

УДК 514.18

Є.П.Гордєєва

Луцький національний технічний університет

ГЕОМЕТРІЯ БАГАТОГРАННИКІВ У КРИСТАЛАХ І КВАЗІКРИСТАЛАХ

Розглядаються наукові обґрунтування аспектів геометричних структур квазікристалів.

До початку ХХІ ст. у фізиці твердого тіла існувало наукове положення про структуру двох протилежних класів тіл: безупорядкованих аморфних, у яких повністю відсутня закономірність у взаємному розташуванні атомів, та кристалічних, структура яких має упорядковане розташування частинок.

У класичній кристалографії основний закон зводиться до створення структури кристалу з єдиної чарунки, яка повинна щільно (грань до грані) заповнити всю площину без будь-яких прогалів.

У науці було прийняте положення, що щільне заповнення площини можливе тільки геометричними фігурами: трикутниками, квадратами, шестикутниками, а п'ятикутники не мають бути елементарними чарунками кристалу. Їх не можна щільно підігнати один до одного, оскільки між ними залишається вільний простір. Цей закон вводив різницю між симетрією кристалів та симетрією рослин і тварин, які мають симетрію п'ятого порядку. Тим самим рахувалося, що кристали мають тільки дво-, три-, чотири-, шестикратні обертальні симетрії і не можуть мати п'ятикратну обертальну симетрію.

Зрозуміло, що кристали — це тверді тіла, що володіють плоскими поверхнями (гранями), які перегинаються під характерними кутами і мають впорядковану структуру, складену з твердих тіл Платона. Отже, кристали кам'яної солі (NaCl) формуються у куби, два атоми водню і один атом кисню з'єднуються у формі тетраедрів (H_2O), у кварцу (SiO_2) кристали представляють собою шестигранні призми, у флюориту (CaF_2) існують октаедричні і кубічні агрегати.

Традиційна кристалографія вивчає фізичні властивості, утворення, ріст кристалів, а також зовнішню і внутрішню геометрію кристалу. Плоскі грані, рівні ребра кристалів відображають їх внутрішню структуру, а зовнішня структура виявляється впорядкованими частинками з правильними рядами у суворій послідовності. Геометрія вказаного і визначає просторову кристалічну решітку (рис. 1).

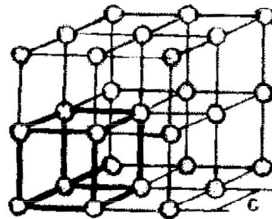


Рис. 1

Кристали, утворені за вказаними властивостями, зберігають однакову орієнтацію та симетрію. Таким чином, очевидно, що геометрія Платонових тіл є основою структури кристалу з регулярним повторенням розташування атомів. Очевидним є і те, що кристал є безперервним трьохмірним поступовим повторенням деякого основного структурного елемента (рис. 1 – кубик). Регулярне розташування і є періодичністю.

Базова структура одиниці кристалу (наприклад, кубика) нескінченно повторюється у всіх кристалах і заповнює весь простір, але кожен атом кристалу зберігає початковий розмір.

У структурі кристалу фундаментальними поняттями є симетрія, яка має дві специфічні операції: трансляційну та обертальну. Трансляційність – це повторення одиниці структури у просторі через визначену відстань вздовж деякої прямої (осі трансляції). Обертальність – це властивість кристалу сумішатися із самим собою при обертанні на деякий кут навколо осі симетрії. За один оберт кристал може займати n разів те ж положення, що і попереду.

Протягом сторіч фізичні і хімічні властивості у канонізованих кристалів в науці були затвердженими, але досконала їх геометрія залишалася таємною і невирішеною загадкою, доки не з'явилися квазікристали (квазі¹⁾ кристали).

У 1984 р. ізраїльським вченим Д. Шехтманом (лауреат Нобелівської премії 2011 р.) були відкриті нові невідомі геометричні структури у твердих тілах під назвою квазікристали (шехманіти). Відкриття стало революційним в науці, оскільки зачіпало фундаментальні положення у фізиці та хімії твердого тіла. За законами класичної науки квазікристали не повинні існувати у твердих тілах, а мають бути тільки в рідинах.

Отже, квазікристали – це тверді тіла з особливим дивовижним типом організації атомної структури. Від звичайних кристалів вони відрізняються тим, що не містять так званої елементарної чарунки, яка копіює сама себе у трьох вимірах. Сенсацією було те, що з відкриттям квазікристалів зникло наукове положення про заборону пентагональної симетрії у твердих тілах.

Перші квазікристали були отримані при відкритті сплаву AlMn при його затвердненні. У процесі різкого охолодження швидко формувалися «базові елементи», що швидко з'єдналися між собою жорсткими октаедричними містками. У структурі нових речовин внутрішній ікосаедр з атомів алюмінію був оточений зовнішнім ікосаедром з атомів марганцю. У базовому елементі знаходилося 42 атоми Al і 12 атомів Mn.

Як відомо, грані ікосаедра є рівнобічними трикутниками. При утворенні октаедричного містка з атомів Mn необхідно, щоб два таких трикутники (по одному в кожній чарунці) наблизилися близько один до одного і розташувалися паралельно між собою. У результаті такого

¹⁾Квазі (лат. quasi) – якби.

фізичного процесу й утворюється квазікристалічна структура з ікосаедричною симетрією і пропорцією «золотого перерізу».

«Базовий елемент» – це поняття, що міститься в основі моделі квазікристалу. Базові елементи з'явилися на екрані упорядкованою картиною, що характерна для симетрії ікосаедра, що володіє забороненими осями симетрії п'ятого ступеня. Додекаедр та ікосаедр володіють шістьма обертальними симетріями п'ятого ступеня, тобто суміщаються самі з собою при оберті на $1/5$ оберту навколо осей, що проходять через центри протилежних граней у додекаедра і через протилежні вершини у ікосаедра. Ця обертальна симетрія має назву ікосаедральної. Таким чином, підкреслюється що у фізиці твердого тіла діють усі п'ять твердих тіл Платона.

У структурі квазікристалічних сплавів визначена ікосаедральна симетрія п'ятого ступеня, декагональна – десятого ступеня і додекагональна – дванадцятого ступеня.

Встановлено, що квазікристали – це проміжне становище між кристалічними і аморфними тілами. Їх фізичні властивості відрізняються від властивостей металів. Структура кристалів є періодичною, а квазікристалів – аперіодичною, що було встановлено в процесі дослідження кристалічного водню, структура якого була основою плазмових двигунів апарату в Розвілі (штат Нью-Мехіко) і семи космічних кораблів, що потерпіли катастрофу.

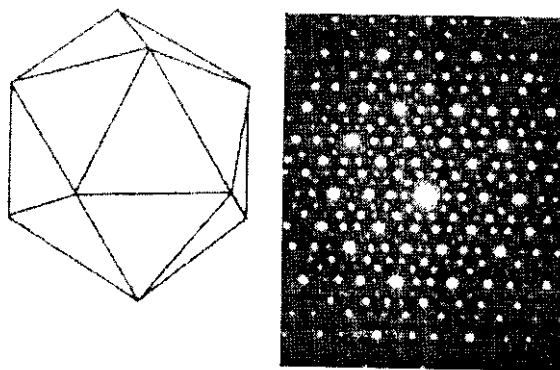


Рис. 2

На рентгенівському знімку (рис. 2) з'являється ікосаедральна характеристика квазікристалу і його геометричний вигляд у базовому елементі.

Після відкриття «шехманітів» вчені відкрили сотні інших видів квазікристалів. У 2010 р. в Росії вперше був знайдений природний мінерал, що мав квазікристалічну структуру (рис. 3, а). На рис. 3, б наведений приклад математичної мозаїки Пенроуза. Плоска структура вірусу (рис. 3, в) також подібна структурам, що приведені на рис. 3, а і 3, б.

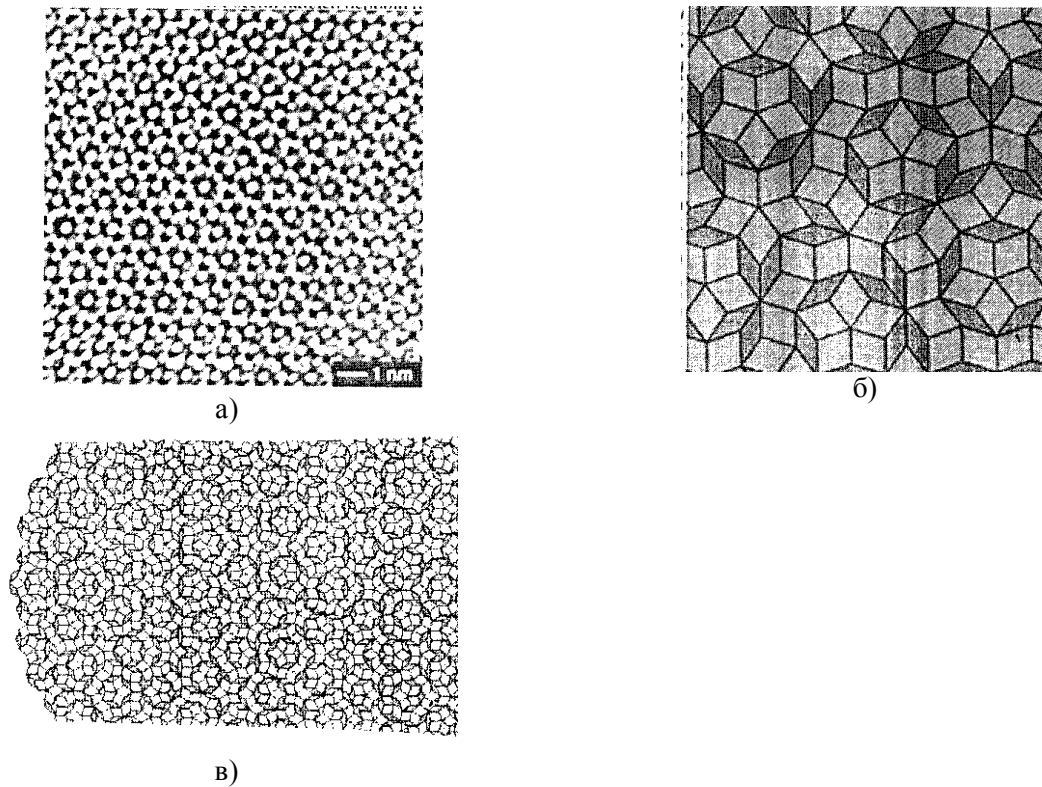


Рис. 3

Квазікристал утворюється синтезуванням з металевих сплавів. Найчастіше застосовувані сплави для квазікристалів – це сплави заліза, міді, алюмінію. Такий же склад містить природний квазікристал. Відкриті квазікристали також в сталях.

У природному квазікристалі вдалося виділити зерно малих розмірів, ікосаедральна геометрія якого отримана за допомогою електронного мікроскопа (рис. 4): а – зображення зерна, б – математична мозаїка.

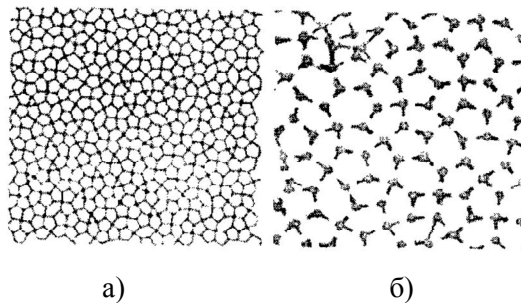


Рис. 4

Встановлено, що вода при визначених умовах перетворюється в квазікристалічну структуру – в одну з форм організації структури твердих тіл з ікосаедральною симетрією.

Японський вчений Ан-Панг-Цай змодельював квазікристали синтезуванням на основі полімерів.

Спочатку структура кристалічної решітки змодельована на комп'ютері, потім за заданими параметрами був утворений квазікристал сплаву алюміній-мідь-нікель-кобальт у формі додекаедра (а) і сплаву алюміній-нікель-кобальт у формі декагональної призми (б) – рис. 5.

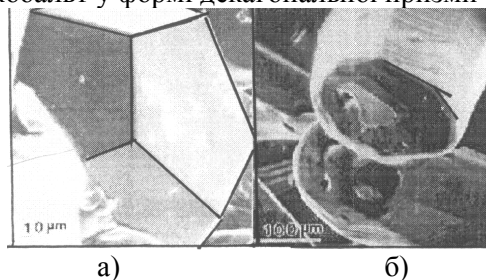


Рис. 5

Зображення моделі квазікристалу було отримане на екрані комп'ютера (рис. 6, а), на якому чітко графічно виділений базовий елемент структури, геометрія якого подібна нескінченному мозаїчному рисунку (рис. 6, б).

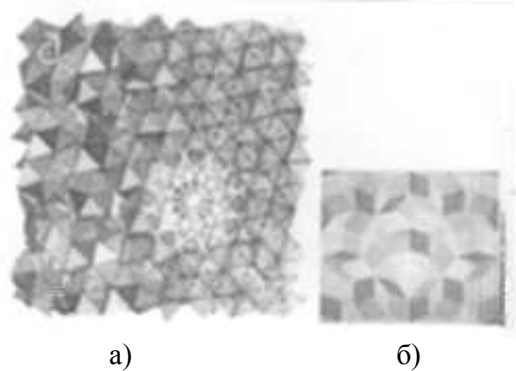


Рис. 6

Для теоретичного обґрунтування форми росту квазікристалу вчені звернули увагу на математичне відкриття Пенроуза Р. (Англія).

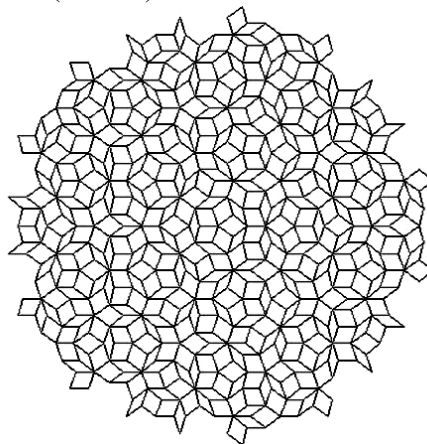


Рис. 7

На основі ікосаедральної симетрії і «золотого перерізу» математик сформував геометричні положення на щільне заповнення площини тільки ромбами двох типів, які утворюють нескінченний неперіодичний візерунок (як на рис. 7).

Цей прийом був названий «паркетуванням плитками Пенроуза», або «решітками Пенроуза». У цьому замощенні без прогалів і перекриттів форма базового елемента (рис. 7) не повторюється. Таким чином, ці плоскі структури є аперіодичними. Аперіодичність структури визначена і у квазікристалах. Для трансформації «решіток Пенроуза» на тривимірний простір роль ромбів (вузького і широкого) мають відігравати ікосаедри. А ікосаедральні структури є квазікристалами.

За квазікристалами велике майбутнє у нанотехнологіях. На основі квазікристалів отримане міцне скло, тонкі плівки і покриття з низьким коефіцієнтом тертя, утворюються композиційні матеріали, нові структури гум. Речовини з квазікристалами мають високу твердість, стійкість до корозії та інші особливі властивості. Дослідження нових речовин продовжується.

1. Гордєєва Є.П., Величко В.Л. Багатогранники (правильні, напівправильні, зірчасті). Частина 1. – Луцьк, 2007.
2. Гратиа Д. Квазікристаллы. М.: УФН т. 156, в. 2, 1988.
3. Гордєєва Є.П. Геометрична модель структури квазікристалу. Науковий журнал «Комп'ютерно-інтегровані технології: освіта, наука, виробництво». №6. – Видавництво Луцького національного технічного університету. Луцьк, 2011.