

УДК 514

ИЗУЧЕНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛОВ

Матвиенко М. С., 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 аналитического исследования веществ применяется компьютерное моделирование, которое основано на использовании тел малой формы. Эти тела состоят из материальных точек (атомов) или твердых тел, образующих кристаллическую решетку. Изучение геометрических свойств и параметров реальных кристаллов позволит моделировать вещества с совершенно новыми свойствами, которые позволяют получать современные материалы, лекарственные препараты, наноустройства и наномашины. Практически все твердые тела Вселенной (95%) состоят из кристаллов.

Когда ученые-химики начинают создавать новые вещества, анализируя состав молекул, они очень часто используют уже имеющиеся в природе элементы, такие как древнейшие иероглифы и пентаграммы, узоры народных промыслов и элементы окружающего мира. В начале творческого процесса ставятся цели, определяется назначение, прорабатываются этапы и элементы соединения. Самым главным фактором при этом, является наличие определенных знаний и навыков, а, следовательно, и интуиции. Однако, пространственное воображение выходит в этой ситуации на первый план, так как изобретателю необходимо представить молекулу в деталях, а также запланировать форму кирпичей и блоков для будущего строительства, кроме того, полезно провести некоторые приблизительные расчеты, иначе «здание» вряд ли будет построено [1].

Кристаллы представляют собой трехмерную пространственную модель, в которой атомы и молекулы расположены в определенной структуре и находятся в твердом состоянии, т. е. формируют постоянную периодическую решетку. При построении решетки первоначально необходимо создать оригинальную универсальную ячейку, для этого надо знать не только ее уникальный химический состав, но и расположение составных частей (атомов и молекул), их параметры и метрические соотношения. Построив факториалы этой ячейки, то есть размножив ее на бесконечное количество по разным направлениям, появляется возможность создать кристаллическую решетку, спрогнозировав возможности роста граней кристаллов.

Основоположник учения о геометрической структуре кристаллов французский физик О. Бравэ впервые предположил, что имеется только 14 типов полиэдров для конструирования какой угодно решетки в пространстве из ко-

торых можно «собрать» любую пространственную решетку. Благодаря этому, возможно бесконечное множество существующих минералов и структур [2].

Уникальное расположение атомов и молекул определяют, соответственно, геометрические неповторимые структуры, соответствующие данному кристаллу. Эти структуры связаны с различными видами многогранников.

Свойства многогранников, их изображение и взаимное расположение, создание плоских и пространственных форм изучает курс инженерной графики.

Геометрический анализ кристаллов проще начать с изучения поваренной соли ввиду ее доступности и наглядности. Кристаллы отличаются своими размерами и имеют различный внешний вид. Это многогранники в форме куба или призмы, у которых грани взаимно перпендикулярны. Химический состав поваренной соли представлен натрием и хлором. При этом, важно, чтобы атомы веществ были расположены в определенном точном порядке с определенными уникальными свойствами. Солеобразные вещества отличаются от аналогичных кристаллических структур. Силы притяжения атомов натрия и хлора распределяются равномерно по всем направлениям, благодаря чему существует прочная связь элементов в узлах решетки [3].

Кристалл алмаза по своей структуре имеет форму тетраэдра, где атомы углерода расположены по центру. В таком тетраэдре вершинами являются самые близстоящие углеродные атомы. Особую прочность вещества можно объяснить тем, что в самой структуре кристалла присутствует устойчивая атомарная связь. Атомарная ячейка состоит из атомов, которые связаны между собой ковалентной связью. Таким образом мы можем понять, почему алмаз имеет свойственную ему высокую плотность. Кристалл приобретает свои грани при обработке [4].

Искусственные кристаллы – это многогранные фигуры, обладающие симметричными простейшими элементами. Эти геометрически правильные объекты образованы плоскостями, расположенными под одинаковыми углами друг к другу. Линии пересечения этих плоскостей – прямые ребра.

При проектировании кристаллов в компьютерной графике мы используем изучение свойств трехмерных твердотельных моделей – многогранников.

Однако, ученые, которые исследуют кристаллы, сталкиваются с тем, что в природе есть множество кристаллов, имеющих искаженную форму, которая отличается от формы правильного многогранника. Например, скелетные кристаллы представлены различными формами снежинок.

Дендриты – это графически разупорядоченные кристаллы, они разрасстаются в различные стороны подобно ветвям дерева.

Для построения факториальных моделей такой конструкции можно использовать отрезки прямых линий в плоском моделировании и цилиндры в объемном пространстве. При этом, для облегчения построений применяются функциональные клавиши создания массивов.

Нитевидные кристаллы драгоценных металлов (платины, золота, серебра и др.) - многогранники, они имеют поперечное сечение кристаллов в форме треугольника, квадрата, шестиугольника. Но, под влиянием того, что происходило медленное тысячелетнее формирование этих кристаллов, сформировалась неодинаковость межатомных расстояний в различных направлениях и включение внутри других минералов.

Пространственной структурой кристаллов называют пространственную систему повторяющихся однотипных простейших ячеек. Построение их можно сопоставить с построением бесконечного множества прямоугольных массивов в компьютерной графике. При этом заложенные свойства применимы ко всем элементам решетки, независимо от их удаленности. В противовес этому, у жидкости, смолы или пластмассы упорядоченность распространена только на ближайшие участки [5].

Если мы имеем идеальный кристалл, то его решетка имеет равновесное состояние атомов, они расположены бесконечно в заданной симметричной последовательности, образованной параллельными переносами. Такая множественная решетка в итоге может накладываться сама на себя. Такие наложения на наименьшее расстояние и образуют период решетки. Соответственно, по количеству наложений и определяется период решетки. Если мы рассматриваем трехмерную пространственную решетку, это обозначает наличие у нее трех периодов наложений ребер заданной элементарной ячейки.

Работая с симметричными объектами, мы можем вращать точки элементарной решетки вокруг оси. Например, если ось симметрии имеет третий порядок, то решетка, перемещающаяся вокруг нее на треть оборота, накладывается сама на себя.

При наличии геометрического образа заданного размера, например, правильного многогранника с определенным числом сторон, порядок осей симметрии может быть произвольным. Есть и такие решетки, бесконечные по своей форме, но имеющие определенное заданное число порядка оси симметрии [6].

Таким образом, знания и навыки инженерной и компьютерной графики используются при изучении химических соединений, позволяют более детально изучить процессы взаимодействия молекулярных систем.

Список литературы:

1. Левицкий М. Карнавал молекул. Химия необычная и забавная / М. Левицкий. – М.: Альпина нон-фикшн, 2019. – 542 с.
2. Бетехтин А.Г. Минералогия / А.Г. Бетехтин. – М.: Гос. изд. геолог. лит-ры, 1950. – 957 с.
3. Булах А.Г. Общая минералогия: учебник / А. Г. Булах. – Изд. второе, испр. и перераб. – СПб.: Изд-во С.-Петерб. ун-та, 1999. – 356 с.

4. Сонин А.С. Курс макроскопической кристаллофизики / А.С. Сонин. – М.: Наука, 2006. – 256 с.
5. Шаскольская М.П. Кристаллография / М.П. Шаскольская. – М.: Высшая школа, 1984. – 376 с.
6. Попов Г.М. Кристаллография / Г.М. Попов, И.И. Шафрановский. – М.: Высшая школа, 1972. – 352 с.