

ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი



ზუსტ და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა ფაკულტეტი  
ფიზიკა

თორნიკე ჭაბუკიანი

კრისტალური მყარი სხეულების შესწავლა რენტგენული დიფრაქციის  
მეთოდით

სადოქტორო სემინარი II

ხელმძღვანელი: ალექსანდრე შენგელაია  
ფიზ. მათ. მეცნიერებათა დოქტორი, პროფესორი

თბილისი 2018 წელი

## ანოტაცია

რენტგენული დიფრაქციის მეთოდი გამოიყენება მყარი სხეულების ატომური და მოლეკულური სტრუქტურის განსასაზღვრად. ამ დროს რენტგენის სხივების დიფრაქცია ხდება კრისტალის შემედგენელი ატომებიდან სხვადასხვა მიმართულებით. კრისტალიდან არეკლილი სხივების კუთხეზე დამოკიდებულების შესწავლით შესაძლებელია დადგინდეს მყარი ნივთიერების მახასიათებელი პარამეტრები, როგორცაა ელექტრონების განაწილების სიმკვრივე, ატომების განლაგება კრისტალში, მათი ქიმიური ბმები, გაირკვეს მინარევების არსებობა და სხვა მრავალი. მოცემულ სემინარში განხილული იქნება კრისტალოგრაფიის საფუძვლები, როგორცაა კრისტალურ და ამორფულ სხეულებს შორის განსხვავება, მათი სტრუქტურა, კრისტალის სიმეტრია, ელემენტარული უჯრედის ორიენტაციის განსაზღვრა მილერის ინდექსების საშუალებით. ასევე განვიხილავთ რენტგენული დიფრაქციის ორ - ლაუეს და ბრეგის მოდელებს. აღწერილი იქნება ექსპერიმენტული მეთოდი და შესაბამისი გამზომი სისტემა.

## **Abstract**

X-ray diffraction is a technique used for determining the atomic and molecular structure of a crystal, in which the crystalline atoms cause a beam of incident X-rays to diffract into many specific directions. By measuring the angles and intensities of these diffracted beams, we can produce a three-dimensional picture of the density of electrons within the crystal. From this picture, the mean positions of the atoms in the crystal can be determined, as well as their chemical bonds, their disorder, and various other information. In this seminar we consider crystallography basics, such as difference between crystalline and amorphous materials, their structures, crystal symmetry and unit cell orientation using Miller's indices. Also we consider two model of X-ray diffraction - Laue's and Bragg's model. Experimental method and measuring system will be also presented.

## სარჩევი

I თავი .....	4
1.1 მყარის სხეულის აგებულება. კრისტალური და ამორფული სხეულები .....	4
1.2 კრისტალური მყარი სხეულების სიმეტრია. სიმეტრიის ელემენტები .....	6
1.3 კრისტალური მესერი. სიმეტრიის წერტილოვანი ჯგუფები .....	7
II თავი .....	11
2.1 რენტგენული დიფრაქცია კრისტალებში. ლაუეს მოდელი .....	11
2.2 რენტგენული დიფრაქციის ბრეგის მოდელი .....	13
2.3 კრისტალური მესრის პარამეტრების გაზომვის ექსპერიმენტული	
მეთოდი .....	14
გამოყენებული ლიტერატურა .....	18

## შესავალი

თანამედროვე სამეცნიერო და ტექნოლოგიური განვითარება მნიშვნელოვნად არის დამოკიდებული მყარი სხეულების ფიზიკის განვითარებაზე. დღესდღეობით მასალების მიღება ხორციელდება ნივთიერებათა როგორც ქიმიური, ასევე ფიზიკური თვისებების შესწავლით და გაუმჯობესებით, შესაბამისად აუცილებელია მათი კვლევის მეთოდების შექმნა და დახვეწა. მყარი სხეულების მახასიათებელი პარამეტრების გაზომვის ყველაზე მოხერხებული, იაფი და ყველაზე გავრცელებული მეთოდია რენტგენის სხივების დიფრაქცია. მისი საშუალებით შესაძლებელია ამორფული და კრისტალური მყარი სხეულების განსხვავება, კრისტალის მნიშვნელოვანი პარამეტრების დადგენა და ა.შ.

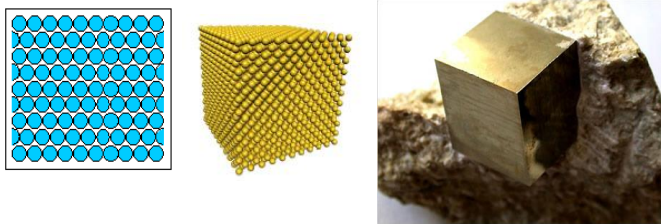
წინამდებარე ნაშრომში აღწერილია მყარი სხეულების მახასიათებელი თვისებები. პირველ ნაწილში ყურადღება გამახვილებულია მყარ კრისტალურ ნივთიერებებზე. აღწერილია სიმეტრიის ელემენტები და მათი სახესხვაობები. ასევე მოყვანილია ატომური სიბრტყეების განლაგების თავისებურებები, საუბარია ბრავეს მესრის ცნებაზე, მოყვანილია მილერის ინდექსები და მათი გამოყენების წესები. მეორე ნაწილი ეხება რენტგენული დიფრაქციის არსებული მოდელების განხილვას. მოკლედ არის აღწერილი როგორც ლაუეს მეთოდი, ასევე ბრეგის მოდელი. ნაჩვენებია ამ მოდელების თავისებურებები და გამოყენების სფეროები.

დასკვნით ნაწილში საუბარია რენტგენული დიფრაქციის ექსპერიმენტის განხორციელებაზე. განხილულია ექსპერიმენტის ჩატარების სპეციფიკა და მიღებული შედეგების ინტერპრეტაციის მეთოდები. მიუხედავად იმისა, რომ რენტგენული დიფრაქცია ყველაზე გავრცელებული მეთოდია მყარი სხეულების შესწავლის საქმეში, მასაც გააჩნია სუსტი მხარე, შესაბამისად ნაშრომის ბოლოს მოკლედ არის ნათქვამი ალტერნატიული მეთოდების შესახებ.

# I თავი

## 1.1. მყარის სხეულის აგებულება. კრისტალური და ამორფული სხეულები

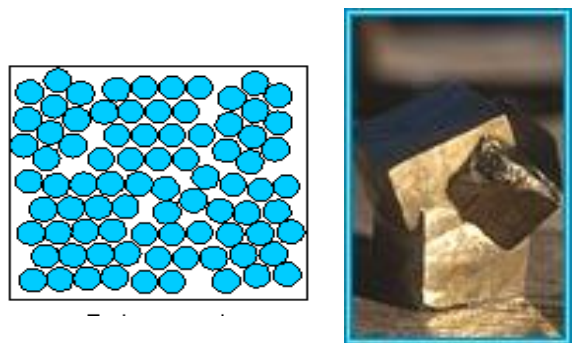
თხევადი ნივთიერება გაცივებისას კარგავს დენადობის თვისებას და გადადის მყარ მდგომარეობაში. მაგრამ გამყარება სხვადასხვა ნივთიერებისთვის სხვადასხვანაირად მიმდინარეობს. ცნობილია გამყარების ორი სახე: გამყარება ნივთიერების კრისტალიზაციის შედეგად და გამყარება სითხის სიბლანტის შედარებით სწრაფი ზრდის შედეგად (სიბლანტის ეს ზრდა გამოწვეულია ტემპერატურის შემცირებით). განვიხილოთ თითოეული მათგანი.



ნახ.1 მონოკრისტალური მყარი სხეული

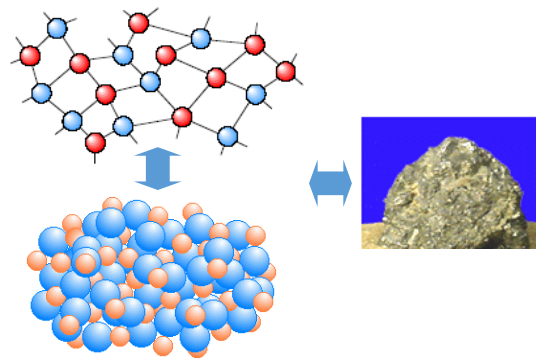
ნაწილაკებისაგან. ამ არეებს კრისტალიზაციის ცენტრები ეწოდება. კრისტალიზაციის ცენტრები უმცირესი კრისტალებია, რომლებიც ნივთიერებიდან სითხოს შემდეგი გამოდევნით თანდათან იზრდება (სითხიდან ნაწილაკების მიერთების ხარჯზე) და ბოლოს მოიცავს ნივთიერების მთელ მოცულობას. მიღებულ მყარ ნივთიერებას კრისტალური ნივთიერება ეწოდება. კრისტალური მყარი სხეულის თვისებაა ის, რომ მასში ნაწილაკები სწორად, კანონზომიერად, გარკვეული გეომეტრიის შესაბამისადაა განლაგებული, რაც ქმნის ეგრედწოდებულ კრისტალურ მესერს. არსებობს კრისტალური ნივთიერებები, რომლებიც შედგებიან ერთი სახის ატომების პერიოდული მიმდევრობისგან მთელ მოცულობაში, რომელსაც ახასიათებს ტრანსლაციური სიმეტრია. ასეთ კრისტალებს მონოკრისტალები ეწოდება. ზოგიერთ კრისტალურ სხეულში კი გვხვდება დიდი რაოდენობის მონოკრისტალების ერთობლიობა (მათ კრისტალიტებს ან მარცვლებს უწოდებენ). ასეთი ნივთიერებები პოლიკრისტალურია.

ნივთიერების (სითხის) კრისტალიზაცია მიმდინარეობს მის გარკვეულ ტემპერატურამდე გაცივებისას. ამ დროს ჩნდება უმცირესი არეები, რომლებიც შედგება ერთმანეთთან მტკიცედ დაკავშირებული, მოწესრიგებულად განლაგებული



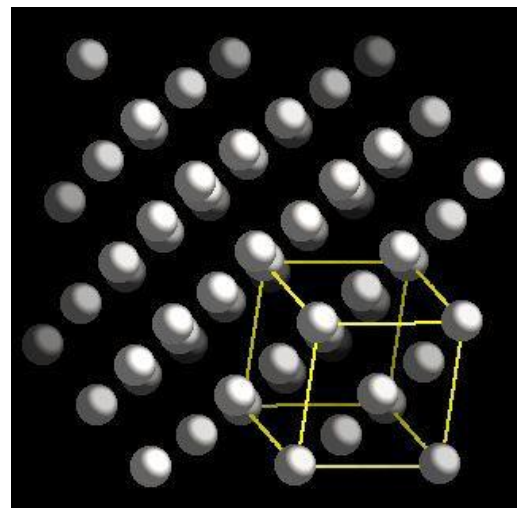
ნახ.2 პოლიკრისტალური მყარი სხეული

მეორე სახის გამყარებისას შეიძლება გვექნოდეს ორი სახის პროცესი: ზოგიერთი ნივთიერება მყარდება ისე, რომ კრისტალიზაციის პროცესი სრულებით არ აღინიშნება. ასეთ სხეულებს ამორფული ხეულები ეწოდება. ასევე არსებობს ნივთიერებები, რომლებსაც კრიდტალიზაციის უნარი გააჩნიათ, მაგრამ მათი სიბლანტე ტემპერატურის შემცირებასთან ერთად მეტად სწრაფად იზრდება. ეს კი აძნელებს ნივთიერების



ნახ.3 ამორფული მყარი სხეული

შემადგენელი ნაწილაკების შემდგომ გადაადგილებას, რაც აუცილებელი პირობაა კრისტალის ჩასახვისა და ზრდისათვის. ამრიგად, ნივთიერება ასწრებს გამყარებას კრისტალიზაციის დწყებამდე. ასეთ ნივთიერებებს მინისებრი ნივთიერებები ეწოდება. ამ ნივთიერებებში კრისტალიზაციის პროცესი მართალია ძალიან ნელა, მაგრამ მაინც მიმდინარეობს მყარ მდგომარეობაში გადასვლი შემდეგაც, ამასთან ტემპერატურის გაზრდა პროცესს აჩქარებს. ამის ნათელი მაგალითია მინის გამოკრისტალეზა, როდესაც მასში წარმოიქმნება მცირე ზომის კრისტალები, რაც იწვევს კრისტალის საზღვრებზე სინათლის მრავალჯერად არეკვლას და გაბნევას. შედეგად მინა კარგავს გამჭვირვალობას. ზოგჯერ გამყარების ხასიათი დამოკიდებულია ნივთიერების გაცივების სიჩქარეზე. მაგალითად თუ გამდნარ გოგირდს გავაცივებთ საკმარისად ნელა, იგი გამყარდება კრისტალური ფორმით, მაგრამ თუ გაცივების პროცესი სწრაფია, მაშინ მიიღება განსხვავებული, ნარევი ფაზა - ამორფულ-მინისებური გოგირდი, რომელსაც კრისტალურისგან განსხვავებული ფიზიკური თვისებები გააჩნია (პლასტიკურია). მინის მსგავსად ამორფული გოგირდიც თანდათან გადადის კრისტალურ მდგომარეობაში. ეს ფაქტი მიუთითებს იმაზე, რომ მყარი სხეულის კრისტალური ფორმა მეტად მდგრადია, ვიდრე ამორფული.



ნახ.4 ატომები კრისტალურ მესერში

ამორფული მყარი სხეულის აღნაგობა არაფრით განსხვავდება მისი წარმომქმნელი სითხის აღნაგობისაგან. მისი შემადგენელი ნაწილაკები (ატომები, იონები, მოლეკულები) მასშიც სრულიად უწყესრიგოდ, ქაოსურადაა განლაგებული. ამორფულ სხეულებს ძალიან მაღალი სიბლანტე და ძალზედ სუსტად გამოხატული დენადობის თვისება აქვს.

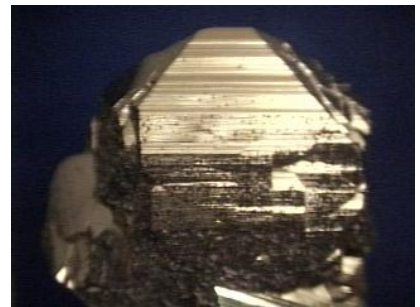
ასეთი მკვეთრი განსხვავება კრისტალურ და ამორფულ სხეულებს შორის განაპირობებს მათ თვისებების მკვეთრ განსხვავებას. კრისტალური მყარი სხეულის ფიზიკური თვისებები (მექანიკური, სითბური, ოპტიკური და სხვა) სხვადასხვა მიმართულებით სხვადასხვაა, რაც ნიშნავს რომ იგი ანიზოტროპულია (ნახ.4). ანიზოტროპულია ყველა მონოკრისტალი, მაგრამ პოლიკრისტალური სხეულების შემთხვევაში შესძლებელია, რომ კრისტალური მაკროსხეული იყოს იზოტროპული. ამის მიზეზია მრავალი მცირე მონოკრისტალი, რომელთა განლაგება სრულიად ქაოსურია. ამორფულ სხეულები კი ყოვეთვის იზოტროპულია.

## 1.2 კრისტალური მყარი სხეულების სიმეტრია. სიმეტრიის ელემენტები

კრისტალის მთავარ თვისებას წარმოადგენს მისი შემადგენელი ნაწილაკების კანონზომიერი განლაგება, რაც განაპირობებს მის ანიზოტროპიას ე.ი. მიმართულების შესაბამისად თვისებების ცვლილებას (ნახ.5). გარდა ამისა ნაწილაკების მოწესრიგებული განლაგება განაპირობებს კრისტალური ნივთიერების შემდეგ ძირითად თვისებებს: ერთგვაროვნება, თვითშემოფარგვლის უნარი და სიმეტრია.



ერთგვაროვნება ნიშნავს რომ კრისტალური სხეულის ერთნაირი ფორმისა და ორიენტაციის ორი უბანი თვისებებით ერთნაირია. თვითშემოფარგვლის უნარი გულისხმობს, რომ კრისტალური ნივთიერება წარმოიქმნება მრავალწახნაგების სახით. კრისტალი რომელიც იზრდება რაიმე ხელისშემშლელი მიზეზის გარეშე, ყოველთვის იღებს ამოხნეკილი მრავალწახნაგას ფორმას. ეს მრავალწახნაგური ფორმები სიმეტრიულია.



ნახ.5 ბუნებრივი კრისტალი

კრისტალურ ფორმებზე დაკვირვება გვიჩვენებს, რომ კრისტალებს ზუსტად განვითარებული მრავალწახნაგას ფორმა ყოველთვის არ ახასიათებთ, ვინაიდან ბუნებრივად იშვიათია შემთხვევა, როცა კრისტალის ზრდა ხელისშემშლელი მიზეზების გარეშე განხორციელდეს, ამიტომ ხშირ შემთხვევაში განვითარებულია მხოლოდ ზოგიერთი წახნაგი. ეს ფორმები, რომლებიც ბუნებაში გვხვდება უამრავია და შეიძლება მოგვეჩვენოს, რომ არსებობს ყველანაირი ფორმის მრავალწახნაგა კრისტალი, ნებისმიერად მიმართული წახნაგებითა და წიბოებით. ჯერ კიდევ 1669 წელს სტენსონმა დაადგინა, რომ კრისტალების ფორმა ემორჩილება შემდეგ კანონს: ერთიდაიმავე ნივთიერების კრისტალებს, იმისდა მიხედვით, თუ რა რაოდენობისა და ზომის წახნაგებით არიან შემოფარგლულნი, შეიძლება ჰქონდეთ სულ სხვადასხვა გარეგანი სახე, მაგრამ კუხეები შესაბამის წახნაგებს შორის მუდმივი სიდიდეა. ეს იმას ნიშნავს, რომ ერთიდაიმავე ნივთიერების ორი



სხვადასხვა კრისტალის ორიენტირდება ისე, რომ სათანადო წახნაგები პარალელური იყოს.

კუთხეთა მუდმივობის კანონი კრისტალოგრაფიის ერთ-ერთი ძირითადი კანონია, რომელიც თავდაპირველად სტენონმა დაადგინა ორი მინერალის - კვარცისა ( $\text{SiO}_2$ ) და ჰემატიტის ( $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ) მაგალითზე, შემდგომში მართებული აღმოჩნდა ყველა კრისტალური ნივთიერებისათვის. ეს კანონი წარმოადგენს იმის შედეგს, რომ კრისტალი ზრდისას იფარგლება არა ნებისმიერი სიბრტყეებით, რომელთა რაოდენობა მოცემული მესერისათვის უსასრულოდ დიდია, არამედ მხოლოდ იმით, რომელთა რეტიკულური სიმკვრივე (ნაწილაკთა რიცხვი ფართობის ერთეულზე) მაქსიმალურია.

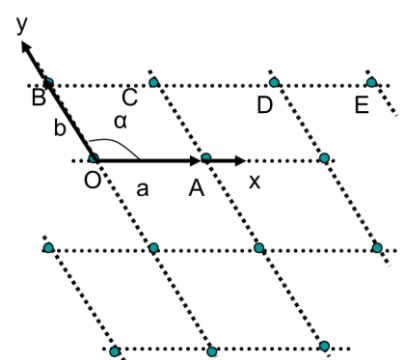
კრისტალებში სიმეტრიის ელემენტების შესაძლო კომბინაციათა რიცხვი, ან რაც იგივეა სიმეტრიის კლასების რაოდენობა მკაცრად არის შეზღუდული. დადგენილია, რომ ბუნებაში შეიძლება არსებობდეს მხოლოდ 32 სიმეტრიის კლასი. ეს კლასები იყოფა 7 კრისტალოგრაფიულ სისტემადა:

1. ტრიკლინური სისტემა;
2. მონოკლინური სისტემა;
3. რომბული სისტემა;
4. ტრიგონური სისტემა;
5. ტეტრაგონური სისტემა;
6. ჰექსაგონური სისტემა;
7. კუბური სისტემა;

### 1.3 კრისტალური მესერი. სიმეტრიის წერტილოვანი ჯგუფები

კრისტალების შინაგანი, მოწესრიგებული სტრუქტურის აღსაწერად სარგებლობენ კრისტალური მესრის ცნებით. კრისტალური მესერი წარმოადგენს სივრცულ ბადეს, რომლის კვანძებში განლაგებულია კრისტალის შემადგენელი ნაწილაკები - ატომები, მოლეკულები (ნახ.6). არსებობს კრისტალური მესერის ორი სახეობა: ბრავეს მესერი და არა ბრავეს მესერი.

ბრავეს მესერი არის ელემენტარული კრისტალური სტრუქტურის პარალელური გადატანის შედეგად მიღებული სივრცული ბადე, რომელიც შედგება ერთი სახის ატომებისაგან.



ნახ.6 კრისტალური მესერი ორ განზომილებაში

ასევე ბრავეს მესერში ყველა წერტილი (ატომი) ეკვივალენტურია(ნახ.7ა). ასეთი დაშვება ამარტივებს სხვადასხვა აგებულების კრისტალური მესრის შესწავლას. არაბრავეს მესერში (ნახ.7ბ) ატომები არა არის ერთნაირი, ასევე შესაძლებელია, რომ ის წარმოადგენდეს რამოდენიმე ბრავეს მესერის ერთობილიობას, შესაბამისად არაბრავეს მესერში ყველა წერტილი ეკვივალენტური არაა. რეალური მესრის ასაგებად იყენებენ გარკვეულ ბაზისს, რომელიც შიძლება იყოს ატომი ან მოლეკულა. მოცემულ ბაზის შეუსაბამებენ სათანადო ბრავეს მესერს. შედეგად აიგება ნივთიერების რეალური სტრუქტურა. აქედან გამომდინარე ნივთიერების კრისტალური სტრუქტურის აღწერა დაიყვანება შესაბამისი ბრავეს მესერის აღწერაზე. მინიშნელოვანია აღინიშნოს, რომ არსებობს ორგანოზომილებიანი თაფლის ფიჭისებრი (ჰექსაგონალური) სტრუქტურა, რომელიც წარმოადგენს არა ბრავეს მესერს. მიუხედავად იმისა, რომ ეს სტრუქტურა შეიძლება შეიცავდეს ერთი და იგივე ატომებს, მისი შემადგენელი წერტილები ეკვივალენტური არ არის. მაგალითისთვის გამოდგება გრაფენის სტრუქტურა (ნახ.8), რომელიც არის ერთი ატომის სისქის ფენა, სადაც ნახშირბადის ატომები ჰექსაგონურ სტრუქტურას ქმნიან.

განვიხილოთ მესრის რაოდენობრივი აღწერის მეთოდები. ამისათვის შემოვიტანოთ მესრის გადაადგილების ვექტორი, რომელსაც ორ განზომილებაში აქვს შემდეგი სახე:

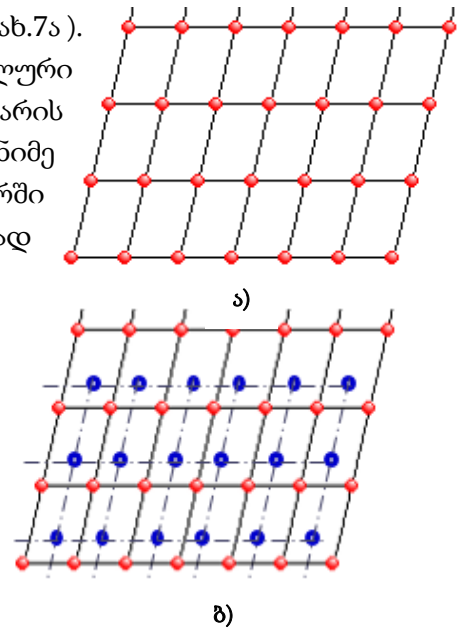
$$\vec{R}_n = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} \quad (1)$$

$\vec{a}$  და  $\vec{b}$  მესრის ვექტორებია, ხოლო  $n_1$  და  $n_2$  მთელი რიცხვებია (ნახ.9). თუ კრისტალის ელემენტარულ უჯრედს გადავადგილებთ მესრის გადაადგილების ვექტორით, უნდა დაიფაროს მესრის მთლიანი ფართობი. ორ განზომილებაში გვაქვს ბრავეს ხუთი მესერი(ხუთი ელემენტარული უჯრედი): ზოგადი, მართკუთხა, კვადრატული, მართკუთხა ცენტრირებული და ექვსკუთხა (ჰექსაგონალური).

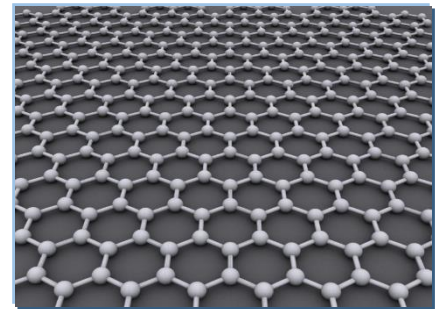
რეალურად, ნებისმიერი კრისტალი სამგანზომილებიანია, შესაბამისად პრაქტიკული მნიშვნელობა აქვს სამგანზომილებიანი ბრავეს მესერის განხილვას. ამ შემთხვევაში ელემენტარული უჯრედი აღიწერება ექვსი მუდმივას საშუალებით:  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$ ,  $\vec{c}$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$  და  $\gamma$  (ნახ.10). მათი მეშვეობით მოიცემა მესრის გადაადგილების ვექტორი, რომელიც შემდეგი სახისაა:

$$\vec{R}_n = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c} \quad (2)$$

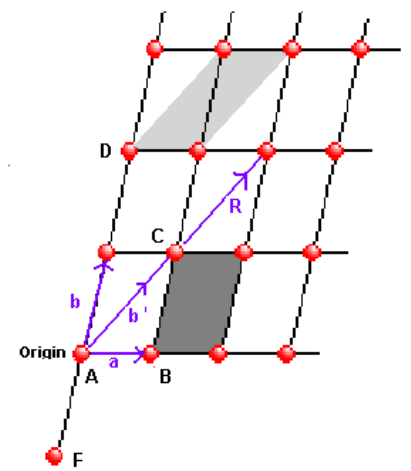
$\vec{a}$ ,  $\vec{b}$ ,  $\vec{c}$  ერთეულოვანი ვექტორებია, ხოლო  $\alpha$ ,  $\beta$  და  $\gamma$  მათ შორის კუთხეები.



ნახ.7 ა) ბრავეს მესერი ბ) არაბრავეს მესერი

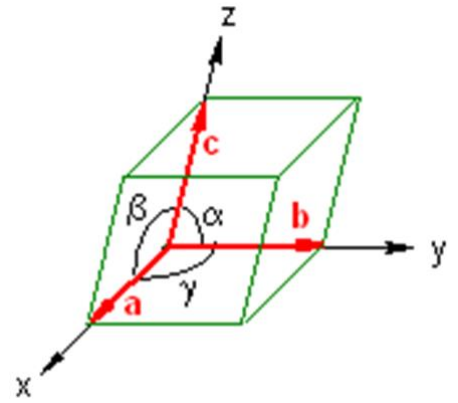


ნახ.8 გრაფენის სტრუქტურა



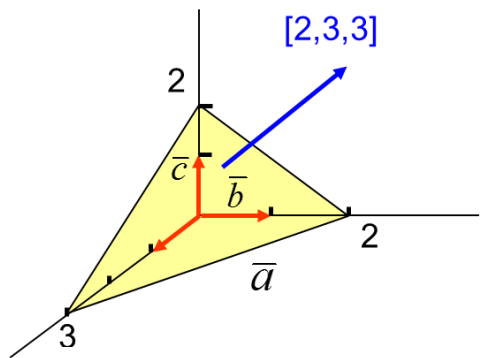
ნახ.9 მესრის ვექტორი

კრისტალურ მესერში არსებობს ერთმანეთის პარალელურად განლაგებული სიბრტყეების უსასრულო რაოდენობა, შესაბამისად მათ დასახასიათებლად საჭიროა, რომ შემოდებულ იქნას შედარებით მარტივი მეთოდი, რომელიც დაკავშირებული იქნება ელემენტარული უჯრედის მახასიათებელ პარამეტრებთან. კრისტალგრაფიული მიმართულებების განსასაზღვრად, გამოიყენება (2) ფორმულით მოცემული გადაადგილების ვექტორი, ხოლო ატომური სიბრტყეების ორიენტაციის განსასაზღვრად შემოდის მილერის ინდექსის ცნება.



ნახ.10 ელემენტარული უჯრედი სამ განზომილებაში

ავირჩიოთ კოორდინატა სისტემა, რომლის ღერძები მიმართულია ელემენტარული უჯრედის წიბოების გასწვრივ, ხოლო სათავე მდებარეობს ამ ღერძების გადაკვეთის წერტილში (ნახ. 11). თითოეულ ღერძზე ავირჩიოთ შესაბამისი წიბოს სიგრძე: X ღერძე - a, Y ღერძე - b და Z ღერძე - c. ნებისმიერი სიბრტყის მდებარეობა სივრცეში განისაზღვრება სამი წერტილით. ჩვენს შემთხვევაში ამ სამ წერტილად მივიღოთ მოცემული სიბრტყეების გადაკვეთის წერტილი საკოორდინატო ღერძებთან. ჩვენს შემთხვევაში სიბრტყეთა გადაკვეთა ხდება  $3\bar{a}$ ,  $2\bar{b}$ ,  $2\bar{c}$  წერტილებში. გადაკვეთის მანძილები შესაბამისად ტოლია  $m = 3$ ,  $n = 2$  და  $p = 2$ . ეს სამი რიცხვი სავსებით განსაზღვრავს მოცემული სიბრტყის მდებარეობას. შესაბამისი მილერის ინდექსების მისაღებად უნდა ავიღოთ m, n, და p რიცხვების შებრუნებული სიდიდეთა ფარდობა და გამოვსახოთ სამი მთელი რიცხვის h, k, l - ის ფარდობის საშუალებით:



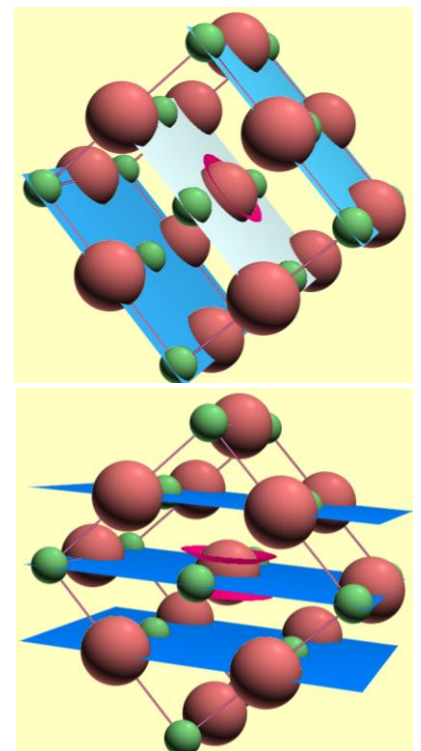
ნახ.11

$$\frac{1}{m} : \frac{1}{n} : \frac{1}{p} = h : k : l \quad (3)$$

h, k, l რიცხვებს მოცემული სიბრტყის მილერის ინდექსები ეწოდება. თუ მიღებული სიდიდეები არამთელია, მაშინ თითოეული უნდა გავამრავლოთ ისეთ რიცხვზე, რომ მივიღოთ მთელი რიცხვი, ვინაიდან მილერის ინდექსები აუცილებლად მთელია. მოცემული სიბრტყისთვის ინდექსების მნიშვნელობა იქნება:

$$\frac{1}{3} : \frac{1}{2} : \frac{1}{2} = 2 : 3 : 3 \quad (4)$$

მილერის ინდექსების მოცემისას რიცხვებს ათავსებენ ფრჩხილებში და ფარდობის ნიშანს არ წერენ, შესაბამისად საბოლოოდ მიღებულ შედეგი ჩაიწერება (233) და იკითხება, როგორც ორი, სამი, სამი და არა „ორასოცდაცამეტი“.

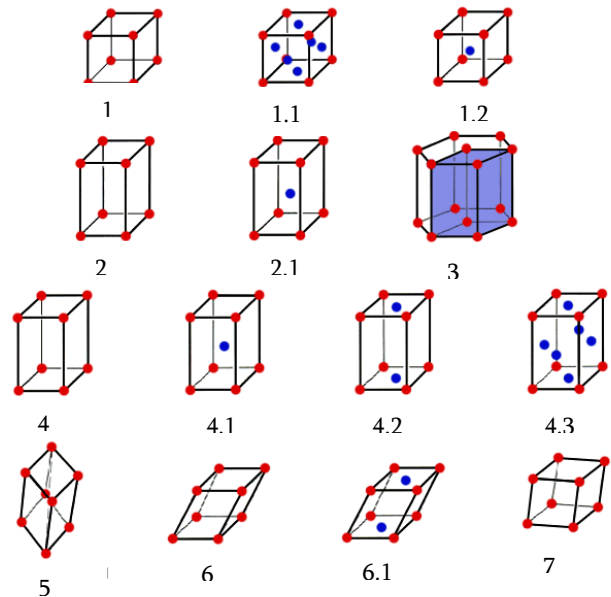


ნახ.12 სხვადასხვა ატომური სიბრტყეები ერთიდაიგივე კრისტალში

თუ სიბრტყე პარალელურია რომელიმე ღერძის, მაშინ ამ ღერძის შესაბამისი ინდექსი ნულის ტოლია. თუ სიბრტყის მიერ ღერძზე მოკვეთილი მონაკვეთი უარყოფითია, მაშინ შესაბამისი მიღერის ინდექსიც უარყოფითია, მაგრამ ნიშანი ეწერება არა ინდექსის წინ, არამედ თავზე. მაგალითად,  $h = -1, k = 0, l = 2 \rightarrow (\bar{1}02)$ . აღსანიშნავია, რომ მიღერის ინდექსები განსაზღვრავს არა რომელიმე კონკრეტულ სიბრტყეს, არამედ პარალელურ სიბრტყეთა ოჯახს, რაც ნიშნავს, რომ მიღერის ინდექსები გვიჩვენებს სიბრტყის კრისტალოგრაფიულ ორიენტაციას.

სამ განზომილებაში გვაქვს 14 ბრავეს მესერი:

1. მარტივი კუბური ;
  - 1.1. წახნაგდაცენტრილი;
  - 1.2. სივრცედაცენტრილი;
2. მარტივი ტეტრაგონური;
  - 2.1. სივრცედაცენტრილი;
3. ჰექსაგონური სისტემა;
4. მარტივი ორთორომბული;
  - 4.1. ფუძედაცენტრილი;
  - 4.2. სივრცედაცენტრილი;
  - 4.3. წახნაგდაცენტრილი;
5. ტრიგონური(რომბოედრული);
6. მარტივი მონოკლინური;
  - 6.1. ფუძედაცენტრილი;
7. ტრიკლინური სისტემა;

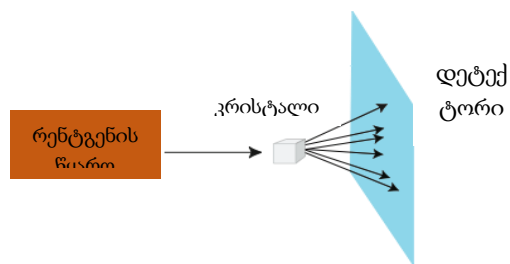


ნახ.13 14 ბრავეს მესერი სამ განზომილებაში

## II თავი

### 2.1 რენტგენული დიფრაქცია კრისტალებში. ლაუეს მოდელი

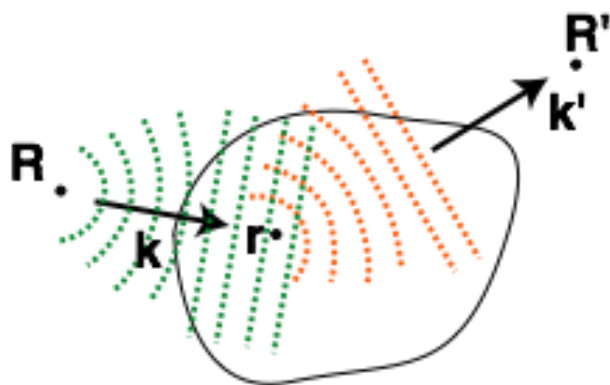
მყარი სხეულების კრისტალური სტრუქტურის შესწავლა ხორციელდება რენტგენის სხივების საშუალებით, რადგან ხილული ან ულტრაიისფერი დიაპაზონის გამოსხივების ტალღის სიგრძე გაცილებით დიდია, ვიდრე კრისტალურ სიბრტყეებს შორის მანძილები, ამიტომ ასეთი გამოსხივება აირეკლება ზედაპირიდან, შესაბამისად ამ საქმისთვის სინათლის მიკროსკოპები არ გამოდგება. ვინაიდან, რენტგენის სხივების ტალღის სიგრძე თანაზომადია მყარი კრისტალური სხეულების შემადგენელ ატომებს შორის მანძილსა, ამიტომ მას შეუძლია მოგვცეს დიფრაქციული სურათი, რომელიც განპირობებული იქნება კრისტალში ატომთა განლაგების თავისებურებით. რენტგენის სხივების დიფრაქციის შედეგად მიღებული სურათის საშუალებით შესაძლებელი დადგინდეს კრისტალური სხეულის აგებულების მრავალი პარამეტრი. რენტგენული დიფრაქციის უპირატესობაა, რომ ის არ აზიანებს არ აზიანებს ნიმუშს. მისი გამოყენების ზოგიერთი სფეროა:



ნახ. 14 რენტგენული დიფრაქციის მოდელი

- კრისტალური და ამორფული სხეულების განსხვავება;
- კრისტალური სხეულების სტრუქტურის განსაზღვრა;
- ატომებში ელექტრონების განაწილების სიმკვრივის შესწავლა;
- მონოკრისტალების ორიენტაციის განსაზღვრა;
- ნივთიერებებში მინარევების რაოდენობის შეფასება;
- პოლიკრისტალურ მესერში მარცვლების ზომის განსაზღვრა და ა.შ.

არსებობს რენტგენული დიფრაქციის ორი მოდელი: ლაუეს მოდელი და ბრეგის მოდელი. ლაუეს მოდელში კრისტალი განიხილება, როგორც პერიოდულად განლაგებული ატომები ბრავეს მესერში. მასზე რენტგენის სხივებით მოქმედებისას, თითოეული ატომი შთანთქავს და შემდეგ გამოასხივებს ტალღას ყველა მიმართულებით. ამ დროს დიფრაქციის მაქსიმუმი დაიმზირება იმ მიმართულებებით, სადაც ხდება გაბნეული ტალღების კონსტრუქციული ინტერფერენცია. განვიხილოთ უფრო დაწვრილებით.



ნახ. 15 რენტგენის სხივების დიფრაქცია ლაუეს მოდელში

ტალღა, რომელიც ეცემა გარკვეულ  $r$  წერტილში მოიცემა შემდეგი ფორმულით:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = E_0 e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{R})-i\omega t} \quad (5)$$

ვინაიდან,  $E_0$  აბსოლიტური მნიშვნელობა არ გვანტერესებს, გვექნება:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) \propto e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{R})} e^{-i\omega t} \quad (6)$$

დედექტორზე დაცემული ტალღისათვის კი:

$$\vec{E}(\vec{R}, t) \propto \vec{E}(\vec{r}, t) \rho(\vec{r}) e^{i\vec{k}'(\vec{R}-\vec{r})} \quad (7)$$

სადაც  $\rho(\vec{r})$  მუხტის სიმკვრივეა ტალღის დაცემის  $r$  წერტილში. ამ მოდელში რენტგენის სხივები განიხილება სფერული ტალღების სახით, რომელიც ერთნაირად მოქმედებს კრისტალში შემავალ ყველა ატომზე. შესაბამისად თუ ვიცით ტალღის მნიშვნელობა რაიმე ერთ წერტილში, შეგვიძლია ვიპოვოთ ტალღის მნიშვნელობა მთელი კრისტალისათვის.

$$\vec{E}(\vec{R}, t) \propto e^{-i\omega t} \int_V \rho(\vec{r}) e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}} dV \quad (8)$$

ამ შემთხვევაში დედექტორზე გაზომვადი სიდიდეა არეკლილი ტალღის ინტენსივობა, რომელიც მოიცემა შემდეგი ფორმულით:

$$I(\vec{K}) \propto \left| \int_V \rho(\vec{r}) e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}} dV \right|^2 = \left| \int_V \rho(\vec{r}) e^{i(\vec{K})\vec{r}} dV \right|^2 \quad (9)$$

სადაც  $\vec{K} = \vec{k}' - \vec{k}$  გაბნევის ვექტორია. ვინაიდან ლაუეს მოდელში კრისტალი ატომების პერიოდული განლაგებაა, შესაბამისად პერიოდულადაა განაწილებული მუხტის სიმკვრივეც. აქედან გამომდინარე (9) ფორმულიდან შეგვიძლია ვთქვათ, რომ დიფრაქციის ინტენსივობა არის მუხტების სიმკვრივის ფურიე გარდაქმნის კვადრატი.

$$I(\vec{K}) \propto \left| \int_V \rho(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} d^3\vec{r} \right|^2 \quad (10)$$

სამ განზომილებაში მუხტის სიმკვრივისთვის გვაქვს შემდეგი გამოსახულება:

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} \rho_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\vec{r}} \quad (11)$$

(11) ფორმულაში თუ გავითვალისწინებთ მესრის გადაადგილების ვექტორის თვისებას გვექნება:

$$\vec{r}_n = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

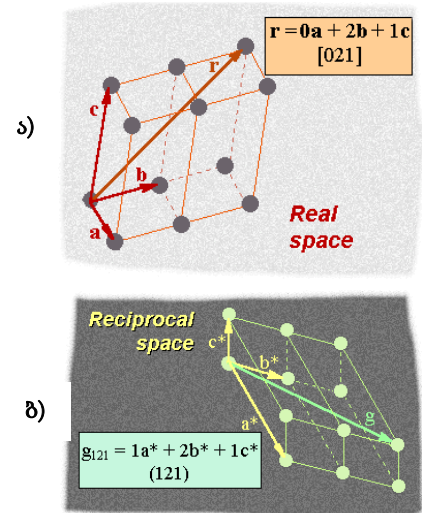
$$\rho(\vec{r} + \vec{r}_n) = \rho(\vec{r}) \quad (12)$$

ეს კი მესრის პერიოდულობის გათვალისწინებით შეგვიძლია ჩავწეროთ შემდეგი სახით:

$$\vec{G} \cdot \vec{r}_n = 2\pi m \quad (13)$$

(13) ფორმულაში შემავალ სიდიდეს  $\vec{G}$  შებრუნებული მესრის ვექტორი ეწოდება, რომელსაც დიდი მნიშვნელობა აქვს დიფრაქციის შედეგად მიღებული მაქსიმუმების გამოთვლაში. კერძოდ, ლაუეს დიფრაქციის მოდელში მაქსიმუმის მიღების პირობაა, როცა  $\vec{K} = \vec{G}$ .

მიუხედავად იმისა, რომ ლაუეს დიფრაქციის მეთოდი თეორიულად კარგად აღწერს კრისტალში რენტგენის სხივების დიფრაქციის ასპექტებს, იგი ვერ გამოდგება ექსპერიმენტული გაზომვებისათვის. ამიტომ ამ მიზნით უფრო ხელსაყრელია ბრეგის მოდელის გამოყენება, რომელშიც განიხილება კონკრეტული ტალღის სიგრძის მქონე რენტგენის გამოსხივების არეკვლა წარმოსახვითი ატომური სიბრტყეებიდან.



ნახ. 16 ა) რეალური მესერი  
ბ) შესაბამისი შებრუნებული მესერი

## 2.2 რენტგენული დიფრაქციის ბრეგის მოდელი

ბრეგის მოდელის მიხედვით კრისტალი შეგვიძლია წარმოვიგინოთ, როგორც ერთმანეთის პარალელური სიბრტყეების უსასრულო მიმდევრობა რომელსაც ეცემა მუდმივი სიხშირის, შესაბამისად უცვლელი ტალღის სიგრძის რენტგენის სხივები. იმისათვის რომ დავადგინოთ რა ენერგიის რენტგენის სხივებია საჭირო შეგვიძლია ჩავატაროთ მარტივი გამოთვლა. ვინაიდან ვიცით დამოკიდებულება ტალღის სიგრძესა და მის შესაბამის სიხშირეს შორის შეგვიძლია დავწეროთ:

$$v = \frac{c}{\lambda} \quad (14)$$

ატომებ შორის მანძილი  $10^{-10}$ მ რიგისაა ( $1\text{\AA}$ ), შესაბამისად ენერგიისთვის მივიღებთ:

$$E_{x\text{-ray}} = \hbar\omega = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{hc}{1 \times 10^{-10} \text{ m}} = 12.3 \times 10^3 \text{ eV} \quad (15)$$

შედეგად ეს სხივები აირეკლება სხვადასხვა სიბრტყეში განლაგებული ატომებიდან, ხოლო შემდეგ ხდება არეკლილი სხივების ზედდება. ინტერფერენციის თვისებიდან გამომდინარე კოჰერენტული ტალღების ზედდების შედეგად მიიღება მაქსიმუმებისა და მინიმუმების მონაცვლეობითი სურათი, რასაც დიფრაქციულ სურათსაც უწოდებენ. ბრაგმა გამოიყენა მაქსიმუმების მიღების პირობა დიფრაქციულ სურათში და იგი დაუკავშირა ატომის სიბრტყეებს შორის მანძილს. 17-ე ნახატზე მოცემულია ბრეგის მოდელის შესაბამისი გამარტივებული სურათი, რომლის მიხედვითაც სვლათა სხვაობა ტალღა 2-სა და ტალღა 1-ს შორის ტოლია:

$$XYZ = 2d \sin \theta \quad (16)$$

სადაც  $d$  ატომურ სიბრტყეებს შორის მანძილია, ხოლო  $\theta$  არის კუთხე სიბრტყესა და დაცემულ/არეკლილ ტალღას შორის. (16) ფორმულაში თუ

გავითვალისწინებთ ტალღების ინტერფერენციისას მაქსიმუმის მიღების პირობას ( $XYZ = n\lambda$ ) მივიღებთ შემდეგ ტოლობას:

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (17)$$

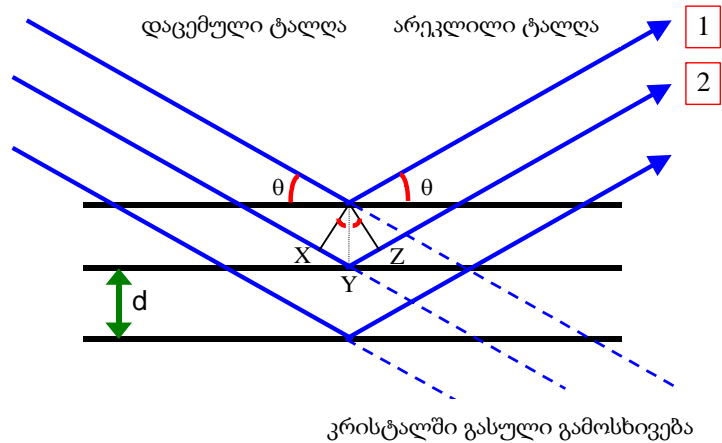
(17) ფორმულას ბრეგის ფორმულა ეწოდება, რომელიც 1913 წელს მამა-შვილმა ბრეგებმა აღმოაჩინეს და იგი დღემდე საუკეთესო ექსპერიმენტულ მეთოდად ითვლება კრისტალის სტრუქტურის შესასწავლად. (17) ფორმულა შეგვიძლია ასეც ჩავწეროთ:

$$2d_{hkl} \sin \theta = \lambda \quad (18)$$

სადაც  $d_{hkl}$  ატომურ სიბრტყეებს შორის მანძილია და მილერის ინდექსებთან დაკავშირებულია შემდეგი თანაფარდობით:

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} \quad (19)$$

ბრეგის კანონის დახმარებით შესაძლებელია ექსპერიმენტულად გაიზომოს კრისტალზე დიფრაქციის შედეგად მიღებული პიკების ინტენსივობები, რომელთა მდებარეობა დაკავშირებულია  $2\theta$  კუთხესთან. ვნახოთ, თუ რა ინფორმაციის მოცემა



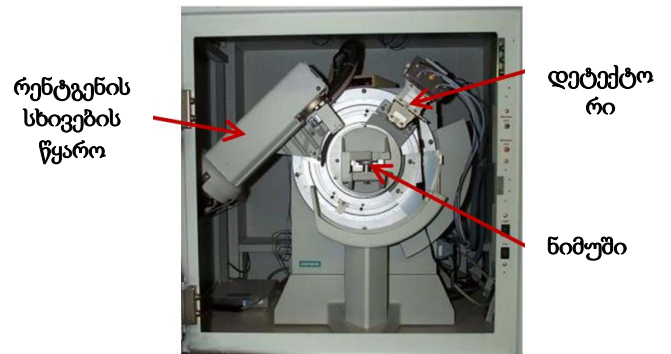
ნახ. 17 რენტგენის სხივების დრეკადი არეკვლა წარმოსახვითი ატომური სიბრტყეებიდან



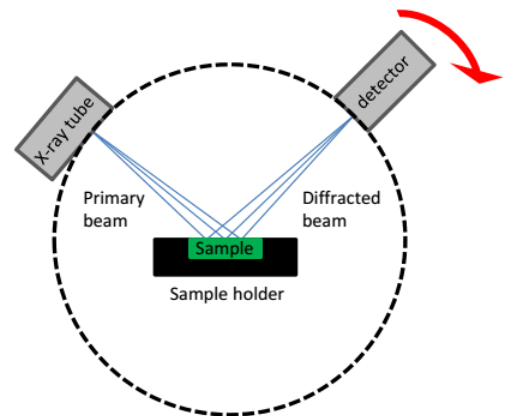
შეუძია ბრეგის კანონზე დაფუძნებულ რენტგენული დიფრაქციის გაზომვის შედეგებს.

### 2.3 კრისტალური მესრის პარამეტრების გაზომვის ექსპერიმენტული მეთოდი

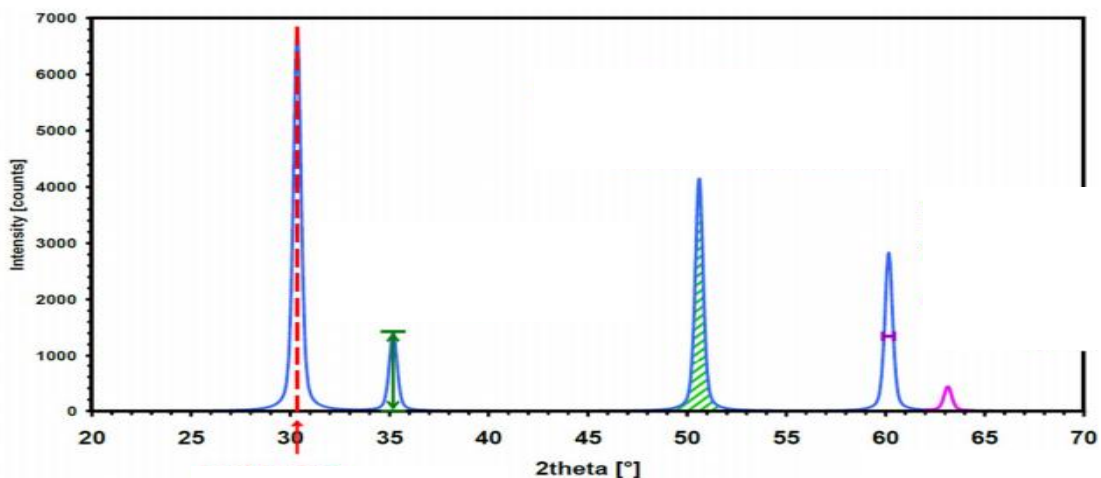
ექსპერიმენტული გაზომვებისას იყენებენ დანადგარს, რომელიც შედგება სამი ძირითადი ნაწილისაგან: რენტგენის სხივების წყარო, ნიმუშის მოსათავსებელი პლატფორმა და დეტექტორი. გაზომვის ჩასატარებლად საჭიროა ვცვალოთ რენტგენის სხივის დაცემის კუთხე. ამის განხორციელება შეიძლება ორი გზით, პირველი - გამომსხივებელი და დეტექტორი უძრავია და მოძრაობს ნიმუში და მეორე ნიმუში უძრავია, ხოლო გამომსხივებელი და დეტექტორი მოძრაობს მის გარშემო ისე, რომ მათშორის კუთხე  $2\theta$  უცვლელია. პრაქტიკაში უფრო ხშირად გამოიყენება მეორე გაზომვის ხერხი, შესაბამისად გვაქვს მაქსიმუმების (პიკების) დამოკიდებულება კუთხეზე  $2\theta$ . რენტგენის სხივების წყაროს უმეტეს შემთხვევაში წარმოადგენ აჩქარებული ელექტრონების მეტალის ზედაპირზე მკვეთრი დამუხრუჭება. ამ მიზნით ძირითადად იყენებენ სპილენძს, რომლის მიერ გამოსხივებული რენტგენის



ნახ. 18 რენტგენული დიფრაქტომეტრი



ნახ. 19 ბრეგი-ბრენტანოს გეომეტრია

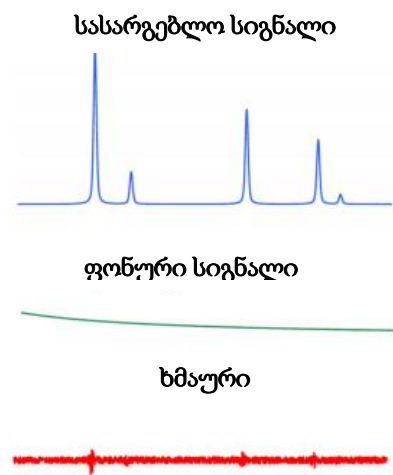


ნახ. 20 რენტგენული დიფრაქციის გრაფიკი

ტალღის სიგრძეა - 1.54 Å (Cu Kα). დეტექტორზე მიღებული დიფრაქციული სურათი შეიცავს მნიშვნელოვან ინფორმაციას ნივთიერების კრისტალური აგებულების შესახებ. გაზომვების შედეგად ვიღებთ პიკების ინტენსივობის დამოკიდებულებას 2θ კუთხეზე შემდეგი სახით:

მოცემული გრაფიკი გვაწვდის შემდეგ ინფორმაციას: მესერის ელემენტარული უჯრედის ზომა და ფორმა შეიძლება მივიღოთ პიკების განლაგებიდან - პიკების მდებარეობის მიხედვით შეგვიძლია დავადგინოთ ატომურ სიბრტყეებს შორის მანძილი და შესაბამისად კრისტალური მესერის პარამეტრები. პიკის სიმაღლე შეესაბამება მიახლოებით ინტენსივობას, ხოლო ინტენსივობა მიგვითითებს მესერის ელემენტარული უჯრედის შემადგენლობაზე. პიკის მიერ შემოსაზღვრული ფართობი შეესაბამება კრისტალურ სტრუქტურას და ფაზის მოცულობას. პიკის ისგანე - კრისტალიტების ზომას და მინარევების რაოდენობას.

რეალური გაზომვები ყოველთვის განსხვავდება იდეალურისაგან, შესაბამისად რენტგენული დიფრაქციის შედეგად მიღებული გრაფიკი ყოველთვის შედგება სამი სახის სიგნალისაგან: სასურველი სიგნალი, ფონური სიგნალი და ხმაური. გაზომვების ხარისხი კი დამოკიდებულია არამარტო გამზომი აპარატურის ხარისხზე, არამედ ნიმუშის მომზადების წესზეც. ჩვეულების ნიმუში მზადდება ფხვნილის სახით და ნაწილდება თანაბრად სიბრტყეზე. შემდეგ იდება აპარატში და ტარდება გაზომვები. მიღებული გრაფიკი დარდება ბაზაში არსებულ მონაცემებთან, რომლის მიხედვითაც ვადგენთ ნიმუშის შემადგენლობას.



ნახ. 21 გაზომვის შედეგად მიღებული სიგნალები

რენტგენული დიფრაქცია არის ყველაზე იაფი, მოხერხებული და შესაბამისად ყველაზე გავრცელებული მეთოდი, ამასთან არ ხდება გამოსხივების შთანთქმა ჰაერში, ამიტომ არ არის საჭირო ნიმუშის ვაკუუმში მოთავსება. მიუხედავად ამ უპირატესობებისა ამ მეთოდსაც გააჩნია თავისი სუსტი მხარე. იგი ძნელად ურთიერთქმედებს მსუბუქ ატომებთან. ამის გამო საჭიროა ალტერნატიული მეთოდების გამოყენება. ეს მეთოდებია ნეიტრონული და ელექტრონული დიფრაქცია.

ნეიტრონი არ ურთიერთქმედებს ელექტრონებთან, ამიტომ რენტგენისაგან განსხვავებით ისინი განიბნევიან მხოლოდ ბირთვებზე. ასევე მათ გააჩნიათ მაგნიტური მომენტი. ამიტომ ნეიტრონები ძლიერად ურთიერთქმედებენ ატომებისა და იონების მაგნიტურ მომენტებთან, შესაბამისად უფრო სასარგებლოა კრისტალურ სტრუქტურებში მსუბუქი ატომების (მაგალითად: წყალბადი,

ჟანგბადი) შესასწავლად. ვინაიდან ნეიტრონების მიღება ხდება ატომურ რეაქტორში, ამიტომ მათი წყარო მსოფლიოში ნაკლებად ხელმისაწვდომია და შესაბამისად რენტგენტთან შედარებით შეზღუდულია ნეიტრონული დიფრაქციის გამოყენება.

ელექტრონები ძლიერად ურთიერთქმედებენ ატომებთან. ამიტომ ელექტრონს შეუძლია შეაღწიოს მხოლოდ კრისტალის ზედაპირში (1-10 ნმ). ამ მიზეზის გამო ელექტრონულ დიფრაქციას უპირველეს ყოვლისა იყენებენ ზედაპირების სტრუქტურის შესასწავლად. ვინაიდან ელექტრონები ძლიერად შთაინთქმებიან ჰაერში, ამიტომ ელექტრონული დიფრაქციისთვის ნიმუში უნდა მოთავსდეს სპეციალურ ვაკუუმურ კამერაში, რაც ართულებს და აძვირებს ექსპერიმენტებს.

რენტგენი X-Ray	ნეიტრონი Neutron	ელექტრონი Electron
$\lambda = 1\text{\AA}$ $E \sim 10^4 \text{ eV}$ ურთიერთქმედებს ელექტრონებთან	$\lambda = 1\text{\AA}$ $E \sim 0.08 \text{ eV}$ ურთიერთქმედებს ბირთვებთან ღრმად აღწევს ნივთიერებაში	$\lambda = 2\text{\AA}$ $E \sim 150 \text{ eV}$ ძლიერად ურთიერთქმედებს ელექტრონებთან სუსტად აღწევს ნივთიერებაში

საბოლოო ჯამში გვაქვს მყარი სხეულების შესწავლის სამი მეთოდი, რომელთაგან ყველაზე მოხერხებული და მრავალმხრივი გამოყენების რენტგენული დიფრაქციაა.

## გამოყენებული ლიტერატურა

1. გ. კუკულაძე - „მყარი სხეულის ფიზიკა“.
2. ა. შენგელაია - „ლექციების კურსი მასალათმცოდნეობაში“.
3. Scott A Speakman – „Basics of X-Ray Diffraction“.
4. Philip Hofmann – „Solid State Physics: An Introduction“.