

УДК 514

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ХИМИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ

Комаревцева А. О., студентка гр. ХПб-191, I курс

Богданова Т. В., старший преподаватель

Кузбасский государственный технический университет

имени Т. Ф. Горбачева, филиал в г. Кемерово

г. Кемерово

Для эффективного обучения в техническом вузе, творческой работы и дальнейшей успешной профессиональной деятельности необходимо развивать пространственное мышление. Это уникальная способность мысленно создавать объемные трехмерные геометрические объекты, оперируя которыми, можно изменить их положение, форму, «увидеть» внешние контуры и внутреннее устройство.

Изучение инженерной графики и применение программ компьютерного проектирования во время обучения позволяет с помощью наглядных изображений понять форму объекта и выполнить соответствующие построения конкретных геометрических образов. При проведении анализа конструкций сложный составной предмет мысленно разбивается на элементарные фигуры, определяются связи и выбираются операции, такие как перемещение, зеркальное отображение, масштабирование, поворот, объединение, вычитание, выдавливание и так далее. Таким образом, использование этих комбинаций позволяет создать чертеж или технический рисунок.

Использование в химии геометрических идей составляет основу молекулярного дизайна. В синтетических задачах ищут оптимальные пути синтеза молекул, которые имеют определенную геометрическую форму. Это позволяет создавать новые молекулы любой, даже невероятной структуры, соблюдая при этом устойчивость молекулы.

Получение знаний и умений в рамках прохождения данного курса, дают возможность строить модели ионов, атомов, молекул, кристаллов, наночастиц и их соединений. Для решения задач при анализе расположения этих элементарных частиц используются понятия плоскости, многогранника и поверхности. В компьютерной версии имеются геометрические примитивы для плоского чертежа и объемного проектирования.

Геометрической моделью, взятой за основу строения атома и его положения в пространстве, является система распределения совокупности точек, имеющих евклидову систему координат.

Точки могут иметь разное положение в пространстве, вокруг них можно описать сферу.

Кристаллическая решетка – это представление подмножества точек (узлов решетки), полученных из одной произвольной точки всеми трансляциями. Все точки образуют элементарную ячейку кристалла, она содержит всю

информацию о его атомной структуре и имеет форму многогранника (параллелипеда). Далее происходит векторная трансляция решетки посредством построения множества факториальных зон, параллельных данной плоскости и данному узловому ряду. Образуется бесконечная система, состоящая из параллельных связанных между собой граней [1].

Графическое представление кристаллов интересно не только для создания новых химических образцов, но и для искусственной обработки драгоценных камней.

В практической деятельности графическое изображение молекулы показывает ее структуру в виде многогранников. Здесь атомы — это точки, которые играют роль вершин, а ребра, соединяющие вершины — химические связи. При этом, линейные и угловые размеры многоугольников не имеют значения.

Во время построения молекулы белого фосфора P_4 выбирается простой правильный многогранник (тетраэдр). Куб используется для построения углеводорода C_8H_8 и кристаллов поваренной соли $NaCl$. Многие кубические кристаллы имеют форму октаэдра, правильного многогранника с шестью вершинами, например монокристалл алюминиево-калиевых квасцов. У сурьменистого сернокислого натрия структура молекулы имеет вид тетраэдра, у бора — икосаэдра. Самый сложный из правильных многогранников — додекаэдр, он реализуется среди углеводородов и в кристаллах сернистого колчедана FeS [2].

Основное геометрическое понятие, которое используется в химии и других естественно-научных дисциплинах, является симметрия. На принципах симметрии основаны многие фундаментальные законы природы, среди которых — закон сохранения энергии.

Если рассматривать симметрию в химии, можно увидеть, что симметрией и симметрическими фрагментами обладают практически все известные молекулы.

Самой известной среди симметрий является зеркальная — самая универсальная и распространенная в разных культурах, природных явлениях. Здания, расположенные на оси симметрии, до сих пор оцениваются как доминирующие. При этом сложные композиции могут иметь главную и второстепенные оси симметрии.

Зеркальная симметрия — самая понятная из симметрий, ее изучение начинается уже во время школьного обучения. Симметричные объекты — это повторяющиеся равные части, которые состоят из геометрических образов: точек, прямых, плоскостей, поверхностей. Выбирается плоскость симметрии, относительно которой фигура делится на две зеркально совместимые части. При построении зеркальной симметрии объект условно делится на правую и левую половину одного целого. Если в определенной закономерности воспроизводить элементы геометрического образа с определенным набором физических свойств, то можно построить симметричную фигуру кристалл

В случае, когда зеркальная симметрия нарушается, в химии этот процесс называется асимметрией (противоположное понятию симметрии). В таких формах элементы симметрии отсутствуют, они имеют более сложную композицию, основанную на сопоставлении материальных элементов.

Другой вид симметрии, использующийся в химии, это симметрия вращения (или осевая симметрия). Она характерна для элементов в форме спирали, винта. Формы совершают полный оборот вокруг оси и несколько раз совмещаются сами с собой. Эта симметрия встречается в белках и нуклеиновых кислотах, а также у гликенов. При построении компьютерной модели применяется цилиндрическая спираль, вдоль которой расположены составляющие ее элементы. Это значит, что в химии чаще встречаются симметричные молекулы. Несимметричные встречаются гораздо реже.

В природе существуют множественные загадки, относящиеся к нарушению законов зеркальной симметрии. Примером могут служить входящие в состав белков и углеводов аминокислоты, располагающиеся зеркально симметрично и представленные в образе двух оптических изомеров. У них подобные свойства, но и только один из них воплощается в действительности. Это очень редкое явление в окружающем нас мире, как, если бы, например, все мальчики рождались только левшами, а девочки — только правшами.

Одно из объяснений этого явления основано на идее автокатализа. Асимметрический автокатализ — это реакция, в которой зеркально асимметричный продукт служит катализатором своего образования. В таких реакциях небольшой избыток одного из двух оптических изомеров, который может образоваться случайным образом в результате флуктуации, будет возрастать по экспоненте, и с течением времени из двух оптических изомеров останется только один, что мы и наблюдаем в живой природе. Это явление называют накоплением зеркальной асимметрии [3].

Дисимметрия — это еще одна аномальность симметрии. Это явление, как правило, выражено в асимметричности деталей или их расположения в форме, которая в целом симметрична.

Антисимметрия — вид симметрии с противоположными признаками. Для построения ассиметричных геометрических тел достаточно построить симметричные относительно оси предметы, но сделать заливку их разными цветами; либо выполнить одну фигуру в виде твердотельной модели, а другую в виде каркаса.

Таким образом, чтобы построить ассиметричную фигуру, необходимо выполнить геометрическое отображение и изменение каких-либо ее признаков (поменять структуру, цвет, направление).

Ассиметрия группируется по цветовым (черно-белым и многоцветным составляющим) и составляющим магнитной симметрии. В многоцветных группах каждый геометрический образ, каждый его элемент описывается как многозначный. Средства компьютерной графики имеют разнообразную палитру цветов для реализации таких проектов.

Построение этих пространственных преобразований возможны при двумерном и трехмерном моделировании компьютерного моделирования [4].

Таким образом, мы рассмотрели всего несколько примеров, которые показывают, как инженерная графика используется в химии. Знания и навыки, полученные на занятиях по инженерной и компьютерной графике, дают возможность конструировать различные химические объекты, причем, не только уже имеющиеся, но и модели необычайных форм.

Список литературы:

1. Чупрунов Е. В. Симметрия и псевдосимметрия кристаллов / Е. В. Чупрунов. – Нижний Новгород: Изд-во ННГУ им. Н. И. Лобачевского, 2015. - 658 с
2. Ерёмин В. В. Математика в химии/ В. В. Ерёмин– 2-е изд., испр. – М.: МЦНМО, 2016. – 64 с
3. Богданова Т. В. Геометрические фигуры в природе / Т. В. Богданова, В.А. Бухмиллер, А. С. Карасев // Сборник материалов IX Всероссийской научно-практической конференции молодых ученых «Россия молодая», 18-21 апреля, КузГТУ. – Кемерово. – 2017. <http://science.kuzstu.ru/wpcontent/Events/Conference/RM/2017/RM17/pages/Articles/0802005-.pdf> (дата обращения 10.03.2020).
4. Богданова Т. В. Применение многогранников в модульных конструкциях хамов и куполов / Т.В. Богданова, Е.Н. Меньшикова, И.А. Гардингер // Сборник материалов IX Всероссийской научно-практической конференции молодых ученых «Россия молодая», 18-21 апреля, КузГТУ. – Кемерово. – 2017. <http://science.kuzstu.ru/wpcontent/Events/Conference/RM/2017/RM17/pages/Articles/0802004-.pdf> (дата обращения 10.03.2020).