

Лаухін Дмитро¹, Довгаль Денис²

¹професор, доктор технічних наук, професор, НТУ «Дніпровська політехніка»,
Дніпро, Україна, e-mail: laukhin.d.v@ntu.one

²доцент, кандидат технічних наук, доцент, НТУ «Дніпровська політехніка»,
Дніпро, Україна, e-mail: dovhal.d.o@ntu.one

МОДЕЛЮВАННЯ БАГАТОГРАННИКІВ КРИСТАЛІЧНОЇ СТРУКТУРИ МАТЕРІАЛІВ НА ОСНОВІ СИМЕТРИЧНИХ ПЕРЕТВОРЕНЬ ЗАСОБАМИ CAD- СИСТЕМ

Анотація. Запропоновано принципівий підхід до побудови поверхонь одиничних кристалів кристалічної решітки матеріалів, заснований на симетричних перетвореннях кінематичних багатогранників кубічної та гексагональної сингоній за допомогою базових інструментів 3D-моделювання CAD-систем.

Ключові слова: кристал, кристалічна решітка, вісь симетрії, багатогранник, сингонія, булева операція, CAD-система, 3D-модель

Вступ. У сучасному матеріалознавстві, зокрема, у кристалографії глибоко вивчають і досліджують кристалічні решітки, їх структури та взаємне розташування окремих кристалів різних матеріалів. У вивченні всіх цих питань окрему і важливу роль відіграє геометричне і комп'ютерне моделювання як кристалічних структур матеріалів так і безпосередньо форм самих кристалів.

Оскільки існує залежність між зовнішньою формою, властивостями кристалів і їхнім складом [1], створення адекватних геометричних і комп'ютерних 3D-моделей форм кристалів вкрай необхідно для подальших досліджень. Мета цих досліджень полягає у створенні нових сучасних матеріалів та поліпшенні властивостей існуючих, зокрема і спеціальних.

Приблизні геометричні форми кристалів більшості матеріалів відомі та досліджувалися багатьма авторами [2]. Але усі дослідження виконувалися виходячи із достатньо спрощеної форми кристалів або з кристалами, форми яких розглядають як прості багатогранники. При цьому ступінь адекватності моделей, які засновані на зазначеному спрощенні, не завжди дають вірогідний результат.

Сучасний рівень розвитку комп'ютерних технологій та потужні прикладні пакети програмного забезпечення дають змогу різко збільшити вірогідність і точність моделювання кристалів і кристалічних структур матеріалів у просторі.



Матеріал і результати досліджень. Метою даної роботи є розробка принципового підходу до побудови багатогранних поверхонь одиничних кристалів різної складності на основі симетричних перетворень призм середньої категорії (кінематичних багатогранників) типовими інструментами CAD-систем.

У тривимірному моделюванні складних багатогранних поверхонь, якими є кристали, виникає проблема їх побудови за допомогою базових формуютьючих (булевих, кінематичних) операцій, оскільки більшість таких поверхонь не є кінематичними.

Форма багатогранника визначається кількістю усіх сортів граней, їх взаємним розташуванням і співвідношенням розмірів граней різного сорту [3]. Гранні поверхні нижчої і середньої категорії (моноедри, діедри, призматичні, пірамідальні, діпірамідальні поверхні, ромбоедри, скаленоїдри тощо) можливо легко побудувати за допомогою булевих операцій. Що ж стосується побудови гранних поверхонь вищої категорії (тетраедри, октаедри, гексаедри, додекаедри тощо), які наближено являють собою форму кристалів, наприклад, таких матеріалів як галіт, пірит, золото, флюрит, хроміт, алмаз тощо, то з точки зору геометричного і комп'ютерного моделювання – це досить складне завдання [4]. І типового алгоритму щодо побудови таких поверхонь засобами CAD-систем немає.

Запропонований підхід до побудови складних гранних поверхонь наявними засобами CAD-систем заснований на симетричних перетвореннях та булевому формоутворенні на базі кінематичних багатогранників гексагональної і кубічної сингонії. Сутність даного підходу полягає у тому, що зазначені базові гранні поверхні легко утворюються стандартними формуютьючими операціями та містять крім простих осей симетрії – інверсійні осі різних порядків. Ці властивості кінематичних багатогранників гексагональної і кубічної сингоній дають змогу з даних простих у побудові гранних поверхонь отримувати практично будь які базові форми багатогранників (відомо 25 середньої і 15 вищої категорії) а також їх комбінації, яких можливо утворити нескінченну кількість.

На рис. 1, а наведено систему внутрішніх (глобальних) і зовнішніх (локальних) осей симетрії, базових площин і точок гексаедра (куба), за допомогою яких базовими булевими операціями побудовані 3D-моделі - приклади багатогранників кубічної сингонії – октаедр (рис. 1, б), ромбічний додекаедр (рис. 1, в).

На рис. 2, а наведено систему внутрішніх (глобальних) і зовнішніх (локальних) осей симетрії, базових площин і точок гексагональної призми, за допомогою яких базовими булевими операціями побудовані 3D-моделі - приклади багатогранників гексагональної



сингонії – гексагональна діпіраміда (рис. 2, б), симетричний комбінований багатогранник з гранями двох сортів (рис. 2, в).

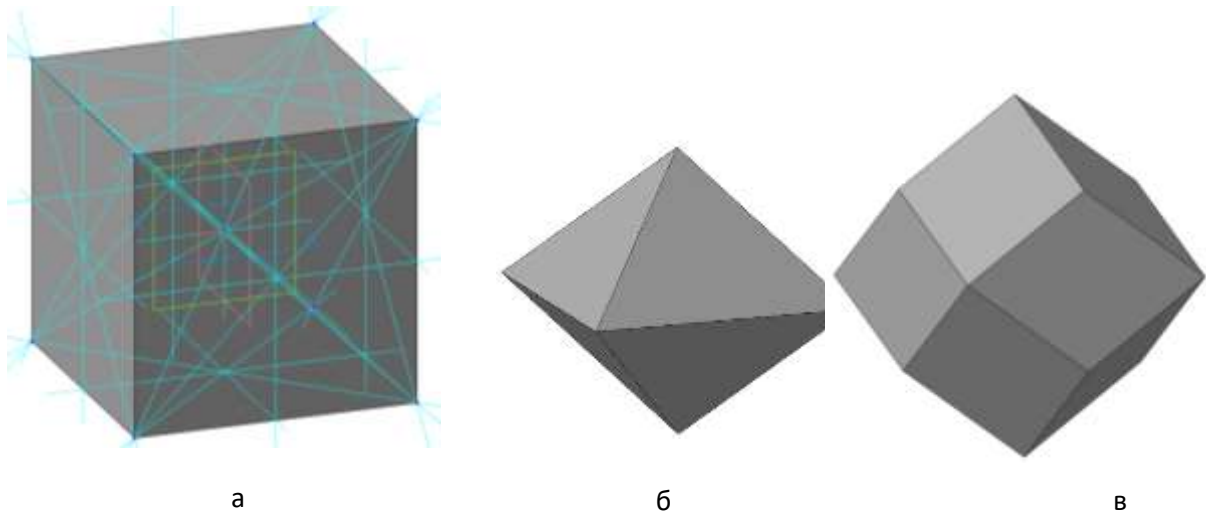


Рисунок 1 – Приклади побудови багатогранників кристалів кубічної сингонії

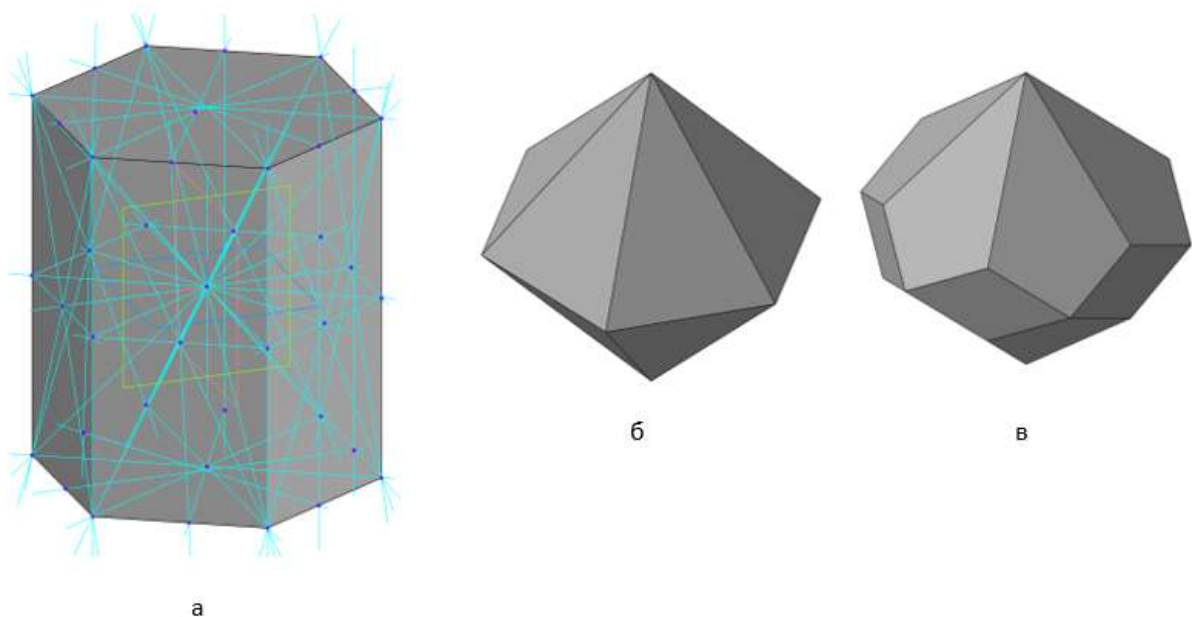


Рисунок 2 – Приклади побудови багатогранників кристалів гексагональної сингонії

Висновки. Запропонований принциповий підхід до побудови поверхонь одиничних кристалів кристалічної решітки матеріалів, дає змогу з на базі простих кінематичних багатогранників кубічної та гексагональної сингоній із застосуванням системи внутрішніх і зовнішніх осей симетрії, базових та допоміжних (побудованих на основі осей симетрії) площин і точок за допомогою базових булевих операцій САD-систем

отримувати 3D-моделі багатогранників практично будь-якої складності. Використання запропонованого підходу може суттєво допомогти у моделюванні дослідженні форми кристалічної решітки матеріалів та агломерацій кристалів матеріалів.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Кривуша, Л., & Большаков, В. (2002). Кристалографія, кристалохімія і мінералогія. Gaudeamus. 223 с.
2. Allan, L. & Bell, R. (1997). Computer Modeling in Inorganic Crystallography. Academic Press. 348 p.
3. Бідніченко, О. (2022). Особливості геометричних поверхонь та способи їх комп'ютерного моделювання. Прикладна геометрія та інженерна графіка, (102), 13-26.
4. Ванін, В., & Вірченко, Г., Яблонський, П., Незенко, А. (2020) Деякі актуальні задачі сучасного комп'ютерного геометричного моделювання технічних об'єктів. Прикладна геометрія та інженерна графіка (97), 16–22.

