

CRISTALOGRAFIE:

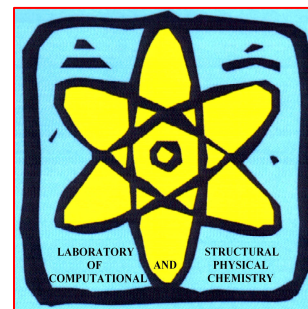
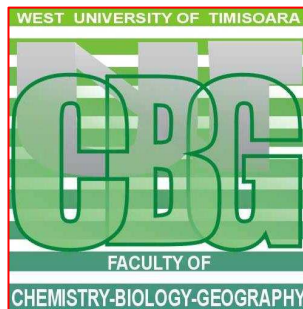
C1: STRUCTURA CRISTALINĂ A MATERIEI

Conf. Dr. Mihai V. PUTZ

*Chemistry Department, West University of Timisoara,
Pestalozzi Street No.16, Timisoara, RO-300115, Romania;
E-mails: mvputz@cbg.uvt.ro or mv_putz@yahoo.com ;
Web: <http://www.mvputz.iqstorm.ro>*

*Member of American Chemical Society
Member of European Society of Mathematical Chemistry*

*Editor in-Chief of Int. J. Chem. Model. (at NOVA Publishers)
Editor in-Chief of Int. J. Environ. Sci. (at SERIALS Publishers)
Guest Editor & Editor of Int. J. Mol. Sci. (at MDPI Organization)*



„Când Dumnezeu a stabilit cerurile am fost acolo: când El a așezat *un compas* pe fața adâncurilor”.



Cartea Proverbelor, 8-27

O scurtă "istorie a cristalelor"

cca. 6000 IC	Sunt active minele de Turquoise egiptene.
Antichitate	Pietrele strălucitoare (în special diamantul, safirul, esmeraldul și rubinul) sunt foarte căutate, fiindu-le atribuite proprietăți magice și curative!
ca. 350 IC	Theophrastus descrie forma regulată a cristalelor Garnet.
ca. 30 IC	Strabo denumește cuarț ($\kappa\rho\upsilon\sigma\tau\lambda\lambda\omicron\zeta$ = <i>crystallum</i> în Latină), ceea ce numim astăzi curent "cristal".
1611	Kepler sugerează că simetria hexagonală a fulgilor de zăpadă este datorată "împachetării regulate a particulelor constituențe".
1665	Hooke avansează ipoteza "sferoizilor" ca și componente ale cristalelor.
1669	Steno observă cum cristalele, indiferent de originea lor, totdeauna pastrează anumite caracteristici legate de unghiurile dintre fețe.

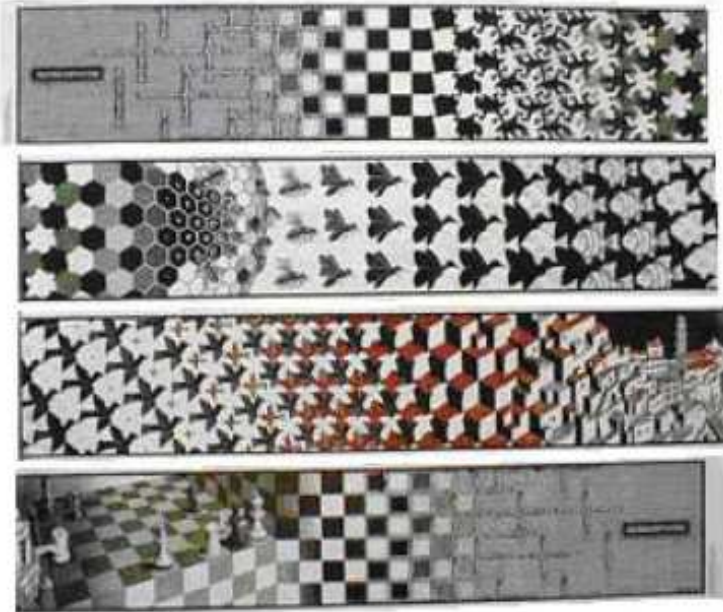
O scurtă "istorie a cristalelor"

1801	Haüy propune legea "Indicilor Raționalizați" în cristal, formulând astfel legea fundamentală a morfologiei cristalelor.
1808	Malus observă polarizarea luminii produsă de anumite cristale.
1815	Biot descoperă formele rotatorii <i>levo-</i> și <i>dextro-</i> ale cuarț-ului.
1819-22	Mitscherlich descoperă <i>izomorfismul</i> (cristalele cu compoziție diversă dar cu aceeași formă) și <i>polimorfismul</i> (cristalele cu forme diferite dar cu aceeași compoziție chimică) - echivalent cu alotropismul elementelor chimice.
1839	Miller folosește <i>indicii Miller</i> pentru a desemna fețele cristalelor.
1848	Pasteur descoperă cristalele enantiomorfe.
1880'-90'	Sohncke, Federov, Schönflies și Barlow dezvoltă teorii despre simetria internă a cristalelor – dar încă fără evidența experimentală care să le confirme teoriile!

O scurtă "istorie a cristalelor"

1912	Friedrich, Knipping și von Laue descoperă <i>difracția cu raze X</i> .
1913	Ewald introduce conceptul de <i>rețea reciprocă</i> .
1914	Teoria lui Debye despre mișcarea termică a atomilor în solide prezice apariția factorului Debye-Waller în structurile înregistrate prin metodele difracției cu razele X.
1916	Debye și Scherrer experimentează difracția produsă de pulberile cristaline.
1924	Bernal et al. – determină structura grafitului.
1926	Investigațiile lui Frenkel relevă existența <i>defectelor punctuale</i> în structurile cristaline.
1926	Goldschmidt formulează ipoteza structurilor cristaline pe baza atomilor sferici.
1927	Pauling, pornind de la modelul ionic a lui Goldschmidt, formulează așa numitele <i>reguli ale lui Pauling</i> pentru combinarea ionilor în cristale.
1934	Patterson introduce <i>funcția Patterson</i> ca soluție pentru determinarea structurii cristalelor bazată pe difracția în raze X.
1955	Formularea <i>principiului golurilor</i> (Principles of Laves) – explică ocuparea spațială în structurile cristaline.

M. C. Escher (1898-1972)



”Metamorfoze II”, 1940

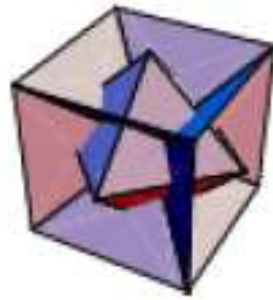


”Pești și Bărci”, 1948

Cele 5 solide platonice de la stânga la dreapta:



tetraedrul



cubul



octaedrul



dodecaedrul

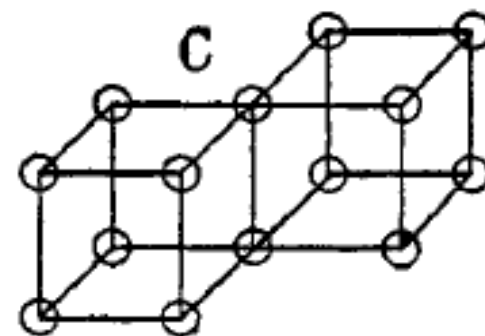
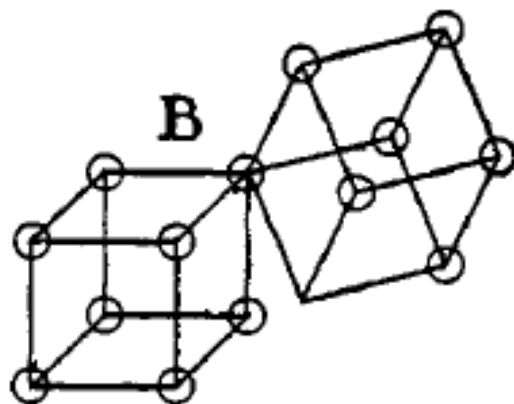
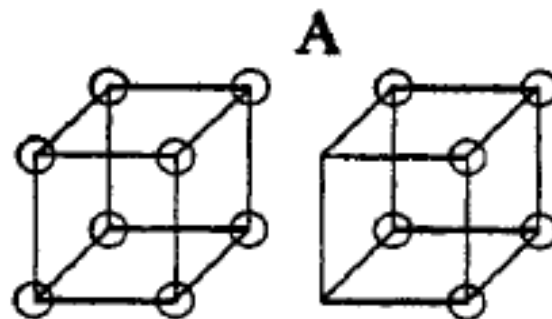
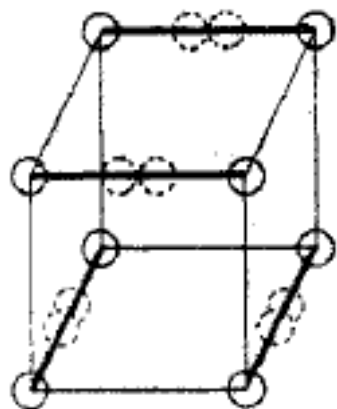
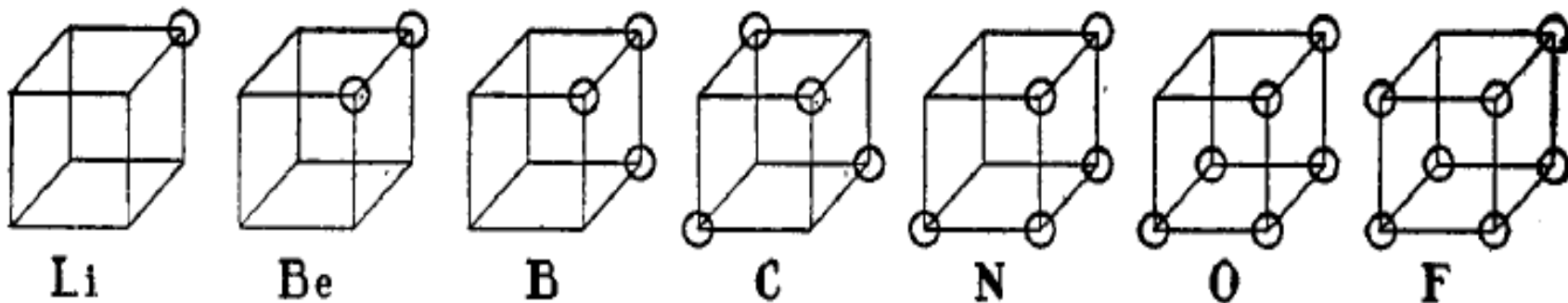


icosaedrul

Ca făurar, D-zeu nu poate crea o lume perfectă dintr-un material imperfect. Așadar, Platon credea că toate substanțele sunt compuse din: *aer* (unități octaedrice), *pământ* (unități cubice), *foc* (unități tetraedrice) și *apă* (unități icosaedrice).

Unitățile dodecaedrice erau asociate materialului ce compunea constelațiile și paradisul. În acest univers Pământul era centrul, iar mișcarea planetelor avea loc pe sfere cristaline.

Atomul cubic:



Paradigma Cristalină a Codului Genetic

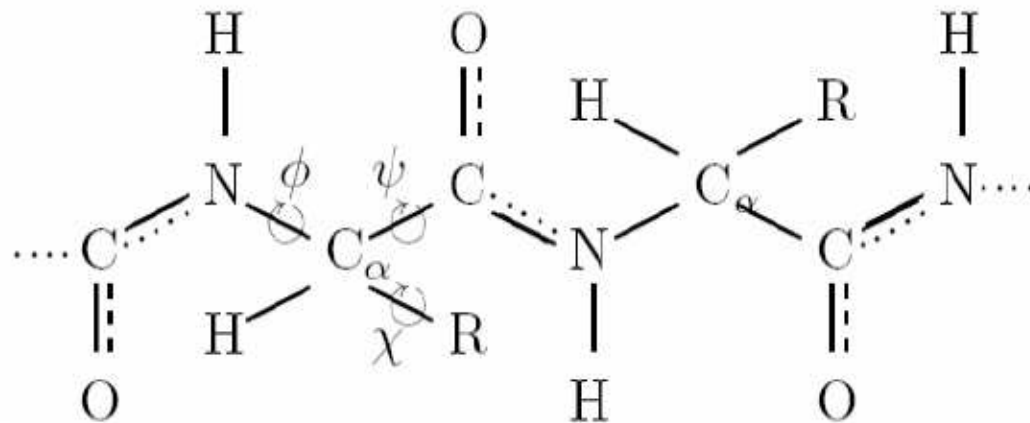
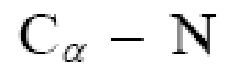
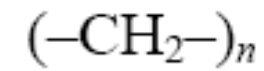
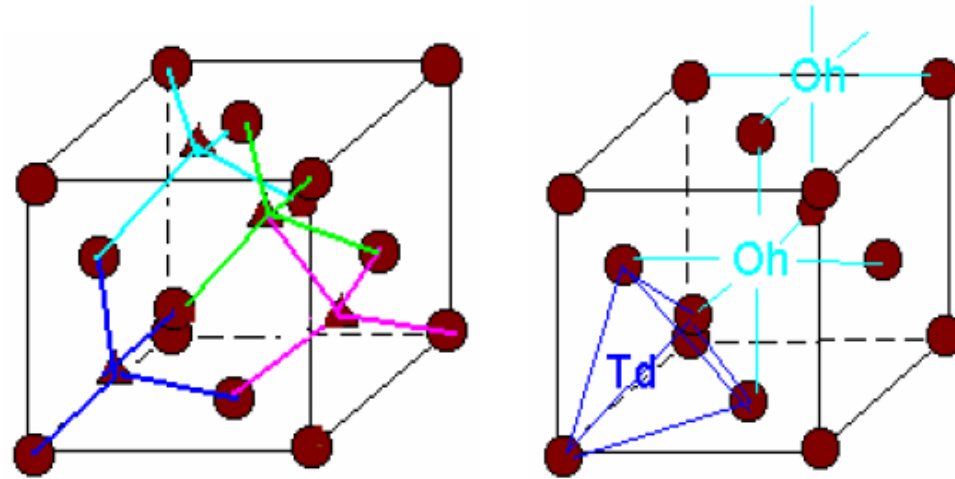
alegere optimă accidente înghețate
de ce carbonul? de ce lanțul peptidic?

De ce 20 de aminoacizi – nici mai mulți nici mai puțini?

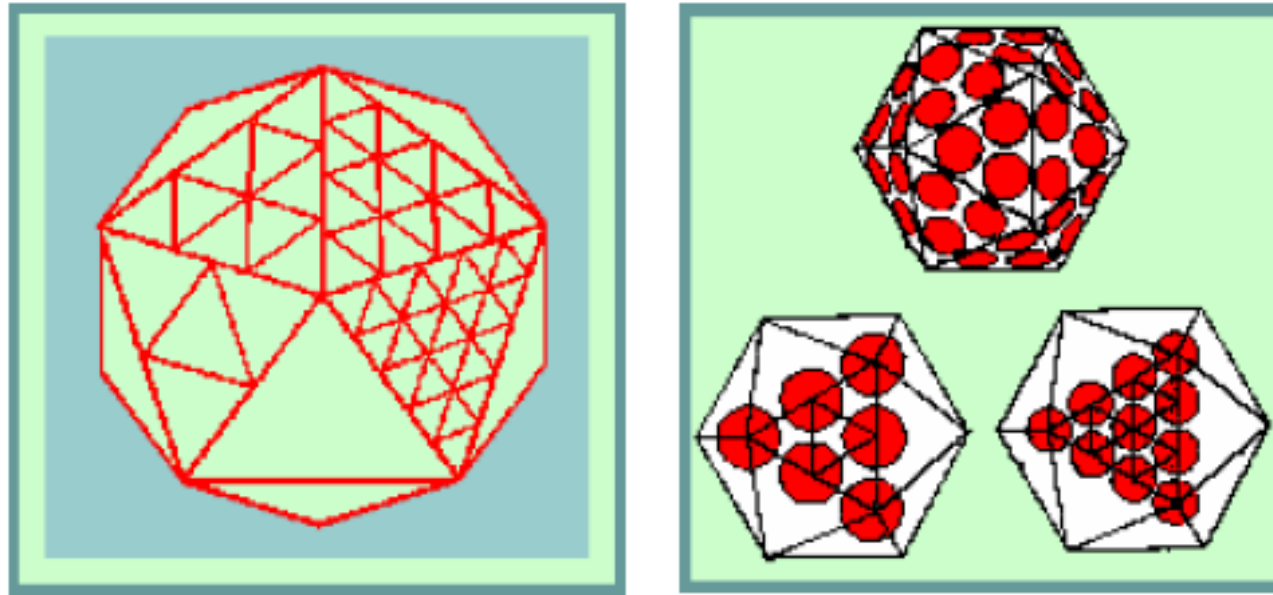
limbaj discret, simplex

Proprietăți	Simplex 1-dimensional	Simplex 3-dimensional
<i>Informații:</i>	<i>Numerice</i>	<i>Structurale</i>
<i>Spațiul Discret:</i>	numerele întregi	rețea/laticice
<i>Variabile de Bază:</i>	$\{0,1\}$	$l=\{0,1\}$
<i>Implementare:</i>	intrare/ieșire	tetraedru
<i>Operații:</i>	adunare/multiplicare	translație/rotație

Paradigma Cristalină a Codului Genetic



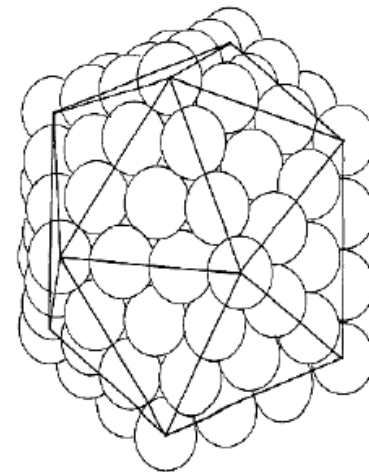
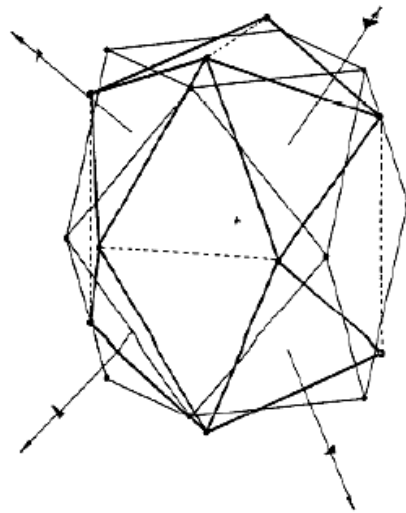
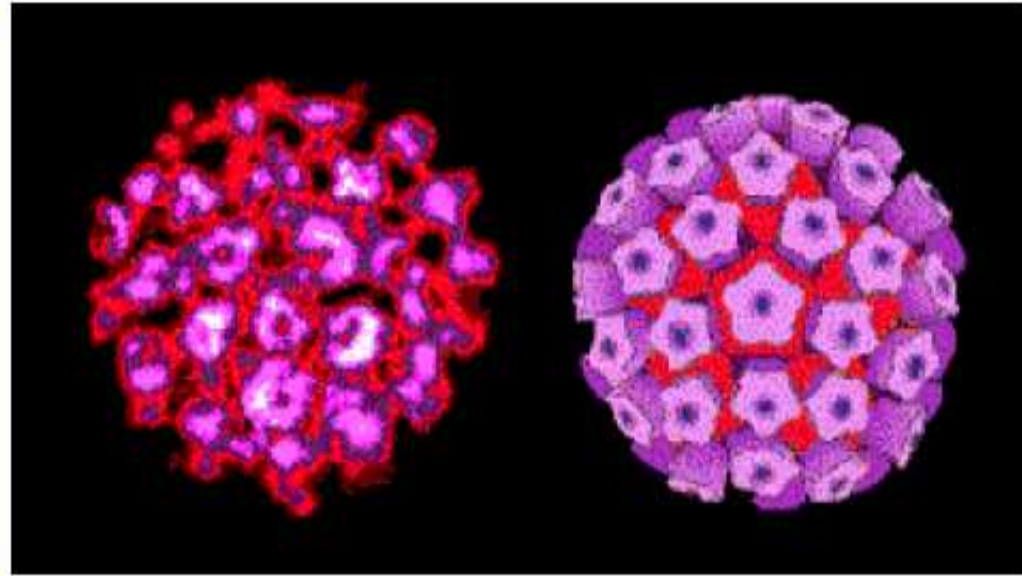
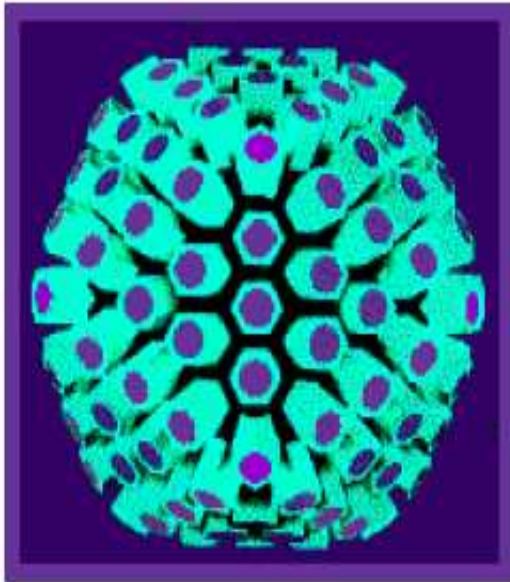
Simetria și împachetarea icosaedrală



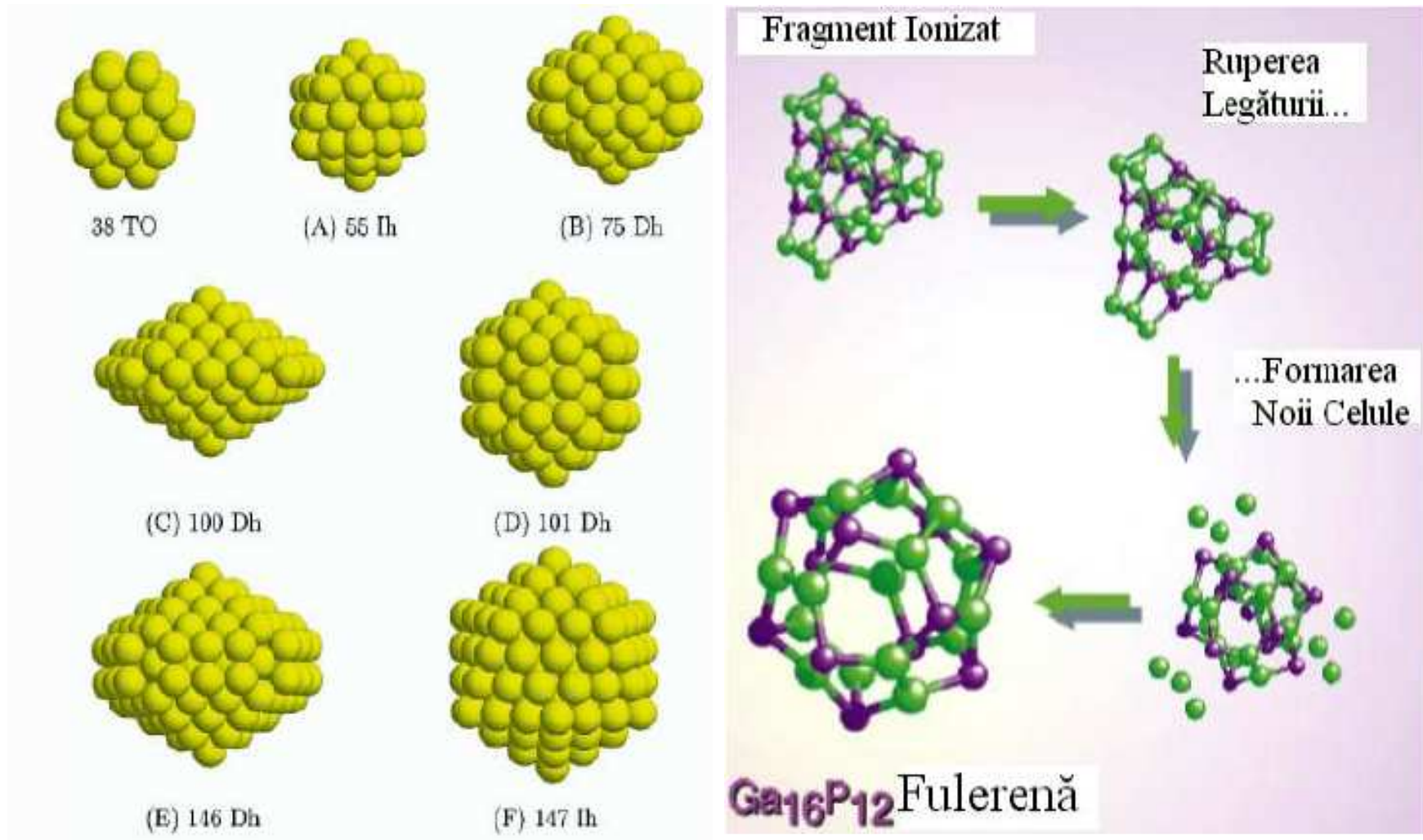
În 1956 Crick și Watson au notat că situarea nucleului acid în mici virioni (particule infectate de un virus) ajunge doar pentru încodarea a mai mult decât câteva din moleculele unei proteine.

Astfel, au concluzionat că, pentru o codificare consistentă, singura modalitate rezonabilă ar fi să se considere capsida, stratul exterior al unei proteine, ca fiind constituită din același tip de molecule, numite *subunități identice*, ce se suprapun (și se împachetează) succesiv.

Simetria și împachetarea icosaedrală



nano-clusteri,



Clasic vs. modern în conceptele cristalografice

Abordarea Clasică	Abordarea Modernă
Cristale	Clusteri, cristaloizi
Identitatea absolută a componentelor	Substituția și non-stoechiometria
Identitatea absolută a vecinătății fiecărei unități structurale	Cuasi-identitatea și cuasi-echivalența
Numar infinit de unități (celule)	Numar finit de unități (structurale)
Operații pe o scala (de translație) infinită	Elemente de simetrie locale, domeniu finit
Elemente ale spațiului Euclidian: plane exacte, linii drepte	Elemente ale spațiului curb: membrane, întrepătrunderi, elice
Împachetare prin compactizare succesivă	Asamblare ierarhică, informațională
Un unic nivel de organizare	Ierahizarea domeniilor de organizare
Repetiție conform operațiilor de simetrie	Repetiție în acord cu automata celulară
Operațiile de simetrie cristalografice	Simetria operațiilor din program

ἀγεωμέρητος
μηδεὶς
εἰσίτω

“Nu lăsați să intre pe nimeni străin de geometrie!”