

**ÓZBEKISTAN RESPUBLIKASI JOQARI HÁM ORTA ARNAWLI  
BILIM MINISTRILIGI**

**BAS ILIMIY-METODIKALÍQ ORAY**

**BERDAQ ATINDAĞI QARAQALPAQ MÁMLEKETLIK  
UNIVERSITETINIŃ JANINDAĞI PEDAGOGIKALIK KADRLARDI  
QAYTA TAYARLAW HÁM QÁNIGELIGIN JETILISTIRIW  
AYMAQLIQ ORAYI**

**"FIZIKALIQ PROCESSLERDI KOMPYUTERDE MODELLESTIRIW"  
MODULI BOYINSHA**

**OQIW-METODIKALIQ KOMPLEKS**

Nókis 2017

**Bul oqıw-metodikalıq kompleks Joqarı hám orta arnawlı bilim ministrliginiń 2017 jıl «\_\_»-  
\_\_\_\_\_dag'i \_\_\_-sanlı buyırığı menen tastıyqlanǵan oqıw reje hám dástúr tiykarında  
tayarlandı.**

**Dúziwshi:**

prof. B.Abdikamalov

**Pıkir bildiriwshi:**

docent U.Nasırov

**Oqıw-metodikalıq kompleks QQMU dıń 2017-jıl «\_\_»-\_\_\_\_\_dagı \_\_-sanlı qararı  
menen baspaǵa usınıdı**

## MAZMUNÍ

OQIW BAĞDARLAMASI .....	4
LEKCIYALAR MATERIALLARI.....	12
ÁMELIY SABAQ MATERIALLARI .....	70
ÁDEBIYATLAR DIZIMI .....	129

**ÓZBEKISTAN RESPUBLIKASI JOQARI HÁM ORTA ARNAWLI  
BILIM MINISTRILIGI**

**BERDAQ ATINDAĞI QARAQALPAQ MÁMLEKETLIK  
UNIVERSITETINIŃ JANINDAĞI PEDAGOGIKALIK KADRLARDI  
QAYTA TAYARLAW HÁM QÁNIGELIGIN JETILISTIRIW  
AYMAQLIQ ORAYI**

"Tastıyıqlayman"

Oraydıń direktori

\_\_\_\_\_ Q.Ubaydullaev

" \_\_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 2017 jil

**"FIZIKALIQ PROCELLERDI KOMPYUTERDE MODELLESTIRIW"  
MODULI BOYINSHA**

**OQIW BAĞDARLAMASI**

Nókis 2017



<ul style="list-style-type: none"> <li>• Tırlawshılar házirgi zaman kompyuterlik programmalaw tilleri hám olardıń múmkinshilikleri haqqındaǵı bilimlerdi aladı.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Tırlawshılardıń kompyuterlerde erkin túrde isley alıwı hám óziniń jumısında kompyuterlik programmalaw tilleriniń birin erkin túrde isley alıwı.</li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Fizikalıq processler ushın matematikalıq modellerdiń dóretiliw múmkinshilikleri. Bunday maqsette fundamentallıq fizikalıq nızamlıqlar menen teoriyalardıń tutqan ornı.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Fizikalıq processler ushın fizikanıń nızamları menen teoriyaların paydalana alıw. Processlerdi modellestiriw ushın esaplaw algoritmlerin dúze alıw.</li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Házirgi waqıtları kompyuterlik modellestiriw boyınsha islenip atırǵan jumıslar. Fizikanıń hár kıylı tarawlarındaǵı ayırım processlerdi modellestiriw jumısların úyreniw.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Matematikalıq programmalaw tillerin fizikalıq esaplardı sheshiw, processlerdi modellestiriw ushın paydalanıw.</li> </ul>

## 2.2. Modul boyınsha sabaqlardıń bólistiriliwi

№	Atamaları	Tırlawshılardıń oqıw júklemesi, saatlar					Óz betinshe
		Hámmesi	Auditoriyadaǵı oqıw júklemesi				
			Jámi	Sonıń ishinde:			
				Teoriyalıq	Ámeliy		
1.	Fizikalıq processlerdi kompyuterlik modellestiriw tarawında qolǵa kirgizilgen jetiskenlikler. Kompyuterlik modellestiriwdiń principi. Paydalanılatuǵın matematikalıq programmalaw tilleri.	12	8	4	4		
2.	Materiallıq noqatlardıń kinematikası menen dinamikasına, jıllılıq processlerine baylanıslı bolǵan ápiwayı processlerdi kompyuterlerde modellestiriw.	16	8	4	4		2
3.	Quramalı fizikalıq processlerdi	6	6	2	4		2

	kompyuterlerde modellestiriw (relyativistlik dinamikağa baylanıslı máseleler).						
3.	Jami:	12	8	4	4		4

### 2.3. Teoriyalıq hám ámeliy sabaqlardıń temaları

No	Moduldiń birlikleriniń ataması	Sabaqtıń túri	Saat sanı
1	Fizikalıq processlerdi kompyuterlik modellestiriw tarawında qolğa kirgizilgen jetiskenlikler. Kompyuterlik modellestiriwdiń principi. Paydalanılatuǵın matematikalıq programmalaw tilleri. 1. Fizika iliminde processlerdi modellestiriwdiń áhmiyeti. Islenip atırǵan jumslar. 2. Fizikalıq processlerdi kompyuterlik modellestiriw islerinde paydalanılatuǵın matematikalıq programmalaw tilleri. Wolfram Mathematica tiliniń 11-versiyası haqqında.	teoriyalıq  ámeliy	1  1
2	Materiallıq noqatlardıń kinematikasını menen dinamikasına, jıllılıq processlerine baylanıslı bolǵan ápiwayı processlerdi kompyuterlerde modellestiriw. 1. Fizikanıń tiykarǵı fundamentallıq nızamları menen teoriyalarınıń tiykarında esaplaw algoritmlerin dúziw. 2. Qozǵalatuǵın processlerdi kompyuterlerdiń járdeminde demonstarciyalawdıń múmkinshilikleri. Animaciyalar menen multimediyalar. 3. Ápiwayı fizikalıq qubılıslardı hám processlerdi modellestiriw.	teoriyalıq  ámeliy	2  2
3.	Qoramalı fizikalıq processlerdi kompyuterlerde modellestiriw (relyativistlik dinamikağa baylanıslı máseleler). 1. Salıstırmalıq teoriyasınıń matematikalıq tiykarları hám onıń teńlemelerin sanlı sheshiwdiń múmkinshilikleri. 2. Ayırım jaǵdaylar ushın salıstırmalıq teoriyasınıń teńlemelerin sheshiw. Orayǵa qarata simmetriya bolǵan jaǵday. 3. Merkuriy planetasınıń perigeliyiniń ásirliw awısıwı. 4. Gravitaciya maydanındaǵı waqtıń ásteleniwi. 5. Qara qurdımlardıń birigiwi menen baylanıslı bolǵan modellestiriw máseleleri.	teoriyalıq  ámeliy	1  1
	JAMI:		8

### III. MODULDIŃ MAZMUNI

#### 3.1. Teorikalıq sabaqlardıń mazmunı:

I. Fizikalıq processlerdi kompyuterlik modellestiriw tarawında qolǵa kirgizilgen jetiskenlikler. Házirgi waqıtları kompyuterlerdiń ilimlerdiń rawajlanıwındaǵı tutqan ornı. Kompyuterlik modellestiriwdiń principi. Paydalanılatuǵın matematikalıq programmalaw tilleri.

1. Fizika iliminde processlerdi modellestiriwdiń áhmiyeti. Islenip atırǵan jumıslar. Oqıw processinde úyrenilip atırǵan processlerdi demonstraciyalaw hám onıń ushın programmalıq ónimlerdi islep shıǵarıw.

2. Fizikalıq processlerdi kompyuterlik modellestiriw islerinde paydalanılatuǵın matematikalıq programmalaw tilleri. Wolfram Mathematica tiliniń 11-versiyası haqqında. Delphi. Obektke orientirlengen programmalaw tilleri.

II. Materiallıq noqatlardıń kinematikasını menen dinamikasına, jıllıq processlerine baylanıslı bolǵan ápiwayı processlerdi kompyuterlerde modellestiriw.

1. Fizikanıń tiykarǵı fundamentallıq nızamları menen teoriyalarınıń tiykarında esaplaw algoritmlerin dúziw.

2. Qozǵalatuǵın processlerdi kompyuterlerdiń járdeminde demonstraciyalawdıń múmkinshilikleri. Animaciyalar menen multimediyalar.

3. Ápiwayı fizikalıq qubılıslardı hám processlerdi modellestiriw.

III. Quramalı fizikalıq processlerdi kompyuterlerde modellestiriw (relyativistlik dinamikaga baylanıslı máseleler).

1. Salıstırmalıq teoriyasınıń matematikalıq tiykarları hám onıń teńlemelerin sanlı sheshiwdiń múmkinshilikleri.

2. Ayırım jaǵdaylar ushın salıstırmalıq teoriyasınıń teńlemelerin sheshiw. Orayǵa qarata simmetriya bolǵan jaǵday.

3. Merkuriy planetasınıń perigeliyiniń ásirliw awısıwı.

4. Gravitaciya maydanındaǵı waqıttıń ásteleniwi.

5. Qara qurdımlardıń birigiwi menen baylanıslı bolǵan modellestiriw máseleri.

#### 3.2. Ámeliy sabaqlardıń mazmunı

I. Fizikalıq processlerdi kompyuterlik modellestiriw tarawında qolǵa kirgizilgen jetiskenlikler. Házirgi waqıtları kompyuterlerdiń ilimlerdiń rawajlanıwındaǵı tutqan ornı. Kompyuterlik modellestiriwdiń principi. Paydalanılatuǵın matematikalıq programmalaw tilleri.

1. Fizika iliminde processlerdi modellestiriwdiń áhmiyeti. Islenip atırǵan jumıslar. Oqıw processinde úyrenilip atırǵan processlerdi demonstraciyalaw hám onıń ushın programmalıq ónimlerdi islep shıǵarıw.



2. Fizikalıq processlerdi kompyuterlik modellestiriw islerinde paydalanılatuǵın matematikalıq programmalaw tilleri. Wolfram Mathematica tiliniń 11-versiyası haqqında. Delphi. Obektke orientirlengen programmalaw tilleri.

3. Kompyuterle ayqın túrdegi modellestiriw máselelerin sheshiw.

II. Materiallıq noqatlardıń kinematikasına menen dinamikasına, jıllıq processlerine baylanıslı bolǵan ápiwayı processlerdi kompyuterlerde modellestiriw.

1. Fizikanıń tiykarǵı fundamentallıq nızamları menen teoriyalarınıń tiykarında esaplaw algoritmlerin dúziw.

2. Qozǵalatuǵın processlerdi kompyuterlerdiń járdeminde demonstarciyalawdıń múmkinshilikleri. Animaciyalar menen multimediyalar.

3. Ápiwayı fizikalıq qubılıslardı hám processlerdi modellestiriw.

4. Elektr hám magnetizm, optika, yadro fizikası, atom fizikası, elementar bóleksheler fizikası boyınsha modellestiriw jumısları menen tanısıw.

III. Quramalı fizikalıq processlerdi kompyuterlerde modellestiriw (relyativistlik dinamikaǵa baylanıslı máseleler).

1. Salıstırmalıq teoriyasınıń matematikalıq tiykarları hám onıń teńlemelerin sanlı sheshiwdiń múmkinshilikleri.

2. Ayırım jaǵdaylar ushın salıstırmalıq teoriyasınıń teńlemelerin sheshiw. Orayǵa qarata simmetriya bolǵan jaǵday.

3. Merkuriy planetasınıń perigeliyiniń ásirliw awısıwı.

4. Gravitiya maydanındaǵı waqıttıń ásteleniwi boyınsha máseleler shıǵarıw.

5. Qara qurdımlardıń birigiwi menen baylanıslı bolǵan modellestiriw máseleleri.

6. Kompyuterlik modellestiriw jumıslarınıń perspektivaları.

### **3.3. Óz betinshe islenetuǵın jumıslardıń mazmunı**

Oqıw moduli boyınsha juwmaqlawshı test sorawlarına tayarlıq kóriw.

Pitkeriw jumısın jaqlawǵa tayarlıq kóriw hám jaqlaw.

## **IV. Qadaǵalıw sorawları**

1. Kompyuterlik modellestiriwdiń tiykarǵı mánisi nelerden ibarat?
2. Kompyuterlerdiń hám olardıń múmkinshilikleriniń tiykarları nelerden ibarat?
3. Kompyuterlerdiń dúzilisi, arxitekturası, islew principleri.
4. Kompyuterlerdi programmalıq jaqtan támiyinlew. Operaciyalıq sistemalar. Kompyuterlik programmalar.
5. Qanday matematikalıq programmalaw tillerin bilesiz?
6. Fortran, Turbo Beysik hám Turbo Paskal tilleriniń ózgeshelikleri nelerden ibarat?

7. Obektlerge orientirlengen programmalaw tillerinen qanday tillerdi beresiz?
8. Universallıq kompyuterlik algebra sisteması haqqında nelerdi bilesiz?
9. Kompyuterlik animaciyalar haqqında qanday maǵlıwmatlarǵa iyesiz?
10. Materiallıq noqatlardıń kinematikası boyınsha modellestiriw jumısların júrgizgende basshılıqqa alınatuǵın tiykarǵı nızamlar menen principler nelerden ibarat?
11. Materiallıq noqatlardıń dinamikası boyınsha modellestiriw jumısların júrgizgende basshılıqqa alınatuǵın tiykarǵı nızamlar menen principler nelerden ibarat?
12. Jıllılıq qubılısların úyreniw boyınsha modellestiriw jumısların júrgizgende basshılıqqa alınatuǵın tiykarǵı nızamlar menen principler nelerden ibarat?
13. Elektr hám magnetizm boyınsha modellestiriw jumısların júrgizgende basshılıqqa alınatuǵın tiykarǵı nızamlar menen principler nelerden ibarat?
14. Atom fizikası boyınsha modellestiriw jumısların júrgizgende basshılıqqa alınatuǵın tiykarǵı nızamlar menen principler nelerden ibarat?
15. YAdro fizikası boyınsha modellestiriw jumısların júrgizgende basshılıqqa alınatuǵın tiykarǵı nızamlar menen principler nelerden ibarat?
16. Elementar bóleksheler fizikası (jokarı energiyalar fizikası) boyınsha modellestiriw jumısların júrgizgende basshılıqqa alınatuǵın tiykarǵı nızamlar menen principler nelerden ibarat?
17. Salıstırmalıq teoriyası boyınsha boyınsha modellestiriw jumısların júrgizgende basshılıqqa alınatuǵın tiykarǵı nızamlar menen principler nelerden ibarat?
18. Astrofizika boyınsha modellestiriw jumısların júrgizgende basshılıqqa alınatuǵın tiykarǵı nızamlar menen principler nelerden ibarat?
19. Astronomiya boyınsha modellestiriw jumısların júrgizgende basshılıqqa alınatuǵın tiykarǵı nızamlar menen principler nelerden ibarat?
20. Fizikalıq processlerdi modellestiriw boyınsha Internet tamaǵınan kanday maǵlıwmatlardı alıwǵa boladı?
21. Wolfram Mathematica firması tárepinen qanday jumıslar islenip atır hám bul jumıslardıń nátiyjelerin qalayınsha paydalanıwǵa boladı?
22. Ózińiz qanday fizikalıq processlerdi modellestire alasız?

## **V. Oqıtıw quralları**

1. Doska.
2. Internet penen baylanısqa kompyuter, noutbuk hám videoproektor.
3. Markerler.
4. Tarqatpa materiallar.

## VI. Ádebiyatlar

### 6.1. Tiykargı ádebiyatlar

1. Ozbekiston Respublikasi Prezidentining 2012 yil 28 maydagi "Malakali pedagog kadrlar tayerlash hamda wrta maxsus, kasb-hunar talimi muassasalarini shunday kadrlar bilan taminlash tizimini yanada takomillashtirishga oid chora-tadbirlar twgrisida"gi 1761-son Qarori
2. Ozbekiston Respublikasi Vazirlar Mahkamasining 2012 yil 10 avgustdagi "Wrta maxsus, kasb-hunar talimi muassasalari rahbar va pedagog kadrlarining malakasini oshirish va ularni qayta tayerlash tizimini yanada takomillashtirishga doir chora-tadbirlar twgrisida"gi 242-sonli qarori.
3. Karimov I.A. "Bunedkorlik ywolidan". – Toshkent: "Wzbekiston", 1996.
4. Karimov I.A. "Yangicha fikrlash va ishlash – davr talabi". – Toshkent: "Wzbekiston", 1997.
5. Karimov I.A. "Ozbekiston XXI asr bwsagasida: xavfsizlikka tahdid, barqarorlik shartlari va taraqqiet kafolatlari" – Toshkent: "Wzbekiston", 1997.
6. Karimov I.A. "Yuksak manaviyat- engilmas kuch" – Toshkent: "Manaviyat", 2008
7. Karimov I.A. "Ozbekiston mustaqillikka erishish ostonasida". – Toshkent: "Wzbekiston", 2011.
8. Karimov I.A. "2012 yil Vatanimiz taraqqietini yangi bosqichga kwrtaradigan yil bwladi" – Toshkent: "Wzbekiston", 2012.

### 6.2. Qosimsha ádebiyatlar

1. I.A. Karimov. Barkamol avlod - Ozbekiston taraqqietining poydevori. – Toshkent: "Sharq nashrieti", 1997.
2. Lutfullaev M.X., Fayziev M.A.. Internet asoslar. – T.: SamDU nashrieti. 2001.
3. Xolmurodov R.I., Lutfullaev M.. Zamonaviy axborot texnologiyalari asosida wqitish , – Toshkent: WzRFA.Fan, 2003.
4. wolfram.org
5. [www.ziyonet.uz](http://www.ziyonet.uz)
6. [www.edu.uz](http://www.edu.uz)
7. [www.uzedu.uz](http://www.uzedu.uz)
8. [www.pedagog.uz](http://www.pedagog.uz)
9. [www.tdpu.uz](http://www.tdpu.uz)
10. <http://inbox.uz> elektron pochta xizmeti ham basqalar.

## LEKCIYALAR MATERIALLARI

### Mazmunı

Kirisiw.

I bap.

1-§. Bir qatar ulıwmalıq maǵlıwmatlar.

2-§. Kristaldagı rentgen nurlarınıń shashırawı. Laueniń interferenciyalıq funkciyası.

3-§. Keri pánjereniń túyinleriniń forması hám ólshemleri.

4-§. Fure qatarına jayıw hám strukturalıq analizdiń principi.

5-§. Patterson sintezi.

6-§. Atom tárepinen rentgen nurlarınıń shashıratılıwı. «Atomlıq amplituda».

7-§. Kishi kristallardagı rentgen nurlarınıń difrakciyası. Intensivliktiń strukturalıq faktori.

8-§. Strukturalıq amplitudalar. Ulıwmalıq formulalar.

9-§. Simmetriyasınıń keńisliktegi toparı hár qıylı bolǵan kristallar ushın strukturalıq amplitudanıń formulaların keltirip shıǵarıw.

10-§. Bazı bir juwmaqlar.

II bap. Rentgendifrakciyalıq eksperimentlerdi kompyuterlik modellestiriw, tiykarǵı fizikalıq principler hám perspektivalar.

11-§. Modellestiriw máseleleri haqqında tiykarǵı talaplar.

12-§. Rentgenstrukturalıq analiz (tallaw) ushın arnalǵan ayırım programmalar.

13-§. Elementar qutınıń parametrleriniń dálligin joqarılatıw ushın arnalǵan basqa programmalar.

14-§. Qaraqalpaq mámleketlik universitetiniń fizika kafedrasında dóretilgen kompyuterlik programmalar.

15-§. Bazı bir perspektivalıq máseleler.

Ulıwmalıq juwmaqlar.

Paydalanılǵan ádebiyatlardıń dizimi.

## Kirisiw

Kompyuterlik model (ingliz tilinde computer model) yamasa sanlı model (ingliz tilinde COMPUTATIONAL model) bir kompyuterde, superkompyuterde yamasa bir biri menen tásir etisetuǵın kompyuterlerde (esaplawshı túyinlerde) isleytuǵın kompyuterlik programma bolıp tabıladı hám bul programmanıń járdeminde obektin (sonıń ishinde fizikalıq hám basqa da qubıstın) haqıyqıy kórinisinen ózgeshe bolǵan, biraq haqıyqıy kóriniske múmkin bolǵanısha jaqın bolǵan kórinisi júzege keltiriledi [1].

Kompyuterlik modeller matematikalıq modellestiriwdiń ádettegi quralına aylandı hám fizikada, astrofizikada, mexanikada, ximiyada, biologiyada, ekonomikada, sociologiyada, meteorologiyada, sonıń menen birge redioelektronikadıń, mashina qurılısınıń, avtomobil qurılısınıń , basqa da tarawlardı keńnen qollanılmaqta. Kompyuterlik modeller modelleniwshi obekt haqqında jańa bilimlerde alıw, analitikalıq izertlewler ushın júdá quramalı bolǵan sistemalardıń qásiyetlerin juwıq túrde bahalaw ushın qollanılıp atır.

Kompyuterlik modellestiriw quramalı sistemalardı izertlewdiń eń effektivli usıllarınıń biri bolıp tabıladı. Mısal keltiremiz.

2016-jıl pútkil tábiyattanıw ilimlerinde áhmiyeti oǵada ullı bolǵan ilimiy ashılıwlar orın alǵan jıl bolıp tabıladı. Mısal retinde gravitaciyalıq tolqınlardıń ashılıwın kórsetiwge boladı [2-3]. 2016-jıldıń 11-fevral kúni Moskva, Vashington hám Piza qalalarında bir waqıtta ótkerilgen press-konferenciya xalıq aralıq LIGO kollaboraciyası (kollaboraciya dep ulıwmalıq maqsetlerge jetiw ushın qanday da bir tarawdaǵı eki yamasa onnan da kóp adamlardıń, shólkemlerdiń birgeliktegi jumısına aytamız) proektiniń (LIGO, ingliz tilinde Laser Interferometer Gravitational-Wave Observatory, gravitaciyalıq-tolqınlıq observatoriya mánisin beredi) qatnasıwshıları gravitaciyalıq tolqınlardıń eksperimentlerde ashılǵanlıǵın daǵazaladı. Gravitaciyalıq tolqındı registraciyalaw waqıyasın astrofizikada GW150914 (bul jazıwdı "2015-jılı 14-sentyabr kúni baqlanǵan gravitaciyalıq tolqınlar" dep oqıw kerek) waqıyası dep belgilew qabıl etildi. Bunday tolqınlardıń bar ekenligi bunnan 100 jıl burın Albert

Eynshteyn tárepinen jańa ǵana dóretilgen ulıwmalıq salıstırmalıq teoriyasınıń tiykarında bolıap ayılǵan edi. 12-fevral kúni bolsa "Physical Review Letters" jurnalında sol proekttiń aǵzalarınıń "Observation of Gravitational Waves from a Binaty Black Hole Merger" atamasındaǵı maqalası shıqtı [2]. Bul maqalanıń avtorlarınıń sanı derlik bir yarım mır. Olar Jer júziniń 12 elinde jaylasqan 133 universitet penen ilimiy mákemelerinde jumıs isleydi.

Gravitaciyalıq tolqınlardı registraciyalaw ushın dóretilgen eki observatoriyanıń bahası shama menen 365 million dollar bolıp tabıladı (AQSH dolları). Bunday eksperimentlerdi ótkeriwdiń aldında usınday aqsha qarjılarınıń jumsalıwı menen ámelge asatuǵın tájiriyelerdiń barısında kútilip atırǵan nátiyelerdiń alınıwınıń múmkinshiligi birinshi gezekte kompyuterlik modellestiriwdiń járdeminde ayqın túrde kórsetiledi. Usınıń nátiyjesinde ǵana mámleket yamasa basqa da shólkemler tárepinen aqsha hám basqa da materiallıq qarjılar bólip shıǵarıladı.

Joqarıda keltirilgen mısaldan aqsha qarjıları yamasa eksperimentallıq bazalar bolmaǵan jaǵdaylarda kompyuterlik modellerdi paydalanıwdıń áhmiyetli ekenligin kórsetedi.

Ekinshi tárepten kompyuterlik modellerdi dúziwdiń barısında fizikalıq qubılıstı tereń úyreniw múmkinshiligi payda boladı. Tájiriyeler modellerdi dúziwdiń barısında alinatıǵın nátiyelerdi fizikalıq tájiriyelerde baqlanatıǵın nátiyelerge múmkin bolǵanınsha jaqınlatıw mashqalası tuwıladı. Bul jaǵday óz gezeginde izertlenetuǵın qubılıstıń mánisin tereń úyreniwge alıp keledi.

Qaraqalpaq mámleketlik universitetiniń fizika kafedrasında kóp jıllar dawamında ótkerilgen kompyuterlik modellestiriw jumısları kóplegen fizikalıq qubılıslardı tereń úyreniwge alıp keldi. Sonday qubılıslardıń qatarına haqıyqıy hám ideal gazlerdegi processlerdi, qattı denelerdiń jıllılıq qásiyetlerin, kvantlıq mexanikanıń bir ólshemli máselelerin sheshiwdi, rentgen nurlarınıń hám elektronlardıń kristallıq denelerdegi difrakciyasın kórsetiwge boladı.

Bul jumısta rentgendifrakciyalıq eksperimentlerdi kompyuterlik modellestiriw, bul tarawdaǵı orın alǵan kemshilikler hám perspektivalar izertlendi.

Pitkeriw qánigelik jumısınıń aktuallığı tómendegilerden ibarat: Qattı denelerdiń barlıq fizikalıq qásiyetleri zattıń strukturalıq-fazalıq xalı menen baylanıslı. Usı jaǵdayǵa baylanıslı jańa funkcionallıq qásiyetlerge iye bolǵan materiallardı izertlewshilerdiń aldında turǵan áhmiyetli máselelerdiń biri strukturalıq-fazalıq hallardı izertlew bolıp tabıladı. Bunday izertlew jumıslarındaǵı tiykarǵı usıllardıń qatarına birinshi gezekte rentgenstrukturalıq tallaw kiredi (rentgen difraktometriyası, rentgenografiya). Bul usıl basqa difrakciyalıq usıllardıń ishinde (elektronografiya, neytronlardıń, gamma-kvantlardıń difrakciyası) bir qatar artıqmashlıqqa da, bir qatar kemshiliklerge de iye. Bul artıqmashlıqlar da, kemshilikler de rentgen nurlarınıń zatlar menen tásirlesiwleriniń tábiyatına baylanıslı kelip shıǵadı. Usınıń menen bir qatarda rentgen difraktometriyasınıń nátiyjeleriniń rentgen nurlarınıń zatlardıń atomları hám molekulları, olardıń keńisliktegi jaylasıwları menen tıǵız baylanıslı ekenligin atap ótemiz.

## **I bap. Rentgen nurlarınıń kristallıq denelerdegi difrakciyasınıń fizikalıq tiykarları**

### **1-§. Bir qatar ulıwmalıq maǵlıwmatlar**

Kristallar rentgenografiyanıń tiykarǵı máselesi rentgen nurlarınıń kristallıq denelerdegi difrakciyasınıń járdeminde strukturalıq tallawdıń tiykarǵı máselesin sheshiw bolıp tabıladı [4-10]. Rentgenografiyalıq usıllar menen kristallardıń atomlıq-kristallıq, substrukturasını anıqlaw máselesi menen rentgenstrukturalıq tallaw shıǵıllanadı. Al strukturalıq analizdiń fizikalıq tiykarı bolsa kristaldıń, amorf deneniń, suyıqlıqtıń, hám zattıń basqa da kondensaciyalanǵan hallarındaǵı zatlıq obektitiń (atomlar menen molekullardıń) mikrobólistiriliwiniń belgisiz bolǵan funkciyasın, olardıń jaylasıwındaǵı simmetriyanı, kristallıq pánjereniń parametrlerin, fazalıq quramdı hám soǵan usanǵan jaǵdaylardı eksperimentallıq jollar menen anıqlaw bolıp tabıladı. Kristallardaǵı rentgen nurlarınıń shashırawı mikrotarqalıwdıń Fure-analiziniń

dúziliwine alıp keledi. Keri matematikalıq operaciya bolǵan Fure-sintezdiń járdeminde izlenip atırǵan mikrotarqalıw funkciyasın tabıw múmkin.

Rentgenstrukturalıq analizdiń járdeminde tómendegilerdi anıqlaw múmkin:

a) kristaldıń atomlıq-molekulalıq qurılısınıń dáwirli sistemasın, onıń noqatlıq hám translyaciyalıq simmetriyasın, elementar qutıdaǵı atomlar menen molekulalardıń koordinataların;

b) kristallardaǵı defektlerdi - nol ólshemli – noqatlıq defektler hám olardıń koncentraciyası, bir ólshemli dislokaciya (súwreti hám koncentraciyası), dislokaciya átirapındaǵı kernewler maydanı defekti (dinamikalıq hám statikalıq), eki ólshemli defektler - jaylasıwlar defektleri menen kristallıq bloklar, egizler arasındaǵı shegaralar, jaylastırıw defektleriniń koncentraciyaları), úsh ólshemli defektlerdi (polikristallıq denelerdegi dánesheler arasındaǵı shegaralar, bul shegaralardıń sırtqı mexanikalıq tásirlerdegi jılısıwları hám basqalar);

v) amorf deneler menen suyıqlıqlardaǵı jaqın aralıqlarda orın alatuǵın tártipler;

g) gaz molekulalarınıń qurılısı;

d) zatlardıń fazalıq quramı.

Internet tarmaǵındaǵı Vikipediya universallıq enciklopediyasında rentgenstrukturalıq analiz haqqında tómendegidey maǵlıwmatlar keltirilgen:

Rentgenstrukturalıq analiz (rentgendifrakciyalıq analiz) – zatlardıń qurılısın izertlewdiń difrakciyalıq usıllarınıń biri. Bul usıldıń tiykarında rentgen nurlarınıń úsh ólshemli kristallıq pánjeredeǵı difrakciya qubılısı jatadı.

Kristallardaǵı rentgen nurlarınıń difrakciyası qubılısı Laue tárepinen ashıldı, bul qubılısqa teoriyalıq tiykardı Vulf-Breggler berdi (Vulf-Bregg shárti) [11]. Olar haqqında tómendegidey maǵlıwmatlardı beriw múmkin:

Ser Uilyam Genri Bregg (ingliz tilinde Sir William Henry Bragg; 1862-jılı 2-iyul kúni Uigton qalasında tuwılǵan hám 1942-jılı 12-mart kúni London qalasında qaytıw bolǵan Angliya fizigi, 1915-jılı kristallardı rentgen nurlarınıń járdeminde izertlewdegi xızmetleri ushın fizika boyınsha Nobel sıylıǵın alıwǵa miyasar boldı (balası U.L.Bregg penen birge) [24].



Ser Uilyam Lorens Bregg (ingliz tilinde Sir William Lawrence Bragg, 1980-jil 31-mart kúni tuwılǵan hám 1971-jılı 1-iyul kúni qaytis bolǵan avstraliyalı fizik, 1915-jılı kristallardı rentgen nurlarınıń járdeminde izertlewdegi xızmetleri ushın ákesi Uilyam Genri Bregg penen birge fizika boyınsha Nobel sıylıǵın alıwǵa miyasar boldı (Nobel sıylıǵın 25 jasında alǵan). Sıylıqtıń barlıq tariyxınlaǵı eń jas lauraet. 1937-1938 jılları Ullibritaniyanıń milliy fizikalıq laboratoriyasın, bunnan keyin Kembridjda Kavendish laboratoriyasın basqarǵan. Usı dáirdiń ishinde sol laboratoriyada 1953-jılı Dj.Uotson, F.Krik hám R.Franklin tárepinen DNK moleulalarınıń strukturası ashıldı [25].

Zatlardıń qurılısın izertlew usılı sıpatında rentgenstrukturalıq analiz Debay (Peter Debye) hám SHerer (Paul Scherrer) tárepinen islep shıǵıldı [12].

Usıl zatlardıń atomlıq qurılısın anıqlawǵa múmkinshilik beredi hám ol óz ishine elementar qutınıń simmetriyasınıń keńisliktegi toparın, onıń ólshemleri menen formasın, sonıń menen birge kristaldıń simmetriyasınıń toparın anıqlaydı.

Rentgenstrukturalıq analiz ápiwayılıǵı hám salıstırmalı arzańǵa túsetuǵınlıǵına baylanıslı usı kúnlerge shekem zatlardıń qurılısın anıqlaytuǵın eń kóp tarqalǵan usıl bolıp tabıladı.

Usıldıń (rentgenstrukturalıq analizdiń) túrleri:

Laue usılı monokristallar ushın qollanıladı. Izertlenetuǵın kristallıq úlgi rentgen nurlarınıń úzliksiz spektriniń jıńışke dástesi menen nurlandırıladı, dáste menen kristall arasındaqı baǵıt ózgermeydi. Difrakciyaǵa ushıraǵan nurlanıwdıń múyeshlik tarqalıwı ayırım difrakciyalıq daqlar túrine iye (lauegramma).

Rentgengoniometriya (rentgen nurlarınıń járdeminde kristallardıń qurılısına baylanıslı bolǵan múyeshlerdiń mánislerin ólshew).

Debay-SHerrer usılı polikristallardı hám olardıń aralaspaların izertlew ushın qollanıladı. Kristalǵa kelip túsiwshi monoxromat rentgen nurlarınıń baǵıtına salıstırǵanda úlgidegi kristallardıń tártipsiz (xaotikalıq) jaylasıwları difrakciyaǵa ushıraǵan nurlardı kósheri úlgige kelip túsiwshi rentgen nurları dástesi bolǵan kaossialıq konuslardıń semeystvosına aylandıradı. Olardıń rentgenogramalardıǵı (fotoplenkadaǵı yamasa debaegrammadaǵı) súwreti koncentrlık saqıynalar túrinde

payda bolıp, olardıń intensivlikleri izertlenip atırǵan zatlıń quramı haqqında maǵlıwmatlardı beredi.

## 2-§. Kristaldagı rentgen nurlarınıń shashırawı. Lauenıń interferenciyalıq funkciyası

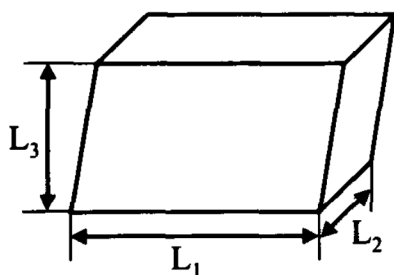
**Máseleniń qoyılıwı.** Atomlar gruppasındaǵı shashırawdıń nátiyjesinde interferenciyalıq effekt hám strukturalıq amplituda túsiniǵi kirgizilgenen keyin elementar qutilardıń jıynaǵı sıpatında qaralatuǵın kristaldagı shashıraw máselesine ótiw maqsetke muwapıq boladı. Bunday máseleni sheshiwdiń nátiyjesinde difrakciyalıq maksimumlardıń payda bolıwınıń shártlerin ǵárezsiz túrde alıw hám kerı keńisliktiń qásiyetleri haqqındaǵı maǵlıwmatlardıń tolıq sistemasın alıw múmkin.

Eń dáslepki boljaw kishi kristal tárepinen shashıratıw termini menen ańlatıladı. Onıń mánisi tómendegilerden ibarat:

kristal jetiliskeń dáwirli strukturaǵa iye boladı;

kristal kishi ólshemlerge iye, yaǵnıy jutıldı esapqa almawǵa boladı;

baqlaw noqatına shekemgi qashıqlıqqa salıstırǵanda kristal kishi ólshemlerge iye (tegis tolqın, uzaqtaǵı maydanda registraciyalaw).



1-súwret.

Geometriyalıq ólshemleri kishi bolǵan kristaldagı shashıraw máselesin sheshiw ushin paydalanılatuǵın sxema.

Analitikalıq formanı ápiwayılastırıw ushın kristaldı parallelepiped formasına iye hám onıń qabırǵaları pánjere kósherlerine parallel dep esaplaymız (1-súwret). Kristaldıń ólshemleri  $L_1 = M_1a$ ,  $L_2 = M_2b$ ,  $L_3 = M_3c$  bolsın. Bunday jaǵdayda elementar qutilardıń ulıwmalıq sanı  $M = M_1M_2M_3$  ke teń boladı. Kristaldagı qutilardıń numeraciyasın  $m$ ,  $n$ ,  $p$  pútin sanlarınıń járdeminde belgileymiz. Elementar qutı  $N$  dana

atomğa iye bolsın. Qutınıń koordinatalarınıń bası  $r_{mnp}$  ğa sáykes keledi dep esaplaymız. Qutınıń ishi  $j$ - atom  $r = r_{mnp} + r_j$  koordinatasına iye. Kristaldaǵı atomlardıń ulıwmalıq sanı  $N \times M = M_1 M_2 M_3$  shamasına teń boladı [4].

Indekslerdiń mánisleri

$$m = 0, 1, 2, \dots, M_1 - 1,$$

$$n = 0, 1, 2, \dots, M_2 - 1,$$

$$p = 0, 1, 2, \dots, M_3 - 1,$$

$$j = 1, 2, \dots, N.$$

Máseleni sheshiwdiń sxeması tómendegilerden ibarat:

Nomeri  $[[mnp]]$  bolǵan qutıdaǵı  $j$ -atom tárepinen  $\mathbf{k} - \mathbf{k}_0 = \mathbf{g}$  tolqın vektorı baǵıtında shashırǵan tolqınınıń amplitudasın joqarıda qabıl etilgen belgilewler hám kristaldıń koordinatalar bası arasındaǵı fazalar ayırmasın esapqa alıw menen jazıw múmkin:

$$E_{mnp,j} = E_e f_i e^{i2\pi r \mathbf{g}} = E_e e^{i2\pi r_{mnp} \mathbf{g}} f_i e^{i2\pi r_j \mathbf{g}}.$$

Bunnan keyin kristaldaǵı barlıq atomlar hám tórt indeks boyınsha summalaw kerek boladı:

$$E_k = E_e \sum_{m=0}^{M_1-1} \sum_{n=0}^{M_2-1} \sum_{p=0}^{M_3-1} \sum_{j=0}^N e^{i2\pi r_{mnp} \mathbf{g}} f_i e^{i2\pi r_j \mathbf{g}}.$$

Summalaw belgilerin ayırǵannan keyin mına ańlatpaǵa iye bolamız:

$$E_k = E_e \sum_{m=0}^{M_1-1} \sum_{n=0}^{M_2-1} \sum_{p=0}^{M_3-1} e^{i2\pi r_{mnp} \mathbf{g}} \sum_{j=0}^N f_i e^{i2\pi r_j \mathbf{g}}.$$

Sońǵı summanıń ("j" boyınsha alınatuǵın summanıń) strukturalıq amplituda ushın joqarıda alınǵan ańlatpaǵa sáykes keletuǵınlıǵı kórinip tur. Biraq  $\mathbf{g}$  vektorınıń kerı keńisliktegi noqattıń koordinatası sıpatında anıqlanǵan ekenligin este saqlaw kerek. Al  $\mathbf{g}$  nıń kerı pánjereniń radius-vektorı bolıwı kerek degen shártti máseleni sheshiwdiń tap usı etapında qoymaymız. Bizge házirshe "difrakciya teńlemesi belgili emes".

Biz endi qısqasha túrdegi

$$E_k = E_e \cdot \Phi \cdot F$$

ańlatpasın jazamız. Bul ańlatpadaǵı

$$\Phi = \sum_{m=0}^{M_1-1} \sum_{n=0}^{M_2-1} \sum_{p=0}^{M_3-1} e^{i2\pi r_{mnp} \mathbf{g}}$$

funkciyasın Lauenin interferenciyalıq funkciyası dep ataymız.

Ekspontalardıń kórsetkishleriniń skalyar kóbeymeleri jazıladı. Vektorlar mınaday túrge iye boladı:

$$\mathbf{g} = \mu \mathbf{a}^* + \eta \mathbf{b}^* + \nu \mathbf{c}^*,$$

$$\mathbf{r}_{mnp} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}.$$

Bul ańlatpadağı  $\mu, \eta, \nu$  shamaları pütün hám bólshek mánislerge iye bola aladı. Skalyar kóbeymeler ushın mına ańlatpalardı alamız:

$$g r_{mnp} = m\mu + n\eta + p\nu,$$

$$g r_j = x_j\mu + y_j\eta + z_j\nu.$$

Nátiyjede

$$F(\mu\eta\nu) = \sum_{j=0}^N f_j e^{[i2\pi(x_j\mu + y_j\eta + z_j\nu)]},$$

$$\Phi = \sum_{m=0}^{M_1-1} \sum_{n=0}^{M_2-1} \sum_{p=0}^{M_3-1} e^{[i2\pi(m\mu + n\eta + p\nu)]}$$

ańlatpalarına iye bolamız. Intensivlikke ótiwde

$$J_k = \frac{c}{8\pi} |E_k|^2 = \frac{c}{8\pi} E_e^2 |F(\mu\eta\nu)|^2 |\Phi(\mu\eta\nu)|^2$$

yamasa

$$J_k = J_e |F(\mu\eta\nu)|^2 |\Phi(\mu\eta\nu)|^2$$

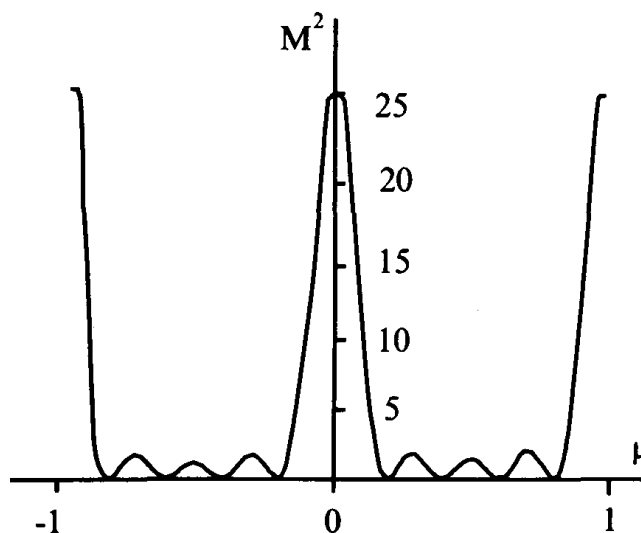
formulasın alamız. Bul formuladağı

$$|\Phi(\mu\eta\nu)|^2 = \Phi(\mu\eta\nu)\Phi^*(\mu\eta\nu)$$

kóbeymesi intensivliktiń interferenciyalıq faktori dep ataladı.  $\mu, \eta, \nu$  indeksleri ózgergende bul faktordıń ózgerisleri shashırawdıń saylap alıwshılığın, yaғnıy interferenciya maksimumlarınıń payda bolıw shártlerin anıqlaydı.

2-súwret.

Bir ólshemli tarqalıwdağı  
interferenciyalıq funkciyanıń  
maksimumları menen  
minimumları.



Indeksler boyınsha

$$\Phi = \sum_{m=0}^{M_1-1} e^{(i2\pi m\mu)} \sum_{n=0}^{M_2-1} e^{(i2\pi n\eta)} \sum_{p=0}^{M_3-1} e^{(i2\pi p\nu)}$$

túrindegi úshlik summanı kóbeytiwshilerine bóliwdiń múmkin ekenligi kórinip tur.

YAǵnıy

$$|\Phi|^2 = |\Phi_1(\mu)|^2 \cdot |\Phi_2(\eta)|^2 \cdot |\Phi_3(p)|^2.$$

Bir ólshemli fragmentti

$$\Phi_1(\mu) = \sum_{m=0}^{M_1-1} e^{i2\pi m\mu} = 1 + e^{i2\pi\mu} + e^{2 \cdot i2\pi\mu} + \dots + e^{(M_1-1)i2\pi\mu}$$

túrindegi progressiya sıpatında qaraymız. Bunday progressiyanıń summası

$$\Phi_1(\mu) = \frac{e^{M_1 i2\pi\mu} - 1}{e^{i2\pi\mu} - 1}$$

formulasınıń járdeminde esaplanadı. Endi interferenciyalıq faktordı sinus funkciyasınıń kvadratı túrinde alamız:

$$\Phi_1 \cdot \Phi_1^* = \frac{\sin^2(\pi M_1 \mu)}{\sin^2(\pi \mu)}.$$

Interferenciyalıq funkciyanıń qásiyetleri 2-súwrette ayqınlasadı. Bul shamanıń barlıq

$$\mu = \frac{1}{M_1}, \frac{2}{M_1}, \dots, \frac{M_1 - 1}{M_1}$$

mánislerinde nolge aylanatuǵınlığı kórinip tur.  $\mu = 1, 2, 3, \dots$  pútin mánislerinde nolge alımı da, bólimi de aylanadı hám nátiyjede anıq emeslik payda boladı.

Lopital qaǵıydası boyınsha differenciallaǵannan keyin  $\mu$  diń qálegen pútin mánisi ushın

$$\frac{\sin^2(\pi M_1 \mu)}{\sin^2(\pi \mu)} = M_1^2$$

añlatpasın alamız.

Demek bir ólshemli tarqalıw súwrette kórsetilgenindey bas maksimumlarğa, noller sistemasına hám qosımsha maksimumlarğa iye boladı eken. Maksimumlardıń biyiklikleriniń qatnasları: bas maksimum - 100, birinshi qosımsha - 4.5, ekinshi qosımsha - 1.6 hám tağı basqalar. Funkciyanıń nolleri  $1/M$  parametriniń járdeminde anıqlanadı. Basqa sóz benen aytqanda maksimumnıń keńligi usı kósher bağıtındağı elementar qutılar sanına ğárezli eken. Úsh ólshemli táriyiplegende bas maksimumlardıń orınları  $\mu = h, \eta = k, \nu = l$  shártleriniń orınlanıwın talap etedi.

$$|\Phi(hkl)|^2 = M_1^2 \cdot M_2^2 \cdot M_3^2.$$

Bunday jaǵdayda ayqın difrakciyalıq maksimumnıń intensivligi ushın ulıwmalıq añlatpa

$$J_k(hkl) = J_e M^2 |F(hkl)|^2$$

túrine iye boladı. Nátiyjede biz zárúrli bolǵan nátiyjege iye bolamız: haqıyqatında biz qarap shıqqan jaǵdayda  $h, k, l$  shamaları pútin mánislerge iye bolǵanda  $\mathbf{k} - \mathbf{k}_0 = \mathbf{g}(hkl)$  teńlemesine qayıp kelemiz. Bul jaǵdayda tolqınlıq sanlar keńisliginde bas maksimumlar ushın noqatlar sisteması payda boladı. Bul noqatlar sisteması keri pánjereni payda etedi.

### 3-§. Keri pánjereniń túyinleriniń forması hám ólshemleri

Biz qarap atırǵan kristall ushın interferenciyalıq funkciyanıń tarqalıwı sxema túrinde 3-súwrette keltirilgen. Keri pánjereniń hár bir koordinata kósheri bağıtındağı túyinlerdiń (bas maksimumlardıń) sızıqlı ólshemleri kristaldıń usı bağıttağı ólshemli (qutılar sanı) menen anıqlanadı. 2-súwrette kórinip turǵanıday, *sinc* funkciyanıń grafiginde minimumnan minimumǵa shekemgi qashıqlıq salıstırmalı birliklerde  $2/M_1$  ge teń. Keri keńisliktiń masshtabında  $\delta x^* = a \cdot 2/M_1$ . Bunday jaǵdayda keri pánjereniń túyiniń kólemi

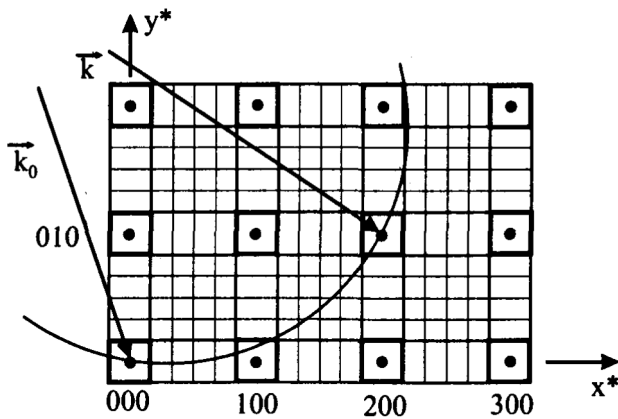
$$V^* = 8a^*b^*c^*/(M_1M_2M_3)$$

shamasına teń hám difrakciya processinde qatnasatuǵın kristallıq obekttiń kólemi  $V=abc(M_1M_2M_3)$  menen kerı qatnas arqalı baylanısqan.

Sanlıq bahalawdı keltiremiz (san mánisin anıqlaymız). Kub tárizli formaǵa iye kristallıq úlgige iyemiz dep esaplayıq. Kubtıń qabırǵasınıń uzınlıǵı  $L_1 = 0.1 \text{ mm} = 10^{-2} \text{ sm}$  bolsın. Elementar qutı ushın  $a = 10 \text{ \AA} = 10^{-7} \text{ sm}$ ; qutılar sanı  $M_1 = L_1/a = 10^5$ ; kerı pánjere tuyininiń keńligi  $\delta x^* = 2 \cdot 10^{-6} \text{ 1/\AA}$ ; mıs anodtıń  $K\alpha$ -nurlanıwı paydalanılatuǵın bolsın  $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$ ,  $|k| = 0.65 \text{ 1/\AA}$ . 3-sızılma boyınsha  $k$  vektorı baǵıtındaǵı, difrakciyalıq maksimumnıń keńligi

$$\delta\theta = \delta x^*/|k| = 3,08 \cdot 10^{-6} \text{ radian} \approx 0,2 \text{ múyeshlik sekunda}$$

shamasına teń boladı.



3-súwret.

Kerı pánjereniń kesimindegi interferenciyalıq funkciyanıń tarqalıwı: noqatlar bas maksimumlardıń poziciyalarına, sızıqlar "funkciyanıń nollerine" sáykes keledi.

Biz *sinc* funkciyası haqqında qısqaşa maǵlıwmatlardı keltiremiz. Matematikada anıqlama boyınsha

$$\text{sinc}(x) = \begin{cases} \frac{\sin(\pi x)}{\pi x}; & x \neq 0. \\ 0; & x = 0. \end{cases}$$

Fraunhofer difrakciyasınıń ulıwmalıq principlerine sáykes interferenciyalıq funkciyalardıń qásiyetlerin izbe-iz tallaw kerı pánjereniń qutısınıń ishindegi intensivliktiń tarqalıwınıń "substrukturasını" tolıq táriyiplewdi támiyinleydi. Fizikalıq optikanıń terminlerinde  $F$  funkciyası kerı keńislikte anıqlanǵan hám hár bir túyin (maksimum) kristallıq obekttiń sırtqı formasınıń fure-obrazı sıpatında táriyiplenedi. Usı jerde túsiniklerdiń bóliniwine jáne de bir ret itibar beremiz:

1) kerı keńisliktiń metrikası birinshi gezekte formal túrdegi matematikalıq problema bolıp tabıladı;

2) kerı pánjere hám interferenciyalıq funkciyanıń túri – bul ayqın fizikalıq eksperimenttiń obrazlıq kórinisi bolıp tabıladı; bul jerde konfiguraciyaǵa difrakciyaǵa qatnasatuǵın kristaldıń ólshemleri, tolqın uzınlıǵı, eksperimentallıq sxemanıń geometriyası tásir etedi.

Tap usınday kóz-qarasta keń tarqalǵan "kerı pánjere "F<sup>2</sup>-dene" sıpatında" termininiń mánisi túsinikli boladı. Interferenciyalıq faktordıń tarqalıwı ayqın eksperimenttegi difrakciyalıq maksimumnıń profili menen piklik intensivligine tiykargı shártlerdi qoyadı. Joqarıda keltirilgen mısalda reflektiń jayılwı dım kishi edi. Biraq fizikalıq materialtanıwdıń ózine tán situaciyalarında (nanokristallar, kristallıq bettegi eki ólshemli qatlamlar, hár qıylı dispersiyalıq quymalar, turaqlı magnitlerdiń strukturaları hám basqalar) difrakciyalıq eksperimentlerdiń ózgeshelikleri kerı pánjereniń ayqın anizotroplıq forması tárepinen qadaǵalanadı.

#### **4-§. Fure qatarına jayıw hám strukturalıq analizdiń principi**

**Elektronlıq tıǵızlıqtıń úsh ólshemli qatarı.** Kristallardıń atomlıq strukturasını anıqlaw (rasshifrovkası) kristaldı elektronlıq tıǵızlıqtıń úzliksiz túrdegi dáwirli tarqalıwı dep qarawǵa tiykarlanadı. Atom yadroların esapqa alıwdı talap etpeytuǵın bul fizikalıq model elektromagnit tolqınlarınıń qattı denelerdegi serpimli shashırawınıń haqıyqıy xarakteristikalarına tiykarlangan.

Máseleni qoyıwdı strukturalıq amplitudanıń

$$F(\mathbf{g}) = \int_V \rho(\mathbf{r}) e^{i2\pi(\mathbf{r}\mathbf{g})} dV$$

túrindegi qısqasha jazılıwınan baslaymız. Bul ańlatpa tegis tolqınınıń shashırawı haqqındaǵı (Fraunhofer jaqınlasıwındaǵı) optikalıq másele ushın arnalǵan ańlatpanı atom hám molekula ushın paydalanıwǵa boladı. Biz qarap atırǵan jaǵdayda shashıratıw subekti kristaldıń elementar qutısı bolıp esaplanadı.



Faza ushın eksponentanıń kórsetkishindegi skalyar kóbeyme túrindegi ańlatpaǵa ótemiz:

$$\mathbf{g} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*,$$

$$\mathbf{r} = x\mathbf{a} + y\mathbf{b} + z\mathbf{c}.$$

Bul ańlatpalarda  $h, k, l$  arqalı berilgen shaǵılısıw ushın pútin sanlar belgilengen.  $x, u, z$  koordinataları 0 den 1 ge shekemgi mánislerdi qabıl etedi.

$$x = \frac{x_1}{|\mathbf{a}|}, \quad y = \frac{y_1}{|\mathbf{b}|}, \quad z = \frac{z_1}{|\mathbf{c}|}$$

ańlatpasında  $x_1, y_1, z_1$  shamaları arqalı noqattıń angstremlerdegi koordinataları belgilengen. Usı aytilǵanlardı esapqa alıp mına ańlatpanı jazıw múmkin:

$$F(hkl) = \int_0^a \int_0^b \int_0^c \rho(x, y, z) e^{i2\pi(hx+ky+lz)} dx_1 dy_1 dz_1 =$$

$$= V_0 \int_0^a \int_0^b \int_0^c \rho(x, y, z) e^{i2\pi(hx+ky+lz)} dx dy dz.$$

Endi  $\rho(xyz)$  funkciyasınıń qásiyetlerin keltirip shıǵaramız. Elektronlıq tıǵızlıqtıń tarqalıwı Dirixle shártlerin qanaatlandıradı: funkciya úzliksiz, barlıq úsh ólshem boyınsha dáwirli, hár bir  $x, y, z$  noqatlarında tuwındıǵa iye. Usıǵan sáykes elektronlıq tıǵızlıq funkciyasın Fure qatarına jayıw múmkin degen sóz:

$$\rho(xyz) = \sum_{-\infty}^{\infty} \sum_{-\infty}^{\infty} \sum_{-\infty}^{\infty} K_{pqr} e^{-i2\pi(px+qy+rz)}.$$

Biz ápiwayılıq ushın Fure qatarınıń eksponenciallıq formasın jazdıq. Bul ańlatpada  $K_{pqr} = A_{pqr} - iB_{pqr}$  coefficientleri tek  $p, q, r$  shamalarınan ǵárezli bolǵan kompleksli shamalar bolıp tabıladı.

Bir ólshemli jaǵday ushın matematikadan maǵlıwmatlar:

1. Fure qatarın ádette bılayınsha jazadı:

$$f(x) = a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left[ a_n \cos\left(2\pi n \frac{x}{a}\right) + b_n \sin\left(2\pi n \frac{x}{a}\right) \right].$$

2. Usı qatardıń oraylıq simmetriyaǵa iye bolǵan jaǵdaylar ushın jazılıwı:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \left[ A_n \cos\left(2\pi n \frac{x}{a}\right) + B_n \sin\left(2\pi n \frac{x}{a}\right) \right]$$

3. Jazıwdıń "kosinuslıq" forması:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \cos\left(2\pi n \frac{x}{a} - \varphi_n\right),$$

$$f(x) = C_0 + \sum_{n=1}^{\infty} 2C_n \cos\left(2\pi n \frac{x}{a} - \varphi_n\right).$$

4. Jazılıwdıń eksponenciallıq forması:

$$f(x) = \sum_{-\infty}^{\infty} K_n e^{-i2\pi n \frac{x}{a}}.$$

Jazılıwdıń alternativlik formalarındaǵı koefficientler arasındaǵı baylanıslar:

$$K_n = C_n e^{-i\varphi_n} = A_n + iB_n,$$

$$A_n = A_{-n} = \frac{a_n}{2},$$

$$B_n = B_{-n} = \frac{b_n}{2},$$

$$K_n = \frac{a_n}{2} + i \frac{b_n}{2}.$$

Bunnan keyin Fure koefficientleri haqqındaǵı máseleni sheshiwdiń tómendegidey standart logikalıq sxeması paydalanıladı:

1.  $\rho(xyz)$  qatarın  $F(hkl)$  integrallıq formada kórsetemiz:

$$F(hkl) = \sum_p \sum_q \sum_r \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 V_0 K_{pqr} e^{-i2\pi(px+qy+rz)} e^{i2\pi(hx+ky+lz)} dx dy dz.$$

Bul ańlatpada  $V_0$  arqalı elementar qutınıń kólemi belgilengen.

2. Endi

$$\begin{aligned} \int_0^1 e^{i2\pi[(h-p)x]} dx &= \int_0^1 \cos[2\pi(h-p)x] dx + i \int_0^1 \sin[2\pi(h-p)x] dx = \\ &= \frac{\sin[2\pi(h-p)x]}{2\pi(h-p)} - i \left( \frac{-\cos[2\pi(h-p)x]}{2\pi(h-p)x} + \frac{1}{2\pi(h-p)x} \right). \end{aligned}$$

túrindegi integraldı túrlendiriwdi qaraymız.  $h$  penen  $p$  pútin mánislerge iye bolǵanda integral báhá nolge teń.  $h = p$  bolǵan jaǵdayda bólshektiń alımı da, bólimi de nolge teń boladı hám payda bolǵan anıqsızlıq  $\frac{\sin(0)}{0} = 1$  túrinde ashıladı. Bul qatardıń tolıq formasında barqulla  $F(hkl) = V_0 K_{hkl}$  ekenligin, yaǵnıy úshlik summadan tek  $p = h, q = k, r = l$  shártin qanaatlandıratuǵın tek bir aǵza qaladı.

Demek qatardıń koefficienti:

$$K_{hkl} = \frac{F(hkl)}{V_0}.$$

Qatardıń nollık aǵzası ushın

$$K_{000} = A_{000} = \frac{F(000)}{V_0} = \bar{\rho}(x, y, z),$$

yaǵnıy jayıwdıń dáwiri boyınsha funkciyanıń ortasha mánisine teń. Tuwrı kelip túsiwshi nurdıń baǵıtındaǵı strukturalıq amplitudanı jazıwdıń basqa da túri bar:

$$F(000) = V_0 \iiint \rho(xyz) dx dy dz = \sum_{j=1}^N Z_j.$$

Nátiyjede eń aqırǵı formulanı alamız:

$$\rho(xyz) = \frac{1}{V_0} \sum_{h=-\infty}^{\infty} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} F(hkl) e^{i2\pi(hx+ky+lz)}.$$

$[\rho(x, y, z)] = \frac{1}{\text{sm}^3}$  ólshem birligine itibar beremiz. Usıǵan baylanıslı qatardıń alternativlik formaların paydalanıw aqılǵa muwapıq keledi. Usınday maqsette

$$F(hkl) = |F(hkl)| e^{i\alpha_{hkl}}$$

ańlatpasınan paydalanamız. Bul ańlatpada

$$|F(hkl)| = \sqrt{F_A^2(hkl) + F_B^2(hkl)},$$

$$\text{tg } \alpha_{hkl} = \frac{F_B(hkl)}{F_A(hkl)}.$$

Bul ańlatpalarda

$$\rho(XYZ) = \frac{1}{V_0} \sum_{h=-\infty}^{\infty} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} F(hkl) \cos[2\pi(hx + ky + lz) - \alpha_{hkl}]. \quad (1)$$

$$\rho(XYZ) = \frac{1}{V_0} \sum_{h=-\infty}^{\infty} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} F_A(hkl) \cos[2\pi(hx + ky + lz)] - iF_B \sin[2\pi(hx + ky + lz)]. \quad (2)$$

**Fure tolqınlarınń semeystvosı hám kristaldıń kerı pánjeresi.** Kerı pánjereniń simmetriya orayı. Alınǵan analitikalıq ańlatpalardı kerı pánjereni hám difrakciyalıq eksperimenttiń ózgesheliklerin fizikalıq jaqtan traktovkalaw ushın júdá paydalı.

Birinshi gezekte kompleksli koefficientleri bar qatarǵa haqıyqıy shama – elektronlıq tıǵızlıqtıń tarqalıwı  $\rho(xyz)$  jayılganlıǵına ayrıqsha itibar beremiz. Bul jaǵday tek mınaday shárt orınlanganda ǵana orın aladı: qatardıń hár bir aǵzasına summaǵa

kiretuğın qatardıń kompleksli túyinles aǵzası tabıladı hám bunday jaǵdayda qatardıń summası haqıyqıy shamaǵa aylanadı. Usınday jollar menen Fure koefficientleri arasındaǵı baylanıs ornatıladı:

$$F(\bar{h}\bar{k}\bar{l}) = F^*(hkl).$$

Demek

$$|F(\bar{h}\bar{k}\bar{l})| = |F(hkl)|,$$

$$\alpha(\bar{h}\bar{k}\bar{l}) = -\alpha(hkl)$$

teńliklerine iye bolamız. Bunnan kerı pánjereniń haqıyqıy obrazınıń yamasa F2-deneniń (000) koordinata basında inversiya orayına iye bolatuǵınlıǵı kelip shıǵadı. Basqa sóz benen aytqanda pánjereniń eki túyini  $(h, k, l)$  hám  $(\bar{h}, \bar{k}, \bar{l})$  birdey salmaqqa iye boladı degen sóz. Difrakciyaǵa ushıraǵan tolqınıń intensivliginiń  $F^2$  shamasına proporcional ekenligin eske túsiremiz (yaǵnıy  $I \sim F^2$ ). Demek rentgenogrammadaǵı difrakciyalıq maksimumlardıń jaylasıwlarında hám intensivliklerinde inversiya orayınıń bar ekenligi tabılsa da, bul jaǵday kristaldıń simmetriyasınıń orayǵa qarata simmetriyalı noqatlıq gruppaaǵa jatatuǵınlıǵın ańǵartpaydı. Mısalı, noqatlıq gruppası 2 bolǵan kristall ayırıqsha kósher baǵıtında súwretke alıńanda rentgenogrammada refleksler 2-tártipli simmetriya kósheriniń bar bolıwına sáykes jaylasadı. Eger kristaldı bursaǵ hám 2-tártipli simmetriya kósherin kelip túsiwshi rentgen nurına perpendikulyar etip jaylastırsaq, onda rentgenogrammadaǵı refdekslerdiń jaylasıwları aynalıq shaǵılısıw simmetriya tegisliginiń bar ekenligin kórsetedi. Bul "m" simmetriya 2-tártipli simmetriya kósherin kerı pánjerede barlıq waqıtta qatnasatuǵın simmetriya orayına kóbeytiwdiń saldarınan alınadı. Bul mısaldan 2 gruppasınıń kristalları da, m gruppasınıń kristalları da simmetriyası boyınsha  $2/m$  gruppasınıń rentgenogrammasında rentgenogrammalardı beretuǵınlıǵı kelip shıǵadı. Bul fenomendi ádette "Fridel nızamı" dep ataydı.

Demek lauegrammalardı túsiriw kristaldıń singoniyası menen noqatlıq gruppasın "inversiya orayı dálligine shekemgi dállikte" anıqlaydı eken. Usıǵan baylanıslı lauegrammalardaǵı daqlardıń jaylasıwlarındaǵı simmetriyanı belgilew ushın ádebiyatta "Laue klassı" termini paydalanıladı.

**Difrakciyanıń kerı máselesi haqqında.** Fure sintezi.  $(h, k, l)$  hám  $(\bar{h}, \bar{k}, \bar{l})$  túyinleri elektronlıq tıǵızlıqtıń sinusoidallıq tolqınıń obrazı bolıp tabıladı. Eger (1)-formulanı paydalanatuǵın bolsaq, onda mına ańlatpanı jaza alamız:

$$\rho(XYZ) = \frac{1}{V_0} \sum_{h=-\infty}^{\infty} \sum_{k=-\infty}^{\infty} F(hk0) \cos[2\pi(hx + ky) - \alpha_{hk0}] + \\ + \frac{1}{V_0} \sum_{h=-\infty}^{\infty} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} |F(hkl)| \cos[2\pi(hx + ky + lz) - \alpha_{hkl}].$$

Qatardıń hár bir aǵzası argument  $hx + ky + lz = const$  argumentiniń anıq bir mánisine sáykes keledi. Eger ayqın bolǵan  $(xyz)$  noqatı ushın qatarǵa jayıwdı qaraytuǵın bolsaq, onda alınǵan ańlatpa kristaldaǵı  $(hkl)$  túyinlik tegisligine parallel hám  $(xyz)$  noqatı arqalı ótiwshi tegislikti táriyipleydi. Bunday jaǵdayda  $hx + ky + lz = const$  bolǵan jaǵdayda  $\rho = const$  bolǵan elektronlıq tıǵızlıqtıń mánisiniń anıqlanǵanlıǵın esapqa alıw kerek. Demek qatardıń bir aǵzasına sáykes keliwshi tarqalıw elektronlıq tıǵızlıqtıń tegis, qozǵalmaytuǵın (muzlatılǵan) tolqını eken: tolqınıń orientaciyası  $(hkl)$  tegisligine túsirilgen normal vektorı menen berilgen; sinusoidanıń dáwiri  $d/n$  nen shaǵılısıw tártibi boyınsha anıqlanadı.

Bunnan keyin difrakciyalıq optikanıń belgili nátiyjesin itibarǵa alamız: shashıratıwshı oraylardıń sinusoidalıq pánjeresindegi difrakciyada tek 0, +1, -1 tártipindegi maksimumlar ǵana boladı. Bunday jaǵdayda tábiyiy túrde  $(hkl)$  hám  $(-h-k-l)$  túyinleriniń hár bir jubı tegis tolqınlardıń sinusoidalıq tarqalıwınıń birinshi (+,-) tártipli difrakciyalıq maksimumları dep qaraladı. Demek kerı pánjereniń hár bir túyini (túyinler jubı) Fureniń úsh ólshemli qatarınıń bir garmonikasına sáykes keledi eken.

Solay etip kerı pánjere berilgen kristaldıń difrakciyalıq maksimumlarınıń jıynaǵı hám Fure tolqınlarınıń semeystvosı haqqında maǵlıwmatlardı beredi degen sóz. Fure tolqınların summalaw jolı menen shashıratıwshı materiyanıń (elektronlıq tıǵızlıqtıń) tarqalıwı haqqındaǵı kórgizbeli kóz-qaraslarǵa iye bola alamız. Bunday jaǵdayda túyinler sanın sheklew (qatar aǵzalarınıń sanın sheklew) kózge kórinetuǵın jaqtılıq optikasındaǵı súwret payda bolǵanda aperturanı kishireytken menen birdey kúshke iye.

Joqarıda keltirilgen tallawlarda belgisiz kristallıq strukturanı anıqlaw proceduraları jóninde ápiwayılasqan pikirlerdiń payda bolıwı múmkin. Haqıyqatında da elementar qutınıń berilgen (xyz) noqatındaǵı elektronlıq tıǵızlıqtıń haqıyqıy mánisin tabıw ushın eksperimentte "tek" qatardıń koefficientleriniń (strukturalıq amplitudalardıń) jetkilikli muǵdarınıń mánislerin anıqlap, bunnan keyin zárúrli bolǵan summalawdı ámelge asırıw kerek boladı. Bunnan keyin tap usınday summalaw elementar qutınıń ishindegi noqatlardıń tolıq seriyası ushın júrgiziledi. Alınǵan nátiyjeler qutıdaǵı elektronlıq tıǵızlıqtıń izosızıqların (tuyıq betlerdi) sıızıwǵa múmkinshilik beredi. Bunday betlerdiń orayları qutıdaǵı atomlardıń oraylarınıń poziciyalarına sáykes keliwi kerek.

Ámelde tap usınday jol (Fure sintezi) sezilerliktey dárejede quramalasadı. Sebebi joqarıda ayılǵanıday, strukturalıq amplituda ushın fazanı anıqlaw máselesi kesent bolıp tabıladı. Usıǵan baylanıslı strukturalıq máseleni tolıq sheshiw ushın quramalı eksperimentallıq hám esaplaw sxemaları islep shıǵılǵan. Biz endi eksperimentte anıqlanıwı múmkin bolǵan parametr – strukturalıq amplitudanıń moduliniń kvadratın paydalanıwshı analitikalıq sxemada toqtap ótemiz.

## 5-§. Patterson sintezi

Atomlar aralıq vektorlar keńisligi.  $F^2$  strukturalıq faktor ushın jazılǵan

$$|F(\mathbf{g})|^2 = F(\mathbf{g})F^*(\mathbf{g}) = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N f_n f_m e^{i2\pi[(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m)\mathbf{g}]} \quad (3)$$

ańlatpanı tolıǵıraq qarap ótemiz. Summalaw "m", "n" shamalarından gárezsiz. Bul ańlatpada strukturalıq faktordıń koordinatalardan emes, al atomlar aralıq vektorlardan gárezligi berilgen ekenligin ańǵaramız. Atomlar aralıq vektorlardıń qurawshıların arnawlı keńislikte belgileymiz

$$\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m = \mathbf{a}u_{nm} + \mathbf{b}v_{nm} + \mathbf{c}\omega_{nm} = \mathbf{a}u_j + \mathbf{b}v_j + \mathbf{c}\omega_j.$$

Bunday jaǵdayda strukturalıq faktordıń moduliniń kvadratın bilayınsha jazıwǵa boladı:

$$|F(hkl)|^2 = \sum_{j=1}^M q_j e^{i2\pi(hu_j + kv_j + l\omega_j)}.$$

Solay etip atomlar aralıq vektorlar keńisligi kirgizildi. Bul keńislikte  $u, v, w$  noqatlarında jaylasqan "túyinler" bar hám olar  $q_i = f_n f_m$  salmaǵına iye boladı. Atomlar aralıq vektorlar ulıwmalıq koordinatalar basınan túsiriledi hám olardıń sanı  $M = N^2$  teńliginiń járdeminde anıqlanadı. Barlıq túyinlerdiń koordinata basında atomlar aralıq vektordıń nollik moduline teń keletuǵınlıǵın esapqa alamız hám  $M = N^2 - N$  teńligine iye bolamız. 4-a-súwrette úsh noqattan turatuǵın predmet ushın bazı bir formallıq dúzilis kórsetilgen. Nátiyjeniń koordinata basında inversiya orayına iye noqatlardıń motivi bolatuǵınlıǵı kórinip tur. Bunnan strukturalıq faktor ushın ańlatpada tek haqıyqıy qosılıwshılardıń qalatuǵınlıǵı kórinip tur

$$|F(hkl)|^2 = \sum_{j=1}^M q_i \cos[i2\pi(hu_j + kv_j + l\omega_j)].$$

Jazıwdıń integrallıq formasına ótiw ushın strukturalıq faktor menen Fure túrlendiriwi menen baylanıslı bolǵan  $P(uvw)$  funkciyası kirgiziledi. Bunnan keyin mınanı jazıw múmkin:

$$|F(hkl)|^2 = \int_{V_0} P(uvw) e^{i2\pi(hu+kv+l\omega)} dV_{uvw}.$$

$P(uvw)$  funkciyası menen  $\rho(xyz)$  funkciyası arasındaqı baylanıstı tabamız:

$$F(hkl)F^*(hkl) = \int_{V_0} \rho(x'y'z') e^{i2\pi(hx'+ky'+lz')} dV' \int_{V_0} \rho(xyz) e^{i2\pi(hx+ky+lz)} dV$$

hám  $x' = x + u, y' = y + v, z' = z + w$  belgilewlerinen keyin

$$|F(hkl)|^2 = \int_{V_0} \left\{ \int_{V_0} \rho(xyz)\rho(x+u, y+v, z+w) dV \right\} e^{i2\pi(hu+kv+l\omega)} dV_{uvw}$$

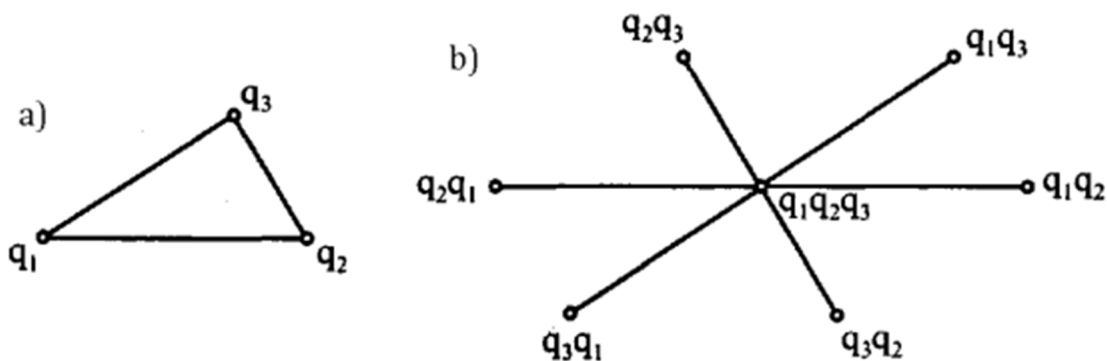
ańlatpasın alamız. Bul jerde mınaday integrallaw izbe-izligi saylap alıngan: vektor qurawshıları menen barlıq qutı boyınsha jılıstırıladı, al bunnan keyin vektordıń parametrleri ózgeriledi. Eń aqırǵı jazıw

$$P(uvw) = \int_{V_0} \rho(xyz)\rho(x+u, y+v, z+w) dV$$

túrine iye boladı.

Bul atomlar aralıq funkciyanıń turaqlı kóbeytiwshi dálligindegi anıqlaması bolıp tabıladı.  $\rho(xyz)$  hám  $\rho(x + u, y + v, z + \omega)$  funkciyaları vektordıń ushındaǵı elektronlıq tıǵızlıq bolıp tabıladı.

$P(uvw)$  shaması Patterson funkciyası dep ataladı hám matematikadaǵı avtokorrelyaciya funkciyası terminine sáykes keledi (4-súwret).



4-súwret. a) – úsh noqattan turatuǵın predmet;  $q_j$  arqalı noqatlardıń jarqınlıǵı belgilengen; b) – Patterson funkciyasınıń konfiguraciyası;  $q_jq_k$  arqalı usı jaǵdaydaǵı noqatlardıń jarqınlıǵı belgilengen.

Atomlar aralıq vektorlar funkciyasınıń ańlatpasın tap usınday etip keltirip shıǵarıw  $\Phi$  Fure-túrlendiriwi arqalı óz-ara baylanıstıń formallıq analogiyasın sáwlelendiredi:

$$F \xrightarrow{\Phi} \rho(xyz),$$

$$|F|^2 \xrightarrow{\Phi} P(uvw).$$

Bunday jaǵdayda analogiya boyınsha  $P(uvw)$  funkciyasın qatarǵa jayıw múmkin hám túrlendiriwlerden keyin mınaday ańlatpa alınadı

$$P(uvw) = \frac{1}{V_0} \sum_{h=-\infty}^{\infty} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} |F(hkl)|^2 e^{-i2\pi(hu+kv+l\omega)}.$$

Bul qatar fazalıq konstantalarsız tek kosinuslar boyınsha summalawdı óz ishine aladı. Solay etip kvadratlıq detektorlawǵa baylanıslı baqlanatuǵın difrakciyalıq súwret predmettiń fure-túrlendiriwi emes, al predmettiń avtokorrelyaciyasınıń bazı bir funkciyasına sáykes keledi eken. Eger golografiya terminologiyasınan paydalansaq, onda kristaldıń strukturasınıń difrakciyalıq súwretinen payda etiw atomlıq aralıq



vektorlar keńisligindeki predmettiń quramalasqan obrazı sıpatında avtokorrelyaciya funkciyasınıń tarqalıwın beredi.

Bul tarqalıwdıń ózgesheliklerin atap ótiw múmkin:

- 1) funksiya haqıyqıy;
- 2) qatardıń koeficientleri haqıyqıy hám oń mánislerge iye, yaǵnıy qatarǵa jayıwdıń barlıq garmonikaları óziniń dónes uchastkaları menen koordinata basınan ótedi;
- 3)  $P(uvw)$  tarqalıwı  $(xyz)$  sıyaqlı dáwirlikke iye;
- 4) maksimumlar sanı  $N^2 - N$  qutıdaǵı atomlardıń sanınan azmaz úlken;
- 5) hár bir maksimumnıń salmaǵı atomlıq nomerlerdiń kóbeymesi arqalı anıqlanadı:

$$\int P_{nm} dV_{uvw} = Z_n Z_m.$$

- 6) maksimumlar atomlıq aralıq vektorlar keńisliginiń  $(uvw)$  noqatlarında jaylasqan, maksimumlar  $(xyz)$  shamasına salıstırǵanda kóbirek jayılgan;
- 7)  $P$  funkciyanıń maksimumları koordinata basında jaylasqan inversiya orayında jup-juptan baylanısqan.

Qatardıń koeficientleri eksperimentte ólshengen intensivliklerden tikkeley kelip shıǵatuǵın bolǵanlıqtan atomlar aralıq funkciyanı paydalanıw strukturalıq rasshifrovkada belgili bir alǵa ilgerilewlerdi támiyinley aladı. Bul  $P(uvw)$  tarqalıwınıń aldın ala strukturalıq modeldi dúzbesten-aq esaplanatuǵınlıǵın hám qutıdaǵı atomlardıń haqıyqıy konfiguraciyası atomlar aralıq funkciyanıń quramalı naǵıshlarınıń járdeminde kórsetiletuǵınlıǵın bildiredi. Strukturalıq máseleni sheshiwdiń bunnan keyingi etapında bir qatar quramalı jaǵdaylar payda boladı – vektorlıq sistemaniń simmetriyası óz ishine "artıq" simmetriya orayın aladı, qutıdaǵı atomlardıń jaylasıwlarındaǵı haqıyqıy motivti ayırıp alıw arawlı túrdegi jaqınlasıwları talap etedi h.t.b. Biraq usınday jaǵdaylarǵa qaramastan bunday procedura haqıyqıy procedura bolıp tabıladı hám laboratoriyalarda ámeliy máseleler sheshilgende keń túrde paydalanıladı.

## **6-§. Atom tárepinen rentgen nurlarınıń shashıratılıwı. «Atomlıq amplituda»**

**Elektronlıq tıǵızlıq.** Elektronnan atomǵa ótkende shashıraǵan tolqınlardıń intensivliginiń shashıraw múyeshinen ǵárezligi ádewir quramalasadı. Polyarizaciyalıq faktorǵa atomnıń hár qıylı bólimlerinde shashıraǵan tolqınlardıń interferenciyasınıń tásiiri de qosıladı. Bunday jańa baylanıstıń xarakterin anıqlaw ushın quramalı bolǵan sanlıq esaplawlardı júrgiziwdiń zárúrligi joq. Ulıwmalıq jaǵdaylar sapalıq tallaw ótkergende de jetkilikli dárejede ayqınlasadı.

Atomnıń hár qıylı noqatlarında jaylasqan eki elektronda bazı bir baǵıtta shashıraǵan tolqınlar baqlaw noqatına jetkende fazalar ayırmasına iye boladı. Sebebi sol elektrondan baqlaw noqatına shekemgi aralıqlar bir birine teń emes. Sonlıqtan eki elektronda shashıraǵan tolqınlardıń qosındı intensivligi atomdaǵı sol eki elektronnıń bir birine salıstırǵandaǵı jaylasıwlarınan hám shashıraw múyeshinen ǵárezli boladı. Bizdi intensivliktiń bir zamatlıq mánisi emes, al ortasha mánisi qızıqtıradı. Sonlıqtan bizdi elektrondardıń qanday da bir waqıt momentindegi iyelegen orınları biziń ushın áhmiyetli emes. Al elektrondardıń sheksiz kóp traektoriyaların qosqanda alınatuǵın «elektronlıq bult» biziń ushın kerek boladı. Solay etip biz atomnıń  $Z$  dana diskret atomlarına emes, al shaması  $eZ$  bolǵan úzliksiz tarqalǵan zaryadqa iye bolamız.

Kvantlıq mexanikanıń kóz-qarasları boyınsha hár bir elektron óziniń  $\psi_j(xyz)$  tolqın funkciyasına iye boladı. Bul tolqın funkciyası keńisliktegi zaryadtıń statistikalıq tarqalıwın beredi. Tolqın funkciyasın sáykes túrde normirovkalǵanda onıń moduliniń kvadrati  $[\psi_j(xyz)]^2$  elektrondı atomnıń ana yamasa mına noqatında tabıwdıń itimallıǵın beredi. Atom boyınsha barlıq elektrondardıń tarqalıwınıń qosındı funkciyası

$$\rho(xyz) = \sum_{j=1}^Z [\psi_j(xyz)]^2 \quad (4)$$

kólemniń bir birligindegi hár qıylı noqatlardaǵı elektrondardıń waqıt boyınsha ortasha sanın anıqlaydı. Bul funkciyanı «elektronlıq tıǵızlıq» dep ataydı.

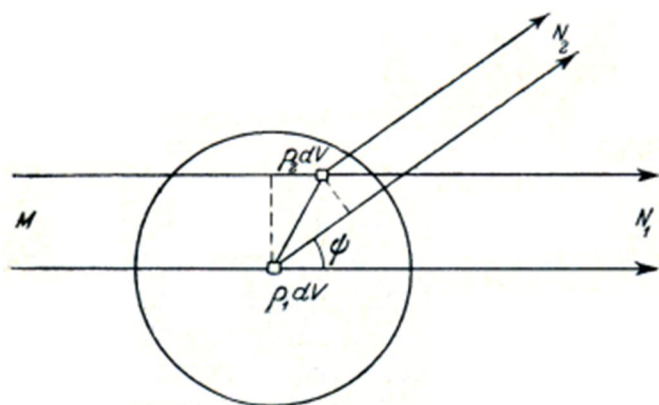
Ayırım elektrondardıń tarqalıw funkciyası bolǵan  $[\psi_j(xyz)]^2$  funkciyasın juwıq túrdegi kvantmexanikalıq esaplawlar jolı menen anıqlawǵa boladı. Atomnıń hár qıylı qabıqlarındaǵı elektronlarǵa sáykes keliwshi tarqalıw funkciyaların qossaq, onda

berilgen noqattan atomnıń orayına shekemgi kólemdegi qosındı elektronlıq tıǵızlıqtı anıqlaymız.

**Atom tárepinen rentgen nurlarınıń shashıratılıwı.** Atomda eki sheksiz kishi  $dV$  kólemdi ayırıp alamız: birinshisi atomnıń orayında (elektronlıq tıǵızlıq  $\rho_1$ ), ekinshisi qálegen noqatta (elektronlıq tıǵızlıq  $\rho_2$ ). Birinshi kólem  $\rho_1 dV$ , al ekinshisi  $\rho_2 dV$  elektronǵa iye boladı.

Rentgen nurları shashıraǵanda birinshi kólem kernewliginiń amplitudası  $E_{el}\rho_1 dV$ , al ekinshi kólem kernewliginiń amplitudası  $E_{el}\rho_2 dV$  bolǵan shashıraǵan tolqınlardı payda etedi.

Ayırıp alıǵan eki kólemler tárepinen hár qıylı baǵıtlarda shashıratılǵan rentgen nurlarınıń qosındısın tabamız. Bul jaǵday 5-súwrette kórsetilgen.



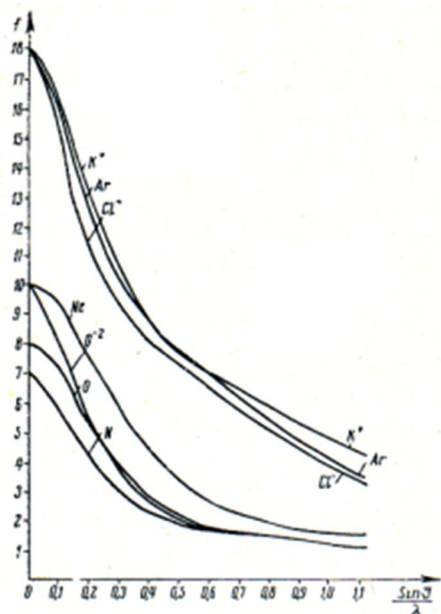
5-súwret.

Atomnıń hár qıylı noqatlarında shashıradıń nátiyjesinde fazalar ayırmasınıń payda bolıwı.

Kelip túsiwshi nurlardıń baǵıtı menen sáykes keliwshi  $N_1$  baǵıtınan baslaymız. Bul baǵıtta eki kólem arqaldı ótiwshi tolqınlardıń júrisler ayırması birdey, nurlardıń fazaları birdey, al qosındı amplituda  $E_{el}\rho_1 dV + E_{el}\rho_2 dV$  qosındısına teń. Basqa baǵıtlarda nurlar arasında fazalar ayırması payda boladı hám soǵan sáykes qosındı nurdıń amplitudası kemeyedi.  $\psi$  múyeshiniń shaması qansha úlken bolǵan sayın fazalar ayırmasınıń da shaması úlkeyedi hám sheksiz kishi eki kólem tárepinen shashıraǵan qosındı tolqınnıń intensivligi de kishi boladı.

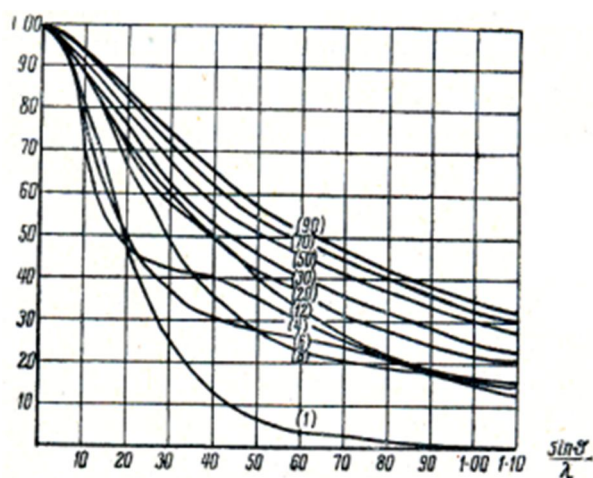
Atomnıń sızıqlı ólshemleri rentgen tolqınlarınıń uzınlıǵına barabar. Eger  $dV_1$  hám  $dV_2$  kólemleri bir birinen úlkenirek qashuqlıqta alıǵan bolsa shashıradıń bazı bir múyeshlerinde  $\pi$  den de úlken bolıwı, al ayırım jaǵdaylarda hátte  $2\pi$  ge de jaqınlasıwı múmkin. Bunday jaǵdayda qosındı amplitudanıń mánisi úlkeye baslaydı. Biraq

elektronlıq tıǵızlıqtıń tarqalıwınıń ulıwmalıq xarakterinen rentgen nurların shashıratıwǵa tiykarınan atomnıń oraylıq bóliminde jaylasqan bólimlerdiń qatnasatıwınlıǵın kóriwge boladı. Al atomnıń oraylıq bóliminde bolsa elektronlıq tıǵızlıq eń úlken mániske iye boladı. Rentgen nurların effektivli túrde shashıratıwın bunday bólimler bir birinen  $\lambda$  ge salıstırǵanda ádewir kishi qashıqlıqlarda jaylasadı. Bul jaǵday shashıraw múyeshiniń úlkeyiwi menen shashıragan tolqınlardıń intensivliginiń monotonlı túrde kishireyiwin támiyinleydi (6-7 súwretler).



6-súwret.

$f = f\left(\sin \frac{\vartheta}{\lambda}\right)$  atomlıq amplitudalar iymeklikleri.



7-súwret.

$\hat{f} = \hat{f}\left(\sin \frac{\vartheta}{\lambda}\right)$  birlik atomlıq amplitudalar iymeklikleri.

Tap sol sıyaqlı tallawlar tiykarında basqa da nızamlıqtı – shashıragan tolqınlardıń intensivliginiń tolqın uzınlıǵınan ǵárezligin anıqlawǵa múmkinshilik beredi.

5-súwretke qaytıp kelemiz. Shashıraw múyeshiniń mánisi berilgen, al rentgen nurlarınıń tolqın uzınlıqların ózgermeli dep esaplaymız. Tolqın uzınlıǵınıń kemeyiwiniń nurlar arasındaǵı fazalar ayırmasınıń úlkeyiwine alıp keletıwınlıǵın túsiniw qıyın emes. Sonlıqtan 1- hám 2-kólemlerde shashıragan tolqınlardıń qosındısınıń amplitudasınıń shashıraw múyeshiniń mánisiniń úlkeyiwi hám tolqın uzınlıǵınıń kishireyiwi menen kishireyetıwınlıǵın kóremiz

Atom boyınsha elektronlardıń tıǵızlıǵınıń statistikalıq tarqalıwın esapqa alatuǵın sanlıq esaplawlar joqarıda keltirilgen tallawlardıń durıs ekenligin tastıyıqlaydı. Atom tárepinen shashıratılǵan tolqınnıń qosındı amplitudası  $E_a$  shashırax múyeshi  $\psi$  hám  $1/\lambda$  shamalarınıń monotonlı túrde kishireywshi funkciyası bolıp tabıladı. Bul esaplawlar  $\psi$  hám  $1/\lambda$  shamaların bir waqıtta esapqa alıwshı funkcionallıq ğárezlilikti  $\frac{\sin(\frac{\psi}{2})}{\lambda}$  funkciyasınıń beretuǵınlıǵın dálilleydi.

**Atomlıq amplituda.** Kelip túsiwshi tolqınlar baǵıtında atomnıń barlıq uchastkaları tárepinen shashıraǵan nurları fazaları boyınsha birdey boladı  $E_a = ZE_{el}$  shamasına teń. Basqa baǵıtlarda  $E_a$  shamasınıń mánisi kishi hám  $\frac{\sin \vartheta}{\lambda}$  shamasınan ğárezli boladı.  $E_a$  nıń mánisin berilgen  $\vartheta$  hám  $\lambda$  shamaları ushın  $E_a = f\left(\frac{\sin \vartheta}{\lambda}\right) E_{el}$  túrinde jazamız.  $\vartheta = 0$  bolǵan jaǵdayda  $f\left(\frac{\sin \vartheta}{\lambda}\right)$  funkciyasınıń mánisi  $Z$  ke teń. Al múyeshtiń basqa mánislerinde  $Z$  ten kishi. Bul shamanıń mánisi berilgen baǵıtta atom tárepinen shashıratılǵan tolqınnıń amplitudasınıń elektron tárepinen shashıratılǵan tolqınnıń amplitudasınan neshe ese úlken ekenligine teń hám onı atomlıq shashırax funkciyası yamasa atomlıq amplituda dep ataymız.

Usınday salıstırmalı shamalar atomlar, molekulalar hám kristallar tárepinen rentgen nurlarınıń shashırax processlerin úyregende jiyi ushırasadı. Usıǵan baylanıslı biz elektronlıq birliklerde jazılǵan shamalardı kirgizemiz. Bunday jaǵdayda elektron tárepinen berilgen baǵıtta shashıratılǵan tolqınnıń amplitudasın birge teń dep qabıl etemiz (bunday jaǵdayda sáykes intensivlikte birge teń boladı). Sáykes iymeklikler 4- hám 5-súwretlerde keltirilgen.

## **7-§. Kishi kristallardaǵı rentgen nurlarınıń difrakciyası. Intensivliktiń strukturalıq faktori**

Kristallıq pánjereniń elementar qutısındaǵı atomlardıń jıynaǵın bazı bir molekula dep qarawǵa boladı. Kristaldan qıyalımızda ayırıp alınǵan elementar qutı rentgen nurların barlıq baǵıtta shashıratadı. Elementar qutıda shashıraǵan nurlardıń amplitudası, baslangısh fazası hám intensivlikleri molekulalar ushın alınǵan

$$E_m = E_{el} |F_m| = E_{el} \sqrt{F_A^2 + F_B^2}, \quad (5)$$

$$\operatorname{tg} \alpha_m = \frac{F_B}{F_A}, \quad (6)$$

$$I_m = I_{el} |F_m|^2 = \left( \frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{I_0}{R^2} P(\psi) f^2 \quad (7)$$

formulalar boyınsha anıqlanadı. Bul formulalarda:

$F_m$  molekula ushın shashırawdıń strukturalıq faktori.  $f$  arqalı ( $f_j$  arqalı -atom ushın) atomlıq faktor, al  $P(\psi)$  arqalı polyarizaciyalıq faktor belgilengen.

$$I_m = \frac{c}{8\pi} E_{el}^2 \left\{ \left[ \sum_{j=1}^N f_j \cos \delta_j \right]^2 + \left[ \sum_{j=1}^N f_j \sin \delta_j \right]^2 \right\},$$

$$F_A = \sum_{j=1}^N f_j \cos \delta_j,$$

$$F_B = \sum_{j=1}^N f_j \sin \delta_j.$$

$$|F_m|^2 = F_A^2 + F_B^2 = \left[ \sum_{j=1}^N f_j \cos \delta_j \right]^2 + \left[ \sum_{j=1}^N f_j \sin \delta_j \right]^2.$$

Biz qarap atırǵan jaǵdayda koordinata bası ornın pánjereniń sáykes túyini iyeleydi. Al koordinata bası bolsa atomlardıń koordinataların, shashırawǵan tolqınlardıń baslangısh fazaların esaplaw ushın tiykar bolıp tabıladı.

Ekinshi tárepten tutası menen alıńǵan kristaldan alınatuǵın qosındı shashırawdıń effekti de jaqsı belgili. Ayırım elementar qutılar tárepinen shashırawǵan tolqınlardıń interferenciyasınıń nátiyjesinde nurlar tek bazı bir baǵıtlarda ǵana tarqaladı. Bunday baǵıtlarda nurlardıń fazalarınıń birdey bolıwı kerek. Qosındı nurdıń amplitudasınıń  $E_m$  amplitudalarınıń ápiwayı arifmetikalıq qosındısı  $ME_m$  kóbeymesine teń bolatuǵınlıǵı túsinikli ( $M$  arqalı kristaldaǵı elementar qutılardıń sanı belgilengen). Solay etip

$$E_k = ME_m, \quad (8)$$

$$I_k = M^2 I_m. \quad (9)$$

Bul formulalarda  $E_k$  arqalı kristalda shashırawǵan tolqınnıń amplitudası, al  $I_k$  arqalı intensivligi belgilengen.

**Strukturalıq faktor.** Shashırağan tolqınlardıń intensivlikleriniń formulalarına qayta keliw arqalı difrakciyağa ushırağan nurlardıń intensivligin elementar qutıdaǵı atomlardıń koordinataları arqalı ańlatıw múmkinshiligine iye bolamız:

$$I_k = I_{el} M^2 |F(hkl)|^2 = \left( \frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{I_0}{R^2} P(\vartheta) M^2 |F(hkl)|^2. \quad (10)$$

Bul ańlatpada

$$|F(hkl)|^2 = \left[ \sum_{j=1}^N f_j \cos 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j) \right]^2 + \left[ \sum_{j=1}^N f_j \sin 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j) \right]^2. \quad (11)$$

(11)-ańlatpadaǵı  $F(hkl)$  shamasın strukturalıq faktor dep ataydı. Bul faktordıń san mánisi difrakciyalıq baǵıttaǵı bir elementar qutıdan shashırağan tolqınlardıń elektronlıq birliklerdegi intensivligine teń.

Strukturalıq faktor atomlıq-kristallıq qurılıstıń ózgesheliklerine baylanıslı difrakciyağa ushırağan tolqınlardıń intensivlikleriniń hár qıylı bolatuǵınlıǵın támiyinleydi. Strukturalıq faktor ushın jazılǵan ańlatpadaǵı argument  $hx_j + ky_j + lz_j$  tikkeley fizikalıq mániske iye: onıń shaması elementar qutıdaǵı j-atom arqalı ótkerilgen atomlıq tordıń usı tordıń betine perpendikulyar baǵıttaǵı awısıwına teń, al  $2\pi(hx_j + ky_j + lz_j)$  bolsa joqarıdaǵı awısıwdıń saldarınan payda bolǵan usı atomlıq torda shashırağan nurdıń baslangısh fazası.

Solay etip elementar qutıdaǵı atomlardıń jaylasıwların bile otırıp qálegen  $hkl$  shashırawınıń intensivligin anıqlawǵa boladı eken ( $hkl$  indeksleri kristallografiyalıq tegislikler seriyasınıń indeksleri yamasa Miller indeksleri dep ataladı).

Izertlewshiler aldında pútkilley qarama-qarsı mazmundadıǵı másele qoyıladı: difrakciyağa ushırağan tolqınlardıń intensivlikleri boyınsha elementar qutıdaǵı atomlardıń koordinataların anıqlaw kerek boladı. Bul másele rentgenstrukturalıq analizdiń tiykarǵı máseleleriniń biri bolıp esaplanadı.

## 8-§. Strukturalıq amplitudalar. Ulıwmalıq formulalar

Strukturalıq amplituda rentgen nurlarınıń shashırawınıń atomlardıń bir birine salıstırǵandaǵı jaylasıwlarınan, olardıń shashıratıwshılıq qásiyetlerinen hám nurlardıń baǵıtınan ǵárezlilikti ańlatadı.

Strukturalıq amplituda túsinigi tutası menen alınǵan kristalǵa ótpesten burın atomlardıń shekli toparlarınan (molekula yamasa elementar qutı atomları) shashıratıwın tallawdıń barısında kirgizildi. Ayırım alınǵan elementar qutıǵa qatnası boyınsha strukturalıq amplituda kompleksli shama túrinde anıqlanadı. Onıń moduli elektronlıq birliklerdegi nurdıń amplitudasına, al argumenti bul nurdıń baslanǵısh fazasına teń.

Fizikalıq jaqtan bul jaǵday mınalardı bildiredi: strukturalıq amplituda nurdıń amplitudası menen baslanǵısh fazasınıń atomlardı xarakterleytuǵın parametrlerden hám nurdıń baǵıtınan ǵárezlikti ańlatadı. Strukturalıq amplitudanıń kompleksli forması eki funkcionallıq ǵárezlilikti bólip kórsetiwge múmkinshilik beredi: moduli amplitudanı, al argumenti baslanǵısh fazanı anıqlaydı.

Kristalǵa qatnası boyınsha strukturalıq amplituda difrakciyaǵa ushıraǵan nurlardıń intensivligin anıqlawshı faktorlardıń biri ǵana bolıp tabıladı. Sonlıqtan shıǵılısıwdıń strukturalıq amplitudasın anıqlaw basqasharaq formada ámelge asırılıwı kerek. Qosımsha faktorlardan qutılıw ushın (integrallıq, jutılıw, ekstinkciya faktorları) kristaldı sheksiz úlken, jutpaytuǵın hám ideal mozaykalıq dep esaplaymız. Bunday jaǵdayda difrakciyalıq shártlerdi qanaatlandırıwshı (Vulf-Bregg shártin qanaatlandırıwshı) baǵıtta tarqalıwshı nurdıń kompleksli amplitudası tómendegidey túrge iye boladı:

$$\tilde{E}(hkl) = E_{el}MF(hkl).$$

Demek

$$F(hkl) = \frac{\tilde{E}(hkl)}{E_{el}M} = \frac{E(hkl)}{E_{el}M} e^{i\alpha(hkl)}. \quad (12)$$

SHaǵılısıwdıń strukturalıq amplitudasınıń moduli sheksiz úlken, jutpaytuǵın, ideal mozaykalıq kristalda difrakciyaǵa ushıraǵan nurdıń amplitudasına teń (bir elementar qutıǵa tiyisli elektronlıq birliklerdegi).



Strukturalıq amplituda ushın ulıwmalıq ańlatpa (11)-ańlatpa bolıp tabıladı. Onı bılayınsha kóshirip jazamız:

$$F(hkl) = \sum_{j=1}^N f_j e^{i2\pi(hx_j + ky_j + lz_j)} = \sum_{j=1}^N f_j e^{i\theta_j}. \quad (13)$$

Bul algebralıq formulaniń járdeminde strukturalıq amplituda atomlıq amplitudalar hám shashıratıwshı atomlardıń oraylarınıń koordinataları  $x_j, y_j$  hám  $k_j$  shamaları menen baylanıstırıladı. Bul koordinatalar  $a, b$  hám  $c$  dáwirleriniń (turaqlılarınıń) úleslerinde berilgen. Sonlıqtan

$$F(hkl) = \int_{v_0} f_j e^{i2\pi(hx_j + ky_j + lz_j)} dv = \int_{v_0} \rho(xyz) f_j e^{i\theta} dv \quad (14)$$

túrine enedi. Bul formulada strukturalıq faktor elektronlıq tıǵızlıqtıń tarqalıwı menen baylanısqan. Bul jerde  $2\pi(hx_j + ky_j + lz_j)$  argumentin ádette  $\theta$  arqalı ańlatatugımız kórinip tur.

Joqarıda keltirilgen algebralıq formula atomlardıń kristaldıń qutısındaǵı koordinataları berilgen jaǵdaylar ushın strukturalıq faktordıń mánislerin anıqlaw ushın paydalanılatuǵın formulalar ekenligin atap ótemiz. Biz tiykarınan (13)- yamasa (14)- túrdegi formulalardan paydalanamız.

Joqarıda keltirilgen formulalarda eksponenciallıq aǵzalar trigonometriyalıq formada kórsetiliwi múmkin. Bunday jaǵdayda kompleksli strukturalıq amplitudanıń haqıyqıy hám jormal bóleklerin ayırıp jazamız:

$$F(hkl) = \sum_{j=1}^N f_j A_j + i \sum_{j=1}^N f_j B_j. \quad (15)$$

Bul ańlatpada

$$A_j = \cos 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j),$$

$$B_j = \sin 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j).$$

Eger kristalda inversiya orayı bolsa (yamasa koordinatalar bası inversiya oraylarınıń birewinde jaylastırılǵan bolsa), onda strukturalıq amplituda haqıyqıy mániske iye boladı hám

$$F(hkl) = \sum_{j=1}^{N/2} f_j A_j = 2 \sum_{j=1}^{N/2} f_j \cos 2\pi(hx_j + ky_j + zk_j)$$

túrine enedi. Bul jaǵday úlken áhmiyetke iye. Bul áhmiyet esaplawlardıń kóleminiń eki ese kemeyiwinde emes, al haqıyqıy  $F(hkl)$  shaǵılıswlardaqı dáslepki fazanı anıqlaw mashqalasın ańsatlastıradı. Orayǵa qarata simmetriyalı kristaldaqı (eger simmetriya orayı koordinatalar bası sıpatında saylap alınǵan bolsa) qálegen difrakciyaǵa ushıraǵan nur tek 0 ge yamasa  $\pi$  ge teń baslanǵısh fazaǵa iye boladı. Eger  $F(hkl) > 0$  bolsa, onda baslanǵısh faza nolge teń, al  $F(hkl) < 0$  bolǵan jaǵdayda baslanǵısh faza  $\pi$  ge teń.

Berilgen struktura ushın strukturalıq amplitudanı esaplaw tiykarǵı sonıń menen birge eń miynetti kóp talap etetuǵın máselelerdiń biri bolıp tabıladı. Ásirese elementar qutıdaqı atomlardıń sanı kóp bolsa (mısalı organikalıq birikpelerde) strukturalıq faktordı esaplaw oǵada úlken kólemdegi esaplawlardıń ótkeriliwin talap etedi.

Mısal retinde  $Ni(NC_5H_5)_4Cl_2$  kristallın alıp qaraymız. Bul kristaldıń elementar qutısında 8 molekula, yaǵnıy 376 atom jaylasqan boladı. Demek tek bir shaǵılısw (difrakciyaǵa ushıraǵan nur) ushın eksponenciallıq funkciyanıń 376 mánisin tabıw kerek. Bunnan keyin bul shamalardı atomlıq faktorlardıń mánislerine kóbeytiw hám alınǵan kóbeymelerdi bir birine qosıw kerek. Bunday operaciyalar difrakciyaǵa ushıraǵan nurlardıń sanına baylanıslı júzlegen yamasa mıńlaǵan ret qaytalawǵa tuwrı keledi.

## **9-§. Simmetriyasınıń keńisliktegi toparı hár qıylı bolǵan kristallar ushın strukturalıq amplitudanıń formulaların keltirip shıǵarıw**

Simmetriya elementleriniń bar bolıwı hám pánjereniń ápiwayı emesligi elementar qutıdaqı hár qıylı atomlardıń koordinataları arasındaqı óz-ara baylanıstı támiyinleydi. Usınday óz-ara baylanıslıqtıń eń ápiwayı formasın oraylasqan pánjere beredi. Mısalı kólemde oraylasqan pánjerede barlıq atomlar jup-juptan baylanısqan: eger bir atom  $x_j, y_j, z_j$  koordinatalarına iye bolsa, onda koordinataları  $x_j' = x_j + 1/2, y_j' = y_j +$

$1/2, z_j' = z_j + 1/2$  bolğan tap sonday sorttaǵı atom sózsiz tabıladı. (13-15)

formulalardaǵı sáykes jup aǵzalarǵı bir birine qosıw arqalı mınaǵan iye bolamız:

$$\begin{aligned} & f_j \text{Exp}[2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)] + f_j \text{Exp} \left\{ 2\pi i \left[ h(x_j + 1/2) + k(y_j + \frac{1}{2}) + l(z_j + 1/2) \right] \right\} = \\ & = f_j \text{Exp}[2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)] [1 + \text{Exp} i\pi(h + k + l)] = \\ & = 2f_j \text{Exp}[2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)] \cos^2 \frac{\pi}{2}(h + k + l). \end{aligned}$$

Barlıq formula tutası menen

$$F(hkl) = 2\cos^2 \frac{\pi}{2}(h + k + l) \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \text{Exp}[2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)]$$

formulasına alıp kelineydi.

Summa belgisiniń aldında turǵan koefficient tek eki mániske iye bola aladı: eger  $h + k + l = 2n$  bolsa ( $n$  arqalı pútin san belgilengen,  $2n$  shaması bolsa  $h + k + l$  qosındısınıń teń), onda  $F(hkl) = 1$ . Eger  $h + k + l = 2n + 1$  bolsa, onda  $F(hkl) = 0$ . Demek rentgenogrammada payda bolǵan reflekslerdiń indeksleri ushın  $h + k + l$  qosındısı jup sanǵa teń bolıwı kerek. Biz kólemde oraylasqan kristallar ushın belgili bolǵan sóniw qaǵıydaların aldıq degen sóz.

Tap sonday jollar menen keńisliktegi simmetriyasınıń toparları basqa bolǵan kristallar ushın da strukturalıq faktorlardıń mánislerin hám sóniw qaǵıydaların keltirip shıǵarıwımız múmkin. Joqarıda keltirilgen mısaldan elementar qutıdaǵı barlıq atomlar boyınsha qosındılardı alıp otırıwdıń da kerek emes ekenligin kórsetedi. Biraq biz esaplawlardıń kólemin kishireytiwdi aldımızǵa maqset etip qoymaymız.

Simmetriya elementleriniń bolıwına baylanıslı formulalardı túrlendiriw. Simmetriya elementleriniń qatnasıwı qosındınıń aǵzalarınıń sanın azaytıp ǵana qoymay, ápiwayılastırılǵan formulalardıń túrlerin de ózgerdedi.

Birinshi mısıl retinde orayǵa qarata simmetriyası bar strukturanı qaraymız: eger koordinatalar bası simmetriya orayında jaylastırılǵan bolsa, onda strukturalıq amplitudanıń tek haqıyqıy bólegi ǵana (summadaǵı kosinus funkciyası bar aǵzalar ǵana) qaladı. Basqa simmetriya elementleri de formulalardıń bir qansha túrlendiriliwin támiyinleydi [13].

Eger kristalda Z kósherine parallel bolğan ekinshi tártipli simmetriya kósheri bolsa (yağnıy 2 bolsa), onda koordinataları  $x_j, y_j, z_j$  hám  $-x_j, -y_j, z_j$  bolğan atomlar juptan birigedi. Bul jağdaydan mınağan iye bolamız:

$$\begin{aligned} & \text{Exp}[2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)] + \text{Exp}[2\pi i(-hx_j - ky_j + lz_j)] = \\ & = \text{Exp}(i2\pi lz_j) 2 \cos 2\pi(hx_j + ky_j). \end{aligned}$$

Demek bul jağdayda strukturalıq amplitudanıń formulası

$$F(hkl) = 2 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \cos 2\pi i(hx_j + ky_j) \text{Exp}(i2\pi lz_j) \quad (16)$$

túrine enedi.

Bul formulanı trigonometriyalıq formağa aylandırısaq, onda

$$\begin{aligned} F(hkl) = 2 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \cos 2\pi i(hx_j + ky_j) \cos(2\pi lz_j) + \\ + 2i \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \cos 2\pi i(hx_j + ky_j) \sin(2\pi lz_j) \end{aligned} \quad (17)$$

formulasına iye bolamız.

Joqarıda ayılğan sıyaqlı Z kósherine perpendikulyar bolğan simmetriya tegisligi m strukturalıq amplituda formulasın

$$F(hkl) = 2 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \cos(2\pi lz_j) \text{Exp}[2\pi i(hx_j + ky_j)]$$

túrine endiredi. Bul formulanı basqasha etip jazsaq, onda

$$\begin{aligned} F(hkl) = 2 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \cos(2\pi lz_j) \cos[2\pi(hx_j + ky_j)] + \\ + 2i \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \cos(2\pi lz_j) \sin[2\pi(hx_j + ky_j)] \end{aligned}$$

formulasına iye bolamız. Sebebi bul jaǵdayda  $x_j, y_j, z_j$  hám  $x_j, y_j, -z_j$  noqatlarında jaylasqan atomlar jup-juptan birlesedi.

Joqarı tártiptegi simmetriya kósherleri, vintlikkósherler, jiljip shashıratıwshı simmetriya tegislikleri bolǵan jaǵdayda esaplawlar ádewir quramalasadı. Mısalı  $XY$  tegisligi arqalı ótiwshi  $a$  jiljip shashıratıwshı simmetriya tegisligi koordinataları  $x, y, z$  bolǵan atomlar menen koordinataları  $x + \frac{1}{2}, y, -z$  bolǵan atomlardı jup-juptan birlestiredi. Usınday ózgerislerge sáykes aǵzalardı bir biri menen baylanıstırıw jolı menen biz tómendegidey formulalarǵa iye bolamız:

$$\begin{aligned} & \text{Exp}[2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)] + \text{Exp}[2\pi i(hx_j + h/2 + ky_j - lz_j)] = \\ & = \text{Exp}[2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)]\{\text{Exp}[2\pi i(lz_j - h/4)]\} + \text{Exp}[2\pi i(h/4 - lz_j)] = \\ & = 2 \cos 2\pi (lz_j - h/4) \text{Exp}[2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)] \end{aligned}$$

hám

$$\begin{aligned} F(hkl) &= 2 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \cos 2\pi(lz_j - h/4) \text{Exp}[2\pi i(hx_j + ky_j + h/4)] = \\ &= 2 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \cos 2\pi(lz_j - h/4) \cos 2\pi(hx_j + ky_j + h/4) + \\ &+ 2i \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \cos 2\pi(lz_j - h/4) \sin 2\pi(hx_j + ky_j + h/4) \end{aligned}$$

formulasın alamız.

Vintlik kósherlerge hám jiljip shashıratıwshı simmetriya tegisliklerine juwap beretuǵın formulalar sáykes simmetriya elementin táriyipleytuǵın sóniw qaǵıydalarına da iye boladı. Mısalı  $a$  jiljip shashıratıwshı simmetriya tegisligi bar jaǵdayǵa sáykes keliwshi eń aqırǵı formula boyınsha  $h = 2n - 1$  bolǵan jaǵdayda (yaǵnıy  $h$  tıń mánisi taq san bolsa)  $F(hk0) = 0$ . Bunnan

$$F(hk0) = 2 \cos \frac{\pi}{2} h \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} f_j \text{Exp} [i2\pi \cos 2\pi(hx_j + ky_j + h/4)]$$

Bul shama  $h$  tıń mánisi taq bolǵanda nolge aylanadı.

Simmetriya elementleriniń kombinacijaları jáne de formulardıń túrleriniń ózgerislerine alıp keledi. Mısalı  $P2/m$  toparında 2 kósheri  $Z$  ke parallel, al  $m$  tegisligi bolsa  $XY$  tegisliginde jatadı dep esaplasaıq, onda srukturalıq amplitudanıń mánisi

$$F(hkl) = \sum_{j=1}^{\frac{N}{4}} f_j \cos 2\pi(hx_j + ky_j) \cos 2\pi lz_j$$

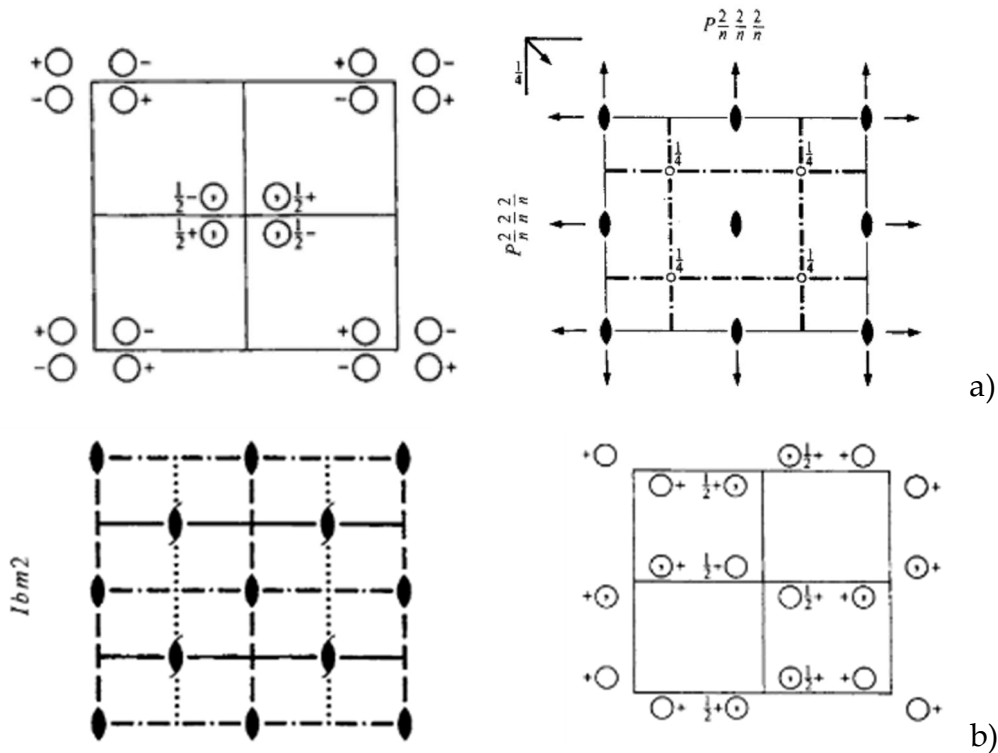
ańlatpasın alamız.

$Pmmm$  toparı formulardı bunnan da beter ápiwayılaştıradı. Bul jaǵdayda

$$F(hkl) = 8 \sum_{j=1}^{\frac{N}{8}} f_j \cos 2\pi hx_j \cos 2\pi ky_j \cos 2\pi lz_j .$$

Strukturalıq amplituda simmetriyanıń  $P2/m$  toparında da,  $Pmmm$  toparında da haqıyqıy mániske iye boladı. Sebebi bunday kristallarda koordinatalar bası simmetriya orayı menen bir noqatta jaylasqan.

$Pnnn$  toparında koordinata bası ekinshi tártipli úsh simmetriya kósheri kesiliken noqatta saylap alınadı. Bul jaǵday 6-súwrette kórsetilgen. Esaplawlar nátiyjesinde biz bul jaǵdayda strukturalıq amplitudanıń tómendegidey kompleksli mániske iye bolatuǵınlıǵın kóremiz:



8-súwret.

a). Simmetriyanıń keńisliktegi toparı  $Pnnn(D_{2h}^2)$  (qatar sanı 48-bolǵan topar) jaǵdaydaǵı elementar qutı hám simmetriya elementleriniń óz-ara jaylasıwları.

b). Simmetriyanıń keńisliktegi toparı  $Ima2(C_{2v}^{22})$  (qatar sanı 46-bolǵan topar) jaǵdaydaǵı elementar qutı hám simmetriya elementleriniń óz-ara jaylasıwları.

$$F(hkl) = 8 \cos^2 2\pi \frac{h+k+l}{4} \sum_{j=1}^{N/8} f_j \cos 2\pi h x_j \cos 2\pi k y_j \cos 2\pi l z_j + \\ + i \sin^2 2\pi \frac{h+k+l}{4} \sum_{j=1}^{N/8} f_j \sin 2\pi \left( h x_j - \frac{h}{4} \right) \sin 2\pi \left( k y_j + \frac{h}{4} \right) \sin 2\pi l z_j.$$

Tap usınday jaǵday inversiya orayına iye emes toparlarda da orın aladı. Mısalı  $Ima2$  ([13], 216-261 betler) toparı ushın (8-súwret)

$$F(hkl) = 8 \cos^2 2\pi \frac{h+k+l}{4} \left\{ \sum_{j=1}^{N/8} f_j \cos 2\pi \left( h x_j - \frac{h}{4} \right) \cos 2\pi \left( k y_j + \frac{h}{4} \right) \cos 2\pi l z_j + \right. \\ \left. + i \sum_{j=1}^{N/8} f_j \cos 2\pi \left( h x_j - \frac{h}{4} \right) \cos 2\pi \left( k y_j + \frac{h}{4} \right) \sin 2\pi l z_j \right\}.$$

Simmetriyanıń hár bir keńisliktegi toparı óziniń túrlendirilgen formulası menen táriyiplenedi. Bul formula strukturalıq amplitudalardı esaplaǵanda ádette tiykarǵı formula sıpatında xızmet etedi. Sáykes maǵlıwmatlar rentgenstrukturalıq analiz boyınsha spravochniklerde, rentgen kristallografiyası boyınsha xalıq aralıq kestelerde keltirilgen. Ádette bizdi qızıqtıratuǵın formula

$$F(hkl) = \sum_{j=1}^{N/p} f_j A_j + i \sum_{j=1}^{N/p} f_j B_j$$

túrine alıp kelingен dep esaplanadı hám joqarıda atap ótilgen ádebiyatlarda A menen B shamalarınıń mánisleri beriledi. Mısalı  $Pnnn$  toparı ushın xalıq aralıq kestelerde

$$A = 8 \cos^2 2\pi \frac{h+k+l}{4} \cos 2\pi h x \cos 2\pi k y \cos 2\pi l z, \\ B = 8 \cos^2 2\pi \frac{h+k+l}{4} \sin 2\pi h x \sin 2\pi k y \sin 2\pi l z,$$

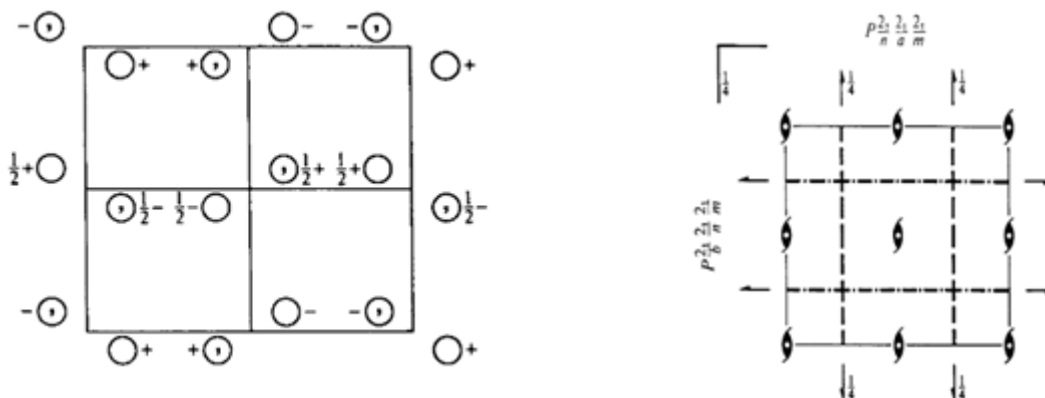
al,  $Ima2$  toparı ushın

$$A = 8 \cos^2 2\pi \frac{h+k+l}{4} \cos 2\pi \left( h x - \frac{h}{4} \right) \cos 2\pi \left( k y + \frac{h}{4} \right) \cos 2\pi h z,$$

$$B = 8 \cos^2 2\pi \frac{h+k+l}{4} \cos 2\pi \left( hx - \frac{h}{4} \right) \cos 2\pi \left( ky + \frac{h}{4} \right) \sin 2\pi hz$$

formulaları berilgen.

Strukturalıq amplitudalardı esaplaw ushın qolaylastırılğan formulalardı ayırıp alğan jaqsı. Haqıyqatında da  $\cos^2 2\pi \frac{h+k+l}{4}$  tipindegi kóbeytiwshi rentgen nurların shashıratıwǵa  $h+k+l=2n-1$  shártin qanaatlandıratuǵın kristallografiyalıq tegislikler semeystvolarınıń qatnaspaytuǵınlıǵın bildiredi. Al  $\cos 2\pi \left( hx - \frac{h}{4} \right) \cos 2\pi \left( ky + \frac{h}{4} \right)$  kóbeytiwshisi bolsa  $h$  jup bolǵanda  $\cos 2\pi hx \cos 2\pi ky$  kóbeymesin beredi. Al  $h$  indeksiniń mánisi taq bolsa  $\sin 2\pi hx \sin 2\pi ky$  kóbeymesin alamız.



9-súwret. Simmetriyanıń keńisliktegi toparı  $Pnma(D_{2h}^{16})$  (qatar sanı 46-bolǵan topar)

jaǵdaydaǵı elementar qutı hám simmetriya elementleriniń óz-ara jaylasıwları.

Eń aqırında  $Pnnn$  toparı ushın tómendegidey qatnaslarǵa iye bolamız:

$h+k+l=2n$ bolǵanda	$A = 8 \cos 2\pi hx \cos 2\pi ky \cos 2\pi lz,$
	$B = 0.$
$h+k+l=2n-1$ bolǵanda	$A = 0,$
	$\sin 2\pi hx \sin 2\pi ky \sin 2\pi lz,$

Simmetriyanıń keńisliktegi  $Ima2$  toparı ushın tómendegidey maǵlıwmatlarǵa iye bolamız:

$h+k+l=2n$ hám $h=2n$ bolǵanda	$A = 8 \cos 2\pi hx \cos 2\pi ky \cos 2\pi lz,$
	$B = 8 \cos 2\pi hx \cos 2\pi ky \sin 2\pi lz,$
$h+k+l=2n$ hám $h=2n-1$ bolǵanda	$A = -8 \sin 2\pi hx \sin 2\pi ky \cos 2\pi lz,$
	$B = -8 \sin 2\pi hx \sin 2\pi ky \sin 2\pi lz,$



$h + k + l = 2n - 1$ bolǵanda	$A = 0$ hám $B = 0$ .
-------------------------------	-----------------------

## 10-§. Bazı bir juwmaqlar

Biz joqarıda rentgen nurlarınıń kristallıq denelerdegi difrakciyasınıń fizikalıq tiykarların qaradıq. Bul qubılıstı modellestiriw ushın tómendegidey úsh jaǵdaydı biliwdiń hám usı jaǵdaylar boyınsha barlıq esaplaw jumısların ótkeriwdiń shárt ekenligin kórdik:

- a) rentgen nurlarınıń atomlardagı shashırawı – atomlıq faktor;
- b) rentgen nurlarınıń elementar qutıdagı shashırawı – strukturalıq faktor;
- c) rentgen nurlarınıń kristallardagı shashırawı – Laueniń interferenciyalıq funkciyası.

Usı jaǵdaylardı esapqa alǵan halda biz joqarıda rentgenstrukturalıq tallawdıń tiykarǵı fizikalıq tiykarları menen matematikalıq apparatı haqqında gáp ettik. Bul óz gezeginde rentgendifrakciyalıq súwretlerdi modellestiriwge tolıq járdem beredi.

Biz rentgendifrakciyalıq súwretlerdi modellestiriw boyınsha oǵada kóp sanlı programmaların bar ekenligin bilemiz. Olardıń qatarına

SHELX (<http://shelx.uni-ac.gwdg.de/SHELX/index.html>),

Sir (<http://www.ba.ic.cnr.it/content/sir2011-v10-available>),

WinGX (<http://www.chem.gla.ac.uk/~louis/software/wingx/>),

Olex2 (<http://www.olex2.org/>),

Platon <http://www.chem.gla.ac.uk/~louis/software/platon/>,

Mercury <http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/mercury/> programmaları kiredi.

Usınıń menen birge elementar qutınıń parametrleriniń dálligin joqarılatıwǵa múmkinshilik beretuǵın kóp sanlı programmalar bar. Olardıń qatarına PowderCell programması kiredi (2.4-versiya). Bul programma Materiallardı izertlew hám testlew Federallıq intstitutında (Berlin qalası) doktorlar Gert Nolce hám Verner Krauslar tárepinen islep shıǵılǵan. Bul programma kristallıq strukturalar menen islesiwge hám sol strukturalarǵa sáykes keliwshi polikristallardıń rentgenogrammaların hám neytronogrammaların dúziw (esaplaw) ushın paydalanıladı.

Kristaldıń dóretilgen yamasa modifikaciyalangan modeliniń durıslıgınıń kriteriyi nátiyjelerdiń eksperimentlerde alınğan nátiyjeleri menen sáykes keliwinde bolıp tabıladı. Eksperimentallıq difraktogramma menen teoriyalıq nátiyjeniń birdey bolmawı haqıyqıy strukturanıń usınılıp atırğan modeliniń qollanıwǵa bolmawınıń tiykarǵı hám ayqın túrdegi sebebi bolıp tabıladı. Programma eksperimenttiń parametrlerin variaciyalawǵa múmkinshilik beredi (bunday parametrler qatarına paydalanılğan nurlanıw, eksperimenttiń geometriyası, anomallıq dispersiya, ólshemleri turaqlı yamasa ózgermeli bolǵan sańlaqlar, intensivlikti korrekciyalaw, fondı esapqa alıw, nurlanıwdıń dubletlik strukturası hám taǵı basqalar kiredi).

Programmanıń xarakteristikaları menen múmkinshilikleri mınalardan ibarat:

PowderCell programmasınıń járdeminde

- strukturalıq maǵlıwmatlardıń importınıń hár qıylı formatların paydalanıw (ICSD, SHELX, POWDER CELL);
- simmetriyanıń keńisliktegi gruppalarınıń 740 ten aslam tiplerin paydalanıp kristallıq strukturalardı kórsetiw;
- monoklinlik, ortorombalıq hám romboedrlik singoniyalar ushın keńisliklik gruppanıń bir tipin ekinshi tipke transformaciyalaw;
- barlıq Laue klassların hám translyaciyalıq podgruppaların generaciyalaw – simmetriyanıń tómenlewi menen júretuǵın fazalıq ótiwler menen basqa da effektlerdi úyreniw ushın oǵada qolaylı qural sıpatında;
- saylap alınğan atomlar menen molekulalardı aylandırıw hám translyaciyalaw jolı menen elementar qutı ishindegi strukturanı variaciyalaw;
- bir waqıtta rentgen hám neytron difraktogrammaların bir waqıtta kórsetiw;
- difrakciyanıń hár qıylı sharayatların imitaciyalaw (tolqın uzınlıǵı, dublettiń bóliniwi, eksperimenttiń geometriyası, ózgermeli sańlaqlar, kóp usharasatuǵın orientaciya, anomallıq shashıraw, fazalardıń qálegen kólemlik yamasa massalıq frakciyaları hám basqalar);
- hár qıylı svertka funkciyaların saylap alıw (difrakciyalıq maksimumlardıń hár qıylı profilleri);

- eksperimentallıq difraktogrammalardı esaplaw jolı menen alınğan difraktogrammalar menen grafikalıq jaqtan salıstırıw;
- kristallıq strukturalardı hám esaplangan difraktogrammalardı hám qıylı grafikalıq formatlarda eksportlaw (mısalı Windows Metafile, PostScript, POVRay);
- struktura ústinen islengen manipulyaciýalar (mısalı molekulanı aylandırıw) menen sáykes difraktogramma arasındadı óz-ara baylanıstı kórsetiw;
- difraktogrammalardı hár qıylı fayllıq formatlardı eksportlaw (mısalı Siemens Diffrac AT: \*.raw) [14-15].

Sistemanıń potentsiallıq energiyası menen eksperimentallıq difraktogrammanıń arasındadı ayırmanı globallıq optimizaciýalıw jolı menen strukturanı anıqlaw ushın arnalğan Endeavour 1.2, Crystal Impact atamasına iye jáne bir programmanı atap ótiw múmkin.

Joqarıda ayılğan programmalar menen bir qatarda monokristallıq úlgilerdiń lauegrammaları menen epigrammaların dúziw ushın arnalğan Single Crystal, polikristallıq úlgilerden alınatuğın difraktogrammalardı dúziw ushın arnalğan CrystalDiffract programmaların bar ekenligin atap ótemiz.

Joqarıda atamaları atalğan programmaların barlığı da rentgen nurlarında, elektronlar hám neytronlar tolqınlarında strukturalıq tallaw processiniń anaw yamasa mınaw máselelerin sheshiw ushın paydalanılıp atır. Rentgenstrukturalıq tallawdıń barlıq máselelerin tolıq sheshiwge arnalğan programma usı waqıtlarğa shekem dóretilmedi. Bul máseleleri sheshiw tómendegidey eki joldıń járdeminde ámelge asırılatuğın bolsa kerek:

1. Usı waqıtlarğa shekem dóretilgen programmaların tiykarında bir programma dóretiliw hám bunday jağdayda orınlanıwı tiyis bolğan máselege baylanıslı online rejimde esaplaw jumısların orınlaw hám nátiyjeler alıw;

2. Rentgenstrukturalıq tallawdıń eki etapın da óz ishine alatuğın (birinshi etapta kristallıq struktura, al ekinshi etapta elementar qutıdadı atomların koordinataları anıqlanadı) jańa programma dúziw.

Biz joqarıda atları atalğan programmaların strukturalıq tallawdıń birinshi etapına tiyisli ekenligin atap ótemiz.

Házir ǵana 1- hám 2-punktlerde keltirilgen máseleler oǵada úlken máselelerdiń qatarına kiredi. Olardı sheshiw ushın úlken ilimiy jámaátler talap etiledi.

## **II bab. Rentgendifrakciyalıq eksperimentlerdi kompyuterlik modellestiriw, tiykarǵı fizikalıq principler hám perspektivalar**

### **11-§. Modellestiriw máseleleri haqqında tiykarǵı talaplar**

Kompyuterlik modellerdegi logika menen formalizaciya úyreniletuǵın obekt-originaldıń (yamasa obektlerdiń klassın) tiykarǵı faktorların anıqlawǵa múmkinshilik beredi. Sonıń ishinde modelleniwshi fizikalıq sistemanıń ishki hám sırtqı parametrlerdıń hám baslanǵısh shártlerdiń ózgeriwlerine beretuǵın juwabın da izertlewdiń múmkinshiligi tuwıladı.

Kompyuterlik modeldi dúziw qubılıslardıń yamasa úyreniletuǵın obekt-originaldıń ayqın tábiyatın abstrakciyalawdı tiykar etip aladı. Ol eki etaptan turadı: dáslep sapalıq onnan keyin sanlıq modeller dúziledi. Eger kompyuterlik modelge qanshama áhmiyetli bolǵan qásiyetler kirgiziletuǵın bolsa, onda model reallıq modelge sonshama jaqın, bul modeldi paydalanıwshı sistema úlken múmkinshiliklerge iye boladı. Al kompyuterlik modellestiriw bolsa óz ishine kompyuterde ótkeriletuǵın esaplaw eksperimentleriniń seriyasınan turadı. Onıń maqseti modellestiriwdiń nátiyjelerin úyreniletuǵın obektin haqıyqıy qásiyetleri menen salıstırıw hám zárúrlık tuwılǵan jaǵdayda modeldi bunnan bılay jetilistiriw yamasa modeldiń dálligin joqarılatıwdan ibarat boladı.

Analitikalıq hám imitaciyalıq modellestiriwdi bir birinen ayırıw kerek.

Analitikalıq modellestiriwde haqıyqıy obektin matematikalıq (abstraktlıq) modelleri algebralıq, differenciallıq hám basqa da teńlemeler úyreniledi. Sonıń menen birge teńlemelerdiń dál sheshimleriniń alınıwı ushın bir mánisli esaplawlardı júrgiziwdiń usılları paydalanıladı.

Imitaciyalıq modellestiriwde algoritmler túrindegi matematikalıq modeller izertlenedi hám olar kóp sanlı elementar operaciyalardı ornlawdıń nátiyjesinde

izertlenip atırǵan sistemaniń arqaratuǵın funkciyasın (atqaratuǵın xızmetin) sáwlelendiredi.

**Kompyuterlik modellestiriwdiń artıqmashlıqları.** Kompyuterlik modellestiriw tómendegidey múmkinshiliklerdi jaratıp beredi:

- izertlenetuǵın obektlerdiń sanın hám túrlerin keńeytedi – nátiyjede haqıyqıy sharayatlarda júzege keltiriwge bolmaytuǵın qaytalanbaytuǵın qubılıslardı úyreniwdiń múmkinshilikleri (bunday qubılıslarǵa qaytımlı emes bir qatar termodinamikalıq qubılıslar kiredi), bolajaqta yamasa ótmishte júzege keletuǵın qubılıslar (mısalı Álemniń payda bolıwı menen onıń evolyuciyası) kiredi;

- qálegen tábiyatqa iye obektlerdi vizuaciyalaw (solardıń ishinde abstraktlıq qubılıslardı);

- processlerdi olardıń rawajlanıw dinamikası barısında izertlew;

- waqıttı basqarıw múmkinshiligi (waqıttıń ótiwin tezlestiriw yamasa ásteletiw hám taǵı basqalar);

- modeldi kóp sanlı sınap kóriw (hár saparı onı óziniń dáslepki halına qaytadan alıp keliw jolı menen);

- sanlı yamasa grafikalıq túrde obektiniń hár qıylı xarakteristikaların alıw múmkinshiligi;

- sınap (izertlenip) kóriletuǵın ekzemplıyaların soqpastan (payda etpesten) obektiniń optimallıq konstrukciyasın tabıw;

- adamniń den sawlıǵına yamasa ortalıqqa tásir etpeytuǵın eksperimentlerdi ótkeriw.

Kompyuterlik modellestiriwdiń tiykarǵı etapları.

Etaptıń ataması	Orınlanatuǵın jumıslar
1. Máseleniń qoyılıwı hám onı tallaw.	1.1. Modeldiń qanday maqsetler ushın dóretiletuǵınlıǵın ayqınlastırıw. 1.2. Eń dáslepki nátiyjelerdiń qanday bolatuǵınlıǵın hám olardı qanday túrde alıwdıń kerekligin anıqlaw.

	1.3. Modeldi dóretiw ushın qanday baslangısh maǵlıwmatlardıń kerek ekenligin anıqlaw.
2. Informaciyalıq modeldi dóretiw.	2.1. Modeldiń parametrlerin hám parametrlar arasındaqı óz-ara baylanıstı anıqlaw. 2.2. Berilgen máseleni sheshiw ushın parametrlardıń qaysılarınıń áhmiyetli ekenligin, al qaysıları esapqa almawǵa bolatuǵınlıǵın bahalaw. 2.3. Modeldiń parametrlari arasındaqı ǵárezliliklerdi (baylanıslardı) matematikalıq jaqtan táriyiplew.
3. Kompyuterlik modeldiń realizaciyası ushın usıldı hám algoritmdi islep shıǵıw.	3.1. Eń baslangısh nátiyjelerdi alıw usılın saylap alıw yamasa tolıq islep shıǵıw. 3.2. Saylap alınǵan usıldıń járdeminde nátiyjelerdi alıwdıń algoritmin dúziw. Algoritmniń durıslıǵın tekserip kóriw.
4. Kompyuterlik modeldi islep shıǵıw.	4.1. Algoritmniń kompyuterde programmalıq realizaciyasınıń quralların saylap alıw. 4.2. Kompyuterlik modeldi islep shıǵıw. 4.3. Dóretilgen kompyuterlik modeldiń durıslıǵın tekseriw.
5. Eksperimentti ótkeriw.	5.1. Izertlewdiń jobasın islep shıǵıw. 5.2. Dóretilgen kompyuterlik model bazasında (tiykarında) eksperimentler ótkeriw. 5.3. Alınǵan nátiyjelerdi tallaw. 5.4. Modeldiń prototipiniń qásiyetleri jóninde juwmaqlar shıǵarıw.

Eksperimentti ótkeriw processiniń barısında nelerdi islewdiń kerek ekenligin anıqlanadı:

- izertlewlerdiń planın korrektirovkalaw;

- máseleni sheshiwdiń basqa usılın saylap alıw;
- nátiyjelerdi alıw algoritmin jetilistiriw;
- informaciyalıq modeldiń dálligin joqarılatıw;
- qoyılğan máseleге ózgerisler kirgiziw.

Bunday jaǵdayda sáykes etapqa qaytıp keliw orın aladı hám process qaytadan baslanadı.

**Ámeliy jaqtan qollanıw.** Kompyuterlik modellestiriwdi tómendegidey máselelerdiń keń sheńberi ushın qollanadı (biz bul maǵlıwmatlardı mısallar sıpatında keltiremiz):

- atmosferadaǵı pataslanıwshı zatlardıń tarqalıwın tallaw;
- transportlıq kurallardı konstrukciyalaw;
- samolettiń pilotlarınıń (ushıwshılardıń) trenirovkaları (shınıǵıwları) ushın imitatorları;
- hawa rayın boljaw (prognozlaw);
- hár qıylı elektronlıq dúzilislerdiń jumısın emulyaciyalaw;
- aqsha bazarındaǵı bahalardı prognozlaw;
- imaratlar, konstrukciyalar menen detallardıń mexanikalıq basımlar astındaǵı qásiyetlerin izertlew;
- konstrukciyalar menen mexanizmlerdiń bekkemligi menen qıyrawınıń prognozi;
- óndirislik processlerdi proektlew (mısalı ximiyalıq óndiris processin);
- shólkemdi yamasa basqa da mákemeni strategiyalıq basqarıw;
- gidravlikalıq sistemanıń qásiyetlerin izertlew (nefteprovodlardı, gazoprovodlardı, vodoprovodtı);
- robotlardı hám avtomat manipulyatorlardı modellestiriw;
- fizikalıq processlerdi modellestiriw (tolqınlardıń hár qıylı ortalıqlardaǵı difrakciyası, haqıyqıy gazlerdegi, suyıqlıqlardaǵı yamasa qattı denelerdegi processler, fazalıq ótiwler, deformaciyalar, astrofizikalıq processler hám basqalar);

Joqarıda keltirilgen dizimdi ele de dawam ete beriwge boladı.

Hár qanday qubılıslardı modellestiriw processlerinde alınatuǵın nátiyjelerdiń dálligi menen isenimligine hár qıylı talaplardıń qoyılıwı múmkin. Mısalı binalardı,

samoletlerdi, sonıń menen birge difrakciyalıq qubılıslardı modellestirgende joqarı dállik talap etiledi. Al qalalardıń evolyuciyasın hám sociallıq-ekonomikalıq sistemalardı modellestirgende ayırıqsha úlken dállik talap etilmeydi.

## **12-§. Rentgenstrukturalıq analiz (tallow) ushın arnalǵan ayırım programmalar**

**SHELX** – monokristallıq rentgenografiyanıń maǵlıwmatları boyınsha kristallıq strukturanı anıqlaw hám sheshiw ushın arnalǵan programma. Birinshi programma Ullibritaniyalı kristallograf Djordj SHeldrik tárepinen 1960-jıllardıń aqırında jazılǵan edi [22] (ol házirgi waqıtları Germaniyadaǵı Gettingem universitetinde isleydi). Bul programma strukturanı rasshifrovkalawshı programmalar ishınlegi dúnyadaǵı eń kóp qollanılatuǵın programmalardıń biri bolıp tabıladı. Programma menen islesiw ushın .hkl keńeytiwshisine iye fayl (bul faylda kristaldan alınǵan difrakciyalıq tolqınlardıń intensivlikleri haqqındaǵı maǵlıwmatlar jaylasadı) hám .ins keńeytiwine iye fayl (bul faylda elementar qutınıń parametrleri, simmetriyanıń keńisliktegi gruppası hám juwıq túrdegi ximiyalıq quramı haqqındaǵı maǵlıwmatlar jaylasadı) qollanıladı. [16]

**Sir** (Semi-Invariants Representation) – rentgen difrakciyası yamasa elektronlar difrakciyası boyınsha islengen eksperimentler tiykarında alınǵan maǵlıwmatlardı paydalanıp onsha úlken emes monokristallıq strukturalardı anıqlaw hám alınǵan nátiyjelerdiń dálligin joqarılatıw ushın arnalǵan paket bolıp tabıladı. Bul Sir paketi dáslep tuwrı usıllar menen kristallıq strukturalar máselesin emperikalıq emes sheshiw ushın arnalǵan edi. Házirgi zaman versiyası basqa paketlerden gárezsiz paket bolıp, hár qıylı ólshemlerge hám quramalıqlarǵa iye (makromolekulalarǵa shekem) strukturalardı emperikalıq emes sheshiw ushın arnalǵan [17].

**WinGX** bolsa kishi molekular ushın monokristallrdaǵı rentgen difrakciyasın tallow hám dálligin joqarılatıw ushın arnalǵan programmalıq kompleks bolıp tabıladı. Bul kompleks Windows operaciyalıq sistemasınıń járdeminde isleydi. Kompleks SHELX-97 hám SirWare (SIR-97, SIR-2004) sıyaqlı házirgi zamandaǵı keń tarqalǵan kristallografiyalıq programmaları ushın unifikaciyalangá hám qolaylı grafikalıq interfareys bolıp tabıladı [18].



**Olex2** programası bolsa kishi molekulalardıń kristallıq strukturasına baylanıslı máselelerdi sheshiw hám strukturanıń dálligin joqarılatıw ushin arnalǵan qollanıwǵa ápiwayı programma bolıp tabıladı. Bul programma strukturalıq analiz, arxivlew hám esaplardı dóretiw ushın kóp sanlı qurallardı óziniń ishine aladı. Komplekstiń qabıǵına SHELX programmaların integraciyalaw múmkin. Bunday túrdegi kompleks tek joqarı isenimlikke iye bolıp qalmaq, basqa da múmkinshiliklerge iye boladı (struktura haqqındaǵı maǵlıwmatlardı sáwlelendiriw organikalıq hám metalloorganikalıq birikpeler menen islewdi jeńillestiriw)[19]

**Platon** programması SHELX programması menen birge islese alatuǵın programma bolıp tabıladı. Ol iqtıyarlı túrde berilgen geometriyalıq maǵlıwmatlar tiykarında avtomat túrdegi esaplawdı isley aladı (atomlar yamasa molekulalar arasındaǵı baylanıslardıń uzınlıǵı, torsionlıq múyeshler, koordinaciyalıq sferalardı, vodorodlıq baylanıslardı, basqa da kóp sanlı molekulalar arasındaǵı baylanıslardı tallaw hám taǵı basqalar). Sonıń menen birge Platon programması simmetriyanıń saylap alınǵan keńisliktegi gruppasın tekserip kóriw hám elementar qutılardı túrlendiriw ushın paydalanıladı [20].

**Mercury** programması bolsa kristallıq strukturalardı vizualizaciyalaw ushın arnalǵan programma bolıp tabıladı. Bul programma atomlar arasındaǵı qashıqlıqlardı, ximiyalıq baylanıslardıń geometriyasın, molekulalardı jaylastırıwdıń usılların anıqlawǵa járdem beredi hám strukturalıq maǵlıwmatlar boyınsha teoriyalıq poroshkogrammalardı (yamasa untalǵan kristallardan alınatuǵın difraktogrammalardı) dúze aladı [21].

### **13-§. Elementar qutınıń parametrleriniń dálligin joqarılatıw ushın arnalǵan basqa programmalar**

Elementar qutınıń parametrleriniń mánisleriniń dálligin joqarılatıw ushın arnalǵan kóp sanlı kompyuterlik programmalar bar. Joqarıda aytlıǵanday olardıń biri Germaniyada islep shıǵılǵan PowderCell programması bolıp tabıladı. Bul programma

kristallıq strukturalardı izertlewge járdem beretuǵın programma bolıp, sol polikristallıq materiallar ushın (yamasa untalǵan kristallar ushın) rentgenogrammalardı hám neytronogrammalardı esaplaydı.

Joqarıda gáp etilgenindey, kristaldıń dóretilgen modeliniń durıslıǵınıń kriteriyi esaplangan difraktogrammanıń eksperimentlerde alınǵan difraktogramma menen sáykes keliwi bolıp tabıladı. Eger esaplaw jolı menen alınǵan difraktogramma menen eksperimentte alınǵan difraktogramma arasında ayırma bolsa, onda bul jaǵday dóretilgen modeldiń durıs emes ekenliginiń ayqın belgisi bolıp tabıladı. PowderCell programması difrakciyalıq eksperimenttiń parametrlerin ózgeritiwge (variaciyalawǵa) múmkinshilik beredi.

Endi Endeavour 1.2, Crystal Impact kompyuterlik programması haqqında gáp etemiz.

ENDEAVOUR – untalǵan kristallar menen polikristallardıń difraktogrammasınıń tiykarında strukturalıq máseleni sheshiw ushın arnalǵan programma bolıp tabıladı. Bul másele esaplangan hám eksperimentlerde alınǵan difraktogrammalar arasındaǵı ayırmanı globalıq optimizaciyası menen sistemaniń potenciallıq energiyası menen kombinaciyalaw arqalı jumıs isleydi.

Programma difrakciyalıq eksperimentlerden alınatuǵın maǵlıwmatlardı difrakciyalıq piklerdiń ápiwayı dizimi túrinde paydalanadı (integrallıq intensivliktiń difrakciyalıq múyeshten gárezligi hám  $|F(hkl)|^2$  shamaları). Eki jaǵdayda da elementar qutınıń parametrlerin biliw shárt. Strukturanı esaplaw simmetriyanıń keńisliktegi gruppası P1 yamasa basqa bolǵan jaǵdaylarda orınlanadı. Barlıq jaǵdaylarda da "Symmetry Finder" alınǵan modeldegi eń joqarǵı keńisliktegi gruppanı anıqlay aladı.

Eger berilgen keńisliktegi gruppa P1 bolmasa, onda programma esaplaw processiniń barısında ayırım atomlardıń arnawlı poziciyalardaǵı orınların almastıra aladı.

Programma tek emperikalıq maǵlıwmatlar (eksperimentlerde alınǵan maǵlıwmatlar) tiykarında jumıs isley almaydı. Onıń tolıq esaplaw jumısların orınlawı ushın elementar qutınıń parametrlerin beriw kerek boladı.

Endeavour programmasınıń járdeminde eń aqırǵı kristallıq struktura hám esaplaw jumıslarınıń aralıqlıq nátiyjeleri Auto Build funkciyasın paydalanıw jolı menen beriledi. Nátiyjede elementar qutınıń ishindegi koordinatalar avtomat túrde generacijalanadı.

Bul programmanıń funkciyaları menen múmkinshilikleriniń tolıq túrdegi dizimi tómendegilerden ibarat:

Strukturanı esaplaw:

- standart difraktometrdiń járdeminde (yamasa elektronlıq hám netron tolqınlarında) alınǵan difrakciya haqqındaǵı maǵlıwmatlar tiykarında strukturanı esaplaw. Zárúr bolǵan maǵlıwmatlar: elementar qutınıń parametrleri,  $I(2\theta)$  pikleri yamasa difraktometrden tikkeley alınǵan maǵlıwmatlar, elementar qutı ishinde bolatuǵın atomlar (molekulanıń strukturası yamasa kompoziciyası plus formulalıq birliklerdiń sanı).

- arnawlı poziciyalardaǵı molekullıq strukturalardı (atomlıq strukturalardı da) esapqa alıw.

- molekullardıń úsh ólshemli strukturasınıń importı (vizualizaciyanıń házirgi zaman programmalaw qurallarınıń eń jiyi tarqalǵan formalarında).

- P1 keńisliktegi gruppadan joqarı gruppalar ushın strukturanı esaplawdıń barısında jeke atomlar ushın poziciyalardı avtomat túrde ózgeritiw.

- strukturanı esaplaw processine tez túrde kirisiw ushın Master den paydalanıw.

- strukturalıq máseleni sheshiwdiń barısında aralıqlıq nátiyjelerdi kóriw múmkinshiligine iye bolıw: progress (esaplaw jumıslarınıń qansha procentke orınlanǵanlıǵı), esaplanǵan hám eksperimentte alınǵan koorelyacijalanǵan pikler, strukturanıń túri hám difraktogramma.

- hár bir aralıqlıq adımnan keyin strukturanı vizualizacijalaw ushın "Auto Build" funkciyası.

- joqarıraq keńisliktegi gruppaga túrlendiriwde avtomat yamasa dialoglıq túrlendiriwge iye "Symmetry Finder".

Kristaldıń strukturasın vizualizaciya boyınsha múmkinshilikler:

- Isorganic Crystal Structure Data, Protein Data Bank, Cambridge Structural Database hám taǵı da basqa kristallıq strukturalar haqqındaǵı maǵlıwmatlar bazalarınıń fayllarınan struktura haqqındaǵı maǵlıwmatlardı import ete alıw.

- kristaldıń strukturası haqqındaǵı maǵlıwmatlar tiykarında polikristallardıń difraktogrammasın avtomat túrde esaplaw.

- strukturanıń parametrlerin qoldan ózgertiw múmkinshiligi.

- molekulardı yamasa olardıń fragmentlerin generaciyalaw.

- struktura kólemlik sáwlelendiriw rejimi, atomlardıń karkasları, tegis súwret; oraylıq hám parallel proekciya.

- fotorealistik modeller, materiallardı paydalanıw (Open GL texnologiyası), paydalanıwshı tárepinen jaqtılandırıwdı saylap alıw múmkinshiligi.

- berilgen kristallografiyalıq kósherdiń baǵıtında qaraǵanda yamasa (hkl) tegisliklerine parallel bolǵan strukturanıń túri (kórinisi).

- noutbuktı paydalanıwshılarda tachpadtıń (sensorlıq paneldiń) járdeminde strukturanı aylandırıw, jılıstırıw hám masshtablaw hám taǵı basqalar.

PowderCell 2.4 programmasınıń járdeminde alınǵan ayırım nátiyjelerdi keltiremiz. –súwrette BiFeO<sub>3</sub> kristalları ushın dúzilgen elementar qutınıń hám polikristallar difraktogramması berilgen. Esaplawlardıń nátiyjesinde alınǵan bul súwretlerdiń eksperimentlerde alınǵan nátiyjelerge dál sáykes kelgenligin atap ótemiz (10-súwret). Bunday nátiyjelerdi alıw ushın programmaǵa

structure data

initial data

BIFEO3

lattice constants

space-group No 160 setting 2 R 3 m atoms in cell: 8.0 (8 pos)

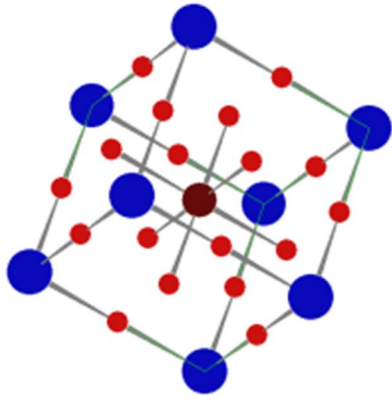
a	b	c	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$
3.9630	3.9630	3.9630	89.4300	89.4300	89.4300

cell vol: 62.231 E1 density: 9.628 g/cm3 rel. mass: 360.824 mass abs coef: 189.816 cm<sup>2</sup>/g

	name	Z	ion	Wyck	x	y	z	SOF	B (temp)
1	Bi	83	Bi	1a	1.00000	1.00000	1.00000	1.0000	0.0000
2	Fe	26	Fe	1a	0.50000	0.50000	0.50000	1.0000	0.0000
3	O	8	O	3b	1.00000	1.00000	0.50000	1.0000	0.0000
4	O	8	O	6c	0.50000	0.00000	0.50000	1.0000	0.0000
5	O	8	O	3b	0.50000	0.50000	1.00000	1.0000	0.0000

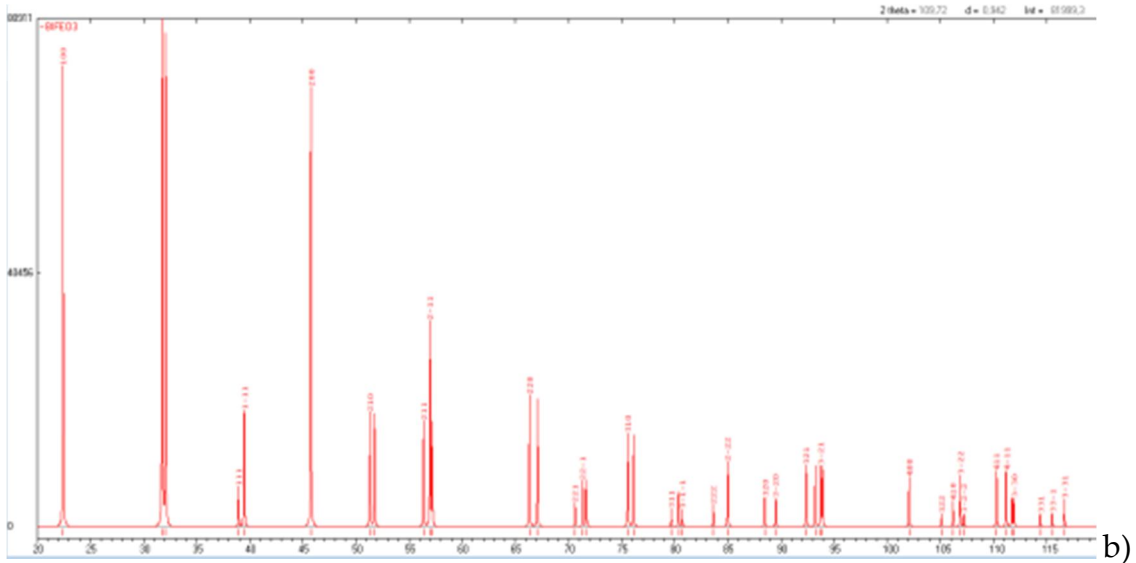
+ atom - atom comment ? Help X Cancel OK

túrindegi maǵlıwmatlar berildi (structure data).



10-súwret.

BiFeO<sub>3</sub> kristalları ushın alıńǵan elementar qutınıń súwreti (a) hám rentgen difraktogramması (b súwret). Qızıl reńli dóńgelekler O, fiolet reńdegi dóńgelekler Fe, al qońır reńli dóńgelek Bi atomlarına sáykes keledi.



## 14-§. Qaraqalpaq mámleketlik universitetiniń fizika kafedrasında dóretilgen kompyuterlik programmalar

1983-1988 jılları Qaraqalpaq mámleketlik universitetiniń rentgen nurları hám metallar fizikası kafedrasında "Iskra -1256" elektron-esaplaw mashinasınıń járdeminde, 1988-1991 jılları ulıwma fizika kafedrasında "Iskra – 1030" mashinasınıń járdeminde, 1991-jıllardan keyin ulıwma fizika kafedrasında házirgi zaman personallıq kompyuterleriniń járdeminde rentgen strukturalıq analizdiń máselelerin sheshiw ushın kompyuterlik programmalar dóretildi (ilimiy basshısı B.A.Abdikamalov).

Eń dáslepki programmalarınń járdeminde hár qıylı singoniyáǵa iye kristallar ushın Laue usılınıń járdeminde túsiriletuǵın rentgenogrammalardaǵı (lauegrammalardaǵı hám epigrammalardaǵı) Laue-refleksleriniń koordinataları esaplandı. Al difrakciyalıq kartinalar reflekslerdiń koordinataları boyınsha qaǵazda qol menen dúzildi.

Sol dáwirlerde programmalar proceduralıq Turbo Beysik (Turbo BASIC) tilinde jazıldı (<https://ru.wikipedia.org/wiki/Beysik>). Keyinirek programmalar kompillyaciyalanıwshı Paskal (Pascal) tiliniń 7-versiyası járdeminde jazıla basladı (avtorı Niklaus Wirth, [https://en.wikipedia.org/wiki/Pascal\\_\(programming\\_language\)](https://en.wikipedia.org/wiki/Pascal_(programming_language))). 2000-jıllardan keyin programmalarđ realizaciyalaw ushın Delphi tili qollanıldı (avtorı Andres Xeylsberg, shıqqan jılı 1995, adresi [https://en.wikipedia.org/wiki/Delphi\\_\(programming\\_language\)](https://en.wikipedia.org/wiki/Delphi_(programming_language))). Bul programmalar tili ózgeriwshilerdi qatań túrde statikalıq tipiziciyalawshı imperativlik, strukturalangan hám obektke orientirlengen programmalar tili bolıp tabıladı. 2002-jıllardan keyin rentgenstrukturalıq tallawdıń programmaları ushın dáslep Stiven Volfram tárepinen, keyinirek Wolfram Research kompaniyası tárepinen rawajlandırılğan Mathematica kompyuterlik algebra sisteması keńnen qollanıla basladı (5-versiyasınan 11-versiyasına shekem, [www.wolfram.com/mathematica](http://www.wolfram.com/mathematica) adresi [www.wolfram.com/mathematica](http://www.wolfram.com/mathematica)). Bul kompyuterlik algebra sisteması ilimiy, matematikalıq hám kompyuterlik oblastlarda keńnen qollanılp kelmekte.

Operativlik este saqlaw qábiletligi joqarıraq bolğan elektron-esaplaw mashinalarınıń payda bolıwı menen (bul 1989-jıllardan keyin) reflekslerdiń grafikalıq jollar menen kompyuterdiń ekranında shıǵarıla basladı. Usınıń menen bir qatarda rentgenogrammada payda bolatuǵın difrakciyalıq reflekslerdiń intensivligin esaplaw baslandı. Bunıń ushın atomlıq, strukturalıq faktorlardıń, qaytalanıw faktorınıń mánislerin esaplaw procedurası meńgerildi.

Házirgi waqıtları fizika kafedrası dep atalatuǵın kafedrada tómendegidey kristallar ushın rentendifrakciyalıq súwretti modellestiriw boyınsha jumıslar orındandı:

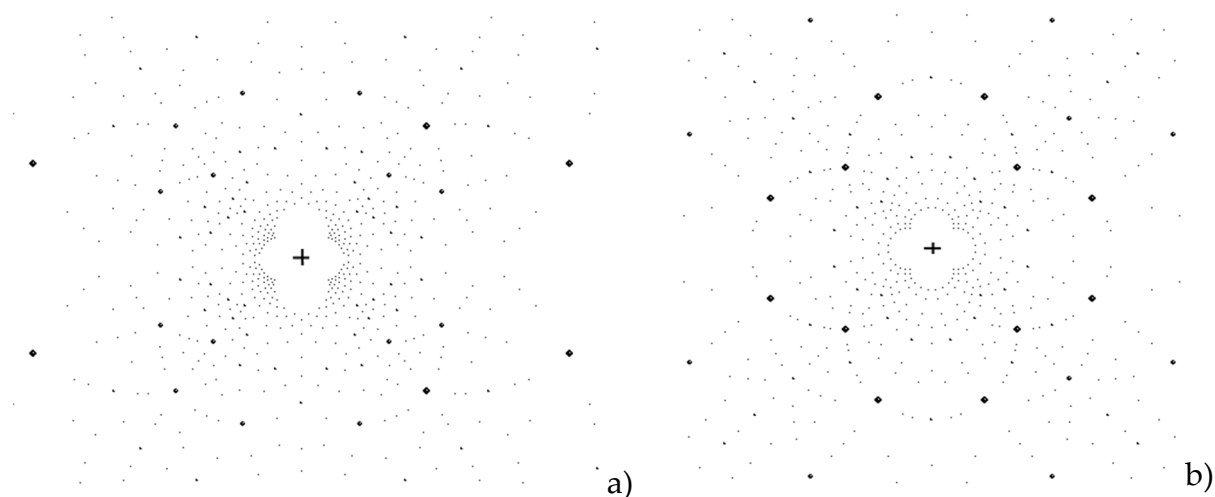
1. Kublıq, geksagonallıq hám politiplik ZnS jáne ZnSe kristalları – lauegrammalar, epigrammalar, terbelis hám aylanıw rentgenogrammaları, keń tarqalıwshı rentgen nurlarında alınatuǵın rentgenogrammalar, polikristallardan (untalğan kristallardan) alınatuǵın rentgen difraktogrammaları. Esaplawlardıń nátiyjelerinde alınğan rentgenogrammalar menen eksperimentlerde alınğan rentgenogrammalar arasında hesh qanday ayırma orın almadı.

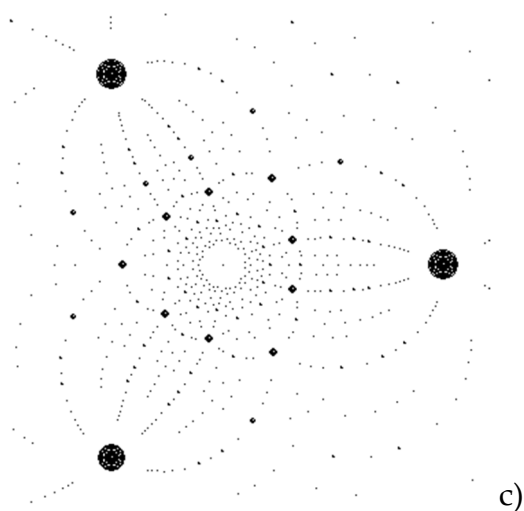
2. Birinshi punktte keltirilgen modellestiriw jumısları elementar qutısındaǵı atomlardıń sanı 10 nan aspaǵan qálegen singoniyáǵa iye, simmetriyanıń noqatlıq toparına, simmetriyanıń keńisliklik toparına kiriwshi monokristallar hám polikristallar ushın orınlandı hám alınǵan nátiyjeler eksperimentlerdiń nátiyjelerine tolıq sáykes keldi.

3. Birinshi punktte atap ótilgendeı modellestiriw isleri qorǵasın ortovanadatı  $[Pb_3(VO_4)_2]$  kristalları hám bunday kristallardaǵı ferroelastiklik fazalıq ótiwlerdi izertlew ushın orınlandı. Teoriyalıq hám esaplaw jolı menen alınǵan nátiyjeler eksperimentlerde alınǵan nátiyjelerge tolıq sáykes keldi. Usınıń nátiyjesinde qorǵasın ortovanadatı kristallarındaǵı ferroelastiklik fazalıq ótiwdiń kristallgeometriyası tolıq anıqlandı.

4. Birinshi punktte keltirilgen modellestiriw jumısları kaliy digidrofosfatı ( $KH_2PO_4$ ) hám bariy titanatı kristallarınıń rentgendifrakciyalıq súwretleri modellestiriw, sol kristallardaǵı ferroelektriklik fazalıq ótiwlerdiń kristallgeometriyasın izertlew ushın orınlandı. Alınǵan nátiyjeler eksperimentallıq nátiyjelerine tolıq sáykes keldi.

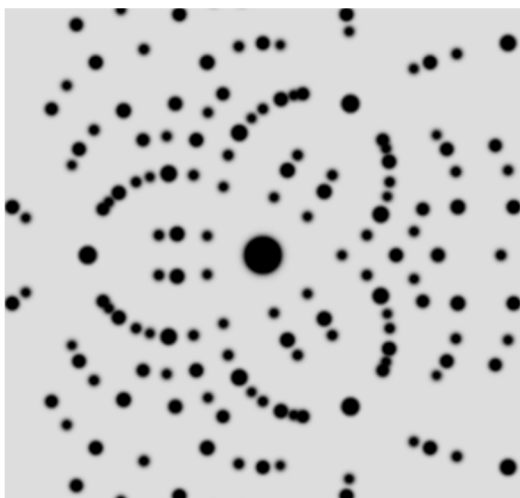
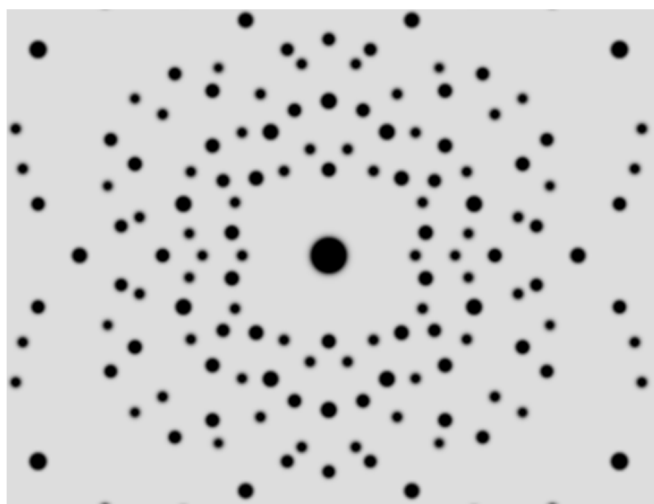
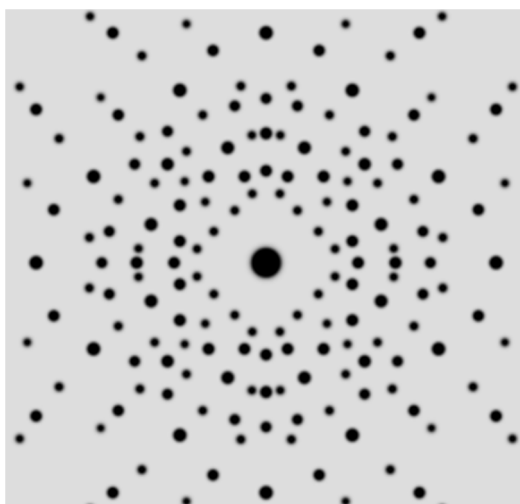
Biz tórende Delphi tilinde jazılǵan programlardıń járdeminde kublıq kristallar ushın dúzilgen hár qıylı rentgenogrammalardı keltiremiz. Kristaldıń simmetriyasın ayqın túrde kórsetiw ushın súwretlerdi  $[100]$ ,  $[110]$   $[111]$  baǵıtlarında túsirilgen modellik lauegrammalardı paydalanlıq.





11-súwret. Delphi tilinde kublıq kristallar ushın dúzilgen lauegrammalar. Kristalğa kelip túsiwshi rentgen nurları [100] (a), hám [110] (b) hám [111] bağıtlarına parallel.

Joqarıda keltirilgen modellik rentgenogrammalar (lauegrammalar) dúnya júzinde keńnen qollanılıp kiyatırǵan SingleCrystal 2.2.3 programmasınǵa járdeminde de alındı hám olar tómende keltirilgen 12-súwrette berilgen. Bul súwretlerdi salıstırw alınǵan modellik rentgenogrammalardıń derlik birdey ekenligin kórsetedi.



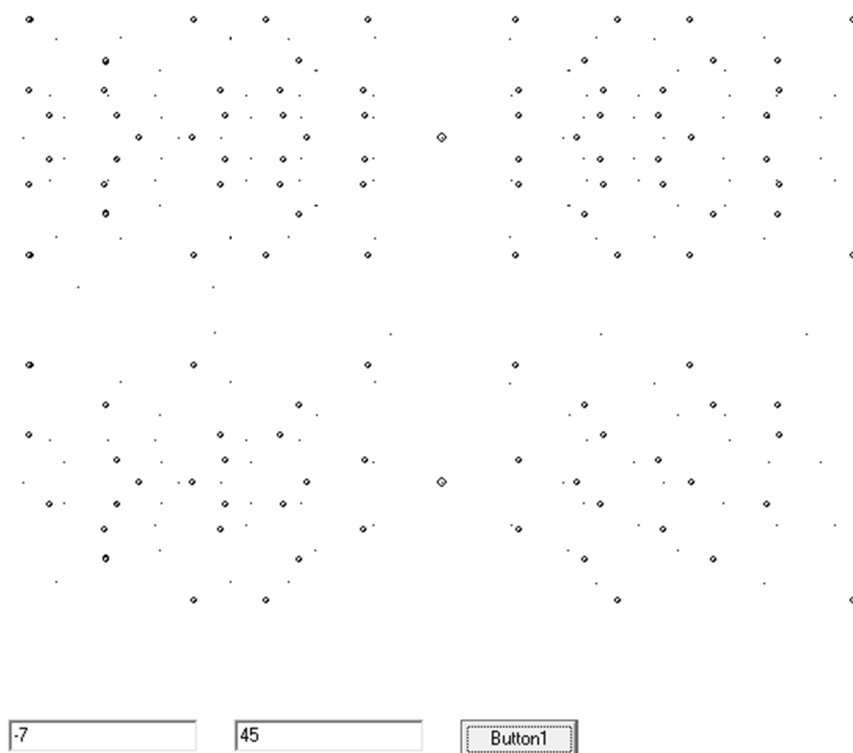
12-súwret.

SingleCrystal 2.2.3 programmasınǵa járdeminde alınǵan kublıq simmetriyaǵa iye NaCl kristalları ushın alınǵan modellik lauegrammalar. Súwretlerdiń jaylasıwları – súwrette keltirilgen izbe-izlikke sáykes keledi.

13-súwrette polisintetikalıq (joqarǵı súwret) hám monokristallıq (tómengi súwret) ZnS kristalları ushın dúzilgen terbelis rentgenogrammalarınıń modelleri keltirilgen.



Tómendegi súwret (monokristalldan alınğan súwret) polisintetikalıq kristallardı [23] jumısta keltirilgendey sxema boyınsha shama menen 18 procentke deformaciyalınğan (elastik deformaciya) kristallıq úlgilerden alınğan. Eki súwrette de kublıq [111] kósheri terbeliw kósherine parallel. Súwretlerdi salıstırğanda elastik deformaciyanıń saldarınan [111] kósherine perpendikulyar bolğan aynalıq simmetriya tegisliginiń joǵalatıwı kórinip tur.



13-súwret. Polisintetikalıq (joqarıdaǵı) hám monokristallıq ZnS kristallarınıń terbelis rentgenogrammalarınıń sanlıq modeli. Button1 arqalı terbeliw intervalınıń shekleri belgilengen.

### 15-§. Bazı bir perspektivalıq máseleler

Biz joqarıda házirgi waqıtları rentgenstrukturalıq analiz, elektronografiya hám neytronografiya boyınsha eksperimentlerdi modellestiriw boyınsha oǵada kóp sanlı matematikalıq programmalardıń bar ekenligin kórdik. Olar tiykarınan strukturalıq analizdiń anaw yamasa mınaw máselelerin sheshiw ushın baǵdarlanğan hám dálligi joqarı bolğan nátiyjelerdi beredi. Joqarıda keltirilgen programmalardıń derlik barlıǵı da

rentgenstrukturalıq analizdiń birinshi etapınıń máselelerin sheshiw ushın arnalǵan (atomlıq-kristallıq strukturanı elementar qutınıń qáddine shekem hám elementar qutınıń ishindegi atomlardıń sanın anıqlaw). Jumısta strukturalıq analizdiń ekinshi etapına (elementar qutınıń ishindegi atomlardıń koordinataların anıqlaw) tiyisli bolǵan jumıslar tallanbadı. Strukturalıq analizdiń ekinshi etapı arnawlı túrde orınlanatuǵın jumıslardan ibarat boladı hám olar tiykarı organikalıq zatlardan turatuǵın kristallardaǵı atomlardıń elementar qutıdaǵı koordinataların anıqlawdan ibarat boladı (mısalı bir elementar qutınıń qutınıń ishinde mırnlaǵan atomlar jaylasatuǵın jaǵdaylar, DNK, beloklar, quramalı organikalıq kislotalar hám basqalar).

Perspektivada strukturalıq analizdiń máselelerin kompleksli túrde sheshetuǵın programmalardı dúziwdiń maqsetke muwapıq bolatuǵınlıǵın atap ótemiz. Bunday jaǵdayda modellestiriw monokristallıq, polikristallıq zatlardan alınatuǵın hár qıylı geometriyalarǵa iye difrakciyalıq eksperimentlerdi, difrakciyaǵa ushırawshı nurlardıń kishi múyeshlerge shashırawın, ekstremallıq jaǵdaylarda alınatuǵın (joqarı yamasa tómengi temperaturalar menen basımlar, hár qıylı ionlastırıwshı nurlardıń tásirini hám basqalar) difrakciyalıq effektlerdi óz ishine qamtıǵan bolar edi.

Ekinshi másele atomlıq faktordıń mánisin, usı faktordıń difrakciyalıq múyeshlerdiń shamasınan ǵárezligin dál esaplaw máselesiniń sheshiliwinen ibarat. Usı waqıtlarǵa shekem dúzilgen programmalardıń hesh qaysısı da atomlıq faktorlardıń difrakciyalıq múyeshlerden ǵárezligin úlken dállikte esaplaw bere almaydı. Sebebi atomlıq faktor (form-faktor) kvantlıq fizikanıń, maydannıń kvantlıq teoriasınıń ádewir quramalı bolǵan máseleleriniń biri bolıp tabıladı. Bunday jaǵdayda fizika iliminiń hár qıylı tarawları boyınsha isleytuǵın qánigelerdiń birgelikte islewin shólkemlestiriw kerek boladı.

## Ulıwmalıq juwmaqlar

1. Rentgenstrukturalıq analizdiń difrakciyalıq eksperimentlerin modellestiriw máseleleri talqılandı. Jer júziniń úlken ilimiy laboratoriyalarında keńnen paydalanılıp atırǵan hám universitettiń fizika kafedrasında monokristallıq hám polikristallıq

úlgilerdi izertlew maqsetinde dóretilgen 20 dan aslam matematikalıq programmalar haqqında maǵlıwmatlar berildi. Programmalar arasındaǵı ulıwmalıq baylanıslar hám olar arasındaǵı principiallıq ayırmalar xaqqında gáp etildi.

2. Bir qatar programmalar boyınsha alınǵan difrakciyalıq súwretlerdiń modelleri bir biri menen salıstırıldı hám difrakciyalıq eksperimentlerdi modellestiriwdiń ulıwmalıq principleri, sonıń ishinde maǵlıwmatlardı grafikalıq súwretlewdiń, online rejiminiń artıqmashlıǵı atap ótildi.

3. Rentgenstrukturalıq analizdiń eksperimentlerin modellestiriwde tiykarǵı marshrut bolǵan atomlardáǵı rentgen nurlarınıń (elektronlardıń hám neytronlardıń) shashırawı (atomlıq faktor) → nurlardıń elementar qutıdaǵı shashırawı (strukturalıq faktor) → nurlardıń kristallıq denelerdegi shashırawı (Lauenıń interferenciyalıq funkciyası) marshrutınıń perspektivası ayqın túrde kórsetildi.

### **Paydalanılǵan ádebiyatlardıń dizimi**

1. Nojnov V.A. Model uchebnogo kursa. //Sbornik trudov Mejdunarodnoy nauchno-prakticheskoy konferencii ITO-2009.

2. B. P. Abbott et al. (LIGO Scientific Collaboration and Virgo Collaboration) (2016). «*Observation of Gravitational Waves from a Binary Black Hole Merger*». *Physical Review Letters* 116 (6).

3. Abbott, B. P. (15 June 2016). «[GW151226: Observation of Gravitational Waves from a 22-Solar-Mass Binary Black Hole Coalescence](#)». *Physical Review Letters* **116** (24).

4. A.Gine. Rentgenografiya kristallov. M. Gosudarstvennoe izdatelstvo fiziko-matematicheskoy literaturı. Moskva. 1961. 604 s.

5. R.Djeyms. Opticheskie principı difrakcii rentgenovskix luchey. M. Izdatelstvo inostrannoy literaturı. 1950. 572 s.

6. A.S.Efremov, V.I.Ivanov, G.A.Ryazankin, A.P.Karpenko, V.SH.SHextman. Avtomatizaciya obrabotki standartnix rentgenogramm s pomoshchyu EVM. Zavodskaya laboratoriya. 1984. 3 6. S. 46-47.

7. V.I.Ivanov, V.SH.SHextman. Obrabotka i rasshifrovka rentgenogramm kachaniya v rejime dialoga s EVM. Zavodskaya laboratoriya. 1984. 3 6. S. 47-50.
8. E.V.SHulakov. Rasshifrovka lauegramm v rejime dialoga s EVM. Zavodskaya laboratoriya. 1984. 3 6. S. 50-53.
9. D.E.Batova, V.I.Ivanov, A.V.Kopil, S.S.Xasanov, V.SH.SHextman, E.V.SHulakov. Modelirovanie rentgenogramm monokristallov s pomosh'yu EVM. Zavodskaya laboratoriya. 1984. 3 6. S. 53-56.
10. S.S.Gorelik, L.N.Rastorguev, YU.A.Skakov. Rentgenograficheskiy i elektronograficheskiy analiz metallov. MISIS. Moskva. 1994. 328 s.
11. Bokiyy G.B., Poray-Koshic M.A. Rentgeno-strukturnyy analiz. T. I. Izdatelstvo MGU. Moskva 1964. 489 s. Poray-Koshic M.A. Prakticheskiy kurs rentgeno-strukturnogo analiza. T. II. Izdatelstvo MGU. Moskva. 1960, 632 s.
12. Jens Als-Nielsen, Dec McMorrow. Elements of Modern X-Ray Physics. John Wiley & Sons, Ltd. 2001. 318 p.
13. Int.tables International Tables for Crystallography (2006).Vol.A, Space group 46, pp. 260–261.
14. PowderCell. <http://powdercell-for-windows.software.informer.com/2.4/>,  
<https://sites.google.com/site/ipprsoft/crystal-structure>
15. [W. Kraus](#) and [G. Nolze](#). [POWDER CELL - a program for the representation and manipulation of crystal structures and calculation of the resulting X-ray powder patterns](#). [J. Appl. Cryst.](#) (1996). [29](#), 301-303.
16. <http://shelx.uni-ac.gwdg.de/SHELX/index.html>
17. <http://www.ba.ic.cnr.it/content/sir2011-v10-available>
18. <http://www.chem.gla.ac.uk/~louis/software/wingx/>
19. <http://www.olex2.org/>
20. <http://www.chem.gla.ac.uk/~louis/software/platon/>
21. <http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/mercury/>
22. [https://en.wikipedia.org/wiki/George\\_M.\\_Sheldrick](https://en.wikipedia.org/wiki/George_M._Sheldrick)
23. SHextman V.SH., SHmitko I.M., Aristov V.V., Abdikamalov B.A. Strukturnie izmeneniya pri odnoosnom sjatii polisinteticheskix kristallov ZnS. Fizika tverdogo tela. T. 18. № 5. 1976 S.1358-1361.

24. [https://en.wikipedia.org/wiki/William\\_Henry\\_Bragg](https://en.wikipedia.org/wiki/William_Henry_Bragg)

[http://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/physics/laureates/1915/index.html](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1915/index.html)

25. [https://en.wikipedia.org/wiki/William\\_Lawrence\\_Bragg](https://en.wikipedia.org/wiki/William_Lawrence_Bragg)

# ÁMELİY SABAQ MATERIALLARI

## Mazmunı

Kirisiw.

I bap. rentgen nurlarınıń kristallıq denelerdegi difrakciyasınıń fizikalıq tiykarları hám matematikalıq modellestiriw máseleleri.

1-§. Kristallıq denelerdiń simmetriyasın anıqlaw.

2-§. Kristallıq pánjerelerdiń turaqlılıarın anıqlaw.

3-§. Fazalıq tallaw mashqalaları.

4-§. Polikristallıq usıldıń fizikalıq principi.

5-§. Polikristaldagı difrakciyağa ushırağan tolqınlardı registraciyalaw usılları. Difrakciyalıq súwretti fotografıyalıq registraciyalaw usılı.

6-§. Cilindrlik kameranı qollangandağı debaegramma túsiriwdiń geometriyası.

7-§. Debay sızıqlarınıń intensivliginiń hár qıylı faktorlarğa baylanısı.

8-§. Spektrdiń  $K_{\alpha}$  hám  $K_{\beta}$  sızıqların ayırıw. Nurlanıwdı monoxromatizaciyalaw.

9-§. Difrakciyalıq súwretti rentgen difraktometriniń járdeminde registraciyalaw.

**10-§.** I bap boyınsha ulıwmalıq juwmaqlar.

II bap. PowderCell hám CrystalDiffract programmaların polikristall úlgilerdiń atomlıq-kristallıq strukturasını anıqlaw ushın paydalanıw.

11-§. PowderCell 2.4 programmasınıń xarakteristikaları hám múmkinshilikleri.

12-§. Birinshi etap – strukturanıń modelin dúziw.

13-§. Ekinshi etap (teoriyalıq rentgenogrammanı dúziw hám strukturanı anıqlaw.

14-§. CrystalDiffract programması hám onıń járdeminde alınan nátiyjeler.

Ulıwmalıq juwmaqlar.

Paydalanılğan ádebiyatlar dizimi.

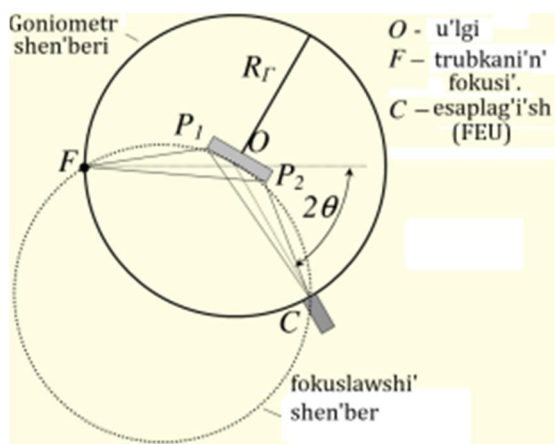
## Kirisiw

Qattı deneler fizikası menen fizikalıq materialtıń rawajlanıwında rentgenostrukturalıq analizdiń tutqan ornı oǵada ullı. 1912-jılı M. fon Laue, (M. von Laue), V.Fridrix (W.Friedrich) hám P.Knipping (P.Knippung) tárepinen kristallardaǵı rentgen nurlarınıń difrakciyası qubılısı ashıldı hám ilimiy ashılıw kristallıq obektlerdegi atomlar menen molekularardıń tártip penen, belgili nızamlar boyınsha tártipli jaylasqanlıǵı haqqındaǵı birinshi eksperimentallıq maǵlıwmatlardı berdi. Rentgen nurları difrakciyasınıń birinshi eń ápiwayı teoriyası (bul teoriyanı kinematikalıq teoriya dep ataydı) 1913-jılı Laue tárepinen berildi [1]. Usı jılı U.L.Bregg (W.L.Bragg) hám G.V.Vulf rentgen nurlarınıń difrakciyasın kristaldaǵı bir birine parallel bolǵan atomlıq tegislikler sistemasındaǵı shashırawı dep interpretaciyaladı hám Vulf-Bregg shárti dep atalatuǵın rentgenografiyadaǵı eń tiykarǵı bolǵan

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

formulasın keltirip shıǵardı. Bul ańlatpada  $d$  arqalı berilgen kristallografiyalıq tegislikler semeystvosı ushın tegislikler arasındaǵı qashıqlıq,  $\theta$  arqalı difrakciyalıq múyesh (shagılısıw múyeshi) hám  $\lambda$  arqalı rentgen nurlarınıń tolqın uzınlıǵı belgilengen.  $n = 1, 2 \dots$  (pútin sanlar). (1)-teńlemenı Vulf-Bregg shárti yamasa Bregg nızamı dep ataydı [2].

Bir qansha ilimiy hám oqıw ádebiyatlarında Vulf-Bregg teńlemesinde difrakciyalıq múyeshi  $\vartheta$  arqalı da belgileydi. Biz bul jumısımızda difrakciyalıq múyeshi  $\theta$  arqalı belgileymiz (1-súwret).



1-súwret.

Rentgen difraktometriniń optikalıq sxeması [3].

1914-jılı CH.Darvin (Ch.Darvin) rentgen nurlarınıń difrakciyasınıń dinamikalıq teoriyasınıń tiykarın dóretti. Bunnan keyin 1917-jılı P.Evald (P.Ewald) ortalıqtır noqatlıq dipolleri menen nurlanıw maydanı arasındagı bir biri menen kelisilgen teoriyasın islep shıqtı (rus tilinde "teoriya samosoglasovannogo vzaimodeystviya tochechnıx dipoley sredi i polya izlucheniya" dep ataladı). 1931-jılı M.Laue rentgen nurlarınıń difrakciyasın nurlanıwdır polyarizaciyanıwshılıgı úsh ólshemli dáwirli  $\chi(r, \omega)$  bolgán ortalıqta tarqalıwınıń elektrodinamikalıq máselesi sıpatında sheshiw menen shugıllandı [4].

Nátiyjede XIX ásirdeń ekinshi yarımında rawajlangán fizikalıq kristallografiya eksperimentallıq tastıyqlanıwga iye boldı. Dárhál rentgen difraktometriyası, keyinirek rentgen topografiyası qalıplesti hám tez pátler menen rawajlana basladı. Ilimpazlar kristallıq denelerdegi difrakciyaga ushırağan nurlardıń intensivligin úyreniw menen sol denelerdeń atomlardır qanday nızamlıqlar menen jaylasqanlıgın anıqlaw usılların islep shıqtı. Dáslepki dáwirlerde kristallıq pánjereniń oraylasıwları (kólemde, qaptalda, bazada oraylasqan kristallıq qurılıslar, kristallıq pánjereler), keyinirek quramalı organikalıq ximiyalıq birikpelerdegi atomlardır elementar qutılardıgı koordinataları anıqlana basladı. Sońgı 10 jil ishindegi DNK molekularınıń qurılısın anıqlaw boyınsha orınlangán jumıslar bul bağdardagı islengen jumıslardıń eń joqargı shırı bolıp tabıladı dep esaplanadı.

Rentgen nurlarınıń difrakciyası tiykarında dóretilgen barlıq usıllardıń jıynağın (rentgen plenkasında difrakciyalıq súwretlerdeń alınıwı, rentgen topografiyasınıń kóp sanlı sxemaları, rentgen difraktometriyası, parallel dástelerdegi hám tarqalıwshı dástelerdegi rentgen nurlarınıń difrakciyası, kristallardıgı elektronlıq tıgızlıqtardıń



izertleniwi, rentgen nurlarınıń difrakciyasınıń kinematikalıq hám dinamikalıq teoriyaları hám usıǵan sáykes usıllar) biz bir sóz benen kristallar rentgenografiyası yamasa rentgeno-strukturalıq analiz dep ataymız.

Kópshilikke belgili bolǵan enciklopedyalarda (mısalı internet tarmaǵındaǵı universallıq vikipediya enciklopediyası, maqalanıń adresi [https://ru.wikipedia.org/wiki/rentgenostrukturniy\\_analiz](https://ru.wikipedia.org/wiki/rentgenostrukturniy_analiz) tómendegidey maǵlıw-matlar keltirilgen:

Rentgenostrukturalıq analiz (rentgenodifrakciyalıq analiz) zatlardıń strukturasını difrakciyalıq izertlew usıllarınıń biri bolıp tabıladı. Bul usıldıń tiykarında úsh ólshemli kristallıq pánjeredegi rentgen nurlarınıń difrakciyası qubılısı jatadı. Kristallardaǵı rentgen nurlarınıń difrakciyası qubılısın Laue ashtı, qubılısqa teoriyalıq tiykardı Vulf penen Bregg berdi (Vulf-Bregg shárti). Usıl sıpatında rentgenostrukturalıq analiz Debay menen SHerrer tárepinen islenip shıǵılǵan.

Usıl zatlardıń atomlıq strukturasını anıqlawǵa múmkinshilik beredi. Ol óz ishine elementar qutınıń simmetriyasınıń keńisliklik gruppasını, onıń ólshemlerin, jáne kristaldıń simmetriyasını anıqlawǵa múmkinshilik beredi.

Rentgenostrukturalıq analiz óziniń ápiwayılıǵı hám salıstırmalı arzanlıǵına baylanıslı usı kúnlerge shekem zatlardıń strukturasını anıqlaw ushın paydalanılatuǵın eń keń tarqalǵan usıl bolıp tabıladı.

Usıldıń túrleri:

Laue usılı. Monokristallardı izertlew ushın qollanıladı. Monokristal úlgige úzliksiz spektrge iye rentgen nuri túsiriledi. Nurlardıń dástesiniń baǵıtı menen kristaldıń baǵıtı ózgerissiz qaladı. Difrakciyaǵa ushıraǵan nurlanıwdıń rentgen plenkasındaǵı tarqalıwı ayırım difrakciyalıq daqlar túrinde boladı. Alınǵan rentgenogrammanı lauegramma dep ataydı.

Rentgen plenkalarındaǵı difrakciyalıq daqlardıń kontrastlıǵı boyınsha difrakciyaǵa ushıraǵan rentgen nurlarınıń intensivligin anıqlaw úlken qáteliklerdi óz ishine aladı. Sebebi intensivlik penen fotoplenkanıń qarawıtıwı arasında tuwrı proporcionallıq baylanıs joq.

Rentgendifraktometriyalıq usıl. Rentgen difraktometriniń eń áhmiyetli bólimi rentgen goniometri bolıp tabıladı. Difrakciyaǵa ushıraǵan rentgen nurlarınıń intensivligi  $I$  fotoelektronlıq kóbeytkishlerine (proporcionallıq kóbeytkishlerge) iye apparaturanıń járdeminde ólshenedi. SHın mánisinde rentgen difraktometri  $I(2\theta)$  gárezligin izertleydi. Házirgi zaman rentgen difraktometrleri difrakciyaǵa ushıraǵan rentgen nurlarınıń intensivligin de,  $\theta$  difrakciyalıq múyeshtiń de mánislerin joqarı dállikte ólshey aladı.

Xarakteristikalıq rentgen nurları paydalanılatuǵın Debay-SHerer usılı polikristallardıń, untalǵan kristallardıń hám olardıń aralaspalarınıń strukturasını izertlew ushın qollanıladı. Izertlenetuǵın úlgi deǵi mayda kristallardıń kelip túsiwshi rentgen nurınıń dástesiniń baǵıtına salıstırǵandaǵı xaotikalıq (tártipsiz) orientaciyaları (baǵıtları) difrakciyalanǵan nurlardı koaksiallıq konuslardıń semeystvosına aylandıradı. Bul konuslardıń kósheri kelip túsken rentgen nurlarınıń dástesine sáykes keledi. Fotoplenkadaǵı difrakciyaǵa ushıraǵan nurlardıń qaldırǵan izleri koncentrik saqıynalar túrinde bolıp, olardıń fotoplastinkadaǵı (debaegrammadaǵı) jaylasıwları menen intensivlikleri izertlenilip atırǵan zattıń atomlıq-kristallıq strukturası hám substrukturası haqqındaǵı maǵlıwmatlardı beredi.

Joqarıda keltirilgen Vikipediya universallıq enciklopediyasınan alınǵan hám bar qansha tolıqtırılǵan maǵlıwmatlar rentgenostrukturalıq analiz haqqında kóp informaciyalardı esapqa almaǵan. Máselen rentgengoniometrlik usıllar (Veysenberg usılı, kerı pánjereniń fotosúwretin túsiriw usılı), kishi múyeshlerge rentgen nurlarınıń shashırawın izertlew usılları, rentgen topografiyalıq usıllar sıyaqlı fizikalıq materialtanıwda keń túrde qollanılatuǵın basqa da usıllar haqqında gáp etilmegen.

Sonıń menen birge sońǵı waqıtları kompyuterler menen matematikalıq programmalaw tilleriniń keskin túrde rawajlanıwına baylanıslı qalıplesken hám jedel rawajlanıp baratırǵan rentgendifrakciyalıq súwrettiń payda bolıwın matematikalıq modellestiriw usılları, usınday usıllardıń járdeminde zatlardıń atomlıq-kristallıq strukturası menen substrukturasın úyreniw máseleleri keń túrde rawajlanıp atır.

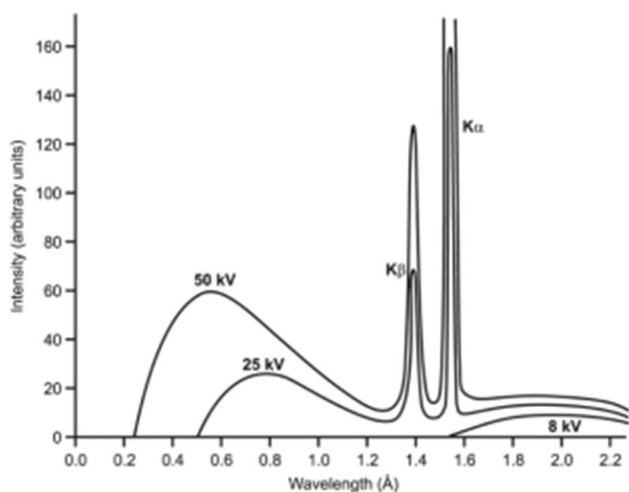
Bul jumısıta kompyuterlik programmalardıń járdeminde polikristallar menen untalǵan kristallardıń rentgendifrakciyalıq súwretlerin (Debay-SHerer usılı menen

rentgendifrakciyalıq usıllar) payda etiw, bul súwretlerdiń járdeminde zatlardıń atomlıq-kristallıq strukturasını anıqlaw, hátte elementar qutıdaǵı atomlar menen ionlardıń koordinatalarınıń dál mánislerin alıw máselelerin sheshiwge úles qosıw maqsetinde orındandı. Jumısta rentgen nurlarınıń kristallıq zatlardaǵı difrakciyasınıń fizikalıq tiykarları, házirgi waqıtları izertlewshiler tárepinen keń túrde qollanılıp kiyatırǵan PowderCell hám CrystalDiffract kompyuterlik programmaların ayqın strukturalıq máselelerdi sheshiwde qollanıw mashqalaları tallanadı. Bul maqsette PowderCell programmasınıń 2.4-versiyası, al CrystalDiffract® for Windows, version 1.4.7 paydalanıldı.

## **I bap. rentgen nurlarınıń kristallıq denelerdegi difrakciyasınıń fizikalıq tiykarları hám matematikalıq modellestiriw máseleleri**

### **1-§. Kristallıq denelerdiń simmetriyasın anıqlaw**

Rentgenostrukturalıq analizde sheshiliwi kerek bolǵan izertlew usılınıń optikalıq ózgesheliklerine baylanıslı rentgen nurlarınıń spektrindegı polixromatlıq (tormozlıq), xarakteristikalıq nurlar hám arnawlı monoxromatorlardıń járdeminde bólinip alınǵan xarakteristikalıq nurlar qollanıladı. Usı jaǵdayǵa baylanıslı 2-súwrette rentgen trubkasınan rentgen nurınıń spektri, al 3-súwrette polikristallar rentgenografiyasınıń járdeminde sheshiliwi múmkin bolǵan máselelerdiń dizimi berilgen.



2 - súwret.

Anodı mıs bolğan trubkadan shıqqan rentgen nurlarınıń spektri [7].

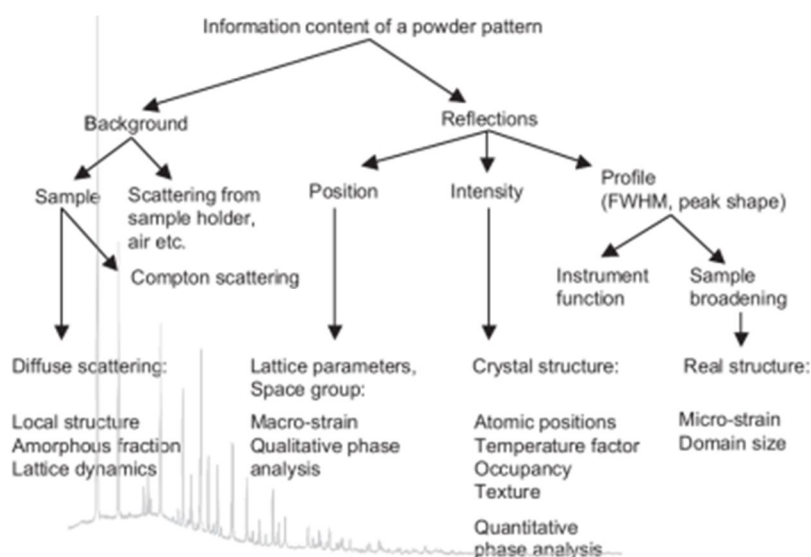
$K_{\alpha}$  spektrallıq sızığı uzınlıqları 1,54051 hám 1,54433 Å bolğan eki sızıqtan turadı,

$$\lambda_{\alpha} = 1,5418 \text{ \AA}.$$

$$\lambda_{\beta} = 1,39217 \text{ \AA} [5-6].$$

Kristallar rentgenografiyasında kristallıq denelerdiń (kristallıq pánjereniń elementar qutısınıń) simmetriyasın anıqlaw birinshi gezekte Laue usılıniń járdeminde sheshiledi.

Laue usılı járdeminde kristallardıń simmetriyanıń 11 Laue toparınıń qaysısına kiretuǵınlıǵı, kristallografiyalıq kósherlerdiń rentgen kamerasına salıstırǵandaǵı baǵıtları anıqlanadı. Bul usıl elementar qutıdaǵı simmetriya orayınıń bar yamasa joq ekenligin ayıra almaydı. Sebebi kristaldıń difrakciyalıq simmetriyası onıń simmetriyasınıń noqatlıq gruppasınan barlıq waqıtta da joqarı boladı. Difrakciyalıq simmetriya noqatlıq simmetriyanıń, inversiya orayınıń hám teńdey tásir etiwshi simmetriya elementleriniń qosındısınan turadı.



3 - súwret. Polikristallar (untalǵan kristallar) rentgenografiyasınıń járdeminde shishiliwi múmkin bolğan máseleler [7].

Simmetriyanıń 32 noqatlıq gruppaları ishinde inversiya orayına iye 11 noqatlıq gruppalar bar. Usınıń nátiyjesinde difrakciyalıq simmetriyanıń barlıǵı bolıp 11 hár qıylı gruppaları ǵana boladı. Noqatlıq toparlardı difrakciyalıq klasslarǵa bóliw [6]

Rentgenostrukturalıq analizde "qalıń kristallar" hám "juqa kristallar" túsinikleri jiyi qollanıladı. Bul túsinikler izertleniwshi kristallıq zattıń ximiyalıq quramına da baylanıslı. Jutilıwdıń saldarınan qalıń kristallar arqalı rentgen nurları, sonıń ishinde difrakciyaǵa ushıraǵan rentgen nurları derlik ótpeydi. Bunday jaǵdayda kristaldıń betlik qatlamında difrakciyaǵa ushıraǵan rentgen nurların izertlew (bunday jaǵdayda  $2\theta$  múyeshiniń mánisi  $90^\circ$  tan úlken hám usıǵan baylanıslı fotoplenka rentgen nurları deregi tárepte jaylastırıladı). Alınǵan difrakciyalıq súwretti epigramma (keri lauegramma) dep ataydı. Juqa kristallıq úlgiler izertlengende difrakciyalıq múyeshlerdiń shaması kishi hám alınǵan difrakciyalıq súwretti lauegramma dep ataydı.

Lauegrammalar menen epigrammalardı kompyuterlerdiń járdeminde modellestiriw máselesi (yaǵnıy izertlenip atırılǵan kristaldıń strukturası, kelip túskен rentgen nurlarınıń dástesine salıstırǵandaǵı baǵıtı hám rentgenogrammada alınǵan difrakciyalıq daqlardıń koordinataları menen intensivliklerin anıqlaw) Rossiya Ilimler Akademiyası Qattı deneler fizikası institutınıń strukturalıq tallaw laboratoriyası xızmetkerleri tárepinen qarap shıǵıldı [8-11]<sup>1</sup>. Bul másele Qaraqalpaq mámleketlik universitetiniń ulıwma fizika kafedrasında da bir qansha rawajlandırıldı [19].

## **2-§. Kristallıq pánjerlerdiń turaqlılıarın anıqlaw**

Bul másele tiykarınan terbeliw yamasa aylanıw rentgenogrammaların túsiriw járdeminde (monokristallar izertlengende), rentgen difraktometriniń (qálegen túrdegi kristallar izertlengende) hám Debay-SHerer usılı járdeminde (polikristallıq hám untalǵan kristallar izertlengende) anıqlanıwı múmkin.

Birinshi jaǵdayda rentgen kamerasında Laue usılıniń járdeminde izertleniletuǵın obektiń bir kristallografiyalıq kósheri rentgen kamerasınıń aylanıw yamasa terbeliw kósheri menen betlestiriledi hám usı kósherdiń baǵıtındaǵı kristaldıń qaytalanıw dáwiri

---

<sup>1</sup> Bul jumısta "tallaw" menen "analiz" sózleri birdey mániste paydalanıladı.

(yaǵnıy kósherge perpendikulyar bolǵan kristallografiyalıq tegislikler arasındaǵı qashıqlıq) ápiwayı formulalar járdeminde anıqlanadı [6]. Al basqa kósherler baǵıtındaǵı turaqlılar sol kósherlerdi kameranıń aylanıw yamasa terbeliw kósheri menen betlestirilgen jaǵdaylarda esaplanadı.

Aylanıw (terbeliw) rentgenogrammalarındaǵı difrakciyalıq daqlardıń qatlamlıq sızıqlar boyınsha jaylasatugınlıǵın esletip ótemiz.

Aylanıw (terbeliw) rentgenogrammalarınıń járdeminde kristal ushın pánjereniń tipin de, simmetriyanıń keńisliktegi toparın da anıqlawǵa boladı. Bul usıl simmetriyanıń keńisliktegi hár bir toparı ushın belgili bir óshiw qaǵıydalarınıń bar ekenligine tiykarlangan. Terbeliw rentgenogramması standart usıllar járdeminde indekslenip, múmkin bolǵan difrakciyalıq daqlardı beretuǵın barlıq kristallografiyalıq tegislikler semeystvolarınıń indeksleri hkl jıynaǵı anıqlanadı hám óshiw qaǵıydaları menen salıstırıladı.

Rentgen nurlarınıń óshiw qaǵıydaları "strukturalıq faktor" dep atalatuǵın hám  $F_{hkl}$  arqalı belgilenetuǵın faktordıń shaması menen baylanıslı. Onı

$$F_{hkl} = \sum_{k=1}^N f_k e^{i2\pi(hx_k + ky_k + lz_k)}$$

formulasınıń járdeminde esaplanadı [21]. Bul formulada  $f_k$  arqalı elementar qutıdaǵı  $k$ -atom ushın "shashırawdıń atomlıq faktori",  $h, k, l$  arqalı Miller indeksleri, al  $x_k, y_k, z_k$  shamaları arqalı  $k$ -atomnıń elementar qutıdaǵı koordinataları belgilengen.

Eger elementar qutı simmetriya orayına iye bolatuǵın bolsa, onda koordinataları  $x_k, y_k, z_k$  shamalarına teń bolǵan xár bir atom ushın koordinataları  $\bar{x}_k, \bar{y}_k, \bar{z}_k$  shamalarına teń atom tabıladı. Sonlıqtan jokarıdaǵı ańlatpa

$$F_{hkl} = 2 \sum_{k=1}^{N/2} f_k \cos 2\pi(hx_k + ky_k + lz_k)$$

ańlatpasına iye bolamız. Usı formuladan kelip shıǵatuǵın úsh jaǵdaydı keltirip ótemiz:

1). Ápiwayı pánjerege iye kristallar ushın  $h, k$  hám  $l$  indekslerine shárt qoyılmaydı. Usınıń nátiyjesinde rentgenogrammada qálegen mániske iye  $h, k$  hám  $l$  indeksli difrakciyalıq daqlar tabıladı.

2). Qaptaldan oraylasqan pánjereler ushın bul indeksler bir waqıtta ya jup, ya taq bolıwı kerek, yaǵnıy bir waqıtta  $h + k = 2n$ ,  $h + l = 2n$ ,  $k + l = 2n$  shártleriniń orınlanıwı kerek (bul ańlatpalarda  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ ). Demek  $h, k, l$  shamaları (Miller indeksleri) bir waqıtta taq yamasa jup mánislerge iye bolıwı shárt.

3). Kólemde oraylasqan kristallar ushın  $h + k + l$  qosındısı jup mániske iye bolıwı shárt. YAǵnıy  $h + k + l = 2n$ .

Bazada oraylasqan yamasa quramalı bolǵan basqa da atomlıq-kristallıq qurılısqa iye bolǵan kristallar izertlengende orın alatuǵın  $h, k, l$  koefficientlerine qoyılatuǵın shártler Kristallografiya boyınsha xalıq aralıq kestelerde berilgen [12].

Usı aytılp ótken jaǵdaylarǵa baylanıslı rentgenogrammalar indekslenennen keyin alınǵan  $h, k$  hám  $l$  shamalarınúń dizimi dúzilip, qanday shártke baǵınatuǵınlıǵı anıqlanadı. Bul óz gezeginde kristal pánjeresiniń oraylasıwı haqqında bir mánisli maǵlıwmatlardı beredi.

Aylanıw (terbeliw) rentgenogrammaların elektron-esaplaw mashinaları járdeminde esaplaw usılların óz ishine alatuǵın máseleler [9] da keltirilgen.

### 3-§. Fazalıq tallaw mashqalaları

Fazalıq tallaw (analiz) máselesi kristallıq úlginin quramında qanday bir birinen atomlıq-kristallıq strukturası boyınsha ayrılatuǵın kristallıq fazalardıń qatnasatuǵınlıǵı haqqındaǵı sapalıq hám sanlıq maǵlıwmatlardı beredi.

Rentgenografiyalıq fazalıq tallaw tómendegidey tiykargı jaǵdaylarǵa súyenedi:

a). Hár bir kristallıq zat (faza) jeke ózine tán bolǵan difrakciyalıq spektrge hám  $d$  menen  $I_{\text{salist.}}$  jıynaǵına iye boladı.

b). Fazalar aralaspasınıń difrakciyalıq spektri usı aralaspaǵa kırıwshi barlıq fazalar difrakciyalıq spektrleriniń superpoziciyasınan turadı.

c). Fazanın difrakciyalıq spektriniń intensivliligi usı aralaspadaǵı fazanın salıstırmalı muǵdarına baylanıslı.

d). Izertleniwshi zatqa kiriwshi fazalardıń difrakciyalıq spektri belgili bolıwı lazım.

Ózgermeli quramǵa iye fazalar, izomorflıq hám izoqurılısqa iye birikpeler izertlengende joqarıda keltirilgen tórt shárttiń birinshisi buzıladı. Usınday jaǵdaylarda qollanılatuǵın usıllar ózgeretilgen bolıwı kerek hám bul jumısta qarap ótilmeydi.

Ádette fazalıq tallaw izertleniletuǵın polikristallıq zattuń rentgenogrammasın alıw, bul rentgenogrammalardaǵı difrakciyalıq spektrdi anıqlaw hám usı spektrdi etalon spektrler menen salıstırıw arqalı ámelge asırıladı. Fazalıq tallawdı ámelge asırıw ushın etalon zatlar ushın dúzilgen difrakciyalıq spektrler boyınsha toplamǵa iye bolıw jetkilikli dárejede áhmiyetke iye. Házirgi waqıtlarǵa shekem júzlegen muńnan aslam etalonlıq rentgenogrammalar bar.

Bul aytilǵanlardı esapqa alıp fazalıq tallaw aldında turǵan máseleni bılayınsha qalıplestiriw múmkin:

Usı kúnlerge shekem toplanǵan difrakciyalıq spektrler menen izertlenip atırǵan zattuń difrakciyalıq spektrin salıstırıw arqalı onuń atomlıq-kristallıq qurılısın anıqlaw. Demek fazalıq tallawdı tabıslı túrde ámelge asırıw ushın ulıwma jaǵdayda kompyuterlerge usı kúnge shekem belgili bolǵan difrakciyalıq spektrler haqqındaǵı maǵlıwmatlar kirgizilgen bolıwı kerek.

Etalon zat ushın difrakciyalıq spektr joq bolǵan jaǵdayda matematikalıq jollar menen esaplaw arqalı spektr alınıwı múmkin. Bul másele kelesi bapta qarap ótiledi.

Rentgenfazalıq tallawı maǵlıwmatların qayta islewdi avtomatlastırıw boyınsha ótken ásirdeń jetpisinshi jıllarınan keyin payda bola basladı [13-15]. Al [15] te kristallograflardıń Xalıq aralıq awqamı tárepinen berilgen polikristallardıń difrakciyalıq spektrleri hám rentgenogrammalardı indekslew boyınsha programmalardıń dizimi keltirilgen. Al [16] te hár bir reflekske qoyılatuǵın shártlerde esapqa alǵan halda difrakciyalıq spektrdi anıqlaw ushın programma berilgen. Bul programmada eki ayqın mısál keltirilgen.

Joqarıda keltirilgen jumıslarda tiykarınan kompyuterler izertlenilip atırǵan zatlardıń difrakciyalıq spektrlerin etalonlıq spektrler menen salıstırıw ámelge asırıladı. Ayırım avtorlar spektr sızıǵınıń intensivliligi  $I$  di esapqa aladı. Al kópshiligi kristallografiyalıq tegislikler arasındǵı qashıqlıqlar  $d$  lardı salıstırıw menen ǵana



sheklenedi. Múmkin bolǵan fazalardı saylap alıw kópshilik jaǵdaylarda eki etaptan turadı. Dáslep etalonnıń tek kúshli sızıqları salıstırıladı. Usılay etip kópshilik fazalar qarap shıǵıwdan alıp taslanadı. Ekinshi etapta birinshi etapta qalǵan barlıq sızıqlar óz-ara salıstırıladı. Bul jaǵdayda kópshilik waqıtları izlenip atırǵan fazanıń usı aralaspǵa kiriw itimallıǵın táripleytuǵın kriteriy esapqa alınadı. Ayırım waqıtları izertleniwshi zattan alınǵan spektr sızıqlarınıń intensivliliginen etalon kristal spektri intensivliligi alıp taslanadı. Nátiyjede fizikalıq jaqtan aqılǵa muwapıq kelmeytuǵın teris mániske iye bolıp qalatuǵın intensivliklerdiń de alınıwı múmkin. [17] da Z-, R- hám D-test ótkeriw usınılǵan. Z-test izertlenilip atırǵan obektin difrakciyalıq spektrine sáykes kelmegenlikte etalondı qarap shıǵıwdan alıp taslaw. R-test Z-testke sáykes keledi, biraq izertleniwshi obekt penen etalonnıń ayırım ximiyalıq radikalların salıstıradı. D-testte Z- hám R-qayta islewlerden ótken etalonlar ushun tegislikler arasındaqı qashılıq izertlenip atırǵan kristaldıń tegislikleri arasındaqı qashılıqlar menen salıstırıladı.

[18] niń avtorları tárepinen usınılǵan jaǵdayǵa ayrıqsha dıqqat awdaramız. Bul jumısta sapalıq fazalıq tallawdıń matematikalıq modelin dúziw máselesi qoyılǵan. Sonlıqtan da aralaspǵa quramındaǵı múmkin bolǵan komponentalardı saylap alıw máselesi sarras matematikalıq túsiniq qáddine kóterilgen. Máseleni sheshiw algoritmi izertleniwshi obektler spektrin etalon zatlar spektri menen baylanıstıratuǵın teńlemelerden aralaspanıń qurawshıları ushun teris mániske iye emes shártli koncentraciyalar alıwǵa tiykarlanǵan.

Házirgi waqıtları kópshilik avtorlar untalǵan kristallar rentgenogrammaların kompyuterlerde islewdiń programmalarınıń paketin usınǵan. Bul paketler tiykarınan tómendegilerden turadı:

- 1). Rentgen difraktometrin basqarıw, ólsheuler nátiyjelerin jıynaw hám qayta islew (rentgendifrakciyalıq maǵlıwmatlar bazasın dóretiw).
- 2). Alınǵan maǵlıwmatlar bazası tiykarında difrakciyalıq eksperimentlerdiń nátiyjelerdi aldın-ala qayta islew.
- 3). Arnawlı matematikalıq usıllardı paydalǵan halda difrakciyalıq sızıqlardıń profillerin aldın ala qayta islew.
- 4). Kompyuter menen dialog rejiminde difraktogrammanı indekslew.

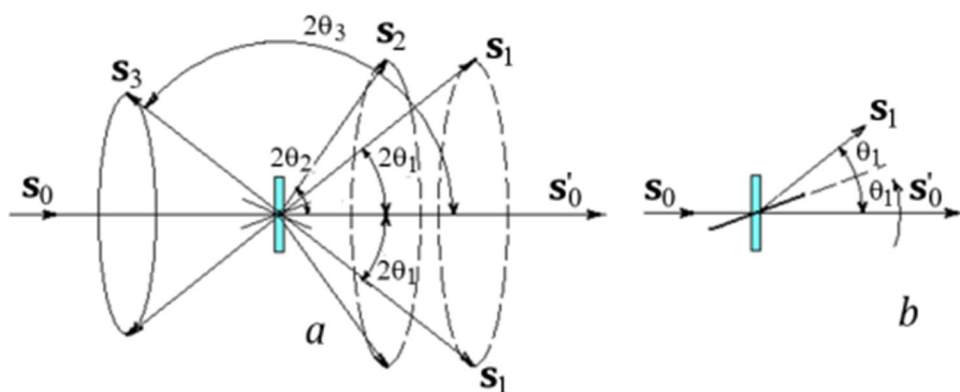
- 5). Maǵlıwmatlar bazası tiykarında sapalıq rentgenfazalıq tallaw.  
 6). Maǵlıwmatlar bazası tiykarında sanlıq rentgenfazalıq tallaw.  
 Alınǵan nátiyjelerdiń barlıǵı da kompyuterdiń monitorına shıǵarladı.

#### 4-§. Polikristallıq usıldıń fizikalıq principi

Kristallıq úlgide tegislikler arasındaqı qashıqlıqtıń shaması  $d_1$  bolǵan  $(h_1k_1l_1)$  kristallografiyalıq tegislikler semeystvosın saylap alayıq. Bul tegislikler  $2d_1\sin\theta_1 = n\lambda$  Vulf-Bregg shártine sáykes kelip túsken rentgen nurların shashıratadı. Bunıń ushın kelip túsiwshi dáste  $s_0$  tegisliklerge  $\theta_1$  múyeshi menen kelip túsivi hám shashıraǵan tolqın  $s_1$  tap sonday múyesh penen shashırawı kerek.

4-a súwrette  $(h_1k_1l_1)$  kristallografiyalıq tegisliklerdiń birewi kórsetilgen. Bul semeystvoǵa kiriwshi basqa da tegislikler  $s_0$  ge salıstırǵanda  $\theta_1$  múyeshine burılǵan dásteni beredi. 4-a súwrette  $(h_1k_1l_1)$  tegisliklerine sáykes keletuǵın  $s_1$  nurınıń eń shetkisi de kórsetilgen.

$s_1$  nurlarınıń eń shetki awhalları arasında basqa da kóp sandaqı shashıraǵan nurlar bolıp, olar shashıraǵan tolqınlardıń (nurlardıń) konusların payda etedi. Bul konuslardıń barlıǵınıń kósheri  $s_0$  baǵıtınıń dawamı bolıp tabıladı. Konustıń tóbesindegi múyeshitiń shaması  $4\theta_1$  shamasına teń. Etot konus gusto useyan otrajennimi luchami. Eger saylap alınǵan  $(h_1k_1l_1)$  tegisligi  $s_0$  baǵıtı átirapında aylanadı dep oyımızda qabil etsek, onda joqarıda aytılıp atırǵan nátiyjeni alıwǵa boladı (1-b súwret).



4-súwret. Debay konuslarınıń payda bolıwınıń sxeması:

$\mathbf{s}_0$  arqalı kelip túsiwshi nurdıń baǵıtı,  $\mathbf{s}_1$ ,  $\mathbf{s}_2$  hám  $\mathbf{s}_3$  vektorlarınıń járdeminde difrakciyaǵa ushıraǵan nurlardıń baǵıtları belgilengen.

Endi tegislikleri arasındaqı qashıqlıq  $d_2$  bolǵan  $d_1 < d_1$  shártin qanaatlandıratuǵın ( $h_2k_2l_2$ ) kristallografiyalıq tegislikler semeystvosın qaraymız. Basqa kristal túyirtpeklerdegi Vulf-Bregg shártin qanaatlandıratuǵın ( $h_2k_2l_2$ ) tegisliklerinde difrakciyaǵa ushıraǵan nurlar múyeshi kósheri menen jasawshısı arasındaqı múyeshtiń shaması  $2\theta_2$  bolǵan konustı payda etedi (h.t.b.).

Solay etip rentgen nurları polikristallıq zat penen tásir etiskende ulıwmalıq kósheri kelip túsiwshi rentgen nurlarınıń dástesiniń baǵıtı  $\mathbf{s}_0$  menen baǵıtlas bolǵan koaksiallıq konuslardıń sisteması túrindegi difrakciyaǵa ushıraǵan tolqınlardı beredi. Konustıń tóbesindegi múyeshtiń shaması  $4\theta_i$  shamasına teń boladı. Konuslardıń barlıǵı da bir waqıtta payda boladı.

$\theta_i$  múyeshiniń shaması ushın

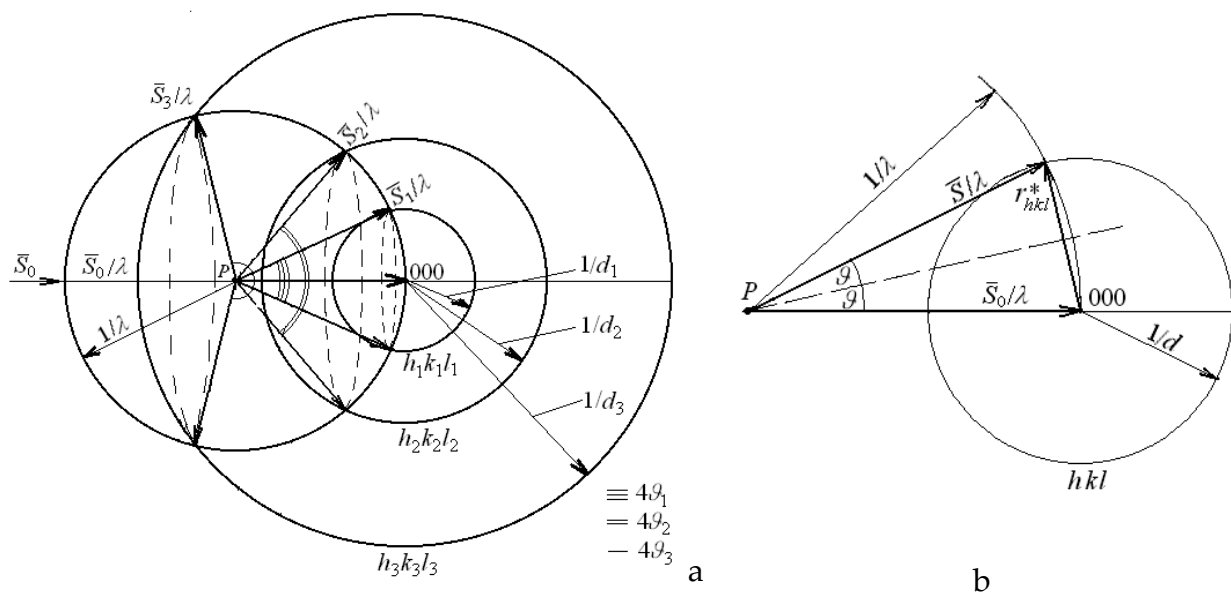
$$\sin\theta_i = \frac{\lambda}{d_i} \leq 1$$

shártiniń ornlanıwı kerek.

Polikristallardaǵı difrakciyalıq súwrettiń payda bolıwın keri keńislikte (keri pánjerede) Evald qurıwınıń járdeminde de kórsetiwge boladı (5-súwret). Keri keńisliktegi koordinata basın  $[[000]]$  bolsın. Jáne de bir birinen  $d_1$  qashıqlıqtaǵı ( $h_1k_1l_1$ ) kristallografiyalıq tegislikler semeystvosın alayıq. Eger biziń qolımızda monokristall bolǵanda, onda bunday tegisliklerge usı ( $h_1k_1l_1$ ) tegisliklerine perpendikulyar baǵıttıń boyında koordinata basınan  $1/(h_1k_1l_1)$  qashıqtıqta jaylasqan keri pánjereniń bir túyini juwap bergen bolar edi. Al polikristall yamasa untalǵan kristaldıń rentgen nurları kelip túsetuǵın kóleminde (bul kólemniń shaması ádette 0,5 mm<sup>3</sup> tan úlken emes) mayda kristallardıń sanı úlken hám olar xaotik (tártipsiz) túrde jaylasqan bolǵanlıqtan sferalıq betti alamız. Bul sferalıq bettiń radiusı  $r_{(h_1k_1l_1)}^* = 1/d_1$  shamasına teń. Solay etip polikristaldıń keri pánjeresiniń túyini orayı  $[[000]]$  noqatında jaylasqan sferalıq bet formasında boladı.

$(h_2k_2l_2)$  tegisliklerine radiusi  $1/d_2$  shamasina teń basqa sferalıq bet sáykes keledi. Eger  $d_1 > d_2$  teńsizligi orınlansa, onda  $\frac{1}{d_1} < \frac{1}{d_2}$ . Demek, statistikalıq jaqtan izotroplıq keńislikteń keri pánjeresi orayı keri pánjereniń  $[[000]]$  noqatında jaylasqan radiusları  $1/d_{(hkl)}$  shamalarına teń koncentrlı (yaǵnıy orayları bir noqat bolǵan) sferalıq betler bolıp tabıladı eken. Usınıń menen birge sol betler  $r_i^*$  vektorlarınıń ushları menen tıǵız hám bir tekli toltırılǵan (5-súwret).

Kristallardaǵı rentgen nurlarınıń shashıraw teoriyasınan [20] keri pánjereniń túyini Evald sferası menen tiyiskende difrakciyaǵa ushıraǵan nurdıń payda bolatuǵınlıǵın bilemiz (bul jaǵdayda Vulf-Bregg shárti orınlanadı). Evald qurılmasın dúzgende  $[[000]]$  noqatınan  $s_0$  vektorınıń baǵıtına qarama-qarsı baǵıtta uzınlıǵı  $1/\lambda$  shamasına teń kesindi júrgizemiz. Usınıń menen birge radiusı  $1/\lambda$  shamasına teń Evald sferasın da (shaǵılıstırıw sferası) soǵamız. Polikristall ushın keri pánjereniń túyini radiusı  $1/d_{(hkl)}$  shamasına teń sfera (sferalıq bet) bolıp tabıladı. Bul sferalıq betler shaǵılıstırıw sferası menen sheńber boyınsha kesilisedi.



5-súwret. Keri pánjereniń hám Evald qurıwınıń járdeminde polikristallıq úlgielerden difrakciyalıq konuslardıń payda bolıwınıń sxeması (a) hám vektorlıq úsh múyeshlikti soǵıw (b). bunday sxemalardı soǵıw ushın rentgenostrukturalıq analiz boyınsha keń tarqalǵan [2, 5-6, 20-26] ádebiyatlarda berilgen. Bul súwretlerde difrakciyalıq múyesh  $\vartheta$  arqalı belgilengen.

Eger bul sheńberlerdiń hár biriniń barlıq noqatların Evald sferasınıń orayı menen tutastırsaq, onda tóbesi shashıraw sferasınıń orayı, kósheri kristalğa kelip túsiwshi dáste bolğan difrakciyağa ushırağan nurlardıń konusların alamız. Konustıń tóbesindegi múyeshitiń mánisi  $4\theta_i$  ge teń boladı. 5-b súwrette tárepleri  $s_0/\lambda$ ,  $s/\lambda$  hám  $(s - s_0)/\lambda$  shamalarına teń bolğan vektorlıq úsh múyeshlikti soǵıwdıń sxeması kórsetilgen. Bunday jaǵdayda difrakciyanıń shártleri

$$\mathbf{r}_{(hkl)}^* = \frac{s-s_0}{\lambda}, \quad \frac{r_{(hkl)}^*}{2} = \frac{\sin\theta}{\lambda}, \quad |\mathbf{r}_{(hkl)}^*| = \frac{1}{d_{(hkl)}}, \quad \frac{s-s_0}{\lambda} = 2d_{(hkl)}\sin\theta.$$

## 5-Ş. Polikristaldagı difrakciyağa ushırağan tolqınlardı registraciyalaw usılları. Difrakciyalıq súwretti fotografiyalıq registraciyalaw usılı

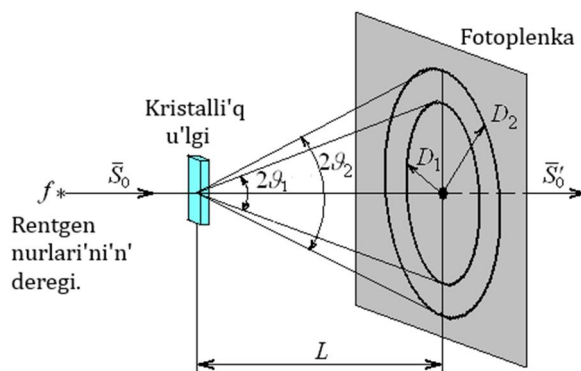
Difrakciyalıq súwretti registraciyalaytuǵın hár qıylı geometriyalıq sxemalar bar. Bul sxemalardıń barlıǵında da rentgen nurlarınıń deregi menen izertlenetuǵın kristallıq úlginiń bir birine salıstırǵandaǵı jaylasıwlarınan, úlginiń formasınan hám registraciyalawdıń usılınan (fotoplenka yamasa kvantlardı esaplaǵısh) ǵárezli.

Biz difrakciyalıq súwretti registraciyalawdıń fotografiyalıq usılın qaraymız. Bunday jaǵdayda tegis fotoplenkanıń (fotoplastinkanıń) hám cilindr tárizli plenkanıń paydalanılıwı múmkin.

1. Difrakciyalıq súwretti tegis fotoplenkada polikristall arqalı ótken rentgen nurlarında alıw. Bunday jaǵdayda  $\theta$  difrakciyalıq múyeshiniń mánisi  $45^\circ$  tan úlken emes hám sonlıqtan difrakciyalıq súwret úlgi arqalı ótken rentgen nurlarınıń esabınan alınadı. Súwretti alıwdıń optikalıq sxeması 6-súwrette berilgen. Fotoplenkada tutas bir tekli qarawıtqan koncentrlık sheńberler alınadı. Olardı ádette Debay saqıynaları dep ataydı.

6-súwret.

Kristallıq úlgi arqalı ótken rentgen nurlarınıń difrakciyasınıń saldarınan fotoplankada Debay saqıynalarınıń payda bolıwınıń sxeması.



Debay saqıynasınıń diametri  $D$  menen difrakciyalıq múyesh arasındaǵı qatnas

$$\operatorname{tg} 2\theta = \frac{D}{2L}$$

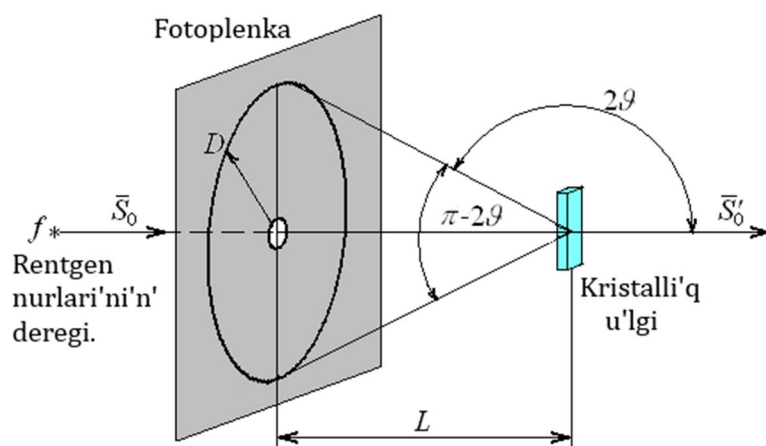
Bul ańlatpada  $L$  arqalı kristallıq úlgi menen fotoplenka arasındaǵı qashılıq belgilengen (6-súwret).

Bunnan

$$2\theta = \operatorname{arctg} \left( \frac{D}{2L} \right) \text{ hám } \theta = \frac{1}{2} \operatorname{arctg} \left( \frac{D}{2L} \right)$$

ańlatpasın alamız. Bul ańlatpalarda  $\theta$  múyeshiniń Debay saqıynasınıń ósiwi menen ósetuǵınlıǵı hám tegis plenkaǵa túsirilgende  $2\theta < 90^\circ$  teńsizliginiń ornınanatuǵınlıǵı kórinip tur.

2. Difrakciyalıq súwretti tegis fotoplankada polikristalda úlken múyeshlerge shashıraǵın (shaǵılısqan) rentgen nurlarında alıw (bunday sxemanı Zaks boyınsha keri túsiriw dep ataydı). Polikristallardı usınday sxema boyınsha izertlegende fotoplenka rentgen nurlarınıń deregi menen kristallıq úlgininń arasına jaylastırıladı (7-súwret).



7-súwret.

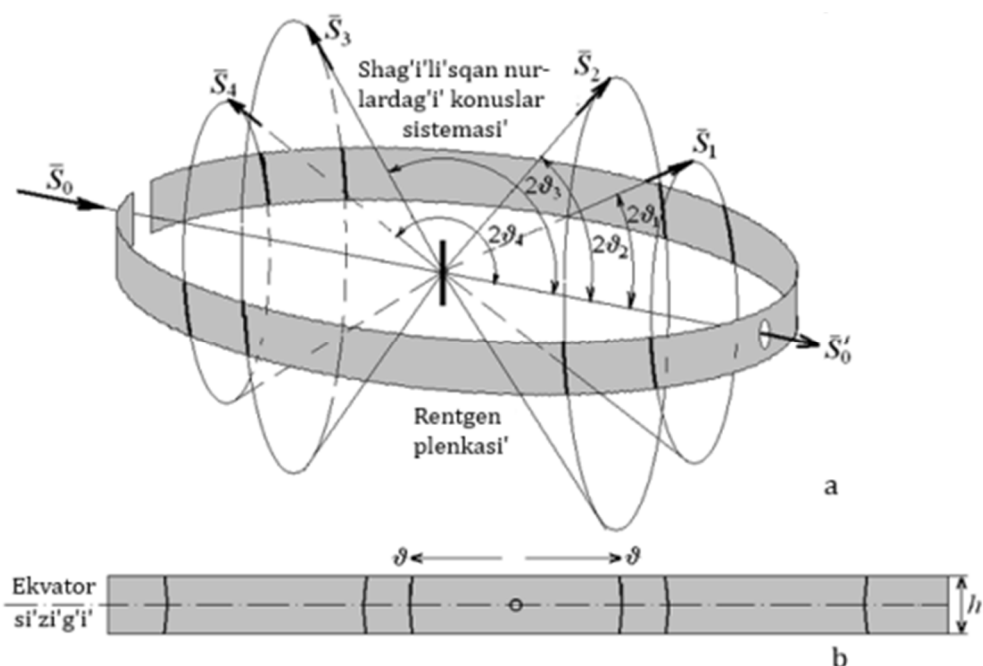
Polikristalda "shaǵılısqan" rentgen tolqınlarındaǵı Debay saqıynalarınıń alınıw sxeması.

6-súwrette keltirilgen jaǵdaydaǵıday, 7-súwrette keltirilgen jaǵdayda da rentgenogrammada tutas, teń ólshewli qarawıtqan koncentrlık sheńberler – Debay saqıynaları alınadı. Debay saqıynaları menen shaǵlıstırıw múyeshi arasındaǵı baylanıs

$$\operatorname{tg}(\pi - 2\theta) = \frac{D}{2L}$$

formulasınıń járdeminde beriledi. Bunday jaǵdayda  $2\theta > 90^\circ$ .

Biz joqarıda keltirgen jaǵdaylar tegis fotoplenkaǵa  $\theta$  múyeshiniń barlıq mánislerindegi difrakciyalıq Debay saqıynalarınıń alınbaytuǵınlıǵı aykın túrde kórinedi. Bunday "kemshilikti" difrakciyalıq súwretti cilindrlik fotoplankaǵa túsiriw jolı menen saplastırıwǵa boladı (8-súwret). Difrakciyalıq súwretti túsiriwdiń usınday sxeması P.Debay tárepinen usınıldı hám endi biz qaraytuǵın usıldı Debay usılı dep ataydı.



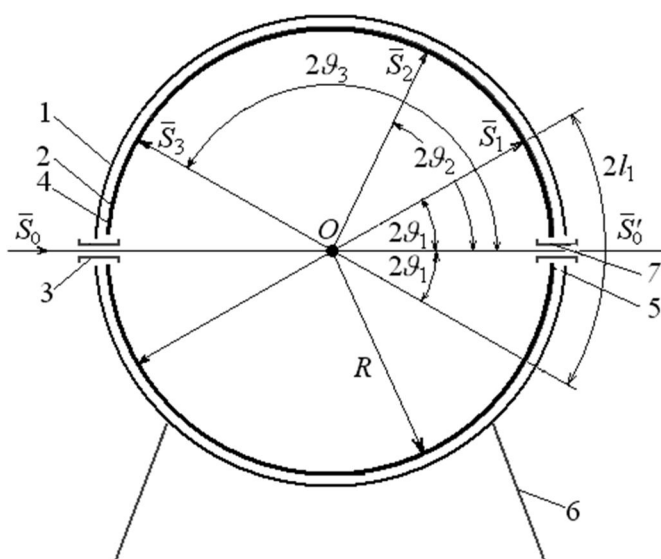
8-súwret. Debay saqıynalarınıń alınıw sxeması (a) hám rentgenogrammanıń (debaegrammanıń) túri (qayta islengennen keyingi).

Debay usılında diametri 1 mm den úlken bolmaǵan polikristallıq úlgi yamasa shiyshe tayaqshaǵa jelimlengen untalǵan kristall úlgi qollanıladı. Tayaqsha menen jelim rentgen plenkasında difrakciyalıq daqlardı yamasa unamsız fondı payda etpewi kerek. Rentgenogrammada (endi rentgenogrammanı "debaegramma" dep ataymız) birdey

qarawıtqan rentgenogrammanıń orayına qarata bir birine simmetriyalı doǵalar payda boladı. Bunday doǵalardı debay sıızıqları dep ataymız.

## 6-§. Cilindrlık kameranı qollanǵandaǵı debaegramma túsiriwdiń geometriyası

Ádette debaegrammalardı alıw ushın RKD tipindegi (sonıń ishinde RKD-114 kóberek tarqalǵan) rentgen kameralarında túsiredi<sup>2</sup>. Bunday kameralardı paydalanǵanda rentgendifrakciyalıq súwrettiń payda bolıwınıń geometriyasın tolıǵıraq qarap shıǵamız. Kameraǵa kirgen orında kese-kesimi belgili bolǵan tegis-parallel rentgen nurlarınıń dástesin alıw ushın kollimatorlıq dúzilis paydalanıladı (9-súwret). Rentgen plenkasın kameranıń ishki cilindrlık betine tegis tiyip turatuǵında etip jaylastıradı. Plenkaniń ushların izertlenetuǵın úlgige kelip túsetuǵın rentgen nurınıń baǵıtına salıstırǵanda jaylastırıwdiń úsh túrli usılı bar (10-súwrette kórsetilgen). Olardıń birinshisin ápiwayı jaylastırıw, ekinshisin kerı jaylastırıw hám úshinshisi asimmetriyalı túrde jaylastırıw dep ataydı. Ámelde asimmetriyalı jaylastırıw keń túrde qollanıladı.

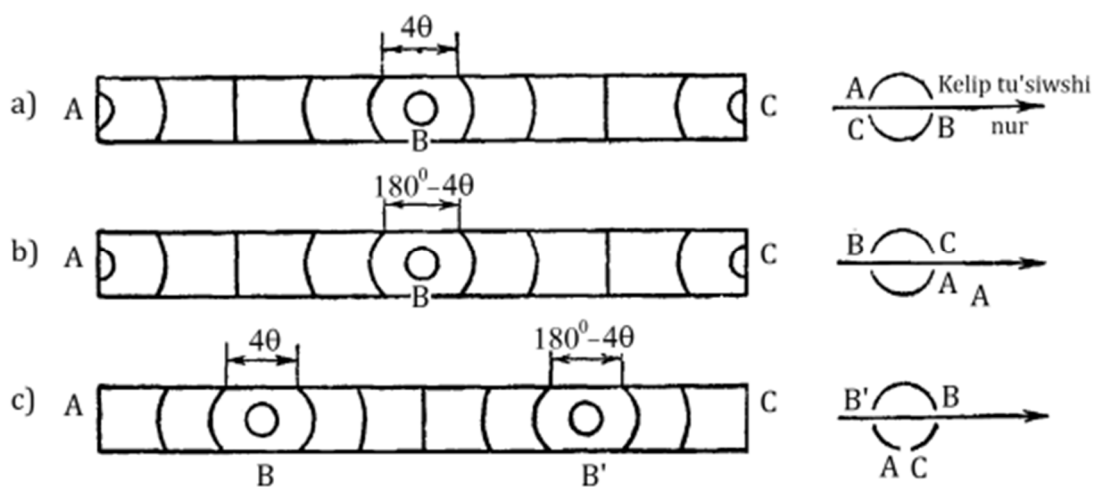


<sup>2</sup> Kameranıń "RKD" ataması "rentgenovskaya kamera Debaya – Debay rentgen kamerası" degendi ańlatadı. RKD-114 kamerasında cilindrlık kameranıń rentgen plenkasın bekitetuǵın cilindrdiń diametri 114 mm. Demek  $\pi \cdot 114 = 360$  mm. Demek rentgen plenkasınıń hár bir millimetrine  $1^\circ$  lıq múyesh sáykes keledi.



9-súwret. Debay kamerasında rentgendifrakciyalıq suyaretti alıwdń geometriyası. 1 – kameranıń korpusı; 2 – rentgen plenkası (fotoplenka), 3 – kollimatorlıq dúzilis, 4 – plenkanıń shetleri, 5 – plenkadaǵı tesik, 6 – podstavka, 7 – kishkene ekran.

Kameranıń kósheri gorizont baǵıtında jaylastırıladı hám usıǵan sáykes ulgi de gorizont baǵıtında jaylastırıladı. Rentgen nurınıń kameradan shıǵatuǵın bólimine fluorentnik ekran bekitilgen kishkene qalpaq hám qorǵasın sińdirilgen shiyshe ornalaştırılǵan. Fluorescenili ekran rentgen nurınıń baǵıtın hám kameranıń yustirovkasın durıslıw ushın qollanıladı.



10-súwret. Debay kamerasında rentgen plenkasın jaylastırıwdıń úsh usılı.

a) – ádetteǵıdey, b) – keri hám c) - asimmetriyalıq

## 7-§. Debay sızıqlarınıń intensivliginiń hár qıylı faktorlarǵa baylanısı

Debay sızıqlarınıń intensivligin esaplaǵanda biz rentgen nurlarınıń kristallardaǵı shashırawınıń kinematikalıq teoriyasın basshılıqqa alamız. Kópshilikke belgili bolǵan bul teoriya boyınsha difrakciyaǵa ushıraǵan polyarizaciyalanbaǵan rentgen tolqınlarınıń intensivligi

$$I = I_0 \frac{N^2 \lambda^3}{\sin 2\theta} |F|^2 p \left( \frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2}$$

formulasınıń járdeminde esaplanadı. Bul formulada N arqalı kristaldıń kólem birliğindeǵı atomlardıń sanı,  $\lambda$  arqalı kristalǵa kelip túsiwshi rentgen nurlarınıń tolqın

uzunlığı,  $\frac{e^2}{mc^2}$  arqalı elektronniń klassikalıq radiusı,  $F$  arqalı strukturalıq faktor (2-paragrafta keltirildi),  $\frac{1+\cos^2 2\theta}{2}$  arqalı polyarizaciyalıq faktor,  $p$  arqalı qaytalanıw faktori,  $I_0$  arqalı kristalğa kelip túsken rentgen nurınıń dástesiniń intensivligi belgilengen.

Biz qaytalanıw faktori  $p$  haqqında gáp etemiz. Eger biz kublıq kristallar ushın kristallografiyalıq tegislikler arasındaqı qashıqlıqtı eske túsiretuğın bolsaq, onda onıń shamasınıń

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

formulasınıń járdeminde esaplanatuğınlığın bilemiz. Biz ápiwayı bolğan 100 tegislikler semeystvosın alıp qaraytuğın bolsaq, onda  $d_{100}$ ,  $d_{\bar{1}00}$ ,  $d_{010}$ ,  $d_{0\bar{1}0}$  hám basqa da tap usınday tegisliklerdiń birdey mániske iye bolatuğınlığın kóremiz. Bul jağdayda biz ekvivalent tegisliklerdiń sanı haqqında aytamız hám úyreneyin dep atırğan qaytalanıw faktorınıń mánisi  $p = 6$ . Eger  $h00$  tipindegi tegisliklerdi qaraytuğın bolsaq, onda  $p$  shamasınıń 12 ge teń bolatuğınlığın kóremiz (321 indeksli tegislikler ushın  $p = 48$ . Bul jağday difrakciyağa ushırağan rentgen nurlarınıń intensivligi  $I$  ushın alınğan ańlatpadağı  $p$  nıń qatnasıwınıń sebebin ayqın túrde túsindiredi.

Álbette, kristallarda difrakciyağa ushırağan rentgen nurlarınıń intensivligi kristaldıń óziniń formasına da, ólshemlerine de baylanıslı. Bul faktorlardıń barlıgın esapqa alsaq, onda tómendegidey formulalardı alamız (basqa belgilewlerde hám SI esaplawlar sistemasında) [37]:

$$E_{hkl} = \frac{\lambda^3}{\omega} I_0 \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 c^2 m} \right)^2 \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2} |F_{hkl}|^2 V^* \times \\ \times \int_{\eta_1}^{\eta_2} \frac{\sin^2(\pi N_a \eta)}{\sin^2(\pi \eta)} d\eta \int_{\xi_1}^{\xi_2} \frac{\sin^2(\pi N_b \xi)}{\sin^2(\pi \xi)} d\xi \int_{\zeta_1}^{\zeta_2} \frac{\sin^2(\pi N_c \zeta)}{\sin^2(\pi \zeta)} d\zeta.$$

Bul ańlatpadağı

$$\int_{\eta_1}^{\eta_2} \frac{\sin^2(\pi N_a \eta)}{\sin^2(\pi \eta)} d\eta \int_{\xi_1}^{\xi_2} \frac{\sin^2(\pi N_b \xi)}{\sin^2(\pi \xi)} d\xi \int_{\zeta_1}^{\zeta_2} \frac{\sin^2(\pi N_c \zeta)}{\sin^2(\pi \zeta)} d\zeta$$

kóbeytiwshisin Laueniń interferenciyalıq funkciyası dep ataydı.

Debaegrammadağı reflekslerdiń sanı paydalanılıp atırğan rentgen nurlarınıń tolqın uzunlıǵınan (bul jerde paydalanılatuğın xarakteristikalıq rentgen tolqınlarınıń uzunlıǵı

názerde tutılmaqta) baylanıslı ekenligin ańsat túsindiriwge boladı. Vulf-Bregg teńlemesinen biz

$$\sin\theta = \frac{\lambda}{2d_{hkl}}$$

ańlatpasın alamız.  $\sin\theta \leq 1$  teńsizligi orınlanatuǵın bolǵanlıqtan  $\frac{\lambda}{2d_{hkl}} \leq 1$  hám  $\frac{\lambda}{2} \leq d_{hkl}$  teńsizlikleriniń orınlı bolatuǵınlıǵın kóremiz. Demek rentgenogrammada aradaǵı qashıqlıq  $d_{hkl}$  nıń shaması  $\frac{\lambda}{2}$  shamasınan úlken bolǵan kristallografiyalıq tegislikler semeystvolarınan difrakciyalıq sızıqlar alınadı eken. Bul teńsizlikler  $\lambda$  niń shaması qanshama kishi bolsa, rentgenogrammada alınatuǵın Debay sızıqlarınıń sanınıń sonshama úlken bolatuǵınlıǵın kórsetedi.

Mısal sıpatında  $\alpha$ -Fe kristalların ( $\alpha$ -Fe kristallı kólemde oraylasqan kublıq strukturaǵa iye,  $a = 2,86 \text{ \AA}$ ) hár qıylı tolqın uzınlıqlarında izertlegende Debay sızıqlarınıń sanınıń qalayınsha ózgeretuǵınlıǵın kóremiz (1-keste).

1-kestede rentgen tolqınınıń uzınlıǵınıń kishireyiwi menen debaegrammadaǵı difrakciyalıq sızıqlardıń kóbeyetuǵınlıǵı kórinip tur: Kobalttan islengen anodı bar rentgen trubkasınıń nurlarıwında eń kóp sanlı difrakciyalıq sızıqlardıń alınadı.

1-keste.

$\alpha$ -Fe kristalların hár qıylı tolqın uzınlıqlarında izertlegende alınatuǵın Debay sızıqlarınıń sanı

$hkl$	$d, \text{ \AA}$	$K_{\alpha}, Cr;$ $\lambda=2,2909 \text{ \AA};$ $z = 24.$	$K_{\alpha}, Fe;$ $\lambda=1,9373 \text{ \AA};$ $z = 26.$	$K_{\alpha}, Co;$ $\lambda=1,7902 \text{ \AA};$ $z = 27.$	$K_{\alpha}, Cu;$ $\lambda=1,5418 \text{ \AA};$ $z = 29.$
110	2,02	+	+	+	+
200	1,43	+	+	+	+
211	1,17	+	+	+	+
220	1,01	-	+	+	+
310	0,907	-	-	+	+
222	0,825	-	-	-	+

## 8-§. Spektrdiń $K_\alpha$ hám $K_\beta$ sızıqların ayırıw. Nurlanıwdı monoxromatizaciyalaw

Biz joqarıda kórip ótken polikristallıq Debay usılı polikristallıq úlgini monoxromatlıq tolqında túsiriw usılı dep atalatuǵın bolsa da, úlgige kelip túsetuǵın rentgen tolqını quramalı spektrallıq quramǵa iye hám tómendegidey qurawshılardan turadı (2-súwret):

1). Tutas spektrden. Bunday spektr eń kishi tolqın uzınlıǵı  $\lambda_{min} = \frac{2\pi\hbar c}{eU} = \frac{12,395}{U}$  (bul ańlatpada anodlıq kernew  $U$  dıń shaması kilovoltlerde beriledi, al tolqın uzınlıǵınıń mánisi angstremlerde alınadı) shamasınan  $\lambda_{max}$  shamasına shekemgi tutas spektrden turadı hám bul spektr rentgen plenkasında fondı beredi;

2) Sızıqlı spektrden (xarakteristikalıq spektrdiń K seriyasınan)<sup>3</sup>. Tolqın uzınlıqları Debay sızıqların payda etetuǵın  $K_\alpha$  hám  $K_\beta$  xarakteristikalıq rentgen nurlarınan turadı (biz  $K_\alpha$  xarakteristikalıq nurınıń eki nurdan turatuǵınlıǵı atap ótemiz, misalı mis antikatodı bar rentgen trubkasınan  $\lambda_{K_{\alpha_1}} = 1,54051 \text{ \AA}$  hám  $\lambda_{K_{\alpha_2}} = 1,54433 \text{ \AA}$  rentgen nurları shıǵıp, kóplegen jaǵdaylarda olar bir difrakciyalıq sızıqtı beredi. Sonlıqtan olardıń ornına intensivliklerin esapqa alǵan halda bir tolqın uzınlıǵı

$$\frac{2\lambda_{K_{\alpha_1}} + \lambda_{K_{\alpha_2}}}{3} = 1,5418 \text{ \AA}$$

formulasınıń járdeminde esaplanadı).

$K_\beta$  xarakteristikalıq nurlanıwı rentgen plenkasında  $K_\alpha$  nurlanıwı menen birge Debay sızıqların beredi. Mis antikatodı ushın  $\lambda_{K_\beta} = 1,39217 \text{ \AA}$ , al onıń intensivligi  $K_\alpha$  xarakteristikalıq nurınıń intensivliginen shama menen úsh ese kishi.



<sup>3</sup> Debaegramma túsirilgende difrakciyalıq súwretti payda etiwge rentgen trubkasınan shıqqan barlıq spektr paydalanıladı. Usıǵan baylanıslı biz xarakteristikalıq K seriyasına kiretuǵın nurlardıń intensivlikleriniń xarakteristikalıq L seriyasına kiretuǵın nurlardıń intensivliklerinen júdá úlken ekenligin, sonlıqtan difrakciyalıq súwretti payda etiwge tek K seriyasına kiretuǵın  $K_\alpha$  menen  $K_\beta$  nurlarınıń qatnasatuǵınlıǵın atap ótemiz.

11-súwret. Litiy iodatı ( $LiIO_3$ ) kristallınan túsirilgen debaegramma. Súwrette  $K_\alpha$  hám  $K_\beta$  xarakteristikalıq rentgen nurlarınıń difrakciyasınıń saldarınan payda bolǵan Debay saqıynalarınıń súwretleri sızıqlar menen ayırım túrde kórsetilgen.

Spektrdegi  $\alpha$  hám  $\beta$  xarakteristikalıq nurlarıwlarınıń beretuǵın Debay saqıynaların bir birinen ańsat ajratıp alıwǵa boladı. Onıń ushın birinshi gezekte difrakciyalıq sızıqlardıń intensivliklerine itibar beriwimiz kerek.

Birinshiden, qurallanbaǵan kóz benen qaraǵanda  $\beta$  nurlarınıń difrakciyasınıń saldarınan alınatuǵın Debay saqıynalarınıń intensivligi  $\alpha$  nurlarınıń difrakciyasınıń saldarınan alınatuǵın Debay saqıynalarınıń intensivliginen shama menen úsh ese úlken.

Ekinshiden Cu anodı bar rentgen trubkası qollanılganda  $2d_{hkl}\sin\theta = n\lambda$  formulasınan

$$\frac{\sin\theta_\beta}{\sin\theta_\alpha} = \frac{1.3922}{1.5418} = 0,903$$

shamasın alamız. Tap usınday jollar menen hár bir difrakciyalıq sızıq ushın  $\sin\theta$  shamalarınıń mánislerin tawıp sáykes esaplawlardan hám intensivliklerin kóz benen salıstırıw arqalı hár qıylı xarakteristikalıq nurlardıń difrakciyasınan payda bolǵan Debay sızıqlarınıń indekslerin tabıw múmkinshiligi bar boladı.

## **9-§. Difrakciyalıq súwretti rentgen difraktometriniń járdeminde registraciyalaw**

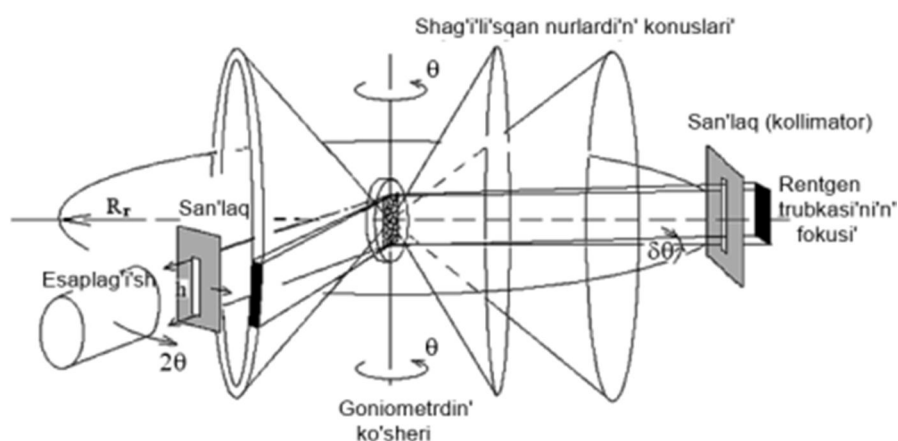
Difrakciyalıq súwretti kvantlardıń esaplaǵıshlarınıń (scintillyaciyalıq, yarım ótkizgishli, proporcionallıq hám poziciyalıq) járdeminde registraciyalaw, al difrakciyalıq múyeshtiń shamasın rentgen goniometri járdeminde tabıw ushın arnalǵan rentgen apparatların rentgen difraktometrleri dep ataymız (3-súwret) [31-33]. Rentgen difraktometrleriniń járdeminde  $I(\theta)$  túrindegi difrakciyalıq súwretti registraciyalaw

usılın difraktometrlik usıl, al alınğan difrakciyalıq súwretlerdi [yaǵnıy  $I = I(\theta)$  ǵárezligin] difraktogrammalar dep ataydı<sup>4</sup>.

Difraktometrinde rentgen súwretin túsiriw sxemasın qarap ótemiz. 12-súwrette bunday súwretke túsiriwdiń keńisliklik sáwleleniwi keltirilgen. Rentgen goniometri difraktometrdiń áhmiyetli bólimleriniń biri bolıp tabıladı (rentgen goniometri rentgen nurlarınıń túsiw hám shaǵılısıw múyeshleriniń mánislerin ólsheydi). Esaplaǵısh aylanatuǵın sheńberdi goniometrdiń sheńberi dep ataydı. Onıń radiusın  $R_g$  arqalı belgileymiz. Bul sheńber ekvatorlıq (gorizont baǵıtındaǵı) tegislikte jaylasqan. Bul sheńberdiń orayı arqalı goniometrdiń vertikal baǵıtta baǵıtlangan kósheri ótedi. Izertlenetuǵın úlgi goniometrdiń kósherine parallel etip goniometrlik dúziliske bekitiledi.

Rentgen goniometrinde ádette tegis kristallıq úlgiler izertlenedi.

Úlgi menen esaplaǵısh goniometrdiń kósheri dógereginde qol menen de, elektr dvigateliniń járdeminde de aylanıwı múmkin. Úlgi menen esaplaǵıstıń aylanıwınıń múyeshlik tezlikleriniń qatnası ádette  $1/2$  ge teń, yaǵnıy  $\omega_{esapl} = 2\omega_{ulgi}$  teńligi orınlanadı<sup>5</sup>.



12-súwret. Rentgen difraktometr qollanǵanda difrakciyalıq maksimumlardı registraciyalawdıń sxeması

<sup>4</sup> Avtomat difraktometrlerde esaplaǵısh tek gorizont baǵıtındaǵı tegislikte jaylasqan tek bir múyesh boyınsha emes, al vertikalıq tegislik boyınsha ólshenetuǵın  $\theta$  múyeshi boyınsha da qozǵaladı.

<sup>5</sup> Úlgi menen esaplaǵıstıń aylanıwınıń múyeshlik tezlikleriniń usınday qatnasında keri keńisliktegi radius-vektordıń boyı menen júriw sáykes keledi.



kristallardıń simmetriyasın, elementar qutılardıń turaqlılıarın, elementar qutıdaǵı atomlar, molekulalar yamasa ionlardıń koordinataların anıqlaw, fazalıq tallawlardı sapalıq hám sanlıq túrde ótkeriw jumıslarınıń fizikalıq tiykarları haqqında gáp ettik. Bul jumıslardıń ádewir quramalı ekenligi, atap aytqanda bir kristallıq dene ushın rentgenostrukturalıq tallaw ótkeriw ushın kóp sanlı difrakciyalıq eksperimentlerdiń ótkeriletuǵınlıǵı kórsetildi.

Kompyuterlik texnikanıń jedel túrde rawajlanıwına baylanıslı debaegrammalar menen difraktogrammalardı qollanıp fazalıq tallaw, kristallıq denelerdiń strukturasını anıqlaw boyınsha "qol menen islenetuǵın jumıslar" orınların difrakciyalıq spektrlerdi avtomat túrde qayta islew jumısları iyeledi. Sonlıqtan ótken ásirdeń 80-jıllarınan baslap difrakciyalıq spektrlerdi jıynaw hám qayta islewdi avtomatlastırıw, teoriyalıq rentgenogrammalardı dúziw boyınsha jumıslar pútkil Jer júzindegi laboratoriyalarda, sonıń ishinde Berdaq atındaǵı Qaraqalpaq mámleketlik universitetiniń ulıwma fizika kafedrasınıń laboratoriyalarında da úlken pátler menen alıp barıldı.

Házirgi waqıtları júdá rentgenostrukturalıq analiz benen baylanıslı bolǵan kóp sanlı kompyuterlik programmalar bar hám olardıń járdeminde kristallıq hám amorflıq zatlardıń strukturaların (atomlıq-kristallıq strukturası menen substrukturasını) izertlew boyınsha keń kólemdegi jumıslar júrgizilmekte. Bul jumıslarınıń barlıǵı da "qol menen islenetuǵın" jumıslardı jeńillestiredi, alınatuǵın strukturalıq informaciyalardıń muǵdarın kóbeytedi.

Kompyuterlik programmalaradı ayqın strukturalıq máselelerdi sheshiw ushın qollanıw rentgen nurlarınıń kristallıq denelerdegi difrakciyası qubılısınıń fizikalıq tiykarların úyreniw ushın da úlken múmkinshiliklerdi ashıp beredi. Sonlıqtan kompyuterlik programmalaradı ayqın strukturalıq máselelerdi sheshiw ushın qollanıwdıń ilimiy-metodikalıq áhmiyetiniń joqarı ekenligi kelip shıǵadı.

Bul jumısta házirgi waqıtları keń túrde tarqalǵan PowderCell hám CrystalDiffract programmaların polikristall úlgilerdiń atomlıq-kristallıq strukturasını anıqlaw ushın paydalanıw ushın orınlandı.

PowderCell programması polikristallıq úlgilerden alınatuǵın difrakciyalıq Debay saqıynalarınıń (bul Debay usılında) hám difraktogrammalardıń (polikristallardı yamasa



untalğan kristallardı rentgen difraktometrleriniń járdeminde izertlegende) alınatuǵın difrakciyalıq profillerin modellestiriw ushın arnalğan [34]. Bir qansha jetilistirilgen CrystalDiffract programması da tap usınday máselelerdi sheshiw ushın dóretilgen. Bul programmaların ekewi de jaqsı kristallanğan obektler ushın difrakciyalıq maǵlıwmatlardı qayta islewdiń eń tiykarǵı usıllarınıń usılı bolıp tabıladı. Eki usıl da Ritveld tárepinen 1967-jılı usınılğan strukturanı tolıq profilli anıqlaw usılına tiykarlangan [35]. Profillik usıldıń mánisi difrakciyalıq profildiń hár bir noqatındaǵı intensivliktiń eksperimentlerde alınğan mánisi menen esaplangan (teoriyalıq) mánisiniń bir birine sáykes keliwine alıp keletuǵın atomlıq parametrler menen profildiń parametrleriniń mánislerin tabıwdan ibarat. Difrakciyalıq shaǵılısıw menen anıqlanatuǵın parametrlerdiń mánislerin izlewdiń bir waqıtta ámelge asırılıwı bul usıldıń artıqmashlıǵı bolıp tabıladı.

Nanokristallıq obektlerdiń strukturasını anıqlaǵında tolıq profili analiz usılın paydalanıw bazı bir qıyınshılıqlar menen baylanıslı. Másele sonnan ibarat, nanokristallıq obektler nanometrlık ólshemlerdegi obektler bir biri menen qanday da bir jollar menen baylanısqa sistemalar bolıp tabıladı. Bunday baylanıs kópshilik jaǵdayda kogerentlik bolıp, bloklardıń birden-bir kristallografiyalıq orientaciyası saqlanadı. Biraq kristallıq bloklar arasındaǵı shegaralar (bunday shegaralar jaylastırıw defektlerine uqsas) saqlanadı. Al Ritveld usılınıń tiykarında rentgen nurlarınıń shashırawındaǵı kinematikalıq jaqınlasıw jatadı. Bunday jaqınlasıwda polikristall xaotikalıq tarqalğan kristallitlerdiń jıynaǵı sıpatında hám hár bir kristallit kogerentlik shashıraw oblastlarınıń ólshemlerindey, biraq ekstinkciyalıq uzınlıqtan ádewir kem ólshemlerge iye.

## **II bap. PowderCell hám CrystalDiffract programmaların polikristall úlgilerdiń atomlıq-kristallıq strukturasını anıqlaw ushın paydalanıw**

### **11-§. PowderCell 2.4 programmasınıń xarakteristikaları hám**

## múmkinshilikleri

PowderCell 2.4 programmasınıń (PCW.EXE faylı) járdeminde tómendegidey operaciyalardı orınlaw múmkin:

a) simmetriyanıń keńisliktegi gruppalarınń tipleriniń 740 tan aslam hár qıylı dúzilislerinen paydalanıp kristallıq strukturalardı kórsetiwge boladı<sup>6</sup>;

b) hár qıylı singoniyalar ushın keńisliklik gruppanıń bir tipinen ekinshi tipine hár qıylı transformaciyalardı paydalanıw;

c) barlıq Laue klassların hám translyaciyalıq podgruppalardı generaciyalaw — bul simmetriyanıń tómenlewi menen júretuǵın fazalıq ótiwlerdegi strukturanıń ózgerislerin úyreniw, saylap alınǵan atomlardıń yamasa molekulalardıń aylanıwları menen translyaciyanıń paydalanıp elementar qutınıń ishindegi strukturanı variaciyalaw ushın almastırıwǵa bolmaytuǵın qural bolıp tabıladı;

d) sáykes rentgenlik hám neytronlıq polikristallıq difraktogrammalardı bir waqıtta kórsetiw;

e) difrakciyanıń hár qıylı sharayatların imitaciyalaw, mısalı: nurlanıwdıń tolqın uzınlıǵı, dubletlerdiń ayrılıwı, eksperimenttiń geometriyası (Bregg-Brentano, Debay-SHerrer hám basqa da usıllar), keńligi (eni) ózgermeli sańlaqlar, anomallıq shashıraw hám taǵı basqalar;

f) difrakciyalıq maksimumlardıń hár qıylı profillerin saylap alıw (Gauss, Lorentz, Pseudo-Voigt);

g) esaplaw jolı (teoriyalıq) menen hám eksperimentte alınǵan profillerdiń bir birine sáykes keliw dárejesin xarakterlewshi hár qıylı faktorlardı paydalanıp grafikalıq jollar menen eksperimentallıq hám esaplaw jolı menen alınǵan difraktogrammalardı salıstırıw;

h) kristallıq struktura menen esaplangan difraktogrammalardı hár qıylı grafikalıq formatlarda eksportlaw (mısalı Enhanced Meta File, Bitmap);

i) difraktogramma menen oǵan sáykes keliwshi strukturanı manipulyaciyalaw (mısalı molekulanı aylandırıw) arasındaǵı baylanıstı kórsetiw;

---

<sup>6</sup> Bul jerde "dúzilis" sózi rus tilindegi "ustanovka" sózine sáykes keledi.

k) berilgen strukturalıq model ushın atomlar arasındaǵı baylanıslardıń uzınlıǵın, elementar qutıdaǵı barlıq atomlardıń koordinataların hám olar arasındaǵı múyeshlerdiń mánislerin anıqlaw;

l) grafika menen difrakciyalıq shaǵılısıwlardıń kestesin Windows operaciyalıq sistemasınıń basqa da programmaları ushın eksportlaw;

PowderCell 2.4 programmasınıń járdeminde basqa da operaciyalardı orınlaw múmkin.

Obektin difraktogrammasında onıń strukturası haqqındaǵı informaciya "shifrlanǵan". Onıń rasshifrovkası ushın biz tómendigdey izbe-izlikte háreket etemiz:

1. Biz bolǵan strukturalıq modeldi dúzemiz;

2. Dúzilgen model ushın kompyuterlik programmanıń járdeminde eksperimenttin berilgen sxemasındaǵı teoriyalıq teoriyalıq difrakciyalıq profildi dúzemiz. Bunnan keyin modeldin parametrlerin ózgeriw (variatsiyalaw) arqalı teoriyalıq profildi eksperimentallıq profilge múmkin bolǵanınsha jaqınlastıramız.

**Anıqlanatuǵın parametrlerdin fizikalıq mánisi haqqındaǵı tiykargı teoriyalıq maǵlıwmatlar.** Obektin (birikpenin, kristallıq denenin) strukturalıq modelin dúzgende tómendegidey maǵlıwmatlar talap etiledi: elementar qutınıń tipi (Brave pánjeresinin tipi), onıń parametrleri ( $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ ), simmetriyanıń keńisliklik gruppası, atomlardın elementar qutıdaǵı koordinatalar hám simmetriyanıń keńisliktegi gruppasınıń berilgen dúzilisi (ustanovka) ushın noqatlardıń durıs sistemaları (vayskoplıq poziciyalar), jıllılıq parametrleri hám atomlıq poziciyalardıń toltırılǵanlıǵı.

Obektin bunday maǵlıwmatların maǵlıwmatlardın hár qıylı bazalarında tabıw múmkin. Bunday bazalardıń ishindegi eń úlkeni internettegi adresi <http://database.iem.ac.ru/mincryst/> bolǵan MINCRYST (Minerallar hám olardıń strukturalıq analogları ushın kristallografiyalıq hám kristalloximiyalıq maǵlıwmatlar bazası) maǵlıwmatlar bazasınan alıwǵa boladı. Zárúrli bolǵan maǵlıwmatlardı izlew obektin ataması, ximiyalıq formulası, kristallostrukturalıq parametri boyınsha ámelge asırıwǵa boladı.

Teoriyalıq difraktogrammanı teoriyalıq jollar menen esaplaw ushın mınalardı biliw gerek: nurlanıwdın túri, súwretke túsiriwdin geometriyası (difrakciyalıq

eksperimenttiń sxeması), súwretke túsiriwdiń intervalı ( $2\theta$  múyeshiniń intervalı), detektordiń skannerlew adımı, detektordiń noliniń awısıwı, profillik funkciyanıń parametrleri hám basqalar. Anıqlawdıń nátiyjeleri: pánjereniń parametrleriniń hám atomlıq parametrlerdiń mánisleri, profillik parametrler, teksturanıń profilleri hám taǵı basqalar.

Endi joqarıda keltirilgen bar qatar atamalardıń fizikalıq mánisleri haqqında gáp etemiz.

**Elementar qutı.** Elementar qutı úsh translyaciyalıq ( $a, b, c$ ) hám úsh múyeshlik ( $\alpha, \beta, \gamma$ ) parametrlerge iye boladı. Bul parametrlerdiń hár qıylı mánisleri boyınsha olardı jeti singoniyalargá bóledi (2-keste):

2-keste.

Singoniyalar (kristallıq sistemalar), Bravais pánjereleriniń tipleri, simmetriya elementleri hám singoniyalardıń xarakteristikaları [36]

Crystal System	Bravais Lattices	Symmetry	Axis System
Cubic	P, I, F	m3m	$a=b=c, \alpha=\beta=\gamma=90$
Tetragonal	P, I	4/mmm	$a=b \neq c, \alpha=\beta=\gamma=90$
Hexagonal	P, R	6/mmm	$a=b \neq c, \alpha=\beta=90 \gamma=120$
Rhombohedral*	R	3m	$a=b=c, \alpha=\beta=\gamma \neq 90$
Orthorhombic	P, C, I, F	mmm	$a \neq b \neq c, \alpha=\beta=\gamma=90$
Monoclinic	P, C	2/m	$a \neq b \neq c, \alpha=\gamma=90 \beta \neq 90$
Triclinic	P	1	$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90$

Kristallar rentgenografiyasındaǵı eń áhmiyetli shamalardıń biri kristallografiyalıq tegislikler arasındaǵı qashıqlıq  $d_{hkl}$  bolıp tabıladı. Hár bir singoniya ushın  $d_{hkl}$  nıń shamasın esaplawdıń formulaları belgili [2]. Olardıń ishindegi eń universallıq formula

triklinik kristallar ushın jazılğan formula bolıp tabıladı:

$$d_{hkl} = \left[ \frac{\begin{vmatrix} \frac{h}{a} & \cos\gamma & \cos\beta \\ \frac{h}{a} & \frac{k}{b} & 1 \\ \frac{l}{c} & \cos\alpha & 1 \end{vmatrix} + \frac{k}{b} \begin{vmatrix} 1 & \frac{h}{a} & \cos\beta \\ \cos\gamma & \frac{k}{b} & \cos\alpha \\ \cos\beta & \frac{l}{c} & 1 \end{vmatrix} + \frac{l}{c} \begin{vmatrix} 1 & \cos\gamma & \frac{h}{a} \\ \cos\gamma & 1 & \frac{k}{b} \\ \cos\beta & \cos\alpha & \frac{l}{c} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & \cos\gamma & \cos\beta \\ \cos\gamma & 1 & \cos\alpha \\ \cos\beta & \cos\alpha & 1 \end{vmatrix}} \right]^{-1/2}$$

Endi  $2d_{hkl}\sin\theta = n\lambda$  formulasın differenciallap  $d_{hkl}$  shamasın anıqlawda jiberiletuğın salıstırmalı qáteliktiń

$$\frac{\Delta d_{hkl}}{d_{hkl}} = \text{ctg}\theta\Delta\theta, \Delta d_{hkl} = d_{hkl}\text{ctg}\theta\Delta\theta$$

formulaları boyınsha anıqlanatuğınlıǵına hám salıstırmalı qáteliktiń shamasınıń  $\theta$  múyeshinen hám radianlardaǵı  $\Delta\theta$  absolyut qátelikten gárezli ekenligine iseniwge boladı. Bul formulalardan  $\theta \rightarrow 0$  sheginde  $\Delta d_{hkl} = 0$  ekenligine iye bolamız. Sonlıqtan  $d_{hkl}$  shamasın anıqlaǵanda úlken múyeshlerdegi rentgen reflekslerin paydalanıw kerek boladı.

**Simmetriyanıń keńisliktegi gruppası** [38]. Simmetriyanıń keńisliktegi gruppası dep kristaldıń noqatlıq hám translyaciyalıq simmetriyasınıń túrlendiriwleriniń jıynaǵı bolıp tabıladı. Bunday gruppa ideal kristallıq pánjerelerdegi materiallıq bólekshelerdiń bir birine salıstırǵandaǵı jaylasıwlarındaǵı múmkin bolǵan barlıq simmetriyanı táriyipleydi. Barlıǵı bolıp simmetriyanıń 230 keńisliktegi gruppası bar. Usı waqıtlarǵa shekem izertlengen júzlegen mın strukturanıń qálegen biri usı 230 gruppanıń birine kiredi.

**Qutıdaǵı atomlardıń koordinataları. Noqatlardıń durıs sisteması.** Simmetriyanıń keńisliktegi gruppası elementar qutıdaǵı atomlardıń koordinataların anıqlamaydı, al atomlardıń kristalda jaylasıwlarınń qaǵıydaların anıqlaydı. Rentgenostrukturalıq analizdiń aldında turǵan másele elementar qutıdaǵı atomlardıń (ionlardıń, molekullardıń) koordinataların anıqlawdan ibarat.

Noqatlardıń durıs sisteması dep simmetriyanıń keńisliktegi gruppasınıń barlıq simmetriyalıq operaciyların bir (baslangısh) noqatqa tásir etiw jolı menen alınatuǵın noqatlardıń jıynaǵına aytamız. Baslangısh noqattıń ornı onıń poziciyası, al bir elementar qutıǵa sáykes keletuǵın sistemanıń noqatlarınń sanın poziciyanıń eseligi (kratnost pozicii) dep ataladı. Sistemanıń hár bir noqatında atom (yamasa ion) jaylasadı, al noqatlardıń durıs sisteması berilgen strukturadaǵı kristalloximiyalıq jaqtan teppe teń bolǵan (birdey bolǵan) atomlardıń jıynaǵı bolıp tabıladı.

Noqatlardıń durıs sistemasınıń sanı simmetriyanıń keńisliktegi gruppası tárepinen anıqlanadı. Noqatlardıń durıs sisteması poziciylardıń eseligin hám onıń atamasın óz ishine aladı. Misalı 4a poziciyası a poziciyasın hám onıń eseliginiń 4 ke teń ekenligin ańlatadı.

Simmetriyanıń hár bir keńisliktegi toparı ushın noqatlardıń durıs sisteması haqqında Kristallografiya boyınsha Xalıq aralıq kestelerden tolıq maǵlıwmatlardı alıwǵa boladı. Tómenдеgi 14-súwrette Xalıq aralıq kesteniń 1-tomınan simmetriyanıń keńisliktegi Pmmn gruppası ushın alınǵan misal keltirilgen [38-39].

96	<i>i</i>	1	$x,y,z; z,x,y; y,z,x; x,z,y; y,x,z; z,y,x;$ $x,y,z; z,x,y; y,z,x; x,z,y; y,x,z; z,y,x;$ $x,y,z; z,x,y; y,z,x; x,z,y; y,x,z; z,y,x;$ $x,y,z; z,x,y; y,z,x; x,z,y; y,x,z; z,y,x.$
48	<i>h</i>	<i>m</i>	$x,x,x; z,x,x; x,z,x; x,x,z; z,x,z; x,z,x;$ $x,x,z; z,x,z; x,z,x; x,x,z; z,x,z; x,z,x.$
24	<i>g</i>	<i>mm</i>	$x,½,½; ½,x,½; ½,½,x; x,½,½; ½,x,½; ½,½,x.$
24	<i>f</i>	<i>mm</i>	$x,0,0; 0,x,0; 0,0,x; x,0,0; 0,x,0; 0,0,x.$
16	<i>e</i>	<i>3m</i>	$x,x,x; x,x,x; x,x,x; x,x,x.$
4	<i>d</i>	<i>3m</i>	$½,½,½.$
4	<i>c</i>	<i>3m</i>	$½,½,½.$
4	<i>b</i>	<i>3m</i>	$½,½,½.$
4	<i>a</i>	<i>3m</i>	$0,0,0.$

14-súwret.

Qatar sanı 216 bolǵan simmetriyanıń keńisliktegi  $F\bar{4}3m$  gruppası ushın noqatlardıń durıs sistemaları [38-39].

Noqatlardıń durıs sisteması ushın (ápiwayı forma ushın sıyaqlı) ulıwmalıq hám

jekke sistemalar bar boladı<sup>7</sup>. Eger baslangısh noqat simmetriya elementleriniń birinde yamasa birdey simmetriya elementlerinen birdey qashıqlıqlarda jaylasqan bolsa noqatlardıń jekke durıs sisteması alınadı.

Eger baslangısh (demek oǵan simmetriyalıq jaqtan ekvivalent bolǵan noqatlardıń barlıǵı) noqat hesh bir simmetriya elementlerinde jaylasqan bolmasa yamasa birdey simmetriya elementlerinen birdey kashıqlıqta jaylaspaǵan bolsa, onda noqatlardıń ulıwmalıq durıs sisteması alınadı.

Simmetriyanıń keńisliktegi  $F\bar{4}3m$  gruppası ushın (Internacionallıq sistemadaǵı qatar sanı 216) noqatlardıń ulıwmalıq durıs sisteması ushın 96 poziciya alınadı.

Biz bul jaǵdaydı tolıǵıraq qarap ótemiz (sebebi keńisliklik simmetriyası tap usınday bolǵan  $ZnS$  kristalları haqqında tómende gáp etemiz).

Ese- ligi	Simmetriya elementi	Durıs sistemalardıń noqatlarınń koordinataları
4	$a$	000, $0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ , $\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$ , $\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$ .
	$b$	$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ , $\frac{1}{2}00$ , $0\frac{1}{2}0$ , $00\frac{1}{2}$ .
	$c$	$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$ , $\frac{1}{4}\frac{3}{4}\frac{3}{4}$ , $\frac{3}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4}$ , $\frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4}$ .
	$d$	$\frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{3}{4}$ , $\frac{3}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$ , $\frac{1}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4}$ , $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4}$ .
16	$e$	$xxx$ , $x\bar{x}\bar{x}$ , $\bar{x}x\bar{x}$ , $\bar{x}\bar{x}x$ .
hám taǵı basqalar		

Biz tómende  $BaTiO_3$  kristallarınıń misalında PowderCell programmasınıń berilgen koordinatalardıń mánisleri boyınsha ayqın atomlıq strukturadaǵı qanday poziciyanı iyeleytuǵınlıǵın anıqlay alatıǵınlıǵın kórsetemiz.

Jıllılıq parametrleri hám atomlıq poziciyalardıń tıǵızlıǵı. Haqıyqıy kristallıq denelerde atomlar ózleriniń elektronları menen birge jıllılıq terbelislerine qatnasadı. Olar ózleriniń teń salmaqlıq orınlarınıń átirapında terbeledi. Sonıń menen birge atomlar arasında ximiyalıq baylanıstıń belgili bir tipi orın aladı. Jıllılıq qozǵalıslarınıń atomnıń shashıratıwshılıq qábiletligine tásir etetuǵınlıǵı tábiyiy. Usınıń saldarınan difrakciyalıq sıziqlardıń intensivligi temperaturanıń ósiwi menen kemeyedi. Bul jaǵday shaǵılısqan

<sup>7</sup> Rus tilindegi terminologiyadaǵı "CHastnaya sistema" termini qaraqalpaq tiline "jekke sistema" túrinde awdarılǵan.

tolqınnıń intensivligi  $I$  diń atomlardıń awısıwınıń ortasha kvadratlıq mánisi bolǵan  $\langle u^2 \rangle$  shaması menen  $I \sim \exp[\langle u^2 \rangle]$  ǵárezliginiń orın alatuǵınlığı menen baylanıslı. Anizotroplıq terbelisler payda bolatuǵın jaǵdaylarda  $\langle u^2 \rangle$  shaması bir birinen ǵárezsiz altı qurawshıǵa iye tenzorga aylanadı.

Kristallar rentgenografiyasında qatar sanı  $j$  bolǵan atom ushın Debay-Uoller faktori (yamasa temperaturalıq faktor) dep atalatuǵın faktordı paydalanadı. Izotroplıq terbelisler orın alǵan jaǵdayda onı

$$\exp \left[ -8\pi^2 \langle u_j^2 \rangle \left( \frac{\sin \theta}{\lambda} \right)^2 \right]$$

túrinde jazıw múmkin.  $B = 8\pi^2 \langle u_j^2 \rangle$  kóbeytiwshisin Debay-Uoller faktorınıń parametri yamasa atomnıń jıllılıq parametri dep ataydı. Onıń birligi  $\text{Å}^2$  (uzınlıqtıń kvadratı). Eger máseleni qatań túrde tallaytuǵın bolsaq, onda  $B$  parametriniń eki qurawshıdan turatuǵınlıǵın kóriwge boladı: birinshisi temperaturadan ǵárezli bolǵan qurawshı  $B_T$  (bul qurawshı atomlardıń jıllılıq terbelislerin menen baylanıslı) hám atomlardıń statikalıq awısıwlar menen baylanıslı bolǵan bólimi  $B_S$ . Ekinshisi temperatura menen baylanıslı emes. Sonlıqtan  $B = B_T + B_S$  ańlatpasına iye bolamız.

Atomlıq poziciyalardıń tıǵızlıǵı  $M$  berilgen poziciyadaǵı atomlardıń úlesine teń. Máselen  $M = 1$  shaması atomlardıń barlıǵınıń berilgen atomlıq poziciyada turatuǵınlıǵın bildiredi.  $M$  shamasınıń ólshem birligi joq.

**Paydalanılatuǵın rentgen nurları.** Rentgenostrukturalıq analizde ádette Cr, Mn, Fe, So, Ni, Si, Zr, Nb, Mo, Ag hám W anodlarınıń rentgen nurları qollanıladı. Tek usı nurlar ushın sáykes dúzetiwler (rentgen nurınıń kristalǵa kiriwiniń tereńligi, jutıwdıń massalıq koefficienti) polikristallardıń difraktogramması ushın esapqa alınadı. Bul jaǵday ásirese fazalıq analiz (tallaw) ushın áhmiyetli.



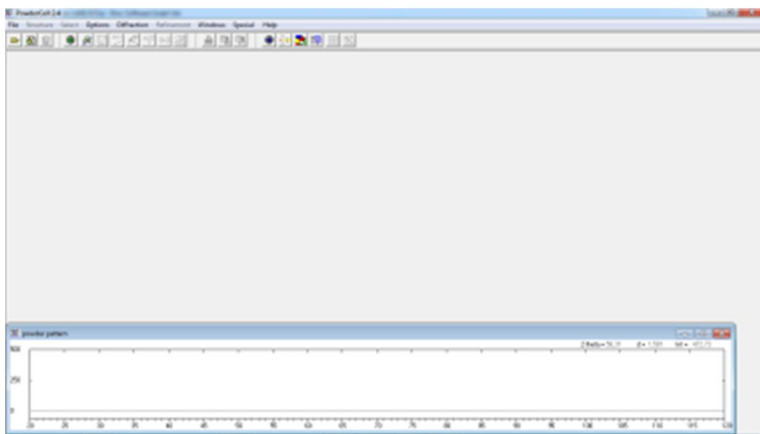
**Difraktogramma túsiriwdiń geometriyası.** Rentgen difraktometrleri súwretke túsiriwdiń hár qıylı geometriyasın paydalanıwǵa múmkinshilik beretuǵın rentgen goniometrine iye boladı (mısalı, GUR-5, GUR-7 hám basqalar). Eń keń tarqalǵan geometriyalar ishinde Bregg-Brentano geometriyası jiyi qollanıladı. Bunday jaǵdayda kristallıq úlgi goniometrdiń kósheri dógeresinde  $\phi$  múyeshine burılǵanda, detektor (difrakciyaǵa ushıraǵan rentgen kvantların esaplaǵısh sol kósherdiń dógeresinde  $2\phi$  múyeshine burıladı). Bunday jaǵdayda  $\theta-2\theta$  rejimi haqqında gáp etedi.

**Profillik funkciyalar.** Eksperimentte alnǵan difrakciyalıq profil eki funkciyanıń svertkasınan turadı. Birinshisi atomlıq-kristallıq struktura haqqında informaciyaǵa, al ekinshisi difrakciyalıq sızıqlarǵa eksperimentlerde orın alǵan sharayatlardıń tásiri bolıp tabıladı. Piktiń profilin hár qıylı funkciyalar menen approksimaciyalaw múmkin. Mısalı PowderCell programmasında bunday funkciyalardıń sanı tórtew - Gauss, Lorentz, Pseudo-Voigt1 hám Pseudo-Voigt2. Fon dárejesi birden jetige shekemgi polinomnıń járdeminde approksimaciyalanadı. PowderCell programması profillik funkciyanıń parametrlerin de, fonnıń polinomınnıń parametrlerin de anıqlawǵa múmkinshilik beredi.

## **12-§. Birinshi etap – strukturanıń modelin dúziw**

PowderCell 2.4 programması menen tanısıwdı ayqın túrdegi máselelerdi sheshiw menen birge alıp barǵan durıs dep esaplaymız. Sonlıqtan tómende programmanı hár qıylı kristallar ushın máselelerdi sheshiw ushın qollanamız.

PowderCell 2.4 programmasın iske qosamız hám monitorda 15-súwrette kórsetilgendey ayna payda boladı.

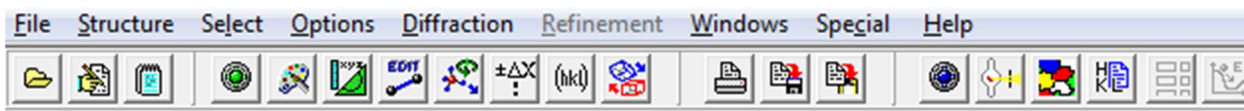


15-súwret.

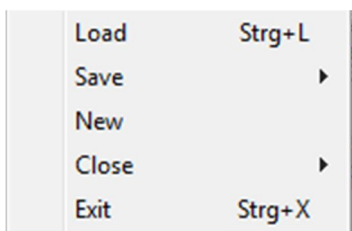
PowderCell 2.4 programmasın iske qosqanda kompyuter monitorında alınatuğın súwret (programmanıń bas aynası).

Programma ushın menyu 9 punktten turadı (File, Structure, Select hám basqalar) hám olardıń astında ikonalar jaylasqan (16-súwret). Help menyuinde programma haqqındağı tolıq informaciyalardı alıwğa boladı. Hár bir menyu usı menyuden kelip shıǵatuğın bir neshe punktten turatuğın menyuden turadı. Menyudiń astında jaylasqan ikonalar menyulerdiń eń zárúrli bolǵan punktlerin sáwlelendiredi<sup>8</sup>.

Dáslep strukturanıń modelin dúzemiz (shın mánisinde biz sáykes keliwshi jańa fayldı dóretemiz). Onıń ushın File menyuinin kelip shıǵarılatuğın New punktinen paydalanıw kerek (17-súwret).



16-súwret. PowderCell 2.4 programmasındağı menyu.



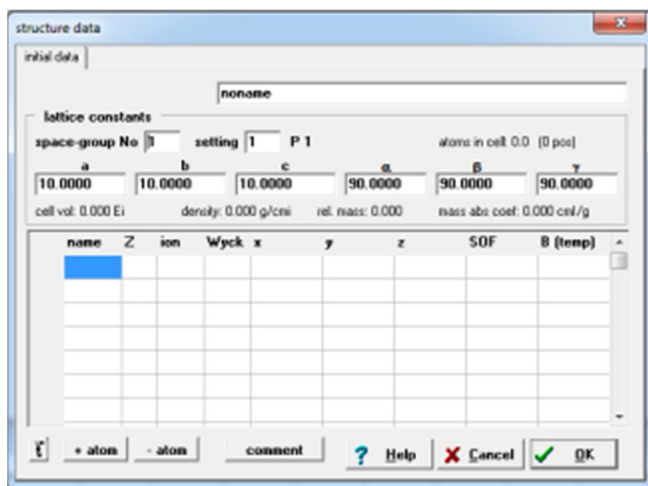
17-súwret.

File menyui astındağı kishi menyui.

Monitorında strukturalıq maǵlıwmatlardı kirgiziw ushın arnalǵan dialoglıq ayna payda boladı (18-súwret). Bul aynada izertlenip atırǵan kristallıq zattıń ataması, simmetriyasınıń keńisliktegi gruppasınıń qatar sanı (bul qatar san kristallografiya boyınsha Xalıq aralıq kestelerden alınadı [38-39]) hám kristallografiyalıq ustanovkanıń qatar sanı beriledi. Space-group No uyasına gruppanıń qatar sannıń jazılıwı menen

<sup>8</sup> Rus tilindegi "podmenyu" sózi "astındağı menyu" mánisinde awdarılǵan.

simmetriyanıń keńisliktegi gruppasınıń belgisi de (formulası da) jazıladı. Bunnan keyin elementar qutınıń parametrleri beriledi. Al tómeni bóliminde elementar qutıdaǵı atomnıń (yamasa ionnıń) koordinataları beriledi.



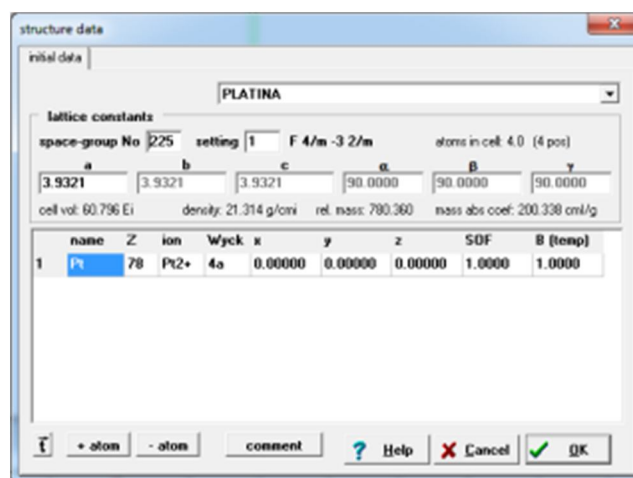
18-súwret.

Strukturalıq maǵlıwmatlardı kirgiziw ushın arnalǵan ayna.

Bunnan keyin hár bir atom ushın onıń ataması, Z grafasına ionnıń ataması hám zaryadı kirgiziledi. Wyck ataması berilgen atom ushın noqatlardıń durıs sistemasındaǵı iyelegen poziciyası, al bunnan keyin onıń x, u, z koordinataları, sáykes atomnıń jıllılıq parametri B hám atomlıq poziciyanıń tıǵızlıǵı kirgiziledi.

19-súwret.

Pt kristalları ushın strukturalıq maǵlıwmatlardı kirgiziwge mısál.

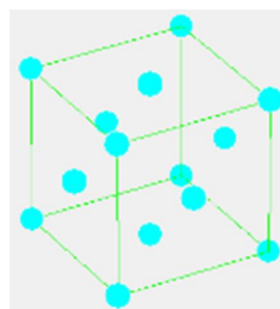


Ápiwayı mısaldı keltiremiz. Platina Pt nıń strukturasınıń modelin dúzemiz. Bunıń ushın MINCRYST dep atalatuǵın maǵlıwmatlar bazasın paydalanıwǵa boladı: onıń strukturasınıń kublıq, simmetriyasınıń formulasınıń  $Fm\bar{3}m$ , Xalıq aralıq kestelerdegi qatar sınınıń 225 ke teń ekenligin bilemiz [38, 338-bet]. Elementar qutınıń parametri  $a = 3.9231 \text{ \AA}$ . Elementar qutıǵa sáykes keliwshi formulalıq birliklerdiń sanı tórtew, sonlıqtan eseligi tórtke teń atomlıq poziciyanı qabıl etemiz. 225-gruppada usınday poziciyalar sanı 2 ge teń ( $4a$  menen  $4b$ ). Biz simmetriyanıń berilgen keńisliktegi

gruppası ushın noqatlardıń durıs sistemaları haqqındaǵı informaciyanı structure and space group information ikonasınıń basıw arqalı (space group zakladkası) alıwǵa boladı. Maǵlıwmatlar bazası bóliminen atomlardıń koordinataların alamız. Olar  $4a$  poziciyasına sáykes keledi. B menen SOF parametrleriniń baslangısh mánislerin 1 ge teń etip alamız. (19-súwret). Maǵlıwmatlar kestegin toltırıp bolǵannan keyin OK klavıshın basamız hám Pt kristallınıń elementar qutısınıń súwretin alamız (20-súwret). Súwrette kók reńli dóńgeleklerdiń járdeminde Pt atomları belgilengen, al shep táreptegi tómengi múyeshte bazislik vektorlar sáwlelendirilgen. Jańa fayldı bir qálegen papkada saqlap qoyıwımız kerek (File menyui, Save punkti).

20-súwret.

Pt kristallınıń elementar qutısınıń súwreti.



Endi quramalıraq strukturaǵa iye kristaldı qaraymız. Misal retinde bariy titanatı ( $BaTiO_3$ ) kristallarıńıń tetragonallıq fazasınıń strukturasını qaraymız<sup>9</sup>. Elementar qutınıń parametrleri  $a = b = 4,003 \text{ \AA}$ ,  $c = 4,002 \text{ \AA}$ . Atomlardıń koordinataları:

Va:  $(0, 0, 0)$ ,

Ti:  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + \delta_{ZTi})$ ,

O<sub>I</sub>:  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \delta_{ZOI})$ ,

O<sub>II</sub>:  $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} + \delta_{ZOII})$ ,

O<sub>III</sub>:  $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + \delta_{ZOIII})$ .

Bul strukturada Va +2 valentlikke, Ti bolsa +4 valentlikke, al kislorod ionları -2 valentlikke iye ekenligin itibarǵa alamız.

Biz  $\delta_{ZTi} = 0,05 \text{ \AA}$ ,  $\delta_{ZOI} = -0,09 \text{ \AA}$ ,  $\delta_{ZOII} = \delta_{ZOIII} = -0,09 \text{ \AA}$  ekenligin bilemiz [40-41].

Usı maǵlıwmatlar tiykarında biz programmaǵa maǵlıwmatlardı beremiz (21-súwret):

<sup>9</sup> Bariy titanatı kristallın mısıl sıpatında kórsetiliwi onıń atomlarınıń koordinatalarınıń belgili ekenligi menen baylanıslı.

21-súwret.

$BaTiO_3$  kristallarınıń strukturası ushın maǵlıwmatlardıń beriliwi.

structure data

initial data

D:\office\abd1\lex\_text\bk1\_isi\2014-2015\no\_2\_1\1\BATIC

lattice constants

space-group No 99 setting 1 P 4 m m atoms in cell: 5.0 (5 pos)

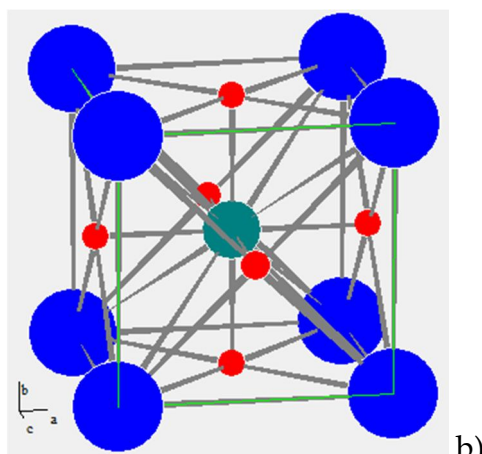
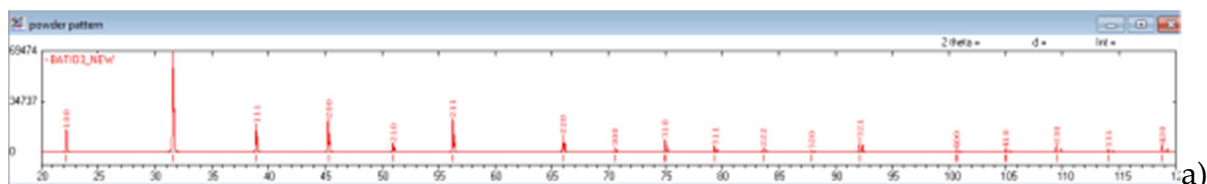
a	b	c	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$
4.0030	4.0030	4.0020	90.0000	90.0000	90.0000

cell vol: 64.128 E<sub>i</sub> density: 6.039 g/cm<sup>3</sup> rel. mass: 233.238 mass abs coef: 238.872 cm<sup>2</sup>/g

name	Z	ion	Wyck	x	y	z	SOF	B (temp)
Ba	56	Ba2+	1a	0.00000	0.00000	1.00000	1.0000	1.0000
Ti	22	Ti	1b	0.50000	0.50000	0.50500	1.0000	0.0000
O2-	8	O2-	1b	0.50000	0.50000	0.49100	1.0000	1.0000
O2-	8	O2-	2c	0.50000	0.00000	0.49400	1.0000	1.0000
O2-	8	O2-	4f	1.00000	0.50000	0.49400	1.0000	1.0000

+ atom - atom comment ? Help X Cancel OK

PowderCell 2.4 programması tárepinen berilgen  $BaTiO_3$  kristallarınıń difraktogramması hám elementar qutınıń strukturası 22-súwrette keltirilgen.



21-súwret.

PowderCell 2.4 programması tárepinen berilgen  $BaTiO_3$  kristallarınıń elementar qutısınıń strukturası (b) hám difraktogramması (a).

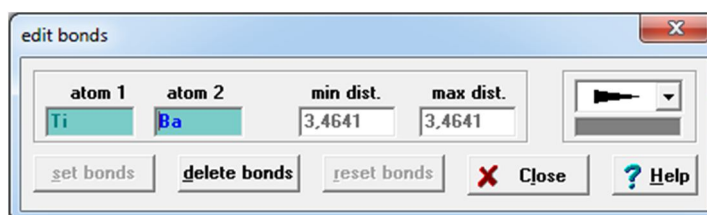
21-súwrette keltirilgen maǵlıwmatlar  $BaTiO_3$  kristallarında  $Ba^{2+}$ ,  $Ti^{4+}$ ,  $O^{2-}$ ,  $O^{2-}$ ,  $O^{2-}$  ionlarınıń sáykes 1a, 1b, 1b, 2c hám 4f poziciyaların iyeleytuǵınlığı kórinip tur.

PowderCell programmasınıń barlıq jaǵdaylarda da (yaǵnıy quramalı bolǵan ximiyalıq birikpelerdi izertlegende) atomlardıń koordinataların beriwdiń saldarınan olar iyelegen poziciyalardı bir mánisli anıqlay alatuǵınlığı yamasa anıqlay almaytuǵınlığı máselesi aqırına shekem sheshilgen joq.

Programma strukturadaǵı atomlar yamasa ionlar arasındaqı maksimalıq hám minimalıq qashıqlıqlardı da anıqlay aladı. Bunıń ushın menyudegi structura vkladkasındaǵı edit bonds bólimge kiremiz. Ekranda



túrindegi ayna payda boladı. Bul aynadaǵı atom 1 hám atom 2 lerdı toltırıw ushın noutbuktıń tachpadınıń járdeminde kórsetilgen strukturadaǵı qálegen atomǵa barıp sensorlıq panelge barmaqtı bir ret tiygiziw jetkilikli. Tap sonday jollar menen atpm 2 de toltırıladı. Nátiyjede sol eki atom arasındaqı múmkin bolǵan maksimalıq hám minimalıq qashıqlıqlardıń mánisleri shıǵarıladı. Tórende Ti hám Ba atomları arasındaqı qashıqlıqlardı anıqlawǵa misal keltirilgen.



Jańa strukturalıq maǵlıwmatlardı kirgiziw, redaktorlaw hám struktura haqqında informaciyalardı alıw ushın 22-súwrette kórsetilgen ikonaldıń toparın paydalanıw múmkin.



22-súwret. Jańa strukturalıq maǵlıwmatlardı kirgiziw, redaktorlaw hám struktura haqqında informaciyalardı alıw ushın arnalǵan ikonaldıń toparı

Elementar qutınıń súwretiniń payda bolıwı menen oń tárepte ikonaldıń gruppası payda boladı (23-súwret). Bul topardı instrumentariy dep ataymız. Onıń járdeminde elementar qutınıń ústinde hár qıylı manipulyaciyalardı islewge boladı: keńislikte úsh baǵıttıń átirapında burıw (qutı menen birgelikte baziste burıladı, bul jaǵday qutınıń baǵıtların anıqlawǵa múmkinshilik beredi), set rotation angle strelkasınıń járdeminde burıwdıń biz qálegen múyeshin beriw múmkin. Elementar qutınıń súwretin úlkeytiw yamasa kishireytiw (move to front, move to back ikonaları), bir waqıtta eki elementar

qutını kórsetiw hám olar ústinde manipulyaciyalar islew (stereo or mono hám closs or parallel looking ikonaları), atomlar arasındaqı baylanıslardı kórsetiw yamasa jasırıw (bond length ikonası), atomlardıń atamaların kórsetiw yamasa jasırıw (atom label ikonası) hám tağı da basqa múmkinshilikler de bar. Elementar qutınıń ózin kórsetiw yamasa jasırıw ushın representation on/off ikonası xızmet etedi.

### 23-súwret.

Elementar kutı ústinde manipulyaciyalar (hár qıylı kósherler dógeresinde burıw, atomlardıń atamaların kórsetiw yamasa kórsetpew hám basqa da kóp sanlı operaciyalar) ótkeriwge arnalğan instrumentariylar.

Bul súwrette elementar qutını minimallıq burıw múyeshi ushın 30<sup>0</sup> lıq múyesh qoyılğan.



Menyudi úyreniwdi dawam etemiz. Structure menyuinde edit initial data punktiniń járdeminde (yamasa edit initial data ikonasınıń járdeminde) strukturalıq maǵlıwmatlar kestesine qaytadan shıǵıwǵa hám onı qaytadan redaktorlaw múmkin. Zárúr bolǵan jaǵdayda + atom /- atom konpkalarınıń járdeminde strukturaǵa atomlardı qosıw yamasa strukturadan atomdı alıp taslaw múmkin. Struktura haqqındaǵı informaciyanı alıw ushın (yaǵnıy qutıdaǵı barlıq atomlardıń koordinataları, baylanıslardıń uzınlıǵı hám olar arasındaqı múyeshler jáne basqalar) Structure menyuinde Info punktini saylap alıw kerek. Bul punktiniń ishinde tómendegidey kishi punktlar bar:

- Generated positions (ulıwmalıq awhallar),
- Bond length (baylanıstıń uzınlıǵı),
- Bond angles (baylanıs arasındaqı múyesh),
- Space group (simmetriyanıń keńisliktegi gruppası),
- Subgroup (podgruppa),
- Click on atoms (atomǵa barıp basınız).

*BaTiO<sub>3</sub>* kristalları ushın 24-súwrette kórsetilgendey jaǵdaydı alamız.



No	name	crystal coordinates			cartesian coordinates		
		x	y	z	x	y	z
1	Ba	0,5000	0,5000	0,0000	-2,0000	-2,0000	-2,0000
2	Ti	0,5000	0,5000	0,5000	0,0000	0,0000	0,0000
3	O	0,5000	0,5000	0,0000	0,0000	0,0000	-2,0000
4	O	0,5000	0,5000	0,5000	0,0000	-2,0000	0,0000
5	O	0,0000	0,5000	0,5000	-2,0000	0,0000	0,0000

No	atom1	atom2	atom3	angle	quant
2	Ti	Ba	O	95,2640	2
3	Ti	Ba	O	95,2640	2
4	Ti	Ba	Ba	94,7355	10
5	Ba	Ti	O	94,7355	6
6	Ba	Ti	O	94,7355	6
7	Ba	Ti	O	94,7355	6
8	Ba	Ti	Ba	70,5286	12
9	Ba	Ti	O	125,2647	6
10	Ba	Ti	O	125,2647	4
11	Ba	Ti	Ba	109,4714	12
12	Ba	Ti	O	125,2647	6
13	Ba	Ti	Ba	179,4701	1

24-súwret.

Info punkti boyınsha  $BaTiO_3$  kristalları ushın alınatuǵın maǵlıwmatlardıń biri.

Wjci	spec. pos.	generator 1	generator 2	generator 3	generator 4	generator 5
1a	0,0,0					
1b	1/2,1/2,1/2					
12c	0,1/2,1/2	13(0,0,0)				
24d	1/2,0,0	13(0,0,0)				
3e	x,0,0	4(0,0,0)	13(0,0,0)			
f	x,1/2,1/2	4(0,0,0)	13(0,0,0)			
g	x,x,x	4(0,0,0)	3(0,0,0)	5(0,0,0)		
h	x,1/2,0	4(0,0,0)	13(0,0,0)	5(0,0,0)		
i	0,y,z	4(0,0,0)	3(0,0,0)	13(0,0,0)		
j	1/2,y,z	4(0,0,0)	3(0,0,0)	13(0,0,0)		
k	0,y,z	4(0,0,0)	3(0,0,0)	13(0,0,0)	5(0,0,0)	

Info punktindeki atom information by click ikonasını paydalanıp atomlardıń koordinataların, olar arasındadıǵı múyeshler menen qashıqlıqlar anıqlanadı (25-súwret).

25-súwret.

Atomlardıń koordinataları, olar arasındadıǵı múyeshler menen qashıqlıqlar anıqlanatuǵın by click aynası ( $BaTiO_3$  kristalları ushın maǵlıwmatlar berilgen).

atom	crystal coordinates			distance	angle	torsion angle
O	0,5000	1,0000	0,5000	2,8284	35,265	-
Ba	0,0000	1,0000	0,0000	3,4641	0,000	-
Ti	0,5000	0,5000	0,5000	3,4641		
Ba	0,0000	1,0000	0,0000			

Bir kristallografiyalıq dúzilisten (ustanovkadan) ekinshisine ótiw ushın Structure menyuindegi Transform punktini paydalanıw arqalı ámelge asırıladı. Eger usı Transform punkti aktiv emes bolsa, onda simmetriyanıń bul keńisliktegi gruppasında tek 1-sanlı kristallografiyalıq dúzilistiń bar bolatuǵınlıǵın ańgartadı.

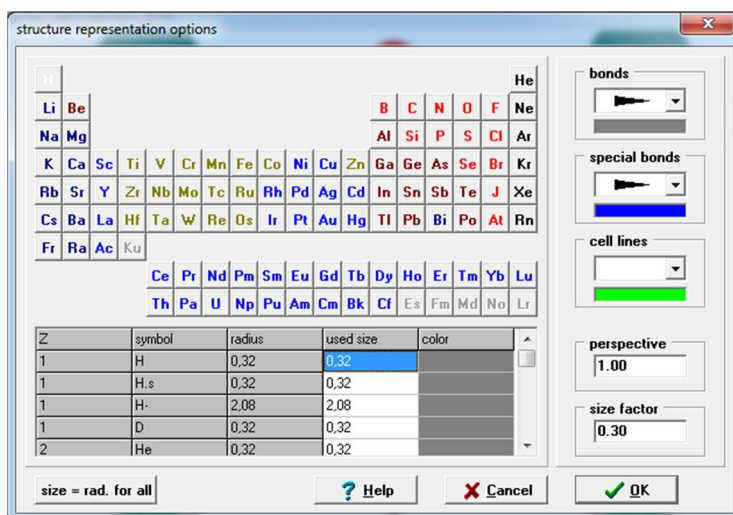
Select menyuindegi operaciylar belgilengen atomlardı (yamasa atomlardıń gruppaların) hám molekullardı alıp taslaydı yamasa jiljitadı.

Options menyuin qaraymız. Structure representation punktini saylap alıp (yamasa structure representation options ikonasını tachpadtıń járdeminde aktivlestirse) D.I.Mendeleev dúzgen ximiyalıq elementlerdiń dáwirlik sistemasınan turatuǵın



dialogliq ayna payda boladı (25-súwret). Bul aynada kerekli bolğan atomlardıń hám atomlar arasındaqı baylanıslardıń reńlerin ózgertiw múmkin. Atomlardı usı kesteniń járdeminde izlew kerek, bul jerde ionnıń zaryadın hám onıń radiusınıń dál mánisin anıqlawğa boladı.

Strukturaniń modeli dúzilgennen keyin kelesi qádemge – rentgenogrammanı esaplawğa hám strukturaniń dálligin (utochnenie strukturi) joqarılátıwğa ótemiz.



25-súwret.  
Structure representation  
aynasınıń súwreti.

### 13-Ş. Ekinshi etap (teoriyalıq rentgenogrammanı dúziw hám strukturanı anıqlaw

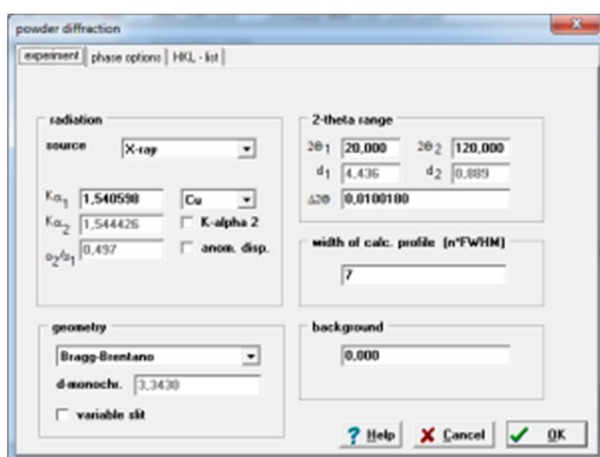
Eksperimenttiń berilgen sharayatlarında hám strukturanı anıqlawdıń dálligi proceduralarında programmada teoriyalıq rentgenogrammanı esaplaw ushın Diffraction hám Refinement, yamasa ikonalarđıń oraylıq gruppası xızmet etedi (26-súwret).



26-súwret. Eksperimenttiń berilgen sharayatlarında hám strukturanı anıqlawdıń dálligi proceduralarında xızmet etetuğın programmadağı teoriyalıq rentgenogrammanı esaplaw ushın Diffraction hám Refinement, yamasa ikonalarđıń oraylıq gruppası. Shepten ońğa qaray diffraction on/off, experimental parameter, phase options, show HKL - list, refinement parameters, start refinement hám basqalar.

Dáslep esaplangan rentgenogrammanı dúzemiz. Bunıń ushın Diffraction menyuinde Diffraction on punktın saylap alıw kerek (yamasa diffraction on/off ikonkasın basıw arqalı ámelge asırıladı). Jańa powder pattern aynası payda boladı. Bul aynada difrakciyaǵa ushıraǵan rentgen tolqınlarınıń intensivligi bolǵan  $I(hkl)$  shamasınıń detektordıń burılıw múyeshi  $2\theta$  dan gárezligi sáwlelendirilgen (21-súwret).

Joqarıdaǵı shep táreptegi múyeshte ashılǵan fayldıń ataması jazıladı, al oń táreptegi joqarǵı múyeshte tachpadtıń kórsetken noqatı ushın detektordıń burılıw múyeshiniń mánisi  $2\theta$ , oǵan sáykes keliwdi tegislikler arasındaǵı qashıqlıq  $d$  hám difrakciyaǵa ushıraǵan rentgen nurlarınıń intensivligi  $Int$  kórinedi.



27-súwret.

Ekspiriment ótkeriletuǵın sharayatlar beriletuǵın experiment aynası.

Ekspiriment ótkerilgen sharayatlar menen baylanıslı bolǵan maǵlıwmatlardı kirkiziw ushın PowderCell programmasında arnawlı experiment aynası bolıp (yamasa experimental parameter ikonası yamasa Diffraction menyuindegi Experiment punkti), onda tómendegidey maǵlıwmatlar berilgen (27-súwret):

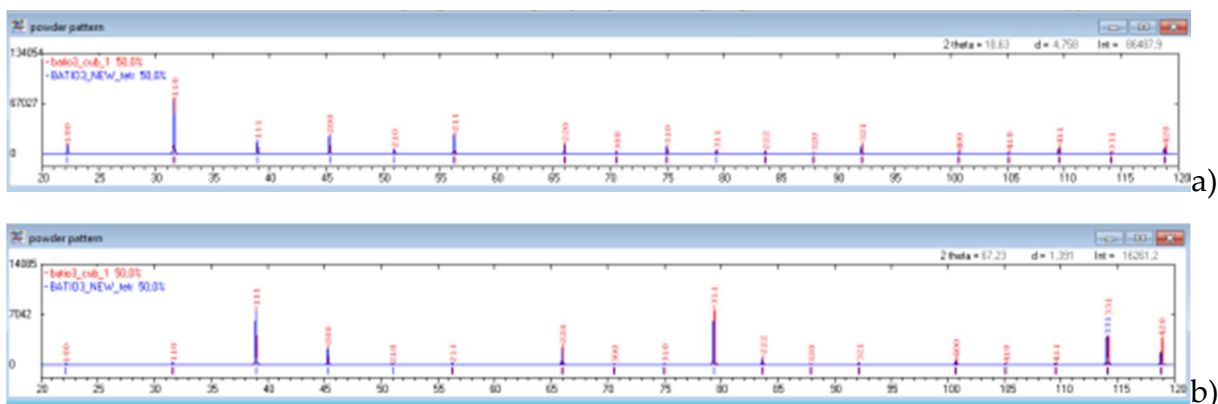
- a) nurlanıw [yaǵnıy rentgen nurları (X-rays) yamasa neytronlar (neutrons)];
- b) anodtıń materialı;
- c) anomallıq dispersiyanı esapqa alıw (anomalous dispersion);
- d)  $K_{\alpha_1}$  hám  $K_{\alpha_2}$  dublet [volfram anodı ushın  $L_{\alpha_1}$  hám  $L_{\alpha_2}$  dublet];
- f) difrakciyanıń geometriyası: Breg-Brentano boyınsha fokuslaw (Bragg- Brentano), Debay-SHerrer kamerası (Debye-Scherrer) hám Gine (Guinier) kamerası (sońǵı jaǵdayda kvarc monoxromatorı paydalanılıp atır dep boljanadı);
- g) sańlaqlardıń turaqlı yamasa ózgermeli sisteması (variable slit);
- h) detektordıń múyeshiniń diapazonı  $2\theta$  (2-theta range) hám detektor ushın skannerlewdiń múyeshiniń shaması ( $\Delta 2\theta$ ).

Bul aynada turaqlı fondı (background) hám piktiń biyikliginiń yarımındaǵı reflektiń keńligin (FWHM yamasa piktiń yarım keńligi dep atalatuǵın shamalı) beriwdiń múmkinshiligi de bar.

PowderCell programmasında bir neshe obektler yamasa fazalar ushın bir rentgenogrammanı dúziwdiń múmkinshiligi bar. Bunıń ushın olardıń strukturası haqqındaǵı maǵlıwmatlar kirgizilgen fayllardı ashıw jetkilikli. Usınday jollar menen fazalıq analizdi ámelge asırıw múmkin.

28-súwrette  $BaTiO_3$  kristalları bir waqıtta kublıq hám tetragonallıq fazaǵa iye bolǵan jaǵday ushın alınǵan teoriyalıq difraktogramma (a) hám neytronogramma (b) berilgen. Bul súwrette kublıq fazadan tetragonallıq fazaǵa ótiw processinde kublıq strukturaǵa sáykes keletuǵın kóp sanlı piklerdiń orınlarınıń ózgeretuǵınlığı, al ayırımlarınıń eki pikke aylanatuǵınlığı kórinip tur.

Sonıń menen birge rentgen tolqınlarında alınǵan difrakciyalıq piklerdiń salıstırmalı intensivliginiń neytron tolqınlarında alınǵan difrakciyalıq piklerdiń salıstırmalı intensivlikleriniń birdey bolmaytuǵınlığın ańsat túrde ańǵarıwǵa boladı.



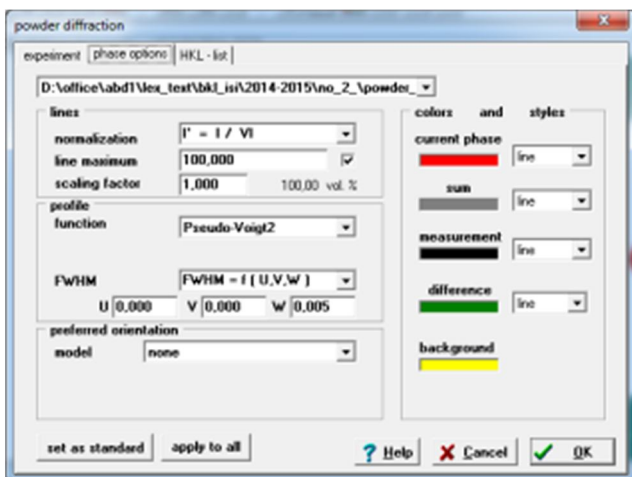
28-súwret.  $BaTiO_3$  kristalları bir waqıtta kublıq hám tetragonallıq fazaǵa iye bolǵan jaǵday ushın alınǵan teoriyalıq difraktogramma (a) hám neytronogramma (b).

Dialoglıq phase options aynasınıń (29-súwret) járdeminde (yamasa phase options ikonasınıń járdeminde) teoriyalıq shtrix-diagrammanıń (line options) parametrin hám ayırım piktiń profiliniń fuknciyasın beretuǵın parametrlerdı anıqlawǵa boladı (profile):

- maksimalıq sıızıqtıń biyikligi line maximum (biyikliktiń mánisin 100 ge teń etip alıwǵa boladı),
- bir shkalaǵa alıp keliw koefficienti scaling factor ( 1 ge teń dep kabil etiwge

boladı),

- profillik funkciyanıń túri,
- teksturanıń bar yamasa joq ekenligi (preferred orientation) hám onıń parametrleri.



29-súwret.

Phase options aynası.

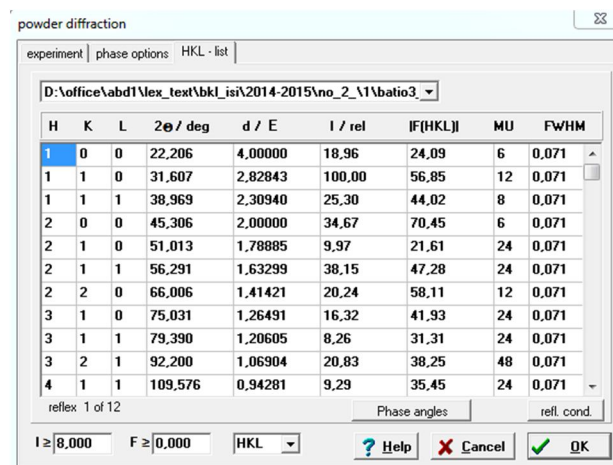
"phase options" aynasınıń shep bóliminde V levoy chasti okna phase options mojno opredelit cvet i stil linii dlya: izertlenip atırǵan fazanıń profili (current phase), qosındı profil (sum), eksperimentallıq profil (measurement), esaplangan hám ólshengen profiller arasındaqı ayırma (difference) hám fon (background) ushın sıyıqtıń reńin hám stilin anıqlawǵa boladı.

Kelesi HKL – list aynasında (30-súwret) hár bir fazadaǵı sáykes refleks ushın d tegislikler arasındaqı qashıqlıqqa juwap beretuǵın múyeshlik mánistiń,  $I/rel$  salıstırmalı intensivliktiń,  $|F(hkl)|$  strukturalıq amplitudanıń moduliniń, shashırawdıń multiplikaciyası MU niń hám yarım keńlik FWHM tiń shamaları beriledi. Aynanıń tómeniń bólimindegi  $I > \dots$  hám  $F > \dots$  maydanların paydalanıp bazı bir mánisten úlken bolǵan intensivlikke (yamasa strukturalıq amplitudaǵa) iye bolǵan shaǵılısıwları selekciyalawǵa (yaǵnıy ayırıp alıwǵa) boladı. Sonıń menen birge berilgen indekslerge iye bolǵan shaǵılısıwları da ayırıp alıw múmkin (30-súwret).

30-súwret.

HKL-list aynası.

Bul súwrette kublıq  $BaTiO_3$  kristalları ushın  $I \geq 8.000$  shártı berilgen. Sonlıqtan tek 12 refleks (shağılısıw) ğana qalğan.



H	K	L	2θ / deg	d / E	I / rel	F(HKL)	MU	FWHM
1	0	0	22,206	4,00000	18,96	24,09	6	0,071
1	1	0	31,607	2,82843	100,00	56,85	12	0,071
1	1	1	38,969	2,30940	25,30	44,02	8	0,071
2	0	0	45,306	2,00000	34,67	70,45	6	0,071
2	1	0	51,013	1,78885	9,97	21,61	24	0,071
2	1	1	56,291	1,63299	38,15	47,28	24	0,071
2	2	0	66,006	1,41421	20,24	58,11	12	0,071
3	1	0	75,031	1,26491	16,32	41,93	24	0,071
3	1	1	79,390	1,20605	8,26	31,31	24	0,071
3	2	1	92,200	1,06904	20,83	38,25	48	0,071
4	1	1	109,576	0,94281	9,29	35,45	24	0,071

Eger "powder pattern" aynasınıw aktivlestirsek, onda rentgen difrakciyası súwreti ústinen manipulyaciýalar islewge járdem beretuĝın ikonalar gruppası payda boladı (31-súwret). Bul ikonalarđın járdeminde rentgenogrammanı (difraktogrammanı) shepke, ońǵa jılıstırıw, qısıw/keńeytiw, úlkeytiw/kishireytiw múmkinshiliklerine iye bolamız.

Ikona astındaĝı ózi ózinen shıǵatuĝın menyu (32-súwret) rentgenogrammadaĝı refleksler ushın hár qıylı belgilewlerdi qabıl etiwge járdem beredi (shağılıstırıw indeksleri, tegislikler arasındaĝı qashılıq, intensivlik, shağılısıw ushın yarım keńlik hám basqalar). Ikonalarđın bul gruppasınıw astındaĝı ikonalar eksperimentallıq maǵlıwmatlardı kirgizbegenshe aktiv emes emes hám olar aktivlestirilgennen keyin eksperimentallıq difrakciyalıq profiller ústinde manipulyaciýalar islew ushın kerek boladı.



31-súwret.

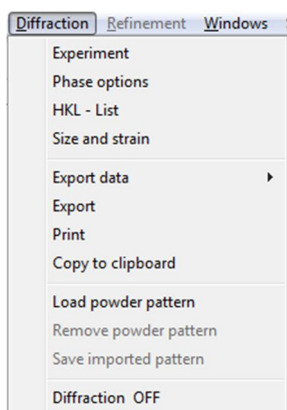
Rentgenogramma  
(difraktogramma) ústinen  
manipulyaciýalar islew  
ushın qollanılatusın  
ikonalar.



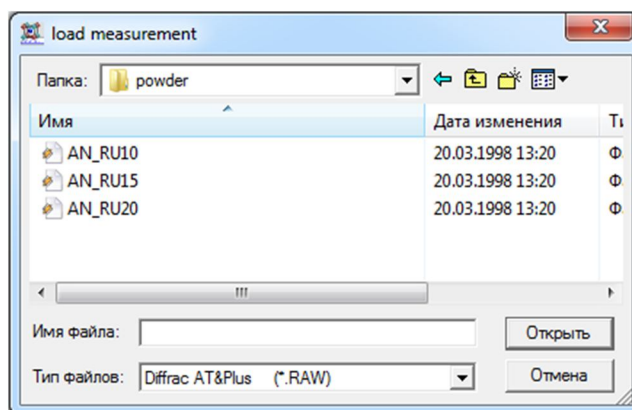
32-súwret.

Reflekslerdiń  
belgileniwlerin ózgertiw  
ushın qollanılatusın  
ikonalar.

Eksperimentallıq difraktogrammanı kompyuterge kirgiziw ushın "Diffraction" vkladkasındaǵı (menyuindegi) "Load powder pattern" punkti qollanıladı (33-súwret). Bunday jaǵdayda "load measurement" aynası payda boladı hám bul aynada eksperimentallıq maǵlıwmatlarga iye faylǵa joldı kórsetiw kerek boladı (34-súwret). Eksperimentallıq maǵlıwmatlar kirgizilgen fayldıń formatı mınaday etip alınadı: fayl \*,x\_y "rasshiresinesine" iye bolıwı hám burılıw múyeshi  $2\theta$  menen sáykes keliwshi intensivlik I diń mánislerin óz ishine alatıwın eki baǵanadan turıwı múmkin (birinshi baǵanada  $2\theta$  múyeshleriniń mánisleri, al ekinshi baǵanada sáykes keliwshi intensivlikler jaylastırıladı).



33-súwret. Diffraction menyuindegi  
"Load powder pattern" punkti.

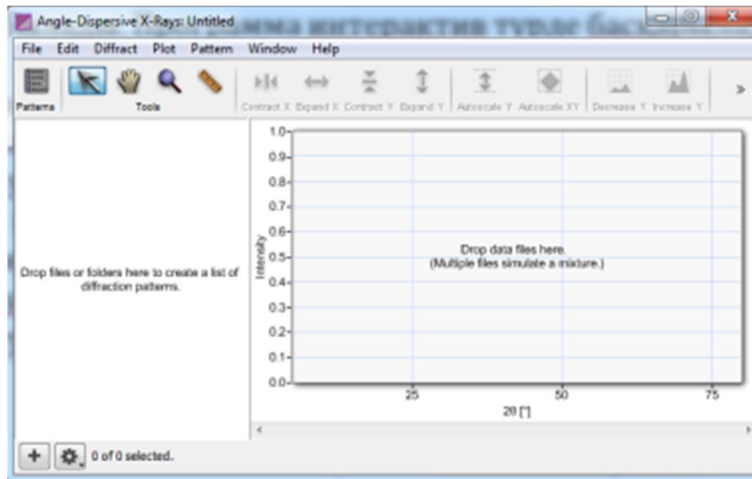


34-súwret. Eksperimentallıq  
maǵlıwmatlardı kirgiziw ushın arnalǵan  
"load measurement" aynası.

## 14-§. CrystalDiffraçt programması hám onıń járdeminde alınǵan nátıyjeler

CrystalDiffract – kompyuter ekranındaǵı polikristallardıń (untaq kristallardıń) rentgenlik hám neytronlıq difrakciyalıq súwretin (difraktogramması menen debaegrammasın) analizlew (tallaw) ushın dóretilgen programma bolıp tabıladı. Programma interaktiv túrde basqarıladı hám alınǵan eksperimentallıq xarakteristikaların anıqlawǵa múmkinshilik beredi. CrystalDiffract programması rentgen nurları menen neytronlar nurlarınıń difrakciyasınıń saldarınan alınatuǵın súwretlerdi modellestiriw ushın berilgen kristall ushın alınǵan hám saqlap qoyılǵan maǵlıwmatlardı oqıy aladı. PowderCell programması sıyaqlı maǵlıwmatlar ústinde hár qıylı manipulyaciyalardı islewge múmkinshilik beredi.

35-súwrette CrystalDiffract programmasın aktivlestirgende kompyuter monitorında shıǵatuǵın aynanıń súwreti keltirgen.



35-súwret.  
CrystalDiffract programmasın  
aktivlestirgende kompyuter  
monitorında shıǵatuǵın  
aynanıń súwreti.

Aynadaǵı "Patterns" ikonası "Drop files of folders here to create a list of diffraction patterns" bólimin joǵaltıwǵa hám aynanıń barlıq maydanında difrakciyalıq súwretti sáwlelendiriwge múmkinshilik beredi.

CrystalDiffract programması keńeytiliwi \*.cmdf, \*.cmd5, \*.cmd4, \*.cmdf hám taǵı basqalar bolǵan binarlıq fayllar menen is alıp baradı [mısalı Anorthite - CaAl<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>O<sub>8</sub>.cmdf, SiO<sub>2</sub>, Cristobalite (Beta, Fd.cmd3) hám taǵı basqalar].

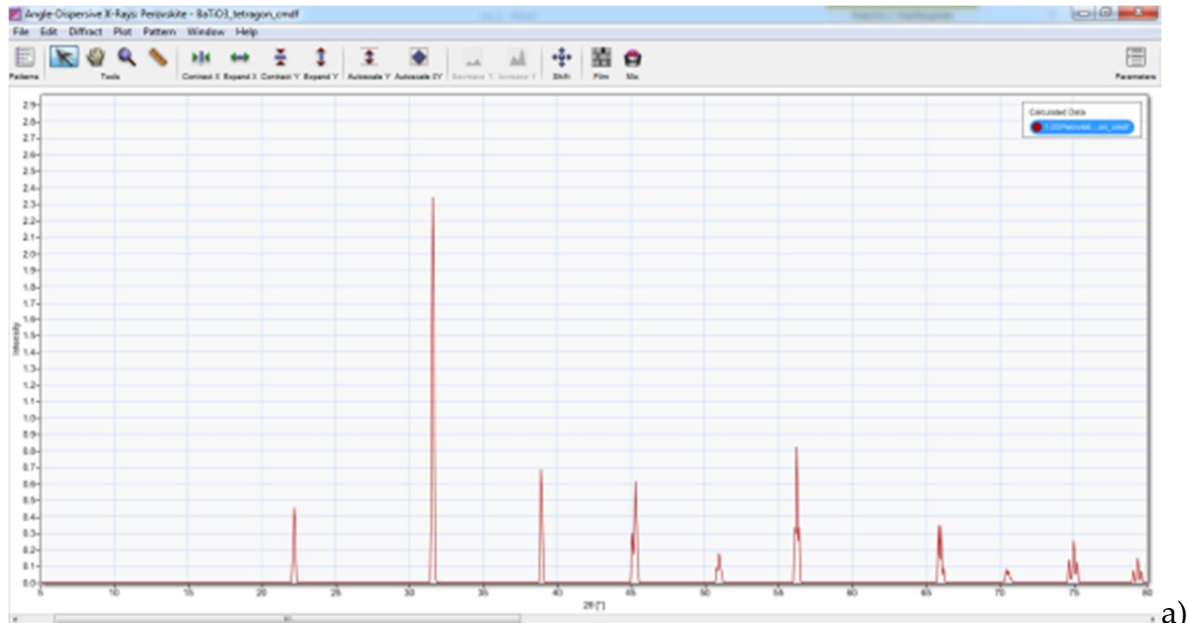
36-a súwrette BaTiO<sub>3</sub> kristallınıń tetragonallıq fazası ushın alınǵan difraktogramma kórsetilgen

36-b súwrette bolsa tap sol jaǵday ushın debaegramma sáwlelendirilgen.

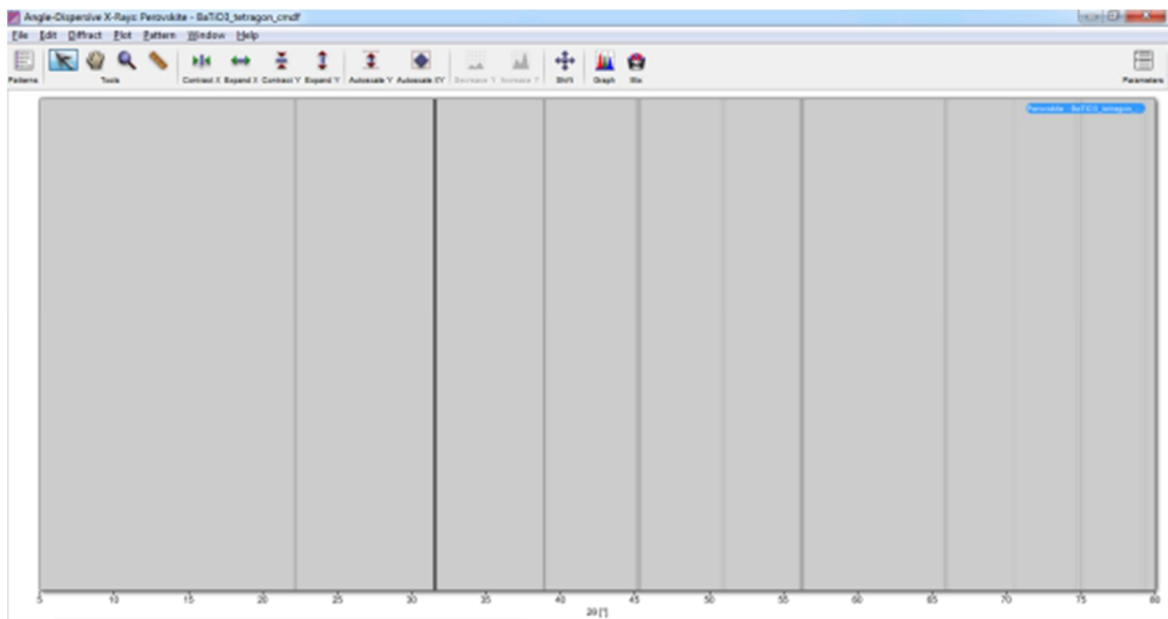
36-súwrette kórsetilgen difraktogramma menen debaegrammanı alıw ushın mıs



anodınıń  $K\alpha_1$  hám  $K\alpha_2$  xarakteristikalıq dubletleri paydalanılǵan. Usınıń nátiyjesinde  $2\theta > 60^\circ$  bolǵan múyeshlerde difrakciyalıq sıızıqtıń eki sıızıqqa bóliniwi ayqın túrde kórinedi.



a)



b)

36-súwret.  $BaTiO_3$  kristallınıń tetragonallıq fazası ushın alınǵan difraktogramma (a) menen debaegramma (b). Bul súwretlerdi alıw ushın mıs anodınıń  $K\alpha_1$  hám  $K\alpha_2$  xarakteristikalıq dubleti paydalanılǵan (bul jaǵday  $2\theta > 60^\circ$  bolǵan múyeshlerde anıq kórinip tur).

3-kestede CrystalDiffract programmasınıń járdeminde  $BaTiO_3$  kristallınıń tetragonallıq fazası ushın jazılǵan tolıq maǵlıwmatlar keltirilgen (biz onı Perovskite -



BaTiO<sub>3</sub>\_tetragon\_cmdf Listing.list faylı túrinde jazıp aldığımız hám .list keńeyiwine iye fayldı "Bloknot" redaktorınıń járdeminde ashtıq. Kestelerde m(hkl) arqalı (hkl) tegislikleri ushın qaytalanıw faktorınıń mánisi berilgen (biz joqarıda qaytalanıw faktorın p arqalı belgilegen edik).

3-keste.

*BaTiO<sub>3</sub>* kristallınıń tetragonallıq fazası ushın jazılğan maǵlıwmatlar

X-ray wavelength: 1.5405 Å

Filename: Perovskite - BaTiO<sub>3</sub>\_tetragon\_cmdf (volume fraction: 100.00%)

UNIT CELL DATA

a: 3.9998 b: 3.9998 c: 4.0180 Å

alpha: 90.000 beta: 90.000 gamma: 90.000 deg

cell volume: 64.282 Å<sup>3</sup>

calculated density: 6024.16 kg / m<sup>3</sup>

RECIPROCAL UNIT CELL DATA

a\*: 0.2500 b\*: 0.2500 c\*: 0.2489 1/Å

alpha\*: 90.000 beta\*: 90.000 gamma\*: 90.000 deg

Space Group Symbol: P4mm

ASYMMETRIC UNIT

label	----- Site Occupancy -----	x	y	z	Num In
Cell					
Ba01	Ba 1.000	0.0000	0.0000	0.0000	1
O01	O 1.000	0.5000	0.5000	0.0160	1
O02	O 1.000	0.5000	0.0000	0.5150	2
Ti01	Ti 1.000	0.5000	0.5000	0.4820	1

Total of: 5 atoms in the unit cell

REFLECTIONS LIST

Notes:

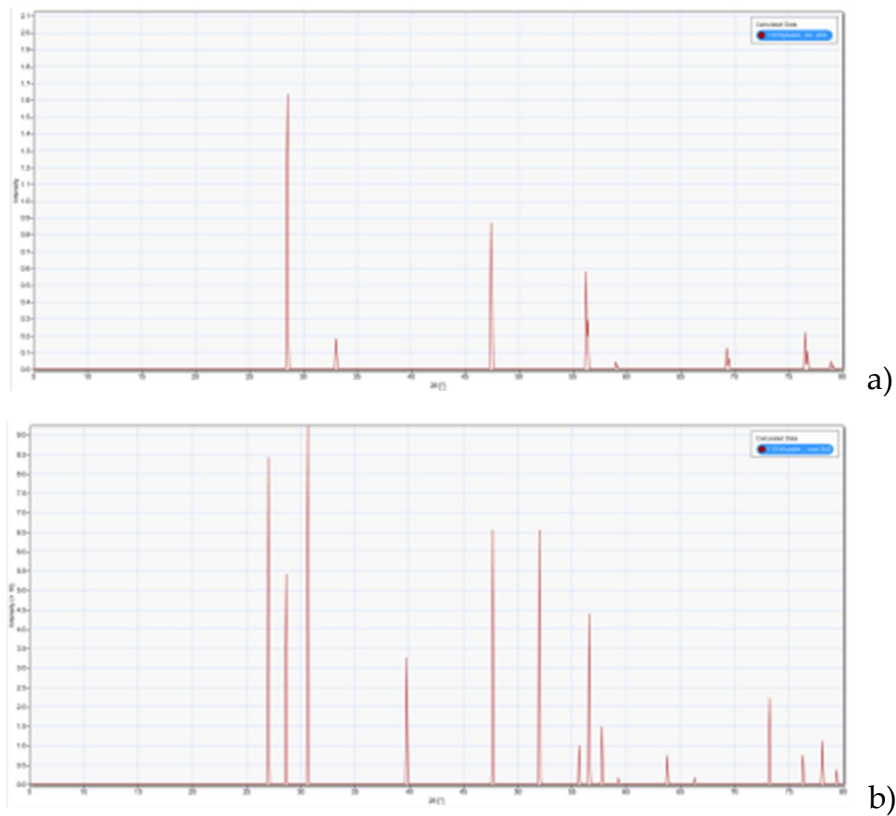
1. Intensities are relative to 1 cubic angstrom of material

2. multiplicities may show unexpected values if two reflections with different sets of Miller indices have the same d-spacing. In these cases, CrystalDiffract lists the sum of the multiplicities for all reflections with the same d-spacing.

ref no.	(N)	h	k	l	d(hkl)	2-Theta	Intensity	I/Imax	m(hkl)
[ 1]	1	0	0	1	4.01800	22.1040	2.68957e-002	9.7	2
[ 2]	1	0	1	0	3.99980	22.2059	5.24134e-002	18.9	4
[ 3]	2	0	1	1	2.83470	31.5335	2.77995e-001	100.0	8
[ 4]	2	1	1	0	2.82829	31.6069	1.38255e-001	49.7	4
[ 5]	3	1	1	1	2.31277	38.9070	1.06135e-001	38.2	8
[ 6]	4	0	0	2	2.00900	45.0889	4.77939e-002	17.2	2
[ 7]	4	0	2	0	1.99990	45.3054	9.58741e-002	34.5	4
[ 8]	5	0	1	2	1.79527	50.8139	1.46408e-002	5.3	8
[ 9]	5	0	2	1	1.79038	50.9624	1.39910e-002	5.0	8
[ 10]	5	1	2	0	1.78876	51.0118	1.37812e-002	5.0	8
[ 11]	6	1	1	2	1.63785	56.1050	5.29870e-002	19.1	8
[ 12]	6	1	2	1	1.63414	56.2437	1.05648e-001	38.0	16
[ 13]	8	0	2	2	1.41735	65.8368	5.54934e-002	20.0	8
[ 14]	8	2	2	0	1.41414	66.0051	2.79886e-002	10.1	4
[ 15]	9	0	0	3	1.33933	70.2132	1.65071e-003	0.6	2
[ 16]	9	1	2	2	1.33595	70.4172	1.24748e-002	4.5	16
[ 17]	9	2	2	1	1.33394	70.5394	6.01280e-003	2.2	8
[ 18]	9	0	3	0	1.33327	70.5802	2.97000e-003	1.1	4
[ 19]	10	0	1	3	1.27002	74.6715	2.25965e-002	8.1	8
[ 20]	10	0	3	1	1.26542	74.9899	2.25651e-002	8.1	8
[ 21]	10	1	3	0	1.26485	75.0296	2.25611e-002	8.1	8
[ 22]	11	1	1	3	1.21047	79.0364	1.21607e-002	4.4	8
[ 23]	11	1	3	1	1.20648	79.3493	2.30149e-002	8.3	16
[ 24]	12	2	2	2	1.15639	83.5310	2.76969e-002	10.0	8

[ 25]	13	0	2	3	1.11283	87.6015	4.14125e-003	1.5	8
[ 26]	13	0	3	2	1.11089	87.7937	3.94531e-003	1.4	8
[ 27]	13	2	3	0	1.10934	87.9475	3.78432e-003	1.4	8
[ 28]	14	1	2	3	1.07211	91.8521	2.86172e-002	10.3	16
[ 29]	14	1	3	2	1.07037	92.0442	2.86941e-002	10.3	16
[ 30]	14	2	3	1	1.06934	92.1596	2.87799e-002	10.4	16
[ 31]	16	0	0	4	1.00450	100.1347	4.85863e-003	1.7	2

37-súwretlerde ZnS kristallınıń kublıq (a) hám geksagonallıq (b) fazaları ushın alınǵan teoriyalıq difraktogrammalar berilgen.



37-súwret. ZnS kristallınıń kublıq (a) hám geksagonallıq (b) fazaları ushın alınǵan teoriyalıq difraktogrammalar. Esaplawlar mıs anodınıń  $\alpha_1$  hám  $\alpha_2$  xarakteristikalıq nurları ushın orınlangan.

ZnS kristallınıń kublıq fazası ushın 3-kestege sáykes keste 4-keste túrinde berilgen.

4-keste.

ZnS kristallınıń kublıq (sfalerit) fazası ushın jazılǵan maǵlıwmatlar

X-ray wavelength: 1.5405 Å

Filename: Sphalerite - cubic ZnS (volume fraction: 100.00%)

#### UNIT CELL DATA

a: 5.4200    b: 5.4200    c: 5.4200 Å

alpha: 90.000    beta: 90.000    gamma: 90.000 deg

cell volume: 159.220 Å<sup>3</sup>

calculated density: 4064.52 kg / m<sup>3</sup>

#### RECIPROCAL UNIT CELL DATA

a\*: 0.1845    b\*: 0.1845    c\*: 0.1845 1/Å

alpha\*: 90.000    beta\*: 90.000    gamma\*: 90.000 deg

Space Group Symbol: F -4 3 m

#### ASYMMETRIC UNIT

label	----- Site Occupancy -----	x	y	z	Num In Cell
S	S 1.000	0.0000	0.0000	0.0000	4
Zn	Zn 1.000	0.2500	0.2500	0.2500	4

Total of: 8 atoms in the unit cell

#### REFLECTIONS LIST

Notes:

1. Intensities are relative to 1 cubic angstrom of material
2. multiplicities may show unexpected values if two reflections with different sets of Miller indices have the same d-spacing. In these cases, CrystalDiffract lists the sum of the multiplicities for all reflections with the same d-spacing.

ref no. (N)	h	k	l	d(hkl)	2-Theta	Intensity	I/Imax	m(hkl)
[ 1]	3	1	1	3.12924	28.4992	2.26674e-001	100.0	8
[ 2]	4	0	0	2.71000	33.0251	2.69134e-002	11.9	6
[ 3]	8	0	2	1.91626	47.4009	1.38045e-001	60.9	12

[ 4]	11	1	1	3	1.63419	56.2418	9.27448e-002	40.9	24
[ 5]	12	2	2	2	1.56462	58.9827	7.07650e-003	3.1	8
[ 6]	16	0	0	4	1.35500	69.2844	2.06824e-002	9.1	6
[ 7]	19	1	3	3	1.24343	76.5526	3.51171e-002	15.5	24
[ 8]	20	0	2	4	1.21195	78.9211	7.93913e-003	3.5	24
[ 9]	24	2	2	4	1.10635	88.2469	4.31122e-002	19.0	24
[ 10]	27	1	1	5	1.04308	95.1971	2.82956e-002	12.5	32

ZnS kristallarının geksagonallıq fazası ushın (yağniy vyurcit ushın) tómendegidey keste alınadı:

5-keste.

ZnS kristallının geksagonallıq (vyurcit) fazası ushın jazılğan mağlıwmatlar

X-ray wavelength: 1.5405 Å

Filename: Wurtzite - hexagonal ZnS (volume fraction: 100.00%)

#### UNIT CELL DATA

a: 3.8100                      b: 3.8100                      c: 6.2300 Å

alpha: 90.000      beta: 90.000                      gamma: 120.000 deg

cell volume: 78.319 Å<sup>3</sup>

calculated density: 4131.51 kg / m<sup>3</sup>

#### RECIPROCAL UNIT CELL DATA

a\*: 0.3031                      b\*: 0.3031                      c\*: 0.1605 1/Å

alpha\*: 90.000                      beta\*: 90.000                      gamma\*: 60.000 deg

Space Group Symbol: P 63 m c

#### ASYMMETRIC UNIT

label	----- Site Occupancy -----	x	y	z	Num In Cell
S1	S 1.000	0.3333	0.6667	0.3750	2
Zn1	Zn 1.000	0.3333	0.6667	0.0000	2

Total of: 4 atoms in the unit cell

## REFLECTIONS LIST

Notes:

1. Intensities are relative to 1 cubic angstrom of material
2. multiplicities may show unexpected values if two reflections with different sets of Miller indices have the same d-spacing.

In these cases, CrystalDiffract lists the sum of the multiplicities for all reflections with the same d-spacing.

ref no.	(N)	h	k	l	d(hkl)	2-Theta	Intensity	I/Imax	m(hkl)
[ 1]	1	0	1	0	3.29956	26.9994	9.01494e-002	91.2	6
[ 2]	4	0	0	2	3.11500	28.6322	5.78342e-002	58.5	2
[ 3]	2	0	1	1	2.91585	30.6340	9.88252e-002	100.0	12
[ 4]	5	0	1	2	2.26507	39.7605	3.48049e-002	35.2	12
[ 5]	2	1	1	0	1.90500	47.6984	6.99408e-002	70.8	6
[ 6]	10	0	1	3	1.75754	51.9850	7.01188e-002	71.0	12
[ 7]	4	0	2	0	1.64978	55.6640	1.07261e-002	10.9	6
[ 8]	6	1	1	2	1.62518	56.5817	4.69959e-002	47.6	12
[ 9]	5	0	2	1	1.59481	57.7596	1.58931e-002	16.1	12
[ 10]	16	0	0	4	1.55750	59.2792	1.79785e-003	1.8	2
[ 11]	8	0	2	2	1.45793	63.7839	7.98555e-003	8.1	12
[ 12]	17	0	1	4	1.40847	66.3051	1.84665e-003	1.9	12
[ 13]	13	0	2	3	1.29176	73.2079	2.37237e-002	24.0	12
[ 14]	5	1	2	0	1.24712	76.2859	8.01749e-003	8.1	12
[ 15]	6	1	2	1	1.22285	78.0823	1.20360e-002	12.2	24
[ 16]	18	1	1	4	1.20579	79.4037	4.02205e-003	4.1	12
[ 17]	26	0	1	5	1.16566	82.7198	1.69184e-002	17.1	12
[ 18]	9	1	2	2	1.15777	83.4084	7.18817e-003	7.3	24
[ 19]	20	0	2	4	1.13254	85.7045	7.97369e-004	0.8	12

[ 20]	9	0	3	0	1.09985	88.9056	1.09683e-002	11.1	6
[ 21]	14	1	2	3	1.06914	92.1816	2.68209e-002	27.1	24
[ 22]	36	0	0	6	1.03833	95.7723	1.81088e-003	1.8	2
[ 23]	13	0	3	2	1.03710	95.9227	1.08404e-002	11.0	12

Paragraftıń aqırında CrystalDiffract programmasınń difrakciyalıq maǵlıwmatlar ústinen kóp sanlı manipulyacıyalardı islewge, simmetriyanıń gruppaların tabıwǵa, atomlardıń yamasa ionlardıń noqatlardıń durıs sistemasınń qaysı noqatların iyeleytuǵınlıǵın anıqlawǵa múmkinshiliklerdi beretuǵınlıǵın, biraq PowderCell programmasındaǵıday elementar qutınń ústinde manipulyacıyalardı islewge múmkinshilik bermeytuǵınlıǵın atap ótemiz.

## Uulıwmalıq juwmaqlar

1. Rentgen nurlarınıń kristallıq denelerde difrakciyasınıń fizikalıq tiykarları bayanlangan. Polikristallıq denelerdegi yamasa untalğan kristallardağı rentgen nurlarınıń difrakciyasınıń ózgeshelikleri shashırawdıń kinematikalıq teoriyasınıń tiykarında túsindirilgen. Bunday obektlerdegi difrakciya qubılısı tuwrı keńislikte de, kerı keńislikte de interpretaciyalangan. Atap aytqanda difrakciyaǵa ushıraǵan rentgen nurlarınıń intensivligine hár qanday faktorlardıń (strukturalıq faktor, polyarizaciyalıq faktor, temperaturalıq faktor, qaytalanıw faktori hám basqalar) tásiri ayqın túrde kórsetilgen.

2. PowderCell hám CrystalDiffract kompyuterlik programmaların polikristall yamasa untalğan kristallardan alınǵan úlgilerdiń atomlıq-kristallıq strukturasını anıqlaw ushın paydalanıwdıń ózine tán ózgeshelikleri bayanlangan. Bul kompyuterlik programmalar  $BaTiO_3$ ,  $ZnS$  sıyaqlı kristallardıń hár qıylı fazalarınıń strukturaların úyreniw ushın qollanılǵan. Alınǵan maǵlıwmatlardıń barlıǵı da PowderCell hám CrystalDiffract programmalarınıń atomlıq-kristallıq strukturalardı, strukturalıq fazalıq ótiwlerdi yamasa strukturalıq processlerdi úyreniwshiler ushın oǵada úlken múmkinshiliklerdi jaratıp beretuǵınlıǵın kórsetedi.

3. Paydalanılǵan hám alınǵan maǵlıwmatlar házirgi zaman rentgenostrukturalıq analizin úyreniwshiler ushın oqıw- jáne ilimiy-metodikalıq jumıs bolıp tabıladı.



## ÁDEBIYATLAR DIZIMI

1. Friedrich W, Knipping P, von Laue M. "Interferenz-Erscheinungen bei Röntgenstrahlen". Sitzungsberichte der Mathematisch-Physikalischen Classe der Königlich-Bayerischen Akademie der Wissenschaften zu München. 1912. 303. Bragg W.L. The Specular Reflexion of X-rays. Nature 90. 410.
2. A.Gine. Rentgenografiya kristallov. Teoriya i praktika. Gosudarstvennoe izdatelstvo fiziko-matematicheskoy literaturı. Moskva. 1961. 604 s.
3. A.N.Ivanov. Difrakcionnye metody issledovaniya materialov (spekurs dlya spetsialnosti "fizika metallov"). Konspekt lekciy. Moskva. 2008 god. 98 s.
4. Ewald P.P. - Ann. Phys., 1917, v. 54, p. 519; Z. Phys., 1920, v. 2, p. 332; 1924, v. 30, p. 1; Pyys. Zschr., 1925, v. 26, p. 29; Handbuch d. Physik, XXIII/2, p. 207-246, 2-nd Ed. Berlin; Julius Springer, 1933.
5. S.S.Gorelik, L.N.Rastorguev, YU.A.Skakov. Rentgenograficheskiy i elektronograficheskiy analiz metallov. Prakticheskoe rukovodstvo po rentgenografii, elektronografii i elektronnoy mikroskopii metallov, poluprovodnikov i dielektrikov. Izdanie vtoroe, ispravlennoe i dopolnennoe. Izdatelstvo "Metallurgiya". Moskva. 1970. 366 s.
6. G.B.Bokiy, M.A.Poray-Koshic. Rentgenostrukturniy analiz. Tom 1. Izdatelstvo Moskovskogo universiteta. Moskva. 490 s.
7. Powder Diffraction. Theory and Practice. Edited by Robert E. Dinnebier (Max-Planck Institute for Solid State Research, Stuttgart, Germany), Simon J. L. Billinge (Department of Physics and Astronomy, Michigan State University, USA). RSC Publishing. 582 p.
8. A.S.Efremov, V.I.Ivanov, G.A.Ryazankin, A.P.Karpenko, V.SH.SHextman. Avtomatizaciya obrabotki standartnix rentgenogramm s pomoyuy EVM. Zavodskaya laboratoriya. 1984. № 6. S. 46-47.
9. V.I.Ivanov, V.SH.SHextman. Obrabotka i rasshifrovka rentgenogramm kachaniya v rejime dialoga s EVM. Zavodskaya laboratoriya. 1984. № 6. S. 47-50.

10. E.V. SHulakov. Rasshifrovka lauegramm v rejime dialoga s EVM. Zavodskaya laboratoriya. 1984. № 6. S. 50-53.
11. D.E.Batova, V.I.Ivanov, A.V.Kopil, S.S.Xasanov, V.SH.SHextman, E.V.SHulakov. Modelirovanie rentgenogramm monokristallov s pomosh'yu EVM. Zavodskaya laboratoriya. 1984. № 6. S. 53-56.
12. International Tables for X-ray Crystallography. Vol. 1. Symmetry Groups. Published for the International Union of Crystallography by the Kynoch Press. Birmangim. England. 1969. 558 p.
13. E.M.Burova, N.P.Jidkov, A.G.Zilberman, V.V.Zubenko, L.SH.Nabutovskiy, M.M.Umanskiy, B.M.IIedrin. Informacionno-poiskovaya sistema dlya rentgenovskogo fazovogo analiza. Kristallografiya. 1977. T. 22. № 6. S. 1182-1190.
14. V.F.Demechenko, I.K.Poxodnya, V.I.Karmanov, N.I.Tarasevich. Kristallografiya. 1974. T. 19. № 3. S. 639-643.
15. B.R.Amangeldiev, L.A.Brichkin, A.B.Murzaxmetov, YU.V.SHipovalov. Rentgenografiya mineralnogo sirya. 1965. 10. S. 56-68.
16. Byrom P.G., Lucas B.W. // POWABS: a komputer program for the automatic determination of reflection conditions in powder diffraction patterns/ J. Appl. Crystallography. 1991. Vol. 24. No 1. P. 70-72. -Angl. RJ Fiz. 1993. 5E59O.
17. L.K.Frevel. Analyt. Chem. 1965. V. 37. P. 471.
18. J.Fiala. J. Phys. and Appl. Phys. 1972. V. 5. P. 1874.
19. B.A.Abdikamalov. Formirovanie topograficheskogo izobrajeniya monokristallov v metode uglovogo skanirovaniya na proxojdenie. Statya v sb. «Issledovaniya po fizike tverdogo tela». Nukus. 1983. S. 14-21.
- 20 V.I.Iveronova, G.P.Revkevich. Teoriya rasseyaniya rentgenovskix luchey. Izdatelstvo Moskovskogo universiteta. Moskva. 1972. 278 s.
21. A.I.Kitaygorodskiy. Rentgenostrukturniy analiz. Gosudarstvennoe izdatelstvo texniko-teoreticheskoy literaturi. Moskva-Leningrad. 1950. 651 s.
22. A.A.Rusakov. Rentgenografiya metallov. Atomizdat. Moskva. 1977. 480 s.

23. Fizika tverdogo tela. Struktura tverdogo tela i magnitnie yavleniya. Specpraktikum. Pod redakciey A.A.Kacnelsona i G.S.Krinchika. Izdatelstvo Moskovskogo universiteta. 1982. 304 s.
24. M.M.Umanskiy, Z.K.Zolina. Sbornik zadach po rentgenostrukturnomu analizu. Izdatelstvo Moskovskogo universiteta. 1975. 232 s.
25. Umanskiy YA.S., Skakov YU.A., Ivanov A.N., Rastorguev L.N. Kristallografiya, rentgenografiya i elektronnaya mikroskopiya. M.: Metallurgiya, 1982, 632 s.
26. R.Djeyms. Opticheskie principy difrakcii rentgenovskix luchey. Moskva. Izdatelstvo inostrannoy literaturi. 1950. 572 s.
27. V.SH.SHextman, R.Dilanyan. Vvedenie v rentgenovskuyu kristallografiyu. Uchebnoe posobie dlya studentov i aspirantov, obuchayuyixsya po specialnostyam "Fizika kondensirovannix sred" i "Fizicheskoe materialovedenie". Redakcionno-izdatelskiy otdel IPXF RAN. Chernogolovka. 2002. 144 s.
28. B.A.Abdikamalov, V.I.Ivanov, V.SH.SHextman, I.M.SHmitko. Issledovanie nizkotemperaturnogo strukturnogo prevrasheniya v kristallax prustita. . Fizika tverdogo tela. T.20. № 10. 1978. S. 2963-2968.
29. B.A.Abdikamalov, I.L.Aptekar, V.M.Sergeeva, E.YU.Tonkov. Fazoviy perexod v splave  $\text{Sm}_{0.8}\text{Gd}_{0.2}\text{S}$  pri nizkix temperaturax. Fizika tverdogo tela. T. 18. № 10. S. 2975-2979.
30. M.A.Bloxin. Fizika rentgenovskix luchey. Izdanie vtoroe, pererabotannoe. Gosudarstvennoe izdatelstvo texniko-teoreticheskoy literaturi. Moskva. 1957. 518 s.
31. V.A.Liepo. Rentgenovskaya difraktometriya. Uchebnoe posobie. Izdatelstvo Grodninskogo universiteta. Grodno. 2003. 171 s.
32. D.K.Bouen, B.K.Tanner. Visokorazreshayuyaya rentgenovskaya difraktometriya i topografiya. Izdatelstvo "Nauka". Moskva. 2002. 274 s.
33. D.M.Xeyker, L.S.Zevin. Rentgenovskaya difraktometriya. Pod redakciey professora G.S.Jdanova. Gosudarstvennoe izdatelstvo fiziko-matematicheskoy literaturi. Moskva. 1963. 380 s.

34. W.Kraus, G.Nolze. POWDERCELL – a Program for the Representation and Manipulation of Crystal Structures and Calculation of the Resulting X-ray Powder Patterns. *J. Appl. Crystallography*. 1996. 29. P.301-303.
35. Rietveld H.M. *J. Appl. Crystallography*. 1969. Vol.2. P.65.
36. A.S. Sonin. Kurs makroskopicheskoy kristallogiziki. Uchebnoe posobie dlya vuzov. Moskva. Izdatelstvo "FIZMATLIT". Moskva. 2006. 256 s.
37. M.M.Woolfson. An introduction X-ray crystallography. Second edition. Cambridge University Press. 1997. 402 p.
38. International Tables for X-Ray Crystallography. Volume I. Symmetry Groups. Published for the International Union for Crystallography by the Kynoch Press. Birmingham. England. 1969. 558 p.
39. International Tables for Crystallography. Volume A. Space-Group Symmetry. Edited by Theo Hahn. Fifth edition. Published for the International Union for Crystallography by Springer. 2005. 911 p.
40. M.Layns, A.Glass. Segnetoelektriki i rodstvennie im materialy. Izdatelstvo "Mir". Moskva. 1981. 736 s.
41. Fizika segnetoelektricheskix yavleniy. Otvetstvennyy redaktor chl.-korr. AN SSSR G.A.Smolenskiy. Izdatelstvo "Nauka". Leningradskoe otdelenie. Leningrad. 1985. 396 s.