Дәріс 8.
Бравэнің 14 торлары. Әртүрлі сингонияларға арналған Бравэ торларының түрлері

Дәріскер: х.ғ.к., доцент

Кудьярова Ж.Б.

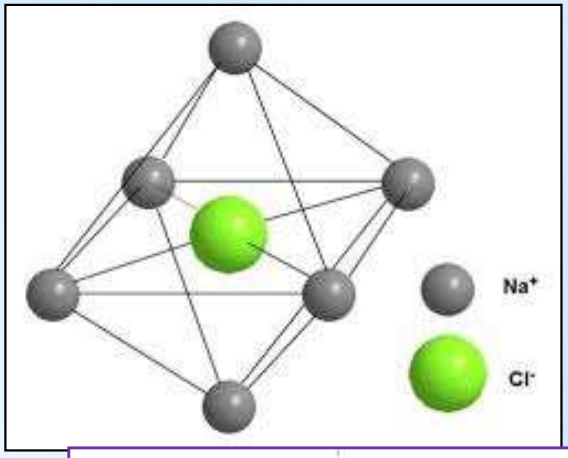
* **Дәрістің мақсаты:** студенттерді Бравэ торларының типтерімен таныстыру және оларды әртүрлі сингониялар бойынша жіктеуді үйрету.
* Дәрісте Бравэ торларының 4 типі және 14 түрі, олардың сингониялар бойынша жіктелуі және Бравэнің қарапайым ұяшығын таңдаудың шарттары қарастырылады.

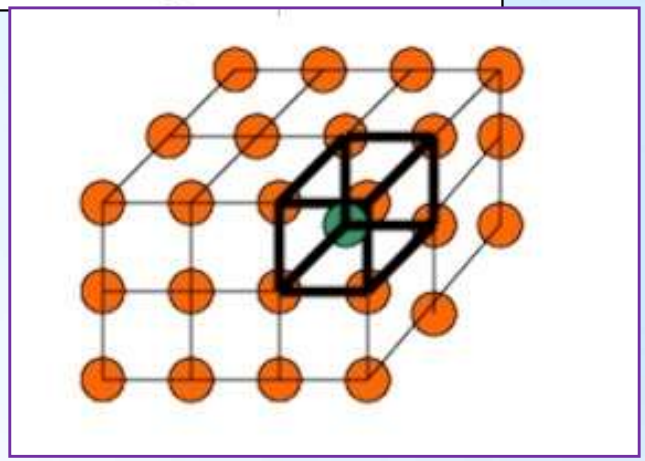


Кристалдық құрылымды түзетін материалды бөлшектер (атомдар, иондар, молекулалар) қатаң түрде белгілі бір ара қашықтықта, белгілі бір бағытта кезеңді түрде қайталана отырып, белгілі заңдылықпен орналасады.

Материалды бөлшектердің кристалда орналасуын сипаттайтын геометриялық сызбанұсқасы кеңістіктік тор болып табылады.

Кеңістіктік торлар а, в, с трансляцияларының өлшемі мен өзара бағытталуына тәуелді әртүрлі симметрияга ие болады.





Кеңістіктік торды қосатын транляциялардың қиылысу нүктесі түйіндер деп аталады. Түйін материалдық бөлшектер арасында және бір бөлшек массасының немесе бөлшектер тобының ортасында орналаса алады. Егер кеңістіктік тордың түйіні бөлшектер тобын сиппаттайтын болса, онда қалған түйіндерге де осындай бөлшектер тобы сәйкес келеді.

- Жалпы жағдайда элементарлы ұяшық $a^{-}, в^{-}, c^{-}$ қабырғалары мен $\alpha(=в^{-}, c^{-})$, $\beta(=c^{-} a^{-})$ және $\gamma(=a^{-} в^{-})$ бұрыштары бар қиғаш бұрышты параллелипипед түрінде болады. **(1.4 сурет).** Көрсетілген алты шама **тор параметрлері** деп аталады. Элементар ұяшықтар өлшеніп анықтаушы $a^{-}, в$ және c^{-} параметрлері көбінесе **тұрақты торлар** деп аталады.
- Кристалдың $\vec{T} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}$ векторына орын ауыстыру операциясы **трансляция**деп аталады, мұндағы n_1, n_2, n_3 — бүтін сандар.
- ***а, в*** және ***с*** трансляцияларында тұрғызылған элементарлы параллелипипед негізгі параллелипипедтік тор болып табылады. Мұндай параллелипипед төбеден өзге, іштегі немесе беттегі ешқандай нүктедегі қосымша түйіндерге ие болмай, оны **элементарлы ұяшық** деп атайды. Негізгі примитивтік элементарлы параллелипед көлеміне бір тор түйініне келеді. Іс жүзінде, параллелипипед төбесінде орналасқан әрбір түбін сегіз параллелипипедке болады. Мұнда параллелипипедтегі төбе сегіз болғандықтан, оған толықтай **8·1/8=1** түйін жатады.

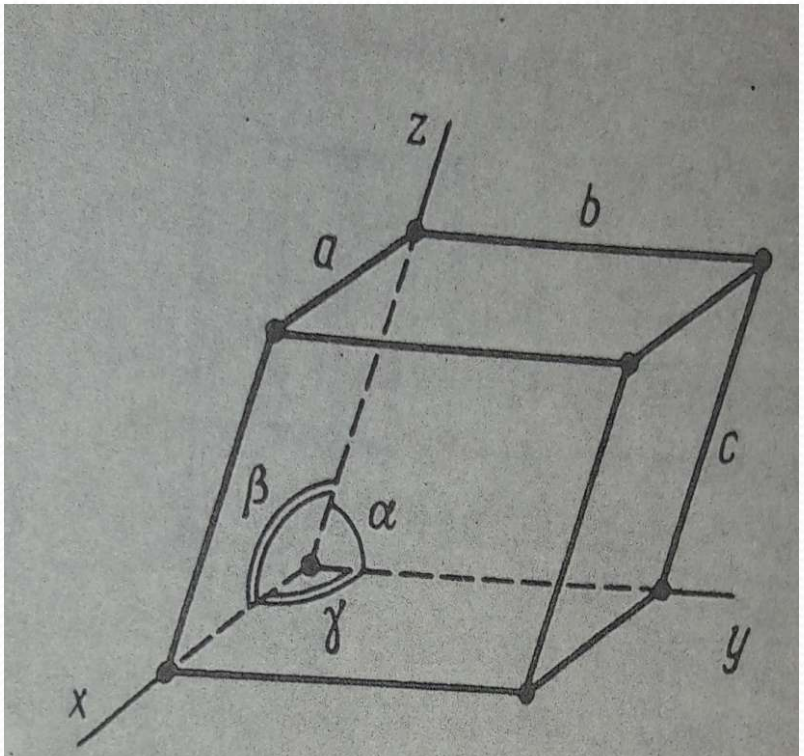


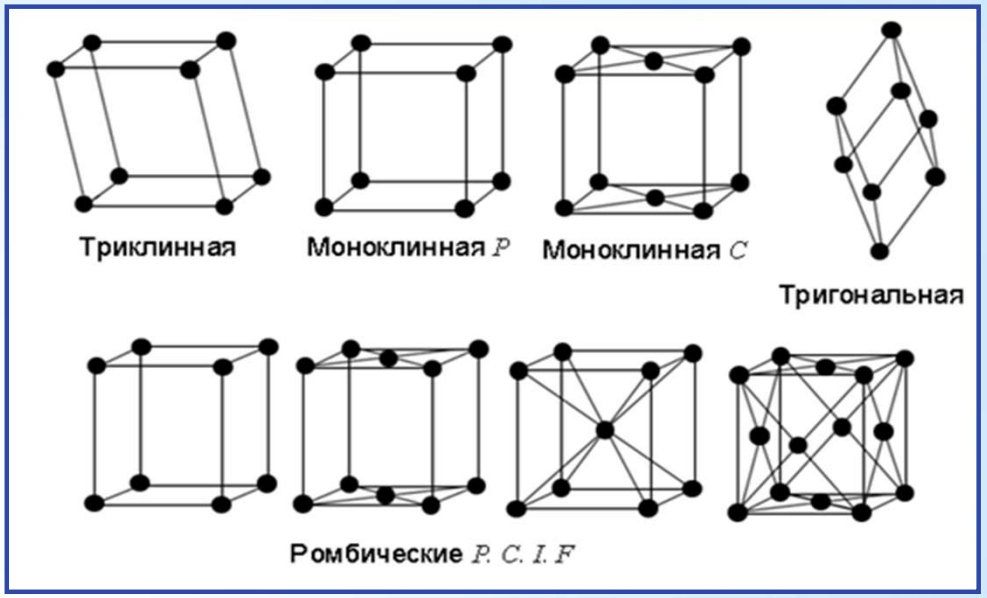
Рис. 1.4. Элементарная ячейка, с параметрами a, $в$, c, α, β, γ, характеризующими пространственную решетку в целом; x, y, z — кристаллографическая система координат

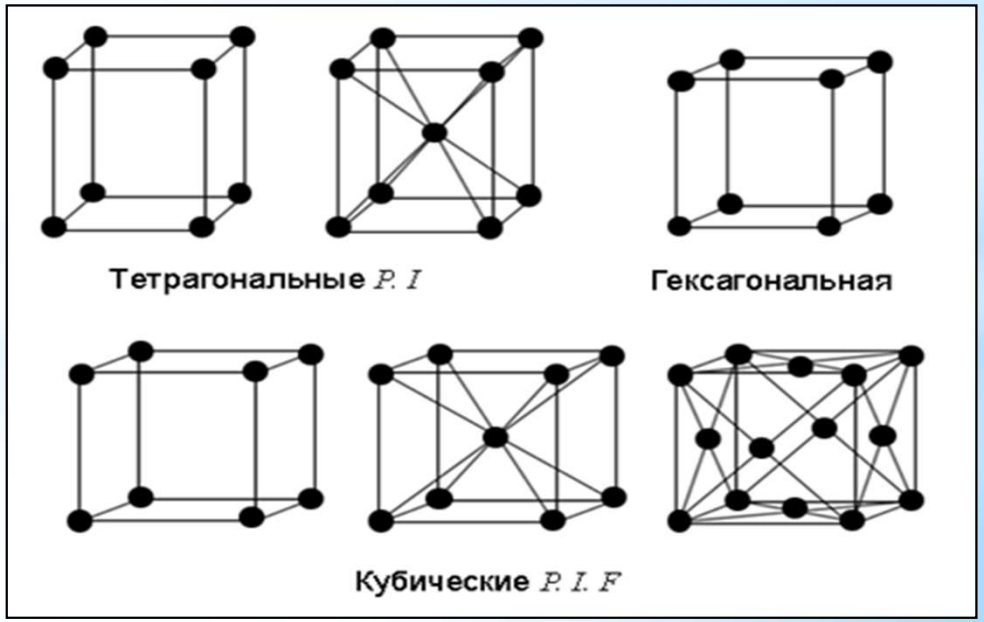
Бравэ торлары

1848 жылы О. Бравэ кристалдың құрылымының көптүрлілігін 7 кристаллографиялық сингонияға бөлінетінін, элементарлы ұяшық және симметрия формасымен ерекшеленетін 14 типті торлар көмегімен сипаттауға болатынын көрсетті.

Бұл торлар **Бравэ торлары** деп аталды.

Әрбір Бравэ торы – материалды бөлшектердің кеңістікте орналасуын сипаттайтын трансляциялар тобы. Кез келген кристалдық құрылымды Бравэнің 14 торының біреуінің көмегімен көрсетуге болады.





Элементар ұяшықтар заттай бөлшектері бар түйіндер санына байланысты примитивті және күрделі болып бөлінеді.

Примитивті ұяшық – бұл кеңістікте периодты түрде қайталанатын, параллелепипед пішінді, әр нүктесінде атомдар жиынтығымен байланысты кристалдық тордың бір бөлігі. Мұндай атомдар жиынтығын базис деп атайды, базис кеңістікте қайталанады және кристалдық құрылымды түзеді.

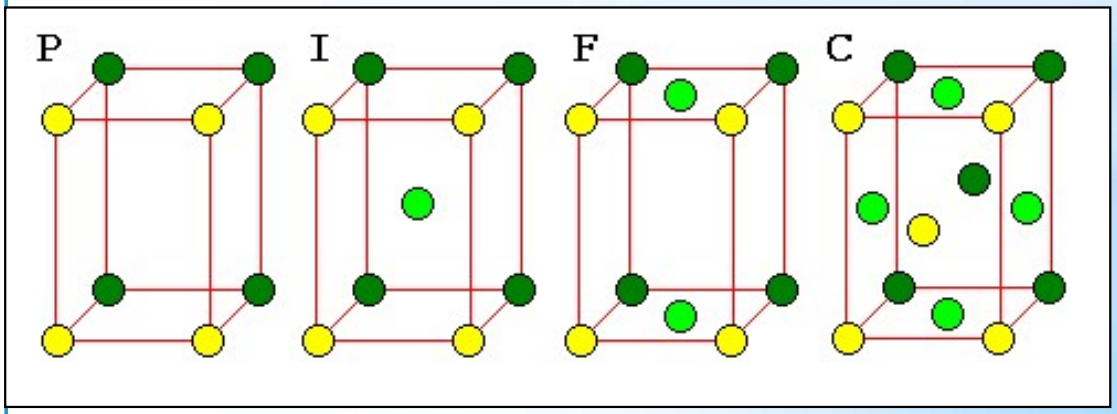
Бравэ торлары кристалдың трансляциялық симметриясын толықтай көрсетеді. Трансляцияның негізгі векторлары келесі шарттарды қанағаттандыруы керек: Бравэ торының қандай да бір түйінінен басталатын және оның бойында құрылған тура тордың векторлары Бравэ торының барлық басқа түйіндерінде аяқталуы қажет, яғни тура тордың векторларының ішінде берілген Бравэ торының кез-келген екі түйінін қосатын векторлар табылады. Егер кристалдық тордың базисі бір ғана атомнан тұратын болса және бір примитивті ұяшықта бір ғана атом орналасса, онда кристалдық тор қарапайым деп аталады. Бұл жағдайда кристалдың барлық атомдары бір Бравэ торының түйіндеріне орналасады. Егер примитивті ұяшықты, оған тек бір атом сәйкес келетіндей етіп таңдап алу мүмкін болмаса, яғни базис бірнеше атомдардан тұрса, онда тор күрделі болады. Бұл жағдайда базистің әр атомына, өзінің бір типтегі атомдардан тұратын торшасы сәйкес келеді және ол кристалдың Бравэ торына ұқсас.

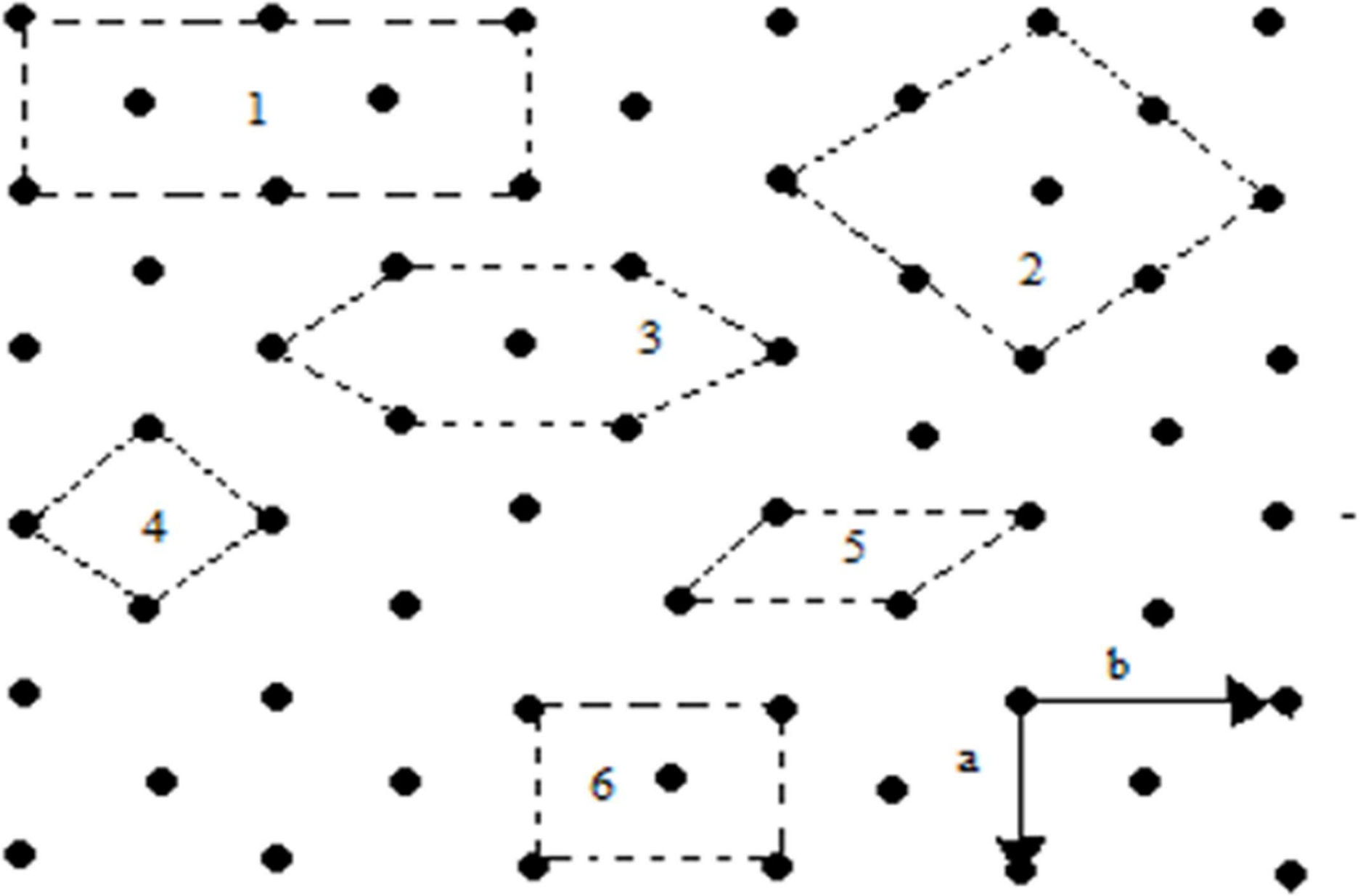
Бравэ ұяшығын таңдау үшін үш шарт пайдаланады:

1. Элементарлы ұяшықтың симметриясы кристалдың симметриясына, дәлірек айтқанда, кристал сингониясының анағұрлым жоғары симметриясына (голоэдрия) сәйкес болуы керек. Элементарлы ұяшықтың қабырғасы тордың трансляциялары болуы керек;
2. Элементарлы ұяшықта тік бұрыштар немесе тең бұрыштар және тең қабырғалар саны максималды болуы керек;
3. Элементарлы ұяшықтың көлемі минималды болуы тиіс

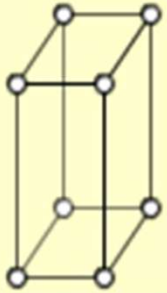
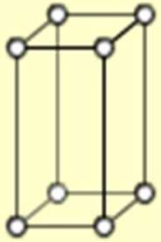
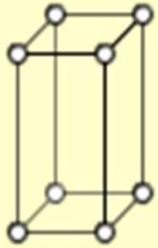
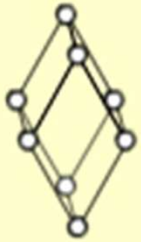
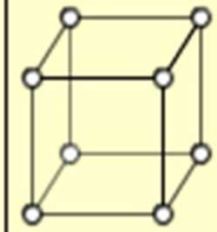
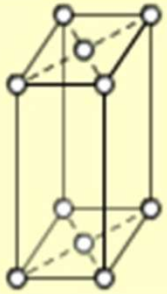
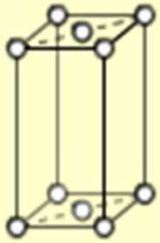
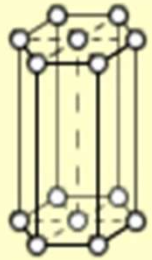
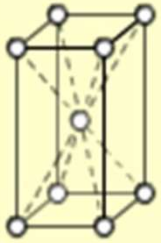
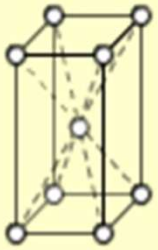
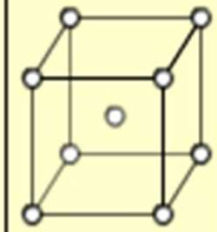
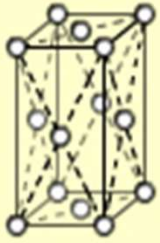
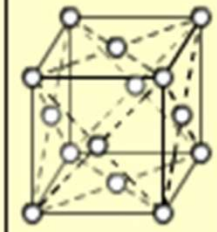
Түйіндердің өзара орналасу сипаты бойынша Бравэ барлық кристалдық торлар төрт түрге бөлінеді:

Примитивті (P);
Көлемді центрленген (I);
Базоцентрленген (F);
Жақ центрленген (C).

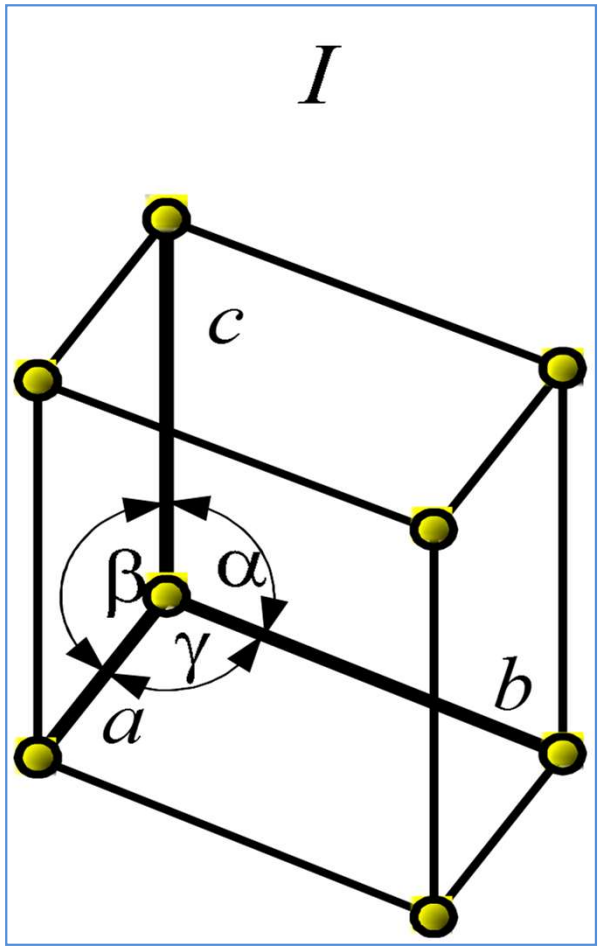




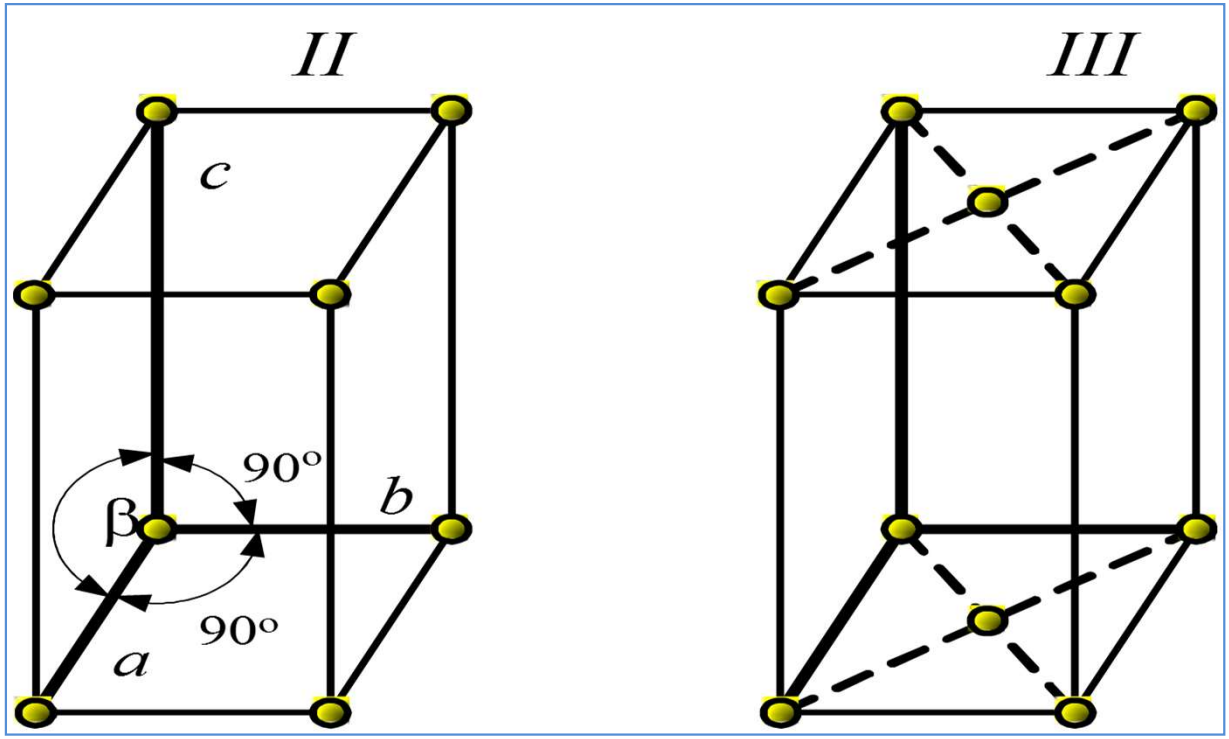
Сурет 18 - Жазық торшада Бравэнің элементарлы ұяшығын таңдау
a, b элементарлы трансляциялары төменде оң жақта көрсетілген

Сингония / Тип решетки	Триклинная	Моноклинная	Ромбическая	Тетрагональная	Тригональная (ромбоэдрическая)	Гексагональная	Кубическая
Примитивный							
Базоцентрированный							
Объемноцентрированный							
Гранецентрированный							

Кристалдық жүйелермен өзара байланыста бравэ кеңістіктік торларының трансляциялық топтарының сипаттамасы

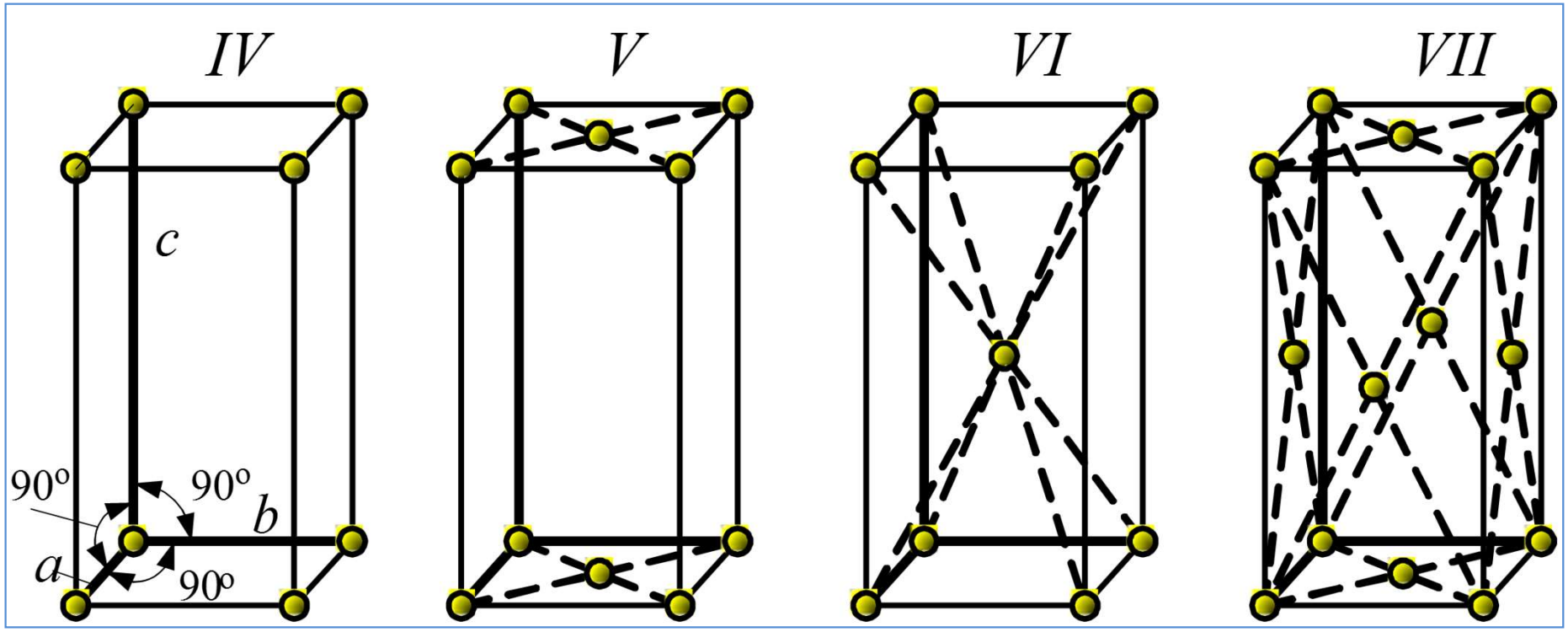


Кристалдық жүйе (сингония)	Кеңістік тор	Трансляциялық топ
1. Триклинді	I – қарапайым	$a \neq b \neq c$; $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^{o}$



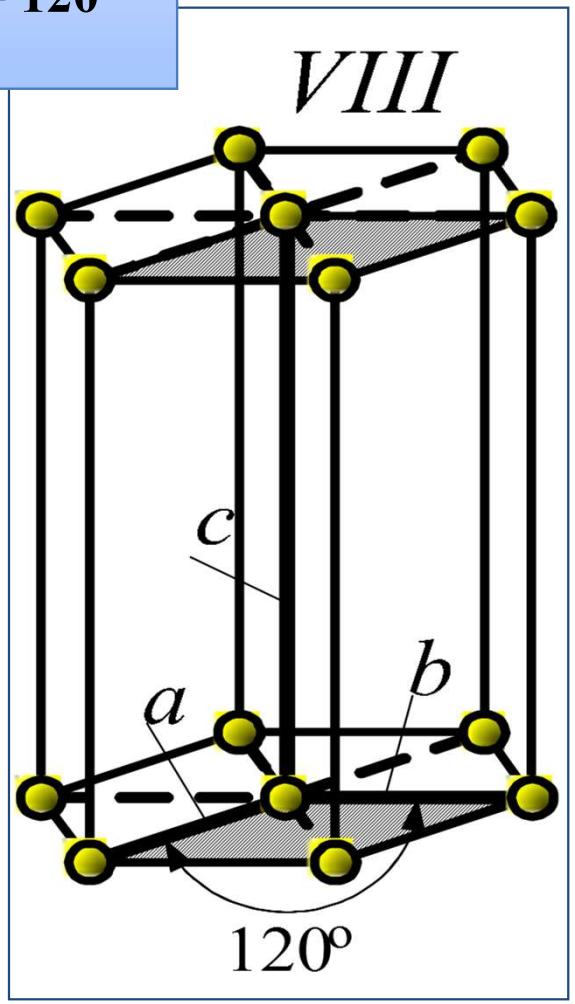
Кристалдық жүйе (сингония)	**Кеңістік тор**	**Трансляциялық топ**
2. Моноклинді	II – қарапайым III – Базоцентрленген	$a \neq b \neq c$; $\alpha = \gamma = 90^{o}$; $\beta \neq 90^{o}$

Кристалдық жүйе (сингония)	Кеңістік тор	Трансляциялық топ
3. Ромбалық	IV – Қарапайым V – базоцентрленген VI – көлемцентрленген VII – Жақцентрленген	$a \neq b \neq c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90^o$

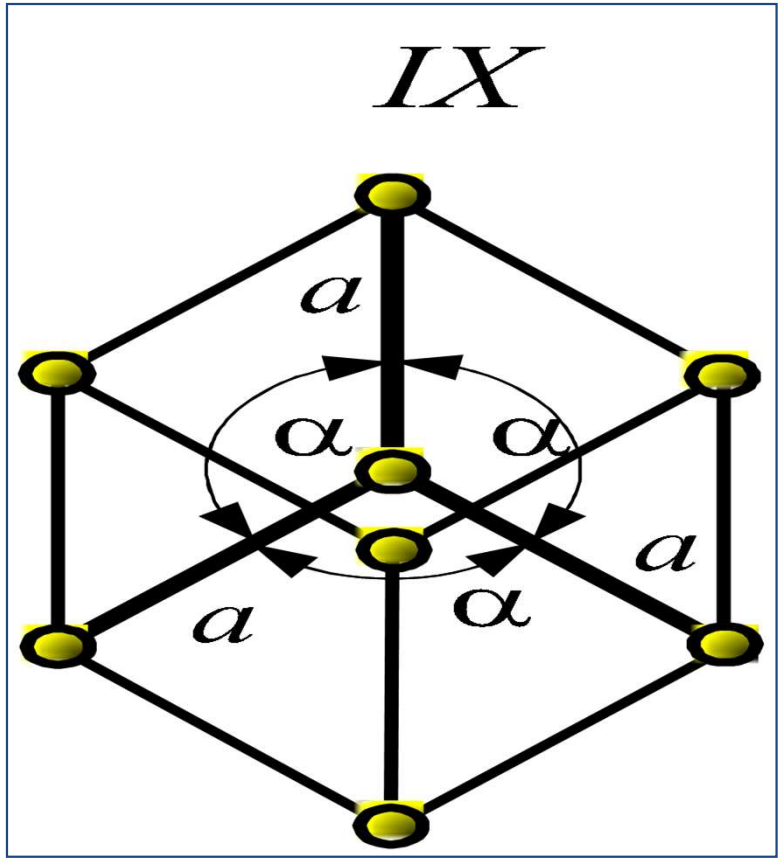


Кристаллдық жүйе (сингония)	Кеңістік тор	Трансляциялық топ
4. Гексагональді	**VIII – Қарапайым**	**a = b ≠ c ; α = β = 90 º ; γ = 120 º**



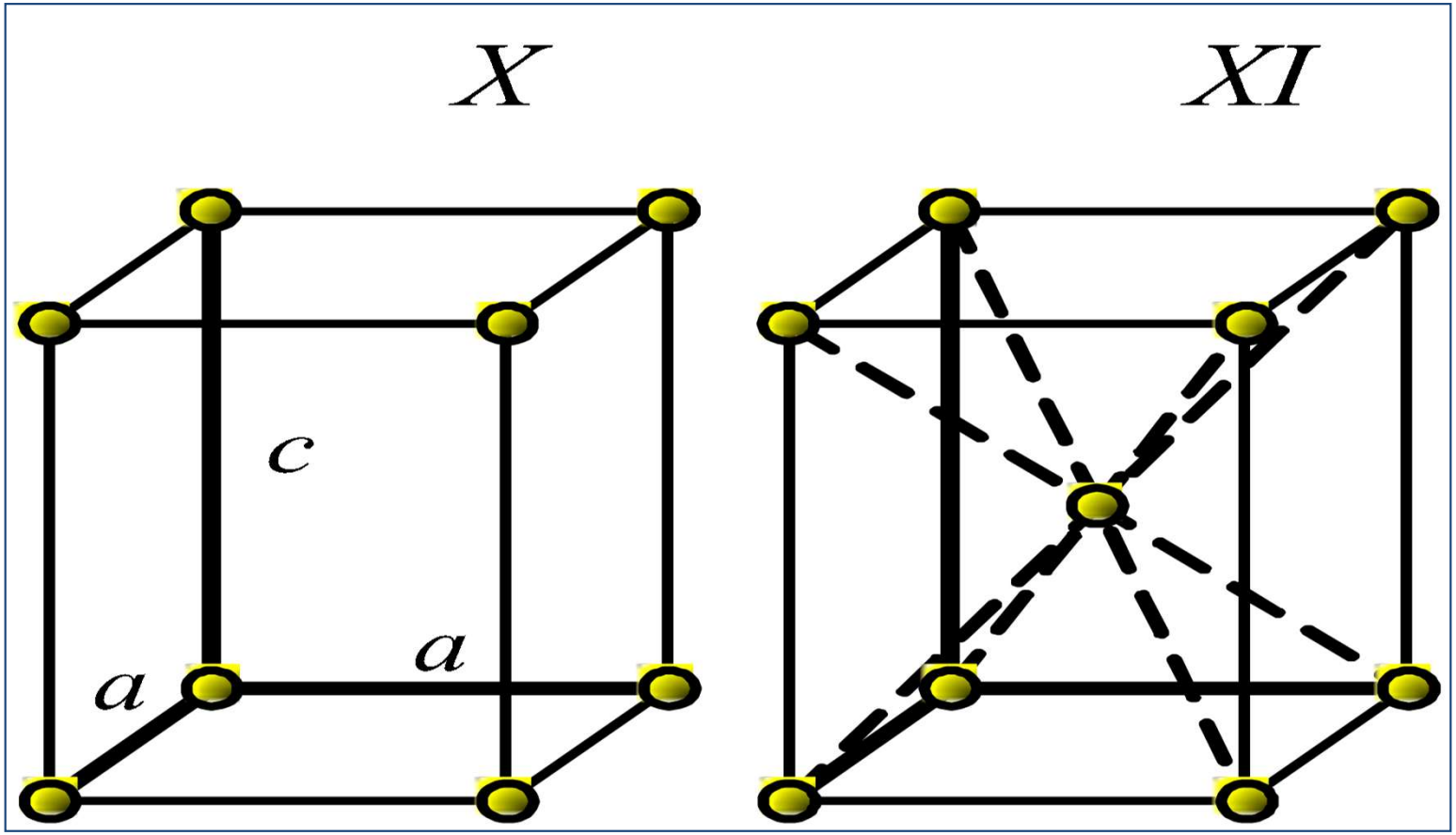


Кристаллдық жүйесі (сингония)	Кеңістік тор	Трансляциялық топ
5. Тригональді (ромбоэдрлік)	**IX – ромбоэдрлік (примитивті)**	**a = b = c ; α = β = γ ≠ 90 °**

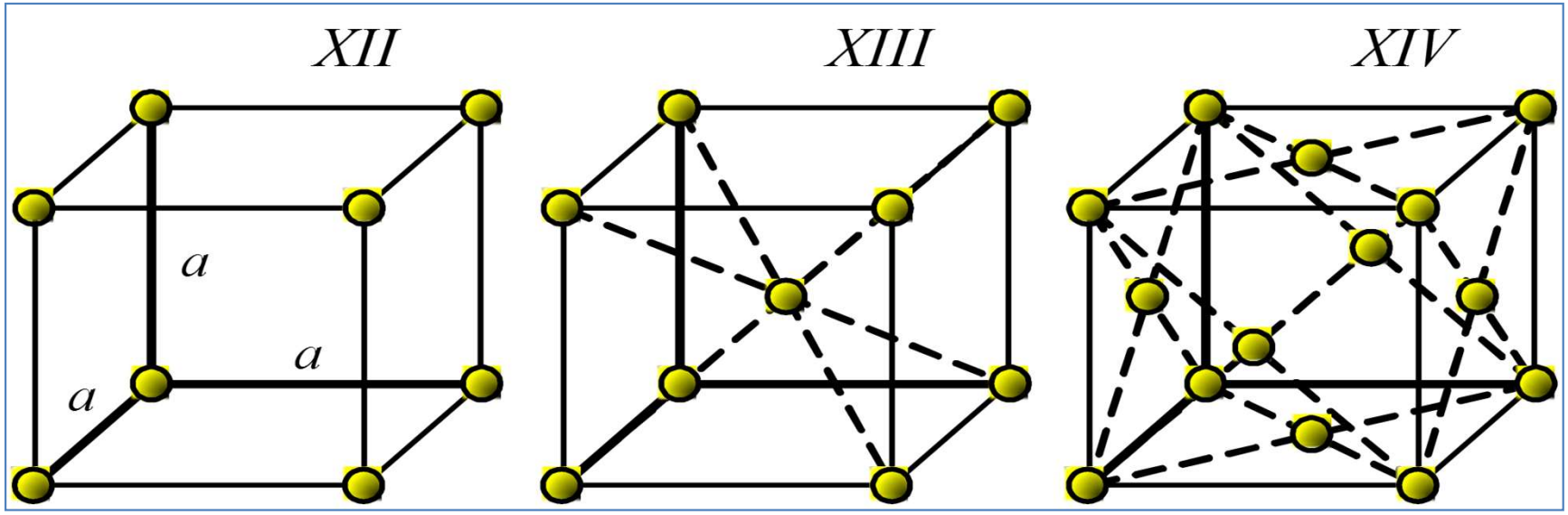




Кристаллдық торы (сингония)	Кеңістік торы	Трансляциялық тобы
6. Тетрагональді	**X – қарапайым** **XI– көлемцентрленген**	**a = b ≠ c ;** **α = β = γ = 90 o**



Кристаллды жүйе (сингония)	Кеңістің тор	Трансляциялық топ
7. Кубты	**XII–қарапайым** **XIII– көлем-центрленген** **XIV– жақцентрленген**	**a = b = c ;** **α = β = γ = 90 °**

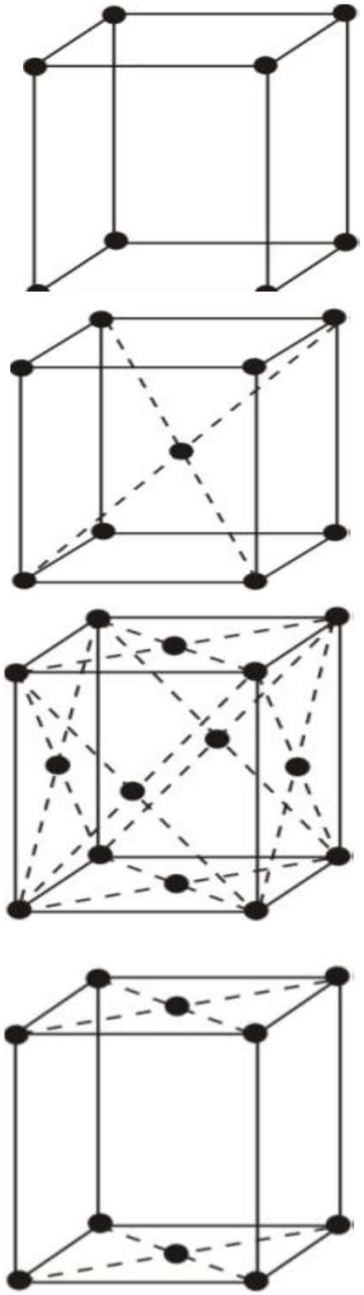


Қатты дененің элементар кристалды құрылысындағы атомдар саны - кристалдық ұяшықтың еселігі k деп аталады

Бравэ ұяшықтарының сипаттамасы

Кесте 5. Бравэ ұяшықтарының сипаттамасы

Ұяшықтың типі және символы	Негізгі трансляциялар	Базис	Ұяшықтағы түйіндер саны
Пиримитивті P	a,b,c	000	1
Көлем центрлі I	a,b,c;(a+b+c)/2	000 ½ ½ ½	2
Жақ центрлі F	(a+b)/2; (b+c)/2; (c+a)/2; a,b,c	000; 1/2 ½ 0; 0. 1/2 ½; 1.2 0 ½;	4
База центрленген A	a,b,c;(b+c)/2	000; 0 ½ ½;	2
База центрленген B	a,b,c;(a+c)/2	000; ½ 0 ½;	2
База центрленген C	a,b,c;(a+b)/2	000; ½ ½ 0;	2



Акти
Чтобы

Бақылау сұрақтары:

- Бравэнің 14 торларын сипаттаңыз.
- Бравэнің қарапайым ұяшығын таңдау шарттарын талдаңыз.
- Сингониялар бойынша Бравэ торларының типтерін жіктеңіз.
- Бравэ ұяшықтарының базистреін жазып көрсетіңіз.

Әдебиеттер:

1. Абдулкаримова Р.Г., Кудьярова Ж.Б. Кристаллохимия. - Алматы, 2015.

2. Егоров-Тисменко Ю.К. Кристаллография и кристаллохимия. – МГУ, 2010.

3.Современные методы кристаллохимического прогноза: учебно-методическое пособие / Н.Н Еремин., Е.И. Марченко, Т.А. Еремина. – М.: «КДУ», 2024. – 114 с.

4. Пущаровский Д.Ю. Минералогическая кристаллография. – М.: Геокарт, 2020 г. - 342 с.

Назарларыңызға рахмет