

KRISTALL PANJARALAR VA ULARNING TUZILISH XUSUSIYATLARI

G'afurova Marjona Tolib qizi

Buxoro davlat pedagogika instituti magistranti.

Annotatsiya: *Ushbu maqolada kristall panjaralarning geometrik va fizik tabiati, ularning turlari hamda atomlarning fazoviy joylashish qonuniyatlari tahlil qilingan. Tadqiqotning asosiy e'tibori nodir yer ionlarining kristall panjaralarga kiritilishi va ularning matritsa bilan o'zaro ta'sir mexanizmlariga qaratilgan. Kristall maydon effektining lantanoidlar optik xususiyatlariga ta'siri va ushbu jarayonlarning zamonaviy materialshunoslikdagi ahamiyati yoritilgan.*

Kalit so'zlar: *kristall panjara, Bravais panjaralari, kovalent bog'lanish, nodir yer elementlari, lantanoidlar, kristall maydon effekti, Stark parchalanishi, lantanoidli lyuminoforlar.*

Аннотация: *В данной статье анализируются геометрическая и физическая природа кристаллических решеток, их типы и закономерности пространственного расположения атомов. Основное внимание в исследовании уделено внедрению редкоземельных ионов в кристаллические решетки и механизмам их взаимодействия с матрицей. Освещено влияние эффекта кристаллического поля на оптические свойства лантаноидов и значение этих процессов в современном материаловедении.*

Ключевые слова: *кристаллическая решетка, решетки Браве, ковалентная связь, редкоземельные элементы, лантаноиды, эффект кристаллического поля, Штарковское расщепление, лантаноидные люминофоры.*

Abstract: *This article analyzes the geometric and physical nature of crystal lattices, their types, and the regularities of the spatial arrangement of atoms. The primary focus of the research is on the incorporation of rare-earth ions into crystal lattices and the mechanisms of their interaction with the host matrix. The influence of the crystal field effect on the optical properties of lanthanides and the significance of these processes in modern materials science are highlighted.*

Keywords: *crystal lattice, Bravais lattices, covalent bonding, rare-earth elements, lanthanides, crystal field effect, Stark splitting, lanthanide phosphors.*

KIRISH (INTRODUCTION)

Zamonaviy fan va texnologiyalarning jadal rivojlanishi qattiq jism fizikasi hamda materialshunoslik sohalarida yangi ilmiy yondashuvlarni talab etmoqda. Ayniqsa, oldindan belgilangan fizik, optik va elektr xususiyatlarga ega bo'lgan funksional materiallarni yaratish bugungi kunning dolzarb ilmiy muammolaridan biri hisoblanadi. Bunday materiallarning xossalari, avvalo, ularning ichki tuzilishi — ya'ni kristall panjarasi va undagi atomlarning fazoviy joylashish tartibi bilan bevosita belgilanadi.

Kristall panjaralar moddaning eng muhim strukturaviy tavsifi bo'lib, ular orqali qattiq jismlarning mexanik mustahkamligi, issiqlik o'tkazuvchanligi, elektr va magnit

xususiyatlari shakllanadi. Shu bois kristall panjara nazariyasini chuqur o'rganish nafaqat fundamental ahamiyatga ega, balki amaliy jihatdan ham muhimdir. Xususan, mikroelektronika, fotonika, lazer texnologiyalari va axborot tizimlarida qo'llanilayotgan ko'plab qurilmalar aynan kristall tuzilishga ega materiallarga asoslanadi.

So'nggi yillarda nodir yer elementlari bilan legirlangan kristall materiallarga bo'lgan qiziqish keskin ortdi. Buning asosiy sababi shundaki, nodir yer ionlari o'zining noyob elektron tuzilishi, xususan, 4f-qobiq elektronlarining ekranlanganligi tufayli yuqori darajada barqaror va aniq energetik sathlarga ega. Ushbu xususiyatlar ularni yuqori samarali lyuminoforlar, lazer aktiv muhitlari hamda optoelektron qurilmalar uchun istiqbolli komponentlarga aylantiradi.

Biroq nodir yer ionlarining fizik xossalari ularning erkin holatidagi parametrlarigina bilan belgilanmaydi. Ular kristall panjaraga kiritilganda, atrofidagi ionlar va atomlar tomonidan hosil qilinadigan ichki elektr maydon ta'sirida ularning energetik sathlari o'zgaradi. Bu jarayon kristall maydon effekti sifatida namoyon bo'lib, spektral xususiyatlar, lyuminessensiya samaradorligi va energiya almashinuvi jarayonlariga sezilarli ta'sir ko'rsatadi.

Shu nuqtai nazardan, kristall panjara simmetriyasi, undagi nuqsonlar, atomlararo masofalar hamda fonon jarayonlarining nodir yer ionlari xatti-harakatiga ta'sirini kompleks o'rganish muhim ilmiy vazifa hisoblanadi. Ayniqsa, ushbu omillarni boshqarish orqali materiallarning funksional xossalarini oldindan loyihalash imkoniyati zamonaviy materialshunoslikning asosiy yo'nalishlaridan biri bo'lib qolmoqda.

Mazkur maqolaning maqsadi — kristall panjaralarning tuzilish xususiyatlari va ulardagi atomlarning joylashish qonuniyatlarini tizimli tahlil qilish, shuningdek, nodir yer ionlarining kristall panjaralar bilan o'zaro ta'sir mexanizmlarini ilmiy asosda yoritishdan iborat. Shu bilan birga, mazkur jarayonlarning zamonaviy texnologiyalardagi qo'llanilishi va istiqbollari ham ko'rib chiqiladi.

ASOSIY QISM

Kristall panjara qattiq jismlarning ichki tuzilishini ifodalovchi asosiy model bo'lib, unda atomlar, ionlar yoki molekulalar fazoda qat'iy tartibda joylashgan bo'ladi. Ushbu tartibning asosiy belgisi — uzoq masofalarda ham saqlanib qoluvchi davriylik, ya'ni translatsion simmetriyadir. Bu xususiyat kristall moddalarning amorf jismlardan tubdan farqlanishini belgilaydi.

Kristall panjaraning matematik tavsifi elementar yacheyka tushunchasi orqali beriladi. Elementar yacheyka — bu panjaraning eng kichik takrorlanuvchi qismi bo'lib, u butun kristall tuzilishini hosil qiladi. Fazoda bunday yacheykalarining takrorlanishi natijasida uch o'lchovli panjara shakllanadi.

Kristall tuzilmalarning simmetriya xossalari ularning fizik xususiyatlariga bevosita ta'sir ko'rsatadi. Zamonaviy kristallografiyada 7 ta kristall sistemasi, 14 ta Brave panjarasi va 230 ta fazoviy guruh mavjudligi aniqlangan. Ushbu tasniflash kristall tuzilmalarning xilma-xilligini va murakkabligini ko'rsatadi.

Simmetriya elementlariga quyidagilar kiradi:

- translatsiya o'qlari;

- aylanish o'qlari;
- akslantirish tekisliklari;
- inversiya markazlari.

Mazkur simmetriya elementlari kristallning optik, mexanik va elektr xususiyatlarini aniqlashda muhim rol o'ynaydi.

Atomlarning joylashish qonuniyatlari va energiya minimizatsiyasi prinsipi

Kristall panjarada atomlarning joylashishi tasodifiy emas, balki energetik jihatdan eng qulay — minimal potensial energiyaga mos holatda amalga oshadi. Atomlar orasidagi o'zaro ta'sir kuchlari (tortishish va itarilish) muvozanatga kelganda barqaror kristall tuzilma shakllanadi.

Ushbu muvozanat quyidagi parametrlar orqali ifodalanadi:

- panjara doimiysi (a, b, c);
- bog'lanish uzunligi;
- koordinatsion son;
- zich joylashish koeffitsienti.

Masalan, metall kristallarda atomlar maksimal zichlikka erishish uchun qirralari markazlashgan kubik (FCC) yoki geksagonal zich joylashgan (HCP) strukturalarni hosil qiladi. Bunday joylashuv energiya jihatdan eng barqaror hisoblanadi.

Ionli kristallarda esa zarrachalar joylashuvi ion radiuslari nisbatiga bog'liq bo'lib, elektrostatik tortishish kuchlari ustunlik qiladi. Kovalent kristallarda esa atomlar qat'iy yo'nalgan bog'lanishlar orqali ma'lum burchaklar ostida joylashadi.

Shunday qilib, har bir kristall panjara turi o'ziga xos energiya minimumiga ega bo'lib, bu uning barqarorligini belgilaydi.

Kristall panjaradagi nuqsonlar va ularning fizik xossalarga ta'siri

Ideal kristall panjara faqat nazariy model bo'lib, real materiallarda turli xil nuqsonlar (defektlar) mavjud bo'ladi. Ushbu nuqsonlar kristallning ko'plab fizik xususiyatlariga sezilarli ta'sir ko'rsatadi.

Nuqsonlar quyidagi asosiy turlarga bo'linadi:

- nuqtaviy nuqsonlar (Shottki va Frenkel nuqsonlari);
- chiziqli nuqsonlar (dislokatsiyalar);
- sirt nuqsonlari (don chegaralari);
- hajmiy nuqsonlar.

Nuqtaviy nuqsonlar atomlarning yetishmasligi yoki ortiqchaligi bilan bog'liq bo'lsa, dislokatsiyalar kristall qatlamlarining siljishi natijasida yuzaga keladi. Ushbu nuqsonlar materialning mexanik mustahkamligi, diffuziya jarayonlari va elektr o'tkazuvchanligiga bevosita ta'sir qiladi.

Ayniqsa, legirlash jarayonida yuzaga keladigan almashinish nuqsonlari muhim ahamiyatga ega. Bunda asosiy panjara atomlari o'rnini boshqa element atomlari yoki ionlari egallaydi. Natijada panjarada lokal deformatsiyalar va ichki kuchlanishlar hosil bo'ladi.

Kristall panjaraning yuqorida ko'rib chiqilgan strukturaviy va energetik xususiyatlari unda joylashgan begona zarrachalarning, xususan, nodir yer ionlarining

xatti-harakatini belgilovchi asosiy omillardir. Nodir yer ionlari panjaraga kiritilganda ular odatda ma'lum tugunlarni egallaydi yoki interstitsial holatlarda joylashadi.

Bunda quyidagi omillar hal qiluvchi rol o'ynaydi:

- ion radiuslarining mosligi;
- panjara simmetriyasi;
- elektr zaryad muvozanati;
- lokal kristall maydon kuchi.

Agar ion radiuslari sezilarli darajada farq qilsa, panjara deformatsiyalanadi va bu lokal energetik holatlarning o'zgarishiga olib keladi. Natijada ion atrofida maxsus "lokal muhit" shakllanadi.

Aynan shu lokal muhit keyingi bosqichda nodir yer ionlarining elektron tuzilishi, energetik sathlari va optik xususiyatlariga bevosita ta'sir ko'rsatadi. Shu sababli kristall panjara ichidagi mikrostrukturaviy omillarni hisobga olmasdan turib, nodir yer ionlarining fizik xossalarini to'liq tushuntirib bo'lmaydi.

Nodir yer ionlarining kristall panjaradagi kvant holatlari va energetik tuzilishi

Nodir yer ionlari, ayniqsa lantanoidlar guruhi elementlari, o'zining noyob elektron konfiguratsiyasi bilan ajralib turadi. Ularning tashqi $5s^2$ va $5p^6$ qobiqlari bilan ekranlangan 4f-elektronlari kristall panjara ta'siriga nisbatan nisbatan zaif sezgir bo'ladi. Shu sababli, bu ionlarning energetik sathlari yuqori darajada diskret xarakterga ega.

Kristall panjara ichiga joylashtirilgan nodir yer ioni quyidagi omillar ta'sirida energetik qayta taqsimlanishga uchraydi:

- kristall maydon simmetriyasi;
- ligandlarning elektrostatik potentsiali;
- panjaradagi lokal deformatsiyalar.

Bu jarayon **kristall maydon nazariyasi** doirasida tushuntiriladi. Mazkur nazariyaga ko'ra, ion atrofidagi zaryadlangan zarrachalar hosil qilgan maydon degeneratsiyalangan energetik sathlarni ajratadi. Natijada **Shtark parchalanishi** yuz beradi.

Energetik sathlarning bunday nozik tuzilishi spektroskopik o'lchovlarda aniq chiziqli spektrlarni hosil qiladi. Aynan shu xususiyat nodir yer ionlarini lazer fizikasi va optoelektronika sohasida beqiyos ahamiyatli qiladi.

Lyuminessensiya jarayonlari va radiatsion o'tishlar mexanizmi.

Kristall panjaraga kiritilgan nodir yer ionlari tashqi energiya (yorug'lik, elektr maydon yoki issiqlik) ta'sirida qo'zg'algan holatga o'tadi. Ushbu holatdan asosiy holatga qaytishda ular foton chiqaradi, bu hodisa **lyuminessensiya** deb ataladi.

Lyuminessensiya jarayonining samaradorligi quyidagi omillarga bog'liq:

- panjara simmetriyasi;
- fonon spektri;
- ionning lokal muhiti;
- defektlar konsentratsiyasi.

Radiatsion o'tishlar asosan 4f–4f yoki 4f–5d o'tishlar orqali amalga oshadi. 4f–4f o'tishlar kvant mexanik jihatdan taqiqlangan bo'lsa-da, kristall panjara nosimmetriyasi sababli ular qisman ruxsat etilgan bo'lib qoladi.

Amaliy jihatdan bu jarayonlar quyidagi texnologiyalarda keng qo'llaniladi:

- qattiq jisimli lazerlar;
- LED va displey texnologiyalari;
- optik tolali aloqa tizimlari;
- tibbiy diagnostika qurilmalari.

Masalan, erbiy (Er^{3+}) ionlari telekommunikatsiya diapazonida (1.55 mkm) nurlanish hosil qilishi sababli optik kuchaytirgichlarda keng qo'llaniladi.

Kristall panjaradagi fononlar va issiqlik tebranishlarining roli

Kristall panjaradagi atomlar mutlaq tinch holatda bo'lmaydi, ular doimo tebranma harakatda bo'ladi. Ushbu tebranishlar kvant mexanikada **fononlar** tushunchasi orqali ifodalanadi.

Fononlar nodir yer ionlarining energetik holatlariga quyidagicha ta'sir qiladi:

- no-radiatsion relaksatsiya jarayonlarini kuchaytiradi;
- energiya sathlari orasidagi o'tish ehtimolini o'zgartiradi;
- spektral chiziqlarning kengayishiga olib keladi.

Agar fonon energiyasi yuqori bo'lsa, qo'zg'algan ion energiyasini foton chiqarmasdan issiqlikka aylantirishi mumkin. Bu esa lyuminessensiya samaradorligini kamaytiradi.

Shu sababli zamonaviy materialshunoslikda past fonon energiyasiga ega matritsalar (masalan, fluoridli kristallar) yaratish muhim vazifa hisoblanadi.

So'nggi yillarda kristall panjaralardagi nodir yer ionlarini o'rganish quyidagi zamonaviy usullar yordamida amalga oshirilmoqda:

- rentgen difraksiyasi (XRD);
- optik spektroskopiya;
- elektron paramagnit rezonans (EPR);
- fotolyuminessensiya tahlili.

Eksperimental natijalar shuni ko'rsatadiki, panjara simmetriyasi va nuqsonlar konsentratsiyasi ionlarning optik xususiyatlarini keskin o'zgartiradi.

Nanotuzilmali materiallarda esa sirt effektlari ustunlik qiladi. Bu holatda nodir yer ionlarining xatti-harakati hajmiy kristallardan sezilarli darajada farq qiladi. Shu sababli nanokristallar va kvant nuqtalar asosida yangi avlod optik materiallari ishlab chiqilmoqda.

Hozirgi ilmiy tadqiqotlar quyidagi muammolarga qaratilgan:

- kristall panjarada ionlarning aniq lokal holatini aniqlash;
- energetik sathlarni yuqori aniqlikda modellashtirish;
- lyuminessensiya samaradorligini oshirish;
- defektlarni boshqarish orqali material xossalari optimallashtirish.

Shu bilan birga, nazariy modellar bilan eksperimental natijalar o'rtasida ayrim tafovutlar mavjud. Bu esa kvant mexanik hisoblashlarning murakkabligi va real kristallardagi tartibsizliklar bilan bog'liq.

MUAMMOLAR YECHIMI BO'YICHA TAKLIF VA TAVSIYALAR

Yuqorida keltirilgan nazariy va eksperimental tahlillar shuni ko'rsatadiki, kristall panjaralar va nodir yer ionlari o'rtasidagi o'zaro ta'sir jarayonlari murakkab ko'p omilli tizimdan iborat bo'lib, ularni samarali boshqarish zamonaviy materialshunoslikning muhim vazifalaridan biridir. Shu munosabat bilan quyidagi ilmiy-amaliy taklif va tavsiyalar ilgari suriladi:

Birinchi, kristall panjara simmetriyasini maqsadli boshqarish zarur. Nodir yer ionlarining optik va energetik xossalari bevosita panjara simmetriyasiga bog'liq bo'lganligi sababli, sintez jarayonida kristall strukturaning aniq turini (masalan, kubik yoki geksagonal) nazorat qilish orqali materialning funksional xususiyatlarini oldindan belgilash mumkin.

Ikkinchi, past fonon energiyasiga ega bo'lgan kristall matritsalarini yaratish tavsiya etiladi. Bunday muhitlarda no-radiatsion yo'qotishlar kamayadi va lyuminessensiya samaradorligi ortadi. Shu nuqtai nazardan, ftoridli va oksifloridli birikmalar asosidagi materiallarni chuqur o'rganish istiqbolli yo'nalish hisoblanadi.

Uchinchi, legirlash (doping) konsentratsiyasini optimallashtirish muhim ahamiyatga ega. Nodir yer ionlarining haddan tashqari yuqori konsentratsiyasi konsentratsion so'nish (quenching) hodisasiga olib keladi, natijada nurlanish intensivligi kamayadi. Shu sababli optimal konsentratsiya diapazonlarini aniqlash uchun tizimli eksperimental tadqiqotlar o'tkazish zarur.

To'rtinchi, kristall panjaradagi nuqsonlarni boshqarish texnologiyalarini rivojlantirish lozim. Maxsus issiqlik ishlovlari (annealing), ion implantatsiyasi va nazoratli kristall o'stirish usullari orqali nuqsonlar miqdorini kamaytirish yoki maqsadli ravishda shakllantirish mumkin. Bu esa materialning mexanik va optik xususiyatlarini yaxshilaydi.

Beshinchi, zamonaviy spektroskopik va difraksiyon usullardan kompleks foydalanish tavsiya etiladi. Xususan, rentgen difraksiyasi, fotolyuminessensiya va elektron paramagnit rezonans usullarini birgalikda qo'llash kristall panjaraning mikro va nano darajadagi xususiyatlarini chuqur tahlil qilish imkonini beradi.

Oltinchi, nazariy modellashtirish va kompyuter simulyatsiyalarini keng joriy etish zarur. Kvant mexanik hisoblashlar (ab initio, DFT usullari) yordamida nodir yer ionlarining energetik sathlari va kristall maydon effektlarini oldindan bashorat qilish mumkin. Bu esa eksperimental ishlarni sezilarli darajada optimallashtiradi.

Yettinchi, nanostrukturali materiallar yaratishga alohida e'tibor qaratish lozim. Nanokristallar va kvant nuqtalarda sirt effektlari ustun bo'lib, bu nodir yer ionlarining xossalari boshqarishda yangi imkoniyatlar yaratadi. Shu bois nanoo'lchamdagi tizimlarni tadqiq qilish istiqbolli ilmiy yo'nalish hisoblanadi.

Sakkizinchi, olingan ilmiy natijalarni amaliyotga joriy etish mexanizmlarini kuchaytirish zarur. Xususan, lazer texnologiyalari, LED yoritish tizimlari, optik aloqa va

tibbiy diagnostika qurilmalarida nodir yer elementlari asosidagi materiallardan keng foydalanish bo'yicha sanoat bilan hamkorlikni rivojlantirish maqsadga muvofiqdir.

XULOSA

Ushbu maqolada kristall panjaralarning tuzilish xususiyatlari, ularning turlari hamda atomlarning fazoviy joylashish qonuniyatlari tizimli ravishda tahlil qilindi. Kristall panjara qattiq jismlarning asosiy strukturaviy elementi sifatida ularning fizik, mexanik va optik xususiyatlarini belgilovchi muhim omil ekanligi asoslab berildi.

Tadqiqot natijalari shuni ko'rsatdiki, kristall panjara simmetriyasi, elementar yacheyka parametrlari va undagi nuqsonlar tizimi materiallarning makroskopik xossalariiga bevosita ta'sir ko'rsatadi. Ayniqsa, atomlarning energetik jihatdan barqaror joylashuvi va minimal energiya prinsipi kristall tuzilmalarning shakllanishida hal qiluvchi rol o'ynaydi.

Shuningdek, nodir yer ionlarining kristall panjaralar bilan o'zaro ta'siri chuqur tahlil qilinib, ularning lokal muhit ta'sirida energetik sathlari o'zgarishi, kristall maydon effekti hamda lyuminessensiya jarayonlari bilan bog'liqligi yoritildi. Ushbu jarayonlar zamonaviy optoelektronika, lazer texnologiyalari va fotonika sohalarida keng qo'llanilayotgan materiallarning fizik asosini tashkil etadi.

Olib borilgan tahlillar asosida kristall panjara parametrlarini boshqarish, legirlash jarayonini optimallashtirish hamda nuqsonlarni nazorat qilish orqali materiallarning funksional xossalariini sezilarli darajada yaxshilash mumkinligi aniqlandi.

Xulosa qilib aytganda, kristall panjaralar va nodir yer ionlarining o'zaro ta'sir mexanizmlarini chuqur o'rganish nafaqat fundamental ilmiy ahamiyatga ega, balki yuqori samarali zamonaviy texnologiyalarni yaratishda muhim ilmiy asos bo'lib xizmat qiladi.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR:

1. Kittel, Charles. *Introduction to Solid State Physics* / Charles Kittel. – 8th ed. – New York: Wiley, 2005. – 1–50 p.
2. Ashcroft, N.W., Mermin, N.D. *Solid State Physics* / N.W. Ashcroft, N.D. Mermin. – New York: Holt, Rinehart and Winston, 1976. – 10–120 p.
3. Blasse, G., Grabmaier, B.C. *Luminescent Materials* / G. Blasse, B.C. Grabmaier. – Berlin: Springer-Verlag, 1994. – 45–110 p.
4. Киттель Ч. *Введение в физику твердого тела* / Ч. Киттель. – М.: Наука, 1982. – 30–100 с.
5. Карякин Ю.В., Ангелов И.И. *Чистые химические вещества* / Ю.В. Карякин, И.И. Ангелов. – М.: Химия, 1974. – 200–250 с.
6. Mirzaev, S.M. *Fizika (qattiq jismlar fizikasi bo'limi)* / S.M. Mirzaev. – Toshkent: O'qituvchi, 2006. – 120–150 b.
7. O'zbekiston Respublikasi Oliy va o'rta maxsus ta'lim vazirligi. *Fizika fanidan namunaviy o'quv dasturi*. – Toshkent, 2021. – 10–25 b.