

ՀՏԴ 53

Ֆիզիկա

Արկադի ՍՈՂՈՍՈՆՅԱՆ

ՀՀ ԳԱԱ ֆիզիկայի կիրառական պրոբլեմների ինստիտուտ, Ֆ.մ.գ.թ

E-mail: Sohomonyan@gmail.com

Կարեն ԱՐԱՄՅԱՆ

**Ար.ՊՀ Մաթեմատիկայի և ֆիզիկայի ամբիոնի պրոֆեսորի պաշտոնակատար,
Ֆ.մ.գ.թ.**

E-mail: k_aramyan@rambler.ru

Ռուզաննա ՍՈՂՈՍՈՆՅԱՆ

**ՀՀ ԳԱԱ ֆիզիկայի կիրառական պրոբլեմների ինստիտուտի կրտսեր
գիտաշխատող**

**ԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐԻ ՀԱՄԱԶԱՓՈՒԹՅԱՆ
ՀԻՄՆԱՐԱՐ ՏԵՍՈՒԹՅՈՒՆԸ ԵՎ ՆՐԱ
ՄԱԹԵՄԱՏԻԿԱԿԱՆ ՁԵՎԱԿԵՐՊՈՒՄԸ**

Սույն հոդվածում նշվում է «սիմետրիա» կամ հայերենով՝ «համաճափության» բառի ֆիզիկայում օգտագործվող իմաստը: Նշվում է, որ սիմետրիայի մաթեմատիկական ձևակերպումը սկիզբ է առել միայն XIX-րդ դարի երկրորդ կեսից սկսած: Տրված է սիմետրիայի սահմանումը որպես որոշակի ձևափոխության նկատմամբ օբյեկտի անփոփոխ մնալու հատկություն:

Նշվում է, որ սիմետրիկ ձևափոխությունների հիմքում ընկած է մաթեմատիկական (ֆիզիկական) օրենքի՝ ձևափոխությունների որոշակի խմբերի նկատմամբ ինվարիանտության ընդհանուր գաղափարը: Սիմետրիայով օժտված են նաև տարածության և ժամանակի հատկությունները՝ տարածության համասեռությունը և իզոտրոպությունը, ժամանակի համասեռությունը:

Դիտարկվել է բյուրեղների սիմետրիայի տեսության որոշ դրույթներ, որոնք հանդիսանում են բյուրեղների

ֆիզիկական հատկությունների ուսումնասիրության հատուկ մեթոդ: Դիտարկվել է նաև պտույտի դեպքում համակարգի համիլտոնիանի ինվարիանտությունը: Դա նշանակում է, որ պտտման $\tilde{S}$ -օպերատորը հանդիսանում է սիմետրիայի ձևափոխություն:

Բանալի բառեր` սիմետրիա (համաչափություն), բյուրեղներ, բյուրեղագիտություն, անիզոտրոպիա, ինվերսիա, մատրիցա, կինետիկ էներգիա, պոտենցիալ էներգիա, ինվարիանտ, համիլտոնիան:

А.Согомонян, К.Арамян, Р. Согомонян
ОСНОВНАЯ ТЕОРИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ
СОВМЕСТИМОСТИ И ЕЕ МАТЕМАТИЧЕСКАЯ
ФОРМУЛИРОВКА

В статье отмечается смысл, в котором слово симметрия используется в физике. Отмечается, что начало математическому определению термина «симметрия» было положено уже во-второй половине XIX века. Приводится определение симметрии как свойства объекта оставаться неизменным в результате применения определенного преобразования.

Отмечается, что в основе понятия симметричных преобразований лежит инвариантность математического, или физического закона по отношению к некоторой группе преобразований. Симметрией обладают также свойства пространства и времени – однородность и изотропность пространства, однородность времени.

Рассмотрены некоторые положения теории симметрии кристаллов, которая представляет собой особый метод изучения физических свойств кристаллов. Рассмотрена инвариантность гамильтониана системы по отношению к вращениям. Это означает, что оператор вращения $\tilde{S}$ – представляет собой преобразование симметрии.

Ключевые слова: симметрия, кристаллы, кристаллография, анизотропия, инверсия, матрица, кинетическая энергия, потенциальная энергия, инвариант, гамильтониан.

A.Soghomonyan, K.Aramyan, R. Soghomonyan
BASIC THEORY OF CRYSTAL COMPATIBILITY AND ITS
MATHEMATICAL FORMULATION

The article notes the meaning in which the word “symmetry” is used in physics. It is noted that the beginning of the mathematical definition of the term “symmetry” was laid in the second half of the 19th century. Symmetry is defined as the property of an object to remain unchanged as a result of applying a certain transformation.

It is noted that the concept of symmetric transformations is based on the invariance of a mathematical or physical law with respect to a certain group of transformations. Symmetry is also possessed by the properties of space and time - the homogeneity and isotropy of space, the homogeneity of time.

Some provisions of the theory of crystal symmetry, which is a special method for studying the physical properties of crystals, are considered. The invariance of the Hamiltonian of the system with respect to rotations is considered. This means that the rotation operator $\hat{S}$ is a symmetry transformation..

Key words: symmetry, crystals, crystallography, anisotropy, inversion, matrix, kinetic energy, potential energy, invariant, hamiltonian.

Հունարեն “սիմետրիա” բառը հայերեն նշանակում է “համաչափություն”: Համաչափության գաղափարը տարածվում է առօրյա կյանքում: Միմետրիկ են օրինակ ծաղիկների պսակները, թիթեռների թևերը, ձյան աստղերը, մարդու մարմնի մասերը և այլն: Մարդկությունը վաղուց օգտագործել է “սիմետրիա” հասկացությունը՝ կիրառելով այն իր գործողության տարբեր ոլորտներում: Այնուամենայնիվ, սիմետրիայի ուսմունքի մաթեմատիկական զարգացումը իրականացվել է միայն XIX դարի երկրորդ կեսին:

Միմետրիան որոշակի փոփոխության (ձևափոխության) նկատմամբ օբյեկտի անփոփոխ մնալու հատկությունն է: Լայն առումով, սիմետրիա ասելով հասկանում են որոշակի կառուցվածքի, համակարգի կազմակերպվածություն, նրա տարրերի կարգավորվածություն, մասերի ներդաշնակ միավորում ընդհանուրի մեջ:

Միմետրիայի սկզբունքները կիրառելի են մաթեմատիկայում (երկրաչափություն, աբստրակտ հանրահաշիվ, համաչափ մատրիցաները գծային հանրահաշվում, հավանականությունների տեսություն և այլն), կենսաբանությունում, քիմիայում, ֆիզիկայում և այլն:

Սույն հոդվածում դիտարկելու ենք միայն բյուրեղների սիմետրիայի հիմնարար սկզբունքը և սիմետրիայի մաթեմատիկական ձևակերպումը:

20-րդ դարի ֆիզիկայում սիմետրիայի սկզբունքները երևան են եկել 1905թ.-ին՝ կապված տարածության-ժամանակի ինվարիանտության խմբի Այնշթայնյան ըմբռնմամբ: Այդ ժամանակից սկսած՝ սիմետրիան ֆիզիկոսների համար դարձել է բնության պարզությունը ամենատարբեր մակարդակներում արտահայտելու միջոց:

Նյութերի թեորեմը պնդում է, որ ֆիզիկական համակարգի յուրաքանչյուր անընդհատ սիմետրիայի համապատասխանում է որոշակի պահպանման օրենք, իսկ Վիգների դասակարգումը հաստատում է, որ ֆիզիկական օրենքների համաչափությունը բնորոշում է բնության մեջ մասնիկների շարժումը:

Սիմետրիկ ձևափոխությունների հիմքում ընկած է մաթեմատիկական (ֆիզիկական) օրենքի՝ ձևափոխությունների որոշակի խմբերի նկատմամբ ինվարիանտության ընդհանուր գաղափարը: Այն օրթոգոնալ ձևափոխությունները, որոնք որևէ պատկեր համատեղում են ինքն իր հետ, կազմում են տվյալ կառուցվածքի սիմետրիայի խումբ: Սիմետրիայի այսպիսի ընդհանրական-մաթեմատիկական ըմբռնումը հնարավորություն է տալիս ակնառու և հայտնի ձևերից գատ հայտնաբերել սիմետրիայի ոչ բացահայտ ձևեր, որոնք կիրառվում են ֆիզիկայի տարբեր բնագավառներում, հատկապես տարրական մասնիկների ֆիզիկայում և քվանտային մեխանիկայում:

Սիմետրիայով օժտված են նաև տարածության և ժամանակի հատկությունները՝ տարածության համասեռությունը (տարածության բոլոր կետերը հավասարազոր են) և իզոտրոպությունը (տարածության մեջ բոլոր ուղղությունները հավասարազոր են), ժամանակի համասեռությունը (ժամանակի բոլոր պահերը հավասարազոր են): Թվարկած հատկություններից յուրաքանչյուրին համապատասխանում են որոշակի ձևափոխություններ (տարածության համաչափությանը՝ տարածական տեղափոխությունը, իզոտրոպությանը՝ տարածական պտույտը, ժամանակի համասեռությանը՝ ժամանակի հաշվարկման սկզբի փոփոխությունը), որոնց նկատմամբ ֆիզիկայի օրենքները մնում են անփոփոխ (ինվարիանտ), այսինքն՝ ֆիզիկայի օրենքները ևս սիմետրիկ են: Ֆիզիկայի օրենքները սիմետրիկ են նաև հաշվարկման իներցիալ համակարգի նկատմամբ: Ֆիզիկայի օրենքներին բնորոշ է նաև հայելային սիմետրիան, որը նշանակում է կոորդինատների ձախ և աջ համակարգերի համաչափություն: Օրինակ, քվանտային մեխանիկայում բացահայտվեցին սիմետրիայի նոր օրենքներ, մասնավորապես, տարածական ինվերսիան (P), լիցքի համալուծությունը (C), T-ինվերսիան և դրանց համադրությունը (տես Լյուդերս-Պաուլիի թեորեմը):

Արդի ֆիզիկայում մեծ տեղ է հատակացվում տրամաչափված սիմետրիային (դաշտի քվանտային տեսության շարժման հավասարումներ), որը հնարավորություն է տալիս միավորելու թույլ և էլեկտրամագնիսական փոխազդեցությունները:

Ֆիզիկական համակարգում սիմետրիայի առկայությունը պայմանավորում է ֆիզիկական մեծության պահպանումը (Նյոթերի թեորեմը): Երկրաչափական սիմետրիայի հատկությունները կարևոր են բյուրեղների սիմետրիայի ուսումնասիրության համար: Այս բնագավառում մեծ է Պիեռ Կյուրիի դերը, որը ընդհանրացրեց սիմետրիայի սկզբունքը և այն տարածեց ֆիզիկական երևույթների ընդարձակ դասի նկատմամբ՝ սիմետրիան կապելով պատճառական ու կառուցվածքային խնդիրներին:

Բյուրեղների համաչափությունը, հատկությունները, կառուցվածքը և առաջացման պայմանները, ուսումնասիրում է բյուրեղագիտությունը՝ գիտություն բյուրեղների և նյութի բյուրեղային վիճակի մասին: Բյուրեղագիտության հիմնական մեթոդը խարսխված է բյուրեղների սիմետրիայի հատկության վրա ըստ որի բյուրեղները դասակարգվում են բյուրեղական 7 համակարգի, 32 դասի և 230 տարածական խմբի:

Բոլոր բյուրեղները կառուցված են նյութական մասնիկներից, որոնք երկրաչափորեն ճիշտ տեղակայված են տարածության մեջ: Ատոմների, մոլեկուլների ր իոնների դասավորված բաշխումը տարբերում է բյուրեղային վիճակը ոչ բյուրեղային վիճակից, որտեղ կարգի աստիճանը բոլորովին աննշան է:

Բյուրեղները բոլոր պինդ մարմիններն են, որոնցում մասնիկները (ատոմներ, իոններ, մոլեկուլներ) կանոնավոր կերպով դասավորված են տարածական ցանցերի հանգույցների տեսքով:

Անիզոտրոպիան և համաչափությունը բյուրեղների բնորոշ հատկություններն են՝ պայմանավորված դրանց ներքին կառուցվածքի կանոնավորությամբ և համաչափությամբ: Սիմետրիայի տարրերը կոչվում են օժանդակ երկրաչափական պատկերներ (կետեր, ուղիղներ, հարթություններ), որոնց օգնությամբ հայտնաբերվում է պատկերների համաչափությունը:

Ինվերսիայի կենտրոնը նկարի ներսում եզակի կետ է, որը բնութագրվում է նրանով, որ միջով գծված ցանկացած գիծ նրա երկու կողմերում և հավասար հեռավորությունների վրա հանդիպում է նկարի նույն համապատասխան կետերին: Երկրաչափության մեջ նման կետը կոչվում է սիմետրիայի կենտրոն:

Համաչափության հարթությունը հարթություն է, որը պատկերը բաժանում է երկու հայելային հավասար մասերի, որոնք գտնվում են միմյանց նկատմամբ որպես առարկա և նրա հայելային պատկեր: Համաչափության առանցքը ուղիղ գիծ է, որի շուրջ պատկերի հավասար մասերը կրկնվում են մի քանի անգամ:

Ինվերսիայի առանցքը այնպիսի ուղիղ գիծ է, որ նրա շուրջը որոշակի անկյան տակ պտտման ժամանակ, որին հաջորդում (կամ նախորդում) է անդրադարձում պատկերի կենտրոնական կետում, պատկերը համընկնում է ինքն իր հետ:

Բոլոր բյուրեղները բաժանվում են 7 սինգոնիայի՝ (հինարենից «սուն»՝ միասին, «գոնիաս»՝ անկյուն)՝ տրիկլինիկ, մոնոկլինի, ռոմբիկ, եռանկյուն, քառանկյուն, վեցանկյուն և խորանարդ:

Նույն նյութերը տարբեր պայմաններում կարող են ձևավորել բոլորովին տարբեր բյուրեղային կառուցվածքներ, և, հետևաբար, տարբեր հանքանյութեր: Վառ օրինակ է հանդիսանում ածխածինը՝ եթե այն ունի վեցանկյուն սինգոնիա, ապա առաջանում է գրաֆիտ, եթե խորանարդ է՝ ադամանդ:

Բյուրեղի ձևը թույլ է տալիս ենթադրել, թե մասնիկները ինչ կարգով են միավորվում նրա կառուցվածքներում: Բացի այդ, բոլոր ֆիզիկական հատկությունները սերտորեն կապված են սիմետրիայի հետ: Այն որոշում է, թե կոնկրետ բյուրեղը ինչ ֆիզիկական հատկություններ կարող է ունենալ կամ չունենալ, այսինքն՝ որոշում է ֆիզիկական հատկությունների անիզոտրոպության բնույթը:

Համաչափությունը ներթափանցում է բյուրեղների ամբողջ ֆիզիկական և գործում է որպես բյուրեղների ֆիզիկական հատկությունների ուսումնասիրության հատուկ մեթոդ: Հետևաբար, բյուրեղագիտության հիմնական մեթոդը երևույթների, հատկությունների, կառուցվածքի և բյուրեղների արտաքին ձևի համաչափության հաստատումն է:

Եթե $F(x_1, x_2, x_3)$ ֆունկցիան նկարագրում է օբյեկտ, օրինակ, բյուրեղի ձևը եռաչափ տարածության մեջ, իսկ $g(x_1, x_2, x_3)$ գործողությունը փոխակերպում է օբյեկտի բոլոր կետերի կոորդինատները, ապա g գործողությունը համարափության ձևափոխություն է, իսկ F -ը սիմետրիկ օբյեկտ՝ եթե տեղի ունեն հետևյալ պայմանները՝

$$\begin{aligned} g[x_1, x_2, x_3] &= x'_1 x'_2 x'_3 \\ F(x_1, x_2, x_3) &= F(x'_1, x'_2, x'_3) \end{aligned}$$

Կետի համաչափության ձևափոխությունները կարելի է ներկայացնել գծային հավասարումներով

$$\begin{cases} x'_1 = a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 \\ x'_2 = a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 \\ x'_3 = a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 \end{cases}$$

այսինքն՝ գործակիցների մատրիցը՝ (a_{ij}) ունի հետևյալ տեսքը.

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

Այժմ ներկայացնենք բյուրեղների սիմետրիայի մաթեմատիկական մոդելը՝ կիրառելով մատրցները, երբ պինդ մարմինը կատարում է α անկյունով պտույտ (OZ) առանցքի շուրջը:

Սիմետրիայի գործողությունը հարմար է ներկայացնել մատրիցայով: Նպատակահարմարությունը կապված է նրա հետ, որ սիմետրիայի

գործողության հաջորդական կիրառումը նկարագրվում է մատրիցաների բազմապատկումով:

Դիտարկենք, օրինակ, մարմնի պտույտը Z -առանցքի շուրջը α անկյունով: Դիտարկենք մարմնի $r'(x', y', z')$ կետի շարժումը նոր $r(x, y, z)$ դիրքի: Նկ.1-ում երևում է, որ

$$\frac{x'}{r'} = \cos\beta; \quad \frac{y'}{r'} = \sin\beta; \quad (1)$$

$$\frac{x}{r} = \cos(\alpha + \beta); \quad \frac{y}{r} = \sin(\alpha + \beta): \quad (2)$$

Քանի որ պտույտի դեպքում $r' = r$, ապա (1)-ից և (2)-ից կստանանք.

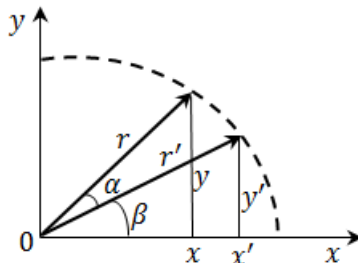
$x = r\cos(\alpha + \beta), y = r\sin(\alpha + \beta)$, որտեղից հետևում է

$$\begin{cases} x = x'\cos\alpha - y'\sin\alpha \\ y = x'\sin\alpha + y'\cos\alpha \\ z = z' \end{cases} \quad (3)$$

Օրթոգոնալ մատրիցան կազմված է (3) հավասարումների գործակիցներից և ունի հետևյալ տեսքը

$$\tilde{S}(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4)$$

Այն տալիս է պտույտի լրիվ նկարագրությունը:



Նկ.1. Պինդ մարմնի պտույտը Z առանցքի շուրջը α անկյունով

Հակառակ ուղղությամբ $(-\alpha)$ անկյամբ պտույտի դեպքում նկարագրվում է հակադարձ $\tilde{S}^{-1}$ մատրիցայով, որը որոշվում է $\tilde{S} \cdot \tilde{S}^{-1} = \tilde{I}$ արտադրյալով, որտեղ $\tilde{I}$ -ն միավոր մատրիցան է:

Z առանցքի շուրջը 90° -ով պտույտի դեպքում մատրիցան կլինի

$$\tilde{S}(90^\circ, z) = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (5)$$

Z առանցքի շուրջը 180° -ով պտույտի դեպքում մատրիցան կլինի

$$\tilde{S}(180^\circ, z) = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (6)$$

(ZOY) հարթության մեջ արտացոլմամբ կհամապատասխանի հետևյալ մատրիցան.

$$\tilde{S}(\sigma) = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (7)$$

r' շառավիղ վեկտորի կոորդինատի և r նոր վեկտորի կոորդինատի միջև կապը կարելի է արտահայտել $\tilde{S}$ մատրիցայի միջոցով.

$$|r| = \tilde{S}|r'|; \quad (8)$$

$$|r'| = \tilde{S}^{-1}|r|; \quad (9)$$

Այժմ, եթե $f(r)$ ֆունկցիան նկարագրում է պինդ մարմնի ֆիզիկական հատկությունները, ապա սիմետրիայի գործողության կիրառումը այդ ֆունկցիայի նկատմամբ նշանակում է, որ $\tilde{S}$ սիմետրիայի գործողությունը կիրառելի է նրա r արգումենտի նկատմամբ:

$$\tilde{S}^{-1}f(r) = f(\tilde{S}^{-1}r); \quad (10)$$

Կիրառելով $\tilde{S}$ -ը $\hat{H}(r)$ Համիլտոնի նկատմամբ, որը կախված չէ Շրեյդինգերի ստացիոնար հավասարման ժամանակից (R_i) կետում՝ մեկուսացված ատոմի համար կունենանք հետևյալ տեսքը.

$$\hat{H}(r)\varphi = E\varphi, \quad (11)$$

որտեղ

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 - \frac{ze^2}{|r - R_i|}; \quad (12)$$

(11) հավասարման մեջ (երկրորդ կարգի դիֆերենցիալ հավասարում) առաջին գումարելին (կինետիկ էներգիան) պարունակում է հետևյալ օպերատորը.

$$\nabla^2 = (\nabla \cdot \nabla) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \quad (13)$$

և հանդիսանում է ∇ երկու վեկտորների սկալյար արտադրյալը:

$\tilde{S}$ պտույտի դեպքում երկու վեկտորները, սկալյար արտադրյալի դեպքում, պտտվում են միատեսակ և սկալյար արտադրյալը չի փոխվում.

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\tilde{S}^{-1}\nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{2m_0}(\nabla')^2, \quad (14)$$

այսինքն՝ կինետիկ էներգիան (x', y', z') և (x, y, z) կոորդինատներում ունեն միևնույն ֆունկցիոնալ տեսքը:

Այժմ, դիտարկենք Համիլտոնի օպերատորում պոտենցիալ էներգիան (12) բանաձևից և կիրառենք $\tilde{S}$ գործողությունը $U(r - R_i)$ հայտարարի նկատմամբ.

$$\tilde{S}^{-1}(r - R_i)^2 = \tilde{S}^{-1}[(x - X_i)^2 + (y - Y_i)^2 + (z - Z_i)^2], \quad (15)$$

Տեղադրելով (15)-ի մեջ (3)-ը, կստանանք՝

$$\tilde{S}^{-1}(r - R_i)^2 = (x - X_i)^2 + (y - Y_i)^2 + (z - Z_i)^2 = (r' - R'_i)^2:$$

Այս դեպքում ասում են, որ $\hat{H}(r)$ Համիլտոնը ինվարիանտ է $\tilde{S}$ -ի նկատմամբ, կամ որ նույնն է՝ $\tilde{S}$ -ը հանդիսանում է սիմետրիայի ձևափոխությունը, մնալով $\hat{H}(r)$ -ի նկատմամբ ինվարիանտ:

Ե-էլեկտրոնի էներգիան

φ -էլեկտրոնի լիցքը

$\hbar$ -Պլանկի հաստատուն

m_0 -էլեկտրոնի զանգվածը
 e -էլեկտրոնի լիցքը
 $\hat{H}$ -Համիլտոնի օպերատորը
 $\tilde{S}$ -մատրիցա

Գրականություն

1. Киттель И. , Квантовая теория твердого тела, М., Наука, 1967г, с.492.
2. Косевич А.М., Основы механики кристаллической решетки, М., Наука, 1972г, с.280.
3. Шаскольская М.П.,Кристаллография, М., Высшая школа, 1984г.
4. Федоров Е.С., Симметрия и структура кристаллов, М., Наука, 1949г.

Նյութը ներկայացվել է 8.06.2023,
գրախոսման է ուղարկվել 15.06.2023:
տպագրության ընդունվել 22.06.2023:
Հոդվածը տպագրության է երաշխավորել ԱրՊՀ մաթեմատիկայի
և ֆիզիկայի ամբիոնը: