

УДК 548.62

3D - МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР МИНЕРАЛОВ

Бедарева И.О., Ледовских С.В., студенты гр. ГМс-201, 1 курс
Овсянникова Е.А., к.т.н., доцент
Кузбасский государственный технический университет
имени Т.Ф. Горбачева
г. Кемерово

3D-моделирование – это создание прототипа объёмных образцов на компьютере с использованием специальных программ.

Тема трёхмерного моделирования кристаллических структур минералов очень важна. Благодаря процессу моделирования появляется возможность ознакомиться с внутренним строением кристаллов. 3D-модели кристаллов помогают осваивать их точечные группы симметрии, которые представляют собой комплекс всех имеющихся в кристалле элементов симметрии, встречающихся в одной неподвижной точке. Кроме того в геологической сфере деятельности по трёхмерной модели будет гораздо проще изучить кристалл при его отсутствии в натуральном виде [1].

Сведения о формулах симметрии кристаллов, их гранях, моделях атомов, ионов, катионов можно представить в виде 3D-моделей кристаллов, а уже затем получить наглядный материал в виде макетов кристаллов и их кристаллических решёток. В процессе моделирования важно создать доработанную модель, которую в современных условиях можно распечатать на 3D-принтере. При этом ход разработки должен ясно демонстрировать главные законы роста кристаллов.

Атомы, молекулы, ионы правильно расположенные в пространстве формируют кристаллическую структуру. Её с объёмной периодичностью именуют кристаллической решёткой. Если изъясняться проще, то это ряды точек в пространстве, расположенные друг за другом на определённом расстоянии, представляющие собой безграничное трехмерное образование. Соответственно грани и форма кристаллов зависят от структуры и условий образования [2].

Уникальную ячейку решётки можно построить, зная химическую формулу минерала, специфику распределения атомов, молекул и ионов в его кристаллической решетке.

Для построения 3D-моделей можно пользоваться характерными свойствами кристаллов:

– однородность строения – гомогенность расположения атомов, размещенных на всем участке его объёма;

– симметричность – закономерная периодичность в размещении на плоскости или в пространстве [3].

Исходя из вышеперечисленных свойств, любой кристалл можно представить в виде плоских сеток, проходящих через узлы решётки, построенной по установленному принципу. Другими словами, каждый кристалл можно увидеть мысленно, как пространственный предмет, у которого форма и положение в пространстве задаются параметрами его решётки.

Рассмотрим суть способа формирования 3D-модели кристалла на примере самородной меди, которую редко встретишь в природе в таком состоянии, в каком она была создана изначально из-за её пластичности и мягкости (рис. 1).



Рис. 1. Медь самородная

Для этого необходимо:

1. Определить химическую формулу минерала (Cu) и радиус атома, который можно рассчитать при помощи периодической системы химических элементов или посмотреть в справочных материалах. Для меди он составляет 128 пм.

2. Определить форму элементарной ячейки. Всего имеется семь форм (рис. 2): кубическая (а), гексагональная (б), тетрагональная (в), тригональная (г), моноклинная (д), ромбическая (е), триклинная (ж). Медь обладает кубической формой решётки, отличающейся наибольшей симметрией.

3. Определить расположение атомов в кристаллической решётке (гранцентрированная), расстояние между ними (360,77 пм) и углы (90°) (рис. 3, а).

4. Построить в программе каркас кристаллической решетки и определить позиции месторасположения атомов (рис. 3, б).

5. Определить положение всех вероятных плоских сеток (рис. 4).

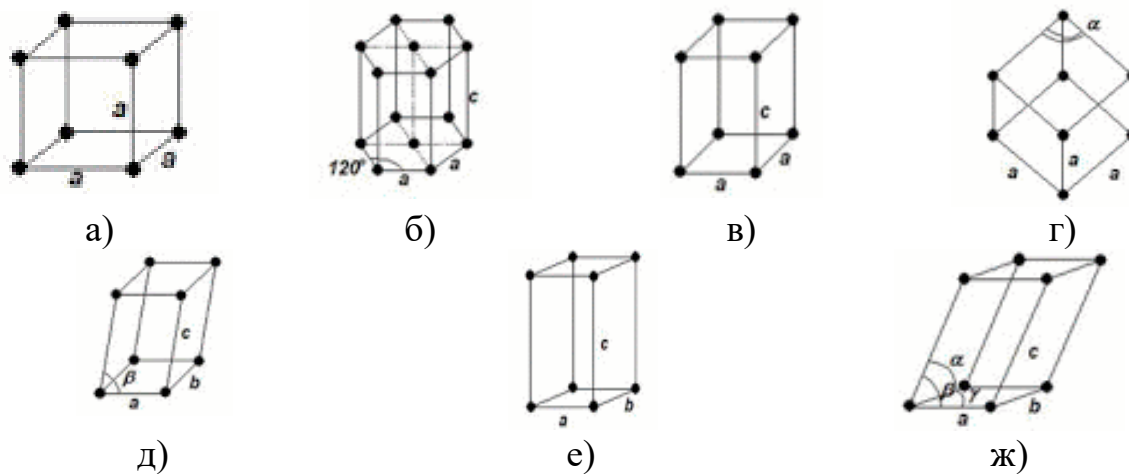


Рис. 2. Формы элементарных кристаллических решёток

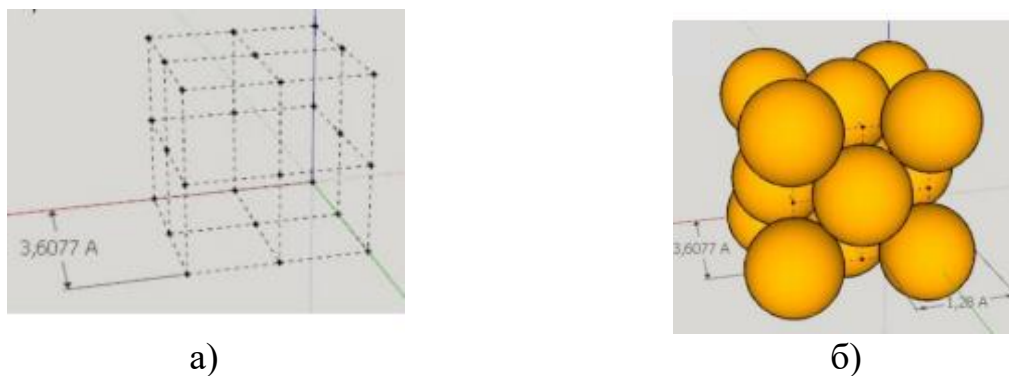


Рис. 3. Построение каркаса кристаллической решётки меди

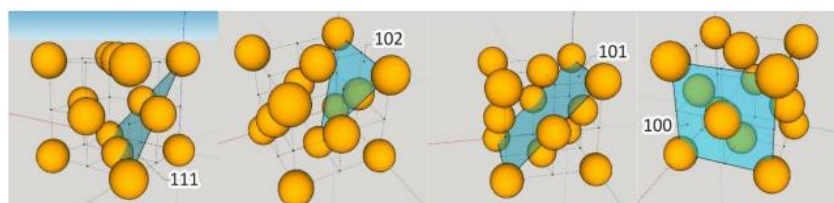


Рис. 4. Вероятные положения плоских сеток

6. Обусловить симметрию $3L^4 4L_6^3 6L^2 9PC$.
7. При помощи плоских сеток построить модель кристалла и убрать ненужные элементы (рис. 5).

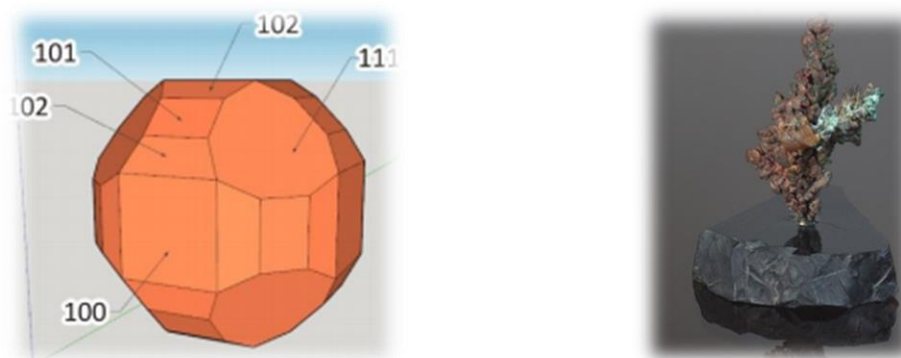


Рис. 5. Построение кристалла меди

Просматривать созданные 3D-объекты можно при помощи программы Sketchfab, которая представляет собой аппаратно-программный комплекс для публикаций, покупки, продажи трёхмерных объектов и другого содержания. Просмотр трёхмерных моделей кристаллов также возможен при помощи обычных Web-браузеров. Выбранный 3D-объект можно вращать для просмотра с разных сторон, то есть рассматривать изо всех точек пространства. При этом возможно рассмотреть грани, форму, блеск, цвет минералов, отдельную кристаллическую решётку [4].

На рисунке 6 приведён пример породы под названием Марказит (связан с кальцитом), который находится в музее минералогии и петрографии (Румыния). На модели обозначены номера участков, имеющих своё собственное строение. Люди, изучающие геологию, имеют возможность познакомиться со строением этих участков, кликнув по их номеру левой кнопкой мыши, увидеть минеральный состав данной породы.



Рис. 6. Марказит (3D-модель)

Созданные трёхмерные модели возможно воссоздать в настоящий физический объект на специальных 3D-принтерах. Принцип воспроизведения объекта заключается в наложении одного слоя будущего предмета на другой, учитывая, что у него твёрдое агрегатное состояние.

Существует всего 7 типов технологий, используемых для создания слоев:

- экструзия – моделирование методом наплавления, прямое письмо чернилами;
- фотополимеризация – лазерная стереолитография (SLA-DLP; SLA-LCD);
- формирование слоя на выровненном слое порошка – 3D печать, электронно-лучевая плавка; селективное лазерное спекание; прямое лазерное спекание металла; выборочное тепловое спекание;
- подача проволочного порошка – электронно-лучевое производство изделий свободной формы;
- ламинирование – изготовление объектов с использованием ламинирования;
- точечная подача порошка – прямая лазерная наплавка;
- струйная печать – метод многоструйного моделирования.

Благодаря 3D-печати можно воссоздать любую трёхмерную модель, в том числе кристаллические структуры. Однако не всё так просто, ведь преобразование сложных кристаллических структур в файлы для 3D-печати очень рутинное и кропотливое занятие. Тем не менее, исследователям удалось разработать способ преобразования проще и быстрее.

Для этого предлагается сначала найти строение кристаллической структуры кристалла для её анализа. Сделать это несложно, так как множество кристаллов в формате файлов хранятся в открытой базе данных кристаллографии (CrystallographyOpenDatabase). На указанном сайте располагаются более трёх сотен тысяч кристаллических структур. Все они содержатся в формате файла, называемом файлом кристаллографической информации (CrystallographicInformationFile (CIF)) (рис. 7). Процесс изменения CIF в файлы для 3D-печати очень долог и сложен. Эти преобразования файлов в формат файлов для 3D принтеров стали более доступными на figshare благодаря учёным: Винстент Ф. Скальфани, Джахред М. Литтла и Джейсон Э. Барру из Университета Алабамы; Валерий Ткаченко, Карен Карапетян, Алексей Пшеничнов из Королевского химического общества; Энтони Дж. Уильямс из Национального центра вычислительной токсикологии Агентства по охране окружающей среды.

Объёмные напечатанные кристаллические структуры (рис. 8) превосходят пластиковые наборы молекулярных моделей из пенопластовых шариков, бусин, которые уже устарели как модели, так как они легко ломаются.

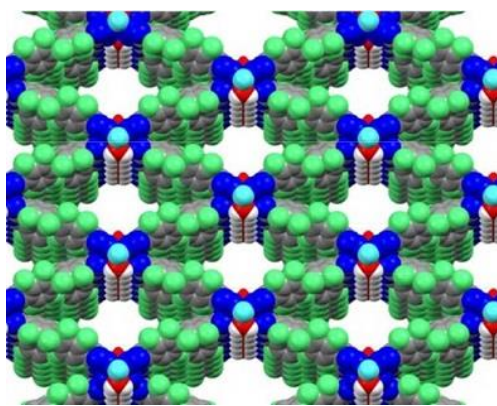


Рис. 7. 3D-модель кристаллической структуры

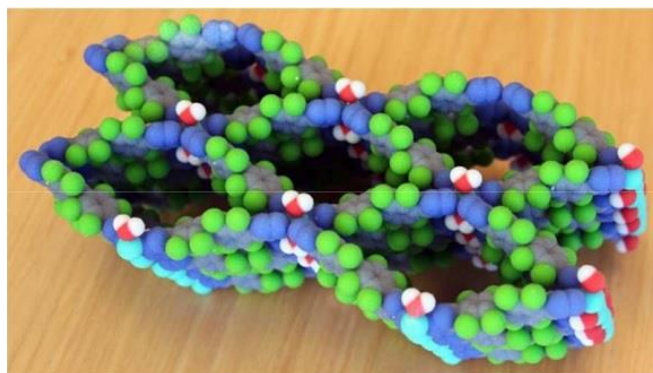


Рис. 8. Модель кристаллической структуры, напечатанная на 3D принтере

Таким образом, работа учёных по созданию 3D-моделей кристаллических структур и их объёмных печатных прототипов очень весома. Они обладают увеличенной детализацией, которая не присуща исходным объектам. Трёхмерные модели кристаллических структур неотъемлемым инструментом в процессе обучения не только геологов, химиков, но и многих других направлений обучения.

Список литературы:

1. Трёхмерная графика. Режим доступа: – https://ru.wikipedia.org/wiki/Трёхмерная_графика
2. 3D принтер. Режим доступа: – <https://ru.wikipedia.org/wiki/3D-принтер>
3. Библиотека геологии. Режим доступа: – <https://www.geolib.net/crystallography/singonii.html>
4. Sketchfab. Режим доступа: – <https://en.wikipedia.org/wiki/Sketchfab>