^{-iqam}) = \frac{2}{M} \sum_{m>0} \beta_m [1 - \cos(qam)]: \end{aligned}$$

Հետևաբար՝

$$\omega^2 = \frac{2}{M} \sum_{m>0} \beta_m [1 - \cos(mqa)]:$$

3.2. ա. Յուցում՝ փոքր mqa -երի դեպքում կոսինուսը վերածել շարքի:
 բ. (1) արտահայտությունը կարելի է ներկայացնել հետևյալ տեսքով՝

$$\omega^2 = \frac{4}{M} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m^p} \sin^2 \frac{mqa}{2} = \frac{4}{M} \sum_{m=1}^{\infty} \sin^2 \frac{mqa}{2} \frac{\left(\frac{qa}{2}\right)^p}{\left(\frac{mqa}{2}\right)^p}.$$

Երկարալիքային սահմանում՝ $qa \ll 1$, վերջին արտահայտության մեջ գումարումից կարելի է անցնել ինտեգրման.

$$\begin{aligned} \omega^2 &= \frac{4}{M} \left(\frac{qa}{2}\right)^{p-1} \int_{\alpha}^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^p} dx = \frac{4}{M} \left(\frac{qa}{2}\right)^{p-1} \left(\int_0^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^p} dx - \right. \\ &\left. - \int_0^{\alpha} \frac{\sin^2 x}{x^p} dx \right) \approx \frac{4}{M} \left(\frac{qa}{2}\right)^{p-1} \left(\int_0^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^p} dx - \int_0^{\alpha} \frac{x^2}{x^p} dx \right) = \\ &= \frac{4}{M} \left(\frac{qa}{2}\right)^{p-1} \left(\int_0^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^p} dx - \frac{\alpha^{3-p}}{3-p} \right), \end{aligned} \quad (2)$$

որտեղ $\alpha = qa/2$: Եթե $1 < p < 3$, ապա (2) արտահայտության մեջ վերջին ինտեգրալը գրոյից տարբեր վերջավոր թիվ է, իսկ վերջին գումարելին ձգտում է գրոյի, ուստի $\omega \sim q^{(p-1)/2}$:

գ. Եթե $p = 3$, ապա $\alpha = qa/2 \ll 1$ դեպքում

$$\int_{\alpha}^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^3} dx = \left[\frac{3}{2} - \gamma + |\ln 2\alpha| + O(2\alpha)^2 \right],$$

որտեղ γ Էյլերի հաստատունը՝ $\gamma \approx 0,577$: Քանի որ α -ի փոքր արժեքների դեպքում էական է լոգարիթմական գումարելին, (2) առնչությունից կատանանք՝

$$\omega \sim q \sqrt{|\ln aq|}:$$

3.3. Հաշվի առնելով, որ $\beta_m = \beta_{-m}$, մասնիկի շարժման հավասարման աջ մասը ներկայացնենք հետևյալ տեսքով՝

$$\sum_{m>0} \beta_m [(u_{l+m} - u_l) + (u_{l-m} - u_l)]: \quad (1)$$

Երկարալիքային սահմանում ($aq \ll 1$) u_l -ը կարելի է դիտարկել որպես $x = al$ -ի անընդհատ ֆունկցիա և նշանակել այն $u(x)$ -ով: Բանի որ β_m -ը m -ից կախված արագ նվազում է, ապա (1) արտահայտության մեջ հիմնական ներդրումը պայմանավորված է փոքր m -երով գումարելիներով: Նշանակում է՝ (1) շարքը կարելի է փոխարինել ըստ m -ի վերջավոր գումարով: Այժմ $u_{l\pm m}$ -ի փոխարեն կարող ենք դիտարկել $u(qx \pm aqm)$ ֆունկցիան և այն վերլուծել շարքի ըստ aqm -ի աստիճանների, համարելով, որ երկարալիքային սահմանում $aqm \ll 1$ ընդհուպ մինչև m -ի ամենամեծ արժեքը: Բավարարվելով շարքում aqm -ի նկատմամբ քառակուսային անդամով կստանանք.

$$u_{l\pm m} = u(qx \pm aqm) = u(qx) \pm \frac{1}{q} \frac{\partial u}{\partial x} aqm + \frac{1}{2q^2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} (aqm)^2 \pm \dots,$$

որը տեղադրելով (1) արտահայտության մեջ, կունենանք՝

$$\sum_{m>0} \beta_m [(u_{l+m} - u_l) + (u_{l-m} - u_l)] = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \sum_{m>0} \beta_m (am)^2: \quad (2)$$

Եթե (2) արտահայտությունը տեղադրենք խնդրում տրված շարժման հավասարման մեջ, կստանանք հոծ միջավայրում ալիքային հավասարումը, որտեղ

$$v_s^2 = \frac{a^2}{M} \sum_{m>0} \beta_m m^2$$

մեծությունը հոծ միջավայրում ճայնի տարածման արագությունն է:

3.4. Գծային ցանցում q -ի թույլատրելի արժեքները տրվում են

$$q = \frac{2\pi}{Na} l \quad (1)$$

բանաձևով, որտեղ N -ն ատոմների թիվն է ցանցում, a -ն՝ միջատոմային հեռավորությունը, իսկ l -ը՝ $-N/2 \leq l \leq N/2$ պայմանին բավարարող ամբողջ թիվ է: (1) բանաձևի համաձայն՝ q -ի արժեքները q -տարածության մեջ բաշխված են հաստատուն խտությամբ, և երկու հարևան արժեքների միջև հեռավորությունը $2\pi/Na$ է: Հետևաբար՝ կամայական $q, q + dq$ միջակայքում նորմալ մոդերի թիվը կլինի $Nadq/2\pi$: Այդ մոդերի հաճախություններն $\omega, \omega + d\omega$ միջակայքում են: Այս միջակայքում են նաև նույն՝ $Nadq/2\pi$ թվով մոդեր, որոնք տարածվում են առաջինների նկատմամբ հակառակ ուղղությամբ: Այսպիսով, $\omega, \omega + d\omega$ հաճախային միջակայքում նորմալ մոդերի թիվը կլինի $Nadq/\pi$: Հետևաբար՝ գծային ցանցի միավոր երկարությանը և հաճախությունների միավոր միջակայքին բաժին ընկնող նորմալ մոդերի թիվը, կամ որ նույնն է, նորմալ մոդերի խտությունը, կտրվի

$$g(\omega) = \frac{1}{Na} \frac{1}{d\omega} \frac{Nadq}{\pi} = \frac{1}{\pi} \frac{dq}{d\omega}$$

Ֆունկցիայով: Խնդրի պայմանում տրված դիսպերսային հավասարումից հետևում է, որ

$$\frac{d\omega}{dq} = \omega_m \frac{a}{2} \cos \frac{qa}{2} = \frac{\omega_m a}{2} \sqrt{1 - \sin^2 \frac{qa}{2}} = \frac{\omega_m a}{2} \sqrt{1 - \frac{\omega^2}{\omega_m^2}} = \frac{a}{2} \sqrt{\omega_m^2 - \omega^2},$$

ուստի $g(\omega)$ -ի համար կստանանք՝

$$g(\omega) = \frac{2}{\pi a} (\omega_m^2 - \omega^2)^{-1/2}:$$

3.5. Պարզության համար դիտարկենք ցանցի տատանումների սպեկտրի մի ճյուղը: Հաճախությունների $\omega, \omega + d\omega$ միջակայքում տատանումների թիվը միավոր ծավալում որոշվում է հետևյալ բանաձևով՝

$$g(\omega) d\omega = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint d^3q, \quad (1)$$

որտեղ տարբեր \mathbf{q} -երով մոդերը՝ $\omega_{\mathbf{q}}$ -երը, փոփոխվում են նշված տիրույթում՝ $\omega \leq \omega_{\mathbf{q}} \leq \omega + d\omega$: (1) բանաձևում ինտեգրումը կարելի է հեշտացնել՝ օգտվելով խմբային արագության սահմանումից՝ $\mathbf{v}_{\mathbf{q}} = \nabla_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}}$: \mathbf{q} -տարածությունում ընտրենք տարրական ծավալ՝ գլանի տեսքով այնպես, որ դրա կողմնային մակերևույթն ուղղահայաց լինի $\omega_{\mathbf{q}} = \omega$ մակերևույթին: Դիցուք՝ գլանի հիմքի մակերեսը dS է, իսկ բարձրությունը՝

$$dq_{\perp} = \frac{d\omega}{|\nabla_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}}|} = \frac{d\omega}{|\mathbf{v}_{\mathbf{q}}|} :$$

Այդ դեպքում (1) արտահայտությունը կարելի է ներկայացնել

$$g(\omega) d\omega = \frac{1}{(2\pi)^3} \iint dS dq_{\perp} = \frac{1}{(2\pi)^3} \iint \frac{dS d\omega}{|\mathbf{v}_{\mathbf{q}}|}$$

տեսքով, որից հետևում է, որ

$$g(\omega) = \frac{1}{8\pi^3} \iint \frac{dS}{|\mathbf{v}_{\mathbf{q}}|} :$$

Ակնհայտ է, որ $g(\omega)$ -ի եզակիություններն առաջանում են այն \mathbf{q}_c կետերում, որտեղ $\mathbf{v}_{\mathbf{q}}$ -ն հավասարվում է զրոյի: Եթե $\omega_{\mathbf{q}}$ ֆունկցիան այդպիսի կրիտիկական կետի շրջակայքում վերածենք աստիճանային շարքի ըստ $\mathbf{t} = \mathbf{q} - \mathbf{q}_c$ տարբերության և սահմանափակվենք քառակուսային անդամներով, ապա գլխավոր առանցքների հետ կապված կոորդինատային համակարգում կունենանք՝

$$\omega_{\mathbf{q}} = \omega_c + \alpha_1 t_1^2 + \alpha_2 t_2^2 + \alpha_3 t_3^2, \quad (2)$$

որտեղ

$$\alpha_i = \left(\frac{\partial^2 \omega_{\mathbf{q}}}{\partial t_i^2} \right)_{t_i=0}, \quad i = 1, 2, 3 :$$

Եթե բոլոր $\alpha_i < 0$, ապա \mathbf{q}_c կետում ֆունկցիան ունի մաքսիմում, իսկ $\omega_{\mathbf{q}} = \text{const}$ մակերևույթները, (2) բանաձևի համաձայն, էլիպսարդներ են:

\mathbf{q}_c կետն ընդգրկող այդպիսի էլիպսարդի ծավալը, որի մակերևույթը տրվում $\omega_q = \omega$ հավասարմամբ, հավասար է

$$\frac{4\pi(\omega_c - \omega)^{3/2}}{3\sqrt{\alpha_1\alpha_2\alpha_3}}:$$

Այս ծավալի դիֆերենցիալն ըստ ω -ի, բազմապատկած $1/8\pi^3$ գործակցով, հենց վիճակների խտության ֆունկցիան է՝

$$g(\omega) = \frac{(\omega_c - \omega)^{1/2}}{4\pi^2\sqrt{\alpha_1\alpha_2\alpha_3}}, \quad \omega \leq \omega_c:$$

Երբ $\omega \rightarrow \omega_c$, $g(\omega)$ ֆունկցիան ձգտում է զրոյի, իսկ դրա ածանցյալը տարամիտում է $(\omega_c - \omega)^{-1/2}$ օրենքով:

3.6. ա. Ինչպես հայտնի է, ընդհանուր դեպքում նորմալ մոդերի լրիվ խտությունը տրվում է

$$g(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_i \int \frac{dS}{|\nabla_{\mathbf{q}} \omega_i(\mathbf{q})|} \quad (1)$$

բանաձևով (տես խնդիր 3.5): (1) արտահայտության մեջ գումարումը կատարվում է ըստ բոլոր դիսպերսային ճյուղերի, իսկ մակերևութային ինտեգրումը կատարվում է $\omega_i(\mathbf{q}) = \omega = \text{const}$ մակերևույթով: Միատոմ եռաչափ բյուրեղում առկա են միայն ձայնային ֆոնոններ, որոնց համար դիսպերսային կորերը (ըստ ենթադրության) տրվում են

$$\omega_i(\mathbf{q}) = \omega_{mi} \left| \sin \frac{qa}{2} \right| \quad (2)$$

բանաձևով: Նկատի ունենալով (2) դիսպերսային հավասարումը՝ հաշվենք (1) արտահայտության մակերևութային ինտեգրալը.

$$g_i(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{dS}{|\nabla_{\mathbf{q}} \omega_i(\mathbf{q})|} = \int_{q=\frac{2}{a} \arcsin \frac{\omega}{\omega_{mi}}} \frac{2dS}{(2\pi)^3 \omega_{mi} a \cos \frac{qa}{2}},$$

որտեղ ինտեգրումը կատարվում է $(2/a) \arcsin(\omega/\omega_{mi})$ շառավղով գնդի մակերևույթով (q -տարածության մեջ): Անցնելով գնդաձևի կոորդինատային համակարգի՝ կատանանք.

$$g_i(\omega) = \frac{\left(\frac{2}{a} \arcsin \frac{\omega}{\omega_{mi}}\right)^2}{4\pi^3 \omega_{mi} a \cos\left(\arcsin \frac{\omega}{\omega_{mi}}\right)} \int_0^\pi \sin \vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi =$$

$$= \frac{4 \left(\arcsin \frac{\omega}{\omega_{mi}}\right)^2}{\pi^2 \omega_{mi} a^3 \sqrt{1 - \sin^2\left(\arcsin \frac{\omega}{\omega_{mi}}\right)}} = \frac{4 \left(\arcsin \frac{\omega}{\omega_{mi}}\right)^2}{\pi^2 \omega_{mi} a^3 \sqrt{1 - \frac{\omega^2}{\omega_{mi}^2}}}$$

Նկատի ունենալով $\omega_{mi} = 2v_{si}/a$ առնչությունը և մակերևութային ինտեգրալի արժեքը տեղադրելով (1) բանաձևի մեջ՝ կատանանք.

$$g(\omega) = \sum_{i=1}^3 \frac{2 \left(\arcsin \frac{\omega}{\omega_{mi}}\right)^2}{\pi^2 a^2 v_{si} \left(1 - \frac{\omega^2}{\omega_{mi}^2}\right)^{1/2}}$$

բ. Ֆաժրիանախային տիրույթում $\omega \ll \omega_{mi}$, ուստի $\arcsin(\omega/\omega_{mi})$ և $\left[1 - (\omega^2/\omega_{mi}^2)\right]^{-1/2}$ ֆունկցիաները վերլուծելով Թեյլորի շարքի և բավարարվելով վերլուծության առաջին անդամով, կատանանք՝

$$g(\omega) = \sum_{i=1}^3 \frac{2 \frac{\omega^2}{\omega_{mi}^2}}{\pi^2 a^2 v_{si}} = \frac{2\omega^2}{\pi^2 a^2} \sum_{i=1}^3 \frac{1}{v_{si} \omega_{mi}^2} = \frac{4\omega^2}{\pi^2 a^3} \sum_{i=1}^3 \frac{1}{\omega_{mi}^3} =$$

$$= \frac{\omega^2}{2\pi^2} \sum_{i=1}^3 \left(\frac{M}{a^2 \beta_i}\right)^{3/2} :$$

Վերջին արդյունքն ստանալիս հաշվի է առնվել, որ $\omega_{mi} = 2(M/\beta_i)^{1/2}$, որտեղ M -ն ատոմի զանգվածն է, իսկ β_i -ն՝ կոշտության գործակիցը:

Այսպիսով, միատոմ եռաչափ բյուրեղում ցածրհաճախային տիրույթում նորմալ մոդերի խտությունը համեմատական է ω^2 -ին:

3.7. d չափայնությամբ բյուրեղում նորմալ մոդերի խտության հաշվարկը կատարվում է եռաչափ բյուրեղի նորմալ մոդերի խտության հաշվարկի նմանությամբ (տես խնդիր 3.6): Այս դեպքում գործ ունենք q -տարածության մեջ $(2/a)\arcsin(\omega/\omega_m)$ շառավղով d -չափ գնդային մակերևույթով ինտեգրալի հետ, որն, ի վերջո, համեմատական է այդ գնդի մակերևույթի մակերեսին, այսինքն՝

$$g(\omega) \sim \left(\frac{2}{a} \arcsin \frac{\omega}{\omega_m} \right)^{d-1},$$

որն էլ ցածրհաճախային տիրույթում՝ $\omega \ll \omega_m$, համեմատական կլինի ω^{d-1} -ին:

3.8. Գինամիկական մատրիցի տարրերի սահմանման համաձայն՝

$$D_{ss'}^{kk'}(\mathbf{q}) = \frac{1}{\sqrt{M_s M_{s'}}} \sum_{\mathbf{h}} G_{ss'}^{kk'}(\mathbf{h}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{h}}, \quad (1)$$

որտեղ M_s -ն s տեսակի ատոմի զանգվածն է, $\mathbf{h} = \mathbf{n} - \mathbf{n}'$, \mathbf{n} -ը բյուրեղային ցանցի վեկտոր է, $G_{ss'}^{kk'}(\mathbf{h})$ -ը՝ \mathbf{n} և \mathbf{n}' վեկտորներով տրվող տարրական բջիջների s և s' տեսակի ատոմների միջև ուժային փոխազդեցության գործակիցները, երբ ատոմները շեղված են համապատասխանաբար k և k' ուղղություններով: Հաշվի առնելով բյուրեղի տեղափոխական համաչափության հատկությունը՝ կարելի է գրել.

$$D_{ss'}^{kk'}(\mathbf{q}) = \frac{1}{\sqrt{M_s M_{s'}}} \sum_{\mathbf{h}} G_{s's}^{k'k}(-\mathbf{h}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{h}} = \frac{1}{\sqrt{M_s M_{s'}}} \sum_{\mathbf{h}} G_{ss'}^{kk'}(\mathbf{h}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{h}} =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{M_s M_{s'}}} \left\{ \sum_{\mathbf{h}} G_{s's'}^{kk'}(\mathbf{h}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{h}} \right\}^* = D_{s's'}^{kk'*}(\mathbf{q}):$$

Երկրորդ հավասարումն ստացվում է գումարման \mathbf{h} փոփոխականի՝ $\mathbf{h} \rightarrow -\mathbf{h}$ փոխարինմամբ, իսկ երրորդ հավասարումն ստանալիս հաշվի է առնվել, որ $G_{s's'}^{kk'}(\mathbf{h})$ գործակիցներն իրական են, որպես որոշակի կետերում իրական ֆունկցիաների ածանցյալներ:

3.9. Պարզ ցանցի \mathbf{h} հանգույցի ատոմին համապատասխանում է նույնպիսի ատոմ $-\mathbf{h}$ հանգույցում: Ուստի խնդիր 3.8-ի (1) բանաձևում \mathbf{h} -ով գումարը կարելի է իրականացնել ըստ \mathbf{h} և $-\mathbf{h}$ ատոմների զույգերի: Եթե հաշվի առնենք նաև, որ $G^{kk}(\mathbf{h}) = G^{kk}(-\mathbf{h})$, ապա դինամիկական մատրիցի տարրը՝

$$D^{kk'}(\mathbf{q}) = \frac{1}{2M} \sum_{\mathbf{h}} [G^{kk'}(\mathbf{h}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{h}} + G^{kk'}(-\mathbf{h}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{h}}] =$$

$$\frac{1}{2M} \sum_{\mathbf{h}} G^{kk'}(\mathbf{h}) (e^{i\mathbf{q}\mathbf{h}} + e^{-i\mathbf{q}\mathbf{h}}) = \frac{1}{M} \sum_{\mathbf{h}} G^{kk'}(\mathbf{h}) \cos(\mathbf{q}\mathbf{h}):$$

Այսպիսով, 3-րդ ռանգի դինամիկական մատրիցի $D^{kk'}(\mathbf{q})$ տարրերն իրական են և, հետևաբար, որպես այդ մատրիցի սեփական ֆունկցիաներ՝ $A^k(\mathbf{q})$ լայնությունը ևս կարելի է ընտրել իրական մեծություններ:

3.10. Առանց խնդրի ընդհանրությունը խախտելու կարելի է M զանգվածով ատոմին՝ արատին վերագրել $n=0$ համարը: Ամենամոտ հարևանների մոտավորությամբ l -րդ ատոմի շարժման հավասարումն ունի հետևյալ տեսքը՝

$$M_0 (1 - \varepsilon \delta_{l,0}) \frac{d^2 u_l}{dt^2} = -\beta (2u_l - u_{l+1} - u_{l-1}): \quad (1)$$

(1) հավասարման լուծումը փնտրենք

$$u_l(t) = u_l e^{-i\omega t} = e^{-i\omega t} \sum_q u_q e^{-iqal}$$

տեսքով, որտեղ

$$u_q = \frac{1}{N} \sum_l u_l e^{iqal} : \quad (2)$$

(1) հավասարման երկու մասերը բազմապատկենք e^{iqal} -ով և գումարենք ըստ l -ի: Նկատի ունենալով (2) առնչությունը՝ ստացված հավասարման ձախ մասը կարելի է ներկայացնել

$$\begin{aligned} M_0 \sum_l (1 - \varepsilon \delta_{l,0}) \frac{d^2 u_l}{dt^2} e^{iqal} &= -M_0 \omega^2 \sum_l (1 - \varepsilon \delta_{l,0}) u_l e^{iqal} = \\ &= -M_0 \omega^2 (N u_q - \varepsilon u_{l=0}) \end{aligned}$$

տեսքով, իսկ աջ մասը՝

$$\begin{aligned} -\beta \sum_l (2u_l - u_{l+1} - u_{l-1}) e^{iqal} &= -\beta \sum_l (2 - e^{iqa} - e^{-iqa}) u_l e^{iqal} = \\ &= -\beta (2 - e^{iqa} - e^{-iqa}) \sum_l u_l e^{iqal} = -2\beta \sin^2 \frac{qa}{2} \sum_l u_l e^{iqal} = -M_0 \omega_q^2 u_q N \end{aligned}$$

տեսքով, որտեղ $\omega_q^2 = (4\beta/M_0) \sin^2(qa/2)$: Հետևաբար՝

$$-M_0 \omega^2 (N u_q - \varepsilon u_{l=0}) = -M_0 \omega_q^2 u_q N,$$

կամ

$$(\omega_q^2 - \omega^2) u_q = -\frac{\omega^2 \varepsilon}{N} u_{l=0} = -\frac{\omega^2 \varepsilon}{N} \sum_q u_q : \quad (3)$$

Գիտարկենք երկու դեպք:

1. Ենթադրենք, որ $\sum_q u_q = 0$ (ա): Այս դեպքում $\omega^2 = \omega_q^2$, եթե

$u_q \neq 0$: Նկատենք, որ $\omega^2 > 4\beta/M_0$ դեպքում գրոյից տարբեր u_q -եր ընդհանրապես չկան, իսկ $\omega^2 \leq 4\beta/M_0$ դեպքում ոչ գրոյական u_q -եր գոյություն ունեն q -ի երկու արժեքի դեպքում՝

$$q = \pm q_0 = \pm \frac{2}{a} \arcsin \left(\frac{M_0 \omega^2}{4\beta} \right)^{1/2} :$$

Հաշվի առնելով (ա) պայմանը՝ u_q -ն այս դեպքում կարելի է ներկայացնել հետևյալ տեսքով՝

$$u_q = A \left(\delta_{q,q_0} - \delta_{q,-q_0} \right),$$

որտեղ A - ն կամայական հաստատուն է: Նշանակում է՝ (ա) պայմանի դեպքում արատի առկայությունը տատանումների սպեկտրը չի փոխում:

2. Այժմ ենթադրենք, որ $(1/N) \sum_q u_q \equiv C \neq 0$ (բ): (3) հավասարումից

$$u_q = -\frac{\varepsilon C \omega^2}{\omega_q^2 - \omega^2}, \quad (4)$$

$$\frac{\omega^2 \varepsilon}{N} \sum_q \frac{1}{(\omega_q^2 - \omega^2)} = -1: \quad (5)$$

Կատարելով

$$\omega^2 = \frac{4\beta \Omega^2}{M_0}, \quad qa = x$$

նշանակումները և (5) հավասարման մեջ q -ով գումարումից անցնելով q -ով ինտեգրման, կստանանք՝

$$\frac{\Omega^2 \varepsilon}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{1}{\sin^2 \left(\frac{x}{2} \right) - \Omega^2} dx = -1, \quad (6)$$

որտեղ $\Omega^2 < 1$ դեպքում առկա է անիմտեգրելի տարամիտություն, երբ $\sin(x/2) = \pm \Omega$: Տարամիտությունը վերացնելու համար շարժման հավասարման աջ մասում ավելացնենք

$$f_l = -\gamma M_0 \frac{du_l}{dt} = i\omega \gamma M_0 u_l$$

«շփման» ուժը: Սա համարժեք է $\omega^2 \rightarrow \omega^2 + i\omega\gamma$ կամ $\omega^2 \rightarrow \omega^2 + i\Omega\eta$ փոխարինմանը, որտեղ $\eta = \gamma(4\beta/M_0)^{-1/2}$: Այնուհետև η -ն ձգտեցնենք զրոյի և օգտվենք հետևյալ նույնությունից՝

$$\int \frac{dx}{\varphi(x) - i\eta} \Big|_{\eta \rightarrow +0} = \oint \frac{dx}{\varphi(x)} + i\pi \int dx \delta[\varphi(x)],$$

որտեղ \oint -ը նշանակում է, որ ինտեգրալը վերցված է գլխավոր արժեքի իմաստով: Հաշվենք ինտեգրալները.

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \oint_{-\pi}^{\pi} \frac{dx}{\sin^2 \frac{x}{2} - \Omega^2} &= \frac{1}{2\pi\Omega(1-\Omega^2)^{1/2}} \times \\ &\times \ln \left| \frac{\operatorname{tg}\left(\frac{x}{2}\right) - \Omega(1-\Omega^2)^{-1/2}}{\operatorname{tg}\left(\frac{x}{2}\right) + \Omega(1-\Omega^2)^{-1/2}} \right| \Big|_{-\pi}^{\pi} = 0, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\frac{i}{2} \int_{-\pi}^{\pi} dx \delta\left(\sin^2 \frac{x}{2} - \Omega^2\right) = \frac{i}{\Omega(1-\Omega^2)^{1/2}}: \quad (8)$$

Ենթադրվում է, որ $\Omega^2 < 1$: (6), (7) և (8) առնչություններից բխում է, որ

$$\frac{i\Omega\varepsilon}{(1-\Omega^2)^{1/2}} = -1, \quad \text{կամ} \quad \Omega^2 = (1-\varepsilon^2)^{-1},$$

որը հակասում է $\Omega^2 < 1$ սկզբնական ենթադրությանը: Հետևաբար՝ (6) հավասարման լուծումը պետք է փնտրել միայն $\Omega^2 > 1$ դեպքում: Այս դեպքում (6) արտահայտության ինտեգրալը հեշտությամբ հաշվվում է՝

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left(\sin^2 \frac{x}{2} - \Omega^2\right)^{-1} dx = -\frac{1}{\Omega(\Omega^2 - 1)^{1/2}}:$$

Հետևաբար, (6) հավասարումը կընդունի

$$\varepsilon \Omega - (\Omega^2 - 1)^{1/2} = 0 \quad (9)$$

տեսքը: $\varepsilon < 0$ դեպքում (9) հավասարումը լուծում չունի, իսկ եթե $\varepsilon > 0$ (արատ-ատոմն ավելի քեթև է, քան շղթայի մնացած ատոմները), ապա

$$\Omega = (1 - \varepsilon^2)^{-1/2}: \quad (10)$$

Այսպիսով՝ $\Omega^2 < 1$ լուծումներից բացի, որոնք առկա են իդեալական բյուրեղում, (6) բանաձևի համաձայն՝ առաջանում է նաև

$$\omega_0 = \omega_m (1 - \varepsilon^2)^{-1/2} > \omega_m \quad \left(\omega_m^2 = \frac{4\beta}{M_0} \right) \quad (11)$$

հաճախությամբ ճեղքված մակարդակ: (4) բանաձևից հետևում է, որ u_q -ն $\omega > \omega_0$ դեպքում, որպես q -ի ֆունկցիա, իրական առանցքի ոչ մի կետում եզակիություն չունի: Այդ դեպքում, ինչպես հայտնի է Ֆուրիեի շարքերի տեսությունից, u_l -ն արագ կձգտի զրոյի, երբ $l \rightarrow \infty$: Այսպիսով, տեղայնացված ֆոնոնի հաճախությունը որոշվում է (11) առնչությամբ:

Գլուխ IV. Բյուրեղային ցանցի ջերմային հատկությունները

4.1. Հիշենք, որ $1\text{ էվ} = 1,6 \cdot 10^{-19}$ Ջ $= 1,6 \cdot 10^{-12}$ էրգ, իսկ Բուլցմանի հաստատունը՝ $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Ջ/Կ $= 1,38 \cdot 10^{-16}$ էրգ/Կ:

$$\text{ա. } T = \frac{1,6 \cdot 10^{-19}}{1,38 \cdot 10^{-23}} \text{ Կ} \approx 1,16 \cdot 10^4 \text{ Կ:}$$

բ. Համարելով, որ $T = 300$ Կ, կստանանք՝

$$k_B T = \frac{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 300}{1,6 \cdot 10^{-19}} \text{ էվ} \approx 0,026 \text{ էվ:}$$

գ. λ ալիքի երկարությամբ ֆոտոնի էներգիան՝

$$\frac{hc}{\lambda} = 1 \text{ էվ} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Ջ,}$$

որտեղ h -ը Պլանկի հաստատունն է՝ $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$ Ջ·վ, իսկ c -ն՝ լույսի արագությունը վակուումում՝ $c = 3 \cdot 10^8$ մ/վ: Հետևաբար՝

$$\lambda = \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{1,6 \cdot 10^{-19}} \text{ մ} \approx 1,24 \cdot 10^{-6} \text{ մ} = 1,24 \text{ մկմ:}$$

4.2. Համակարգի ներքին էներգիան որոշվում է

$$U \equiv \langle E \rangle = \int E(\mathbf{r}, \mathbf{p}) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) d\Gamma \quad (1)$$

բանաձևով, որտեղ $f(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ -ն համակարգի բաշխման ֆունկցիան է՝

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = Z^{-1} \exp\left(-\frac{E(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{k_B T}\right), \quad (2)$$

Z -ը՝ վիճակագրական ինտեգրալը՝

$$Z = \int \exp\left(-\frac{E(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{k_B T}\right) d\Gamma, \quad (3)$$

իսկ ինտեգրումն N մասնիկներից կազմված համակարգի դեպքում կատարվում է $6N$ չափանի ֆազային ծավալով: (1) և (2) բանաձևերից

$$U = \frac{1}{Z} \int E(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \exp\left(-\frac{E(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{k_B T}\right) d\Gamma : \quad (4)$$

(3) արտահատությունն ածանցենք ըստ T -ի.

$$\frac{\partial Z}{\partial T} = \frac{1}{k_B T^2} \int E(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \exp\left(-\frac{E(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{k_B T}\right) d\Gamma : \quad (5)$$

Համեմատելով (4) և (5) բանաձևերը, դժվար չէ տեսնել, որ

$$U = k_B T^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial T} :$$

4.3. Դասական միաչափ ներդաշնակ տատանակի մեխանիկական էներգիան՝

$$E(p, x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}, \quad (1)$$

որտեղ p -ն մասնիկի իմպուլսն է, m -ը՝ զանգվածը, x -ը՝ կոորդինատը: Վիճակագրական ինտեգրալը՝

$$Z \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{E(p, x)}{k_B T}\right\} dp dx \quad (2)$$

(տես խնդիր 4.2): (1) և (2) արտահայտություններից կստանանք.

$$Z = \sqrt{2\pi m k_B T} \sqrt{\frac{2\pi k_B T}{m\omega^2}} = \frac{2\pi k_B T}{\omega},$$

$$\langle E \rangle = k_B T :$$

4.4. ω հաճախությամբ դասական միաչափ ներդաշնակ տատանակի մեխանիկական էներգիան՝

$$E(p, x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2},$$

որտեղ p -ն մասնիկի իմպուլսն է, m -ը՝ զանգվածը, x -ը՝ կոորդինատը:

Միջին էներգիան հաշվելու համար օգտվենք խնդիր 4.2-ում ստացված բանաձևից՝

$$\langle E \rangle = k_B T^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial T} : \quad (1)$$

Հաշվենք միաչափ ներդաշնակ տատանակի վիճակագրական ինտեգրալ՝

$$\begin{aligned} Z &= \int_{-x_0}^{x_0} dx \int_{-p_0}^{p_0} dp \exp\left(-\frac{E(p, x)}{k_B T}\right) = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dp \exp\left(-\frac{p^2}{2mk_B T}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{m\omega^2 x^2}{2k_B T}\right) : \end{aligned} \quad (2)$$

Ինչպես տեսնում ենք, երկչափ ինտեգրալում փոփոխականներն անջատվում են: (2) ինտեգրալում հաշվի է առնվել նաև, որ ենթահինտեգրալային ֆունկցիաների արագ փոփոխման հետևանքով, առանց մեծ սխալ թույլ տալու, ինտեգրալների վերջավոր սահմանները կարելի է փոխարինել անվերջություններով: (1) և (2) բանաձևերից հետևում է, որ

$$\langle E \rangle = k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left[\ln \int_{-\infty}^{\infty} dp \exp\left(-\frac{p^2}{2mk_B T}\right) + \ln \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{m\omega^2 x^2}{2k_B T}\right) \right] : \quad (3)$$

(3) բանաձևում կիներտիկ և պոտենցիալ էներգիաների ներդրումները բաժանվել են: Նկատի ունենալով, որ

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dp \exp\left(-\frac{p^2}{2mk_B T}\right) &= \sqrt{2\pi mk_B T} , \\ \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{m\omega^2 x^2}{2k_B T}\right) &= \sqrt{\frac{2\pi k_B T}{m\omega^2}} , \end{aligned}$$

կստանանք՝

$$\langle E \rangle = k_B T^2 \left(\frac{1}{2T} + \frac{1}{2T} \right) = \frac{k_B T}{2} + \frac{k_B T}{2} :$$

4.5. ω հաճախությամբ քվանտային միաչափ ներդաշնակ տատանակի էներգիան տրվում է

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

բանաձևով, որտեղ $\hbar = h/2\pi = 1,05 \cdot 10^{-34}$ Ջ·վ:

Վիճակագրական գումարը՝

$$Z \equiv \sum_n \exp\left(-\frac{E_n}{k_B T}\right) = \sum_n \exp\left[-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\left(n + \frac{1}{2}\right)\right] = \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \times \times \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}n\right) = \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)\right]^{-1} : \quad (1)$$

(1) բանաձևը տեղադրելով $\langle E \rangle$ -ի արտահայտության մեջ՝ կստանանք.

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1} :$$

Բարձր ջերմաստիճաններում՝ $\hbar\omega/k_B T \ll 1$, ցուցչային ֆունկցիան վերլուծելով շարքի, կստանանք՝

$$\langle E \rangle \approx \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{1}{1 + \frac{\hbar\omega}{k_B T} - 1} = \frac{\hbar\omega}{2} + k_B T \approx k_B T :$$

4.6. ω_i հաճախությամբ տատանումների միջին թիվը տվյալ ջերմաստիճանում տրվում է Բոզե-Այնշտայնի բաշխման ֆունկցիայով՝

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_i}{k_B T}\right) - 1} ,$$

ուստի այն կախված չէ բյուրեղում ատոմների թվից:

4.7. $\omega, \omega + d\omega$ միջակայքին պատկանող հաճախություններով տատանումների dn թիվը որոշվում է $dn = g(\omega)d\omega$ բանաձևով, որտեղ վիճակների խտության $g(\omega)$ ֆունկցիան համեմատական է բյուրեղի ծավալին, հետևաբար՝ նաև նմուշում ատոմների N թվին:

4.8. Բյուրեղում մոդերի լրիվ թիվը $3N$ է, հետևաբար, եթե բոլոր մոդերը գրգռված են, ապա դրանց թիվը համեմատական կլինի նմուշում ատոմների N թվին:

4.9. Հայտնի է, որ պարզ միաչափ բյուրեղում տատանումների դիսպերսային առնչությունը՝

$$\omega(q) = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}} \left| \sin \frac{qa}{2} \right|, \quad (1)$$

որտեղ β -ն ատոմների փոխազդեցությունը նկարագրող քվազիառաձգականության գործակիցն է, m -ը՝ ատոմի զանգվածը, q -ն՝ ալիքային թիվը, a -ն՝ ցանցի հաստատունը: Երկարալիքային սահմանում, երբ կիրառելի է Գեբայի տեսությունը, (1) առնչությունն ընդունում է հետևյալ տեսքը՝

$$\omega(q) = vq :$$

Գեբայի հաճախությունը՝ $\omega_D = \omega(\pi/a)$, հետևաբար՝

$$\omega_D = \frac{\pi v}{a} :$$

Քանի որ ատոմների գծային խտությունը՝

$$n_a = \frac{N}{L} = \frac{N}{Na} = \frac{1}{a},$$

որտեղ N -ը բյուրեղում ատոմների թիվն է, կստանանք՝

$$\omega_D = \pi v n_a \approx 3,14 \cdot 3000 \cdot 5 \cdot 10^9 \text{ ռադ}\cdot\text{վ}^{-1} = 4,7 \cdot 10^{13} \text{ ռադ}\cdot\text{վ}^{-1}$$

Տատանումների հաճախության միջին արժեքը որոշվում է

$$\langle \omega \rangle = \frac{1}{N} \int_0^{\omega_{\max}} \omega g(\omega) d\omega$$

բանաձևով, որտեղ

$$g(\omega) = \frac{2N}{\pi} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\max}^2 - \omega^2}}$$

վիճակների խտության ֆունկցիան է, $\omega_{\max} = 2\sqrt{\beta/m}$: Հաշվելով ինտեգրալը՝ կատանանք.

$$\langle \omega \rangle = \frac{2\omega_{\max}}{\pi} :$$

Գերայի տեսության մեջ ω_{\max} -ը փոխարինվում է ω_D -ով, ուստի

$$\langle \omega \rangle = \frac{2\omega_D}{\pi} = 2vn_a = 3 \cdot 10^{13} \text{ ռադ}\cdot\text{վ}^{-1} :$$

4.10. Հաշվենք երկչափ ցանցի վիճակների խտության ֆունկցիան: Սահմանման համաձայն՝ դիսպերսային j -րդ ճյուղի վիճակների խտության ֆունկցիան՝

$$g_j(\omega) = \sum_{\mathbf{q}} \delta[\omega_j(\mathbf{q}) - \omega] :$$

Նկատի ունենալով \mathbf{q} երկչափ ալիքային վեկտորի քվադրանդիատությունը և դիսպերսային երկու ճյուղերի գոյությունը, վիճակների խտության ֆունկցիան կարելի է ներկայացնել հետևյալ արտահայտությամբ՝

$$g(\omega) = \sum_{\mathbf{q}} \delta(v_l q - \omega) + \sum_{\mathbf{q}} \delta(v_t q - \omega) = \frac{S}{(2\pi)^2} 2\pi \times$$

$$\times \left[\int q dq \delta(v_l q - \omega) + \int q dq \delta(v_t q - \omega) \right] = \frac{S\omega}{2\pi} \left(\frac{1}{v_l^2} + \frac{1}{v_t^2} \right) = \frac{S\omega}{\pi v^2},$$

որտեղ $v_l = v_t = v$: Եռաչափ դեպքի համանմանությամբ, Գերայի հաճախությունը որոշենք համակարգի ազատության աստիճանների թվի և տատանման մոդերի թվի հավասարության պայմանից՝

$$2N = \int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega = \frac{S}{\pi v^2} \int_0^{\omega_D} \omega d\omega = \frac{S\omega_D^2}{2\pi v^2},$$

որտեղից՝

$$\omega_D = 2v\sqrt{\pi n_a} \approx 5,3 \cdot 10^{13} \text{ ռադ}\cdot\text{վ}^{-1} :$$

Տատանումների հաճախության միջին արժեքը՝

$$\langle \omega \rangle = \frac{1}{2N} \int_0^{\omega_D} \omega g(\omega) d\omega = \frac{S}{2N\pi v^2} \int_0^{\omega_D} \omega^2 d\omega = \frac{2}{3} \omega_D \approx \\ \approx 3,54 \cdot 10^{13} \text{ նադ}\cdot\text{վ}^{-1}:$$

4.11. $\omega_{\max} = \omega_D$ հաճախության և Գեբայի ջերմաստիճանի միջև կապից հետևում է, որ

$$\omega_{\max} = \frac{k_B \theta_D}{\hbar} \approx \frac{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 180}{1,05 \cdot 10^{-34}} \text{ նադ}\cdot\text{վ}^{-1} \approx 2,366 \cdot 10^{13} \text{ նադ}\cdot\text{վ}^{-1}:$$

4.12. Բյուրեղում գրգռված տատանումների առավելագույն էներգիան՝

$$E_m = \hbar \omega_D = k_B \theta_D \approx 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 300 \text{ Ջ} = 4,14 \cdot 10^{-21} \text{ Ջ},$$

իսկ ֆոտոնի ալիքի երկարությունը՝

$$\lambda_m = \frac{\hbar c}{E_m} \approx \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{4,14 \cdot 10^{-21}} \text{ մ} \approx 48 \cdot 10^{-6} \text{ մ} = 48 \text{ մկմ}:$$

4.13. Ջրոյական տատանումների էներգիան՝

$$E_0 = \sum_{qj} \frac{\hbar \omega_{qj}}{2} = \int \frac{\hbar \omega}{2} g(\omega) d\omega, \quad (1)$$

որտեղ $g(\omega)$ -ն վիճակների խտության ֆունկցիան է: Ըստ Այնշտայնի տեսության՝

$$g(\omega) = 3N \delta(\omega - \omega_E), \quad (2)$$

իսկ ըստ Գեբայի տեսության՝

$$g(\omega) = 9N \frac{\omega^2}{\omega_D^3}: \quad (3)$$

(1) ինտեգրալում տեղադրելով նախ (2), ապա (3) բանաձևերը՝ կստանանք.

$$E_0^{(E)} = \frac{3N\hbar\omega_E}{2}, \quad E_0^{(D)} = \frac{9N\hbar\omega_D}{8}:$$

$E_0^{(E)}$ -ն հավասարեցնելով $E_0^{(D)}$ -ին և նկատի ունենալով, որ $\omega_E/\omega_D = \theta_E/\theta_D$, կստանանք՝

$$\frac{\theta_E}{\theta_D} = \frac{3}{4}.$$

4.14. Միաչափ բյուրեղի երկայնքով տարածվող ալիքի առավելագույն էներգիան՝ $E_{\max} = \hbar\omega_D = \hbar vk_{\max} = \pi\hbar v/d$, որտեղ k_{\max} -ը համապատասխանում է Բրիլյուենի զոնայի սահմանին: Հետևաբար՝

$$E_{\max} = \frac{\pi\hbar v}{d} \approx \frac{3,14 \cdot 1,05 \cdot 10^{-34} \cdot 5 \cdot 10^3}{3 \cdot 10^{-10}} \text{ Ջ} \approx 5,5 \cdot 10^{-21} \text{ Ջ}:$$

4.15. $T \ll \theta_D$ ջերմաստիճաններում գրգռվում են միայն ձայնային տատանումներ, հետևաբար՝

$$\langle p \rangle = \hbar \langle q \rangle = \hbar \frac{\sum_{qj} q f(\omega_j(q))}{\sum_{qj} f(\omega_j(q))} = \frac{\hbar \int_0^{\omega_D} \omega g(\omega) f(\omega) d\omega}{v \int_0^{\omega_D} g(\omega) f(\omega) d\omega},$$

որտեղ $f(\omega)$ -ն Բոզե-Այնշտայնի բաշխման ֆունկցիան է՝

$$f(\omega) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1},$$

$g(\omega)$ -ն՝ վիճակների խտության ֆունկցիան Գեբայի մոտավորությամբ, v -ն՝ ձայնի տարածման միջինացված արագությունը: Նկատի ունենալով խնդիր 4.13-ի (1) արտահայտությունը՝ կստանանք.

$$\langle p \rangle = \frac{\hbar \int_0^{\omega_D} \omega^3 f(\omega) d\omega}{v \int_0^{\omega_D} \omega^2 f(\omega) d\omega} = \frac{k_B T \int_0^{\theta_D/T} t^3 f(t) dt}{v \int_0^{\theta_D/T} t^2 f(t) dt} = \frac{k_B T \int_0^{\theta_D/T} t^3 (e^t - 1)^{-1} dt}{v \int_0^{\theta_D/T} t^2 (e^t - 1)^{-1} dt}:$$

Ինտեգրալներում հիմնական ներդրումները տալիս է փոքր t -երի տիրույթը, ուստի եթե $T \ll \theta_D$, ապա ինտեգրալների վերին սահմանները կարելի է փոխարինել անվերջություններով՝

$$\langle p \rangle \approx \frac{k_B T}{v} \frac{\int_0^{\infty} t^3 (e^t - 1)^{-1} dt}{\int_0^{\infty} t^2 (e^t - 1)^{-1} dt} : \quad (1)$$

Օգտվենք հետևյալ ինտեգրալի արտահայտությունից՝

$$\int_0^{\infty} \frac{t^{n-1} dt}{e^t - 1} = \Gamma(n) \zeta(n), \quad n > 1, \quad (2)$$

որտեղ $\Gamma(n)$ -ը Գաուսի գամմա-ֆունկցիան է, իսկ $\zeta(n)$ -ը՝ Ռիմանի ձեռա-ֆունկցիան: Նկատի ունենալով, որ $\zeta(3) = 1,202$, $\zeta(4) = 1,082$, (1) բանաձևից կստանանք.

$$\langle p \rangle = \frac{k_B T}{v} \frac{\Gamma(4) \zeta(4)}{\Gamma(3) \zeta(3)} = \frac{k_B T}{v} \frac{3! 1,082}{2! 1,202} \approx 2,7 \frac{k_B T}{v} :$$

4.16. Բյուրեղի ներքին էներգիան՝

$$U = \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar \omega g(\omega)}{\exp\left(\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right) - 1} d\omega :$$

Նկատի ունենալով հաճախությունների բաշխման ֆունկցիայի տրված տեսքը միաչափ դեպքում՝ կստանանք.

$$U = \frac{N_A}{\omega_D} \hbar \int_0^{\omega_D} \frac{\omega d\omega}{\exp\left(\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right) - 1} = RT \frac{T}{\theta_D} f_1\left(\frac{\theta_D}{T}\right),$$

որտեղ $R = N_A k_B$ -ն ունիվերսալ գազային հաստատունն է,

$$f_1(x) = \int_0^x \frac{tdt}{e^t - 1}, \quad \theta_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_B} :$$

4.17. Բյուրեղի ներքին էներգիան՝

$$U = \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar \omega g(\omega)}{\exp\left(\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right) - 1} d\omega :$$

Նկատի ունենալով հաճախությունների բաշխման ֆունկցիայի տրված տեսքը երկչափ դեպքում՝ կատանանք.

$$U = \frac{4N_A}{\omega_D^2} \hbar \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^2 d\omega}{\exp\left(\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right) - 1} = 4RT \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^2 f_2\left(\frac{\theta_D}{T}\right),$$

որտեղ

$$f_2(x) = \int_0^x \frac{t^2 dt}{e^t - 1}, \quad \theta_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_B} :$$

4.18. Ըստ ջերմունակության սահմանման՝

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V :$$

Տվյալ խնդրում համակարգի ծավալի դերը կատարում է միաչափ ցանցի L երկարությունը: Օգտվելով բյուրեղի ներքին էներգիայի տրված բանաձևից՝ կատանանք.

$$C_L = R \left[2 \frac{T}{\theta_D} \int_0^{\theta_D/T} \frac{x dx}{e^x - 1} - \frac{\theta_D/T}{e^{\theta_D/T} - 1} \right] :$$

4.19. ա. Ցածր՝ $T \ll \theta_D$ ջերմաստիճաններում առաջին գումարելիում ինտեգրալի վերին սահմանը փոխարինելով անվերջությամբ (տես խնդիր 4.15)՝ կատանանք.

$$\int_0^{\infty} \frac{x dx}{e^x - 1} = \frac{\pi^2}{6} :$$

Երկրորդ գումարելիում կոտորակի հայտարարում անտեսելով միավորը՝ ջերմունակության համար կստանանք.

$$C_L = R \left(\frac{\pi^2}{3} \frac{T}{\theta_D} - \frac{\theta_D}{T} e^{-\theta_D/T} \right):$$

բ. Բարձր՝ $T \gg \theta_D$ ջերմաստիճաններում ենթաինտեգրալային ֆունկցիան և երկրորդ գումարելու հայտարարը վերածելով շարքի՝ կստանանք.

$$C_L \approx 2R - R = R:$$

4.20. Ըստ ջերմունակության սահմանման՝

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V:$$

Տվյալ խնդրում համակարգի ծավալի դերը կատարում է երկչափ ցանցի S մակերեսը: Օգտվելով բյուրեղի ներքին էներգիայի տրված բանաձևից՝ կստանանք.

$$C_S = 4R \left[3 \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^2 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^2 dx}{e^x - 1} - \frac{(\theta_D/T)}{e^{\theta_D/T} - 1} \right]:$$

4.21. ա. Ցածր՝ $T \ll \theta_D$ ջերմաստիճաններում առաջին գումարելիում ինտեգրալի վերին սահմանը փոխարինելով անվերջությամբ (տես խնդիր 4.15-ի (2) բանաձևը)՝ կստանանք.

$$\int_0^{\infty} \frac{x^2 dx}{e^x - 1} = 2\zeta(3):$$

Երկրորդ գումարելիում կոտորակի հայտարարում անտեսելով միավորը, ջերմունակության համար կստանանք՝

$$C_S = 4R \left[6\zeta(3) \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^2 - \frac{\theta_D}{T} e^{-\theta_D/T} \right]:$$

բ. Բարձր՝ $T \gg \theta_D$ ջերմաստիճաններում ենթահնտեգրալային ֆունկցիան և երկրորդ գումարելու հայտարարը վերածելով շարքի՝ կստանանք.

$$C_S \approx 6R - 4R = 2R :$$

4.22. Ենթադրենք, որ կարելի է օգտվել ցածր՝ $T \ll \theta_D$ ջերմաստիճաններում ցանցի մոլային ջերմունակության արտահայտությունից.

$$C_V = \frac{12\pi^4}{5} R \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 = \frac{12\pi^4}{5} R \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega_D} \right)^3,$$

որտեղից Դեբայի ω_D հաճախության համար կստանանք՝

$$\omega_D = \left(\frac{12\pi^4 R}{5C_V} \right)^{1/3} \frac{k_B T}{\hbar} :$$

Վերջին բանաձևում տեղադրելով արժաքի ջերմունակության և ջերմաստիճանի թվային արժեքները՝ կստանանք.

$$\omega_D \approx 2,75 \cdot 10^{13} \text{ վ}^{-1} :$$

Ստացված ω_D -ով գնահատենք արժաքի Դեբայի ջերմաստիճանը.

$$\theta_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_B} \approx \frac{1,05 \cdot 10^{-34} \cdot 2,75 \cdot 10^{13}}{1,38 \cdot 10^{-23}} \text{ Կ} \approx 210 \text{ Կ},$$

այսինքն՝ արված ենթադրությունը հիմնավորված է:

4.23. Ցածր ջերմաստիճաններում ցանցային ջերմունակության կախումը ջերմաստիճանից T^2 օրենքով բնորոշ է երկչափ բյուրեղներին (տես խնդիր 4.21), ուստի կարելի է ասել, որ գրաֆիտը երկչափ շերտերից կազմված բյուրեղ է:

4.24. N ներդաշնակ տատանակների համակարգի զրոյական տատանումների էներգիան Այնշտայնի մոտավորությամբ՝

$$E_0^{(E)} = \frac{3N\hbar\omega_E}{2} :$$

Նկատի ունենալով, որ համակարգի ջերմային էներգիան՝

$$U = 3Nk_B T,$$

կատանանք՝

$$T = \frac{\hbar\omega_E}{2k_B}:$$

4.25. T ջերմաստիճանում տատանման մոդերի թիվը, որոնց հաճախություններն ընկած են ω -ի շուրջը միավոր միջակայքում, տրվում է

$$n_\omega = \frac{g(\omega)}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1}$$

արտահայտությամբ, որտեղ

$$g(\omega) = 9N \frac{\omega^2}{\omega_D^3}$$

մեծությունը վիճակների խտության ֆունկցիան է ըստ Դեբայի տեսության:

Տատանման մոդի ամենահավանական էներգիան որոշվում է

$$\frac{dn_\omega}{d\omega} = 0$$

այսմանից: Պարզ հաշվարկներով տատանման մոդի ամենահավանական $\hbar\omega_p$ էներգիայի որոշման համար ստացվում է (1) հավասարումը: Բացի

$\omega_p = 0$ տրիվիալ լուծումից, (1) հավասարման մոտավոր լուծում է

$\hbar\omega/k_B T \approx 1,6$ -ը, այսինքն՝ (1) հավասարումից որոշվող $\hbar\omega_p$ -ն $k_B T$ -ի կարգի է՝

$$\lambda_p = \frac{v}{\omega_p} \sim \frac{a\omega_D}{\omega_p} = \frac{a\hbar\omega_D}{\hbar\omega_p} = \frac{a\theta_D}{T},$$

որտեղ v -ն ձայնի արագությունն է բյուրեղում:

4.26. Ցանցային ջերմունակությունն ընդհանուր դեպքում որոշվում է

$$C_V = k_B \int \left(\frac{\hbar \omega}{k_B T} \right)^2 \frac{\exp\left(\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right) g(\omega) d\omega}{\left[\exp\left(\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right) - 1 \right]^2}$$

արտահայտությամբ: Ըստ խնդրի պայմանի՝ $g(\omega) = \gamma \omega^{d-1}$, հետևաբար՝ ջերմունակությունը ցածր ջերմաստիճաններում կարելի է ներկայացնել

$$C_V = k_B \gamma \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^d \int_0^\infty x^{d+1} \frac{\exp(x) dx}{[\exp(x) - 1]^2} :$$

տեսքով, որի համաձայն՝ $C_V \sim T^d$:

Որոշենք վիճակների խտության ֆունկցիան, երբ դիսպերսային օրենքը՝ $\omega = \sigma q^\nu$.

$$\begin{aligned} g(\omega) &= \sum_{(q)} \delta(\omega - \sigma q^\nu) = A \int q^{d-1} \delta(\omega - \sigma q^\nu) dq = \\ &= \frac{A}{\sigma \nu} \int \frac{q^{d-1}}{q^{\nu-1}} \delta\left(q^\nu - \frac{\omega}{\sigma}\right) dq^\nu = \frac{A}{\sigma \nu} \left(\frac{\omega}{\sigma}\right)^{\frac{d-\nu}{\nu}} = \gamma \omega^{\frac{d}{\nu}-1} : \end{aligned}$$

Նկատի ունենալով խնդրի առաջին մասում ստացված արդյունքը, կարելի է պնդել, որ ցածրջերմաստիճանային ջերմունակությունը համեմատական կլինի $T^{d/\nu}$ -ին:

4.27. Հաշվենք միաչափ աններդաշնակ տատանակի միջին էներգիան խնդիր 4.2-ում ստացված

$$\langle E \rangle = k_B T^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial T}$$

բանաձևով, որտեղ Z -ը վիճակագրական ինտեգրալն է.

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} dp \int dx \exp \left\{ - \left(\frac{p^2}{2Mk_B T} + \frac{bx^2}{k_B T} - \frac{gx^3}{k_B T} - \frac{fx^4}{k_B T} \right) \right\} =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{p^2}{2Mk_B T}\right\} dp \int_{-x_{01}}^{x_{02}} \exp\left\{-\left(\frac{bx^2}{k_B T} - \frac{gx^3}{k_B T} - \frac{fx^4}{k_B T}\right)\right\} dx :$$

Երկրորդ ինտեգրալում $x_{01}(x_{02})$ -ը հավասարակշռության դիրքից ձախ (աջ) շեղման առավելագույն արժեքն է, որը ենթադրվում է փոքր՝ $x_{01}(x_{02}) \ll a$, որտեղ a -ն ցանցի հաստատունն է:

Հայտնի է, որ

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{p^2}{2Mk_B T}\right\} dp = (2\pi Mk_B T)^{1/2} :$$

Գնահատենք երկրորդ ինտեգրալը՝

$$\begin{aligned} I &= \int_{-x_{01}}^{x_{02}} \exp\left\{-\left(\frac{bx^2}{k_B T} - \frac{gx^3}{k_B T} - \frac{fx^4}{k_B T}\right)\right\} dx = \\ &= \int_{-x_{01}}^{x_{02}} \exp\left(-\frac{bx^2}{k_B T}\right) \exp\left(\frac{gx^3}{k_B T}\right) \exp\left(\frac{fx^4}{k_B T}\right) dx : \end{aligned}$$

Ենթաինտեգրալային արտահայտության երկրորդ և երրորդ էքսպոնենտները վերլուծենք շարքի՝ սահմանափակվելով x^4 -ին և x^6 -ին համեմատական անդամներով՝

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{gx^3}{k_B T}\right) &= 1 + \frac{gx^3}{k_B T} + \frac{1}{2}\left(\frac{gx^3}{k_B T}\right)^2 + \dots \approx 1 + \frac{gx^3}{k_B T} + \frac{1}{2}\left(\frac{gx^3}{k_B T}\right)^2, \\ \exp\left(\frac{fx^4}{k_B T}\right) &= 1 + \frac{fx^4}{k_B T} + \dots \approx 1 + \frac{fx^4}{k_B T} : \end{aligned}$$

Նկատի ունենալով, որ I ինտեգրալում հիմնական ներդրում ունեն փոքր x -երը, դրանում վերջավոր սահմանները կարելի է փոխարինել $\pm\infty$ -ով: Կատարված մոտավորություններից հետո կստանանք՝

$$I \approx \int_{-\infty}^{\infty} \left(1 + \frac{gx^3}{k_B T} + \frac{fx^4}{k_B T} + \frac{1}{2} \frac{g^2 x^6}{k_B^2 T^2}\right) \exp\left(-\frac{bx^2}{k_B T}\right) dx :$$

Քանի որ

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{bx^2}{k_B T}\right) dx = \left(\frac{\pi k_B T}{b}\right)^{1/2}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{gx^3}{k_B T} \exp\left(-\frac{bx^2}{k_B T}\right) dx = 0,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{fx^4}{k_B T} \exp\left(-\frac{bx^2}{k_B T}\right) dx = \frac{3\pi^{1/2}}{4} \frac{f}{k_B T} \left(\frac{k_B T}{b}\right)^{5/2},$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{g^2 x^6}{2k_B^2 T^2} \exp\left(-\frac{bx^2}{k_B T}\right) dx = \frac{15\pi^{1/2}}{16} \frac{g^2}{k_B^2 T^2} \left(\frac{k_B T}{b}\right)^{7/2},$$

ապա վիճակագրական ինտեգրալը՝

$$Z = (2\pi M k_B T)^{1/2} I \approx (2\pi M k_B T)^{1/2} \left[\pi^{1/2} \left(\frac{k_B T}{b}\right)^{1/2} + \frac{3\pi^{1/2}}{4} \frac{f}{k_B T} \left(\frac{k_B T}{b}\right)^{5/2} + \frac{15\pi^{1/2}}{16} \frac{g^2}{k_B^2 T^2} \left(\frac{k_B T}{b}\right)^{7/2} \right] =$$

$$= \left(\frac{2M}{b}\right)^{1/2} \pi k_B T \left[1 + \left(\frac{3f}{4b^2} + \frac{15g^2}{16b^3}\right) k_B T \right],$$

և, հետևաբար,

$$\frac{\partial \ln Z}{\partial T} = \frac{1}{T} + \frac{\partial}{\partial T} \left(\ln \left[1 + \left(\frac{3f}{4b^2} + \frac{15g^2}{16b^3}\right) k_B T \right] \right) \approx \frac{1}{T} + \left(\frac{3f}{4b^2} + \frac{15g^2}{16b^3}\right) k_B :$$

Վերջին արտահայտությունն ստանալիս օգտվել ենք $x \ll 1$ դեպքում $\ln(1+x) \approx x$ մոտավոր բանաձևից:

Այսպիսով՝ միաչափ աններդաշնակ տատանակի միջին էներգիան՝

$$\langle E \rangle = k_B T + \left(\frac{3f}{4b^2} + \frac{15g^2}{16b^3}\right) k_B^2 T^2,$$

իսկ ջերմունակությունը՝

$$C_V = \left(\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}\right)_V = k_B \left[1 + \left(\frac{3f}{2b^2} + \frac{15g^2}{8b^3}\right) k_B T \right]:$$

4.28. Գծային ընդարձակման ջերմաստիճանային գործակիցը սահմանվում է հետևյալ բանաձևով՝

$$\alpha = \frac{\Delta l}{l_0 T} = \frac{N \langle x \rangle}{NaT} = \frac{\langle x \rangle}{aT},$$

որտեղ l_0 -ն միաչափ բյուրեղի երկարությունն է $T = 0$ Կ ջերմաստիճանում, Δl -ը՝ բացարձակ երկարացումը, $\langle x \rangle$ -ը՝ ատոմների միջին շեղումը հավասարակշռության դիրքից, a -ն՝ միջատոմային հեռավորությունը, N -ը՝ ատոմների թիվը:

Միջինի սահմանման համաձայն՝

$$\langle x \rangle = \frac{\int x \exp\left[-\frac{U(x)}{k_B T}\right] dx}{\int \exp\left[-\frac{U(x)}{k_B T}\right] dx} = \frac{\int x \exp\left(-\frac{bx^2}{k_B T}\right) \exp\left(\frac{gx^3 + fx^4}{k_B T}\right) dx}{\int \exp\left(-\frac{bx^2}{k_B T}\right) \exp\left(\frac{gx^3 + fx^4}{k_B T}\right) dx}:$$

Հաշվի առնելով g և f գործակիցների համար նշված անհավասարությունները՝ կարելի է գրել.

$$\exp\left(\frac{gx^3 + fx^4}{k_B T}\right) \approx 1 + \frac{gx^3}{k_B T} + \frac{fx^4}{k_B T},$$

հետևաբար՝ (տես խնդիր 4.27)

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &\approx \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \left(x + \frac{gx^4}{k_B T} + \frac{fx^5}{k_B T}\right) \exp\left(-\frac{bx^2}{k_B T}\right) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \left(1 + \frac{gx^3}{k_B T} + \frac{fx^4}{k_B T}\right) \exp\left(-\frac{bx^2}{k_B T}\right) dx} = \\ &= \frac{\frac{g}{k_B T} \int_{-\infty}^{\infty} x^4 \exp\left(-\frac{bx^2}{k_B T}\right) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{bx^2}{k_B T}\right) dx + \frac{f}{k_B T} \int_{-\infty}^{\infty} x^4 \exp\left(-\frac{bx^2}{k_B T}\right) dx}: \end{aligned}$$

Քանի որ

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{bx^2}{k_B T}\right) dx = \pi^{1/2} \left(\frac{k_B T}{b}\right)^{1/2},$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^4 \exp\left(-\frac{bx^2}{k_B T}\right) dx = \frac{3\pi^{1/2}}{4} \left(\frac{k_B T}{b}\right)^{5/2},$$

ապա

$$\alpha = \frac{1}{aT} \cdot \frac{\frac{3}{4} \left(\frac{k_B T}{b}\right)^2 \frac{g}{k_B T}}{1 + \frac{3}{4} \left(\frac{k_B T}{b}\right)^2 \frac{f}{k_B T}} = \frac{3}{4} \frac{g}{b^2} \frac{k_B}{a} \left(1 + \frac{3}{4} \frac{f}{b^2} k_B T\right)^{-1} :$$

4.29. Ենթադրենք՝ ջերմային հավասարակշռության վիճակում կա E_1 էներգիայով N_1 մոլեկուլ, իսկ $E_2 = E_1 + \Delta E$ էներգիայով՝ N_2 մոլեկուլ: Մոլեկուլների լրիվ թիվը՝

$$N = N_1 + N_2,$$

իսկ համակարգի լրիվ էներգիան՝

$$U = N_1 E_1 + N_2 (E_1 + \Delta E) = N E_1 + N_2 \Delta E : \quad (1)$$

Նկատի ունենալով, որ ջերմային հավասարակշռության վիճակում մոլեկուլի՝ E_i մակարդակը զբաղեցնելու հավանականությունը համեմատական է $\exp(-E_i/k_B T)$ արտադրիչին, E_1 և E_2 մակարդակներում մոլեկուլների N_1 և N_2 թվերի միջև կստանանք հետևյալ կապը՝

$$N_2 = N_1 \exp\left(-\frac{\Delta E}{k_B T}\right) = (N - N_2) \exp\left(-\frac{\Delta E}{k_B T}\right), \quad (2)$$

որտեղից՝

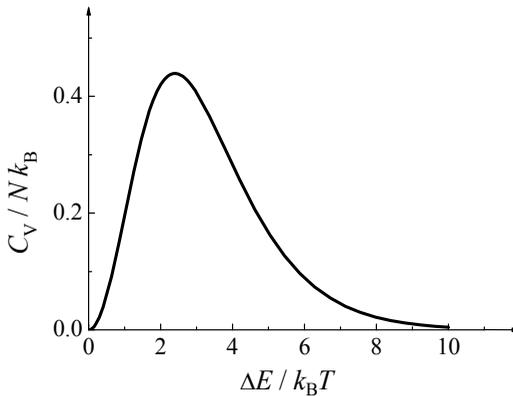
$$N_2 = \frac{N}{1 + \exp\left(\frac{\Delta E}{k_B T}\right)} : \quad (3)$$

(1)–(3) բանաձևերից հետևում է, որ

$$U = NE_1 + \frac{N\Delta E}{1 + \exp\left(\frac{\Delta E}{k_B T}\right)},$$

իսկ ջերմունակությունը՝

$$C_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_v = Nk_B \left(\frac{\Delta E}{k_B T}\right)^2 \exp\left(\frac{\Delta E}{k_B T}\right) \left[1 + \exp\left(\frac{\Delta E}{k_B T}\right)\right]^{-2} :$$



Նկ. 4.1

4.30. Ինչպես հայտնի է, ներդաշնակ մոտավորությամբ բյուրեղի ջերմունակությունը որոշվում է հետևյալ արտահայտությամբ՝

$$C_v = \frac{\partial}{\partial T} \left(\sum_{\mathbf{q}j} \frac{\hbar \omega_j(\mathbf{q})}{\exp\left(\frac{\hbar \omega_j(\mathbf{q})}{k_B T}\right) - 1} \right)_v : \quad (1)$$

Եթե $\hbar \omega_j(\mathbf{q}) \leq \hbar \omega_{\max} \ll k_B T$, այսինքն, երբ յուրաքանչյուր նորմալ մոդ ուժեղ գրգռված վիճակում է, (1) բանաձևում էքսպոնենտի ցուցիչը փոքր է, և կարելի է օգտվել հետևյալ վերլուծությունից՝

$$\frac{1}{e^x - 1} = \frac{1}{x + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{6}x^3 + \dots} = \frac{1}{x} \left[1 - \frac{x}{2} + \frac{x^2}{12} + O(x^3) \right],$$

որտեղ $x = \hbar\omega_j(\mathbf{q})/k_B T$: Այսպիսով՝ (1) բանաձևը կընդունի հետևյալ տեսքը՝

$$C_V = \frac{\partial}{\partial T} \left(\sum_{\mathbf{q}j} \hbar\omega_j(\mathbf{q}) \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega_j(\mathbf{q})} \right) \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar\omega_j(\mathbf{q})}{k_B T} \right) + \frac{1}{12} \left(\frac{\hbar\omega_j(\mathbf{q})}{k_B T} \right)^2 + O \left(\left(\frac{\hbar\omega_j(\mathbf{q})}{k_B T} \right)^3 \right) \right] \right) : \quad (2)$$

Եթե պահենք այս վերլուծության միայն առաջին անդամը, ապա

$$C_V^0 = \frac{\partial}{\partial T} (k_B T) \sum_{\mathbf{q}j} 1 = 3Nk_B, \quad (3)$$

որն իրենից ներկայացնում է Դյուլոնգ-Պտիի օրենքը:

Վերլուծության հաջորդ անդամները Դյուլոնգ-Պտիի օրենքի բարձր-ջերմաստիճանային քվանտային ուղղումներն են: Ընդ որում, քառակուսային փակագծերում երկրորդ անդամով պայմանավորվում է ջերմային էներգիայի արտահայտության մեջ ջերմաստիճանից չկախված գումարելի, որը զրոյական տատանումների էներգիան է՝ վերցրած «միմուս» նշանով և, հետևաբար, ջերմունակության մեջ ներդրում չի տալիս: Այսպիսով, գլխավոր ուղղումը պայմանավորված է վերլուծության քառակուսային անդամով:

Եթե C_V -ն ներկայացնենք

$$C_V = C_V^0 + \Delta C_V$$

տեսքով, ապա (2) և (3) բանաձևերից կստանանք.

$$\frac{\Delta C_V}{C_V^0} = -\frac{1}{12} \cdot \frac{1}{3N} \sum_{\mathbf{q}j} \left(\frac{\hbar\omega_j(\mathbf{q})}{k_B T} \right)^2 : \quad (4)$$

Եթե (4) արտահայտության մեջ \mathbf{q} -ով և j -ով գումարումներից անցնենք

ω -ով ինտեգրման, ներածելով նորմալ մոդերի խտության $g(\omega)$ ֆունկցիան, որը բավարարում է

$$\int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega = 3N$$

պայմանին, ապա (4) արտահայտությունը կընդունի հետևյալ տեսքը՝

$$\frac{\Delta C_V}{C_V^0} = -\frac{1}{12} \int_0^{\omega_D} g(\omega) \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T} \right)^2 d\omega \bigg/ \int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega :$$

4.31. Եթե ցանցային տատանումների մոդերը ենթարկվելին Ֆերմի-Դիրակի վիճակագրությանը, ապա ցանցի ներքին էներգիայի՝ ջերմաստիճանից կախված մասը կտրվեր

$$U_T = \int \frac{\hbar\omega g(\omega) d\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) + 1}$$

բանաձևով: Դերայի տեսության համաձայն՝

$$g(\omega) = \frac{3V\omega^2}{2\pi^2 v_s^3},$$

որտեղ v_s -ը բյուրեղում ձայնի տարածման միջինացված արագությունն է, ուստի

$$U_T = \frac{3V}{2\pi^2 v_s^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar\omega^3 d\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) + 1} = \frac{3V\hbar}{2\pi^2 v_s^3} \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^4 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^3 dx}{e^x + 1} : \quad (1)$$

Ցածր ջերմաստիճանների տիրույթում՝ $T \ll \theta_D$, այս ինտեգրալի վերին սահմանը կարելի է փոխարինել անվերջությամբ, հետևաբար՝

$$U_T \approx \frac{3V\hbar}{2\pi^2 v_s^3} \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^4 \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x + 1} \equiv AT^4, \quad (2)$$

որտեղ $A = 7\pi^4/120 \approx 5,682$: (2) բանաձևից հետևում է, որ $C_V \sim T^3$: Այսինքն՝ ջերմունակության ջերմաստիճանային կախումը ցածրջերմաստիճանային տիրույթում նույնն է, ինչ Բոզե-Այնշտայնի վիճակագրության դեպքում:

Բարձրջերմաստիճանային տիրույթում՝ $T \gg \theta_D$, (1) արտահայտության ենթաինտեգրալային ֆունկցիան կարելի է վերածել շարքի: Բավարարվելով վերլուծության առաջին անդամով՝ կստանանք.

$$U_T \approx \frac{3V\hbar}{16\pi^2 v_s^3} \left(\frac{k_B \theta_D}{\hbar} \right)^4,$$

որը կախված չէ ջերմաստիճանից: Հետևաբար՝ ցանցային ջերմունակությունն այս ջերմաստիճանային տիրույթում, ի տարբերություն Բոզե-Այնշտայնի վիճակագրության, կլինի զրո:

4.32. Տատանման մոդերին համապատասխանող ներքին էներգիան (առանց զրոյական տատանումների հաշվառման) տրվում է

$$U = \sum_{\mathbf{q}} \frac{\hbar\omega(\mathbf{q})}{\exp\left(\frac{\hbar\omega(\mathbf{q})}{k_B T}\right) - 1} = \frac{V\hbar}{(2\pi)^3} \int \frac{\omega(\mathbf{q}) d\mathbf{q}}{\exp\left(\frac{\hbar\omega(\mathbf{q})}{k_B T}\right) - 1}$$

բանաձևով: Քանի որ էներգիական սպեկտրն ունի գնդոլորտային համաչափություն՝ $\omega \sim q^2$, ապա ըստ θ -ի և φ -ի ինտեգրումը համարժեք է 4π -ով բազմապատկելուն: Այսպիսով՝

$$U = \frac{V\alpha}{2\pi^2} \int_0^{q_m} \frac{q^4 dq}{\exp\left(\frac{\alpha q^2}{k_B T}\right) - 1} = \frac{V\alpha}{4\pi^2} \left(\frac{k_B T}{\alpha} \right)^{5/2} \int_0^{T_m/T} \frac{x^{3/2} dx}{e^x - 1},$$

որտեղ q_m -ը տատանողական մոդի ալիքային վեկտորի առավելագույն արժեքն է, իսկ $T_m = \alpha q_m^2 / k_B$: Եթե $T \ll T_m$, ապա ինտեգրալի վերին սահմանը կարելի է փոխարինել ∞ -ով և, հետևաբար՝

$$U = \frac{V}{4\pi^2 \alpha^{3/2}} (k_B T)^{5/2} \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) \zeta\left(\frac{5}{2}\right),$$

որտեղ $\Gamma(x)$ -ը և $\zeta(x)$ -ը համապատասխանաբար Γ - և ζ -ֆունկցիաներն են (տես խնդիր 4.15-ի լուծումը): Ջերմունակությունը՝

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = \frac{5V k_B}{8\pi^2} \left(\frac{k_B T}{\alpha}\right)^{3/2} \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) \zeta\left(\frac{5}{2}\right):$$

Ինչպես հետևում է ջերմունակության արտահայտությունից, ցածր ջերմաստիճանների տիրույթում, ի տարբերություն Գեբայի տեսությամբ հաշվարկված ջերմունակության ($C_V^D \sim T^3$), այն համեմատական է $T^{3/2}$ -ին:

Հավելված. ՖԻԶԻԿԱԿԱՆ ՀԱՍՏԱՏՈՒՆՆԵՐԻ ԱՂՅՈՒՍԱԿ
 (ըստ X-Ray data Booklet, Lawrence Berkeley National Laboratory,
 Second edition, January 2001 գրքույկի)

Մեծություն	Նշանակում	Թվային արժեք և միավոր (CGSE)
Էլեկտրոնի զանգված	m	$9,10938188(72) \cdot 10^{-28}$ գ
Տարրական լիցք	e	$4,80320420^{-19} \cdot 10^{-10}$ CGSE _գ
Պրոտոնի զանգված	M_p	$1,67262158(13) \cdot 10^{-24}$ գ
Լույսի արագություն	c	$2,99792458 \cdot 10^{10}$ սմ/վ
Պլանկի հաստատուն	h $\hbar = h/2\pi$	$6,62606876(52) \cdot 10^{-27}$ էրգ·վ $1,054571596(82) \cdot 10^{-27}$ էրգ·վ
Ավոգադրոյի հաստատուն	N_A	$6,02214199(47) \cdot 10^{23}$ մոլ ⁻¹
Բոլցմանի հաստատուն	k_B	$1,3806503(24) \cdot 10^{-16}$ էրգ/Կ
Նորթ կառուցվածքի հաստատուն	$\alpha = e^2/\hbar c$	1/137,03599976(50)
Բորի շառավիղ	$a_B = \hbar^2/me^2$	$0,52917772083(19) \cdot 10^{-8}$ սմ
Ռիդբերգի հաստատուն	$Ry = me^4/2\hbar^2$	13,60569172(53) (էՎ)
Բորի մագնետոն	$\mu = e\hbar/2mc$	$0,927400(87) \cdot 10^{-20}$ էրգ/Գ·ս
1 էլեկտրոն-վոլտ	1 էՎ	$1,6021765 \cdot 10^{-12}$ էրգ
	1 էՎ/ h	$2,417989 \cdot 10^{14}$ Հգ
	1 էՎ/ hc	$8,065554 \cdot 10^3$ սմ ⁻¹
	1 էՎ/ k_B	$1,16045 \cdot 10^4$ Կ

Մաթեմատիկական հաստատուններ

$\pi = 3,141592653589793$, $e = 2,718281828459045$

ԳՐԱԿԱՆՈՒԹՅՈՒՆ

1. Չ. Киттель. Введение в физику твердого тела. М., Наука, 1978.
2. Дж. Займан. Принципы теории твердого тела. М., Мир, 1974.
3. Н. Ашкрофт, Н. Мермин. Физика твердого тела (тт. I, II). М., Мир, 1979.
4. Дж. Блейкмор. Физика твердого тела. М., Мир, 1988.
5. Ч. Уерт, Р. Томсон. Физика твердого тела. М., Мир, 1966.
6. Р. Кубо. Статистическая механика. М., Мир, 1967.
7. Таблицы физических величин. Справочник, под ред. акад. И. К. Кикоина. М., Атомиздат, 1976.
8. Պ. Հ. Բեզիրգանյան, Ռենտգենյան հետազոտությունների ֆիզիկական հիմունքները, Երևան, ԵՊՀ հրատ., 1977:
9. Ս. Ս. Կիրակոսյան, Պինդ մարմնի ֆիզիկայի ներածություն, I մաս, Երևան, Հայաստան հրատ., 1998:
10. Задачи по физике твердого тела, под ред. Г. Дж. Голдсмида, М., Наука, 1976.
11. В. М. Варикаш, Ю. М. Хачатрян, Избранные задачи по физике твердого тела. Минск, Вышэйш. школа, 1969.
12. А. Г. Чертов, А. А. Воробьев, Задачник по физике. М., Высшая школа, 1988.
13. Է. Ղազարյան, Ս. Վարդանյան, Պինդ մարմնի քվանտային տեսություն, Երևան, ԵՊՀ հրատ., 1997:

ԵՐԵՎԱՆԻ ՊԵՏԱԿԱՆ ՀԱՄԱԼՍԱՐԱՆ

Ա. Ա. Կիրակոսյան, Ա. Լ. Վարդանյան, Ա. Լ. Ասատրյան

ՊԻՆԴ ՄԱՐՄՆԻ ՖԻԶԻԿԱՅԻ
ԽՆԴԻՐՆԵՐ

Մաս I

Համակարգչային ձևավորումը՝ Գ. Հովհաննիսյանի,
Կ. Չալաբյանի
Կազմի ձևավորումը՝ Ա. Պատվականյանի
Տեխ. խմբագրումը՝ Վ. Գերձյան

Չափսը՝ 60x84 ¹/₁₆: Տպ. մամուլ 9.625:
Տպաքանակը՝ 100:

ԵՊՀ հրատարակչություն

ք. Երևան, 0025, Ալեք Մանուկյան 1



ՄԱՍԻՍԻՍԻԱՆ ԳՐԱԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆ
ԵՐԵՎԱՆ 2015