

საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი

თ. ძიგრაშვილი

თეორიული კრისტალოგრაფიის შესავალი



დამტკიცებულია სახელმძღვანელოდ
სტუ-ის სარედაქციო-საგამომცემლო
საბჭოს მიერ 15.12.2011, ოქმი №4

თბილისი

2012

უაკ 548.1

სახელმძღვანელო განკუთვნილია საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტის ფიზიკის სპეციალობების ბაკალავრიატის მაღალი კურსების სტუდენტების, მაგისტრებისა და იმ მკვლევარებისთვის, რომლებიც თავის საქმიანობაში იყენებენ კრისტალოგრაფიულ გამოთვლებს.

რეცენზენტები: პროფესორი თენგიზ მეუნარგია
პროფესორი დავით გორგიძე

© საგამომცემლო სახლი „ტექნიკური უნივერსიტეტი“, 2012

ISBN 978-9941-20-038-0

<http://www.gtu.ge/publishinghouse/>



ყველა უფლება დაცულია. ამ წიგნის არც ერთი ნაწილი (იქნება ეს ტექსტი, ფოტო, ილუსტრაცია თუ სხვ.) არანაირი ფორმით და საშუალებით (იქნება ეს ელექტრონული თუ მექანიკური), არ შეიძლება გამოყენებულ იქნეს გამომცემლის წერილობითი ნებართვის გარეშე.

საავტორო უფლებების დარღვევა ისჯება კანონით.

წინასიტყვაობა

ბოლო წლების მნიშვნელოვანმა მიღწევებმა გამოყენებით კრისტალოგრაფიაში, კრისტალის სტრუქტურის დადგენის ტრადიციული მეთოდები რუტინულ პროცედურებამდე დაიყვანა და მას კრისტალოგრაფიული განათლების არმქონე მკვლევრებიც წარმატებით ახორციელებენ ავტომატური დიფრაქტომეტრების მეშვეობით. მეტიც, გაშიფრული სტრუქტურები არასაკმარისი კრიტიციზმის გარეშე მიიღება, რაც ხელს უწყობს უარყოფითი შეხედულების ჩამოყალიბებას იმის შესახებ, რომ სპეციალური კრისტალოგრაფიული განათლება აღარ წარმოადგენს აუცილებლობას რიგი კრისტალოგრაფიული ამოცანების გადასაწყვეტად.

რაც შეეხება თეორიულ (მათემატიკურ) კრისტალოგრაფიას, რომელიც შორს არის მისი შესაძლებლობების ამოწურვისაგან, დღეს ახალი გამოწვევების წინაშე დგას. ეს ეხება არა მარტო კლასიკურ ჯგუფთა თეორიას (მაგნიტური ჯგუფები, ქრომატული ჯგუფები, N-განზომილებიანი ჯგუფები) და მათ გამოყენებას (ფაზური გარდაქმნები, პოლიმორფიზმი და პოლიტიპიზმი, ორეულები, ბიკრისტალოგრაფია), არამედ მრავალ სხვა მიმართულებას, რომლებიც იმთავითვე ნაკლებად იყო დაკავშირებული კრისტალოგრაფიულ და კრისტალოქიმიურ პრობლემებთან. მათ რიგს მიეკუთვნება გრაფთა თეორია, კომბინატორული ტოპოლოგია, რიცხვთა თეორია, დისკრეტული გეომეტრია, დიფრაქციის თეორია და.ა.შ. ამგვარად, მათემატიკური კრისტალოგრაფიის მიღწევები აყალიბებს მჭიდრო ურთიერთობას კრისტალოგრაფიას, მათემატიკასა და მყარი სხეულების ფიზიკას შორის, რითაც კრისტალოგრაფია ხდება ინტერდისციპლინური მეცნიერება.

კრისტალოგრაფთა საერთაშორისო კავშირის

მათემატიკური და თეორიული კრისტალოგრაფიის კომისია

ავტორი მადლობას უხდის პროფესორებს: გ.სამსონაძეს, ნ. მაისურაძესა და ე. მიმინოშვილს, დახმარებისა და რჩევებისათვის.

კურსის მიზანი

ვექტორული ალგებრის, მატრიცული აღრიცხვისა და ჯგუფთა თეორიის გამოყენებით აღიწეროს ვექტორისა და ტენზორის კოვარიანტული და კონტრავარიანტული კომპონენტების არსი და სიმეტრიის ოპერაციებისა და სიმეტრიის ელემენტების კონცეფციები, რათა მათი საშუალებით მათემატიკურად აისახოს კრისტალოგრაფიული, კანონზომიერებები, წერტილოვანი ჯგუფები და სტრუქტურული ფაზური გარდაქმნები.

კურსის დონე

არსებითად მაღალი დონის კურსია და მისადაგებულია ბაკალავრიატის მაღალი კურსისათვის და/ან მაგისტრატურის პირველი წლის კვლევითი მუშაობისათვის. იგი ასევე დახმარებას გაუწევს კრისტალოგრაფიის სხვა დისციპლინებთან დაკავშირებას, კერძოდ, ფიზიკასა და ქიმიასთან, იმ პირობით, რომ სტუდენტების მათემატიკური მომზადების დონე შესაბამისია.

კურსის შესწავლისათვის საჭირო საბაზისო ცოდნა

მოითხოვება კრისტალოგრაფიის ელემენტების, წრფივი ალგებრის, ვექტორული და მატრიცული ალგებრის ოპერაციების, და ასევე ზოგიერთი პარაგრაფისათვის, შებრუნებული მესრის ძირითადი ცნებების ცოდნა.

აღნიშვნების ნუსხა:

$\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}, \mathbf{a}^1, \mathbf{a}^2, \mathbf{a}^3, \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$	საბაზისო ვექტორები
$a, b, c, a^1, a^2, a^3, a_1, a_2, a_3$	საბაზისო ვექტორების მოდულები
X, Y, Z	ვექტორის გეგმილები
$x, y, z, x^1, x^2, x^3, x_1, x_2, x_3$	ვექტორის (ან წერტილის) კოორდინატები
α, β, γ	კუთხეები საბაზისო ვექტორებს შორის
g_{ij}, g^{ij}	მეტრიკული კოეფიციენტები (ანუ მეტრიკული ტენზორის კომპონენტები)
$\det(\dots)$	მატრიცის დეტერმინანტი
$\mathbf{G}, \mathbf{G}^{-1}$	მეტრიკული ტენზორი და მისი შებრუნებული
h, k, l	კრისტალის სიბრტყის მიღერის ინდექსები
U, V, W	კრისტალში მიმართულების ინდექსები
$\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{r} \dots$	ვექტორები
$\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}, \mathbf{M}, \mathbf{N} \dots$	მატრიცები
\mathbf{I}	ერთეულოვანი მატრიცა
\mathbf{E}	ჯგუფის ერთეულოვანი ელემენტი
$1, \bar{1}, 2, m_h \dots$	კრისტალოგრაფიული სიმეტრიის ელემენტები (ოპერატორები)
$1, 2, m, mm2 \dots$	კრისტალოგრაფიული სიმეტრიის წერტილოვანი ჯგუფები

1. შესავალი

(კურსის მათემატიკური საფუძვლების მოკლე მიმოხილვა)

1.1. მეტრიკული ტენზორი წრფივ სამგანზომილებიან სივრცეში

მიუხედავად საგნის ასათვისებლად მოთხოვნილი საბაზისო ცოდნისა, ავტორი საჭიროდ მიიჩნევს ვექტორული ალგებრის პრინციპების განხილვას შესავალში, სადაც პირველ ნაბიჯებს გადავდგამთ ისეთი ფუნდამენტური ცნებების საილუსტრაციოდ, როგორებიც არის მეტრიკული ტენზორი და ვექტორის ე.წ. კოვარიანტული და კონტრავარიანტული კომპონენტები¹.

მათემატიკის თვალსაზრისით ჩვენი განხილვის საგანი იქნება წრფივი, სამგანზომილებიანი სივრცე, რომლისათვისაც განსაზღვრულია სკალარული ნამრავლი, კერძოდ, ევკლიდური სივრცე. ტერმინი ევკლიდური აქ იხმარება იმ მიზნით, რომ ეს სივრცე გაიმიჯნოს გამრუდებული, ე.წ. არაევკლიდური სივრცეებისაგან.

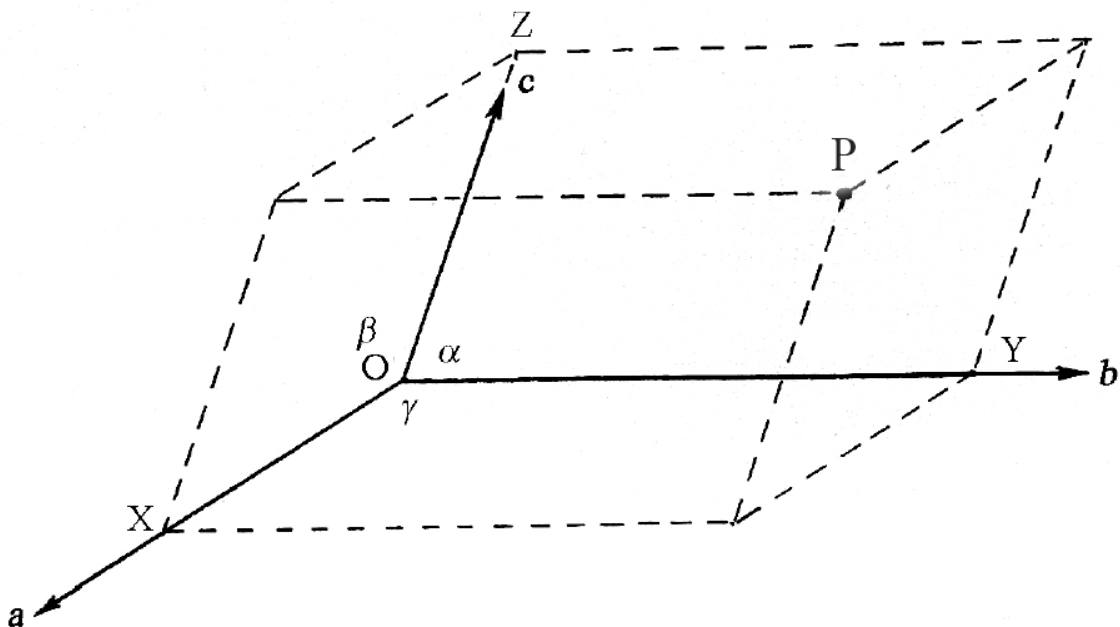
იმ სივრცის მათემატიკური მოდელი, რომელსაც განვიხილავთ, არის სამგანზომილებიანი წერტილოვანი სივრცე. მისი ელემენტები არის წერტილები. ამ სივრცის ობიექტები შეიძლება იყოს, როგორც ცალკეული წერტილები, ასევე წერტილთა სასრული (მაგ.: ატომებისა და მოლეკულების ცენტრები) და უსასრულო (მაგ.: იდეალური კრისტალის ატომთა ცენტრების უსასრულო და პერიოდული მწკრივები) ერთობლიობები.

რიგი საკითხების დამუშავებისას ამ სახელმძღვანელოში გამოვიყენებთ აფინურ გარდაქმნებს (იხ. დამატება 1). აფინურია გარდაქმნა, თუ მისი განხორციელების შედეგად კოლინეარობა არ ირღვევა. თუმცა, ზოგადად აფინური გარდაქმნები გულისხმობს წირზე წერტილთა შორის მანძილის ცვლილებასაც და შესაბამისად, ბრტყელი და სამგანზომილებიანი ობიექტების ფორმის შეცვლას. კრისტალოგრაფიაში კრისტალთა სიმეტრიის აღსაწერად განიხილება მხოლოდ ნაწილი აფინური გარდაქმნებისა: პარალელური გადატანისა და ბრუნვის ოპერაციები ანუ ტრანსლაცია და როტაცია, ისე, რომ ადგილი არ აქვს ორ წერტილს შორის მანძილის ცვლილებას. უკანასკნელს შევეხებით მხოლოდ სტრუქტურული ფაზური გარდაქმნების აღწერისას, როდესაც კრისტალური მესრის ტრანსფორმაციას აქვს ადგილი.

¹ კრისტალოგრაფიაში ფართოდ გამოყენებული ამ კატეგორიების საფუძვლების შექმნა და ფორმულირება ეკუთვნით კ. ფ. გაუსს, ბ. რიმანს, გ. რიჩისა და ტ. ლევი-ჩივიტას, რომელთა მიღწევები შემდგომ გამოყენებულ იქნა ა. აინშტაინის მიერ რელატივისტური თეორიის ჩამოყალიბებაში.

იმისათვის, რომ ზემოთ აღნიშნული ცნებები შემოვიტანოთ, წინასწარ განვიხილოთ ვექტორული ანალიზის ზოგიერთი ძირითადი საკითხი (იხ. ასევე დამატებები 1 და 2).

კერძოდ, ობიექტის აღსაწერად წერტილოვან სივრცეში შემოტანილია წრფივი კოორდინატთა სისტემისა და წერტილის კოორდინატების ცნებები [1-3, ER1,ER2] (ნახ. 1). აქ, x, y, z წარმოადგენს P წერტილის ე.წ. აფინურ კოორდინატებს, \mathbf{a}, \mathbf{b} და \mathbf{c} საბაზისო ვექტორებით წარმოდგენილ x, y და z კოორდინატთა ღერძებზე. ისინი განისაზღვრება ე.წ. პარალელური დაგეგმილებით და მათ ასევე ზოგჯერ *პარალელურ კოორდინატებს* უწოდებენ [3]. ტერმინი „პარალელური“ ამ შემთხვევაში გულისხმობს მხოლოდ დაგეგმილების მეთოდს [1,2]. მაგალითად, იმას, რომ P წერტილის გეგმილი x ღერძზე (X) მიღებულია ამ წერტილის დაგეგმილებით y და z ღერძებზე გამავალი სიბრტყის პარალელურად. განსხვავებით უკანასკნელისა, წერტილის ორთოგონალური (მართობული) გეგმილები ნებისმიერ კოორდინატთა სისტემაში მიიღება წერტილის ორთოგონალური დაგეგმილებით კოორდინატთა ღერძებზე [1, ER1]. ცხადია, მართკუთხა კოორდინატთა სისტემაში პარალელური და ორთოგონალური გეგმილები იდენტურია. თვით x კოორდინატის რიცხვითი მნიშვნელობა კი განსაზღვრულია როგორც ფარდობა $\frac{X}{a}$, სადაც a შესაბამისი ღერძის (x) საბაზისო ვექტორის (\mathbf{a}) მოდულია, ანუ კოორდინატი გამოსახულია შესაბამისი საბაზისო ვექტორის მოდულის ერთეულებში (იხ დამატება 1).



ნახ.1. კოორდინატთა სისტემა ($O, \mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$). $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ - საბაზისო ვექტორებია. X, Y, Z - P წერტილის პარალელური გეგმილებია (პროექციები)

შესაბამისად, x -ს კრისტალოგრაფიაში *ფარდობითი კოორდინატი* ეწოდება. შემდგომში ტერმინ *ფარდობითი კოორდინატების* ნაცვლად, მოკლედ ვიხმართ *კოორდინატებს*. ანალოგიურად განისაზღვრება P წერტილის y და z კოორდინატები, შესაბამისად, a და c -ზე და a და b -ზე გამავალი სიბრტყეების პარალელურად დაგეგმილებით y და z კოორდინატა ღერძებზე, ისე რომ, $y = \frac{Y}{b}$, $z = \frac{Z}{c}$.

ზოგადად საბაზისო ვექტორების სიგრძეები a , b და c (ან უფრო ეკონომიური აღნიშვნებით და უნიფიცირებულად - a_1 , a_2 , a_3 ხოლო, თვით ვექტორებისათვის - \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 , \mathbf{a}_3), ერთმანეთისაგან განსხვავებულია. ასევე განსხვავებულია კოორდინატა ღერძებს შორის კუთხეებიც - α , β , γ . ასეთ კოორდინატა სისტემას ირიბკუთხა ან დეკარტის განზოგადებული კოორდინატა სისტემა ეწოდება. სწორედ ასეთი არაორთონორმირებული სისტემა (იხ. დამატება 1) გახდა სრულად მისადაგებული კრისტალის სტრუქტურასა და სიმეტრიასთან და, ამგვარად, მომდევნო პარაგრაფების განხილვის საგანს წარმოადგენს. თუმცა, აქვე უნდა აღინიშნოს, რომ რეალური ფიზიკური სამყაროს ბუნება არ არის დამოკიდებული გამოთვლების ჩატარების ჩვენ მიერ არჩეულ მეთოდზე.

თუ P წერტილი ვექტორის ბოლოს წარმოადგენს, რომლის სათავე კოორდინატა სისტემის სათავეს ემთხვევა, მაშინ P ვექტორის მდგენელები (ანუ კომპონენტები) და კოორდინატებიც იგივე წესით დგინდება, როგორც წერტილისათვის. შემდგომში სწორედ ასეთ ვექტორებს განვიხილავთ. ანალიზური გეომეტრიიდან [1,3,ER1,ER2] ცნობილია, რომ ვექტორი შეიძლება წარმოვადგინოთ მისი მდგენელების ვექტორული ჯამის სახით:

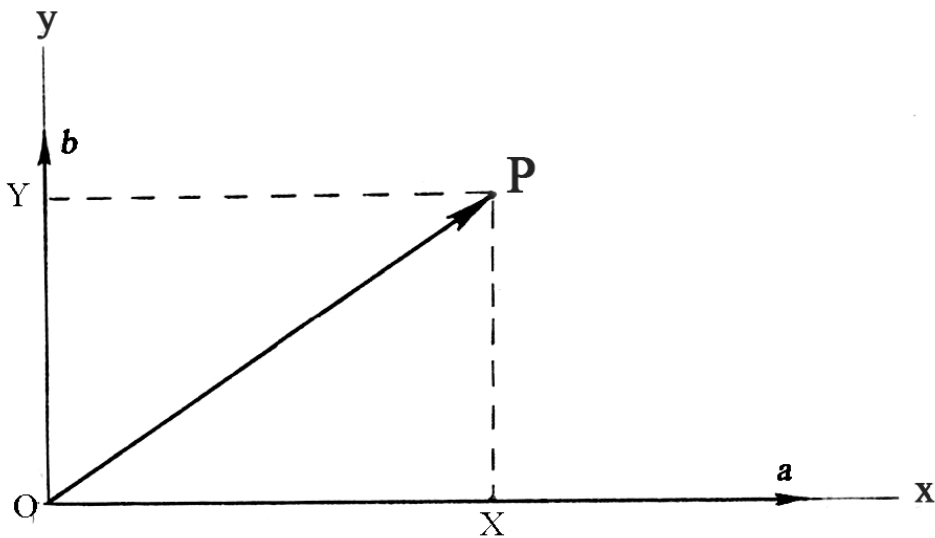
$$\mathbf{P} = x \mathbf{a} + y \mathbf{b} + z \mathbf{c} \quad \text{ან} \quad \mathbf{P} = x^1 \mathbf{a}_1 + x^2 \mathbf{a}_2 + x^3 \mathbf{a}_3$$

ამ ვექტორულ ტოლობაში $x\mathbf{a}$, $y\mathbf{b}$, $z\mathbf{c}$ - P ვექტორის ვექტორული კომპონენტებია, რომელთა სიდიდეები X, Y, Z გეგმილების სიდიდეებს წარმოადგენს. ამგვარად, სამგანზომილებიანი სივრცის არჩეულ მათემატიკურ მოდელში ყოველ წერტილს ცალსახად შეესაბამება კოორდინატა სამეული (x, y, z) , ან უნიფიცირებულად - (x^1, x^2, x^3) ² (იხ. დამატება 1).

² პარალელური დაგეგმილებით მიღებული (აფინური) კოორდინატების ზედა ინდექსით ჩაწერის უპირატესობას ქვემოთ გავეცნობით ირიბკუთხა კოორდინატა სისტემის განხილვის დროს, ვექტორის კოვარიანტული და კონტრავარიანტული კოორდინატების ცნებების შემოტანისას [1-3].

ზემოხსენებული ცნებების ფორმულირებისათვის, ჩვენ მიერ განხილულ წრფივ სამგანზომილებიან კოორდინატა სისტემაში, დგას ვექტორის სიგრძის (ანუ სივრცის ორ წერტილს შორის მანძილის, მეტრიკის) განსაზღვრის საკითხი.

ამისათვის განვიხილოთ მარტივი, ორგანზომილებიანი მართკუთხა კოორდინატა სისტემის შემთხვევა (ნახ. 2). როგორც ელემენტარული მათემატიკიდან არის ცნობილი, ეს ამოცანა ასევე მარტივად იხსნება პითაგორას თეორემის საშუალებით. სიმარტივისთვის და ზოგადობის შეუზღუდავად, განვიხილოთ კოორდინატა სისტემის სათავეში გადატანილი \mathbf{P} ვექტორის (თავისუფალი ვექტორი) სიგრძე.



ნახ. 2. ორგანზომილებიანი მართკუთხა კოორდინატა სისტემა

თუ მისი ბოლოს კოორდინატებია x და y (ამ შემთხვევაში პარალელური და ორთოგონალური კოორდინატები იდენტურია), მაშინ იგი შემდეგი ვექტორული ჯამის სახით წარმოიდგინება [1-9] (იხ. დამატება 1):

$$\mathbf{P} = xa + yb \quad \text{ან} \quad \mathbf{P} = x^1\mathbf{a}_1 + x^2\mathbf{a}_2 \equiv \sum x^i\mathbf{a}_i \quad (1.0)$$

სადაც $i = 1, 2$

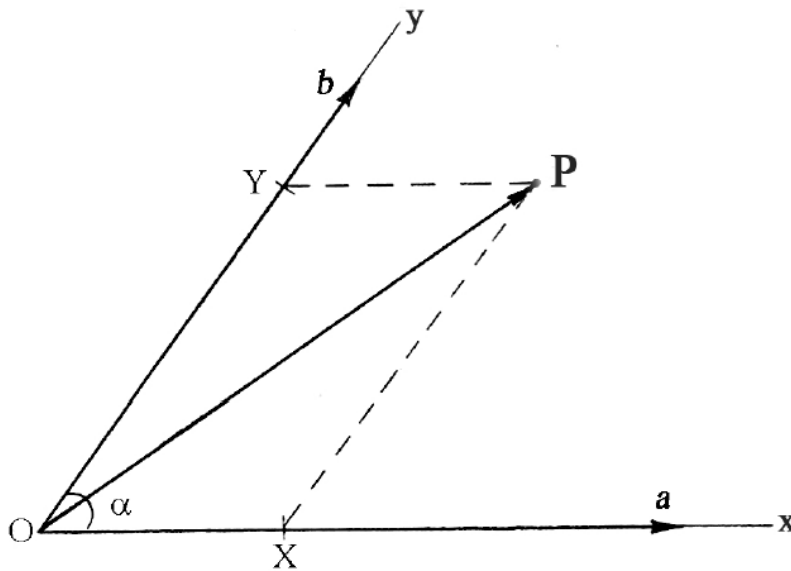
და აჯამვა ხდება დადგენილი წესით - განმეორებადი ინდექსის (აქ, i) მიხედვით. (იხილე ასევე შენიშვნა 3 გვ.12). ცხადია, ამ შემთხვევაში \mathbf{P} ვექტორის სიგრძის ($|\mathbf{r}| \equiv r$) კვადრატი:

$$r^2 = x^2a^2 + y^2b^2 \quad (1.1)$$

აქ \mathbf{a} და \mathbf{b} , შესაბამისად x და y კოორდინატა ღერძების საბაზისო ვექტორებია, a და b მათი მოდულებია, $X = xa$ და $Y = yb$ - \mathbf{P} ვექტორის ორთოგონალური გეგმილებია, xa და yb ვექტორები - \mathbf{P} -ს კომპონენტები (ვექტორული მდგენელები), ხოლო x და y კი \mathbf{P} -ს კოორდინატებია.

ასევე ორგანზომილებიან, მაგრამ ირიბკუთხა კოორდინატა სისტემის შემთხვევაში, ცნობილი კოსინუსების თეორემის გამოყენებით, ვექტორის სიგრძის კვადრატისათვის მივიღებთ:

$$r^2 = x^2 a^2 + y^2 b^2 + 2xyab \cos \alpha \quad (1.2)$$



ნახ. 3. ორგანზომილებიანი ირიბკუთხა (არაორთონორმირებული) კოორდინატა სისტემა. \mathbf{P} ვექტორის გეგმილები X, Y , მიღებულია პარალელური დაგეგმილებით სადაც, $X = xa$ და $Y = yb$. α - კუთხეა კოორდინატა ღერძებს შორის

სამგანზომილებიანი ირიბკუთხა კოორდინატა სისტემის შემთხვევაში (ნახ.1), როგორც ცნობილია კრისტალოგრაფიის ზოგადი კურსიდანაც [3-8], ვექტორის სიგრძის კვადრატის ფორმულას შემდეგი სახე აქვს:

$$r^2 = x^2 a^2 + y^2 b^2 + z^2 c^2 + 2xyab \cos \gamma + 2xzac \cos \beta + 2yzbc \cos \alpha . \quad (1.3)$$

საინტერესოა, თუ ამ გამოსახულებას შემდეგი გაშლილი სახით ჩავწერთ:

$$r^2 = x^2 a^2 + xyab \cos \gamma + xzac \cos \beta + yxba \cos \gamma + y^2 b^2 + yzbc \cos \alpha + \\ + zxca \cos \beta + zycb \cos \alpha + z^2 c^2$$

და x, y, z -ს შევცვლით x^1, x^2, x^3 -ით, ხოლო a, b, c -ს a_1, a_2, a_3 -ით, მაშინ გვექნება:

$$r^2 = (x^1 a_1)^2 + x^1 x^2 a_1 a_2 \cos \gamma + x^1 x^3 a_1 a_3 \cos \beta + x^2 x^1 a_2 a_1 \cos \gamma + (x^2 a_2)^2 + \\ + x^2 x^3 a_2 a_3 \cos \alpha + x^3 x^1 a_3 a_1 \cos \beta + x^3 x^2 a_3 a_2 \cos \alpha + (x^3 a_3)^2 . \quad (1.4)$$

აქ ყურადღებას იქცევს (1.4)-ის ცხრა კომპონენტში x^1, x^2, x^3 კოორდინატების მამრავლები:

$$\begin{aligned} g_{11} &= a_1^2, & g_{12} &= a_1 a_2 \cos \gamma, & g_{13} &= a_1 a_3 \cos \beta, \\ g_{21} &= a_2 a_1 \cos \gamma, & g_{22} &= a_2^2, & g_{23} &= a_2 a_3 \cos \alpha, \\ g_{31} &= a_3 a_1 \cos \beta, & g_{32} &= a_3 a_2 \cos \alpha, & g_{33} &= a_3^2 \end{aligned} \quad (1.5)$$

ამ კოეფიციენტებს *მეტრიკული კოეფიციენტები* ეწოდება და ტრადიციულად g -თი აღინიშნავენ [1,2,5,8]. როგორც ქვემოთ ვნახავთ, სწორედ ისინი განსაზღვრავს *სივრცის მეტრიკას* და მათ ერთობლიობას (ჩაწერილს მატრიცის სახით, $\{g_{ij}\} \equiv \mathbf{G}$), *მეტრიკული ტენზორი* ეწოდება (იხ. პარ. 1.2.1).

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} (a_1)^2 & a_1 a_2 \cos \gamma & a_1 a_3 \cos \beta \\ a_2 a_1 \cos \gamma & (a_2)^2 & a_2 a_3 \cos \alpha \\ a_3 a_1 \cos \beta & a_3 a_2 \cos \alpha & (a_3)^2 \end{pmatrix} \quad (1.5.1)$$

მისი კომპონენტები g_{ij} თითქმის ყველა კრისტალოგრაფიულ და კრისტალოფიზიკურ გამოთვლაში ფიგურირებს და შეიცავს ინფორმაციას საბაზისო ვექტორების სიგრძეებსა და მათ შორის კუთხეებზე. სიტყვა „მეტრიკული“ მიუთითებს, რომ მისი ფუნქცია ეხება სივრცის განზომილებით თვისებებს. მეტრიკული ტენზორის შინაარსისა და ფუნქციის

დასადგენად ქვემოთ (პარ. 1.2.1, 1.2.2) კიდევ ერთი გზით მივუახლოვდებით მის განსაზღვრას. ამგვარად, (1.5) აღნიშვნების გამოყენებით (1.4) ჯამს ასეთი სახე ექნება:

$$r^2 = g_{11}x^1x^1 + g_{12}x^1x^2 + g_{13}x^1x^3 + g_{21}x^2x^1 + g_{22}x^2x^2 + g_{23}x^2x^3 + g_{31}x^3x^1 + g_{32}x^3x^2 + g_{33}x^3x^3,$$

ხოლო ჯამის სიმბოლოს გამოყენებით: $r^2 = \sum g_{ij}x^i x^j$,
სადაც $i, j = 1, 2, 3$.

ეს გამოსახულება ჯამის ჩაწერის აინშტაინის წესის³ გამოყენებით ასე ჩაიწერება:

$$r^2 = g_{ij}x^i x^j \quad (1.6)$$

აქაც აჯამვა ხდება განმეორებადი ინდექსების (i, j) მიხედვით. ცხადია, (1.5)-ის გათვალისწინებით დეკარტის ორგანოზომილებიანი მართკუთხა კოორდინატთა სისტემისათვის, სადაც $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, ფორმულა (1.6) მიიღებს (1.1) სახეს.

1.2. შებრუნებული (დუალური, ბიორთონორმალური) ბაზისი და ვექტორის კოვარიანტული და კონტრავარიანტული კომპონენტები

ვისაც კი მცირედი შეხება ჰქონია კრისტალოგრაფიულ გამოთვლებთან, ყურადღება მიუქცევია ზონალობის პირობის, სტრუქტურული ფაქტორისა და ვექტორული ნამრავლის გამოსახულებებში იმ ფაქტისათვის, რომ მაგალითად, ზონალობის პირობაში, რომელიც წარმოადგენს $[UVW]$ კრისტალოგრაფიული მიმართულებისა და (hkl) კრისტალოგრაფიული სიბრტყის ურთიერთმართობულობის პირობას [4,5,7]:

³ ჯამის მოკლედ ჩაწერის აინშტაინის წესი გულისხმობს შეკრებას ორჯერ განმეორებადი ინდექსის მიხედვით და ინდექსი შეიძლება შეგვხვდეს თითოეულ შესაკრებში არა უმეტეს ორჯერ.

მაგ.: $y = C_i X^i = \sum C_i X^i = C_1 X^1 + C_2 X^2 + C_3 X^3$. ან კიდევ, $a_{ik} a_{ij} = \sum a_{ik} a_{ij}$ და $M_{ij} v_i = \sum M_{ij} v_i$.

$$hU + kV + lW = 0, \quad (1.7)$$

(ანუ, რაც იგივეა - პირდაპირი მესრის $[UVW]$ ვექტორისა და შებრუნებული მესრის (hkl) ვექტორის ურთიერთმართობულობის პირობას), თანამამრავლი ვექტორების კოორდინატები სხვადასხვა კოორდინატთა სისტემებშია გამოსახული.

კერძოდ, U, V, W - პირდაპირი სივრცის ვექტორის კოორდინატები (კრისტალოგრაფიული ტერმინოლოგიით, მიმართულების ინდექსები) - კრისტალის, ანუ პირდაპირი მესრის კოორდინატთა სისტემაშია წარმოდგენილი, ხოლო h, k, l - სიბრტყის მიღების ინდექსები კი - შებრუნებული მესრის შესაბამისი ვექტორის კოორდინატებია და იმავე, შებრუნებულ, კოორდინატთა სისტემაშია წარმოდგენილი. ასევეა ორი ვექტორის, $\mathbf{P}(p^1 p^2 p^3)$ და $\mathbf{Q}(q^1 q^2 q^3)$, ვექტორული ნამრავლის ფორმულაში, რომლის ზოგადი სახე განზოგადებულ დეკარტის კოორდინატთა სისტემაში (ანუ არაორთონორმირებულ სისტემაში, $a \neq b \neq c$; $\alpha \neq \beta \neq \gamma$), ასეთია [4,5,7]:

$$\begin{aligned} \mathbf{P} \times \mathbf{Q} &= (p^1 q^2 - p^2 q^1) \mathbf{a} \times \mathbf{b} + (p^2 q^3 - p^3 q^2) \mathbf{b} \times \mathbf{c} + (p^3 q^1 - p^1 q^3) \mathbf{c} \times \mathbf{a} = \\ &= V[(p^2 q^3 - p^3 q^2) \mathbf{a}^* + (p^3 q^1 - p^1 q^3) \mathbf{b}^* + (p^1 q^2 - p^2 q^1) \mathbf{c}^*], \end{aligned} \quad (1.7.1)$$

სადაც V კოეფიციენტი პირდაპირი მესრის $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ საბაზისო ვექტორებზე აგებული პარალელეპიპედის მოცულობაა; $\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^*$ - შებრუნებული მესრის [4-8] საბაზისო ვექტორებია ⁴. (1.7.1) გამოსახულებიდან ჩანს, რომ პირდაპირი სივრცის ორი ვექტორის ვექტორული ნამრავლი შებრუნებული კოორდინატთა სისტემის საბაზისო ვექტორების წრფივი კომბინაციით არის გამოსახული (იხ. პარ.5). ამ გამოსახულების მოდიფიკაცია, რომელიც კრისტალოგრაფიაში ზონის ღერძის მიმართულების გამოსათვლელად გამოიყენება [4,5,8]:

$$(h_1, k_1, l_1) \times (h_2, k_2, l_2) = (k_1 l_2 - l_1 k_2) \mathbf{a} + (l_1 h_2 - h_1 l_2) \mathbf{b} + (h_1 k_2 - k_1 h_2) \mathbf{c}, \quad (1.7.2)$$

⁴ $\mathbf{a}^* = (\mathbf{b} \times \mathbf{c})/v$; $\mathbf{b}^* = (\mathbf{c} \times \mathbf{a})/v$; $\mathbf{c}^* = (\mathbf{a} \times \mathbf{b})/v$. სადაც v - პირდაპირი მესრის ელემენტარული უჯრედის მოცულობაა. $\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^*$ ვექტორები ორიენტირებულია პირდაპირი მესრის საკოორდინატო სიბრტყეების მართობულად და მათი სათავეები ერთსა და იმავე წერტილში იმყოფება (იხ. ნახ. 5). $\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}^*$ ტიპის ნამრავლები ტოლია 1-ის, როცა $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}^*$ ტიპისა ტოლია 0-ის. (შებრუნებული მესრის შესახებ იხ. ვრცლად პარ. 5 -ში).

ასევე გვიჩვენებს, რომ შებრუნებული მესრის ვექტორების ვექტორული ნამრავლი პირდაპირი მესრის საბაზისო ვექტორებით გამოისახება, ე.ი. პირდაპირი მესრის ვექტორია, მაშინ, როდესაც თანამამრავლი ვექტორების კოორდინატები - (h_i, k_i, l_i) შებრუნებული მესრის კოორდინატთა სისტემაშია წარმოდგენილი.

აქვე შევნიშნოთ, თუ რას ეყრდნობა შებრუნებული (დუალური, ბიორთონორმალური) ბაზისის კონცეფცია (იხ. ასევე პარ. 5). როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, ცნობილია [1-3], რომ, ზოგადად, თუ ევკლიდური სამგანზომილებიანი (პირდაპირი) სივრცის რომელიმე წერტილში მოდებულია სამი არაკომპლანარული ვექტორი $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$, მაშინ, მათი საშუალებით შესაძლებელია ნებისმიერი ვექტორის წარმოდგენა ამ სივრცეში შემდეგი სახით [1,2] (იხ. ასევე დამატება 1):

$$\mathbf{P} = x^1 \mathbf{a}_1 + x^2 \mathbf{a}_2 + x^3 \mathbf{a}_3 = \sum x^i \mathbf{a}_i \quad i = 1,2,3 \quad (1.7.3)$$

აქ x^i კოორდინატები განსაზღვრულია \mathbf{a}_i ბაზისის მიმართ (იხ. ასევე 1.0). ფიზიკური რეალობის თვალსაჩინოდ აღსაწერად, მაგალითად, წრფივ ალგებრაში, ტენზორულ აღრიცხვაში, კრისტალოგრაფიაში, დიფრაქციის თეორიაში და, ზოგადად, მყარი სხეულების ფიზიკაში, ხელსაყრელია ე.წ. შებრუნებული, დუალური $\mathbf{a}^1, \mathbf{a}^2, \mathbf{a}^3$ ბაზისის შემოტანა (კრისტალოგრაფიაში მიღებული ტრადიციის მიხედვით $\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^*$. იხილეთ დამატებით პარ. 5), რომელიც გარკვეულ პირობებს აკმაყოფილებს (შენიშვნა 4, გვ.13) და ასევე, არაკომპლანარული ვექტორებია [3-8]. შესაბამისად, ამ ბაზისის გამოყენება შეიძლება ნებისმიერი ვექტორის წარმოსადგენად წრფივ, სამგანზომილებიან სივრცეში [1-3,5]:

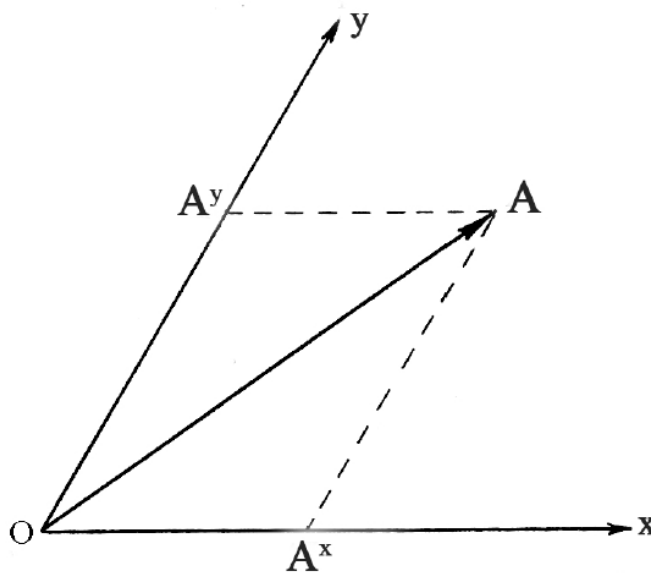
$$\mathbf{P} = x_1 \mathbf{a}^1 + x_2 \mathbf{a}^2 + x_3 \mathbf{a}^3 = \sum x_i \mathbf{a}^i . \quad (1.7.4)$$

აქ \mathbf{P} ვექტორის ორივე გაშლაში (1.7.3 და 1.7.4), შესაკრებები წარმოადგენს მის ვექტორულ მდგენელებს - კომპონენტებს, შესაბამისად, პირდაპირ და შებრუნებულ კოორდინატთა სისტემების ბაზისების მიხედვით. \mathbf{a}_i ბაზისს, მათემატიკაში მიღებული ტრადიციის მიხედვით, *კოვარიანტული* ბაზისი ეწოდება (კრისტალოგრაფიაში მას პირდაპირი მესრის ბაზისი შეესაბამება), ხოლო \mathbf{a}^i -ს, *კონტრავარიანტული* (კრისტალოგრაფიაში - შებრუნებული მესრის ბაზისი). ასევეა კოორდინატებისათვის - x_i და x^i . ქვედა ინდექსით

კოვარიანტული კოორდინატი აღინიშნება (შებრუნებული მესრის ბაზისის მიმართ), ზედა ინდექსით კი - კონტრავარიანტული (პირდაპირი მესრის ბაზისის მიმართ) ჩვეულებრივი, აფინური კოორდინატი, მიღებული პარალელური დაგეგმილებით დეკარტის განზოგადებულ კოორდინატთა სისტემაში - კრისტალოგრაფიული ტერმინოლოგიით, პირდაპირ მესერში [1,3,4]).

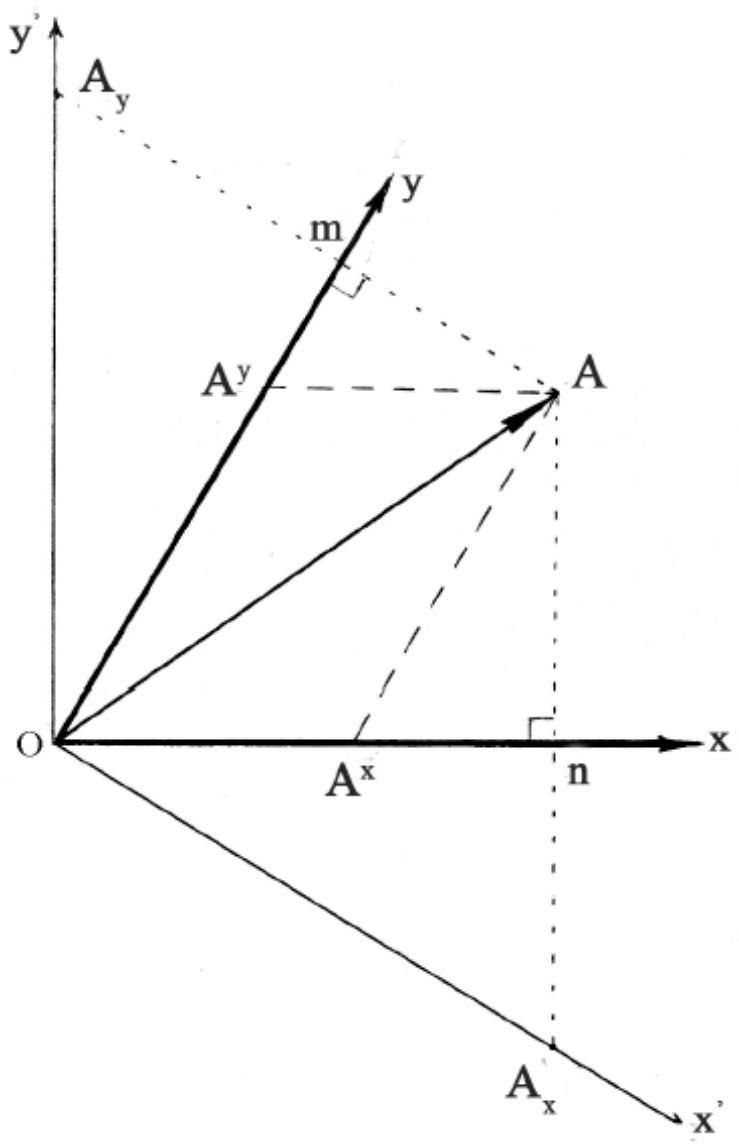
ასეთი ფორმალიზმის აზრი და მისი უპირატესობა გასაგები ხდება ქვემოთ, არაორთოგონალურ კოორდინატთა სისტემაში ვექტორის კომპონენტების განსაზღვრისას, სადაც ბუნებრივად შემოდის ვექტორის ე.წ. *კოვარიანტული და კონტრავარიანტული კომპონენტების* და შესაბამისი კოორდინატების ცნებები.

უნდა აღინიშნოს, რომ ტენზორული აღრიცხვის შესწავლისას კოვარიანტობასა და კონტრავარიანტობას შორის განსხვავების აღქმა ბუნდოვანია მისი ვიზუალიზაციის გარეშე [9]. შესაბამისად, ამ პარაგრაფში განხილული იქნება ამ კომპონენტების გეომეტრიული ინტერპრეტაცია, ისე როგორც ეს რიჩისა და ლევი-ჩივიტას მიერ იყო მოცემული [10], და ლოგიკურად შემოვა დიფრაქციის თეორიაში კარგად ცნობილი და კრისტალოგრაფიისათვის ისეთი მნიშვნელოვანი ცნება, როგორცაა შებრუნებული (დუალური) კოორდინატთა სისტემა (ანუ კრისტალოგრაფიული ტერმინოლოგიით - შებრუნებული მესერი). ამ მიზნით, სიმარტივისათვის და ზოგადობის შეუზღუდავად, განვიხილოთ ორგანზომილებიანი კოორდინატთა სისტემა.



ნახ. 4. \mathbf{A} ვექტორის კონტრავარიანტული კომპონენტები \mathbf{A}^x და \mathbf{A}^y მიღებული პარალელური დაგეგმილებით ირიბკუთხა კოორდინატთა სისტემაში

მათემატიკაში, კერძოდ ტენზორულ აღრიცხვაში მიღებული შეთანხმების მიხედვით, პარალელური დაგეგმილებით მიღებულ რომელიმე \mathbf{A} ვექტორის \mathbf{A}^x და \mathbf{A}^y მდგენელებს, როგორც აღვნიშნეთ (იხილეთ ასევე ნახ. 2), ვექტორის კონტრავარიანტული კომპონენტები ეწოდება (ნახ.4) და ზედა ინდექსებით აღინიშნება (იხილეთ ნახ. 1).



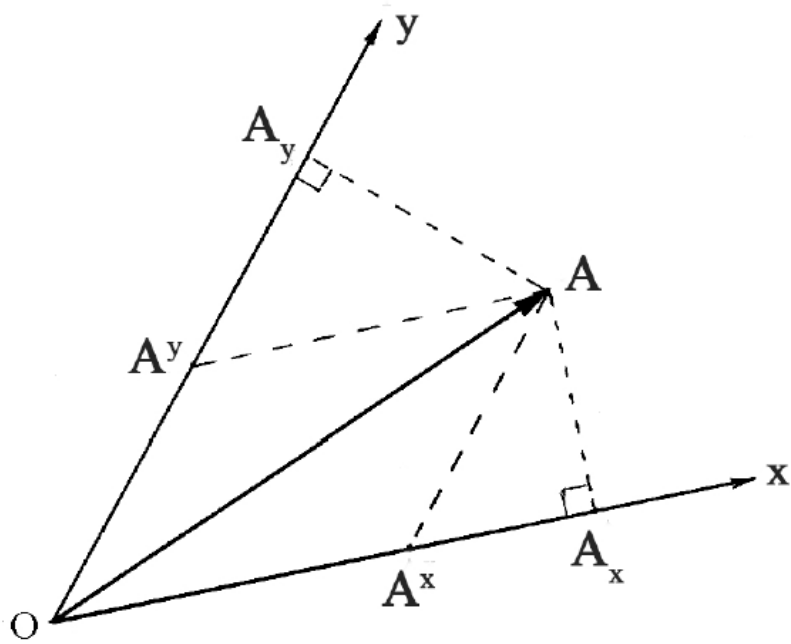
ნახ. 5. \mathbf{A} ვექტორის კონტრავარიანტული \mathbf{A}^x , \mathbf{A}^y და კოვარიანტული $\mathbf{A}_{x'}$, $\mathbf{A}_{y'}$ კომპონენტები

ამის შემდეგ გეომეტრიული კრისტალოგრაფიის კურსიდან კარგად ცნობილი შებრუნებული მესრის აგების მეთოდი მოვიშველიოთ [3,5-7,11] (იხილეთ ასევე შენიშვნა 3, გვ.13 და პარ. 5) და დადგენილი წესით ავაგოთ XOY ორგანოზომილებიანი კოორდინატა

სისტემის შესაბამისი შებრუნებული $X'OY'$ კოორდინატა სისტემა (ნახ.5). ამ ორგანზომილებიან შემთხვევაში, X' ხდება Y -ის მართობული, ხოლო Y' კი X -ის. აქ, შებრუნებული კოორდინატა სისტემის X' და Y' ღერძებზე, ასევე პარალელური დაგეგმილებით მიღებულ A_x და A_y -ს, ეწოდება A ვექტორის კოვარიანტული კომპონენტები.

სისრულისათვის უნდა აღინიშნოს, რომ ვექტორის კოვარიანტული კომპონენტების ინტერპრეტაცია შესაძლებელია, როგორც ორთოგონალური პროექციებისა პირდაპირი კოორდინატა სისტემის X და Y ღერძებზე (ნახ.6) - შესაბამისად, O_m და O_n გეგმილები ნახ. 5-ზე. სწორედ ასეთი ინტერპრეტაცია იყო მოცემული ტენზორული აღრიცხვის ფუძემდებლების, რიჩისა და ლევი-ჩივიტას მიერ [10].

იგივე ნახაზზე ჩანს, რომ A_n -სა და A_m -ის გაგრძელებები კვეთს შესაბამისად, X' და Y' ღერძებს და მათზე A_x და A_y პარალელურ გეგმილებს ქმნის.



ნახ. 6. ვექტორის კონტრავარიანტული A^x , A^y და კოვარიანტული A_x , A_y კომპონენტები ირიბკუთხა კოორდინატა სისტემაში. რიჩისა და ლევი-ჩივიტას ინტერპრეტაცია. აქ A ვექტორის კოვარიანტული კომპონენტები მიიღება ორთოგონალური დაგეგმილებით

ცხადია, ნახ.6-ზე მოცემული ინტერპრეტაცია შებრუნებულ კოორდინატთა სისტემასთან დასაკავშირებლად დამატებითი მამრავლის შემოტანას მოითხოვს. წინამდებარე კურსის ამოცანებიდან გამომდინარე, ჩვენ ორივე ინტერპრეტაციას გამოვიყენებთ. შევნიშნოთ, რომ კრისტალოგრაფიაში, და ზოგადად მყარი სხეულების ფიზიკაში, გამოიყენება პირველი ინტერპრეტაცია (ნახ. 5), სადაც ვექტორის კოვარიანტული კომპონენტების მისაღებად დაგეგმილება ხდება ასევე პარალელურად, მაგრამ შებრუნებულ, დუალურ ბაზისში, და კოორდინატები აითვლება შებრუნებული კოორდინატთა სისტემის საბაზისო ვექტორების მიმართ [4-9].

ამგვარად, (ნახ.6)-ზე ჩვენ გვაქვს ერთი და იმავე ვექტორის ორი განსხვავებული წარმოდგენა ერთი და იმავე კოორდინატთა სისტემაში იმისდა მიხედვით, თუ დაგეგმილების რომელი წესი (პარალელური თუ მართობული) იქნა გამოყენებული. (ნახ.5)-ზე კი მოცემულია ასევე ერთი და იგივე ვექტორის ორი განსხვავებული წარმოდგენა, მაგრამ ამ შემთხვევაში, ორ სხვადასხვა სისტემაში (პირდაპირსა და შებრუნებულში) და ორივეში პარალელური დაგეგმილებით. ცხადია, დეკარტის მართკუთხა კოორდინატთა სისტემაში ვექტორის წარმოდგენის ორივე წესი იდენტურ შედეგს გვაძლევს ⁵.

1.2.1. კავშირი ვექტორის კოვარიანტულ და კონტრავარიანტულ კოორდინატებს შორის

როგორც წინა პარაგრაფში განვიხილეთ, ერთი და იგივე ვექტორი შეიძლება წარმოდგენილი იქნეს მისი როგორც კოვარიანტული, ასევე კონტრავარიანტული კომპონენტების და, შესაბამისად, კოორდინატების საშუალებით, ანუ, კრისტალოგრაფიული ტერმინოლოგიით - როგორც პირდაპირ, ასევე შებრუნებულ მესერში. ე.ი. გვაქვს ერთი და იგივე ობიექტის ორ სხვადასხვა ბაზისში წარმოდგენა. შეთანხმების მიხედვით კოვარიანტული საბაზისო ვექტორები აღინიშნება ქვედაინდექსიანი ასოებით, $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ (კოვარიანტული ბაზისი), განსხვავებით კონტრავარიანტული ბაზისისა ($\mathbf{a}^1, \mathbf{a}^2, \mathbf{a}^3$), რომელიც ზედა ინდექსებითაა წარმოდგენილი. პირველს კრისტალოგრაფიაში შეესაბამება პირდაპირი მესრის ბაზისი, ხოლო მეორეს - შებრუნებული მესრისა.

⁵ აქ იდენტურობა ეხება გეომეტრიულ ინტერპრეტაციას, ხოლო რაოდენობრივად ისინი განსხვავდება მუდმივი კოეფიციენტის სიზუსტით, რომელიც დამოკიდებულია პირდაპირი და შებრუნებული საბაზისო ვექტორების განზომილებებსა და მოდულებზე. ცნობილია, რომ შებრუნებული მესრის კონცეფცია კრისტალოგრაფიაში ჩაისახა ბრავეს შრომებში და ფართოდ გამოიყენება მთლიანად მყარი სხეულების ფიზიკასა და დიფრაქციის თეორიაში. მკითხველს შეუძლია შებრუნებული (დუალური) მესრის ცნების ჩამოყალიბებისა და განვითარების ეტაპებს გაეცნოს მეხუთე პარაგრაფში.

წრფივი ალგებრიდან ცნობილია, რომ თუ გვაქვს ორი სხვადასხვა კოორდინატთა სისტემა, შესაძლებელია ერთი კოორდინატთა სისტემის ნებისმიერი ვექტორი, მათ შორის საბაზისოც, წარმოვადგინოთ მეორე კოორდინატთა სისტემის საბაზისო ვექტორების წრფივი კომბინაციით, ანუ წარმოვადგინოთ მეორე სისტემის ბაზისში [2,3,8,12] (იხ. დამატება 1). მაგალითად, პირდაპირი მესრის საბაზისო ვექტორები, ე.ი. კოვარიანტული ბაზისი - $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$, ისევე, როგორც ნებისმიერი სხვა ვექტორი, შეიძლება წარმოვადგინოთ შებრუნებული მესრის საბაზისო ვექტორებით, ანუ კონტრავარიანტული ბაზისით - $\mathbf{a}^1, \mathbf{a}^2, \mathbf{a}^3$:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= g_{11}\mathbf{a}^1 + g_{12}\mathbf{a}^2 + g_{13}\mathbf{a}^3 \\ \mathbf{a}_2 &= g_{21}\mathbf{a}^1 + g_{22}\mathbf{a}^2 + g_{23}\mathbf{a}^3 \\ \mathbf{a}_3 &= g_{31}\mathbf{a}^1 + g_{32}\mathbf{a}^2 + g_{33}\mathbf{a}^3 \end{aligned} \quad \text{ან მატრიცული სახით:} \quad \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{a}_3 \end{pmatrix} = \mathbf{G} \begin{pmatrix} \mathbf{a}^1 \\ \mathbf{a}^2 \\ \mathbf{a}^3 \end{pmatrix} \quad (1.8)$$

სადაც g_{ij} - წრფივი კომბინაციების კოეფიციენტებია; $\mathbf{G} \equiv \{g_{ij}\}$ (იხ. დამატება 2).

აინშტაინის წესის გამოყენებით ჯამები (1.8) გამოსახულებებში მოკლედ ასე ჩაიწერება:

$$\mathbf{a}_i = g_{ij}\mathbf{a}^j \quad (1.9)$$

სადაც აჯამვა ხდება ზედა და ქვედა მდებარეობაში განმეორებადი ინდექსის მიხედვით. ამ შემთხვევაში j -ს მიხედვით. აქ j , ისევე, როგორც i იღებს მნიშვნელობებს 1, 2, 3. ფორმულები (1.8) და (1.9) გამოხატავს კავშირს პირდაპირი და შებრუნებული მესრების საბაზისო ვექტორებს შორის, ანუ კოვარიანტულ და კონტრავარიანტულ ბაზისებს შორის. ვაჩვენოთ, რომ აქ (1.8, 1.9) წრფივი კომბინაციების კოეფიციენტები - g_{ij} , *მეტრიკული ტენზორის კომპონენტებია* (იხილეთ ასევე 1.5).

მათი არსის დასადგენად (1.8)-ს რომელიმე ტოლობის ორივე მხარე სკალარულად გავამრავლოთ რომელიმე, ასევე კოვარიანტულ, საბაზისო ვექტორზე. მაგალითად, I ტოლობა გავამრავლოთ \mathbf{a}_2 -ზე. შებრუნებული და პირდაპირი მესრების საბაზისო ვექტორებს შორის დამოკიდებულების გათვალისწინებით (ერთსახელა ვექტორების ნამრავლი 1-ის ტოლია, ხოლო სხვადასხვა ვექტორებისა 0-ს), მივიღებთ:

$$\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 = g_{12} \quad (1.10)$$

ასევე დადგინდება დანარჩენი g_{ij} კოეფიციენტების მნიშვნელობები. ზოგადად კი,

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j = g_{ij} \quad (1.11)$$

ამგვარად, გვაქვს \mathbf{G} მეტრიკული ტენზორის g_{ij} კომპონენტები, რომლებიც წარმოადგენს შესაბამისი კოვარიანტული საბაზისო ვექტორების სკალარულ ნამრავლებს (1.11 და 1.5). სკალარული ნამრავლის კომუტაციურობის გამო, ნებისმიერი $g_{ij} = g_{ji}$, ანუ მათ მიერ შედგენილი მატრიცა \mathbf{G} , სიმეტრიულია (იხ. დამატება 2) და მას *კოვარიანტული მეტრიკული ტენზორი* ეწოდება.

ანალოგიურად, თუ განვიხილავთ საპირისპირო გარდაქმნას, ანუ შებრუნებული მესრის საბაზისო ვექტორების (*კონტრავარიანტული ბაზისი*) წარმოდგენას პირდაპირი მესრის საბაზისო ვექტორებით (*კოვარიანტული ბაზისი*), მივიღებთ [2,3,8]:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}^1 &= g^{11} \mathbf{a}_1 + g^{12} \mathbf{a}_2 + g^{13} \mathbf{a}_3 \\ \mathbf{a}^2 &= g^{21} \mathbf{a}_1 + g^{22} \mathbf{a}_2 + g^{23} \mathbf{a}_3 \\ \mathbf{a}^3 &= g^{31} \mathbf{a}_1 + g^{32} \mathbf{a}_2 + g^{33} \mathbf{a}_3 \end{aligned} \quad \text{ან მატრიცული ფორმით:} \quad \begin{pmatrix} \mathbf{a}^1 \\ \mathbf{a}^2 \\ \mathbf{a}^3 \end{pmatrix} = \mathbf{G}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{a}_3 \end{pmatrix} \quad (1.12)$$

სადაც $\mathbf{G}^{-1} \equiv \{g^{ij}\}$ ანუ ჯამის მოკლე ჩაწერით,

$$\mathbf{a}^i = g^{ij} \mathbf{a}_j \quad (1.13)$$

აქ \mathbf{G}^{-1} წარმოადგენს \mathbf{G} მატრიცის შებრუნებულ მატრიცას, ვინაიდან მის შებრუნებულ გარდაქმნას შეესაბამება (იხ. დამატება 2) [1-5]. ფორმულები (1.12) და (1.13) ამყარებს კავშირს შებრუნებული და პირდაპირი მესრების ბაზისებს შორის, ანუ კონტრავარიანტულ და კოვარიანტულ ბაზისებს შორის. ანალოგიურად, (1.13) გაშლის g^{ij} კოეფიციენტების არსის დასადგენად ჩავატაროთ ზემოთ მოყვანილი პროცედურა - (1.10), და (1.12)-ის რომელიმე სტრიქონის ორივე მხარე სკალარულად გავამრავლოთ რომელიმე \mathbf{a}^i -ზე. შედეგად მივიღებთ, რომ g^{ij} კოეფიციენტები, განსხვავებით (1.11)-სა, წარმოდგენილია კონტრავარიანტული საბაზისო ვექტორების სკალარული ნამრავლებით, ანუ

შებრუნებული მესრის შესაბამისი საბაზისო ვექტორების სკალარულ ნამრავლებს წარმოადგენს:

$$\mathbf{a}^i \cdot \mathbf{a}^j = g^{ij} \quad (1.14)$$

და მათ მეტრიკული ტენზორის კონტრავარიანტული კომპონენტები ეწოდება. \mathbf{G}^{-1} -ს კი - კონტრავარიანტული მეტრიკული ტენზორი. აქაც, $g^{ij} = g^{ji}$.

თუ შევადარებთ (1.9) და (1.13) ტოლობებს, ცხადია, $\{g_{ij}\}$ და $\{g^{ij}\}$ მატრიცები ახორციელებს ურთიერთშებრუნებულ გარდაქმნებს და, შესაბამისად, მათი ერთობლივი მოქმედება იგივე გარდაქმნას უნდა გვაძლევდეს, ე.ი. მათი ნამრავლი ერთეულოვანი მატრიცის ტოლი უნდა იყოს. მართლაც, თუ გავითვალისწინებთ (1.11)-ს, (1.14)-ს და თანაფარდობებს კონტრავარიანტულ (შებრუნებულ) და კოვარიანტულ (პირდაპირ) ბაზისებს შორის (იხ. შენიშვნა 4, გვ. 13) :

$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{G}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.15)$$

ე.ი. \mathbf{G} და \mathbf{G}^{-1} მატრიცები ურთიერთშებრუნებულია. როგორც ეს წინა პარაგრაფიდან ჩანს, მეტრიკული ტენზორის კოვარიანტული კომპონენტები გამოისახება პირდაპირი მესრის პარამეტრებით (1.5), ხოლო რაც შეეხება კონტრავარიანტულ კომპონენტებს, (1.14)-ის მიხედვით ისინი შებრუნებული მესრის პარამეტრებით გამოისახება და ქმნის შემდეგი სახის მატრიცას, რომლის ელემენტები (1.12) წრფივი კომბინაციების კოეფიციენტებს წარმოადგენს:

$$\mathbf{G}^{-1} = \begin{pmatrix} (a^1)^2 & a^1 a^2 \cos \gamma^* & a^1 a^3 \cos \beta^* \\ a^2 a^1 \cos \gamma^* & (a^2)^2 & a^2 a^3 \cos \alpha^* \\ a^3 a^1 \cos \beta^* & a^3 a^2 \cos \alpha^* & (a^3)^2 \end{pmatrix} \quad (1.16)$$

სადაც, a^1, a^2, a^3 და $\alpha^*, \beta^*, \gamma^*$, შებრუნებული მესრის საბაზისო ვექტორების (ანუ კონტრავარიანტული ბაზისის) მოდულები და მათ შორის კუთხეებია.

მეტრიკული ტენზორის კომპონენტების ფუნქციის საილუსტრაციოდ, დავუბრუნდეთ ფორმულა (1.6)-ს, რომელიც ვექტორის სიგრძის კვადრატს გამოსახავს. როგორც ცნობილია ანალიზური გეომეტრიიდან და ასევე კრისტალოგრაფიის კურსიდან, ვექტორის სიგრძის

კვადრატი მიიღება ამ ვექტორის თავის თავზე სკალარული გამრავლებით. შევადაროთ (1.6) ორი სხვადასხვა ვექტორის სკალარული ნამრავლის ანალოგიურ ფორმულას [4-8]. პირდაპირი მესრის ორი ვექტორის $\mathbf{u}(x^i)$ და $\mathbf{v}(y^j)$ -ს სკალარული ნამრავლი, ანუ შიდა პროდუქტი, გამოსახული კოორდინატებით და წარმოდგენილი დეკარტის განზოგადებულ კოორდინატთა სისტემაში [4-8], g_{ij} -ის მნიშვნელობების (1.5 ან 1.11) შეტანის შემდეგ, ტოლია:

$$\begin{aligned} \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = & x^1 y^1 \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_1 + x^1 y^2 \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2 + x^1 y^3 \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_3 + x^2 y^1 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_1 + x^2 y^2 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_2 + x^2 y^3 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3 + \\ & + x^3 y^1 \mathbf{a}_3 \mathbf{a}_1 + x^3 y^2 \mathbf{a}_3 \mathbf{a}_2 + x^3 y^3 \mathbf{a}_3 \mathbf{a}_3 \end{aligned}$$

ანუ, მოკლე ჩაწერით:
$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = x^i y^j \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j \quad (1.17)$$

სადაც $i, j = 1, 2, 3$.

თუ გავითვალისწინებთ, რომ \mathbf{a}_i საბაზისო ვექტორების სკალარული ნამრავლები მეტრიკული ტენზორის კოვარიანტულ კომპონენტებს ქმნის (1.11), მაშინ ფორმულა (1.17) შეიძლება ასეთი კომპაქტური სახით წარმოვადგინოთ:

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = g_{ij} x^i y^j \quad (1.18)$$

ე.ი. გვაქვს სკალარული ნამრავლის გამოსახვა მეტრიკული ტენზორის g_{ij} კომპონენტებით. (1.18) წარმოადგენს ევკლიდურ სივრცეში ვექტორთა სკალარული ნამრავლის ზოგად სახეს მოცემულს დეკარტის განზოგადებულ (არაორთონორმირებულ) სისტემაში.

ცხადია, ერთი და იმავე ვექტორის თავის თავზე სკალარულ ნამრავლს, რომელიც ამ ვექტორის სიგრძის (მოდულის) კვადრატის ტოლია, ასეთი სახე ექნება (შეადარეთ 1.4-ს და 1.6-ს):

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{u} = g_{ij} x^i x^j \quad (1.19)$$

(1.19)-ის მარჯვენა მხარე (1.6)-ს მარჯვენა მხარის იდენტურია. ამგვარად, (1.18) და (1.19), შესაბამისად, ორი ვექტორის სკალარული ნამრავლისა და ვექტორის სიგრძის კვადრატის

გამოსათვლელი ფორმულებია, წარმოდგენილი მეტრიკული ტენზორის კომპონენტებით (იხ. ასევე დამატება 4.4).

გამოვიყვანოთ კიდევ ორი სასარგებლო თანაფარდობა მეტრიკული ტენზორის კომპონენტების გამოყენებით. წინასწარ შევნიშნოთ, რომ (1.0, 1.1, 1.17, 1.18, 1.19) ფორმულებში ვექტორები პირდაპირ მესერშია განსაზღვრული, ანუ ისინი წარმოდგენილია მათი კონტრავარიანტული კოორდინატებით (x^i) კოვარიანტულ ბაზისში (\mathbf{a}_i). თუ განვიხილავთ იგივე მეთოდით, ანალოგიურად (1.7.4) -ისა, ვექტორის წარმოდგენას შებრუნებულ კოორდინატა სისტემაში, ანუ კოვარიანტული კოორდინატებით (x_i) კონტრავარიანტულ ბაზისში (\mathbf{a}^i), როგორც წინა პარაგრაფში აღვნიშნეთ, მას შემდეგი სახე აქვს:

$$\mathbf{u} = \sum x_i \mathbf{a}^i \quad \text{ან მოკლე ჩაწერით,} \quad \mathbf{u} = x_i \mathbf{a}^i \quad (1.20)$$

სადაც აჯამვა ხდება განმეორებადი ინდექსის მიხედვით და $i = 1, 2, 3$.

როგორც ცნობილია [2,3,5], თუ ერთი და იგივე ვექტორი წარმოდგენილია ორ სხვადასხვა სისტემაში, კერძოდ პირდაპირ (1.0, 1.7.3) და შებრუნებულ კოორდინატა სისტემაში (1.7.4, 1.20), მაშინ ადგილი აქვს შემდეგ ტოლობას:

$$x_i \mathbf{a}^i = x^j \mathbf{a}_j \quad (1.21)$$

აქ \mathbf{a}_j -სათვის თუ გამოვიყენებთ თანაფარდობას შებრუნებულ და პირდაპირ ბაზისებს შორის (1.9), მივიღებთ:

$$x_i \mathbf{a}^i = x^j g_{ji} \mathbf{a}^i$$

საიდანაც $g_{ij} = g_{ji}$ სიმეტრიულობის პირობის გათვალისწინებით გამომდინარეობს, რომ

$$x_i = g_{ij} x^j \quad \text{ან მატრიცული სახით:} \quad \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \mathbf{G} \begin{pmatrix} x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} \quad (1.22)$$

რაც ამყარებს კავშირს ერთი და იმავე ვექტორის კოვარიანტულ და კონტრავარიანტულ კოორდინატებს შორის, ანუ შებრუნებულ და პირდაპირ მესრებში წარმოდგენილ ერთი და იმავე ვექტორის შესაბამის კოორდინატებს შორის. ახლა იგივე ხერხით (1.21)-ში \mathbf{a}^i -სათვის გამოვიყენოთ თანაფარდობა (1.13), ანუ $\mathbf{a}^i = g^{ij} \mathbf{a}_j$ და მივიღებთ: $x_i g^{ij} \mathbf{a}_j = x^j \mathbf{a}_j$, რასაც, \mathbf{G}^{-1} -ის ასევე სიმეტრიულობის გათვალისწინებით, მივყავართ შემდეგ ტოლობამდე:

$$x^j = g^{ij} x_i \quad \text{ან მატრიცულად:} \quad \begin{pmatrix} x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} = \mathbf{G}^{-1} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \quad (1.23)$$

რომელიც ამყარებს კავშირს ერთი და იმავე ვექტორის კონტრავარიანტულ და კოვარიანტულ კოორდინატებს შორის ანუ პირდაპირ და შებრუნებულ მესრებში წარმოდგენილ, ერთი და იმავე ვექტორის შესაბამის კოორდინატებს შორის.

ახლა განვიხილოთ ორი ვექტორის სკალარული ნამრავლი (1.18), რომელიც, როგორც ვნახეთ, კოორდინატების საშუალებით შემდეგნაირად ჩაიწერება:

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = g_{ij} x^i y^j$$

ხოლო (1.22) თანაფარდობის გათვალისწინებით (ამ შემთხვევაში $g_{ij} y^j = y_i$ ან $g_{ij} x^i = x_j$), მივიღებთ:

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = x^i y_i = x_j y^j \quad (1.24)$$

ანალოგიურად, ვექტორის სიგრძის კვადრატი (1.19), იგივე (1.22) -ის გათვალისწინებით (ამ შემთხვევაში $g_{ij} x^j = x_i$ ან $g_{ij} x^i = x_j$), მიიღებს ასეთ სახეს:

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{u} = g_{ij} x^i x^j = x^i x_i = x_j x^j, \quad (1.25)$$

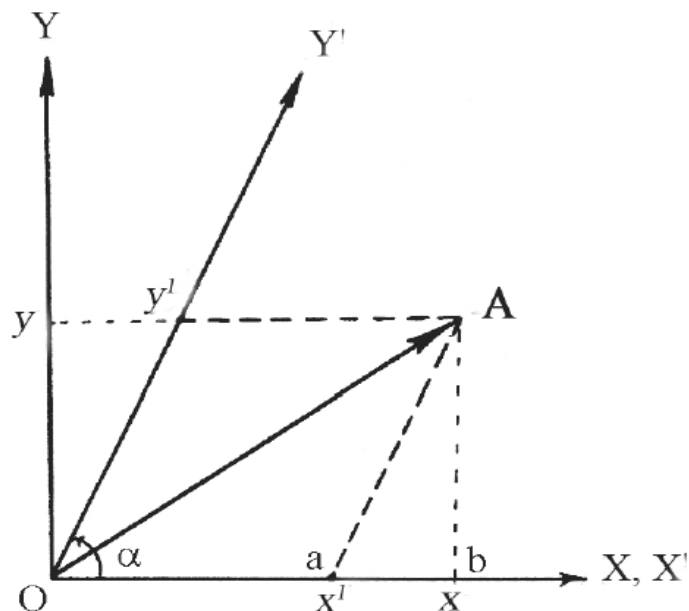
სადაც $i = 1, 2, 3$. ამგვარად, ორი ვექტორის სკალარული ნამრავლი ამ ვექტორების ერთსახელა კონტრავარიანტული და კოვარიანტული კოორდინატების ნამრავლების

ჯამით გამოისახა (1.24), ანუ, ნაცვლად ცხრაწევრიანი ჯამისა (1.17), სამწევრიანი ჯამი (1.24) მიიღება. როგორც (1.25)-დან ჩანს, ასევე ვექტორის სიგრძის კვადრატისთვისაც. აქედან ცხადია, თუ რატომ გამოისახება ზონალობის პირობაში და სტრუქტურული ფაქტორის ფორმულაში, (მიუხედავად კოორდინატთა სისტემის გვარობისა - ორთოგონალური თუ არაორთოგონალური), ორი თანამამრავლი ვექტორის კოორდინატები, სხვადასხვა (პირდაპირ და შებრუნებულ) კოორდინატთა სისტემებში (1.7). ფორმულები (1.24) და (1.25) მეტრიკული ტენზორის საშუალებით კომპაქტურად გამოსახავს ვექტორების სკალარულ ნამრავლსა და ვექტორის მოდულის კვადრატს ზოგად შემთხვევაში.

1.2.2. კოვარიანტობა, კონტრავარიანტობა და მეტრიკული ტენზორი

(კონკრეტული მაგალითი)

ამ მაგალითის მიზანია არა მარტო აჩვენოს განსხვავება ვექტორის კოვარიანტულ და კონტრავარიანტულ კომპონენტებს შორის გეომეტრიული ინტერპრეტაციის საშუალებით, არამედ ასევე დაამყაროს მათ შორის კავშირი. ასეთი ინტერპრეტაცია მოცემულია [13]-ში. იგივეს გაკეთება შესაძლებელია განზოგადებული კოორდინატების გამოყენებითაც [14],



ნახ. 7. კოვარიანტული და კონტრავარიანტული კოორდინატების ინტერპრეტაციისათვის. (x', y') - ვექტორის კონტრავარიანტული კოორდინატებია ირიბკუთხა $OX'Y'$ სისტემაში; (x, y) - ორთოგონალური კოორდინატებია დეკარტის მართკუთხა OXY სისტემაში

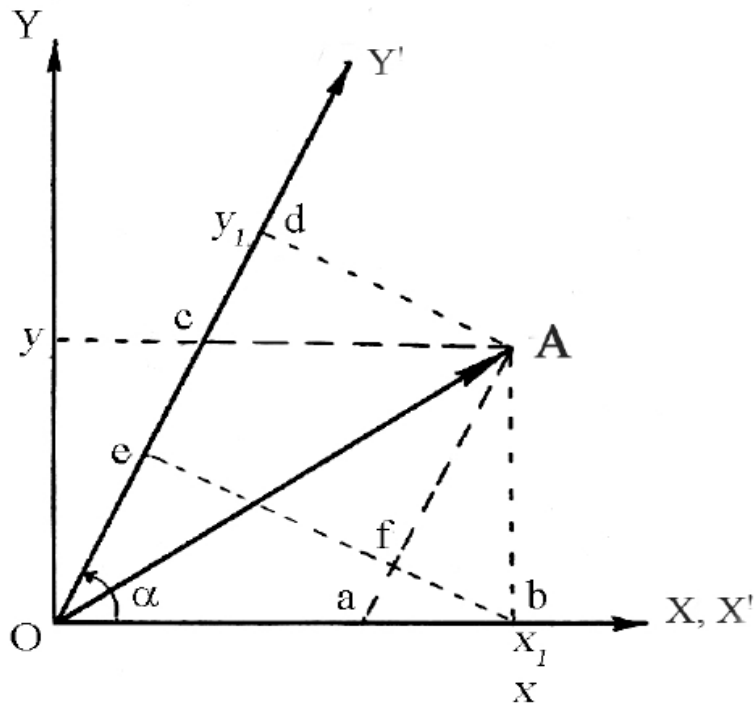
რაც ცდება ამ კურსის ფარგლებს და ამიტომ უფრო თვალსაჩინო მაგალითით შემოვისაზღვრებით. სიმარტივისათვის, და ზოგადობის შეუზღუდავად, განვიხილოთ ორი ორგანზომილებიანი კოორდინატთა სისტემა (ნახ. 7). ერთი მათგანი დეკარტის მართკუთხა კოორდინატთა სისტემაა - (OXY), მეორე კი - ირიბკუთხა (OX'Y'), ორივე ერთეულოვანი საბაზისო ვექტორებით და საერთო სათავით. ასევე, გამოთვლების გამარტივებისათვის, OX' პარალელურია OX-ის.

როგორც წინა პარაგრაფებში იყო აღნიშნული, წერტილის კოორდინატები დამოკიდებულია ბაზისის არჩევაზე, და ერთი წერტილისათვის შეიძლება გვექონდეს განსხვავებული კოორდინატები ბაზისის მიხედვით. აღვნიშნოთ **A** ვექტორის ორთოგონალური კოორდინატები პირველ (მართკუთხა) კოორდინატთა სისტემაში x -ით და y -ით, ხოლო მეორე - ირიბკუთხა სისტემაში, პარალელური დაგვემძილებით მიღებული კონტრავარიანტული კოორდინატები შეასაბამისად x^1 -ით და y^1 -ით. წარმოვადგინოთ **A** ვექტორის x^1, y^1 კოორდინატები ირიბკუთხა სისტემაში მისი ორთოგონალური კოორდინატებით მართკუთხა სისტემაში [1,4,12]. ეს ნიშნავს, ვექტორის კოორდინატები მეორე სისტემაში - x^1 და y^1 , გამოვსახოთ ამავე ვექტორის, პირველ სისტემაში მიღებული, კოორდინატების (x, y) წრფივი კომბინაციით. ნახ. 7-ზე მოცემული გეომეტრიული აგებიდან ცხადია, რომ კოორდინატებს შორის შემდეგი დამოკიდებულებებია (იხ. ასევე ცხრილი დამატება 1-ში) [15]:

$$\begin{aligned} x^1 &= x - \frac{y}{\operatorname{tg} \alpha} \\ y^1 &= 0 + \frac{y}{\sin \alpha} \end{aligned} \tag{1.26}$$

კონტრავარიანტული კოორდინატი $x^1 = ob - ab$, სადაც ob აღნიშნავს **A** ვექტორის ორთოგონალურ კოორდინატს მართკუთხა სისტემაში (x), და $ab = \frac{y}{\operatorname{tg} \alpha}$, aAb სამკუთხედიდან.

ახლა ვიპოვოთ **A** ვექტორის კოვარიანტული კოორდინატები - x_1 და y_1 , ირიბკუთხა სისტემაში მისი ორთოგონალური დაგვემძილებით OX' და OY' ღერძებზე (ნახ. 8), და გამოვსახოთ ისინი, ანალოგიურად წინა შემთხვევისა, ამავე ვექტორის კოორდინატებით მართკუთხა სისტემაში - (x, y) :



ნახ. 8. ორგანზომილებიანი კოორდინატთა სისტემები. x_1, y_1 - ვექტორის კოვარიანტული კოორდინატები ირიბკუთხა სისტემაში; (x, y) - ორთოგონალური კოორდინატები დეკარტის მართკუთხა სისტემაში (იხ. ნახ. 7)

$$x_1 = x + 0$$

$$y_1 = x \cos \alpha + y \sin \alpha \quad (1.27)$$

აქ, x_1 კოორდინატი ემთხვევა x კოორდინატს პირობის თანახმად, ხოლო $y_1 = oe + ed$, სადაც $oe = x \cos \alpha$, oeb სამკუთხედიდან, და $ed = y \sin \alpha$, fAb სამკუთხედიდან. თუ ჩავწერთ (1.26) და (1.27) წრფივ კომბინაციებს მატრიცების სახით [1-4,12] (იხ. დამატება 1), მაშინ (1.26) -სთვის მივიღებთ:

$$\begin{pmatrix} x^1 \\ y^1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{\operatorname{tg} \alpha} \\ 0 & \frac{1}{\sin \alpha} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad (1.28)$$

ასევე, (1.27) მატრიცული ფორმით მიიღებს შემდეგ სახეს:

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \cos \alpha & \sin \alpha \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad (1.29)$$

მატრიცები (1.28) და (1.29) გამოსახულებებში,

$$\mathbf{N} = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{\operatorname{tg} \alpha} \\ 0 & \frac{1}{\sin \alpha} \end{pmatrix} \quad \text{და} \quad \mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \cos \alpha & \sin \alpha \end{pmatrix}, \quad (1.30)$$

კოორდინატა გარდაქმნის მატრიცებია, რომლებსაც ვექტორის ორთოგონალური კოორდინატები დეკარტის მართკუთხა სისტემიდან (x, y) გადაჰყავს ირიბკუთხა სისტემის კონტრავარიანტულ x^1, y^1 (მატრიცა \mathbf{N}) და კოვარიანტულ x_1, y_1 (მატრიცა \mathbf{M}) კოორდინატებში შესაბამისად (იხ. ასევე ცხრილი დამატება 1-ში).

ნახ. 7-დან და ნახ. 8-დან ნათელია და ანალიტიკურადაც მარტივი დასამტკიცებელია, რომ \mathbf{A} ვექტორის სიგრძის კვადრატი, გამოსახული მისი ორთოგონალური კოორდინატებით მართკუთხა სისტემაში, განხილული შემთხვევისათვის ტოლია $x^2 + y^2$ მაშინ, როდესაც შესაბამისი ჯამები კონტრავარიანტული და/ან კოვარიანტული კოორდინატებისა ირიბკუთხა სისტემაში, ვექტორის სიგრძის კვადრატს არ გვამღევს. ასეთ შემთხვევაში ვექტორის სიგრძის გამოსათვლელად უნდა ვისარგებლოთ 1.2.1 პარაგრაფში მიღებული ზოგადი (1.25) ფორმულით, რომელიც საშუალებას იძლევა გამოვთვალოთ ვექტორის სიგრძის კვადრატი მისი ერთსახელა კონტრავარიანტული და კოვარიანტული კოორდინატების ნამრავლების ჯამით. ამგვარად, შემოწმდება (1.27) და (1.28) გაშლების მართებულობა განხილულ შემთხვევაში. მართლაც, (1.25)-ის მიხედვით:

$$r_A^2 = x^1 x_1 + y^1 y_1$$

სადაც,
$$x^1 x_1 = \left(x - \frac{y}{\operatorname{tg} \alpha} \right) x = x^2 - \frac{xy}{\operatorname{tg} \alpha}, \quad \text{ხოლო} \quad y^1 y_1 = \frac{xy}{\operatorname{tg} \alpha} + y^2.$$

ცხადია, აქ $x^1 x_1 + y^1 y_1 = x^2 + y^2$, რაც ტოლია \mathbf{A} ვექტორის სიგრძის კვადრატისა (შევნიშნოთ, რომ აქ ტოლობის მარჯვენა მხარეს ზედა ინდექსები ხარისხის მაჩვენებლებია). ახლა, გავითვალისწინოთ \mathbf{N} და \mathbf{M} მატრიცების ზემოაღნიშნული (1.28, 1.29) ფუნქციები და (1.30) -ის მიხედვით ისინი მოკლედ ასე ჩავწეროთ:

$$\mathbf{N} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x^1 \\ y^1 \end{pmatrix} \quad (1.31)$$

$$\text{და} \quad \mathbf{M} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} \quad (1.32)$$

გამოვიყენოთ ეს მატრიცები x_1, y_1 -სა და x^1, y^1 -ის ერთმანეთთან დასაკავშირებლად. კერძოდ, (1.31) ტოლობიდან გამომდინარეობს, რომ:

$$\mathbf{N}^{-1} \begin{pmatrix} x^1 \\ y^1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

თუ ჩავსვამთ ამ ტოლობას (1.32) -ში, მივიღებთ:

$$\mathbf{MN}^{-1} \begin{pmatrix} x^1 \\ y^1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} \quad (1.33)$$

ე.ი (1.33) ერთმანეთთან აკავშირებს ვექტორის კონტრავარიანტულ და კოვარიანტულ კოორდინატებს ირიბკუთხა კოორდინატთა სისტემაში. თუ შევადარებთ (1.33)-ს და (1.22)-ს, მაშინ ცხადი ხდება \mathbf{MN}^{-1} მატრიცის ფუნქცია - იგი მეტრიკული ტენზორია, კერძოდ, $\mathbf{MN}^{-1} \equiv \mathbf{G}$ - კოვარიანტული მეტრიკული ტენზორია (იხ. 1.8 და ცხრილი დამატება 1-ში). შესაბამისად, (1.33) ასე ჩაიწერება:

$$\mathbf{G} \begin{pmatrix} x^1 \\ y^1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} \quad (1.34)$$

ცხადია,

$$\mathbf{G}^{-1} \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x^1 \\ y^1 \end{pmatrix}. \quad (1.35)$$

ახლა ვიპოვოთ \mathbf{G} -სა და \mathbf{G}^{-1} -ის მნიშვნელობები განხილული შემთხვევისათვის. ამისათვის წინასწარ გამოვთვალოთ \mathbf{N}^{-1} -ის ელემენტები, ე.ი. ვიპოვოთ \mathbf{N} -ის შებრუნებული მატრიცა დადგენილი წესით [1-4,8] (იხ. დამატება 2).

რადგან \mathbf{N} -ისათვის $\det \mathbf{N} = \frac{1}{\sin \alpha}$, შესაბამისად,

$$\mathbf{N}^{-1} = \sin \alpha \begin{pmatrix} \frac{1}{\sin \alpha} & \frac{1}{\operatorname{tg} \alpha} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \cos \alpha \\ 0 & \sin \alpha \end{pmatrix}$$

ვინაიდან, $\mathbf{G} = \mathbf{M}\mathbf{N}^{-1}$,

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \cos \alpha & \sin \alpha \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & \cos \alpha \\ 0 & \sin \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \cos \alpha \\ \cos \alpha & 1 \end{pmatrix}$$

ანალოგიურად გამოვთვალოთ \mathbf{G}^{-1} -ს, როგორც \mathbf{G} -ს შებრუნებულ მატრიცას:

$$\mathbf{G}^{-1} = \frac{1}{\sin^2 \alpha} \begin{pmatrix} 1 & -\cos \alpha \\ -\cos \alpha & 1 \end{pmatrix}$$

ცხადია ნამრავლი $\mathbf{G}\mathbf{G}^{-1}$ ტოლი უნდა იყოს ერთეულოვანი მატრიცისა. მართლაც:

$$\mathbf{G}\mathbf{G}^{-1} = \frac{1}{\sin^2 \alpha} \begin{pmatrix} 1 & \cos \alpha \\ \cos \alpha & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & -\cos \alpha \\ -\cos \alpha & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ამგვარად, ჩვენ დავასრულეთ დუალური ვექტორული სისტემის - კოვარიანტული და კონტრავარიანტული (კრისტალოგრაფიული ტერმინოლოგიით, პირდაპირი და შებრუნებული) კოორდინატთა სისტემების ჩამოყალიბება, რომლებშიც ნებისმიერი ვექტორი შეიძლება იქნეს წარმოდგენილი:

1. კოვარიანტულ ბაზისში (ე.ი. პირდაპირ მესერში, 1.0, 1.7.3) კონტრავარიანტული კოორდინატებით

და პირიქით,

2. კონტრავარიანტულ ბაზისში (ე.ი. შებრუნებულ მესერში, 1.7.4, 1.20) კოვარიანტული კოორდინატებით.

მეტრიკული ტენზორი განაპირობებს გადასვლას ვექტორის წარმოდგენის ერთი ფორმიდან მეორეში (1.22, 1.23; ტენზორულ აღრიცხვაში მიღებული ტერმინოლოგიით - ინდექსის დაწევა და ინდექსის აწევა შესაბამისად). შებრუნებული მესერის კონცეფციის ჩამოყალიბების შესახებ ვრცლად იხილეთ პარ. 5.

2. მეტრიკული ტენზორი და სიმეტრიის ოპერაციები კრისტალოგრაფიაში

ამ თავის მასალის ასათვისებლად მკითხველისთვის ცნობილი უნდა იყოს კრისტალის პირდაპირი და შებრუნებული მესრების ცნებები, კვანძებს შორის მანძილისა და ვექტორებს (მიმართულებებს) შორის კუთხის გამოთვლის ფორმულები [4-8].

წინა თავში გავვეცანით მეტრიკული ტენზორის კომპონენტების არსს და ფუნქციას. შემდგომი მსჯელობისათვის გამოვიყენოთ სკალარული ნამრავლის ფორმულა (1.25), ჩაწერილი მატრიცული ფორმით [16-18] (იხ. დამატება A2-10.ა):

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{r} = \mathbf{r}^T \mathbf{G} \mathbf{r} \quad (2.1)$$

სადაც \mathbf{r} სვეტ-მატრიცაა და \mathbf{G} - მეტრიკული ტენზორი, რომელიც მოცემული კრისტალის კოორდინატთა სისტემის საბაზისო ვექტორებითა და მათ შორის კუთხეებით განისაზღვრება (1.5.1). აქედან ვექტორის სიგრძისათვის მივიღებთ:

$$|\mathbf{r}| = \sqrt{\mathbf{r}^T \mathbf{G} \mathbf{r}} \quad (2.2)$$

თუ მოვიშველიებთ ორი ვექტორის სკალარული ნამრავლის ფორმულას, ჩაწერილს ვექტორებს შორის კუთხის კოსინუსით, $\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2 = |\mathbf{r}_1| |\mathbf{r}_2| \cos \alpha$, მივიღებთ:

$$\cos \alpha = \frac{\mathbf{r}_1^T \mathbf{G} \mathbf{r}_2}{\sqrt{\mathbf{r}_1^T \mathbf{G} \mathbf{r}_1} \cdot \sqrt{\mathbf{r}_2^T \mathbf{G} \mathbf{r}_2}} \quad (2.3)$$

ფორმულები (2.2) და (2.3) გამოსახავს ვექტორის სიგრძესა და ორ ვექტორს შორის კუთხეს მეტრიკული ტენზორის გამოყენებით. სივრცეს, რომელშიც განსაზღვრულია ვექტორის სიგრძე და კუთხე ვექტორებს შორის, მეტრიკული სივრცე ეწოდება და მისი მეტრიკა მოცემულია \mathbf{G} მატრიცით.

2.1. სიმეტრიის ოპერაციები

ნებისმიერი სიმეტრიის ოპერაცია შეიძლება წარმოდგენილ იქნეს წრფივი გარდაქმნის მატრიცის საშუალებით [4-8,18] (იხ. ასევე დამატებები 1 და 3):

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

ამ მატრიცის ელემენტების სიდიდეები დამოკიდებულია მისი შესაბამისი სიმეტრიის ელემენტის ტიპსა და ორიენტაციაზე ბაზისის მიმართ, და ამ უკანასკნელის არჩევაზე. სიმეტრიის ოპერაცია პირდაპირ სივრცეში მოცემულ \mathbf{r} ვექტორს გარდაქმნის იგივე სივრცის რომელიმე \mathbf{r}' ვექტორად, რაც მატრიცული აღნიშვნებით შემდეგნაირად ჩაიწერება:

$$\mathbf{r}' = \mathbf{A}\mathbf{r} \quad (2.5)$$

აქ \mathbf{r} და \mathbf{r}' სვეტ-მატრიცებია, რომელთა ელემენტები ამ ვექტორების კომპონენტებისაგან შედგება შესაბამისად (იხ. დამატება 2). როგორც ცნობილია კრისტალოგრაფიიდან [3-8], თუ საბაზისო ვექტორებად არჩეულია პრიმიტიული მესრის \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 , \mathbf{a}_3 ვექტორები მაშინ, კრისტალის სტრუქტურის დისკრეტულობისა და პერიოდულობის გამო, \mathbf{A} მატრიცის a_{ij} ელემენტები მთელ რიცხვებს წარმოადგენს. შევნიშნოთ, რომ გარდაქმნა \mathbf{A} სამართლიანია მესრის ნებისმიერი ვექტორისათვის (იხ. ცხრილი დამატება 1-ში) და კრისტალის დისკრეტულობის გამო \mathbf{r} და \mathbf{r}' ვექტორების კომპონენტებიც მთელი რიცხვებია.

ახლა განვიხილოთ კიდევ ერთი პირობა, რომელსაც უნდა აკმაყოფილებდეს სიმეტრიული გარდაქმნის მატრიცა \mathbf{A} და რომელიც საშუალებას მოგვცემს განვსაზღვროთ მისი a_{ij} ელემენტები, როგორც მეტრიკული ტენზორის ფუნქცია. ცხადია, სიმეტრიის ოპერაციის არსიდან გამომდინარე [4-8,11,12], იგი არ ცვლის ვექტორის სიგრძეს და კუთხეს ვექტორებს შორის, ანუ სიმეტრიული გარდაქმნისას ორი ვექტორის სკალარული ნამრავლი უცვლელია (ორთოგონალური გარდაქმნა, იხ. დამატებები 1 და 2) :

$$\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}' = \mathbf{r} \cdot \mathbf{r} \quad (2.5.1)$$

საიდანაც (2.1)-ის გამოყენებით (იხ. ასევე დამატება 2), მივიღებთ:

$$\mathbf{r}'^T \cdot \mathbf{G}\mathbf{r}' = \mathbf{r}^T \mathbf{G}\mathbf{r}$$

თუ ახლა სიმეტრიის ოპერაციას (2.5)-ს და დამატება (A2.12)-ში მოცემულ თანაფარდობას გავითვალისწინებთ, მივიღებთ:

$$\mathbf{r}^T \mathbf{A}^T \mathbf{G}\mathbf{A}\mathbf{r} = \mathbf{r}^T \mathbf{G}\mathbf{r}$$

რადგან ეს ტოლობა სამართლიანია ნებისმიერი \mathbf{r} ვექტორისათვის, მაშინ:

$$\mathbf{G} = \mathbf{A}^T \mathbf{G}\mathbf{A} \quad (2.6)$$

გაშლილი სახით (2.6) თანაფარდობა შემდეგნაირად ჩაიწერება:

$$\begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} \\ a_{12} & a_{22} & a_{32} \\ a_{13} & a_{23} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

ეს ტოლობა წარმოადგენს სკალარული ნამრავლის შენახვის (2.5.1) მატრიცულ გამოსახულებას მოცემული კრისტალოგრაფიული ბაზისისათვის, რომელიც გარკვეულ პირობას ადებს მოცემულ ბაზისში \mathbf{A} მატრიცით ასახულ სიმეტრიის ელემენტს (ოპერაციას):

ყველა ის მატრიცა, რომელიც (2.6) თანაფარდობას აკმაყოფილებს, წარმოადგენს სიმეტრიის ოპერაციას იმ სისტემაში, რომლის ბაზისითაც არის განსაზღვრული \mathbf{G} მატრიცა.

თუ გამოვიყენებთ მატრიცის დეტერმინანტის თვისებებს (იხ. დამატება A2.13), მაშინ (2.6)-დან მივიღებთ:

$$\det \mathbf{G} = \det \mathbf{A}^T \det \mathbf{G} \det \mathbf{A}$$

საიდანაც, იმის გათვალისწინებით, რომ $\det \mathbf{A}^T = \det \mathbf{A}$ (იხ. დამატება A2.13), გამომდინარეობს შედეგი: $\det \mathbf{A} = \pm 1$.

იმ შემთხვევაში, როდესაც დეტერმინანტი უდრის +1, სიმეტრიის ოპერაციას ეწოდება I ტიპის და იგი წარმოადგენს ბრუნვას (*როტაცია*), ხოლო თუ დეტერმინანტი უდრის -1, მაშინ სიმეტრიის ოპერაცია II ტიპისაა და იგი წარმოადგენს *როტოინვერსიას* (ანუ სარკულ არეკვლას).

ასევე, დეტერმინანტის ± 1 -თან ტოლობა მიუთითებს იმაზე, რომ საბაზისო ვექტორებზე აგებული ელემენტარული უჯრედის მოცულობა არ იცვლება სიმეტრიის ელემენტის მოქმედებით [3-5,18]. თუმცა უნდა გავითვალისწინოთ, რომ როცა დეტერმინანტი უდრის -1-ს, მაშინ სიმეტრიის ოპერაციის განხორციელების შედეგად კოორდინატთა სისტემა იცვლის ლუწობას, ე.ი. მარჯვენა სისტემა გადადის მარცხენაში და პირიქით.

პირველი ტიპის სიმეტრიული გარდაქმნის შემთხვევაში მეორდება *კონგრუენტული* ობიექტი (ანუ იგივე ობიექტი კონფიგურაციის შეუცვლელად), ხოლო მეორე ტიპის შემთხვევაში მეორდება *ენანტიომორფული* ობიექტი (ანუ ობიექტის კონფიგურაციის სარკული ან ინვერსიული ასახვა) [4-8, 11].

სიმეტრიის ოპერაციები (როტაცია, როტოინვერსია, კოორდინატთა O სათავეში გამავალ სიბრტყეში არეკვლა, და მათი კომბინაციები) სამგანზომილებიან ევკლიდეს სივრცეში O წერტილს ტოვებს უცვლელად. შესაბამისად, ასეთი ოპერაციების ერთობლიობას, რომელსაც ობიექტი (სტრუქტურულ ერთეულთა კონფიგურაცია) გადაჰყავს თავის თავში, ეწოდება ამ ობიექტის *სიმეტრიის წერტილოვანი ჯგუფი* [3-8] (იხ. დამატება 3).

2.2. მეტრიკული ტენზორით განსაზღვრული სიმეტრიის ოპერაციები კუბური სისტემისათვის.

მაგალითისათვის განვიხილოთ კუბური სისტემის პრიმიტიული მესერი, სადაც $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, და მეტრიკულ ტენზორს შემდეგი სახე აქვს:

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} g_{11} & 0 & 0 \\ 0 & g_{11} & 0 \\ 0 & 0 & g_{11} \end{pmatrix}$$

მაშინ, თანაფარდობა (2.6), კუბური სისტემისათვის \mathbf{G} მატრიცის სიმეტრიულობისა და დიაგონალურობის გათვალისწინებით, შეიძლება ასე ჩავწეროთ განხილული შემთხვევისათვის:

$$g_{11} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = g_{11} \cdot \mathbf{A}^T \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \mathbf{A}$$

რაც ნიშნავს, რომ

$$\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A} = \mathbf{I} \tag{2.8}$$

სადაც, \mathbf{I} ერთეულოვანი მატრიცაა (იხ. დამატება A2.5 და A3.2). ამ კერძო შემთხვევაში \mathbf{A} მატრიცა ისეთი აღმოჩნდა, რომ მისი შებრუნებული (\mathbf{A}^{-1}) უდრის მის ტრანსპონირებულს - \mathbf{A}^T (მატრიცის ორთოგონალურობის პირობა. იხ. დამატება A2.14.1). გამომდინარე (2.8) თანაფარდობიდან, ვიღებთ შემდეგ ტოლობებს:

$$\begin{aligned} a_{11}a_{11} + a_{21}a_{21} + a_{31}a_{31} &= 1 \\ a_{11}a_{12} + a_{21}a_{22} + a_{31}a_{32} &= 0 \\ a_{11}a_{13} + a_{21}a_{23} + a_{31}a_{33} &= 0 \\ a_{12}a_{11} + a_{22}a_{21} + a_{32}a_{31} &= 0 \\ a_{12}a_{12} + a_{22}a_{22} + a_{32}a_{32} &= 1 \\ a_{12}a_{13} + a_{22}a_{23} + a_{32}a_{33} &= 0 \\ a_{13}a_{11} + a_{23}a_{21} + a_{33}a_{31} &= 0 \\ a_{13}a_{12} + a_{23}a_{22} + a_{33}a_{32} &= 0 \\ a_{13}a_{13} + a_{23}a_{23} + a_{33}a_{33} &= 1 \end{aligned} \tag{2.9}$$

მიღებული 9 ტოლობიდან (2.9), ერთის ტოლი 3 ტოლობა (რომლებიც \mathbf{A} მატრიცის სვეტების წევრ-წევრად ნამრავლების ჯამებს წარმოადგენს) მატრიცის a_{ij} ელემენტებს გარკვეულ პირობას უყენებს. კერძოდ, მის ყოველ სვეტში მხოლოდ ერთი ელემენტი უდრის ± 1 -ს და დანარჩენი ორი - 0 -ს. ანალოგიურად, (2.9)-ის ნულის ტოლი ტოლობებიც ადებს პირობას \mathbf{A} მატრიცის თითოეულ სტრიქონს, ვინაიდან თითოეული სვეტის ნულისაგან განსხვავებული ელემენტი უნდა იყოს მოთავსებული დანარჩენი ორი

სვეტის არანულოვანი ელემენტის მიერ დაკავებული სტრიქონისაგან განსხვავებულ სტრიქონში. (2.10)-ში ნაჩვენებია **A** მატრიცის მხოლოდ ის ვარიანტები, რომლებიც შესაბამისი a_{ij} ელემენტის მხოლოდ +1-თან ტოლობის შემთხვევაში მიიღება (დანარჩენი მატრიცები იხილეთ ტაბულა 1-ში). ამგვარად, **A** გარდაქმნის მატრიცებით გამოსახული რიგი სიმეტრიის ოპერაციებისა, რომლებიც კუბურ სისტემას შეესაბამება, მოცემულია ქვემოთ:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.10)$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

შესაბამისი a_{ij} ელემენტების -1-თან ტოლობის გათვალისწინებით თითოეულ ამ 6 მატრიცას დაემატება კიდევ 7 მატრიცა (თითოეულს), რომლებიც მიიღება თითოეულ ამ 6 მატრიცაში „ - „ ნიშნის ყველა შესაძლო გადანაწილებით (ერთ, ორ და სამ პოზიციაში). ამით კიდევ 42 მატრიცა დაემატება 6-ს და, ამრიგად მივიღებთ, რომ იმ დასაშვებ სიმეტრიის ოპერაციათა რაოდენობა, რომლებიც კუბურ სისტემას შეესაბამება, უდრის 48-ს. მათი შესაბამისი მატრიცები მოცემულია ტაბულა 1-ში. აქვეა მითითებული სიმეტრიის ოპერაციის სიმბოლო და მისი ორიენტაცია ($m, 1, 2, 3, 4, \bar{1}, \bar{3}, \bar{4}$ სიმეტრიის ოპერატორებია. ტაბულაში $3, 4, \bar{3}, \bar{4}$ -ის შებრუნებულები აღნიშნულია $(^{-1})$ ხარისხის მაჩვენებლით). ეს 48 მატრიცის ერთობლიობა ქმნის ე.წ. სიმეტრიის წერტილოვან ჯგუფს, რომლის საერთაშორისო კრისტალოგრაფიული სიმბოლოა $m\bar{3}m$ [4-8] (იხ. ასევე პარ. 3 და დამატება 3). ასეთ ჯგუფთა რაოდენობა, ყველა კრისტალური სისტემისათვის (7 სინგონია) ერთად, ტოლია 32-ის. ტაბულიდან ჩანს, რომ მაგალითად, სიმეტრიის ოპერაცია, რომელიც შეესაბამება 60° -ით მობრუნებას, ე.ი. მე-6 რიგის სიმეტრიის ღერძი, შეუთავსებელია კუბურ სისტემასთან (თუმცა ის შეთავსებადია სხვა, კერძოდ ჰექსაგონალურ სისტემასთან, იხ. პარ.3). ასევე დადგენილია, რომ თითოეული 32 წერტილოვანი ჯგუფი წარმოადგენს $m\bar{3}m$ ან $6/mmm$ სიმეტრიის წერტილოვანი ჯგუფის ან ორივეს ქვეჯგუფს.

განვიხილოთ კიდევ ერთი მაგალითი, მხოლოდ ახლა, ყველაზე დაბალი სიმეტრიის მქონე - ტრიკლინური სისტემისათვის, სადაც $a \neq b \neq c$ და $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$. ცხადია მეტრიკული ტენზორის ელემენტები 0-ისაგან განსხვავებული სიდიდეები იქნება (თუმცა $g_{ij} = g_{ji}$) და (2.6) ტოლობა დაკმაყოფილდება მხოლოდ \mathbf{A} -ს შემდეგი ორი მნიშვნელობისათვის (იხ. ასევე დამატება A2.10ბ):

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

რაც შეესაბამება ტრიკლინურ სისტემასთან თავსებად სიმეტრიის ელემენტებს (ოპერაციებს): I და \bar{I} . ანუ, პირველი რიგის ღერძსა და ინვერსიის ცენტრს [4-8] (იხ. დამატება 3).

და ბოლოს, თანაფარდობა $\mathbf{G} = \mathbf{A}^T \mathbf{G} \mathbf{A}$ შეიძლება გამოყენებული იქნეს \mathbf{A} -სთან თავსებადი მეტრიკული ტენზორის დასადგენად, თუ ცნობილია თვით გარდაქმნის \mathbf{A} მატრიცა (სიმეტრიის ოპერაცია). ე.ი. შესაძლებელია ამოიხსნას შებრუნებული ამოცანა: დადგინდეს, შეესაბამება თუ არა მოცემული სიმეტრიის ოპერაცია (\mathbf{A}) ამა თუ იმ ბაზისს, ანუ უფრო მარტივად, ეკუთვნის თუ არა მოცემული სიმეტრიის ოპერაცია \mathbf{G} -თი ასახულ ამა თუ იმ კრისტალოგრაფიულ სისტემას. უკანასკნელს კი ადგილი ექნება მხოლოდ იმ შემთხვევაში, თუ \mathbf{A} აკმაყოფილებს სკალარული ნამრავლის ინვარიანტულობის (2.6) პირობას.

2.3. სიმეტრიის ოპერაცია და სიმეტრიის ელემენტის ორიენტაცია

სიმეტრიის ოპერაცია ისეთი ოპერაციაა (ბრუნვა, არეკვლა ან მათი კომბინაცია), რომლის განხორციელების დროს ნებისმიერი ობიექტი (გეომეტრიული ფიგურა, მოლეკულა, დ.ა.შ.) იძენს ახალ კონფიგურაციას, რომელიც განურჩევადია პირველადი კონფიგურაციისაგან და ობიექტი უთავსდება თავის თავს (მაგრამ არ არის იგივე). მხოლოდ იდენტურობის ოპერაცია (პირველი რიგის სიმეტრიის ღერძის მოქმედება) წარმოადგენს გამონაკლისს, რომელიც იგივე გარდაქმნის ოპერაციაა. მისი მოქმედებით ობიექტი არა მარტო უთავსდება თავის თავს, არამედ იგივეა.

შესაბამისად, ეს სიმეტრიის ელემენტი აპრიორი ნებისმიერ ობიექტს გააჩნია და მას შესაბამისად, იგივე ან იდენტურობის გარდაქმნა ეწოდება.

იმის მიხედვით, თუ როგორია ობიექტის სიმეტრია, შეიძლება არსებობდეს რამდენიმე სიმეტრიული გარდაქმნა (სიმეტრიის ოპერაცია), რომლებიც მოცემულ ობიექტს შეუთავსებს თავის თავს. სიმეტრიული გარდაქმნების ეს ერთობლიობა კი ქმნის ჯგუფს (იხ. დამატება 3), რომელსაც მოცემული ობიექტის სიმეტრიის ჯგუფი ეწოდება [4-8,11, 25].

თვით სიმეტრიის ელემენტი გეომეტრიული კატეგორიაა, რომლის მიმართაც ხორციელდება აღნიშნული ოპერაცია (ან ოპერაციები) და შეესაბამება იმ წერტილთა ერთობლიობას, რომელიც უძრავი რჩება სიმეტრიის ოპერაციის მოქმედების შედეგად [4-8,11]. კერძოდ, ბრუნვის ღერძები, სიმეტრიის სიბრტყე, ტრანსლაცია, სიმეტრიის ცენტრი, წარმოადგენს სიმეტრიის ელემენტებს, და მათი ორიენტაცია უცვლელი რჩება გარდაქმნის შემდეგაც.

ვინაიდან სიმეტრიის ოპერაციები წრფივ გარდაქმნებს წარმოადგენს და გამოისახება გარდაქმნის მატრიცებით [1-8, 22-26] (იხ. დამატებები 1, 2, 3), ცხადია, მათი ორიენტაციის დადგენა კრისტალის კოორდინატთა სისტემის მიმართ, ანალიტიკურად, სწორედ ამ გარდაქმნის მატრიცის საკუთრივი ვექტორების პოვნის ამოცანამდე დადის.

მართლაც, თუ გვინდა სიმეტრიის ელემენტის ორიენტაციის დადგენა შესაბამისი **A** გარდაქმნის მატრიცის საშუალებით, უნდა ვიპოვოთ ისეთი ვექტორი ან ვექტორები, რომლებიც ამ გარდაქმნის (სიმეტრიის ოპერაციის) განხორციელების შემდეგ თავის თავის კოლინეარული რჩება (საკუთრივი ვექტორი ან ვექტორები). ანუ შესაძლებელია ორიგინალი ვექტორი ასახულისაგან განსხვავდებოდეს მხოლოდ სიგრძით და ნიშნით, რაც განისაზღვრება გარდაქმნის მატრიცის საკუთრივი მნიშვნელობებით [1, 22-25, ER2] (იხ. დამატება 2).

მაგალითისათვის განვიხილოთ მარტივი თვალსაჩინო შემთხვევა: ვთქვათ, გვაქვს $0 < \alpha < 180^\circ$ კუთხით ბრუნვის ღერძი სამგანზომილებიან სივრცეში, ორიენტირებული მართკუთხა კოორდინატთა სისტემის **z** ღერძის დადებითი მიმართულების გასწვრივ [3-8,11,12]. მაშინ შესაბამისი გარდაქმნის მატრიცის საკუთრივი ვექტორები იქნება ნებისმიერი **0**-ისაგან განსხვავებული, **z** ღერძის პარალელური ვექტორები. ანუ ის ვექტორები, რომლებიც გარდაქმნის შემდეგ ისევ **z** ღერძზე რჩება, და რომელთა სიგრძეები შესაბამისი საკუთრივი მნიშვნელობებით განისაზღვრება [22-25, ER1, ER2]. სხვა ნებისმიერი ვექტორი კი ამ გარდაქმნის მოქმედებით არ გადავა თავის პარალელურ პოზიციაში. მაგალითად, თუ განვიხილავთ იგივე α კუთხით ბრუნვას **z** ღერძის მართობულ სიბრტყეში მოთავსებული ნებისმიერი ვექტორისათვის, ამ შემთხვევაში არც ერთი ვექტორი არ გადადის თავის კოლინეარულში.

ზემოაღწერილი, ანალიზური გეომეტრიის სტანდარტული ამოცანაა და ნიშნავს წრფივი გარდაქმნის მატრიცის საკუთრივი მნიშვნელობებისა და საკუთრივი ვექტორების პოვნას მახასიათებელი განტოლების ამოხსნის საშუალებით [22-25, ER2]. კერძოდ, თუ A გარდაქმნის მატრიცაა, მაშინ საკუთრივი r ვექტორისათვის გვექნება შემდეგი განტოლება:

$$Ar = \lambda r$$

ან სხვა სახით,

$$Ar = I\lambda r \quad \text{ანუ} \quad (A - I\lambda)r = 0 \quad (2.11)$$

სადაც I ერთეულოვანი მატრიცაა და λ - საკუთრივი მნიშვნელობა (იხ. დამატება 2).

ამ განტოლებიდან ვპოულობთ r -ს. ცხადია, $r = 0$, ტრივიალური ამონახსნია, ჩვენს ინტერესს კი წარმოადგენს არატრივიალური ამოხსნები, ანუ ის ამოხსნები, რომლებიც აკმაყოფილებს შემდეგ განტოლებას [22, 23, ER1, ER2]:

$$\det(A - I\lambda) = 0 \quad (2.12)$$

დეტერმინანტის გაშლის შედეგად მიღებული მახასიათებელი განტოლების (კუბური განტოლება λ -ს მიმართ) სტანდარტული მეთოდით ამოხსნის შედეგად [22-25, ER2] ვღებულობთ საკუთრივ მნიშვნელობებსა და შემდეგ შესაბამის საკუთრივ ვექტორებს. კრისტალოგრაფიული სიმეტრიის ზოგიერთი ოპერაციისათვის შეიძლება საჭირო აღმოჩნდეს ასევე $A \cdot A$ გარდაქმნის საკუთრივი ვექტორების პოვნა იმ შემთხვევაში, თუ თვით A -სთვის არ მოინახა 0 -ისაგან განსხვავებული საკუთრივი ვექტორი.

შევნიშნოთ, რომ ის გარდაქმნები, რომელთა შესაბამის მატრიცებს არ აქვს საკუთრივი ვექტორები (0 -ისაგან განსხვავებული), არ წარმოადგენს სიმეტრიის ოპერაციებს. მაგრამ არა ყველა გარდაქმნა, რომლის მატრიცასაც საკუთრივი ვექტორი გააჩნია, წარმოადგენს სიმეტრიის ოპერაციას. მაგალითად, ზემოთ განხილულ შემთხვევაში, როცა $\alpha \neq 45^\circ, 60^\circ, 90^\circ$. შევნიშოთ ასევე, რომ კრისტალოგრაფიაში გამოყენებული წრფივი გარდაქმნის მატრიცების საკუთრივი მნიშვნელობები ყოველთვის ნამდვილი რიცხვებია.

2.4. კრისტალურ მესერთან თავსებადი ბრუნვები

თუ \mathbf{A} წარმოადგენს I ტიპის სიმეტრიის ოპერაციის შესაბამისი გარდაქმნის მატრიცას (პარ. 2.1), მაშინ შეგვიძლია გამოვთვალოთ მობრუნების კუთხე მისი კვალის მნიშვნელობიდან (იხ. დამატება 2.15) და გავითვალისწინოთ, რომ მატრიცის კვალი ინვარიანტულია ბაზისის გარდაქმნის მიმართ, ე.ი. არ არის დამოკიდებული საბაზისო ვექტორების არჩევაზე. შესაბამისად, გამოთვლების სიმარტივისათვის ბრუნვის მატრიცა განვიხილოთ ორთონორმირებული ბაზისისათვის (იხ. დამატება 1.1). ასევე შევნიშნოთ, რომ კრისტალური მესრის კოორდინატა სისტემის ბაზისში გარდაქმნის მატრიცის კვალი არის მთელი რიცხვი, რადგან თვით მატრიცის ელემენტები მთელი რიცხვებია, რაც, თავისთავად, კრისტალური მესრის დისკრეტულობით და პერიოდულობით არის განპირობებული. სწორედ ეს უკანასკნელი პირობა განსაზღვრავს კრისტალური მესრისათვის დასაშვებ ბრუნვის კუთხეების მნიშვნელობებს.

მაგალითისათვის განვიხილოთ ორთონორმირებულ სიტემაში ვექტორის საათის ისრის საწინააღმდეგო მიმართულებით ბრუნვა რაიმე α კუთხით \mathbf{z} ღერძის ირგვლივ. ეს გარდაქმნა აღიწერება ქვემოთ მოყვანილი მატრიცით (იხ. ასევე დამატება 1.2),

$$\begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.13)$$

რომლის კვალია $2 \cos \alpha + 1$ და ზემოაღნიშნული პირობების თანახმად (მესრის დისკრეტულობა და პერიოდულობა) იგი მთელი რიცხვია, ანუ

$$\text{tr} \mathbf{A} = 2 \cos \alpha + 1 = k \quad (\text{მთელი რიცხვი}).$$

აქედან ვიპოვოთ კრისტალურ მესერთან თავსებადი α -ს მნიშვნელობები. ვინაიდან $\cos \alpha = \frac{(k-1)}{2}$, მაშინ ცხადია, რომ $\cos \alpha$ -ს დასაშვები მნიშვნელობები მიიღება მხოლოდ $k = -1, 0, 1, 2, 3$ -თვის, და ეს მნიშვნელობებია: $-1, -1/2, 0, 1/2, 1$, რომლებიც შეესაბამებიან კუთხეებს: $60^\circ, 90^\circ, 120^\circ, 180^\circ, 240^\circ, 270^\circ, 300^\circ, 360^\circ$. როგორც კრისტალოგრაფიის კურსიდან არის ცნობილი, ზოგადად სწორედ ეს კუთხეები არის თავსებადი კრისტალის მესერთან მისი ტრანსლაციური პერიოდულობის გამო, და

შესაბამება შემდეგ დასაშვებ ბრუნვის ღერძებს 1, 2, 3, 4, 6 [3-8,11,12], ანუ სხვა სიტყვებით, პირველი, მეორე, მესამე, მეოთხე და მეექვსე რიგის ბრუნვის ღერძებით განხორციელებად სიმეტრიის ოპერაციებს.

ადვილი საჩვენებელია, რომ თითოეული ზემოთ მოყვანილი სიმეტრიის ელემენტი წარმოადგენს (ქმნის) მონოაქსიალური სიმეტრიის წერტილოვან ჯგუფს, რომელიც იგივე, მხოლოდ, ვერტიკალური სიმბოლოთი აღინიშნება (1, 2, 3, 4, 6), და ციკლურ ჯგუფს წარმოადგენს (იხ. დამატება 3 და პარ. 3.1) [4-8, 26]. ქვემოთ ცხრილში (ტაბულა 2) მოცემულია შესაბამისობები k - ბრუნვის მატრიცის კვალს, $\cos \alpha$ -ს, α -სა და n - ბრუნვის ღერძის რიგს შორის.

ტაბულა 2

ბრუნვის მატრიცის კვალის დასაშვები მნიშვნელობები k	$\cos \alpha$	ბრუნვის კუთხის დასაშვები მნიშვნელობები α	α -ს შესაბამისი შესაძლო ბრუნვის კუთხეები (°)	ბრუნვის ღერძის რიგი n
+3	1	360°	0	1
+2	1/2	60°	120, 180, 240, 300, 360	6
+1	0	90°	180, 270, 360	4
0	-1/2	120°	240, 360	3
-1	-1	180°	360	2

2.5. სიმეტრიის ჯგუფები

თუ A_1 და A_2 წრფივი გარდაქმნის მატრიცები გამოსახვენ სიმეტრიის ოპერაციებს ერთი და იგივე ბაზისში, მაშინ $A = A_1 \cdot A_2$ მატრიცაც ასევე სიმეტრიის ოპერაციის მატრიცაა ამავე ბაზისში. ამის სადემონსტრაციოდ A_1 და A_2 მატრიცებისათვის განვიხილოთ (2.6) თანაფარდობით გამოსახული კანონზომიერება, რომელსაც ზოგადად

ყველა სიმეტრიის ოპერაცია უნდა აკმაყოფილებდეს, ე.ი. პირობის თანახმად $\mathbf{A}_1^T \mathbf{G} \mathbf{A}_1 = \mathbf{G}$ და $\mathbf{A}_2^T \mathbf{G} \mathbf{A}_2 = \mathbf{G}$. შევამოწმოთ ამ თანაფარდობის კანონზომიერება \mathbf{A} მატრიცისათვის:

$$(\mathbf{A}_1 \cdot \mathbf{A}_2)^T \cdot \mathbf{G} \cdot (\mathbf{A}_1 \cdot \mathbf{A}_2) = \mathbf{A}_2^T \mathbf{A}_1^T \cdot \mathbf{G} \cdot \mathbf{A}_1 \mathbf{A}_2 = \mathbf{A}_2^T \mathbf{G} \mathbf{A}_2 = \mathbf{G},$$

რადგან აქ შიდა წევრების ნამრავლი $\mathbf{A}_1^T \mathbf{G} \mathbf{A}_1 = \mathbf{G}$

ეს შედეგი სამართლიანია არა მარტო ორი მატრიცისათვის, არამედ ასევე რამდენიმე მატრიცის ნამრავლისათვისაც, $\mathbf{A}_1 \cdot \mathbf{A}_2 \cdot \mathbf{A}_3 \dots$ სადაც \mathbf{A}^n კერძო შემთხვევას წარმოადგენს, როცა ერთი და იგივე სიმეტრიის ოპერაცია მეორდება n -ჯერ.

მეტიც, ვთქვათ, რომელიმე სიმეტრიის ოპერაციას გამოსახავს \mathbf{A} მატრიცა. ვაჩვენოთ, რომ მატრიცა \mathbf{A}^{-1} -იც ასევე სიმეტრიის ოპერაციას შეესაბამება. მართლაც, თუ (2.6) ტოლობის ორივე მხარეს მარცხნიდან და მარჯვნიდან გავამრავლებთ შესაბამისად $(\mathbf{A}^T)^{-1}$ -ზე და $(\mathbf{A})^{-1}$ -ზე,

$$(\mathbf{A}^T)^{-1} \mathbf{A}^T \cdot \mathbf{G} \cdot \mathbf{A} (\mathbf{A})^{-1} = (\mathbf{A}^T)^{-1} \cdot \mathbf{G} \cdot (\mathbf{A})^{-1},$$

და უკანასკნელი ტოლობის მარჯვენა მხარეში გავითვალისწინებთ, რომ $(\mathbf{A}^T)^{-1} = (\mathbf{A}^{-1})^T$ (იხ. დამატება 2), მივიღებთ:

$$\mathbf{G} = (\mathbf{A}^{-1})^T \cdot \mathbf{G} \cdot (\mathbf{A})^{-1}.$$

ე.ი. \mathbf{A}^{-1} ასევე სიმეტრიის ოპერაციის შესაბამისი მატრიცაა.

აქვე აღვნიშნოთ, რომ კერძოდ ერთეულოვანი მატრიცა, რომელიც იდენტურობის ოპერაციას აღნიშნავს და კრისტალოგრაფიაში მას სიმეტრიის ელემენტი - *პირველი რიგის სიმეტრიის ღერძი* - შეესაბამება, არ არის დამოკიდებული იმაზე, თუ \mathbf{G} მატრიცა რომელ კოორდინატთა სისტემის ბაზისს ასახავს.

ამგვარად, ზემოთ მოყვანილი მსჯელობით მოვახდინეთ იმ ფაქტის დემონსტრირება, რომ ჯგუფთა თეორიის ყველა პოსტულატი მისაღებია სიმეტრიის ოპერატორებისათვის [4,8,26] (იხ. ასევე დამატება 3). შესაბამისად, სიმეტრიის ოპერატორები წარმოადგენენ ჯგუფის ელემენტებს, რომელსაც სიმეტრიის ჯგუფი ეწოდება, ე.ი. სიმეტრიის ელემენტები, რომელთაც შეესაბამება გარკვეული ოპერაციები და რომლებიც წრფივი გარდაქმნის ორთოგონალური მატრიცებით აღიწერება, აკმაყოფილებს ჯგუფის ელემენტის ყველა თვისებას. შედეგად, კრისტალოგრაფიული სიმეტრიის ელემენტების მიმართ შესაძლებელია გამოვიყენოთ ჯგუფური ოპერაციები, რაც ქვემოთ იქნება ნაჩვენები (იხ. ასევე დამატება 3).

ვინაიდან, ყველა კრისტალოგრაფიული სიმეტრიის ოპერაცია წერტილს $0,0,0$ კოორდინატებით ტოვებს უცვლელად, რაც ნიშნავს, რომ ყველა სიმეტრიის ელემენტი შეიცავს ამ წერტილს (ანუ სხვა სიტყვებით - ამ წერტილზე გადის), სიმეტრიის ასეთ ჯგუფებს წერტილოვანი ჯგუფები ან სიმეტრიის წერტილოვანი ჯგუფები ეწოდება (იხ. დამატება 3) [4-8, 26].

3. კრისტალოგრაფიული წერტილოვანი სიმეტრიის ჯგუფების გამოყვანის მაგალითები

ზოგადად ასეთ წერტილოვან ჯგუფთა უსასრულო რაოდენობა არსებობს. მაგრამ კრისტალის პერიოდულობა, ტრანსლაციური სიმეტრია, კრისტალურ სტრუქტურასთან მიმართებაში ზღუდავს მათ რიცხვს და სამგანზომილებიან შემთხვევაში შესაძლებელია მხოლოდ სიმეტრიის 32 წერტილოვანი ჯგუფის არსებობა. კრისტალებისათვის ამ ჯგუფების დასადგენად საჭიროა პასუხი გაეცეს შემდეგ კითხვებს:

1. რომელი სიმეტრიის ღერძები არის თავსებადი კრისტალის ტრანსლაციურ პერიოდულობასთან.
2. ბრუნვის ღერძების რომელი კომბინაციებია დასაშვები მათი თანაკვეთისას.
3. როგორ კომბინაციებს ქმნის სხვადასხვა ტიპის ბრუნვის ღერძები ინვერსიის ოპერაციასთან.

3.1. ჯგუფები, რომლებიც მხოლოდ ერთ ბრუნვის ღერძს შეიცავს

როგორც აღვნიშნეთ, გარდაქმნათა ერთობლიობა, რომელიც რაიმე ობიექტს თავის თავს უთავსებს, ქმნის ჯგუფს და ამ ჯგუფს სიმეტრიის ჯგუფი ეწოდება. მაგალითად, თუ A_n წრფივი გარდაქმნის მატრიცა ასახავს რომელიმე ღერძის მიმართ გარკვეული კუთხით ბრუნვას (იხ. პარ. 2.4, დამატება 1), მაშინ $A_1^1, A_2^2, A_3^3, \dots, A_n^n = I$, (აქ ზედა ინდექსი ხარისხს მიუთითებს) წარმოადგენს სიმეტრიის ოპერაციებს (იხ. პარ. 2.5), რომლებიც შეესაბამება $1\alpha_1, 2\alpha_2, 3\alpha_3, \dots, n\alpha_n = 360^\circ$ ბრუნვებს რომელიმე ღერძის მიმართ, და რომელთაც ობიექტი თავის თავში გადაჰყავთ.

თუ გავითვალისწინებთ 2.4 პარაგრაფში მიღებულ შედეგს, რომ კრისტალის მესრის საბაზისო სისტემას შეესაბამება ბრუნვის α კუთხის მკვეთრად განსაზღვრული მნიშვნელობები ($360^\circ, 180^\circ, 120^\circ, 90^\circ, 60^\circ$), მაშინ ამ ოპერაციების სახით გვექნება ამდენივე წერტილოვანი სიმეტრიის ჯგუფები (იხ. დამატება 3).

კრისტალოგრაფიაში მიღებული ტრადიციის მიხედვით, როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, ისინი შემდეგი საერთაშორისო სიმბოლოებით აღინიშნება: 1, 2, 3, 4, 6 [3-8,11,12] და მათ მონოაქსიალური წერტილოვანი ჯგუფები ეწოდება.

3.2. ჯგუფები, რომლებიც ერთზე მეტ ბრუნვის ღერძს შეიცავს

(ბრუნვის ღერძთა დასაშვები ორიენტაციები მათი გადაკვეთისას)

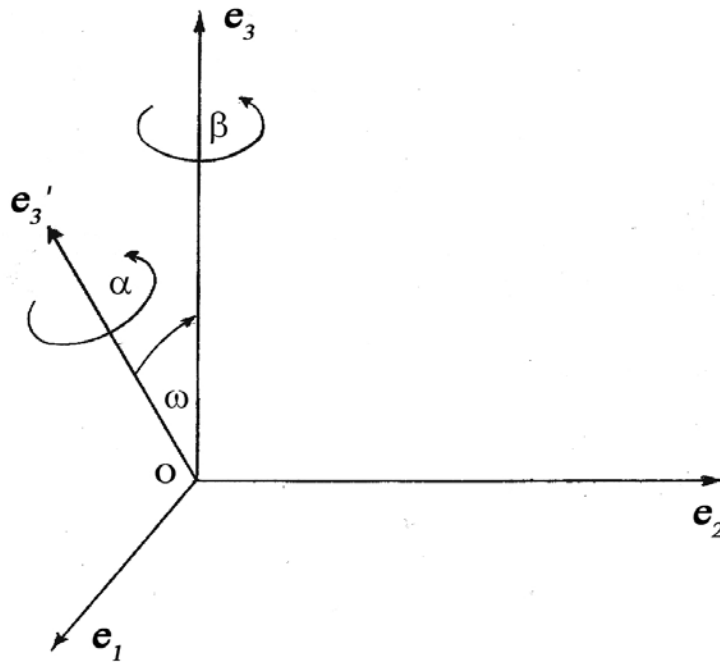
განვიხილოთ ორი სიმეტრიის ოპერაციის ერთობლივი მოქმედება - ორი სხვადასხვა კუთხით ბრუნვის ღერძის კომბინაცია: ერთი ოპერაცია, რომელიც შეესაბამება α კუთხით ბრუნვას პირველი ღერძის მიმართ, ხოლო მეორე - β კუთხით ბრუნვას მეორე ღერძის მიმართ. კუთხე თვით ამ ღერძებს შორის აღვნიშნოთ ω -თი. ცნობილია, რომ ზოგადად ორი ბრუნვა ურთიერთგადამკვეთი ღერძების მიმართ აუცილებლად წარმოქმნის მესამე ბრუნვას (ეილერის თეორემა [3-8]). შესაბამისად, α და β კუთხეებით ბრუნვის შესაბამისი მატრიცების ნამრავლიც ასევე ბრუნვის მატრიცაა [3-8, 18] (იხ. დამატება 3). ამ მატრიცის შესაბამისი ბრუნვის ღერძი, ცხადია, ზოგად შემთხვევაში ორიენტირებული იქნება განსხვავებულად α და β კუთხეებით ბრუნვის ღერძებისაგან.

ამოცანა მდგომარეობს შემდეგში: მივიღოთ ამ სიმეტრიის ოპერაციების ერთობლივი მოქმედების პროდუქტის შესაბამისი მატრიცა და დავადგინოთ ამ სიმეტრიის ღერძებს შორის კრისტალოგრაფიის თვალსაზრისით დასაშვები კუთხეები და მარეზულტირებული ღერძის ორიენტაცია.

ამისათვის, სიმარტივისა და თვალსაჩინოებისათვის, განვიხილოთ ორთონორმირებული საბაზისო სისტემა e_1, e_2, e_3 (ნახ. 9), იმის გათვალისწინებით, რომ ბრუნვის კუთხეების სიდიდეები და კუთხე ამ ორ ღერძს შორის არ არის დამოკიდებული კოორდინატთა სისტემის არჩევაზე, ანუ ისინი ინვარიანტულებია კოორდინატთა გარდაქმნის მიმართ. ამ სისტემაში სიმეტრიის ოპერაცია, რომელიც შეესაბამება საათის ისრის საწინააღმდეგოდ ბრუნვას α კუთხით e_3 ღერძის მიმართ, ზოგადად წარმოდგენილია შემდეგი მატრიცით [3-8, 18] (იხ. დამატება 1):

$$\mathbf{R}_3 = \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

დავუშვათ, რომ განსახილველ შემთხვევაში α კუთხით ბრუნვა ხდება არა e_3 ღერძის, არამედ e'_3 ღერძის მიმართ, რომელიც მდებარეობს e_1 და e_3 ღერძებზე გამავალ



ნახ. 9. e_3 და e_3' ბრუნვის ღერძების ურთიერთგანლაგება. ორთონორმირებული სისტემა

სიბრტყეში და ადგენს ω კუთხეს e_3 ღერძთან (ნახ. 9). e_3' ბრუნვის ღერძის მიმართ ბრუნვის ოპერაციის განსახორციელებლად ხელსაყრელია ვისარგებლოთ იგივე, სტანდარტული \mathbf{R}_3 მატრიცით. ამისათვის საჭიროა e_3' ღერძი მოვაბრუნოთ ω კუთხით, საათის ისრის მიმართულებით, e_3 ღერძთან შეთავსებამდე. ამის შემდეგ ჩავატაროთ α კუთხით e_3 ღერძის მიმართ ბრუნვა (\mathbf{R}_3) და ისევ დავაბრუნოთ e_3' ღერძი პირვანდელ მდგომარეობაში. შედეგად მივიღებთ ობიექტის ბრუნვას α კუთხით e_3' ბრუნვის ღერძის მიმართ. ეს მნემონიკური ოპერაციები, მათი მიმდევრობის გათვალისწინებით, მატრიცული სახით შემდეგნაირად ჩაიწერება:

$$\mathbf{R}'_3 = \mathbf{R}_2 \cdot \mathbf{R}_3 \cdot \mathbf{R}_2^{-1} \tag{2.14}$$

სადაც, \mathbf{R}_2 მატრიცა ასახავს e_2 ღერძის მიმართ ω კუთხით ბრუნვას საათის ისრის საწინააღმდეგო მიმართულებით (იხ. დამატება 2.1), ხოლო \mathbf{R}_2^{-1} მისი შებრუნებული

ოპერაცია და შედეგად ასახავს ω კუთხით ბრუნვას საათის ისრის მიმართულელებით e_2 ღერძის მიმართ:

$$\mathbf{R}_2 = \begin{pmatrix} \cos \omega & 0 & \sin \omega \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \omega & 0 & \cos \omega \end{pmatrix} \quad \mathbf{R}_2^{-1} = \begin{pmatrix} \cos \omega & 0 & -\sin \omega \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \omega & 0 & \cos \omega \end{pmatrix}$$

აქ უნდა გავითვალისწინოთ, რომ ამოცანის პირობით, მატრიცა \mathbf{R}'_3 ახორციელებს სიმეტრიის \mathbf{R}_3 ოპერაციას \mathbf{R}_2 გარდაქმნასთან კომბინაციაში. შესაბამისად, თუ გამოვიყენებთ მატრიცების გამრავლების წესს (იხ. დამატება 2), და ოპერაციათა მიმდევრობას (2.14), მარეზულტირებელი მატრიცის ელემენტებს ასეთი მნიშვნელობები ექნებათ:

$$\mathbf{R}'_3 = \begin{pmatrix} \cos^2 \omega \cos \alpha + \sin^2 \omega & -\cos \omega \sin \alpha & -\cos \omega \sin \omega \cos \alpha + \sin \omega \cos \omega \\ \cos \omega \sin \alpha & \cos \alpha & -\sin \omega \sin \alpha \\ -\sin \omega \cos \omega \cos \alpha + \cos \omega \sin \omega & \sin \omega \sin \alpha & \sin^2 \omega \cos \alpha + \cos^2 \omega \end{pmatrix}$$

შედეგად, მატრიცა \mathbf{R}'_3 ასახავს α კუთხით ბრუნვას e'_3 ღერძის მიმართ. პირობის მიხედვით, ამ ოპერაციებს უნდა დაემატოს β კუთხით ბრუნვა საათის ისრის საწინააღმდეგო მიმართულელებით e_3 ღერძის მიმართ, რომელიც, მსგავსად \mathbf{R}_3 -სა, შემდეგი მატრიცით გამოისახება იმავე კოორდინატთა სისტემაში:

$$\mathbf{R}''_3 = \begin{pmatrix} \cos \beta & -\sin \beta & 0 \\ \sin \beta & \cos \beta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ამ ორი ღერძის (e_3, e'_3) მიმართ ბრუნვის კომბინაცია ასევე ბრუნვას წარმოადგენს და აღიწერება \mathbf{R} მატრიცით, რომლის სახე, ოპერაციათა მიმდევრობისა და, ზოგადად, მატრიცული გამრავლების არაკომუტატიურობის გათვალისწინებით (იხ. დამატება 2), შემდეგია:

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}''_3 \mathbf{R}'_3 \quad (2.15)$$

ამ მატრიცის ელემენტებისა და შესაბამისი კვალის გამოთვლის შედეგად, მსგავსად პარ. 2.4-ში განხილული პროცედურისა (ყველა დასაშვები α -ს და β -ს ჩასმით), დავადგინოთ კრისტალური სტრუქტურისათვის დასაშვები ბრუნვის ღერძებს შორის ω კუთხის ასევე დასაშვები მნიშვნელობები და მარეზულტირებელი ბრუნვის (\mathbf{R}) ღერძის ორიენტაცია [5,8,18,19]. ეს მარეზულტირებელი ბრუნვა თავსებადი უნდა იყოს კრისტალის მესრის პერიოდულ სტრუქტურასთან, მისი კვალი კი, რომელიც ინვარიანტულია კოორდინატთა სისტემის გარდაქმნის მიმართ, მთელი რიცხვის ტოლი [3-8,18]. \mathbf{R} მატრიცის ელემენტები გამოთვლილი (2.15)-ის მიხედვით, გვამღევს კვალის შემდეგ მნიშვნელობას:

$$\text{tr}\mathbf{R} = \cos^2 \omega (\cos \alpha \cos \beta - \cos \alpha - \cos \beta + 1) - 2 \cos \omega \sin \alpha \sin \beta + \cos \alpha \cos \beta + \cos \alpha + \cos \beta$$

ისევე როგორც პარ. 2.4-ში აღვნიშნეთ, კვალის შესაძლო მნიშვნელობებია: $k = +3, +2, +1, 0, -1$, და ეს რიცხვები განსაზღვრავს \mathbf{e}_3 და \mathbf{e}'_3 ღერძებს შორის შესაძლო კუთხეებს (ω) და ასევე მარეზულტირებელი ბრუნვის ღერძის რიგს.

მართლაც, თუ კვალის გამოსახულებაში რიგრიგობით შევიტანთ α -ს და β -ს ყველა, ზოგადად კრისტალური მესრისათვის დასაშვები მნიშვნელობის (პარ. 2.4) კომბინაციებს, მივიღებთ შესაბამისი რაოდენობის მეორე ხარისხის განტოლებებს $\cos^2 \alpha$ -ის მიმართ, რომლებიც მოცემულია ტაბულა 3-ში. ტაბულის მე-4 სვეტში მოცემულია ω -ს მნიშვნელობები, რომლებიც შეესაბამება \mathbf{e}_3 და \mathbf{e}'_3 ღერძებს შორის შესაძლო კუთხეებს. რაც შეეხება მე-5 სვეტში მოცემულ მარეზულტირებელი ბრუნვის ღერძის რიგს, იგი იმავე წესით დგინდება, როგორც პარ. 2.4-ში, მხოლოდ კვალის იმ მნიშვნელობების (k) მიხედვით, რომლებიც მე-3 სვეტშია მოცემული. თვით k -ს მნიშვნელობები შერჩეულია ყველა დასაშვებიდან (იხ. ტაბულა 3) მე-2 სვეტში მოცემული განტოლებების გათვალისწინებით. კერძოდ $\cos \omega$ -ს მხოლოდ დასაშვები მნიშვნელობებისათვის. მარეზულტირებელი ღერძის ორიენტაცია დგინდება $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ ორთონორმირებული სისტემის მიმართ სტანდარტული წესით - $(\mathbf{R} - \mathbf{I}\lambda)\mathbf{r} = 0$ განტოლების ამოხსნის გზით, რომელშიც ჩასმული იქნება α -ს, β -სა და ω -ს კონკრეტული მნიშვნელობები და ნაპოვნი იქნება \mathbf{R} -ის საკუთრივი მნიშვნელობები და ვექტორები [ER1, 18] (იხილეთ პარ. 2.3). ტაბულა 3-ის მე-6 სვეტში მარეზულტირებელი ღერძის ორიენტაცია მოცემულია ორთონორმირებულ სისტემაში მიმართულების კოსინუსების სახით.

ტაბულა 3

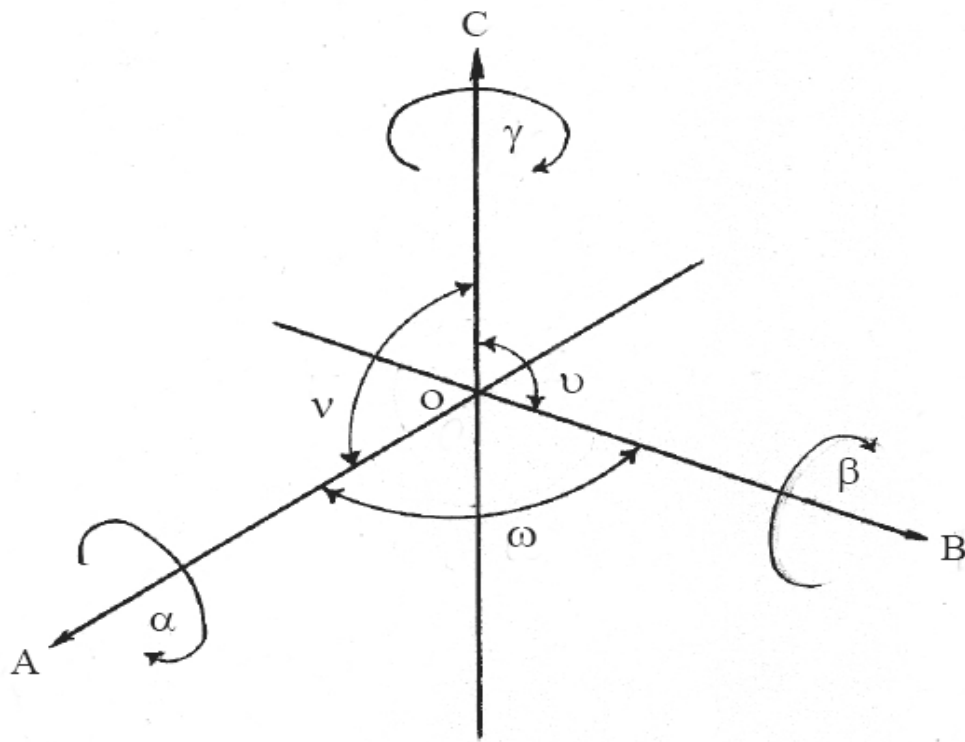
ღერძების რიგი	მარეზულტირებელი მატრიცის კვალი	კვალის დასაშვები მნიშვნელობები k	ω -ს შესაძლო მნიშვნელობები	მარეზულტირებელი ღერძის რიგი Π	მარეზულტირებელი ღერძის ორიენტაცია
1	2	3	4	5	6
2-2	$4\cos^2 \omega - 1 - k = 0$	+3 +2 +1 0 -1	$0^\circ, 180^\circ$ $30^\circ, 150^\circ, 210^\circ, 330^\circ$ $45^\circ, 135^\circ, 225^\circ, 315^\circ$ $60^\circ, 120^\circ, 240^\circ, 300^\circ$ $90^\circ, 270^\circ$	1 6 4 3 2	- 010 010 010 010
3-2	$3\cos^2 \omega - 1 - k = 0$	+2 +1 0 -1	$0^\circ, 180^\circ$ $35^\circ 16', 144^\circ 44', 324^\circ 44', 215^\circ 16'$ $54^\circ 44', 125^\circ 16', 305^\circ 16', 234^\circ 44'$ $90^\circ, 270^\circ$	6 4 3 2	001 $1/2 \quad -\sqrt{3}/2 \quad 0$
4-2	$2\cos^2 \omega - 1 - k = 0$	+1 0 -1	$0^\circ, 180^\circ$ $45^\circ, 135^\circ, 225^\circ, 315^\circ$ $90^\circ, 270^\circ$	4 3 2	001 $1/\sqrt{3} \quad -1/\sqrt{3} \quad 1/\sqrt{3}$ $1/\sqrt{2} \quad -1/\sqrt{2} \quad 0$
6-2	$\cos^2 \omega - 1 - k = 0$	0 -1	$0^\circ, 180^\circ$ $90^\circ, 270^\circ$	3 2	001 $\sqrt{3}/2 \quad -1/2 \quad 0$
3-3	$9\cos^2 \omega - 6\cos \omega - 3 - 4k = 0$	+3 0 -1	180° $0^\circ, 109^\circ 28', 250^\circ 32'$ $70^\circ 32', 289^\circ 28'$	1 3 2	- 001
4-3	$3\cos^2 \omega - 2\sqrt{3}\cos \omega - 1 - 2k = 0$	+1 -1	$125^\circ 16', 234^\circ 44'$ $54^\circ 44', 305^\circ 16'$	4 2	
6-3	$3\cos^2 \omega - 6\cos \omega - 1 - 4k = 0$	+2 -1	180° 0°	6 2	001 001
4-4	$\cos^2 \omega - 2\cos \omega - k = 0$	+3 0 -1	180° $90^\circ, 270^\circ$ 0	1 3 2	- $1/\sqrt{3} \quad -1/\sqrt{3} \quad 1/\sqrt{3}$ 001
6-4	$\cos^2 \omega - 2\sqrt{3}\cos \omega + 1 - 2k = 0$		არ აქვს დასაშვები ამოხსნები		
6-6	$\cos^2 \omega - 6\cos \omega + 5 - 4k = 0$	+3 0	180° 0°	1 3	- 001

შენიშვნა: ტაბულა 3-ში არ არის ნაჩვენები ის ამოხსნები რომელთათვისაც $\cos \omega > 1$; I სვეტში მოცემული ღერძებიდან პირველი ემთხვევა e_3 , ხოლო მეორე - e_3' -ს;

ტაბულა 3-ში მოყვანილი ღერძების კომბინაციები შეესაბამება კრისტალოგრაფიული სიმეტრიის 32 წერტილოვანი ჯგუფიდან 222, 32, 422, 622, 23, 432 ჯგუფებს [3-8, 11,12,18]. ანუ, ამ ჯგუფებში დასაშვებია და არსებობენ სიმეტრიის ღერძების ზემოთმოყვანილი კომბინაციები.

ახლა განვიხილოთ ურთიერთგადამკვეთი სიმეტრიის ღერძების დასაშვები კომბინაციები და ორიენტაციები, ტრადიციული მიდგომით - მეტრიკული ტენზორის გამოყენების გარეშე.

როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, ორი ბრუნვა ურთიერთგადამკვეთი ღერძების მიმართ აუცილებლად წარმოქმნის მათი კომბინაციის ექვივალენტურ მესამე ბრუნვას (ეილერის თეორემა) [4,5,8, 37]. ვთქვათ მოცემულია სამი ბრუნვის ღერძი OA, OB და OC, რომლებიც იკვეთებიან O წერტილში და შესაბამისად ასრულებენ α , β და γ კუთხეებით ბრუნვებს. მათ შორის კუთხეებია ν - B და C ღერძებს შორის, ν - A და C ღერძებს შორის და ω - A და B ღერძებს შორის (ნახ. 10).



ნახ. 10. სამი ბრუნვის ღერძის ურთიერთკვეთა

ეილერის თეორემაზე დაყრდნობით ფ. ზაიტცმა [37] მიიღო ფორმულა, რომელიც ერთმანეთთან აკავშირებს ღერძების ბრუნვის კუთხეებსა და თვით ღერძებს შორის კუთხეებს. მაგალითად ω -სათვის მას ასეთი სახე აქვს:

$$\cos \omega = \frac{\left(\cos \frac{\gamma}{2} + \cos \frac{\alpha}{2} \cos \frac{\beta}{2} \right)}{\left(\sin \frac{\alpha}{2} \sin \frac{\beta}{2} \right)} \quad (2.16)$$

(2.16)-ში გავითვალისწინოთ კრისტალოგრაფიული შეზღუდვები α , β , γ ბრუნვის კუთხეების დასაშვები მნიშვნელობებისათვის მივანიჭოთ γ -ს 2, 3, 4, 6 ბრუნვის ღერძების (ოპერატორების) შესაბამისი კუთხეების მნიშვნელობები (180°, 120°, 90°, 60°) და შემდეგ α და β -ს ასევე ყველა დასაშვები მნიშვნელობებისათვის ვიპოვოთ ω -ს მნიშვნელობები. ანუ ის კუთხეები, რომლებიც შეიძლება არსებობდეს კრისტალში სიმეტრიის ორ (A და B) ღერძს შორის ისე, რომ მათი მარეზულტირებელი ღერძის (C) შესაბამისი ბრუნვის კუთხე (γ) ასევე იყოს დასაშვები. (2.16) განტოლების ამოხსნები ცხრილის სახით მოცემულია ტაბულა 4-ში.

ტაბულა 4

ღერძების კომბინაციები	α	ω	β	ν	γ	ν
222	180°	90°	180°	90°	180°	90°
322	180°	60°	180°	90°	120°	90°
422	180°	45°	180°	90°	90°	90°
622	180°	30°	180°	90°	60°	90°
233	180°	54°44'	120°	70°32'	120°	54°44'
432	180°	35°16'	120°	54°44'	90°	45°

ცხრილიდან ჩანს, რომ ბრუნვის ღერძების დასაშვები კომბინაციებია შესაბამისად: 222, 322, 422, 622, 233 და 432. ამ ღერძების (სიმეტრიის ელემენტების) შესაბამისი ოპერატორები (მატრიცების სახით) ქმნის ჯგუფებს. ეს ექვსი პოლიაქსიალური

წერტილოვანი ჯგუფი, ზემოთ გამოყვანილ ხუთ მონოქსიალურ წერტილოვან ჯგუფთან ერთად ქმნის ბრუნვის 11 (როტაციულ) კრისტალოგრაფიულ წერტილოვან ჯგუფს. ქვემოთ მოცემულია ამ ჯგუფების საერთაშორისო აღნიშვნები (ფრჩხილებში მოცემულია მოკლე აღნიშვნები) [36]:

$$1, 2, 3, 4, 6, 222, 322(32), 422, 622, 233(23), 432.$$

3.2.1. ინვერსიის ოპერაციის გავლენა

ახლა განვიხილოთ ყველა ის წერტილოვანი ჯგუფი, რომლებიც მიიღება ამ 11 როტაციული ჯგუფისა და ინვერსიის ოპერაციის (სიმეტრიის ცენტრი) კომბინაციის შედეგად, რაც კიდევ 11 ახალ წერტილოვან ჯგუფს წარმოქმნის. ეს ახალი 11 ჯგუფი ფორმირდება თითოეული ზემოთ მოყვანილი 11 როტაციული ჯგუფისა და ინვერსიის ერთობლივი მოქმედებით. ანუ ამ 11 ჯგუფისა და $\bar{1}$ ჯგუფის (რომლის ელემენტებია I, \bar{I}), პირდაპირი ნამრავლების სახით (იხ. დამატება 3). ამ ოპერატორების (იგივური გარდაქმნა და ინვერსია) შესაბამისი მატრიცები მოცემულია დამატება 3-ში.

მაგალითისათვის ავიღოთ ბრუნვის ჯგუფი 222, რომელიც მეოთხე რიგის ჯგუფია და შეიცავს შემდეგ ელემენტებს $(I, 2_x, 2_y, 2_z)$, რომელთა ამსახველი გარდაქმნის მატრიცები მოცემულია ქვემოთ და დამატება 3-ში (A3-5, დამატება 3). ამ ჯგუფის პირდაპირი ნამრავლი $\bar{1}$ ჯგუფის ელემენტებზე გვაძლევს ახალი ჯგუფის შემდეგ ელემენტებს:

$$(I, \bar{I}) \otimes (I, 2_x, 2_y, 2_z) = I, 2_x, 2_y, 2_z, \bar{I}, m_x, m_y, m_z$$

რომელთაც, როგორც სიმეტრიის ოპერატორებს, შემდეგი მატრიცები შეესაბამება:

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad 2_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad 2_y = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad 2_z = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\bar{I} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad m_x = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad m_y = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad m_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

ეს არის მე-8 რიგის ჯგუფი, რომლის საერთაშორისო კრისტალოგრაფიული სიმბოლოა mmm [3-8,11]. მსგავსი პროცედურების გამოცდებით ($\bar{1}$ ჯგუფის პირდაპირი გამრავლებით ზემოთ მოყვანილ 11 ბრუნვის ჯგუფზე) მივიღებთ შემდეგ ახალ 11 ჯგუფს:

$1 \otimes \bar{1} = \bar{1}$	$222 \otimes \bar{1} = mmm$	$332 \otimes \bar{1} = m\bar{3}$
$2 \otimes \bar{1} = 2/m$	$322 \otimes \bar{1} = \bar{3}m$	
$3 \otimes \bar{1} = \bar{3}$	$422 \otimes \bar{1} = 4/mmm$	
$4 \otimes \bar{1} = 4/m$	$622 \otimes \bar{1} = 6/mmm$	
$6 \otimes \bar{1} = 6/m$	$432 \otimes \bar{1} = m\bar{3}m$	

შევნიშნოთ, რომ ლუწი რიგის ღერძებისა და ინვერსიის კომბინაცია წარმოქმნის სიმეტრიის სიბრტყეს ამ ლუწი რიგის ღერძის მართობულად (იხ. დამატება 3).

ასეთნაირად მიიღება 22 წერტილოვანი ჯგუფი, რომელთა გენერაცია მოხდა კრისტალებისათვის დასაშვები ინდივიდუალური სიმეტრიის ღერძებით და მათი ყველა შესაძლო კომბინაციით ერთმანეთთან და ინვერსიის ოპერაციასთან [4,5,11].

3.2.2. სიმეტრიის ღერძისა და სიმეტრიის სიბრტყის პარალელობა

დარჩენილი 10 ჯგუფისათვის, კრისტალურ მესერში დასაშვები სიმეტრიის ოპერაციებიდან, განსახილველი დაგვრჩა სიმეტრიის სიბრტყის (სარკული არეკვლის სიბრტყე, m) მოქმედება სხვა ელემენტებთან. კერძოდ ახალი სიმეტრიის წერტილოვანი ჯგუფების გენერირებისათვის 1, 2, 3, 4, 6 რიგის ღერძებთან m -ის კომბინაცია, ისე, რომ სიმეტრიის სიბრტყე ღერძის პარალელური იყოს. ანუ, ჯგუფური ტერმინოლოგიით, უნდა ვიპოვოთ ამ ღერძების შესაბამისი ჯგუფების პირდაპირი ნამრავლები სიმეტრიის m ჯგუფთან, რომლის ელემენტებია (I, m) . ცხადია უმარტივეს შემთხვევაში, პირველი რიგის სიმეტრიის ღერძთან მისი პარალელური სიბრტყის კომბინაცია გვაძლევს ისევ სიმეტრიის სიბრტყეს (იგივე გარდაქმნა):

$$1 \otimes m = m$$

რაც შეეხება მეორე რიგის ღერძთან კომბინაციას, ზემოთმოყვანილი აღნიშვნებით (იხ. ასევე დამატება 3), მას შემდეგი სახე ექნება:

$$2 \otimes m = (1, 2) \otimes (1, m)$$

ანუ, თუ მეორე რიგის ღერძი ემთხვევა, მაგალითად, z ღერძს და მისი პარალელური სიმეტრიის სიბრტყე x ღერძის მართობულია, ე.ი. სისტემის ორთოგონალობის გამო z-ის და y-ის პარალელურია, მაშინ პირდაპირი გამრავლებით ახალი ჯგუფის ელემენტებისათვის გვექნება:

$$2 \otimes m = (1 \circ 1), (1 \circ m_x), (2_z \circ 1), (2_z \circ m_x) = 1, m_x, 2_z, m_y$$

ამ ოპერაციების შესაბამისი მატრიცების გადამრავლებით (იხ. დამატება 3), ახალი ჯგუფის ელემენტები (სიმეტრიის ოპრეატორები) მატრიცული წარმოდგენით შემდეგ სახეს მიიღებს:

$$\begin{matrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ 1 & m_x & 2_z & m_y \end{matrix}$$

(იხილეთ ასევე დამატება 3-ში ნახ. A3-2 და შესაბამისი მატრიცები). საერთაშორისო აღნიშვნებით ღერძისა და სიბრტყის პარალელურობას აღნიშნავენ მათი სიმბოლოების ერთმანეთის მიყოლებით ჩაწერით. ჩვენს შემთხვევაში მიღებული წერტილოვანი ჯგუფისათვის გვექნება mm2 (ან 2mm).

ამგვარად, კრისტალების სიმეტრიისათვის დასაშვები ხუთი ბრუნვის ღერძის შესაბამისი 5 ახალი ჯგუფი მიიღება ანალოგიური პროცედურების საფუძველზე და მათი სიმბოლოებია: m, 2mm, 3m, 4mm, 6mm.

ბოლო ხუთი ჯგუფის გენერირებისათვის განვიხილოთ შემთხვევები, როდესაც სიმეტრიის სიბრტყე სიმეტრიის ღერძის მართობულად მდებარეობს. ცხადია, ლუწი რიგის

ღერძებისათვის, რომელთა ინვერსიასთან კომბინაცია გვაძლევდა ღერძის მართობულ სიბრტყეს (იხილეთ ზემოთ), ჯგუფური თვისებების გათვალისწინებით, ასევე ადგილი ექნება ღერძისა და სიბრტყის ურთიერთქმედებით, პირიქით, ინვერსიის გაჩენას, რაც ზემოთ უკვე განვიხილეთ. შესაბამისად, ლუწი ღერძებისათვის, მათი და მათი მართობული სიმეტრიის სიბრტყეების კომბინაციებით ახალი ჯგუფები არ მიიღება.

რაც შეეხება კენტი, მესამე რიგის ღერძს, \mathcal{Z} , მისი კომბინაცია მისადმი მართობულ სიბრტყესთან გვაძლევს მეექვსე რიგის ინვერსიული ღერძის \bar{n} ეკვივალენტურ შედეგს, რაც ახალ ჯგუფს ქმნის.

მართლაც, (2.13)-ის მიხედვით მესამე რიგის ბრუნვის ღერძის შესაბამისი ოპერატორისა და მის მართობულ სიბრტყეში არეკვლის ოპერატორის ერთობლივი მოქმედება, მატრიცული წარმოდგენით, შემდეგნაირად გამოისახება:

$$3_z \circ m_z = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

მიღებული მატრიცა შეესაბამება \bar{n} ღერძს⁶. ამ ჯგუფის სიმბოლოა \bar{n} და მისი ელემენტებია (\mathcal{Z}, m_h) , სადაც ინდექსი h მიუთითებს სიბრტყის ჰორიზონტალურ ორიენტაციას (განხილულ შემთხვევაში z -ის მართობულს). ამ წერტილოვანი ჯგუფის სიმეტრიის სრული ფორმულაა L^3P .

იგივე მსჯელობა 222, 32, 422 და 622 ბრუნვითი ჯგუფების შემთხვევაში, როდესაც მთავარი ღერძის რიგი ლუწია, და მის მართობულ სიმეტრიის სიბრტყესთან ასევე ინვერსიის ცენტრს წარმოშობს, უკვე განხილულ ჯგუფებს გვაძლევს. ახალი ჯგუფი მიიღება მხოლოდ ერთ ჯგუფთან, კერძოდ, 32-თან (სიმეტრიის სრული ფორმულა L^33L^2); აქაც მესამე რიგის ღერძისა და მისი მართობული სიბრტყის კომბინაციით [4,11].

⁶ აქ გასამიჯნია ბრუნვა საათის ისრის მიმართულებით და საწინააღმდეგოდ. კერძოდ, მესამე რიგის სარკული ღერძის მიმართ მობრუნებას (120°) საათის ისრის მოძრაობის მიმართულებით წერტილი გადააქვს იმ პოზიციაში, რომელშიც გადააქვს \bar{n} -ს (-60°), საათის ისრის საწინააღმდეგო მიმართულებით ბრუნვისას. თუმცა შევნიშნოთ, რომ როდესაც პირველი ღერძის, ასევე მეორე ღერძის შესაბამისი ყველა ბრუნვა შესრულდება ექვსივე პოზიცია დაკავებული იქნება. ე.ი. ამ ორი ღერძის მოქმედება იდენტურ შედეგს იძლევა, მიუხედავად ბრუნვის მიმართულებისა.

როგორც ვნახეთ, ღერძი 3 მის მართობულ სიბრტყესთან ურთიერთქმედებით წარმოქმნის მესამე რიგის სარკულ ანუ მეექვსე რიგის ინვერსიულ ღერძს ($\bar{6}$). ეს ჯგუფი აღნიშნება სიმბოლოთი $\bar{6} m2$.

მისი წარმოდგენა შეიძლება, ანალოგიურად ზემოთ განხილული შემთხვევებისა, ორი ჯგუფის პირდაპირი ნამრავლის სახით:

$$m \otimes 32 = (1, m_z) \otimes (1, 3, 3^2, 2, 2', 2'') = (1, 3, 3^2, 2, 2', 2'', m_z, 3m_v, \bar{6})$$

სადაც 3^2 აღნიშნავს მესამე რიგის ღერძის ორჯერ მიყოლებით მოქმედებას ($2 \times 120^\circ$), ე.ი. 240° -ით მობრუნებას, ხოლო $2, 2', 2''$ სიმბოლოები აღნიშნავს 3 -ის მართობ სიბრტყეში მდებარე სამ მეორე რიგის ღერძს, რომლებიც ერთმანეთთან 120° -ს ადგენს.

m_v აღნიშნავს ვერტიკალურ (ამ შემთხვევაში 3 -ის პარალელურ) სიბრტყეს. ცხადია, მიღებული ჯგუფი 12 ელემენტს შეიცავს. მისი სიმეტრიის სრული ფორმულაა $L^3 3L^2 4P$ ან $L_{\bar{6}} 3L^2 3P$.

ამით ამოიწურა სიბრტყისა და ღერძების ურთიერთპარალელური და ურთიერთმართობული კომბინაციები. დარჩა სიბრტყის ისეთ პოზიციაში განლაგების შესაძლებლობა, როდესაც იგი 90° და 0° -საგან განსხვავებულ კუთხეს ადგენს ბრუნვის ღერძთან (ე.წ. „დიაგონალური“ სიბრტყეები). მაგალითად, ვერტიკალური სიმეტრიის სიბრტყე გავატაროთ ჰორიზონტალურ სიბრტყეში მდებარე მეორე რიგის ღერძებს შუა, რომლებიც თავისთავად რომელიმე n რიგის მთავარი, ვერტიკალური სიმეტრიის ღერძის მართობულია (მაგ. 32 და 222 ჯგუფებში; იხ დამატება A3-3.9).

შედეგად, ვერტიკალური ღერძის მოქმედებით გაჩნდება შესაბამისი რაოდენობის ვერტიკალური სიბრტყეები [4,5,11]. მაგალითად, თუ მთავარი (ვერტიკალური) ღერძი მესამე რიგისაა და ჰორიზონტალურ სიბრტყეში სამი მეორე რიგის ღერძია განლაგებული (ჯგუფი 32), ღერძებს შორის სამი ვერტიკალური სიბრტყე გვექნება (ე.წ. დიაგონალური სიბრტყეები). ცხადია, არსებული მეორე რიგის ღერძები (2) მართობული აღმოჩნდება ვერტიკალური სიმეტრიის სიბრტყეების (ე.წ. „დიაგონალური“ სიბრტყეების) მიმართ [4]. ეს კომბინაცია კი (2 -სა და მის მართობი m -ის ურთიერთქმედება), როგორც ზემოთ განვიხილეთ, წარმოქმნის ინვერსიის ცენტრს და ამის შედეგად მთავარი ღერძი ხდება

ინვერსიული. ასეთი კომბინაცია მესამე რიგის ღერძის შემთხვევაში გვაძლევს ახალ ჯგუფს, რომლის სიმბოლოა $\bar{3}m$.

ასეთივე დიაგონალური სიბრტყე 222 ჯგუფთან კომბინაციაში ქმნის ასევე ახალ ჯგუფს. კერძოდ, ამ ჯგუფში გვექნება ორი დიაგონალური სიბრტყე და მათ გადაკვეთაზე მდებარე მეორე რიგის ვერტიკალური მთავარი ღერძი. ეს კომბინაცია ქმნის მეოთხე რიგის ინვერსიულ (ან სარკულ) ღერძს. ამის დემონსტრირება შეიძლება, თუ განვიხილავთ ჰორიზონტალურ სიბრტყეში მდებარე მეორე რიგის ღერძისა (x -ის პარალელური) და მასთან 45° -ში გავლებულ ვერტიკალური სიბრტყის (ე.წ. „დიაგონალური“ სიბრტყე) კომბინაციას, როდესაც სიბრტყე გადის x და y ღერძებს შორის. ანუ, ვიხილავთ მეორე რიგის ღერძის ოპერატორისა (2_x) და ამ ღერძთან სიმეტრიის სიბრტყის m_{xy} (დიაგონალური სიბრტყე; იხ დამატება 3.5.1) ურთიერთქმედებას, როცა მათ შორის კუთხეა 45° . შედეგად მივიღებთ შემდეგ მატრიცულ გამოსახულებას:

$$2_x \circ m_{xy} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

მიღებული მატრიცა შეესაბამება მეოთხე რიგის ინვერსიული (ან სარკული) ღერძის მოქმედებას (იხ. ტაბულა 1), რომელიც განხილულ კოორდინატთა სისტემაში z ღერძის გასწვრივ არის ორიენტირებული [4,5,11]. ამ ჯგუფის სიმბოლოა $\bar{4}2m$.

ანალოგიური პროცედურებით - დიაგონალური სიბრტყეების გატარებით 23 ჯგუფში (სრული ფორმულა $3L^24L^3$), როგორც მესამე რიგის ღერძებს შორის ასევე მეორე რიგის ღერძებს შორის, მიიღება კიდევ ერთი ახალი ჯგუფი $\bar{4}3m$.

ამით ღერძებისა და სიბრტყეების კომბინაციების ყველა შესაძლო ვარიანტი იყო განხილული და რჩება მხოლოდ ერთი, მეოთხე რიგის ინვერსიული ღერძის დამოუკიდებელი მოქმედება (სხვა ელემენტებთან კომბინაციის გარეშე), რომელიც ცალკე ჯგუფს ქმნის. მისი სიმბოლოა $\bar{4}$, სიმეტრიის სრული ფორმულა L_4 . ამგვარად, ყველა ზემოთ განხილული პროცედურის შედეგად ყალიბდება კრისტალოგრაფიული სიმეტრიის 32 წერტილოვანი ჯგუფი.

4. კრისტალური მესრის ტრანსფორმაცია

4.1. სტრუქტურული ფაზური გარდაქმნის მაგალითი

კრისტალურ მასალებში, თერმული მექანიკური და რადიაციული ზემოქმედების შედეგად ადგილი აქვს ფაზურ გარდაქმნებს, რასაც თან სდევს კრისტალის სტრუქტურის ცვლილება. ასეთი სტრუქტურულ-ფაზური გარდაქმნებისას წარმოქმნილ ატომთა ახალი განლაგების პირვანდელთან კავშირის აღსაწერად მოხერხებულია კოორდინატთა გარდაქმნის მატრიცების გამოყენება [12,24,35,ER5]. სტრუქტურულ-ფაზური გარდაქმნების შედეგად შეიძლება მოხდეს ატომთა მხოლოდ მოწესრიგება ან ახალი ფაზის შესაბამისი მესრის ფორმირება.

ამოცანა მდგომარეობს იმაში, რომ დავამყაროთ კავშირი ძველი და ახალი მესრების ნებისმიერ ვექტორებსა და სიბრტყეებს შორის. ამისათვის ხელსაყრელია ავსახოთ კავშირი ძველი და ახალი ფაზების მესრების საბაზისო ვექტორებს ($\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ და $\mathbf{a}', \mathbf{b}', \mathbf{c}'$) შორის მატრიცული სახით და შემდეგ კონკრეტული გარდაქმნისათვის გამოვიყენოთ ამ მატრიცის ტრანსპონირებული და შებრუნებული მატრიცები სტანდარტული სქემის მიხედვით [4,12] (იხ. ცხრილი დამატება 1-ში).

ტრადიციულად, კრისტალურ სხეულებში ორი სხვადასხვა ფაზის მესრს შორის ორიენტაციული თანაფარდობა მოიცემა პარალელური მიმართულებებისა

$$\mathbf{u} [u \ v \ w] \parallel \mathbf{u}' [u' \ v' \ w']$$

და სიბრტყეების სახით

$$\mathbf{h} (h \ k \ l) \parallel \mathbf{h}' (h' \ k' \ l') .$$

უკანასკნელი კი ექსპერიმენტულად დგინდება [34,35]. ინდექსი პრიმა (') შეესაბამება ახალი ფაზის ვექტორებსა და შესაბამის მატრიცებს. აქ, $u \ v \ w$ მიმართულების ინდექსებია, ხოლო $h \ k \ l$ - სიბრტყის მილერის ინდექსები.

სამგანზომილებიან სივრცეში ორი კოორდინატთა სისტემის საბაზისო ვექტორებს შორის მატრიცული ტოლობის შესადგენად საჭიროა ასევე პირდაპირი მესრის პარალელურ ვექტორთა სამი წყვილის დადგენა [35, ER5].

ამ ამოცანის მარტივად გადასაწყვეტად ჯერ ვიპოვოთ $(h \ k \ l)$ და $(h' \ k' \ l')$ სიბრტყეების ნორმალების კოორდინატები, ანუ, კრისტალოგრაფიული ტერმინოლოგიით, ვიპოვოთ სიბრტყის ნორმალის მიმართულების ინდექსები, რომლებიც 1.22-ის და A4-6 -ის თანახმად პირდაპირი მესრის ვექტორებია. ისინი პარალელურ ვექტორთა მეორე წყვილს u_2 , u'_2 შექმნის (თუ პირველ, მოცემულ წყვილს u_1 , u'_1 -ით აღვნიშნავთ). შემდეგ ამ ორი წყვილიდან ვპოულობთ მესამე წყვილს, შესაბამისი ვექტორების ვექტორული ნამრავლების სახით.

როგორც აღვნიშნეთ (დამატება 4) სიბრტყის ნორმალის პოვნა ხორციელდება A4-6 ფორმულით, რომელსაც განხილულ შემთხვევაში შემდეგი სახე ექნება:

$$u_2 = G^{-1}h \quad \text{და} \quad u'_2 = (G')^{-1}h'$$

სადაც G და G' , შესაბამისად, ძველი და ახალი ფაზების კრისტალური მესრების მეტრიკული ტენზორებია და გამოითვლება თითოეული მესრის კრისტალოგრაფიული პარამეტრების საშუალებით (იხ. დამატება 4). h და h' სვეტ-მატრიცებია, შესაბამისად $h \ k \ l$ და $h' \ k' \ l'$ ვექტორების კოვარიანტული კოორდინატებისაგან (მილერის ინდექსები) შედგენილი.

ძველი და ახალი მესრების პარალელურ ვექტორთა მესამე წყვილის სახით მოხერხებულია პირველი ორის შესაბამისი მართობი ვექტორების არჩევა, რომელთა კოორდინატებს ძველი და ახალი მესრების შესაბამისი ვექტორების u_1 , u_2 და u'_1 , u'_2 ვექტორული ნამრავლებით ვიპოვოთ (იხ. დამატება 4):

$$u_3 = G^{-1}(u_1 \times u_2)$$

$$u'_3 = (G')^{-1}(u'_1 \times u'_2)$$

აქ, ფრჩხილებში მოცემული ვექტორული ნამრავლები იგულისხმება განხორციელებული სტანდარტული სქემით [3-8], რომელშიც ნამრავლის კოორდინატები გამოსახულია შებრუნებულ კოორდინატთა სისტემაში. მეტრიკული ტენზორის საშუალებით კი

პროდუქტს ისევ პირდაპირ სისტემაში წარმოვადგენთ (იხ. დამატება 4). შედეგად მივიღებთ ძველი და ახალი მესრების ურთიერთპარალელური ვექტორების სამ წყვილს:

$$\mathbf{u}_1 \parallel \mathbf{u}'_1, \quad \mathbf{u}_2 \parallel \mathbf{u}'_2, \quad \mathbf{u}_3 \parallel \mathbf{u}'_3$$

ისე, რომ, როგორც $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3$, ასევე $\mathbf{u}'_1, \mathbf{u}'_2, \mathbf{u}'_3$, მარჯვენა სისტემებს ემნის.

ამ ვექტორების წყვილ-წყვილად პარალელობა შემდეგი სახით წარმოვადგინოთ:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_1 &= m\mathbf{u}'_1 & \mathbf{u}_1\mathbf{a} + v_1\mathbf{b} + w_1\mathbf{c} &= m(\mathbf{u}'_1\mathbf{a}' + v'_1\mathbf{b}' + w'_1\mathbf{c}') \\ \mathbf{u}_2 &= n\mathbf{u}'_2 & \text{ან } \mathbf{u}_2\mathbf{a} + v_2\mathbf{b} + w_2\mathbf{c} &= n(\mathbf{u}'_2\mathbf{a}' + v'_2\mathbf{b}' + w'_2\mathbf{c}') \\ \mathbf{u}_3 &= p\mathbf{u}'_3 & \mathbf{u}_3\mathbf{a} + v_3\mathbf{b} + w_3\mathbf{c} &= p(\mathbf{u}'_3\mathbf{a}' + v'_3\mathbf{b}' + w'_3\mathbf{c}') \end{aligned} \quad (4.1)$$

სადაც m, n, p მუდმივი მამრავლები წარმოადგენს ახალი და ძველი სისტემების შესაბამის პარალელური ვექტორების სიგრძეების ფარდობებს:

$$m = \frac{|\mathbf{u}_1|}{|\mathbf{u}'_1|}, \quad n = \frac{|\mathbf{u}_2|}{|\mathbf{u}'_2|}, \quad p = \frac{|\mathbf{u}_3|}{|\mathbf{u}'_3|}$$

თითოეული ამ ვექტორის მოდულის გამოთვლისათვის გამოვიყენოთ ფორმულა (2.2) და ამის შემდეგ შეგვიძლია (4.1) წრფივი კომბინაციები წარმოვადგინოთ შემდეგი მატრიცული სახით:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{u}_1 & v_1 & w_1 \\ \mathbf{u}_2 & v_2 & w_2 \\ \mathbf{u}_3 & v_3 & w_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \\ \mathbf{c} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m\mathbf{u}'_1 & m\mathbf{v}'_1 & m\mathbf{w}'_1 \\ n\mathbf{u}'_2 & n\mathbf{v}'_2 & n\mathbf{w}'_2 \\ p\mathbf{u}'_3 & p\mathbf{v}'_3 & p\mathbf{w}'_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}' \\ \mathbf{b}' \\ \mathbf{c}' \end{pmatrix}$$

მოკლე ჩაწერით,

$$U\mathbf{a} = U'\mathbf{a}' \quad (4.2)$$

სადაც \mathbf{U} წარმოადგენს $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3$ ვექტორების კოორდინატებისაგან შედგენილ მატრიცას, ხოლო \mathbf{U}' - შესაბამისად, $\mathbf{u}'_1, \mathbf{u}'_2, \mathbf{u}'_3$ ვექტორების კოორდინატებისაგან (m, n, p მუდმივი თანამამრავლებით). \mathbf{a} სვეტ-მატრიცაა შედგენილი $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ ვექტორებისაგან, ხოლო $\mathbf{a}' - \mathbf{a}', \mathbf{b}', \mathbf{c}'$ ვექტორებისაგან. ახლა კი ძველი და ახალი კოორდინატთა სისტემების საბაზისო ვექტორების დამაკავშირებელი მატრიცა (ე.ი. ბაზისის გარდაქმნის მატრიცა) შეგვიძლია მივიღოთ (4.2) ტოლობიდან. მართლაც:

$$\mathbf{a} = \mathbf{U}^{-1}\mathbf{U}'\mathbf{a}' \quad \text{ან} \quad (\mathbf{U}')^{-1}\mathbf{U}\mathbf{a} = \mathbf{a}' \quad (4.3)$$

მოკლედ (4.3) ასე ჩაიწერება: $\mathbf{T}\mathbf{a} = \mathbf{a}'$

სადაც, $\mathbf{T} \equiv (\mathbf{U}')^{-1}\mathbf{U}$ და შესაბამისად, $\mathbf{T}^{-1} \equiv \mathbf{U}^{-1}\mathbf{U}'$

\mathbf{T} ბაზისის გარდაქმნის მატრიცის საშუალებით კი შესაძლებელია დამყარდეს კავშირები მიმართულებებსა და სიბრტყეებს შორის როგორც პირდაპირ, ასევე შებრუნებულ კოორდინატთა სისტემაში, რაც წარმოადგენდა ამ პარაგრაფის მიზანს (იხ. ცხრილი დამატება 1-ში).

მაგალითად, თუ ცნობილია “ძველი” ფაზის კრისტალური მესრის რომელიმე მიმართულების ინდექსები $[uvw]_a$, მაშინ “ახალ” ფაზაში მისი პარალელური მიმართულების ინდექსები $[uvw]_a$ გამოითვლება შემდეგი ტოლობით (იხ. ცხრილი დამატება 1-ში):

$$\begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix}_a = (\mathbf{T}^{-1})^T \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix}_d$$

ანალოგიურად გამოითვლება პარალელური სიბრტყეების მიღერის ინდექსები \mathbf{T} მატრიცის საშუალებით (იხ. ცხრილი დამატება 1-ში). მიღებული შედეგები გამოიყენება ორფაზა სისტემების შესაბამისი დიფრაქციული სურათების, სტერეოგრაფიული პროექციების და, ზოგადად, კრისტალოგრაფიული ანალიზის დროს [ER5].

4.2. ორეულოვანი თანაფარდობის მაგალითი

კრისტალებში, ზოგადად, ადგილი აქვს ორეულების წარმოქმნას [38, 39]. ეს არის კრისტალის ორი ან მეტი, იდენტური სტრუქტურის მქონე ნაწილის ერთობლიობა (განსხვავებით წინა შემთხვევისა, როცა გარკვეულ ორიენტაციულ თანაფარდობაში მყოფ კრისტალის ნაწილებს სხვადასხვა სტრუქტურები ჰქონდა) ისე, რომ მათ შორის არსებობს გარკვეული სიმეტრია [38].

კრისტალურ მესერში ორეულის ფორმირებისათვის, ე.ი. კრისტალის ნაწილებს შორის ორეულოვანი ორიენტაციული თანაფარდობის წარმოქმნისათვის, სიმეტრიის თვალსაზრისით, არსებობს მხოლოდ ერთი ფუნდამენტური შეზღუდვა: კრისტალის ორეულოვან ნაწილებს შორის სიმეტრიულ გარდაქმნას ის ელემენტი უნდა ახორციელებდეს, რომელიც არ გააჩნია საწყის კრისტალს ამ ორიენტაციაში (უფრო დეტალურად იხილეთ [39, 40, ER5]). პრაქტიკულად, უმეტესწილად ასეთ ელემენტებს წარმოადგენს სარკული არეკვლის სიბრტყე და მეორე რიგის სიმეტრიის ღერძი (180°-ით ბრუნვა). ეს სიმეტრიის ოპერაციები კი, გარკვეულ შემთხვევაში, როგორც ნაჩვენებია დამატება 3-ში (3.3 და 3.6, ფორმულა A3-1.1) ერთმანეთთან ინვერსიის ოპერაციით არის დაკავშირებული (ფორმულა A3-3.1). ასე რომ, თუ მივიღებთ რომელიმე მიმართულების მიმართ 180°-ით ბრუნვის მატრიცას, მისგან მარტივად შეიძლება მივიღოთ ამ მიმართულების მართობულ სიბრტყეში სარკული არეკვლის მატრიცა - პირველის გამრავლებით ინვერსიის ოპერაციის შესაბამის მატრიცაზე (დამატება 3, 3.1).

ნაშრომებში [40, 41] ნაჩვენებია იყო რომ ზოგად, არაორთონორმირებული სისტემისათვის (ტრიკლინური სინგონია) ძირითადი კრისტალისა და მასთან მეორე რიგის ღერძით დაკავშირებული ორეულის კოორდინატთა სისტემების ერთეულოვან ვექტორებს შორის არსებობს შემდეგი თანაფარდობა:

$$\mathbf{A}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2(\mathbf{m} \cdot \mathbf{a}_i)(\mathbf{m} \cdot \mathbf{a}_j) - (\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j) \quad (4.4)$$

სადაც \mathbf{A}_i , \mathbf{a}_i , \mathbf{a}_j - ორეულისა და ძირითადი კრისტალის კოორდინატთა სისტემების ერთეულოვანი (ნორმირებული) ვექტორებია, \mathbf{m} არის ბრუნვის ღერძის ერთეულოვანი ვექტორი და იგი მართობია გაორების სიბრტყისა, ე.ი. მის ერთეულოვან ნორმალს წარმოადგენს. თუ ამ ტოლობას სკალარული ნამრავლების ნაცვლად შესაბამისი კოსინუსებით ჩავწერთ, მივიღებთ:

$$\cos \omega_{ij} = 2 \cos \alpha_i \cdot \cos \alpha_j - \cos \alpha_{ij} \quad (4.5)$$

აქ ω_{ij} - კუთხეა ორეულის i -ურ და ძირითადი კრისტალის j -ურ ერთეულოვან ვექტორებს შორის შესაბამისად. α_i - კუთხეა ძირითადი კრისტალის მესრის \mathbf{a}_i ერთეულოვან ვექტორსა და \mathbf{m} -ს შორის. α_j - კუთხეა ძირითადი კრისტალის მესრის \mathbf{a}_j ერთეულოვან ვექტორსა და \mathbf{m} -ს შორის. α_{ij} - კი კუთხეა ძირითადი კრისტალის \mathbf{a}_i და \mathbf{a}_j ერთეულოვან ვექტორებს შორის და დამოკიდებულია კრისტალის სიმეტრიაზე (სინგონია). აქვე უნდა აღინიშნოს, რომ ძირითად კრისტალსა და ორეულში შესაბამის ერთეულოვან ვექტორებს შორის კუთხეები ტოლია, ვინაიდან ორეულის სტრუქტურა იდენტურია ძირითადი კრისტალის სტრუქტურისა და ისინი მხოლოდ სიმეტრიის ოპერაციით (მაგ. არეკვლა, ბრუნვა) არიან ერთმანეთთან დაკავშირებული. ეს უკანასკნელი კი არ იწვევს ვექტორებს შორის კუთხის ცვლილებას.

მეორე რიგის სიმეტრიის ღერძით დაკავშირებული ორეულისა და ძირითადი კრისტალის მესრების ერთეულოვან ვექტორებს შორის ცნობილი დამოკიდებულება [38], მარტივად მიიღება (4.4)-დან:

$$\mathbf{A}_i = 2(\mathbf{m} \cdot \mathbf{a}_i)\mathbf{m} - \mathbf{a}_i \quad (4.6)$$

თუ გავითვალისწინებთ, რომ \mathbf{m} ერთეულოვანი ვექტორია, ანუ აკმაყოფილებს ნორმირების პირობას, $m_i m^i = 1$ (მისი სიგრძის კვადრეტი 1-ის ტოლია; $i = 1, 2, 3$ და აჯამვა ხდება განმეორებადი ინდექსის მიხედვით). ასევე, \mathbf{m} ვექტორის კოვარიანტულ და კონტრავარიანტულ კოორდინატებს შორის შემდეგი დამოკიდებულებაა: $m^i = g^{ik} m_k$ (იხილეთ პარ. 1.2.1, ფორმულა 1.23) და ნებისმიერი \mathbf{r} ვექტორის (კრისტალოგრაფიული მიმართულების) გარდაქმნის მატრიცისათვის (4.6)-დან შემდეგი თანაფარდობა მიიღება ტენზორული აღნიშვნებით [ER5]:

$$r_j^i = 2m^i m_j - \delta_j^i. \quad (4.7)$$

მატრიცული სახით, გაშლილად (4.7) შემდეგნაირად ჩაიწერება:

$$R = \begin{bmatrix} 2m^1m_1 - 1 & 2m^1m_2 & 2m^1m_3 \\ 2m^2m_1 & 2m^2m_2 - 1 & 2m^2m_3 \\ 2m^3m_1 & 2m^3m_2 & 2m^3m_3 - 1 \end{bmatrix} \quad (4.8)$$

როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, 180° -ით ბრუნვის მატრიციდან (R) ბრუნვის ღერძის მართობულ სიბრტყეში სარკული არეკვლის მატრიცა (S) მიიღება შემდეგნაირად: $S = CR$, სადაც C - ინვერსიის ოპერაციის შესაბამისი მატრიცაა (იხ. დამატება 3, 3.1). შესაბამისად, სარკული არეკვლის მატრიცის ზოგადი სახე ნებისმიერი სინგონიისათვის ასეთი იქნება:

$$S = \begin{bmatrix} 1 - 2m^1m_1 & -2m^1m_2 & -2m^1m_3 \\ -2m^2m_1 & 1 - 2m^2m_2 & -2m^2m_3 \\ -2m^3m_1 & -2m^3m_2 & 1 - 2m^3m_3 \end{bmatrix} \quad (4.9)$$

აქ m^i და m_j , \mathbf{m} ვექტორის ნორმირებული კონტრავარიანტული და კოვარიანტული კოორდინატებია, ე.ი. მისი სიგრძე $\sqrt{m^i m_i} = 1$, ან რაც იგივეა $\sqrt{g^{ij} m_i m_j} = 1$ (იხილეთ პარ. 1.2.1). შევნიშნოთ, რომ მატრიცები (4.8) და (4.9) წარმოადგენს ვექტორის (მიმართულების) გარდაქმნის მატრიცებს და არა ბაზისის გარდაქმნის მატრიცებს, როგორც ეს იყო წინა პარაგრაფში განხილულ შემთხვევაში (პარ. 4.1). ამიტომ თუ ვისარგებლებთ დამატება 1.2-ში მოყვანილი ცხრილით, ცხადი გახდება, რომ (4.9) მატრიცა არის შესაბამისი ბაზისის გარდაქმნის მატრიცის ტრანსპონირებული მატრიცა. ამ უკანასკნელის გათვალისწინება აუცილებელია კრისტალოგრაფიული გამოთვლების დროს.

პრაქტიკულად, ორეულოვანი თანაფარდობის (4.9) მატრიცის ელემენტების გამოთვლისათვის საჭიროა წინასწარ გამოვიანგარიშოთ გაორების სიბრტყის ნორმალის m^i და m_j ნორმირებული კონტრავარიანტული და კოვარიანტული კოორდინატები.

ამისათვის გაორების სიბრტყის მიღერის (hkl) ინდექსების საშუალებით, მეტრიკული ტენზორის გამოყენებით, ვიპოვოთ ამ სიბრტყის ნორმალი:

$$\mathbf{n} = \mathbf{G}^{-1} \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}$$

(იხ. პარ. 1.2.1 და ცხრილი დამატება 1.2-ში). ან ტენზორული აღნიშვნების გამოყენებით, $n^i = g^{ij} h_j$. ანუ, n^i წარმოადგენს გაორების სიბრტყის ნორმალის არანორმირებულ კონტრავარიანტულ კოორდინატებს (ე.ი. მისი მიმართულების ინდექსებს პირდაპირ სივრცეში), ხოლო h_i - მის არანორმირებულ კოვარიანტულ კოორდინატებს (ანუ თვით სიბრტყის მიღერის ინდექსებს). ახლა n^i და h_i კოორდინატების ნორმირების მიზნით, რის შედეგადაც, განმარტების თანახმად, მიიღება \mathbf{m} ვექტორის m^i და m_j კოორდინატები, გამოვთვალოთ \mathbf{n} -ის სიგრძე (იხ. პარ. 1.2.1-ში ფორმულები 1.19 და 1.25):

$$n = (g_{ij} n^i n^j)^{1/2} = (n^i n_i)^{1/2}$$

მაშინ

$$m_i = h_i / n \quad \text{ხოლო} \quad m^i = n^i / n$$

ამ მნიშვნელობების ჩასმით (4.9)-ში მიიღება (hkl) სიბრტყეში სარკული არეკვლის მატრიცა ნებისმიერი კრისტალური სისტემისათვის [ER5]. მისი გამოყენება, ორეულისა და ძირითადი კრისტალის მიმართულებებისა და სიბრტყეების დასაკავშირებლად, წინა პარაგრაფში მოცემული სტანდარტული წესებით ხორციელდება (იხ. ასევე ცხრილი დამატება 1.2-ში).

5. ბრავეს პოლარული მესერი - შებრუნებული მესრის წინამორბედი

შებრუნებული მესრის კონცეფცია დამწყებთათვის რამდენადმე აბსტრაქტულად რჩება, სანამ დიფრაქციულ ექსპერიმენტს და შესაბამის თეორიას არ გაეცნობიან. მისი გაგება მარტივდება შუალედური კონცეფციის - *ბრავეს პოლარული მესრის* - საშუალებით [27].

კრისტალში რენტგენის სხივების დიფრაქციის აღმოჩენამდე [28] და, შესაბამისად, ატომური სტრუქტურის კანონზომიერებების დადგენამდე, მათი კვლევა მხოლოდ მორფოლოგიური და ოპტიკური მახასიათებლებით შემოიფარგლებოდა. რენტგენის სხივების დიფრაქციული სურათების ინტერპრეტაციისათვის პ. ევალდის მიერ შემოტანილი იქნა შებრუნებული მესრის ცნება [29] და კრისტალის მესერს ამ მიმართებაში, შესაბამისად, პირდაპირი ეწოდა. ისე რომ, ეს ორი მესერი ურთიერთშებრუნებულია. ე.ი. შებრუნებულის შებრუნებული ისევ პირდაპირი მესერია [3-8]. პ. ევალდის ეს კონცეფცია ეფუძნებოდა უფრო ადრე ვ. გიბსის მიერ შემოტანილ ვექტორთა შებრუნებულ სისტემას [30], ზუსტად ისეთს, რომელსაც დღეს კრისტალოგრაფიაში იყენებენ. ასევე მას ეკუთვნის სკალარული ნამრავლის წარმოდგენა შებრუნებულ და პირდაპირ მესრებში მათი ერთსახელა კოორდინატების ნამრავლის სახით [30]. მაგრამ ვ. გიბსზე ბევრად უფრო ადრე მ. ბრავემ [31] კრისტალის მორფოლოგიის დასახასიათებლად შემოიტანა ისეთი ვექტორთა სისტემა, რომელიც შებრუნებული მესრის რეალურ წინამორბედად იქცა: მესერი, რომელიც დუალურია პირდაპირისა, თუმცა არ არის მისი შებრუნებული, რადგან მისი ვექტორები ისევ ანგსტრემებში (\AA) იზომება და არა \AA^{-1} -ში, როგორც ეს შებრუნებულ მესერშია განსაზღვრული [3-8]. მას ეწოდა *პოლარული მესერი* და ამ კონცეფციამ მნიშვნელოვანი როლი შეასრულა კრისტალების მორფოლოგიის შესწავლაში.

როგორც ცნობილია კრისტალოგრაფიიდან, კრისტალის წახნაგებს შორის დიედრული კუთხეები, იმისდა მიუხედავად, თუ როგორ არიან განვითარებული ეს წახნაგები,

მუდმივია მოცემული ატომური სტრუქტურის კრისტალისათვის (სტენონის კანონი [3-8]). ხოლო რაც შეეხება თვით წახნაგების ზომას (მეტიც, მის არსებობას), იგი დამოკიდებულია მხოლოდ კრისტალის ზრდის პირობებზე. ამის ყველაზე ნათელი გამოვლინებაა ის, რომ კრისტალის გარეგანი სიმეტრია ყოველთვის არ ასახავს მის შიდა ატომური სტრუქტურის სიმეტრიას. განსხვავებით წახნაგების ზომებისა, მათი ორიენტაციები უცვლელია მოცემული ნივთიერების კრისტალისათვის და ასახავს მისი ატომური სტრუქტურის სიმეტრიას. შესაბამისად, კრისტალს ახასიათებენ მისი წახნაგების ნორმალების ორიენტაციებით, რომლებიც კრისტალოგრაფიაში ცალსახად სტერეოგრაფიულ პროექციაზე მოიცემა [3-8, ER3-ER5] (იხ. დამატება 5).

ამ პროექციაზე ფიქსირდება წახნაგების ნორმალების საპროექციო სფეროსთან გადაკვეთის წერტილები, რომელთაც *პოლუსები* ეწოდება. თვით წახნაგი კი წარმოადგენს წახნაგის პარალელურ სიბრტყეთა ოჯახის ბოლო სიბრტყეს. ცხადია, კრისტალის სტერეოგრაფიული პროექცია ასახავს მხოლოდ წახნაგთა ორიენტაციას და არ ასახავს მის მეტრიკულ თვისებებს. კერძოდ, შესაბამისი სიბრტყეთა ოჯახის სიბრტყეთაშორის მანძილს - $d_{(hkl)}$. სწორედ ეს მეტრიკული ინფორმაცია იქნა დამატებული ბრავეს მიერ [31], რომელმაც კრისტალის დასახასიათებლად, ნაცვლად მხოლოდ ნორმალებისა (hkl) სიბრტყეების მიმართ, შემოიტანა ვექტორთა სისტემა, რომელშიც თითოეული ვექტორი ასევე მართობია შესაბამისი (hkl) სიბრტყისა და ამავე დროს მისი სიგრძე პროპორციულია შესაბამისი $d_{(hkl)}$ -სა. ე.ი ამ სისტემაში ვექტორს იგივე განზომილება აქვს, რაც $d_{(hkl)}$ -ს პირდაპირ მესერში (ანუ $\overset{\circ}{A}$). ასეთ ვექტორებზე აგებული მესერი დუალურია პირდაპირისა, რადგან იგივე აგება, გამეორებული დუალურ მესერზე, ისევ საწყის, პირდაპირ მესერს გვაძლევს. სტერეოგრაფიულ პროექციებზე სიბრტყის ნორმალის საპროექციო სფეროსთან კვეთის წერტილს პოლუსი ეწოდება და ამ ტრადიციაზე დაყრდნობით ბრავემ ახალ ვექტორთა სისტემას პოლარულ ვექტორთა სისტემა, ხოლო მასზე აგებულ მესერს *პოლარული მესერი* უწოდა.

5.1. ბრავეს პოლარული მესრის აგება

როგორც ცნობილია [3-8], კრისტალის პირდაპირ მესერში \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} საბაზისო ვექტორებზე აგებული ელემენტარული უჯრედის მოცულობა ამ ვექტორების შერეული ნამრავლით გამოისახება:

$$V = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c} = \mathbf{b} \cdot \mathbf{c} \times \mathbf{a} = \mathbf{c} \cdot \mathbf{a} \times \mathbf{b} \quad (5.1)$$

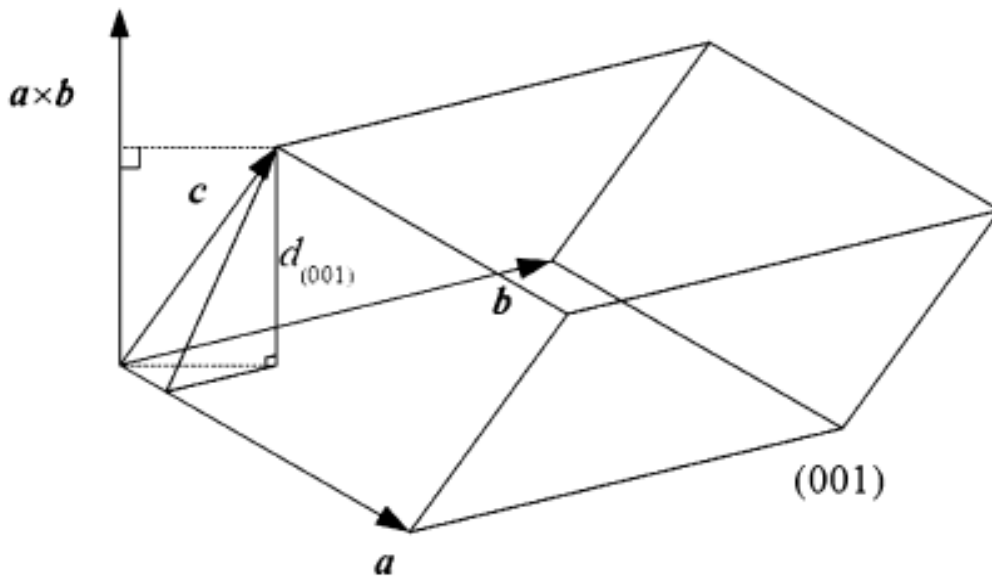
განმარტების თანახმად ვექტორული ნამრავლის მოდული - $|\mathbf{a} \times \mathbf{b}|$ უდრის \mathbf{a} და \mathbf{b} ვექტორებზე აგებული პარალელოგრამის ფართს, რომელსაც ბრავე S(001)-ით აღნიშნავდა. ცნობილია ასევე, რომ ამ ფართის ნამრავლი შესაბამის სიბრტყეთაშორის მანძილზე ტოლია ელემენტარული უჯრედის მოცულობისა პირდაპირ სივრცეში (იხ. ნახ.10).

$$V = S(001) d_{(hk1)}$$

ახალი, პოლარული მესრის ბაზისად ბრავემ აირჩია (100), (010) და (001) სიბრტყეების ნორმალეები სივრცეებით:

$$\frac{S(100)}{V^{1/3}}, \frac{S(010)}{V^{1/3}} \text{ და } \frac{S(001)}{V^{1/3}} \quad (5.2)$$

აქ, კოეფიციენტი $V^{1/3}$ შეესაბამება კრისტალის მესრის ელემენტარული უჯრედის წიბოს საშუალო მნიშვნელობას. ამ პირობით, როგორც ქვემოთ ვნახავთ, ახალი სისტემის ელემენტარულ უჯრედსაც იგივე მოცულობა ექნება - V . შედეგად $O \mathbf{a}^p \mathbf{b}^p \mathbf{c}^p$ პოლარული მესრის პარამეტრებს (საბაზისო ვექტორების მოდულებს) იგივე განზომილება აქვთ, კერძოდ \AA .



ნახ. 11. ბრავეს პოლარული მესრის აგებისათვის [27]. $d_{(hkl)}$ - (001) სიბრტყეთა ოჯახის სიბრტყეთაშორისი მანძილი. აქ $S(001) d_{(hkl)} = \mathbf{c} \cdot \mathbf{a} \times \mathbf{b} = V$ კრისტალის მესრის ელემენტარული უჯრედის მოცულობაა

ბრავეს პოლარული მესრის მოცულობა ასევე სტანდარტული წესით [3-8] - საბაზისო ვექტორების შერეული ნამრავლის სახით მოიცემა (იხ. ასევე დამატება 4.6) :

$$V^p = \mathbf{a}^p \cdot \mathbf{b}^p \times \mathbf{c}^p = \frac{(\mathbf{b} \times \mathbf{c})}{V^{1/3}} \cdot \frac{(\mathbf{c} \times \mathbf{a})}{V^{1/3}} \times \frac{(\mathbf{a} \times \mathbf{b})}{V^{1/3}} \quad (5.3)$$

გამოვყოთ ამ გამოსახულების მრიცხველში თანამამრავლები, მაგალითად,

$$(\mathbf{c} \times \mathbf{a}) \times (\mathbf{a} \times \mathbf{b}).$$

ვექტორულ ანალიზში ცნობილი თანაფარდობის თანახმად [30, ER1],

$$(\mathbf{c} \times \mathbf{a}) \times (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = [\mathbf{a} \ \mathbf{b} \ \mathbf{c}]\mathbf{a},$$

სადაც კვადრატული ფრჩხილები შერეულ ნამრავლს აღნიშნავს (იხ. დამატება 4). თუ ამ შედეგს ისევ (5.3)-ში შევიტანთ და გავითვალისწინებთ სკალარული ნამრავლის კომუტაციურობას, მივიღებთ:

$$V^p = \frac{[\mathbf{a} \ \mathbf{b} \ \mathbf{c}] \mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})}{V}$$

აქ მარჯვენა მხარის წილადის მრიცხველი

$$[\mathbf{a} \ \mathbf{b} \ \mathbf{c}] \mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = [\mathbf{a} \ \mathbf{b} \ \mathbf{c}]^2 = V^2,$$

და შესაბამისად, $V^p = V$.

ამგვარად ბრავეს პოლარულ მესერში ვექტორს იგივე განზომილება აქვს, რაც პირდაპირში.

რენტგენის სხივების კრისტალზე დიფრაქციის აღმოჩენამ [28], პ. ევალდი [29] მიიყვანა ვ. გიბსის მიერ ჩამოყალიბებულ, შებრუნებულ ვექტორთა სისტემის [30] გამოყენებამდე, რამაც მთლიანად გამოდევნა ბრავეს პოლარული მესერი კრისტალოგრაფიიდან ისე, რომ იგი კრისტალოგრაფიის საერთაშორისო ცხრილებშიც კი არ არის მოხსენიებული [27]. ამჟამად შებრუნებული მესერი კრისტალოგრაფიაში აქსიომატურად განისაზღვრება [3-8], ისე, რომ არ წარმოჩინდება ანალოგიები ბრავეს მესერთან.

მართლაც, შებრუნებული მესრის ცნება ასევე ადვილად აღიქმება მისი ფიზიკური (და არა მხოლოდ გეომეტრიული [30]) ინტერპრეტაციის საფუძველზე. კერძოდ, კრისტალიდან დიფრაგირებული ტალღის ამპლიტუდა პროპორციულია კრისტალში ელექტრონების სიმკვრივის ფურიე-სახისა [3,8,11,12]. თვით ფურიე გარდაქმნის არსი კი განაპირობებს ისეთი სივრცის შემოტანას, რომელსაც რეალურის შებრუნებული განზომილება აქვს. ამ სივრცეში (შებრუნებული მესერი) საბაზისო ვექტორების სიგრძეები, განსხვავებით ბრავეს პოლარული მესრის საბაზისო ვექტორებისა (5.2), განისაზღვრება შემდეგი წესით:

$$\frac{S(100)}{V}, \quad \frac{S(010)}{V} \quad \text{და} \quad \frac{S(001)}{V},$$

ხოლო მათი ორიენტაცია იგივე წესით მოიცემა, როგორითაც ბრავეს პოლარულ მესერში.

შესაბამისად, ვექტორის განზომილება მიიღება \AA^{-1} .

კავშირი შებრუნებული და პირდაპირი მესრების ელემენტარული უჯრედების მოცულობებს შორის შემდეგია:

$$V^* = \mathbf{a}^* \cdot \mathbf{b}^* \times \mathbf{c}^* = \frac{(\mathbf{b} \times \mathbf{c})}{V} \cdot \frac{(\mathbf{c} \times \mathbf{a})}{V} \times \frac{(\mathbf{a} \times \mathbf{b})}{V} = \frac{(\mathbf{b} \times \mathbf{c}) \cdot (\mathbf{c} \times \mathbf{a}) \times (\mathbf{a} \times \mathbf{b})}{V^3}$$

აქაც, მსგავსად (5.3)-სა, შერეული ნამრავლიდან $(\mathbf{c} \times \mathbf{a}) \times (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = [\mathbf{a} \mathbf{b} \mathbf{c}] \mathbf{a}$ (იხ. დამატება 4), ამიტომ,

$$V^* = \frac{[\mathbf{a} \mathbf{b} \mathbf{c}] \mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})}{V^3} = \frac{[\mathbf{a} \mathbf{b} \mathbf{c}]^2}{V^3} = V^{-1}. \quad (5.4)$$

ამგვარად პოლარული მესრის შემოტანა ბუნებრივი შედეგია სტენონის კანონისა, ხოლო შებრუნებული მესრისა კი - ფრაუნჰოფერის დიფრაქციისა [27]. თუმცა, აქვე უნდა აღინიშნოს, რომ მათემატიკაში, ვექტორული ნამრავლის თვისებების კვლევისას, ვ. გიბსმა ჯერ კიდევ 1881 წელს შემოიტანა და სრულად ჩამოაყალიბა შებრუნებულ ვექტორთა სისტემა [30], ისე როგორც ეს დღეს კრისტალოგრაფიაში არის მიღებული [3-8]. ბრავეს პოლარული მესერი ბუნებრივი გადასვლაა კრისტალის მორფოლოგიური შესწავლიდან დიფრაქციულზე, რომლებშიც ორივეგან განიხილება პირდაპირი მესრის გარკვეული სიბრტყეების მართობული ვექტორები და იგი კარგი თვალსაჩინოებაა შებრუნებული მესრის არსის გაგებისათვის. თვით შებრუნებული მესერი კი მძლავრი იარაღია დიფრაქციული სურათების ინტერპრეტაციისათვის [11,32-35, ER5].

ვნახოთ, თუ როგორ შემოიტანა გიბსმა შებრუნებული ვექტორთა სისტემა თავის ორიგინალურ მონოგრაფიაში „ვექტორული ანალიზი“ [30], რომელმაც 7 გამოცემას გაუძლო. მიყვებით ორიგინალში მოყვანილ მსვლელობასა და აღნიშვნებს.

როგორც ცნობილია, რაიმე \mathbf{r} ვექტორის წარმოდგენა სამი არაკომპლანარული \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} ვექტორის საშუალებით შემდეგი სახისაა:

$$\mathbf{r} = a\mathbf{a} + b\mathbf{b} + c\mathbf{c} \quad (5.5)$$

სადაც a, b, c სკალარული მუდმივებია - \mathbf{r} -ის კოორდინატებია $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ ბაზისში (იხ. 1.0 და 1.7.3), რომელთა მნიშვნელობები უნდა იქნას განსაზღვრული.

ამისათვის გავამრავლოთ (5.5) სკალარულად $\mathbf{b} \times \mathbf{c}$ -ზე

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c} = a \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c} + b \mathbf{b} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c} + c \mathbf{c} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}$$

ვინაიდან $\mathbf{b} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}$ და $\mathbf{c} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}$ შერეული ნამრავლები ნულის ტოლია (განმარტების თანახმად), მივიღებთ,

$$[\mathbf{rbc}] = a [\mathbf{abc}]$$

მსგავსი პროცედურით, (5.5)-ის $\mathbf{c} \times \mathbf{a}$ და $\mathbf{a} \times \mathbf{b}$ -ზე გამრავლებით, ასევე მივიღებთ b და c კოეფიციენტებისათვის:

$$[\mathbf{rca}] = b [\mathbf{bca}]$$

$$[\mathbf{rab}] = c [\mathbf{cab}]$$

აქედან მიღებული a, b, c -ს მნიშვნელობების ჩასმით (5.5)-ში, \mathbf{r} -სათვის გვექნება:

$$\mathbf{r} = \frac{[\mathbf{rbc}]}{[\mathbf{abc}]} \mathbf{a} + \frac{[\mathbf{rca}]}{[\mathbf{bca}]} \mathbf{b} + \frac{[\mathbf{rab}]}{[\mathbf{cab}]} \mathbf{c} \quad (5.6)$$

ტოლობის მარჯვენა მხარეში მნიშვნელების ერთმანეთთან ტოლობა გვადლევს თანაფარდობას,

$$[\mathbf{abc}] \mathbf{r} - [\mathbf{rbc}] \mathbf{a} - [\mathbf{rca}] \mathbf{b} - [\mathbf{rab}] \mathbf{c} = 0,$$

რომელიც განხილულ შემთხვევაში უნდა არსებობდეს $\mathbf{r}, \mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ ვექტორებს შორის.

ამრიგად, განტოლება (5.6) შეიძლება ასე გადავწეროთ:

$$\mathbf{r} = \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}}{[\mathbf{abc}]} \mathbf{a} + \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{c} \times \mathbf{a}}{[\mathbf{abc}]} \mathbf{b} + \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{a} \times \mathbf{b}}{[\mathbf{abc}]} \mathbf{c}$$

ან

$$\mathbf{r} = \mathbf{r} \cdot \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{[\mathbf{abc}]} \mathbf{a} + \mathbf{r} \cdot \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{[\mathbf{abc}]} \mathbf{b} + \mathbf{r} \cdot \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{[\mathbf{abc}]} \mathbf{c} \quad (5.7)$$

სამ ვექტორს ამ გამოსახულებაში, რომლებიც წარმოდგენილია \mathbf{r} თანამამრავლით, კერძოდ,

$$\frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{[\mathbf{abc}]}, \quad \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{[\mathbf{abc}]}, \quad \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{[\mathbf{abc}]} \quad (5.8)$$

განსაკუთრებული მნიშვნელობა აქვს. ისინი, შესაბამისად, მართობულია \mathbf{b} და \mathbf{c} , \mathbf{a} და \mathbf{c} და \mathbf{a} და \mathbf{b} ვექტორებზე გამავალი სისბრტყეებისა. ეს ვექტორები მრავალ მნიშვნელოვან გამოსახულებაში ჩნდება ამ სახით. ამის გამო ისინი იმსახურებს ცალკე სახელსა და აღნიშვნას [30].

განმარტება: სამი ვექტორის სისტემა (5.8), რომელიც მიიღება სამი არაკომპლანარული \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} ვექტორის ვექტორული ნამრავლების $\mathbf{b} \times \mathbf{c}$, $\mathbf{c} \times \mathbf{a}$, $\mathbf{a} \times \mathbf{b}$ გაყოფით ამავე ვექტორების შერეულ ნამრავლზე, ეწოდება \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} -ს *შებრუნებული სისტემა*.

აქ მნიშვნელოვანია მათი არაკომპლანარულობა, რადგან თუ \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} კომპლანარული ვექტორებია, ცხადია, მათი შერეული ნამრავლი $[\mathbf{abc}]$ ნულის ტოლია და (5.8) გამოსახულებები აზრს კარგავენ. \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} არაკომპლანარულ ვექტორთა სისტემის შებრუნებული ვექტორთა სისტემა აღინიშნება პრიმებით - \mathbf{a}' , \mathbf{b}' , \mathbf{c}' ⁷, სადაც

⁷ თანამედროვე კრისტალოგრაფიულ ლიტერატურაში, როგორც ცნობილია, პრიმას ნაცვლად იხმარება ნიშანი * .

$$\mathbf{a}' = \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{[\mathbf{abc}]}, \quad \mathbf{b}' = \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{[\mathbf{abc}]}, \quad \mathbf{c}' = \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{[\mathbf{abc}]} \quad (5.9)$$

შედეგად, \mathbf{r} -ის გამოსახულება (5.7) მიიღებს შემდეგ მარტივ ფორმას

$$\mathbf{r} = \mathbf{r} \cdot \mathbf{a}' \mathbf{a} + \mathbf{r} \cdot \mathbf{b}' \mathbf{b} + \mathbf{r} \cdot \mathbf{c}' \mathbf{c} \quad (5.10)$$

შევნიშნოთ, თუ $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ არაკომპლანარულ ვექტორთა სისტემაა, მაშინ, ცხადია, $\mathbf{a}', \mathbf{b}', \mathbf{c}'$ სისტემაც არაკომპლანარულია მისი განმარტების თანახმად. შესაბამისად, \mathbf{r} შეიძლება გამოისახოს ამ ვექტორების წრფივი კომბინაციითაც, სათანადო სკალარული x, y, z კოეფიციენტების საშუალებით:

$$\mathbf{r} = x\mathbf{a}' + y\mathbf{b}' + z\mathbf{c}' \quad (5.11)$$

აქაც, თუ გავითვალისწინებთ (5.9)-ს, მივიღებთ

$$[\mathbf{abc}] \mathbf{r} = x \mathbf{b} \times \mathbf{c} + y \mathbf{c} \times \mathbf{a} + z \mathbf{a} \times \mathbf{b}$$

ამ გამოსახულების რიგრიგობით $\cdot \mathbf{a}$, $\cdot \mathbf{b}$ და $\cdot \mathbf{c}$ -ზე გამრავლებით მივიღებთ შემდეგ ტოლობებს:

$$[\mathbf{abc}] \mathbf{r} \cdot \mathbf{a} = x [\mathbf{bca}]$$

$$[\mathbf{abc}] \mathbf{r} \cdot \mathbf{b} = y [\mathbf{cab}]$$

$$[\mathbf{abc}] \mathbf{r} \cdot \mathbf{c} = z [\mathbf{abc}]$$

რადგან განმარტების თანახმად,

$$[\mathbf{abc}] = [\mathbf{bca}] = [\mathbf{cab}],$$

შესაბამისად,

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{a} = x, \quad \mathbf{r} \cdot \mathbf{b} = y, \quad \mathbf{r} \cdot \mathbf{c} = z.$$

აქ ყურადღება უნდა მიექცეს იმ ფაქტს, რომ ვექტორები $\mathbf{r}, \mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ პირდაპირი კოორდინატთა სისტემის ვექტორებია, ხოლო x, y, z \mathbf{r} ვექტორის კოორდინატებია შებრუნებულ სისტემაში (იხილეთ კოვარიანტული და კონტრავარიანტული კოორდინატების განსაზღვრა პარ. 1.2).

შედეგად \mathbf{r} -ისათვის, მსგავსად (5.10)-სა, მივიღებთ:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r} \cdot \mathbf{a} \mathbf{a}' + \mathbf{r} \cdot \mathbf{b} \mathbf{b}' + \mathbf{r} \cdot \mathbf{c} \mathbf{c}' \quad (5.12)$$

ე.ი. \mathbf{r} ვექტორის წარმოდგენა შესაძლებელია როგორც პირდაპირ (5.5 და 5.10), ასევე შებრუნებულ (5.11 და 5.12) ვექტორთა სისტემაში.

დავადგინოთ თანაფარდობები პირდაპირ და შებრუნებულ ვექტორთა სისტემას შორის. თუ ვექტორთა $\mathbf{a}', \mathbf{b}', \mathbf{c}'$ სისტემა შებრუნებულია $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ სისტემისა, მაშინ ნებისმიერი ერთსახელა ვექტორთა სკალარული ნამრავლი ერთის ტოლია, სხვადასხვა ვექტორთა სკალარული ნამრავლი კი – ნულის ტოლი.

მართლაც,

$$\mathbf{a}' \cdot \mathbf{a} = \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c} \cdot \mathbf{a}}{[\mathbf{abc}]} = \frac{[\mathbf{bca}]}{[\mathbf{abc}]} = 1$$

ასევე დანარჩენი წყვილებისათვის: $\mathbf{b} \cdot \mathbf{b}' = 1$ და $\mathbf{c} \cdot \mathbf{c}' = 1$

ხოლო შერეული წყვილებისათვის გვექნება:

$$\mathbf{a}' \cdot \mathbf{b} = \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c} \cdot \mathbf{b}}{[\mathbf{abc}]} = \frac{[\mathbf{bcb}]}{[\mathbf{abc}]} = \frac{0}{[\mathbf{abc}]} = 0$$

ასევე,

$$\mathbf{a}' \cdot \mathbf{c} = \mathbf{b}' \cdot \mathbf{a} = \mathbf{b}' \cdot \mathbf{c} = \mathbf{c}' \cdot \mathbf{a} = \mathbf{c}' \cdot \mathbf{b} = 0.$$

ამგვარად, თუ არსებობს ისეთი ვექტორთა სამეულეები A, B, C და a, b, c , რომელთათვისაც სრულდება პირობები:

$$A \cdot a = B \cdot b = C \cdot c = 1$$

და

$$A \cdot b = A \cdot c = B \cdot a = B \cdot c = C \cdot a = C \cdot b = 0,$$

მაშინ ვექტორთა ეს სისტემები *ურთიერთმებრუნებულია*.

აღნიშვნის ღირსია ასევე (5.12) გამოსახულებაში გამლის წევრების სტრუქტურა. კერძოდ, თანამამრავლები $r \cdot a$, $r \cdot b$ და $r \cdot c$ წარმოადგენს r -ის კოვარიანტულ კოორდინატებს რიჩისა და ლევი-ჩივიტას ინტერპრეტაციით (იხ. პარ. 1.2, ნახ.6). ე.ი. გამოსახულება (5.12) ასახავს ვექტორის წარმოდგენას კოვარიანტული კოორდინატებით კონტრავარიანტულ ბაზისში (a', b', c') მუდმივი თანამამრავლის სიზუსტით. ნიშანდობლივია, რომ გიბსის ამ ნაშრომში ვექტორის კოვარიანტული და კონტრავარიანტული კომპონენტებით წარმოდგენა არაცხადი სახით უკვე არსებობდა ზემოთ დასახელებული ავტორებისაგან დამოუკიდებლად.

დამატებები

A1

დამატება 1

წრფივი გარდაქმნების მატრიცული წარმოდგენის მაგალითები

1. ვექტორი ევკლიდურ სივრცეში

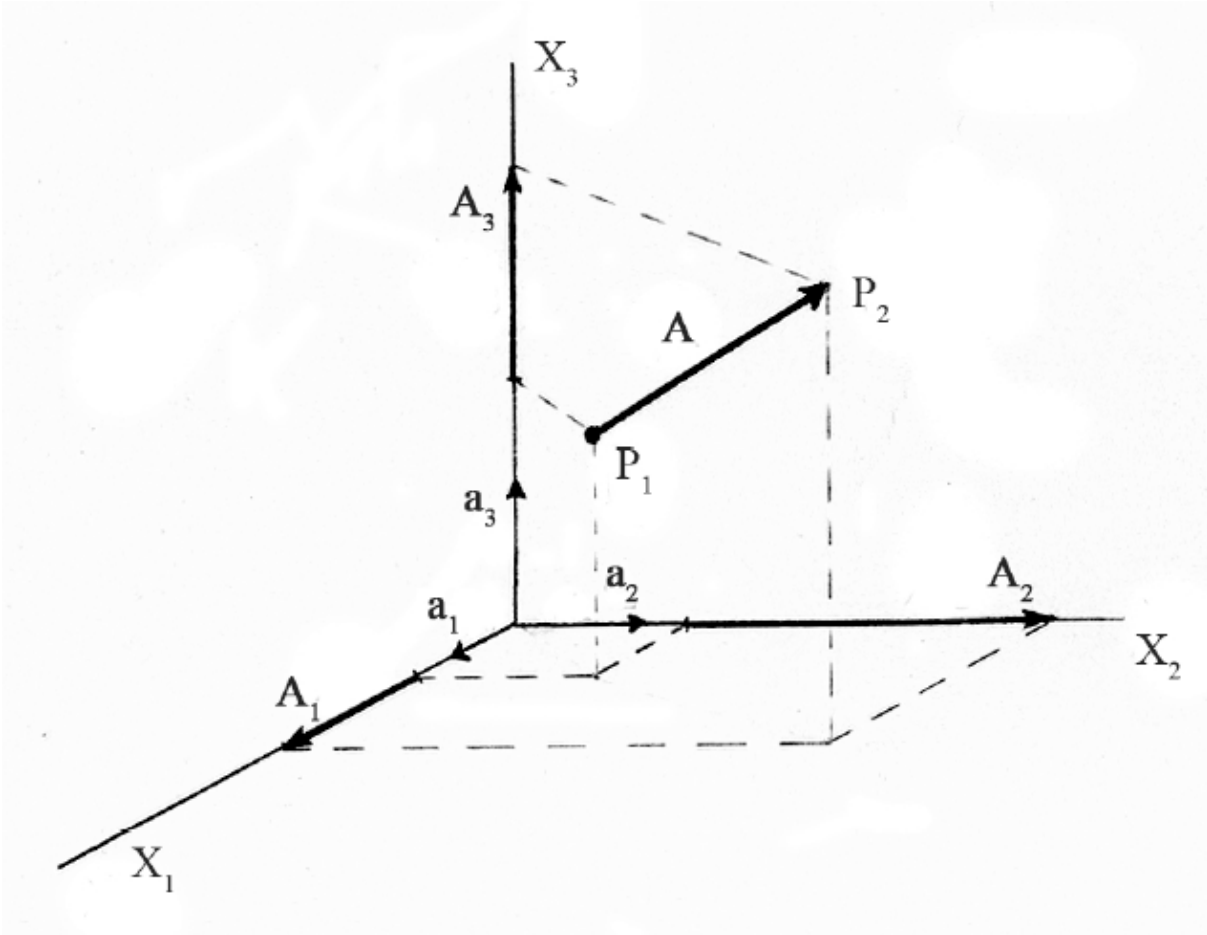
წინამდებარე კურსში განვიხილავთ ვექტორის ზოგადი ცნების კერძო შემთხვევას - სამგანზომილებიან, წრფივ, ევკლიდურ სივრცეში ე.წ. გეომეტრიულ ვექტორს. ელემენტარულ მათემატიკაში, ფიზიკასა და ტექნიკაში გეომეტრიული, სივრცითი ვექტორი ან, უბრალოდ, ვექტორი, წარმოადგენს გეომეტრიულ ობიექტს, რომელსაც გააჩნია სიდიდე (სიგრძე) და მიმართულება [1, 3, 17, 22, ER1,ER2].

ჩვეულებრივ, ვექტორს წარმოადგენენ წრფის მონაკვეთის სახით, რომელსაც აქვს გარკვეული მიმართულება, ანუ გეომეტრიული ვექტორი განმარტებულია, როგორც ორიენტირებული (მიმართული) P_1P_2 მონაკვეთი, რომლის საწყისი წერტილი ემთხვევა P_1 წერტილს, ხოლო ბოლო წერტილი - P_2 წერტილს და ყოველი ასეთი P_1P_2 წყვილი წარმოადგენს სივრცის წერტილების ყველა დალაგებული წყვილის სიმრავლეს [17,ER2]. ყველა n -განზომილებიან ვექტორთა ერთობლიობას, ნამდვილი კომპონენტებით, რომელთათვისაც განმარტებულია ვექტორთა შეკრებისა და ვექტორის სკალარზე გამრავლების ოპერაციები, ეწოდება n -განზომილებიანი ვექტორული სივრცე [17,24]. როდესაც სკალარი ნამდვილი რიცხვია, მაშინ ამ სივრცეს ნამდვილი ვექტორული სივრცე ანუ წრფივი სივრცე ეწოდება.

ჩვენი განხილვის საგანი - ევკლიდური სივრცე - არის წრფივი სივრცე, და მასში განმარტებულია: ვექტორის სიგრძე (მოდული), კუთხე ვექტორებს შორის, სკალარული ნამრავლი, სამართლიანია ვექტორთა შეკრების პარალელოგრამის წესი და სამკუთხედის შიდა კუთხეთა ჯამი ტოლია 180° .

ასეთ სივრცეში ვექტორი ცალსახად წარმოიდგინება წრფივ დეკარტულ კოორდინატთა სისტემაში მისი ვექტორული მდგენელების $(\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2, \mathbf{A}_3)$ ანუ კომპონენტების ჯამის

სახით (იხ. ნახაზი A1.1), რომელთაც ვექტორის ვექტორული კომპონენტები ეწოდება. ვექტორი ასევე წარმოიდგინება კოორდინატთა სისტემის საბაზისო ვექტორების $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$ და ე.წ. სკალარული კომპონენტების ანუ კოორდინატების (x^1, x^2, x^3) ნამრავლების ჯამის სახით (იხ. ძირითადი ტექსტი):



ნახ. A1.1

$$\mathbf{P}_1\mathbf{P}_2 \equiv \mathbf{A} = \mathbf{A}_1 + \mathbf{A}_2 + \mathbf{A}_3 = x^1\mathbf{a}_1 + x^2\mathbf{a}_2 + x^3\mathbf{a}_3$$

სადაც \mathbf{A}_i წარმოადგენს $\mathbf{P}_1\mathbf{P}_2$ ვექტორის ვექტორულ კომპონენტებს (მდგენელებს), x^i მისი კოორდინატებია, შესაბამისად X_1, X_2, X_3 საკოორდინატო ღერძების მიმართ, ხოლო \mathbf{a}_i მოცემული კოორდინატთა სისტემის საბაზისო ვექტორებია.

ვექტორის სიგრძეს, გამოსახულს შესაბამისი ფიზიკური სიდიდის ერთეულებით, ვექტორის მოდული (ან სიგრძე) ეწოდება და ასე აღინიშნება $|\mathbf{P}_1\mathbf{P}_2|$ (იხ. ძირითადი

ტექსტი). შევნიშნოთ ასევე, რომ სამგანზომილებიან ევკლიდურ სივრცეში დასაშვებია ვექტორის გადატანა თავის თავის პარალელურად ნებისმიერ წერტილში, ე.ი. საქმე გვაქვს თავისუფალ ვექტორებთან.

იმ შემთხვევაში როდესაც $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ საბაზისო ვექტორები ურთიერთმართობულია, ასეთ სისტემას ორთოგონალური ეწოდება. თუ $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ ვექტორები ამავე დროს ერთეულოვანი სიგრძის ვექტორებია, ასეთ სისტემას *ორთონორმირებული კოორდინატთა სისტემა* ეწოდება. ასეთი სისტემის საბაზისო ვექტორები ერთეულოვანი ვექტორებია და სამგანზომილებიანი სისტემისათვის აკმაყოფილებს შემდეგ პირობებს:

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j = 0 \quad \text{როცა } i \neq j \quad \text{და} \quad \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_i = 1 \quad i = 1, 2, 3$$

სადაც ‘ \cdot ’ ნიშანი ვექტორების სკალარულ ნამრავლს ნიშნავს [22, ER1,ER2]. თუ ერთ-ერთი პირობა დარღვეულია, სისტემა *არაორთონორმირებულია*.

1.1. აფინური გარდაქმნა

გეომეტრიაში აფინური გარდაქმნა ორ ვექტორულ სივრცეს შორის ზოგადად შედგება წრფივი გარდაქმნისა \mathbf{A} (ბრუნვა, ძვრა, გაჭიმვა, კუმშვა) და გადატანისაგან \mathbf{b} (ტრანსლაცია):

$$x \rightarrow \mathbf{A} x + \mathbf{b}.$$

გეომეტრიულად, აფინური გარდაქმნის დროს ევკლიდურ სივრცეში დაცულია შემდეგი პირობები:

ა. კოლინეარობა: წერტილები, რომლებიც გარდაქმნამდე ერთ წრფეზე მდებარეობდა, ასევე ერთ წრფეზე რჩება გარდაქმნის შემდეგაც.

ბ. წრფეზე p_1, p_2, p_3 წერტილებს შორის მანძილების ფარდობა:

$$\frac{|p_2 - p_1|}{|p_3 - p_2|}$$

უცვლელია.

1.2. წრფივი გარდაქმნის წარმოდგენა მატრიცულად

ზოგადად კოორდინატა გარდაქმნა წარმოდგენს იმ წესების ან/და თანაფარდობების ერთობლიობას, რომელიც ყოველ წერტილს შეუსაბამებს კოორდინატა ახალ სიმრავლეს. არსებობს კოორდინატა გარდაქმნის ორგვარი ინტერპრეტაცია - „აქტიური“ და „პასიური“.

პირველი გულისხმობს, რომ კოორდინატა გარდაქმნა აღწერს ისეთ ოპერაციას, რომელიც ყოველ მოცემულ მათემატიკურ ობიექტს, მაგალითად მოცემულ წერტილს, შეუსაბამებს რომელიმე ახალ წერტილს იგივე კოორდინატა სისტემაში.

მეორე კი გულისხმობს მოცემული წერტილის კოორდინატების წარმოდგენას ახალ კოორდინატა სისტემაში. წინამდებარე კურსში გამოყენებულია ორივე მიდგომა. სიმეტრიული გარდაქმნებისთვის - პირველი, ხოლო დანარჩენ შემთხვევებში მეორე. კოორდინატა სისტემის ბაზისის გარდაქმნის მაგალითი („პასიური“ ინტერპრეტაცია). ზოგადად ეს გარდაქმნა ასე ჩაიწერება:

$$\mathbf{b}_1 = a_{11}\mathbf{a}_1 + a_{12}\mathbf{a}_2 + a_{13}\mathbf{a}_3$$

$$\mathbf{b}_2 = a_{21}\mathbf{a}_1 + a_{22}\mathbf{a}_2 + a_{23}\mathbf{a}_3 \quad \text{ან კომპაქტურად} \quad \mathbf{Aa} = \mathbf{b} \quad (\text{A1-2.1})$$

$$\mathbf{b}_3 = a_{31}\mathbf{a}_1 + a_{32}\mathbf{a}_2 + a_{33}\mathbf{a}_3$$

აქ \mathbf{a}_i პირველი კოორდინატა სისტემის საბაზისო ვექტორებია, \mathbf{b}_i - მეორის (ორივე კოვარიანტული, იხ. პარ. 1). \mathbf{A} - წრფივი კომბინაციების a_{ij} კოეფიციენტებისაგან შემდგარი მატრიცაა. \mathbf{a} და \mathbf{b} სვეტ-მატრიცებია (ვექტორ-სვეტები) შედგენილი \mathbf{a}_i და \mathbf{b}_i საბაზისო ვექტორებისაგან შესაბამისად. \mathbf{A} მატრიცა გამოსახავს \mathbf{b}_i საბაზისო ვექტორებს \mathbf{a}_i საბაზისო ვექტორების საშუალებით, და მას *ბაზისის გარდაქმნის მატრიცა* ეწოდება. თუ \mathbf{a}_i ბაზისში ვექტორის (ან წერტილის) კოორდინატებს აღვნიშნავთ x^i -ით და \mathbf{b}_i ბაზისში y^i -ით (ორივე კონტრავარიანტული კოორდინატებია კოვარიანტულ

ბაზისებში, იხ. პარ. 1), მაშინ კოორდინატთა სისტემების გარდაქმნისას, საბაზისო და ნებისმიერი ვექტორებისათვის, შეგვიძლია ვისარგებლოთ ქვემოთ მოყვანილი სქემით [12]:

გარდაქმნის მატრიცა	საბაზისო ვექტორები	ვექტორებისა და წერტილების კოორდინატები
\mathbf{A}	$\mathbf{a}_i \rightarrow \mathbf{b}_i$	$x_i \rightarrow y_i$
\mathbf{A}^{-1}	$\mathbf{b}_i \rightarrow \mathbf{a}_i$	$y_i \rightarrow x_i$
\mathbf{A}^T	$\mathbf{b}^i \rightarrow \mathbf{a}^i$	$y^i \rightarrow x^i$
$(\mathbf{A}^T)^{-1}$	$\mathbf{a}^i \rightarrow \mathbf{b}^i$	$x^i \rightarrow y^i$

კრისტალოგრაფიული თვალსაზრისით აქ

\mathbf{a}_i და \mathbf{b}_i - პირდაპირი მესრების საბაზისო ვექტორებია (კოვარიანტული ბაზისები).

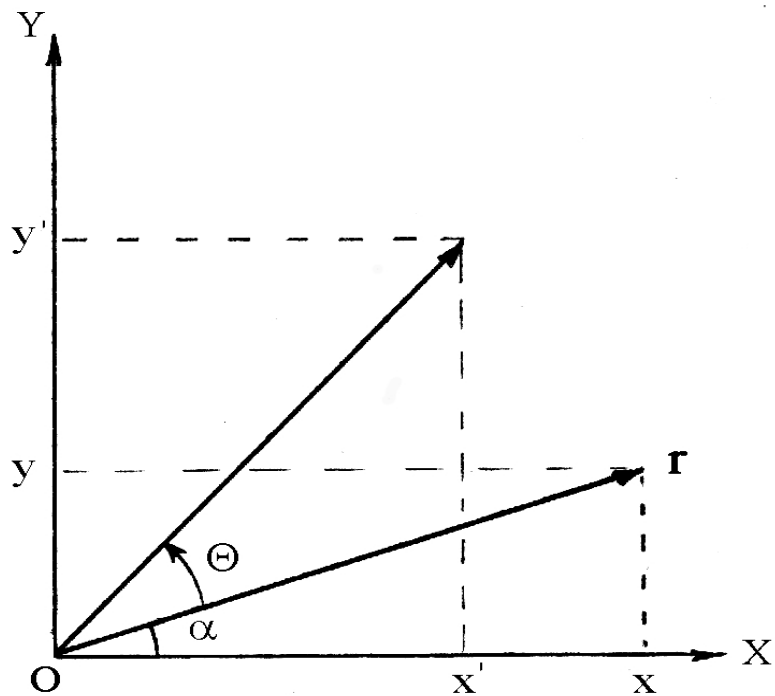
\mathbf{a}^i და \mathbf{b}^i - შებრუნებული მესრების საბაზისო ვექტორებია (კონტრავარიანტული ბაზისები).

x^i და y^i - ვექტორის კოორდინატებია პირდაპირ მესერში - მიმართულების ინდექსები (ანუ ვექტორის კონტრავარიანტული კოორდინატები), გარდაქმნამდე და გარდაქმნის შემდეგ, შესაბამისად.

x_i და y_i - ვექტორის კოორდინატები შებრუნებულ მესერში - სიბრტყის მიღერის ინდექსები (ანუ ვექტორის კოვარიანტული კოორდინატები), გარდაქმნამდე და გარდაქმნის შემდეგ, შესაბამისად.

2. ვექტორის ბრუნვა θ კუთხით საათის ისრის საწინააღმდეგოდ

ნებისმიერი \mathbf{r} ვექტორის კოორდინატები შემობრუნების შემდეგ შეიძლება გამოისახოს ამავე ვექტორის იმ კოორდინატების წრფივი კომბინაციით, რომელიც მას ჰქონდა შემობრუნებამდე. ფუნქციის სახით ჩაწერილი ეს ასახვა მოცემულია ქვემოთ იხ. A1-2.2. (აქ და ქვემოთ, განხილულია ორთონორმირებული კოორდინატთა სისტემის მაგალითები, ნახ. A1.2):



ნახ. A1.2

$$\begin{aligned} x' &= x \cos \theta - y \sin \theta \\ y' &= x \sin \theta + y \cos \theta \end{aligned} \quad (\text{A1-2.2})$$

სადაც x, y ვექტორის კომპონენტებია მობრუნებამდე, x', y' - იგივე ვექტორის კომპონენტები იმავე კოორდინატა სისტემაში, მობრუნების შემდეგ. მართლაც, ნახაზიდან ცხადია, რომ:

$$\begin{aligned} x' &= r \cos(\alpha + \theta) \\ y' &= r \cos(90 - \alpha - \theta) = r \sin(\alpha + \theta) \end{aligned}$$

კუთხეების ჯამის კოსინუსისა და სინუსის ფორმულების გათვალისწინებით მივიღებთ:

$$x' = r \cos \alpha \cos \theta - r \sin \alpha \sin \theta$$

$$y' = r \sin \alpha \cos \theta + r \sin \theta \cos \alpha$$

თუ გავითვალისწინებთ, რომ: $r \cos \alpha = x$ და $r \sin \alpha = y$,

მივიღებთ (A1-2.2) თანაფარდობებს. იგივე, მატრიცული ფორმით, ასე ჩაიწერება:

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

სამგანზომილებიანი შემთხვევისათვის z ღერძის მიმართ ბრუნვის მატრიცას შემდეგი სახე აქვს:

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

3. ბრუნვა θ კუთხით საათის ისრის მიმართულეობით (ჩაწერილი ფუნქციის სახით):

$$x' = x \cos \theta + y \sin \theta$$

$$y' = -x \sin \theta + y \cos \theta$$

იგივე მატრიცული ფორმით:

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

4. გაჭიმვა ან კუმშვა (ჩაწერილი ფუნქციის სახით):

$$x' = s_x \cdot x \quad \text{და} \quad y' = s_y \cdot y$$

იგივე, მატრიცული ფორმით:

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s_x & 0 \\ 0 & s_y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

5. ძვრა x ღერძის გასწვრივ (ჩაწერილი ფუნქციის სახით):

$$\begin{aligned} x' &= x + ky \\ y' &= y; \end{aligned}$$

იგივე, მატრიცული ფორმით:

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & k \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

6. ძვრა y ღერძის გასწვრივ (ჩაწერილი ფუნქციის სახით):

$$\begin{aligned} x' &= x \\ y' &= y + kx \end{aligned}$$

იგივე, მატრიცული ფორმით:

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ k & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}.$$

მატრიცული ალგებრის დებულებები, რომლებიც გამოყენებულია წინამდებარე სახელმძღვანელოში

1. მატრიცა

$m \cdot n$ რაოდენობის სიდიდეთა ერთობლიობა, განლაგებული m სტრიქონსა და n სვეტში:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} = (a_{ij}) = A$$

სადაც a_{ij} მატრიცის ელემენტია; თუ მატრიცა შედგება m სტრიქონისაგან და n სვეტისაგან, მას (m, n) განზომილების მატრიცა ეწოდება; როცა $m = n$ - მატრიცა კვადრატულია.

2. სტრიქონ-მატრიცა

n რაოდენობის სიდიდეთა ერთობლიობას, განლაგებულს ერთ სტრიქონში ისე, რომ ქმნის $(1, n)$ განზომილების მატრიცას, სტრიქონ-მატრიცა (ან ვექტორ-სტრიქონი) ეწოდება:

$$(a_1 \ a_2 \ \dots \ a_n)$$

3. სვეტ-მატრიცა

m სიდიდითა ერთობლიობას, რომლებიც ერთ სვეტშია განლაგებული და n სვეტის (m, n) განზომილების მატრიცას, სვეტ-მატრიცა (ან ვექტორ-სვეტი) ეწოდება:

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \cdot \\ a_n \end{pmatrix}$$

4. დიაგონალური მატრიცა

კვადრატული მატრიცა რომლის არადიაგონალური ელემენტები ნულის ტოლია. ე.ი. $a_{ij} = 0$, როცა $i \neq j$, ხოლო დიაგონალურ ელემენტს შეიძლება ნებისმიერი მნიშვნელობა ჰქონდეს.

5. ერთეულოვანი მატრიცა

დიაგონალური მატრიცა, რომლის ყველა დიაგონალური ელემენტი 1-ის ტოლია. ერთეულოვანი მატრიცა აღინიშნება E ან I ასოთი:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} \equiv \mathbf{I}$$

6. მატრიცის ტრანსპონირება

A მატრიცის ტრანსპონირებული არის A^T მატრიცა, რომლის სვეტები A -ს სტრიქონებს წარმოადგენს:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{pmatrix} \quad \text{მაშინ} \quad \mathbf{A}^T = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} \\ a_{12} & a_{22} \\ a_{13} & a_{23} \end{pmatrix}$$

შესაბამისად, სვეტ-მატრიცის ტრანსპონირება გვაძლევს სტრიქონ-მატრიცას, და პირიქით. მათ ელემენტებს შორის კი ასეთი კავშირია: $a_{ij} = a_{ji}^T$.

შევნიშნოთ, რომ $(A^{-1})^T = (A^T)^{-1}$, სადაც A^{-1} არის A -ს შებრუნებული მატრიცა (იხ. 14 აქვე).

7. სიმეტრიული და ანტისიმეტრიული მატრიცები

კვადრატულ მატრიცას, რომლისათვისაც $a_{ij} = a_{ji}$, ეწოდება სიმეტრიული, ხოლო თუ $a_{ij} = -a_{ji}$, ეწოდება ანტისიმეტრიული. სიმეტრიული მატრიცისათვის $A^T = A$, ხოლო ანტისიმეტრიულისათვის $A^T = -A$.

8. მატრიცის სკალარზე გამრავლება

$k \cdot A = A \cdot k = B$. ისე, რომ ყოველი $b_{ij} = k \cdot a_{ij}$. ასევე, $k \cdot (A + B) = k \cdot A + k \cdot B$.

9. მატრიცის მატრიცაზე გამრავლება

მატრიცების გადამრავლება ისეა განსაზღვრული, რომ ორი გარდაქმნის კომპოზიციის მარეზულტირებელი მატრიცა წარმოადგენდეს შესაბამისი გარდაქმნების მატრიცების ნამრავლს (იხ. დამატება 1). ერთი მატრიცა შეიძლება გამრავლდეს მეორეზე მხოლოდ იმ შემთხვევაში, როცა პირველის სვეტების რაოდენობა უდრის მეორის სტრიქონების რაოდენობას. მატრიცებს, რომლებიც ამ პირობებს აკმაყოფილებს ეწოდება შესაბამისი მატრიცები. თუ გვაქვს ორი შესაბამისი მატრიცა, მაშინ მათი ნამრავლი $AB = C$ ისე, რომ თუ A და B მატრიცების განზომილებებია (m, p) და (p, n) შესაბამისად, მაშინ, $c_{ij} = \sum a_{ik} b_{kj}$, სადაც $k = 1, 2 \dots p$, და C -ს განზომილებაა (m, n) . კვადრატული $(3,3)$ მატრიცების მაგალითი:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} \end{pmatrix}$$

მაშინ, $AB = C =$

$$= \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} + a_{12}b_{21} + a_{13}b_{31}, & a_{11}b_{12} + a_{12}b_{22} + a_{13}b_{32}, & a_{11}b_{13} + a_{12}b_{23} + a_{13}b_{33} \\ a_{21}b_{11} + a_{22}b_{21} + a_{23}b_{31}, & a_{21}b_{12} + a_{22}b_{22} + a_{23}b_{32}, & a_{21}b_{13} + a_{22}b_{23} + a_{23}b_{33} \\ a_{31}b_{11} + a_{32}b_{21} + a_{33}b_{31}, & a_{31}b_{12} + a_{32}b_{22} + a_{33}b_{32}, & a_{31}b_{13} + a_{32}b_{23} + a_{33}b_{33} \end{pmatrix}$$

10. მატრიცების გამრავლების რიგითობა

ზოგადად $\mathbf{AB} \neq \mathbf{BA}$, ე.ი. მატრიცული გამრავლების ოპერაცია არაკომუტაციურია. კერძო შემთხვევაში, თუ $\mathbf{AB} = \mathbf{BA}$, მაშინ \mathbf{A} და \mathbf{B} კომუტირებადი მატრიცებია. ერთეულოვანი მატრიცა კომუტირებადია ნებისმიერ იგივე განზომილების მატრიცასთან:

$$\mathbf{IA} = \mathbf{AI} = \mathbf{A}.$$

მატრიცების ნამრავლი \mathbf{AB} ითვლება \mathbf{B} მატრიცის \mathbf{A} -ზე მარცხნიდან ნამრავლად ან \mathbf{A} მატრიცის \mathbf{B} -ზე მარჯვნიდან ნამრავლად.

10ა. სვეტ-მატრიცის მარცხნიდან გამრავლება სტრიქონ-მატრიცაზე წარმოდგენილი მატრიცული ფორმალიზმით

ორთონორმირებულ სისტემაში (დეკარტის მართკუთხა კოორდინატთა სისტემა ერთეულოვანი საბაზისო ვექტორებით. იხ. დამატება 1) ორი, \mathbf{a} და \mathbf{b} ვექტორის სკალარული ნამრავლი წარმოდგენილი მატრიცული ფორმით შემდეგნაირად წარმოიდგინება:

$$\mathbf{a}^T \cdot \mathbf{b} = (a_1 \quad a_2 \quad a_3) \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} = (a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3) \quad (\text{A2-10.1})$$

აქ a_i და b_i შესაბამისად \mathbf{a} და \mathbf{b} ვექტორების გეგმილება შესაბამის საკოორდინატო ღერძებზე. ფორმულა (A2-10.1) გამოსახავს (1, 3) განზომილების მატრიცის ნამრავლს (3, 1) განზომილების მატრიცაზე (იხილეთ აქვე 9). ცხადია ამ ნამრავლის განზომილება იქნება: (1,3)·(3,1) = (1,1). ასე, რომ მათი ნამრავლი სკალარია. ამგვარად ეს არის ორი ვექტორის სკალარული ნამრავლის გამოსახულება ორთონორმირებულ კოორდინატთა სისტემაში (კრისტალოგრაფიული ტერმინოლოგიით, კუბურ სისტემაში).

აქვე შევნიშნოთ, რომ თუ გავითვალისწინებთ (1.25)-ს და (A2-10.5)-ს, და ასევე \mathbf{G} მატრიცის სიმეტრიულობას, არაორთონორმირებულ სისტემაში (კრისტალოგრაფიული ტერმინოლოგიით, კუბურის გარდა ყველა სისტემაში), აფინური კოორდინატებით (კონტრავარიანტული კოორდინატები) წარმოდგენილი ორი $\mathbf{u}(x^i)$ და $\mathbf{v}(y^i)$ ვექტორის სკალარული ნამრავლის ზოგად ფორმულას (1.17, 1.18) [4-8], სადაც

$$\mathbf{u} = x^1 \mathbf{a}_1 + x^2 \mathbf{a}_2 + x^3 \mathbf{a}_3$$

და

$$\mathbf{v} = y^1 \mathbf{a}_1 + y^2 \mathbf{a}_2 + y^3 \mathbf{a}_3 ,$$

დეკარტის განზოგადებულ კოორდინატთა სისტემაში აქვს შემდეგი სახე:

$$\begin{aligned} \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = & x^1 y^1 \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_1 + x^1 y^2 \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2 + x^1 y^3 \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_3 + x^2 y^1 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_1 + x^2 y^2 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_2 + x^2 y^3 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3 + \\ & + x^3 y^1 \mathbf{a}_3 \mathbf{a}_1 + x^3 y^2 \mathbf{a}_3 \mathbf{a}_2 + x^3 y^3 \mathbf{a}_3 \mathbf{a}_3 . \end{aligned}$$

მატრიცული ფორმალიზმის გათვალისწინებით (სტრიქონ-მატრიცის გამრავლება სვეტ-მატრიცაზე) ეს უკანასკნელი შეგვიძლია შემდეგი სახით წარმოვადგინოთ:

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = (x^1 x^2 x^3) \begin{pmatrix} y^1 \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_1 + y^2 \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2 + y^3 \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_3 \\ y^1 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_1 + y^2 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_2 + y^3 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3 \\ y^1 \mathbf{a}_3 \mathbf{a}_1 + y^2 \mathbf{a}_3 \mathbf{a}_2 + y^3 \mathbf{a}_3 \mathbf{a}_3 \end{pmatrix}$$

ან უფრო გამლილი სახით:

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = (x^1 x^2 x^3) \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2 & \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_3 \\ \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_2 & \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3 \\ \mathbf{a}_3 \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_3 \mathbf{a}_2 & \mathbf{a}_3 \mathbf{a}_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y^1 \\ y^2 \\ y^3 \end{pmatrix}$$

თუ გავითვალისწინებთ, რომ \mathbf{a}_i საბაზისო ვექტორების სკალარული ნამრავლები მეტრიკული ტენზორის კოვარიანტულ კომპონენტებს ქმნიან (იხ. 1.11), მაშინ, ბოლო ფორმულა შეიძლება შემდეგი კომპაქტური სახით წარმოვადგინოთ:

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = \mathbf{u}^T \mathbf{G} \mathbf{v} \tag{A2-10.2}$$

სადაც, \mathbf{u} და \mathbf{v} სვეტ-მატრიცებია, ხოლო \mathbf{G} - მეტრიკული ტენზორია. ამგვარად (A2-10.2) წარმოადგენს ორი ვექტორის სკალარული ნამრავლის ზოგად ფორმულას, ჩაწერილს მატრიცული სახით.

ცხადია, ორთონორმირებული სისტემისთვის (კუბური სისტემა) $\mathbf{G} = \mathbf{I}$, ერთეულოვანი მატრიცაა და (A2-10.2) იდენტურია (A2-10.1)-ის .

შესაბამისად, რომელიმე \mathbf{r} ვექტორის სიგრძის კვადრატი (ანუ, მისი სკალარული ნამრავლი თავის თავზე) მატრიცული სახით (A2-10.2)-ის ანალოგიურად ასე ჩაიწერება:

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{r} = (x^1 \quad x^2 \quad x^3) \mathbf{G} \begin{pmatrix} x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} \quad (\text{A2-10.3})$$

სადაც, \mathbf{r} - სვეტ-მატრიცაა.

შევადართ (A2-10.3) ჩაწერა (1.5.1)-სა და (1.6)-ს, და ვაჩვენოთ მათი იდენტურობა.

ამისათვის (A2-10.3) წარმოვადგინოთ გაშლილი სახით (იხ. აქვე 10ბ):

$$\begin{aligned} \mathbf{r} \cdot \mathbf{r} &= (x^1 \quad x^2 \quad x^3) \begin{pmatrix} g_{11}x^1 + g_{12}x^2 + g_{13}x^3 \\ g_{21}x^1 + g_{22}x^2 + g_{23}x^3 \\ g_{31}x^1 + g_{32}x^2 + g_{33}x^3 \end{pmatrix} = \\ &= g_{11}x^1x^1 + g_{12}x^1x^2 + g_{13}x^1x^3 + g_{21}x^2x^1 + g_{22}x^2x^2 + g_{23}x^2x^3 + g_{31}x^3x^1 + \\ &+ g_{32}x^3x^2 + g_{33}x^3x^3. \end{aligned}$$

მოკლე ჩაწერით კი, (1.22)-ის გათვალისწინებით, გვექნება:

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{r} = g_{ij}x^i x^j = x^i x_i. \quad (\text{A2-10.3.1})$$

სკალარული ნამრავლის წარმოდგენის ეს ფორმა იდენტურია (1.25)-სა. შესაბამისად, ვექტორის სკალარული ნამრავლი თავის თავზე (სიგრძის, მოდულის კვადრატი) შეიძლება წარმოვადგინოთ (A2-10.2, 10.3) მატრიცული ფორმით მეტრიკული ტენზორის გამოყენებით. კომპაქტურად (A2-10.3), ვექტორის მოდულის კვადრატი, მსგავსად (A2-10.2)-ისა ასე ჩაიწერება:

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{r} = \mathbf{r}^T \mathbf{G} \mathbf{r}.$$

10ბ. კვადრატული მატრიცის მარჯვნივ გამრავლება სვეტ-მატრიცაზე

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_{11} & \mathbf{a}_{12} & \mathbf{a}_{13} \\ \mathbf{a}_{21} & \mathbf{a}_{22} & \mathbf{a}_{23} \\ \mathbf{a}_{31} & \mathbf{a}_{32} & \mathbf{a}_{33} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \\ \mathbf{x}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}_{11}\mathbf{x}_1 + \mathbf{a}_{12}\mathbf{x}_2 + \mathbf{a}_{13}\mathbf{x}_3 \\ \mathbf{a}_{21}\mathbf{x}_1 + \mathbf{a}_{22}\mathbf{x}_2 + \mathbf{a}_{23}\mathbf{x}_3 \\ \mathbf{a}_{31}\mathbf{x}_1 + \mathbf{a}_{32}\mathbf{x}_2 + \mathbf{a}_{33}\mathbf{x}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \\ \mathbf{b}_3 \end{pmatrix}$$

ასე რომ, კვადრატული მატრიცის ნამრავლი სვეტ-მატრიცაზე მარჯვნივ გვაძლევს ასევე სვეტ-მატრიცას (ვექტორ-სვეტს). ამ შემთხვევაში ამ მატრიცების განზომილებები შემდეგ დამოკიდებულებაში არიან: (3,3)·(3,1)=(3,1). შესაბამისად, წრფივ განტოლებათა სისტემა შეიძლება კომპაქტურად ასე ჩაიწეროს [16,17,19,20]:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_{11}\mathbf{x}_1 + \mathbf{a}_{12}\mathbf{x}_2 + \mathbf{a}_{13}\mathbf{x}_3 &= \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{a}_{21}\mathbf{x}_1 + \mathbf{a}_{22}\mathbf{x}_2 + \mathbf{a}_{23}\mathbf{x}_3 &= \mathbf{b}_2 \\ \mathbf{a}_{31}\mathbf{x}_1 + \mathbf{a}_{32}\mathbf{x}_2 + \mathbf{a}_{33}\mathbf{x}_3 &= \mathbf{b}_3 \end{aligned} \qquad \mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$

აქ \mathbf{A} კვადრატული მატრიცაა, რომლის ელემენტებია \mathbf{a}_{ij} . \mathbf{x} და \mathbf{b} - სვეტ-მატრიცებია, ელემენტებით \mathbf{x}_i და \mathbf{b}_i შესაბამისად.

თუ მატრიცა მარჯვნივ მრავლდება ორი ვექტორის სკალარულ ნამრავლზე, ან უფრო ზუსტად, როცა სკალარული ნამრავლის პირველი ვექტორი მრავლდება მატრიცაზე მარცხნიდან, მაშინ ადგილი აქვს თანაფარდობას:

$$\mathbf{Aa} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{a} \cdot (\mathbf{A}^T \mathbf{b}) \tag{A2-10.5}$$

ანალოგიურად:
$$\mathbf{a} \cdot (\mathbf{A} \mathbf{b}) = (\mathbf{A}^T \mathbf{a}) \cdot \mathbf{b} \tag{A2-10.6}$$

11. მატრიცული გამრავლების ასოციაციურობა

რამდენიმე მატრიცის ნამრავლის შემთხვევაში მნიშვნელოვანია ასოციაციურობის თვისება:

$$ABC = A(BC) = (AB)C$$

ეს ნიშნავს, რომ ამ შემთხვევაში ფრჩხილების ხმარება აუცილებელი არ არის.

12. მატრიცების ნამრავლის ტრანსპონირება

$$(AB)^T = B^T A^T \quad \text{ასევე,} \quad (ABC)^T = C^T B^T A^T$$

13. მატრიცის დეტერმინანტი

ყოველ კვადრატულ მატრიცას $A = (a_{ij})$ ცალსახად შეესაბამება ნამდვილი ან კომპლექსური რიცხვი, რომელიც გარკვეული ალგორითმით გამოითვლება და ეწოდება A მატრიცის დეტერმინანტი - $\det A$. ზოგადი სახით A მატრიცის დეტერმინანტი შეიძლება გამოისახოს მისი ნებისმიერი სვეტის ან სტრიქონის ელემენტებისა და შესაბამისი ალგებრული დამატებების ნამრავლების ჯამის სახით [1,16,17,19-25] :

$$\det(A) = \sum_{i=1}^n a_{ij} A_{ij} \quad \text{ან} \quad \sum_{k=1}^n a_{jk} A_{jk}$$

სადაც $j=1,2,3,4 \dots n$ და A_{ji} შესაბამისი ალგებრული დამატებებია [1,17,ER1]. მაგალითად, i -ური სტრიქონის მიხედვით გაშლის შემთხვევაში,

$$\det(A) = a_{i1}A_{i1} + a_{i2}A_{i2} + \dots + a_{in}A_{in}$$

კონკრეტულად, (2,2) განზომილების მატრიცისათვის დეტერმინანტის გამოთვლის წესი შემდეგ ალგორითმამდე დაიყვანება:

$$\det \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$$

ასევე, (3,3) განზომილების მატრიცისათვის:

$$\det \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = a_{11}(a_{22}a_{33} - a_{23}a_{32}) - a_{12}(a_{21}a_{33} - a_{23}a_{31}) + a_{13}(a_{21}a_{32} - a_{22}a_{31})$$

თუ \mathbf{A} და \mathbf{B} ერთი და იგივე განზომილების კვადრატული მატრიცებია, მაშინ

$$\det(\mathbf{AB}) = \det\mathbf{A} \cdot \det\mathbf{B}. \quad \text{ასევე, } \det\mathbf{A} = \det(\mathbf{A}^T).$$

ასევე, შესაძლებელია მატრიცის დეტერმინანტის გამოთვლა მატრიცის კვალის საშუალებით (იხ. აქვე 15). კერძოდ, (2,2) განზომილების მატრიცისათვის:

$$\det(\mathbf{A}) = \frac{\text{tr}(\mathbf{A})^2 - \text{tr}(\mathbf{A}^2)}{2}$$

(3,3) მატრიცისათვის:

$$\det(\mathbf{A}) = \frac{\text{tr}(\mathbf{A})^3 - 3\text{tr}(\mathbf{A})\text{tr}(\mathbf{A}^2) + 2\text{tr}(\mathbf{A}^3)}{6};$$

14. შებრუნებული მატრიცა

თუ \mathbf{A} კვადრატული მატრიცაა და არსებობს ისეთი მატრიცა, რომ $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = \mathbf{I}$, მაშინ \mathbf{B} -ს ეწოდება \mathbf{A} -ს შებრუნებული და აღინიშნება \mathbf{A}^{-1} . ანუ, $\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^{-1} = \mathbf{I}$. შევნიშნოთ, რომ $(\mathbf{A}^{-1})^{-1} = \mathbf{A}$ და $(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})^{-1} = \mathbf{B}^{-1} \cdot \mathbf{A}^{-1}$. ასევე, $(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \cdot \mathbf{C})^{-1} = \mathbf{C}^{-1} \cdot \mathbf{B}^{-1} \cdot \mathbf{A}^{-1}$

(იხილეთ აგრეთვე 6 და 12). ყოველ \mathbf{A} მატრიცას, რომლის $\det\mathbf{A} \neq 0$, აქვს თავისი შებრუნებული მატრიცა. შებრუნებული მატრიცის ელემენტი ტოლია:

$(\mathbf{A}^{-1})_{ij} = (1/\det\mathbf{A})(-1)^{i+j} M_{ji}$, სადაც, M_{ij} არის \mathbf{A} მატრიცის $(\mathbf{A})_{ij}$ ელემენტის მინორი, და გამოითვლება \mathbf{A} მატრიციდან i -ური სტრიქონისა და j -ური სვეტის „ამოშლის“ შემდეგ.

კონკრეტულად, შებრუნებული მატრიცა (2,2) განზომილების მატრიცისათვის:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \quad \text{იქნება} \quad \mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{\det \mathbf{A}} \begin{pmatrix} a_{22} & -a_{12} \\ -a_{21} & a_{11} \end{pmatrix}$$

ან ასეთი ალგორითმით:

$$\mathbf{A}^{-1} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}^{-1} = \frac{1}{ad - bc} \begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix}.$$

(3,3) განზომილების მატრიცისათვის:

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{\det \mathbf{A}} \begin{pmatrix} a_{22}a_{33} - a_{23}a_{32} & a_{13}a_{32} - a_{12}a_{33} & a_{12}a_{23} - a_{22}a_{13} \\ a_{23}a_{31} - a_{21}a_{33} & a_{11}a_{33} - a_{13}a_{31} & a_{13}a_{21} - a_{11}a_{23} \\ a_{21}a_{32} - a_{22}a_{31} & a_{12}a_{31} - a_{11}a_{32} & a_{11}a_{22} - a_{21}a_{12} \end{pmatrix}$$

ან შემდეგი ალგორითმით:

$$\mathbf{A}^{-1} = \begin{bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & k \end{bmatrix}^{-1} = \frac{1}{Z} \begin{bmatrix} A & B & C \\ D & E & F \\ G & H & K \end{bmatrix}^T = \frac{1}{Z} \begin{bmatrix} A & D & G \\ B & E & H \\ C & F & K \end{bmatrix}$$

სადაც, $Z = a(ek - fh) + b(fg - kd) + c(dh - eg)$

და

$$\begin{aligned} A &= (ek - fh) & D &= (ch - bk) & G &= (bf - ce) \\ B &= (fg - dk) & E &= (ak - cg) & H &= (cd - af) \\ C &= (dh - eg) & F &= (bg - ah) & K &= (ae - bd) \end{aligned}$$

14.1 ორთოგონალური მატრიცა

კვადრატულ მატრიცას ეწოდება ორთოგონალური, თუ $\mathbf{A}^T = \mathbf{A}^{-1}$ ანუ $\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \mathbf{I}$ (იხილეთ ასევე 7), და ორთოგონალური მატრიცისათვის $\det \mathbf{A} = \pm 1$. შესაბამისად, წრფივ გარდაქმნას, რომელიც უცვლელს ტოვებს ვექტორის სიგრძეს, ანუ სკალარულ ნამრავლს - შიდა პროდუქტს (და შესაბამისად კუთხეს ვექტორებს შორის, და საბაზისო ვექტორებზე აგებული ელემენტარული უჯრედის მოცულობას, ე.ი. $\det \mathbf{A} = \pm 1$), ეწოდება ორთოგონალური გარდაქმნა [1,3-8, ER2], ხოლო შესაბამის მატრიცას - ორთოგონალური მატრიცა. ორთოგონალური მატრიცების მაგალითებია:

იდენტური გარდაქმნის მატრიცა:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ბრუნვა

მაგალითად, $16,26^\circ$ -ით (ორგანზომილებიანი ორთონორმირებული კოორდინატთა სისტემის მაგალითი; იხ. ასევე დამატება 1):

$$\begin{pmatrix} 0.96 & -0.28 \\ 0.28 & 0.96 \end{pmatrix}$$

არეკვლა

z ღერძის მართობ სიბრტყეში (სამგანზომილებიანი მართკუთხა კოორდინატთა სისტემის მაგალითი):

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

15. მატრიცის კვალი

კვადრატული მატრიცის ყველა დიაგონალური ელემენტის ჯამს მატრიცის კვალი ეწოდება: $\text{trM} = \sum m_{ii}$. ასევე, $\text{trAB} = \text{trBA}$. თუ $\mathbf{AB} = \mathbf{C}$, მაშინ $\text{trA trB} = \text{trC}$.

$\text{trM} = \sum \lambda_i$, სადაც λ_i გარდაქმნის \mathbf{M} მატრიცის საკუთრივი მნიშვნელობებია და ინვარიანტულია ბაზისის მიმართ [1, 22-25]. ასევე, თუ \mathbf{A} არის φ კუთხით მობრუნების

მატრიცა მაშინ, $\cos \varphi = \pm \frac{\text{trA} - 1}{2}$.

16. წრფივი გარდაქმნის საკუთრივი ვექტორი და საკუთრივი მნიშვნელობა

თუ რომელიმე $\mathbf{v} \neq 0$ ვექტორი რომელიმე წრფივი სივრცის ვექტორია და რომელიმე წრფივ \mathbf{A} გარდაქმნას იგი გადაჰყავს მის კოლინეარულ (პროპორციულ) ვექტორში, მაშინ არსებობს ისეთი რიცხვი λ (ზოგად შემთხვევაში კომპლექსური), რომ

$$\mathbf{Av} = \lambda \mathbf{v} \quad (\text{A2-16.1})$$

ამ შემთხვევაში \mathbf{v} ვექტორს ეწოდება \mathbf{A} გარდაქმნის საკუთრივი ვექტორი და λ -ს კი საკუთრივი მნიშვნელობა. შევნიშნოთ, რომ რადგან $\mathbf{v} \neq 0$, ამიტომ \mathbf{v} -ს პოვნა შესაძლებელია (A2-16.1) განტოლებიდან, ანალიზური გეომეტრიიდან ცნობილი სტანდარტული წესით [21-25, ER1, ER2]; ასევე, ნულოვანი ვექტორი არ ითვლება \mathbf{A} გარდაქმნის საკუთრივ ვექტორად, თუმცა იგი აკმაყოფილებს (A2-16.1) ტოლობას ნებისმიერი λ -სათვის [21-25, ER1, ER2].

17. მსგავსი მატრიცები; მსგავსობის გარდაქმნა

ზოგჯერ ვექტორის რომელიმე წრფივი გარდაქმნის განხორციელება უფრო ხელსაყრელია ამა თუ იმ განსაზღვრულ კოორდინატთა სისტემაში და არა იმ სისტემაში, რომელშიც იგი

მოცემულია. ამიტომ, თუ ვექტორს წინასწარ გადავიყვანთ ამ ახალ სისტემაში სპეციალური გარდაქმნის მატრიცის (\mathbf{u}) საშუალებით, რომელიც აკავშირებს პირველ და მეორე სისტემების საბაზისო ვექტორებს, ჩავატარებთ გარდაქმნას (\mathbf{A}) ამ ახალ სისტემაში და დავაბრუნებთ გარდაქმნის პროდუქტს (\mathbf{u}^{-1} -ის საშუალებით) ისევ საწყის სისტემაში, მაშინ შედეგად მივიღებთ იგივე გარდაქმნის პროდუქტს, მხოლოდ საწყის სისტემაში წარმოდგენილს. ამ ოპერაციების მარეზულტირებელ მატრიცას (\mathbf{B}) შემდეგი სახე ექნება:

$$\mathbf{B} = \mathbf{u}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{u} \quad (\text{A2-16.2})$$

სადაც \mathbf{A} და \mathbf{B} მატრიცებს მსგავსი მატრიცები ეწოდება, ხოლო (A2-16.2) გარდაქმნას – მსგავსობის გარდაქმნა [4, 8,16,19,24,25]. ასე რომ, \mathbf{A} და \mathbf{B} მატრიცები წარმოადგენს ერთი და იმავე წრფივ გარდაქმნას სხვადასხვა ბაზისებში და \mathbf{u} ამ ბაზისებს შორის გარდაქმნის მატრიცაა. ასევე,

$$\det \mathbf{A} = \det \mathbf{B}.$$

ჯგუფთა თეორიის ელემენტები

1. ძირითადი დებულებები (კურსში განხილულ თემატიკასთან მიმართებაში)

ზოგადად არაცარიელ $G(a,b,c,d..)$ სიმრავლეს ეწოდება ჯგუფი, თუ მასში განსაზღვრულია ცალსახა, ბინარული ოპერაცია (\circ), რომლის განხორციელების შედეგად დაცულია შემდეგი პირობები (აქსიომები) [3,26, ER2]:

1. G სიმრავლის ყოველი ორი ელემენტისაგან მიიღება ელემენტი, რომელიც იმავე სიმრავლეს ეკუთვნის. ე.ი. ჯგუფის ყველა ელემენტისათვის სრულდება ასეთი ტიპის თანაფარდობა:

$$a \circ b = c$$

2. ოპერაცია ასოციაციურია

$$a \circ (b \circ c) = (a \circ b) \circ c$$

3. G სიმრავლეში არსებობს ერთი და მხოლოდ ერთი ელემენტი E , რომელიც ჯგუფის ნებისმიერ ელემენტთან აკმაყოფილებს შემდეგ პირობას:

$$E \circ a = a, \quad a \circ E = a \quad E \circ E = E$$

და მას ჯგუფის *ერთეულოვანი* ან *ნეიტრალური ელემენტი* ეწოდება.

4. G სიმრავლეში ნებისმიერი a ელემენტისათვის არსებობს მისი სიმეტრიული (შებრუნებული, მოპირდაპირე) ერთადერთი ელემენტი a^{-1} , რომელიც ამავე სიმრავლეს ეკუთვნის და აკმაყოფილებს შემდეგ პირობას:

$$a \circ a^{-1} = a^{-1} \circ a = E$$

ელემენტების რაოდენობას ჯგუფში მისი რიგი ეწოდება. როგორც აღვნიშნეთ, ზოგადად ჯგუფური ოპერაცია (\circ - რომლის მიმართაც სიმრავლე ჯგუფს წარმოადგენს) არაკომუტაციურია ე.ი. $a \circ b \neq b \circ a$. თუმცა, კერძო შემთხვევაში შეიძლება არსებობდეს ოპერაცია, რომლის მიმართაც ჯგუფის ყველა ელემენტი კომუტაციურია. მაშინ ჯგუფს, რომელიც ამ ოპერაციით იქმნება, *აბელური* ან კომუტაციური ჯგუფი ეწოდება.

მაგალითად, მთელ რიცხვთა და, ასევე, ნამდვილ რიცხვთა, სიმრავლეები აბელურ ჯგუფებს წარმოადგენს ჩვეულებრივი არითმეტიკული შეკრების მიმართ.

განვიხილოთ ჯგუფის მაგალითები:

1. ნამდვილ რიცხვთა ერთობლიობა, რომელზედაც განსაზღვრულია ჩვეულებრივი არითმეტიკული შეკრების ოპერაცია, აკმაყოფილებს ჯგუფის ყველა თვისებას. კერძოდ:

ნებისმიერი ორი ნამდვილი რიცხვის ჯამი ისევ ნამდვილი რიცხვია;

არსებობს ნეიტრალური ელემენტი - რიცხვი 0 (ნული);

ყოველ ნამდვილ რიცხვს შეესაბამება მისი მოპირდაპირე ნამდვილი რიცხვი (არითმეტიკული გაგებით);

2. ამავე სიმრავლეზე, მაგალითად, არითმეტიკული გამრავლების ოპერაცია ჯგუფს არ ქმნის, რადგან არ არსებობს ამ სიმრავლეში შემავალი ერთ-ერთი ელემენტის, კერძოდ 0 რიცხვის შებრუნებული. თუ განვიხილავთ ამავე სიმრავლეს ნულის გამოკლებით, მაშინ აქ გამრავლების ოპერაცია უკვე ჯგუფს ქმნის, ნეიტრალური ელემენტით, 1.

2. სიმეტრიული გარდაქმნები სამგანზომილებიან სივრცეში

ახლა თუ დავუბრუნდებით მოცემულ კურსში განხილულ წრფივ გარდაქმნებს, კერძოდ სიმეტრიულ გარდაქმნებს სამგანზომილებიან სივრცეში, რომლებიც წრფივ ორთოგონალურ გარდაქმნებს წარმოადგენს და გამოისახება (3,3) განზომილების მატრიცებით (იხ. დამატება 1 და 2.14.1), აქაც შეგვიძლია განვმარტოთ ჯგუფის ცნება, ვინაიდან მატრიცათა გამრავლება ჯგუფის ყველა თვისებას აკმაყოფილებს.

მაგალითად, თუ მოცემულია წრფივ ორთოგონალურ გარდაქმნათა რაიმე ერთობლიობა, რომელიც შეიცავს გარდაქმნათა სასრულ ან უსასრულო სიმრავლეს, მაშინ გარდაქმნათა ეს ერთობლიობა შეადგენს ჯგუფს [1,3,4,8,26] თუ:

1. ორი გარდაქმნის (**A** და **B**) მიმდევრობა, რომლებიც ეკუთვნის აღნიშნულ ერთობლიობას და წარმოადგენს წრფივ ორთოგონალურ გარდაქმნათა მატრიცებს, გვაძლევენ გარდაქმნას, რომელიც ისევე ამ ერთობლიობას ეკუთვნის

$$\mathbf{C} = \mathbf{AB}$$

2. დაცულია ასოციაციურობის პირობა: $\mathbf{A(BC)} = (\mathbf{AB})\mathbf{C}$

3. გარდაქმნათა ერთობლიობაში არსებობს ერთი და მხოლოდ ერთი ისეთი გარდაქმნა, რომელიც ნებისმიერ გარდაქმნას ამ ერთობლიობიდან უცვლელად ტოვებს. ეს არის ე.წ. იგივეური გარდაქმნა, **E** (ან **I**, როგორც ეს კრისტალოგრაფიული ნომენკლატურით არის მიღებული) და მას ერთეულოვანი მატრიცა შეესაბამება (იხ. დამატება 2). ერთეულოვანი ელემენტად ვიღებთ სწორედ ამ იგივეურ გარდაქმნას, რომელიც ობიექტს ტოვებს უცვლელად,

$$\mathbf{AI} = \mathbf{IA} = \mathbf{A}$$

4. ამ ერთობლიობაში შემავალი გარდაქმნების შებრუნებული გარდაქმნებიც (მაგ. \mathbf{A}^{-1}) ამ ერთობლიობას ეკუთვნის, და აკმაყოფილებს შემდეგ პირობას:

$$\mathbf{AA}^{-1} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{I}$$

თუ მოცემულ ჯუფში შემავალი გარდაქმნების რომელიმე ნაწილი აგრეთვე, თავის მხრივ, შეადგენს ჯგუფს (1, 2, 3, 4 პირობების მიხედვით), მაშინ ამ უკანასკნელს ეწოდება მოცემულის ქვეჯგუფი.

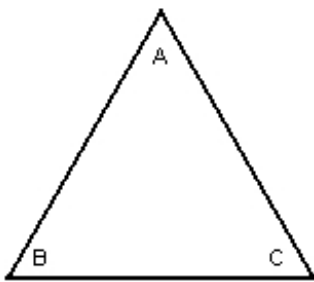
ნებისმიერი ორი წრფივი ორთოგონალური გარდაქმნის თანმიმდევრული მოქმედება გვაძლევს ახალ წრფივ გარდაქმნას, რომლის მატრიცაც მიიღება პირველი ორი გარდაქმნის მატრიცების გადამრავლების გზით [3-8] (იხ. დამატებები 1 და 2).

როგორც აღვნიშნეთ, სამგანზომილებიანი სივრცის წრფივ ორთოგონალურ გარდაქმნებს ჯგუფის ელემენტების ზემოთ მოყვანილი თვისებები გააჩნია [4] (იხ. ასევე დამატება 2.14.1). კრისტალოგრაფიაში ასეთ გარდაქმნებს მიეკუთვნება სიმეტრიული გარდაქმნები და მათი შესაბამისი შებრუნებული გარდაქმნები - ასევე წრფივი და ორთოგონალური [3-8], (იხ. დამატება 2.14.1).

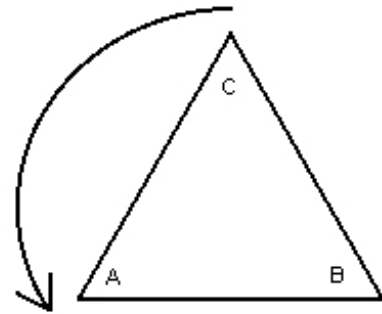
მაგალითად, სამგანზომილებიან სივრცეში ნებისმიერი ობიექტის ბრუნვათა ერთობლიობა უძრავი ღერძის მიმართ შეადგენს ჯგუფს. მაგალითად, თუ გვაქვს ორი ბრუნვა α და β კუთხეებით, ამ ბრუნვათა მიმდევრობითი განხორციელება მოგვცემს ობიექტის $\alpha + \beta$

კუთხით მობრუნებას. ერთეულოვანი ელემენტის ფუნქცია აქ ასრულებს $0^\circ(n360^\circ)$ -ით ბრუნვა, სადაც n მთელი რიცხვია.

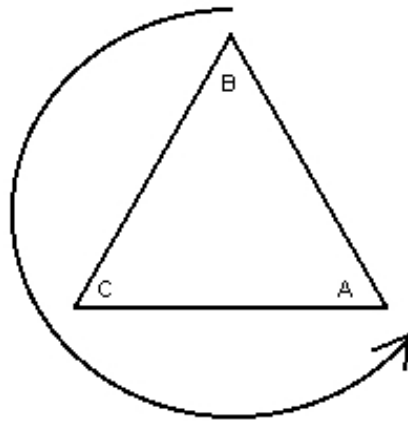
ასეთი ჯგუფის ერთ-ერთი მარტივი მაგალითია ტოლგვერდა სამკუთხედის ბრუნვა მის ცენტრში, სამკუთხედის სიბრტყის მართობულად აღმართული ღერძის ირგვლივ (იხ. ქვემოთ მოყვანილი ნახაზები, A3-1). ასეთი სამკუთხედის ყველა წვერო ეკვივალენტურია. აღნიშვნები გაკეთებულია მხოლოდ მათ გასარჩევად.



1.



2.



3.

ნახ. A3-1

ყოველი შემოხუნება $2\pi/3$ -ის ჯერადი კუთხით ($120^\circ, 240^\circ, 360^\circ(0^\circ)$), მაგალითად საათის ისრის მოძრაობის საწინააღმდეგო მიმართულებით, ამ ობიექტს თავის თავთან ათავსებს (ნახ. A3-1: 1 - 0° ($n360^\circ$); 2 - 120° ; 3 - 240°). ჯგუფში სამი ელემენტია. აღვნიშნოთ ისინი **E**, **A** და **B**-ით, შესაბამისად. ერთეულოვანი ელემენტის ფუნქციას ასრულებს $0^\circ(360^\circ)$ -ით ბრუნვა, ანუ იგივე გარდაქმნა - **E** (ან **I**). ამ ჯგუფის ელემენტები წარმოადგენს ბრუნვის ოპერაციებს. ამ ბრუნვათა ერთობლიობიდან ნებისმიერი ორი ბრუნვის მიმდევრობით განხორციელება გვაძლევს მესამე ელემენტის შესაბამის ბრუნვას:

$$A I = I A, \quad B I = I B, \quad AB = BA = I,$$

ასევე, $A^2 = B, \quad A^3 = I$

განხილულ მაგალითში საინტერესოა, რომ ჯგუფის ყველა ელემენტი მისი ერთ-ერთი ელემენტის (**A**) ხარისხებს წარმოადგენს. ასეთ ჯგუფს *ციკლური* ეწოდება, ხოლო იმ ელემენტს, რომელთა ხარისხებს წარმოადგენს ჯგუფის სხვა ელემენტები, ეწოდება *გენერატორი*. იმ შემთხვევაში, როცა ჯგუფი არ არის ციკლური, შეიძლება გამოიყოს ამავე ჯგუფის რამდენიმე ელემენტი, რომელთა ხარისხები და/ან ნამრავლები გვაძლევს მოცემული ჯგუფის ყველა ელემენტს. მათ მოცემული ჯგუფის გენერატორები ეწოდება (იხ. ქვემოთ).

ამგვარად, განხილული მესამე რიგის ჯგუფი შედგება ელემენტებისაგან: **A**, **A**², **A**³ = **I**. იგი ციკლურია და ამავე დროს აბელური, რადგან ჯგუფის ნებისმიერი ორი ელემენტის ნამრავლი კომუტაციურია. ზოგადად, ყველა ციკლური ჯგუფი აბელურია.

3. სიმეტრიის ოპერაციების, როგორც ჯგუფის ელემენტების მატრიცული წარმოდგენა

კრისტალოგრაფიული ნომენკლატურის მიხედვით, სიმეტრიის ოპერაციები ცალსახად წარმოიდგინება (3,3) მატრიცების საშუალებით [3-8, 36], რომლებიც შესაბამისი სიმეტრიის ელემენტის სიმბოლოებით აღინიშნება. ჯგუფის ელემენტებს, რომლებიც ამ შემთხვევაში სიმეტრიის ელემენტებს წარმოადგენს, აღვნიშნავთ იგივე სიმბოლოთი, რომელიც გამოიყენება სიმეტრიის ელემენტებისათვის კრისტალოგრაფიაში. სიმეტრიის ოპერაციის განხორციელება ამ შემთხვევაში, ნიშნავს შესაბამისი მატრიცის გამრავლებას იმ წერტილის კოორდინატებზე, რომლის გარდაქმნასაც ვახდენთ. თვით წერტილის კოორდინატები კი (3,1) სვეტ-მატრიცის (ვექტორ-სვეტის) სახით არის წარმოდგენილი. ამ შემთხვევაში სიმეტრიის ოპერაციების შესაბამისი მატრიცების გამრავლება შეესაბამება ჯგუფის ელემენტების გამრავლებას. ქვემოთ იხილეთ მაგალითები.

3.1. ინვერსიის ოპერაციას C (კრისტალოგრაფიული საერთაშორისო აღნიშვნით \bar{I}), წერტილის (ინვერსიის ცენტრის) მიმართ ასახვას, ნებისმიერი წერტილის (x, y, z) კოორდინატები გადაჰყავს $(-x, -y, -z)$ -ში. მატრიცული სახით გვექნება (იხ. დამატებები 1 და 2):

$$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x \\ -y \\ -z \end{bmatrix}$$

3.2. იდენტურობის გარდაქმნა - I (კრისტალოგრაფიული სიმეტრიის ელემენტის შესაბამისი საერთაშორისო აღნიშვნით - I , რაც შეესაბამება პირველი რიგის სიმეტრიის ღერძს [3-8,11]), რომელიც წერტილს საწყის პოზიციაში აბრუნებს (ტოვებს):

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

3.3. სარკული არეკვლა x, y სიბრტყეში - m_z (ორთოგონალური კოორდინატთა სისტემა):

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ y \\ -z \end{bmatrix}$$

3.4. სარკული არეკვლა x, z სიბრტყეში - m_y (ორთოგონალური კოორდინატთა სისტემა):

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ -y \\ z \end{bmatrix}$$

3.5. სარკული არეკვლა y, z სიბრტყეში - m_x (ორთოგონალური კოორდინატთა სისტემა):

$$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

3.5.1. სარკული არეკვლა z -ის პარალელურ და x და y ღერძებს შორის გამავალ სიბრტყეში - ე.წ. დიაგონალურ სიბრტყეში, m_{xy} (ორთონორმირებული კოორდინატთა სისტემა):

$$\begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

3.6. ბრუნვა ϕ კუთხით z ღერძის მიმართ, საათის ისრის მოძრაობის მიმართულებით C_n (ორთოგონალური კოორდინატთა სისტემა. იხ. დამატება 1). კრისტალოგრაფიაში ყოველთვის დაცულია პირობა, რომ $\phi = 2\pi/n$ და n მთელი რიცხვია:

$$\begin{bmatrix} \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z \end{bmatrix} \quad (\text{A3-1})$$

კერძო შემთხვევაში, როდესაც $\phi = 180^\circ$, ე.ი. გვაქვს მეორე რიგის სიმეტრიის ღერძი, (2_z), მაშინ ეს მატრიცა მიიღებს შემდეგ სახეს:

$$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{A3-1.1})$$

რაც იმას მიუთითებს, რომ მეორე რიგის ღერძი საკოორდინატო z ღერძს ემთხვევა.

3.7. ϕ კუთხით ბრუნვისა და ბრუნვის ღერძის მართობ სიბრტყეში არეკვლის ოპერაციების კომბინაცია: $S_n = C_n \cdot m_h$. ეს ნამრავლი, სიმეტრიის ოპერატორების მატრიცული ნამრავლის სახით, შემდეგნაირად არის წარმოდგენილია A3-3):

$$\begin{bmatrix} \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x' \\ y' \\ -z \end{bmatrix} \quad (\text{A3-2})$$

S_n

ქვემოთ მოყვანილ კერძო შემთხვევაში ეს ნიშნავს z ღერძის მიმართ $\phi = 2\pi/n$ კუთხით ბრუნვისა (C_n) და x, y სიბრტყეში არეკვლის (m_z) ოპერაციების კომბინაციას:

$$S_n = \begin{bmatrix} \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (\text{A3-3})$$

C_n

m_z

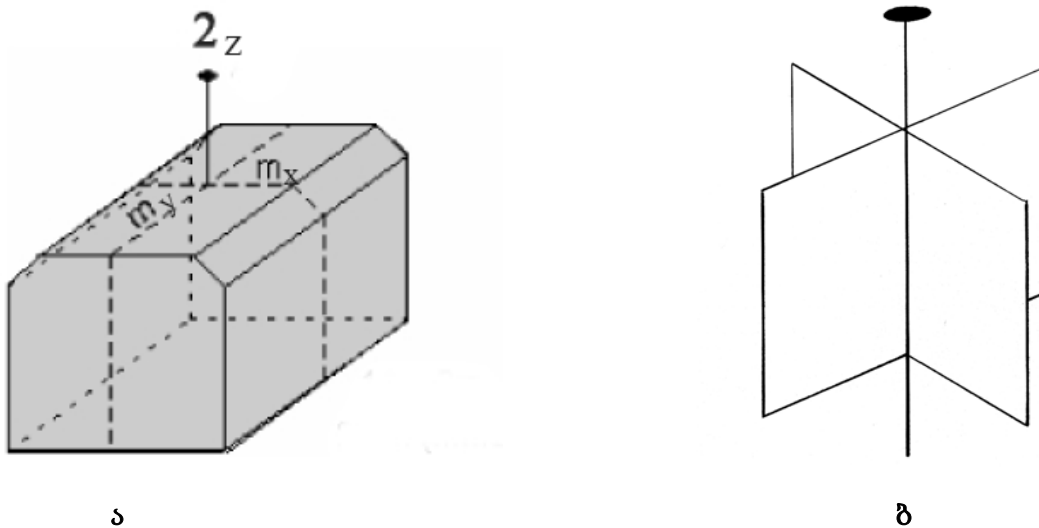
საინტერესოა, რომ ლუწი ღერძების შემთხვევაში ეს კომბინაცია სიმეტრიის ცენტრს, ანუ ინვერსიის ოპერაციას წარმოქმნის. განვიხილოთ ეს მეორე რიგის ღერძის მაგალითზე: $\phi = 180^\circ$ -ით z ღერძის მიმართ ბრუნვა (იხილეთ ზემოთ), მაშინ სიმეტრიის ოპერატორების, როგორც ჯგუფის ელემენტების ნამრავლი $2_z \circ m_z$ მათი მატრიცული წარმოდგენებით, შემდეგი სახისაა:

$$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (\text{A3-3.1})$$

კრისტალოგრაფიაში სიმეტრიის ელემენტთა ასეთი კომბინაცია ქმნის ჯგუფს და აღინიშნება სიმბოლოთი $2/m$. თუ დავაკვირდებით მარეზულტირებელ მატრიცას, იგი ინვერსიის (სიმეტრიის ცენტრის) ოპერაციას წარმოადგენს [3-8,11].

3.8. ϕ კუთხით ბრუნვისა და ბრუნვის ღერძის პარალელური სიმეტრიის სიბრტყის კომბინაცია (ღერძი სიბრტყეში ძევს). ამ ჯგუფის გამოყვანა უფრო დეტალურად ძირითად ტექსტშია მოცემული (პარ. 3.2.2)

მაგალითისათვის განვიხილოთ კრისტალოგრაფიული სიმეტრიის წერტილოვანი ჯგუფი $mm2$ (ან $2mm$; სიმეტრიის სრული ფორმულა $L_2 2P$ [3-8,11]), რომელიც შეიცავს მეორე რიგის სიმეტრიის ღერძს და ორ სიმეტრიის სიბრტყეს, რომელთა გადაკვეთის წრფე ამ ღერძს ემთხვევა (იხ. ნახაზი A3-2).



ნახ. A3-2. ა- $mm2$ წერტილოვანი ჯგუფის შესაბამისი მრავალწახნაგა; ბ - სიმეტრიის ელემენტების სივრცული განლაგება.

ქვემოთ მოყვანილი სიმეტრიის ოთხი ელემენტის შესაბამისი მატრიცა აღწერს ყველა შესაძლო სიმეტრიის ოპერაციას $mm2$ წერტილოვან ჯგუფში, რომლებიც მოქმედებს წერტილზე კოორდინატებით x, y, z . სიმეტრიის ელემენტების შესაბამისი მატრიცების

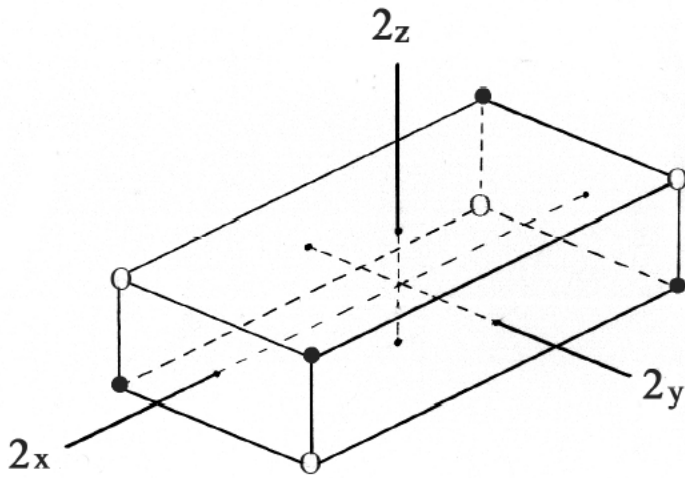
ერთობლიობას, რომელიც სიმეტრიის ელემენტებისაგან შედგენილი ჯგუფის მატრიცული ასახვაა, ეწოდება ჯგუფის სრული წარმოდგენა. განხილულ შემთხვევაში ეს ერთობლიობაა:

$$\begin{matrix}
 \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\
 I & Z_z & m_y & m_x
 \end{matrix}$$

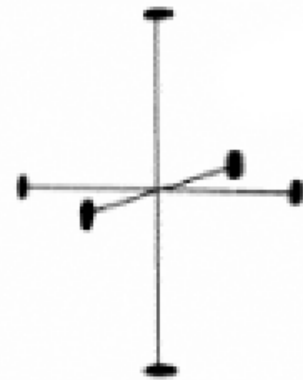
და ეწოდება $mm2$ წერტილოვანი ჯგუფის სრული წარმოდგენა. თუ დავაკვირდებით მატრიცათა ამ ერთობლიობას, შეიძლება გამოვყოთ ორი მათგანი, კერძოდ Z_z და m_x , რომელთა ნამრავლი წარმოქმნის მესამე ელემენტის (m_y) შესაბამის მატრიცას. შესაბამისად, Z_z და m_x ამ ჯგუფის გენერატორებია.

3.9. ასევე, ჯგუფთა თეორიაში კარგად ცნობილ კლაინის მეოთხე რიგის ჯგუფს, რომელიც ამავე დროს მეოთხე რიგის მინიმალური ჯგუფია, კრისტალოგრაფიაში შეესაბამება რომბული სინგონიის წერტილოვანი სიმეტრიის ჯგუფი 222 (სრული ფორმულა $3L_2$), რომლის საერთაშორისო აღნიშვნა (სიმბოლო) [36] მიუთითებს, რომ სამი მეორე რიგის ღერძი ქმნის ნახ. A3-3 -ზე მოცემულ კომბინაციას.

ეს ჯგუფი წარმოდგენილია ყველა შესაძლო ბრუნვათა ერთობლიობით, რომელთაც მართკუთხა პარალელებიპედი გადაჰყავს თავის თავში. ცხადია, გარდა იგივერი გარდაქმნისა (I), იგი შეიცავს სამ ბრუნვას 180° -ით, შესაბამისად, x , y და z ღერძების მიმართ. ვინაიდან თითოეული მეორე რიგის ბრუნვის ღერძი საკოორდინატო ღერძზე ძევს, მათი აღნიშვნებია Z_x , Z_y , Z_z და შემდეგი თანაფარდობებია დაცული:



ა



222

ბ

ნახ. A3-3. ა - სტრუქტურულ ერთეულთა 222 წერტილოვანი ჯგუფის შესაბამისი კონფიგურაცია; ბ - სიმეტრიის ელემენტების სივრცული განლაგება.

$$2_x \circ 2_x = 1, \quad 2_y \circ 2_y = 1, \quad 2_z \circ 2_z = 1, \quad 2_x \circ 2_y = 2_z, \quad 2_x \circ 2_z = 2_y, \quad 2_y \circ 2_z = 2_x \quad (\text{A3-4})$$

შევნიშნოთ, რომ ეს ჯგუფი არ არის ციკლური, ე.ი. არ არსებობს ისეთი ელემენტი, რომლის ხარისხებითაც გამოისახება დანარჩენები. ამ ჯგუფის შემადგენელი ელემენტების (1 , 2_x , 2_y , 2_z) შესაბამის მატრიცების ერთობლიობას (ორთოგონალური სისტემაში) შემდეგი სახე აქვს:

$$\begin{matrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\ 1 & 2_x & 2_y & 2_z \end{matrix} \quad (\text{A3-5})$$

ეს ოთხი მატრიცა ქმნის 222 სიმეტრიის წერტილოვანი ჯგუფის წარმოდგენას. აქაც შესაძლებელია ჯგუფის გენერატორების გამოყოფა. მაგალითად, 2_x და 2_z -ის შესაბამისი მატრიცები ამ ჯგუფის გენერატორებია [4,5,8].

3.10. (A3-3) და (A3-4) თანაფარდობები ჯგუფის კონკრეტული ელემენტების გამრავლების მაგალითებს წარმოადგენს და გამრავლების პროდუქტი აქ ისევ ჯგუფის ელემენტია. ასეთ ნამრავლს *შინაგანი ნამრავლი* ეწოდება. არსებობს კიდევ ისეთი ნამრავლი, როდესაც თანამამრავლებს თვითონ ჯგუფები წარმოადგენს. ასეთ ნამრავლს *პირდაპირი ნამრავლი* ეწოდება და იგი აღინიშნება \otimes ნიშნით და ასეთი ნამრავლის პროდუქტი ასევე ჯგუფს წარმოადგენს. პირდაპირი ნამრავლი გულისხმობს ერთი ჯგუფის თითოეული ელემენტის გამრავლებას მეორე ჯგუფის თითოეულ ელემენტზე იმ პირობით, რომ სხვადასხვა ჯგუფის ელემენტები კომუტირებს. ცხადია, თუ ერთი ჯგუფის რიგია m და მეორესი n , მაშინ ახალი ჯგუფის რიგი იქნება $m \cdot n$. (იხ. მაგალითები ძირითად ტექსტში, პარ. 3)

დამატება 4

მეტრიკული ტენზორის გამოყენების ზოგიერთი მაგალითი კრისტალოგრაფიაში

1. კრისტალოგრაფიული აღნიშვნებით გამოსახული მეტრიკული ტენზორი

მსგავსად (1.5.1)-სა და (1.16)-სა

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} a^2 & ab \cos \gamma & ac \cos \beta \\ ba \cos \gamma & b^2 & bc \cos \alpha \\ ca \cos \beta & cb \cos \alpha & c^2 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{G}^{-1} = \begin{pmatrix} (a^*)^2 & a^* b^* \cos \gamma^* & a^* c^* \cos \beta^* \\ b^* a^* \cos \gamma^* & (b^*)^2 & b^* c^* \cos \alpha^* \\ c^* a^* \cos \beta^* & c^* b^* \cos \alpha^* & (c^*)^2 \end{pmatrix}$$

სადაც $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ კრისტალის, პირდაპირი მესრის პარამეტრებია (ანუ საბაზისო ვექტორების მოდულები), ხოლო $a^*, b^*, c^*, \alpha^*, \beta^*, \gamma^*$, შესაბამისი შებრუნებული მესრისა [3-8].

2. სკალარული ნამრავლი

პირდაპირი მესრის ორი ვექტორის სკალარული ნამრავლი, მოცემულია ფორმულით (1.18, 1.24, პარ. 1.2.1.):

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = x^i y_i$$

სადაც ერთი თანამამრავლი მოცემულია მის კონტრავარიანტულ კოორდინატებში, მეორე კი – კოვარიანტულში. ხშირად ხელსაყრელია ეს პროცედურა განვახორციელოთ \mathbf{G}

მატრიცის გამოყენებით. კერძოდ, ერთ-ერთი ვექტორი წინასწარ წარმოვადგინოთ მისი კოვარიანტული კოორდინატებით (ანუ შებრუნებულ მესერში) და შემდეგ ვიპოვოთ ორივე ვექტორის ერთსახელა კოორდინატების ნამრავლთა ჯამი (1.24), რაც ამ ვექტორების სკალარულ ნამრავლს გვაძლევს. მართლაც, კრისტალოგრაფიული აღნიშვნებით, თუ მოცემულია ორი ვექტორი $\mathbf{U}_1[u_1 v_1 w_1]$ და $\mathbf{U}_2[u_2 v_2 w_2]$, წარმოვადგინოთ, მაგალითად მეორე ვექტორი მისი კოვარიანტული კოორდინატებით (1.22),

$$\mathbf{G} \begin{pmatrix} u_2 \\ v_2 \\ w_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_2 \\ k_2 \\ l_2 \end{pmatrix} \quad (\text{A4-1})$$

და გამოვთვალოთ შემდეგ ნამრავლთა ჯამი:

$$u_1 h_2 + v_1 k_2 + w_1 l_2 = \mathbf{U}_1 \cdot \mathbf{U}_2 \quad (\text{A4-2})$$

ეს კი ვექტორების სკალარული ნამრავლის ფორმულაა დეკარტის განზოგადებულ კოორდინატთა სისტემაში (არაორთონორმირებული სისტემა), წარმოდგენილი ერთი ვექტორის კონტრავარიანტული და მეორის კოვარიანტული კოორდინატებით.

მატრიცული ფორმით იგივე ასე ჩაიწერება:

$$\mathbf{U}_1 \cdot \mathbf{U}_2 = \mathbf{U}_1^T \mathbf{G} \mathbf{U}_2 \quad (\text{A4-3})$$

ცხადია, ორთონორმირებულ სისტემაში, ანუ კრისტალოგრაფიული ტერმინოლოგიით, კუბური სინგონიის შემთხვევაში, ვექტორის კოვარიანტული და კონტრავარიანტული კოორდინატები იდენტურია, რადგან აქ \mathbf{G} ერთეულოვანი მატრიცაა (იხ. 1 ამავე დამატებაში) მუდმივი თანამამრავლის სიზუსტით, რასაც კრისტალოგრაფიული მიმართულებების ინდექსებისათვის მნიშვნელობა არ აქვს, უკანასკნელის განმარტების თანახმად [3,5,8,19].

3. კრისტალოგრაფიული სიბრტყის ნორმალი

განვიხილოთ გამოსახულება (1.23, პარ. 1.2.1)

$$\begin{pmatrix} x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} = \mathbf{G}^{-1} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \quad (\text{A4-5})$$

რომელიც ამყარებს კავშირს ერთი და იმავე ვექტორის კონტრავარიანტულ და კოვარიანტულ კოორდინატებს შორის, ანუ პირდაპირ და შებრუნებულ მესრებში წარმოდგენილ ერთი და იმავე ვექტორის კოორდინატებს შორის. ამავე პროცედურით შესაძლებელია კრისტალოგრაფიული (hkl) სიბრტყის ნორმალის მიმართულების ინდექსების პოვნა.

თუ გავიხსენებთ კრისტალოგრაფიიდან და დიფრაქციის თეორიიდან [3-8], რომ hkl ასევე წარმოადგენს შებრუნებული მესრის ვექტორის კოორდინატებს, ანუ ვექტორის კოვარიანტულ კოორდინატებს (იხ. ასევე 4 ქვემოთ). ასევე, შებრუნებული მესრის ვექტორი კოორდინატებით h, k, l, პირდაპირ მესრის (hkl) სიბრტყის მართობულია. თუ ვექტორის შებრუნებული მესრის h, k, l კოორდინატებიდან (ანუ მისი კოვარიანტული კოორდინატებიდან) ვიპოვით, (1.23)-ის საშუალებით, ამავე ვექტორის კოორდინატებს პირდაპირ მესრში (ანუ მის კონტრავარიანტულ კოორდინატებს), კრისტალოგრაფიულ აღნიშვნებში გვექნება (1.23)-ის მსგავსად:

$$\mathbf{G}^{-1} \begin{pmatrix} h \\ k \\ l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} \quad (\text{A4-6})$$

სადაც hkl და uvw ერთი და იგივე ვექტორის კოვარიანტული და კონტრავარიანტული კოორდინატებია, (1.23) ანუ hkl არის შებრუნებულ მესრში წარმოდგენილი პირდაპირი მესრის uvw ვექტორის კოორდინატები. ამავე დროს კრისტალოგრაფიული კანონზომიერებით, შებრუნებული მესრის hkl ვექტორი მართობულია ამავე ინდექსებიანი (hkl) სიბრტყისა (სიბრტყეთა ოჯახისა) პირდაპირ მესრში.

უკანასკნელიდან გამომდინარეობს, რომ $[uvw]$ მიმართულება მართობია (hkl) სიბრტყისა და ისინი (A4-1) და (A4-6) ტოლობებს აკმაყოფილებს.

4. სიბრტყეთაშორისი მანძილი

როგორც შებრუნებული მესრის განმარტებიდან არის ცნობილი, ამ მესრის რომელიმე ვექტორი \mathbf{h} , რომელიც აერთებს შებრუნებული მესრის კოორდინატა სათავეს ამავე მესრის რომელიმე კვანძთან, შეესაბამება პირდაპირი (კრისტალური) მესრის გარკვეულ სიბრტყეთა ოჯახს, ისე, რომ ეს სიბრტყეები მართობულია ზემოთ ხსენებული \mathbf{h} ვექტორისა. ამ ვექტორის სიგრძე კი ტოლია შესაბამისი სიბრტყეთაშორისი მანძილის (d) შებრუნებული სიდიდისა [3-8].

ფორმულა (1.19)-ის ანალოგიურად (პარ. 1.2.1), ისეთივე პროცედურით შეიძლება ვექტორის სიგრძის კვადრატის გამოთვლა შებრუნებულ მესერში, იმ განსხვავებით, რომ აქ, განსხვავებით (1.19)-საგან, ვექტორი მოცემული იქნება მისი კოვარიანტული კოორდინატებით, ე.ი. შებრუნებულ მესერში და $\mathbf{G}(g_{ij})$ მეტრიკული ტენზორის მაგივრად გამოვიყენებთ მის შებრუნებულს ანუ $\mathbf{G}^{-1}(g^{ij})$ -ს. შესაბამისად, თუ h_i ($i=1,2,3$) არის \mathbf{h} ვექტორის კოორდინატები შებრუნებულ მესერში (კოვარიანტული კოორდინატები), ანუ კრისტალოგრაფიული ტერმინოლოგიით, შესაბამისი სიბრტყის მილერის ინდექსები, მაშინ მისი სიგრძის $|\mathbf{h}|$ კვადრატი, ანალოგიურად (1.19)-სა, მხოლოდ კოვარიანტულ კოორდინატებში, იქნება:

$$\mathbf{h} \cdot \mathbf{h} = g^{ij} h_i h_j$$

ხოლო შებრუნებული მესრის ვექტორის სიგრძის განმარტების თანახმად, მივიღებთ:

$$\frac{1}{d} = (g^{ij} h_i h_j)^{1/2} \quad (\text{A4-7})$$

5. ვექტორული ნამრავლი

როგორც ძირითადი ტექსტის ფორმულა (1.7.1)-დან ჩანს (პარ.1.1), პირდაპირი მესრის ორი ვექტორის ვექტორული ნამრავლი გამოსახულია შებრუნებული მესრის კოორდინატთა სისტემის ბაზისში. კრისტალოგრაფიული ანალიზის დროს ხშირად არის საჭიროება

პროდუქტის იმავე (ამ შემთხვევაში პირდაპირ) მესერში გამოსახვისა. ამისათვის შეგვიძლია ვისარგებლოთ მეტრიკული ტენზორის ერთ-ერთ ფუნქციით, რომელიც აკავშირებს პირდაპირ და შებრუნებულ საბაზისო ვექტორებს (1.22), (1.23), პარაგრაფი 1.2.1.

მართლაც, ამისათვის პირდაპირი მესრის ორი ვექტორის ვექტორული ნამრავლი, გამოსახული შებრუნებული მესრის კოორდინატებში (1.7.1), უნდა გავამრავლოთ \mathbf{G}^{-1} -ზე, როგორც მატრიცა ვექტორ-სვეტზე და მიღებული კონტრავარიანტული კოორდინატები სწორედ წარმოადგენს ვექტორული ნამრავლის კოორდინატებს პირდაპირ მესერში (იხ. ფორმულა 1.23)

ასევე შიძლება (1.22)-ს გამოყენება, თუ საჭიროა შებრუნებული მესრის ორი ვექტორის ვექტორული ნამრავლის კოორდინატების (რომლებიც პირდაპირ მესერში იქნებიან წარმოდგენილი) გადაყვანა საწყის, ამ შემთხვევაში, შებრუნებულ მესერში. ამისათვის მიღებულ ვექტორულ პროდუქტს (1.7.2) მატრიცულად ვამრავლებთ \mathbf{G} -ზე (იხ. ფორმულა 1.22) და ვექტორული ნამრავლის პროდუქტი გვექნება წარმოდგენილი ისევ შებრუნებულ მესერში.

6. კრისტალური მესრის ელემენტარული უჯრედის მოცულობა

კიდევ ერთი სასარგებლო თანაფარდობა მიიღება ამჯერად \mathbf{G} მატრიცის დეტერმინანტიდან, რომელიც შემდეგი სახისაა (იხ. ფორმულა 1.5.1):

$$\det \mathbf{G} = a_1^2 a_2^2 a_3^2 (1 - \cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma). \quad (\text{A4-8})$$

ვინაიდან ამ ტოლობის მარჯვენა მხარე ტოლია კრისტალური მესრის საბაზისო ვექტორებზე აგებული პარალელეპიპედის, ანუ შესაბამისი ელემენტარული უჯრედის მოცულობის (V) კვადრატისა [3-8], შედეგად მივიღებთ: $(\det \mathbf{G})^{1/2} = V$.

ასევე მიიღება (1.16)-დან კრისტალის შებრუნებული მესრის საბაზისო ვექტორებზე აგებული პარალელეპიპედის მოცულობისათვის:

$$(\det \mathbf{G}^{-1})^{1/2} = V^* .$$

იგივე შედეგი მიიღება ვექტორულ ანალიზში კარგად ცნობილი სამი ვექტორის შერეული ნამრავლით:

$$V = [\mathbf{abc}] \equiv \mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}), \quad \text{ან} \quad \mathbf{b} \cdot (\mathbf{c} \times \mathbf{a}) \quad \text{ან} \quad \mathbf{c} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}),$$

სადაც \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} , ამ შემთხვევაში, კრისტალური მესრის საბაზისო ვექტორებია.

ასევე, ზოგადად, რამდენიმე ვექტორის ვექტორული ნამრავლისათვის გვაქვს შემდეგი თანაფარდობები [30]:

$$(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \times (\mathbf{a} \times \mathbf{c}) = [\mathbf{a} \ \mathbf{b} \ \mathbf{c}] \mathbf{a}$$

$$(\mathbf{b} \times \mathbf{c}) \times (\mathbf{b} \times \mathbf{a}) = [\mathbf{b} \ \mathbf{c} \ \mathbf{a}] \mathbf{b}$$

$$(\mathbf{c} \times \mathbf{a}) \times (\mathbf{c} \times \mathbf{b}) = [\mathbf{c} \ \mathbf{a} \ \mathbf{b}] \mathbf{c}$$

(A4-9)

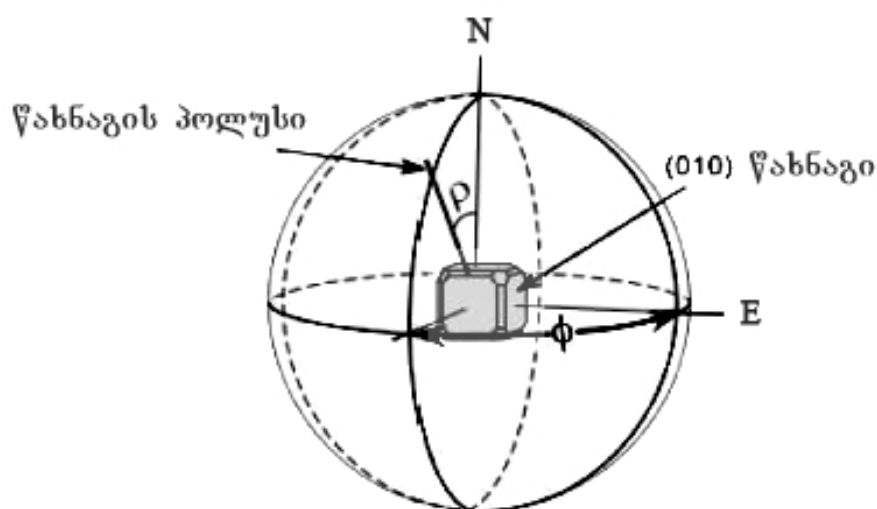
და

$$(\mathbf{c} \times \mathbf{a}) \times (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = [\mathbf{c} \ \mathbf{a} \ \mathbf{b}] \mathbf{a}$$

სტერეოგრაფიული პროექციები

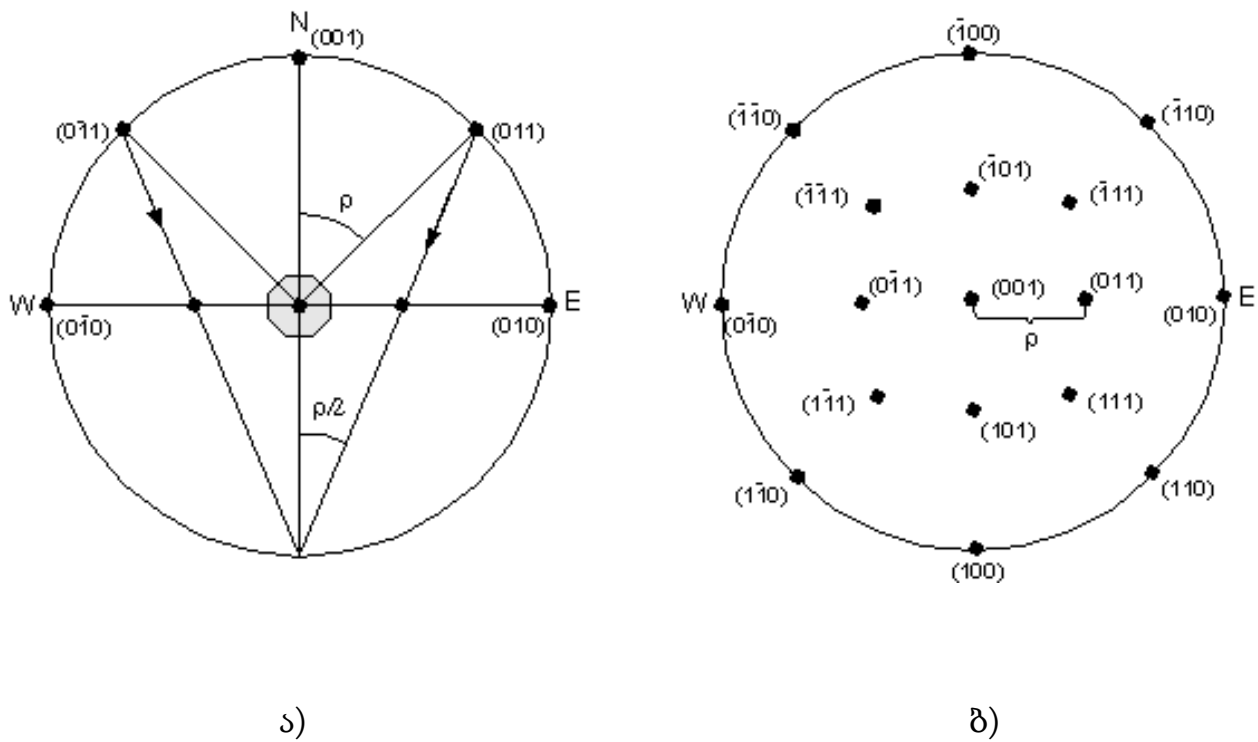
კრისტალოგრაფიაში სტერეოგრაფიული პროექციების აგების პრინციპი შემდეგია:

- კრისტალს ვათავსებთ წარმოსახვითი სფეროს ცენტრში (ნახ. A5-1). სფერული ზედაპირის ეკვატორის სიბრტყე წარმოადგენს საპროექციო სიბრტყეს. იგი მართობულია N მიმართულებისა და ნახვენებია მისი სფერულ ზედაპირთან გადაკვეთის წირი. თითოეული წახნაგიდან აღვმართავთ ნორმალს, ვაფიქსირებთ ამ ნორმალის სფერულ ზედაპირთან გადაკვეთის წერტილებს (პოლუსებს) და ვპოულობთ პოლუსის გეგმილს საპროექციო სიბრტყეზე, პოლუსიდან სფერული ზედაპირის უკიდურეს ქვედა წერტილამდე გავლებული წრფისა და საპროექციო სიბრტყის გადაკვეთის წერტილის სახით (ნახ. A5-2ა, წერტილები WE მონაკვეთზე).



ნახ. A5-1. სტერეოგრაფიული პროექციის აგების სქემა. ρ კუთხეა N მიმართულებასა და წახნაგის ნორმალის მიმართულებას შორის; ϕ კუთხეა წახნაგის ნორმალს შორის. N მიმართულება პერპენდიკულარულია საპროექციო სიბრტყისა.

ნახ. A5-2ა-ზე ნაჩვენებია ნახ A5-1-ზე გამოსახული სფერული ზედაპირის კვეთა N და E მიმართულებებზე გამავალი სიბრტყით. ნახაზე (A5-2ა) გამოსახულია სხვადასხვა წახნაგის პოლუსები. მაგალითად, (011) წახნაგიდან აღმართული ნორმალის სფერულ ზედაპირთან გადაკვეთის წერტილი (პოლუსი), რომელიც აღნიშნულია ამავე წახნაგის შესაბამისი მიღერის ინდექსებით (011). ამის შემდეგ, ამ წერტილს სფეროს უკიდურეს ქვედა წერტილთან ვაერთებთ წრფის მონაკვეთით, რომელიც N მიმართულებასთან $\rho/2$ კუთხეს ქმნის (ნახ. A5-2ა). ამ წრფის გადაკვეთა საპროექციო სიბრტყესთან (ეს სიბრტყე ნახაზის მართობულია და WE მონაკვეთით არის წარმოდგენილი), გვაძლევს (011) პოლუსის გეგმილს საპროექციო სიბრტყეზე (მარჯვენა წერტილი WE მონაკვეთზე). ასეთივე პროცედურით მიიღება დანარჩენი წახნაგების სტერეოგრაფიული პროექციებიც.



ნახ. A5-2. ა) სტერეოგრაფიული პროექციის აგების სქემა. WE მონაკვეთი წარმოადგენს საპროექციო სიბრტყის გეგმილს ნახაზის სიბრტყეზე. N მიმართულება განხილულ შემთხვევაში ემთხვევა კრისტალის (001) წახნაგის ნორმალის მიმართულებას (იხ. ბ); ბ) საპროექციო სიბრტყე (N მიმართულების მართობული სიბრტყე). ცენტრში ნაჩვენებია (001) პოლუსის პროექცია. E წერტილი ემთხვევა (010) წახნაგის პოლუსს (იხ. ნახ. A5-1).

ყველა ზემოთ აღწერილი მნემონიკური ოპერაცია შესაძლებელია განხორციელებულ იქნეს შესაბამისი კომპიუტერული ალგორითმის საშუალებით. ამისათვის ნახაზის სიბრტყეში ავირჩიოთ x და y მიმართულებები, მაგალითად (100) და (010) პოლუსების მიმართულებები (ნახ. A5-2ბ), ხოლო z მიმართულება დავამთხვიოთ N მიმართულებას. მაშინ ამ კოორდინატთა სისტემაში თითოეული პოლუსის პოზიცია გამოითვლება შემდეგი ფორმულებით:

$$x_i = \frac{R \cos \alpha_i}{1 + \cos \gamma_i} \quad \text{და} \quad y_i = \frac{R \cos \beta_i}{1 + \cos \gamma_i}$$

სადაც, α_i , β_i და γ_i შესაბამისად x , y და z კოორდინატთა ღერძებთან შესაბამისი $(hkl)_i$ წახნაგის ნორმალის მიერ შედგენილი კუთხეებია (იხ. ER3, ER4, ER5).

მითითებული ლიტერატურა:

1. ნ. მუსხელიშვილი. *ანალიზური გეომეტრიის კურსი*. თბილისი, 1962, 671 გვ.
2. ი. ვეკუა. *ტენზორული ანალიზისა და კოვარიანტთა თეორიის საფუძვლები*. თბ. : "მეცნიერება", 1982. 365გვ.
3. H. Wondratschek. *Matrices, Mappings and Crystallographic Symmetry*. International Union of Crystallography, Chester , UK, 2002, 81pp.
4. ვ. სანაძე. *კრისტალოფიზიკის საფუძვლები*, „განათლება“, თბილისი, 1986წ. 514გვ.
5. Ю. И. Сиротин, М. П. Шаскольская. *Основы кристаллофизики*, М. «Наука», 1979. 639с.
6. A. R. Verma, O. N. Srivastava. *Crystallography for solid state physics*, Wiley, New Delhi, 1982. 348pp.
7. D.E. Sands. *Introduction to crystallography*, Dover Publishing, inc, New York, 1993. 165pp.
8. Д. М. Васильев. *Физическая кристаллография*. М., «Металлургия», 1981, 244 с.
9. S. R. Deans. *Covariant and Contravariant Vectors*. Mathematics Magazine, Vol. 44, No 1 (1971), pp. 5-8.
10. T. Levi-civita. *The Absolute Differential Calculus: Calculus of Tensors*, Dover Publications Inc. 2005. 452pp.
11. ა. შველაშვილი, ე. მიმინოშვილი, თ. ვარდოსანიძე. *ქიმიურ ნივთიერებათა რენტგენოსტრუქტურული ანალიზის პრაქტიკული სახელმძღვანელო*. გამ-ბა "განათლება", თბილისი, 1991. 173გვ.
12. Г. Б. Бокий, М. Порай-Кошиц. *Рентгеноструктурный анализ*. М., изд. МГУ, 1964. 488с.
13. В. Паули. *Теория относительности*. М., «Наука», 1991, 324с.
14. I. S. Sokolnikoff. *Tensor Analysis. Theory and Applications to Geometry and Mechanics of Continua*. Wiley, New York, 1990, 355 pp.
15. N.C. Rana, P.C. Joag. *Classical Mechanics*. Tata McGraw Hill, New Delhi, 2006, 596pp.
16. Э. Ф. Беккенбах. *Современная математика для инженеров*, Перевод под ред. И.Н. Векуа, М., 1958, 500с.
17. Г. Корн, Т. Корн. *Справочник по математике*, М., «Наука», 1970, 720 с.
18. G. Rigault. *Metric tensor and Symmetry operations in crystallography*, International Union of Crystallography (IUCr), University College Cardiff Press, Wales, 2001, 15pp.

19. D.E. Sands. *Vectors and tensors in crystallography*, Dover Publishing, inc, New York, 1995. 236 pp.
20. А. Дж. Мак-Коннел. *Введение в тензорный анализ*. М., ФМ, 1963, 411с.
21. L. Lebedev, M. J. Cloud. *Tensor Analysis*, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. USA, 2003, 191pp.
22. უმაღლესი მათემატიკა. წრფივი ალგებრისა და ანალიზური გეომეტრიის ელემენტები (თეორია, სავარჯიშოები და ამოცანები). ს. თოფურიას რედაქციით, თბილისი, „განათლება“, 1988, 316 გვ.
23. უმაღლესი მათემატიკა. ს. თოფურიას რედაქციით, თბილისი, 2007, 546 გვ.
24. А.Г. Курош. *Курс высшей алгебры*. М., «Наука», 1971, 431с.
25. И. В. Ефимов. *Квадратичные формы и матрицы*. М., «Наука», 1972, 160 с.
26. М. Хамермеш. *Теория групп и ее применение к физическим проблемам*. М., «Мир», 1966, 588 с.
27. M. Nespolo, B. Souvignier. *The Bravais polar lattice as a didactic tool for diffraction beginners*, Journal of Applied Crystallography, 43, 2010, pp.1144 -1149.
28. W. Friedrich, P. Knipping, M. Laue. *Interferenz-Erscheinungen bei Röntgenstrahlen*, Sitzungsberichte der Mathematisch-Physikalische Klasse der Königlich-Bayerische Akademie für Wissenschaften zu München, 1912, pp. 303-322.
29. P.P. Ewald. *Zür Theorie der Interferenzen der Röntgenstrahlen in Kristallen*. Physikalische Zeitschrift, 14, 1913, p.p. 465-472.
30. W. Gibbs. *Vector Analysis (A text-book for students of mathematics an physics)*, Yale University Press, 1901 - 1947, 436pp.
31. M. A. Bravais. *Mémoire sur les systèmes formés par des points distribués régulièrement sur un plan ou dans l'espace*, J. Ecole Polytechnic, Caliiier 33, tome 19, 1850, p.p. 1-128.
32. А. Гинье. *Рентгенография кристаллов*, М., Гос. Изд. Физ.-Мат. Лит. 1961, 604с.
33. П. Хирш, А. Хови и др. *Электронная микроскопия тонких кристаллов*, М., «Мир», 1968, 574 с.
34. К. Эндрюс, Д. Дайсон, С. Киоун. *Электроннограммы и их интерпретация*, М., «Мир», 1971, 256 с.
35. Л. М. Утевский. *Дифракционная электронная микроскопия в металловедении*, М., «Металлургия», 1973, 583 с.

36. *International Tables for Crystallography*, Volume A. (IUCr). 2003.
37. F. Seitz. *Zeitschrift fur Kristallographie, A matrix-algebraic development of the crystallographic groups*, 88, 1934, p. 433
38. М.В.Классен-Нехлюдова. *Механическое двойникование кристаллов*. М., Академия наук, 1960, с.261
39. J.W.Christian, S.Mahajan. *Deformation Twinning*. Progress in Materials Science, Vol.39, p.p.1-157, (1995)
40. Т.А.Дзиграшвили, Э.Р.Кутелия, В.В.Санадзе. *Методика вывода матриц двойникового соотношения для анализа электронно-микродифракционных картин кристаллов любой сингонии*. Кристаллография, т.20, 5, с.965 (1975)
41. Т.А. Дзиграшвили. *Матрица двойникового соотношения для анализа электронно-дифракционных картин*, Изд. «Наука», Кристаллография. Т.32, №6, стр. 1523- 1525, (1987).

სასარგებლო ელექტრონული რესურსები ქართულ ენაზე

(წინამდებარე წიგნში განხილული საკითხების მითითებით):

ER1. დ. ნატროშვილი, გ. სამსონაძე, მ. შუბლაძე. *წრფივი ალგებრა. ნაწილი I*.
http://www.gtu.ge/books/wrf_ald_natroshvili_I.pdf

(წრფივი სივრცე, ვექტორები, მატრიცთა ალგებრა, დეტერმინანტი).

ER2. დ. ნატროშვილი, გ. სამსონაძე, რ. ბიწაძე მ. შუბლაძე. *წრფივი ალგებრა. ნაწილი II*.
http://www.gtu.ge/books/wrf_ald_natroshvili_II.pdf

(საკუთრივი მნიშვნელობები და ვექტორები, მახასიათებელი განტოლება)

ER3. <http://www.matter.org.uk/stereography/>

(სტერეოგრაფიული პროექციების აგების კომპიუტერული პროგრამა)

ER4. თ. ძიგრაშვილი. <http://www.gtu.ge/gtu/departments/rcsr/temur.htm>

(დიფრაქციული სურათებისა და სტერეოგრაფიული პროექციების აგების კომპიუტერული პროგრამები)

ER5. Е.Кутелия, Т. Дзиграшвили.

<http://www.gtu.ge/books/Analysis%20of%20Electron%20Diffraction%20Patterns.pdf>

(კრისტალურ მესრებს შორის ორიენტაციული თანაფარდობების აღწერა მატრიცების საშუალებით. კომპიუტერული მოდელირება)

სარჩევი

წინასიტყვაობა	3
კურსის მიზანი, დონე და მისი შესწავლისათვის საჭირო საბაზისო ცოდნა.	4
აღნიშვნების ნუსხა.	5
1. შესავალი (კურსის მათემატიკური საფუძვლების მოკლე მიმოხილვა).	6
1.1. მეტრიკული ტენზორი წრფივ სამგანზომილებიან სივრცეში.	6
1.2. შებრუნებული (დუალური, ბიორთონორმალური) ბაზისი და ვექტორის კოვარიანტული და კონტრავარიანტული კომპონენტები.	12
1.2.1. კავშირი ვექტორის კოვარიანტულ და კონტრავარიანტულ კოორდინატებს შორის.	18
1.2.2. კოვარიანტობა, კონტრავარიანტობა და მეტრიკული ტენზორი (კონკრეტული მაგალითი).	25
2. მეტრიკული ტენზორი და სიმეტრიის ოპერაციები კრისტალოგრაფიაში.	32
2.1. სიმეტრიის ოპერაციები.	33
2.2. მეტრიკული ტენზორით განსაზღვრული სიმეტრიის ოპერაციები კუბური სისტემისათვის.	35
2.3. სიმეტრიის ოპერაცია და სიმეტრიის ელემენტის ორიენტაცია.	39
2.4. კრისტალურ მესერთან თავსებადი ბრუნვები.	42
2.5. სიმეტრიის ჯგუფები.	43
3. კრისტალოგრაფიული წერტილოვანი სიმეტრიის ჯგუფების გამოყვანის მაგალითები	46
3.1. ჯგუფები, რომლებიც მხოლოდ ერთ ბრუნვის ღერძს შეიცავს.	46

3.2. ჯგუფები, რომლებიც ერთზე მეტ ბრუნვის ღერძს შეიცავენ (ბრუნვის ღერძთა დასაშვები ორიენტაციები მათი გადაკვეთისას).....	47
3.2.1. ინვერსიის ოპერაციის გავლენა	54
3.2.2. სიმეტრიის ღერძისა და სიმეტრიის სიბრტყის პარალელობა.....	55
4. კრისტალური მესრის ტრანსფორმაცია.....	60
4.1. სტრუქტურული ფაზური გარდაქმნის მაგალითი.....	60
4.2. ორეულოვანი თანაფარდობის მაგალითი.....	64
5. ბრავეს პოლარული მესერი - შებრუნებული მესრის წინამორბედი	68
5.1. ბრავეს პოლარული მესრის აგება.....	70
დამატებები.....	79
A1. წრფივი გარდაქმნების მატრიცული წარმოდგენის მაგალითები.....	79
A2. მატრიცული ალგებრის დებულებები, რომლებიც გამოყენებულია წინამდებარე სახელმძღვანელოში	87
A3. ჯგუფთა თეორიის ელემენტები.....	100
A4. მეტრიკული ტენზორის გამოყენების ზოგიერთი მაგალითი კრისტალოგრაფიაში. .	112
A5. სტერეოგრაფიული პროექციები	118
<i>მითითებული ლიტერატურა.....</i>	<i>121</i>

წიგნის გამოცემის დაფინანსებისათვის ავტორი მადლობას უხდის

ქ-ნ რ. ძიგრაშვილს და ქ-ნ ნ. ბულიშვილს

რედაქტორი ა. ჩიქოვანი

გადაეცა წარმოებას 30.01.2012 ხელმოწერილია დასაბეჭდად 21.02.2012. ქალაქის ზომა 60X84
1/8. პირობითი ნაბეჭდი თაბახი 8 ტირაჟი 100 ეგზ.

საგამომცემლო სახლი „ტექნიკური უნივერსიტეტი“, თბილისი, კოსტავას 77

