

大家一起做多孔螺旋型與鑽石型三度週期 最小曲面的串珠模型 (上) — 立體幾何介紹

左家靜^a、莊宸^b、金必耀^{*c}

^a 國家高速網路與計算中心、^b 美國麻省理工學院化學系、^{*c} 國立臺灣大學化學系

*byjin@ntu.edu.tw

■ 摘要

動手做可以有效增進數學與化學的學習成效，本文介紹一種模組化方式，讓大家能一起動手製做兩種結構優美的三度週期最小曲面的串珠模型：多孔螺旋型與鑽石型類石墨烯體。我們將這兩類曲面分解成相同的螺旋長條型帶子，可以分別進行製作，最後再以兩種不同的方式連結，製作成含有約八個晶胞的兩種 $2 \times 2 \times 2$ 多孔類石墨烯體，所製成的串珠模型不但形態優美結構精巧，更是一個具有數學與科學內涵的藝術品。

關鍵字：物理模型、分子模型、串珠模型、三度週期最小曲面、多孔螺旋最小曲面、鑽石型最小曲面、石墨烯結構

“The educational value of building models representing the arrangements of atoms in crystals cannot be over-emphasized; and by this we mean that the student actually assembles the model and does not simply look at a ready-made model, however much more elegant the latter may be.”

– A. F. Wells in “*Structural Inorganic Chemistry*”

■ 引言

你知道蝴蝶的翅膀為什麼看起來那麼地絢麗嗎？你知道為什麼手指頭長時間泡在水中只會產生皺紋，而不會融化在水中嗎？這些有趣而且重要的現象，其實都跟奈米尺度的多孔螺旋週期結構 (gyroidal structures) 有關¹⁻⁵。

瞭解物質在奈米尺度的結構、性質、與其變化是化學研究的核心問題，但是弄清楚奈米尺度的各種結構特徵是不是一件容易的事情。例如，雖然平面的石墨烯結構容易理解，僅是一個六邊形的蜂窩排列，但是由石墨烯所延伸出來的多孔週期立體結構，像是多孔碳舒瓦茲體 (carbon Schwarzites) 或是碳海綿體 (carbon sponge) 微觀細部與整體構造並不是那麼容易想像。一個辦法是模型的建構，通過製作巨觀的模型，可以增進我們對奈米尺度立體結構的認識^{6,7}。

本文介紹兩種多孔碳舒瓦茲體的串珠模型製作，這種結構也可稱為多孔碳石墨烯體，這兩種結構分別為多孔螺旋結構 (簡稱 G 型，參見圖 1) 與鑽石型結構 (簡稱 D 型)，均屬於三度週期最小曲面 (Triply Periodic Minimal Surfaces, TPMS)，也是雙曲面型的曲面，雖然僅有少數實驗室能夠合成類似

本文所討論的多孔碳石墨烯體，但是週期最小曲面等幾何結構是普遍存在於自然界以及一些高分子體系中，所以通過多孔石墨烯體的模型建構，我們可以對於此類雙曲面型的非歐幾何奈米結構有一些初步的認識^{3,6,7}。

在國際化學年的最後兩個月，本文作者曾與北一女數位化學科的老師以及三個班的同學一起合作，利用模組化方式，成功地製作出一大一小兩個含有 6750 的超級珠璣碳球 C_{4500} 。這證明，雖然串珠是一個循序的建構過程，但是通過適當的分解，也可以將複雜的串珠過程，分解成簡單的單元，可由大家合力動手做，在很短的時間內，做出極富數學與科學意涵的串珠雕塑。除了超級珠璣球可以分解為較為簡單易做的單元，三度週期最小曲面的串珠結構經過適當的分解，也可以產生結構單純，易於製做的單體螺旋長帶，如此，縱然僅有初步經驗的一些串珠初學者，也可以按圖索驥，一起合作，製做出驚人的串珠幾何藝術品⁸⁻¹⁷。

除了 D 型與 G 型最小曲面，還有一個結構更為單純的三度週期最小曲面，叫做 P 型曲面，但由於 P 型曲面串珠模型的分解方式，跟 D 型與 G 型曲面不一樣，所以本文將以 G 型與 D 型最小曲面串珠模型的製做為主。製作程序分為兩個部份：第一是單體的

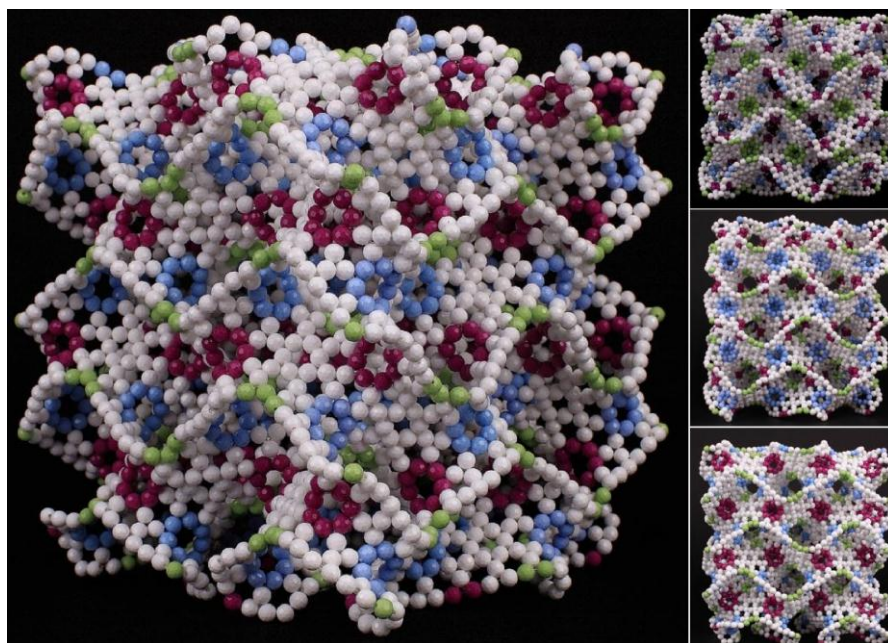


圖 1：多孔螺旋結構型三度週期最小曲面

製做，這個部分可以由許多人一起製作；第二是單體的連結與組裝，以兩種不同的連結方式，可分別產生 D 型與 G 型兩種三度週期最小曲面。在這三種最小曲面中，G 曲面特別的不易想像，這是因為此結構中沒有鏡面對稱，在曲面上找不到直線；而 P 與 D 曲面則有鏡像對稱，以及可清楚判斷的結構單元，因此本文作者很早就成功地利用一個單元一個單元的構築方式，建構起此兩結構的串珠模型，唯獨 G 型曲面特別困難，一直到本文作者發展出以螺旋長帶為單元的模組方法後，才終於成功製作出此結構的串珠模型。

第二階段為單體的連結，這是整個製作過程中最困難的地方，每一個單體為一條螺旋長帶，相鄰的兩個長帶不僅只在同一側相連，而是一條長帶兩側都與相鄰另一個長帶的兩側都有連結，讀者也許會懷疑，如果一長帶的左側已經與鄰帶相連結，右側怎麼可能再與同一鄰帶相連結。如果長帶攤平在一

平面上，那確實是不可能的，但是空間是立體的，若允許長帶在三度空間旋轉成一螺旋帶，則可能同時在長帶的兩側都與鄰帶的兩側相連接。

因此對於 D 型與 G 型兩種最小曲面的結構特徵，有一些基本認識，才能避免產生錯誤。串珠模型製作的一個困擾是，一旦發生錯誤，特別是發生在比較久以前的錯誤，是很不容易進行修改的。我們在下兩節對三度週期最小曲面最些基本的介紹，然後才進入到串珠結構的單體，以及雙體連結規律。

■ 背景知識

自然界充滿著各式各樣的形狀，其中有一類特別引人注意的是最小曲

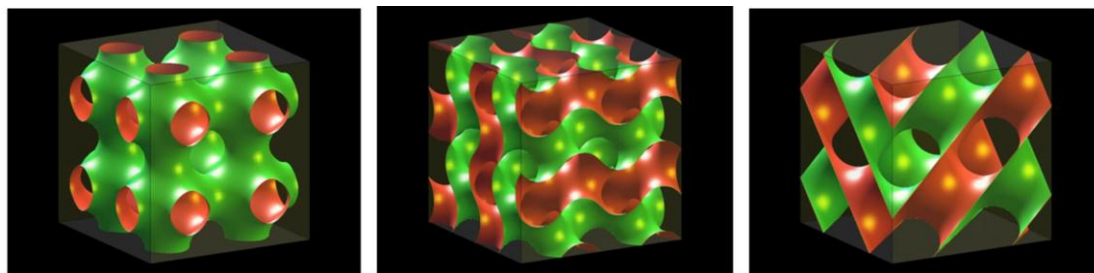


圖 2：三種基本的三度週期最小曲面，由左至右本別是 P 型、G 型、D 型三度週期最小曲面。

面，這種曲面的面積在滿足一定邊界條件下為最小。由於增加面積需要額外的表面能，而自然界有朝向能量變得越小越好的趨勢，因此自然界常常出現這種最小曲面。三度空間的曲面的彎曲程度，可以用兩種曲率來描述：高斯曲率與平均曲率。高斯曲率是兩個主曲率 κ_1 與 κ_2 的乘積 $G = \kappa_1\kappa_2$ ，平均曲率則是主曲率的平均值 $K = (\kappa_1 + \kappa_2)/2$ 。根據高斯曲率的正負，曲面可以分為正的曲面與負的曲面。若曲面在某一點的高斯曲率是正的，在這點附近的曲面是朝著同一個方向彎曲，一個最常見的例子是地球；而負的高斯曲

率，在那一點附近會像是鞍點，像是馬的背部，沿著一個方向朝上彎曲，而垂直的方向，則是向下彎曲。最小曲面指的即是那些平均曲率處處為零的曲面，一個最簡單的情形是平面，此時兩個主曲率均為零，即 $\kappa_1 = \kappa_2 = 0$ ，因此平均曲率自然為零。主曲率不為零的最小曲面必須滿足 $\kappa_1 = -\kappa_2$ ，所對應的高斯曲率一定是負的，非平的最小曲面必然處處都是鞍點。

本文所討論的 P、D 與 G 旋型舒瓦茲體（參見圖 2 所示），不僅是最小曲面，而且還是三度無限延伸的週期最小曲面。P 型與 D 型曲面是由十九世紀德國數學家舒瓦茲

（H. A. Schwarz）所發現，臺灣中學同學應該都有學過舒瓦茲在數學上另一個重要的貢獻，即柯西-舒瓦茲不等式。P 型曲面是第一個三度延伸、沒有邊界的週期最小曲面，由於的結構單元與正立方體有相同的對稱，比起其他三度最小曲面還要簡單而基本，所以舒瓦茲稱此曲面為原型（Primitive），表示其重要性。D 型曲面的結構則與鑽石的結構類似，所以稱為鑽石型（Diamond）的最小曲面。P 與 D 型曲面在自然界中的許多微觀結構中都很常出現，化學家也能夠通過化學

合成設計出各種有用的多孔洞沸石結構，由於含有大量的孔洞，所以沸石常具有非常好的催化用途，常被應用到各種化學相關的產業中。

微觀的石墨烯是二維無限延伸的單層純碳結構，其中的碳以三價方式排列成六邊形蜂巢式圖案，可以視為是數學上的平面近似結構，其平均曲率處處皆為零，滿足最小曲面的要求。由於石墨烯所具備的特殊物理特性，此類材料具備有極大的潛能，因此最早成功製備出石墨烯的二位俄裔英籍物理學家 A. K. Geim, 與 K. S. Novoselov，一起獲得 2010 年的諾貝爾物理學獎。在石墨烯上，引入非六邊形會使得石墨烯偏離平面結構，例如，引入一個五邊形使得石墨烯變成含有正高斯曲率的錐體，五邊形正好位在錐體的頂點。另外若在適當的位置引入 12 個五邊形，則可以產生一個封閉的籠形碳分子，其中最重要的結構就是碳六十，或稱為巴克球，具有截頂正二十面的構造，用以表達對美國建築師巴克明斯特·富勒的尊崇，由於發現此類分子對奈米科技的重要性，1996 年的諾貝爾化學獎頒給了 R. Smally、R. Curl、H. Kroto 三位化學家。

引入五邊形可以產生正的高斯曲率，但引入是大於六的七邊形或是八邊形，則會產生相反的影響，在石墨烯平面上引入負的高斯曲率，對應到的是鞍點。處處為負的曲面不像正曲面，不會形成籠形的封閉球體，而是無限延伸的曲面，數學家將這種負曲面叫做雙曲面型的曲面。在石墨烯適當的週期位置上引入八邊形，可以產生近似各種三度週期最小曲面的石墨烯結構，我們稱這些三度

空間無限延伸的單層石墨烯為「類石墨烯體」(graphenoid)或是「碳舒瓦茲結構」，用以表達對數學家十九世紀德國數學家舒瓦茲(H. Schwarz)的尊敬。

我們在下一節會針對 P、D、G 三種曲面的幾何做簡單的介紹，然後在下一篇文章說明如何用適當模組化方式，把整個編織過程分解成許多簡單的單元，進行組裝。

■ P、D、G 三度週期最小曲面的結構

舒瓦茲的老師是德國著名的數學家魏爾斯特拉斯(K. Weierstrass)，他證明最小曲面可以用含有一個參數 θ 與一個任意解析函數 $R(\omega)$ 的適當的一組方程式來表示，這個參數 θ 的值是從 0 到 $\pi/2$ 的任意實數。給定一個特定的解析函數 $R(\omega)$ ，便有 θ 從 0 到 $\pi/2$ 一整個家族無限多個最小曲面。譬如，D 型與 P 型曲面屬於用特定解析函數 $R(\omega)$ 的同一家族最小曲面，其詳細形式並不重要，當 θ 為 0 時，得到的是 D 曲面。而當 θ 為 $\pi/2$ 時，得到的是 P 曲面。很長的一段時間，人們都以為只要 θ 為其它的值時，對應的最小曲面都會自我相交，而且不是週期函數。但在 1960 年代末，在美國太空總署工作的物理學家余恩(Alan Schoen)為了要研發質輕強度高的新型材料時，製作了 P 型與 D 型曲面的塑膠模型，在試圖將 P 型曲面轉變成 D 型曲面的過程中，他偶然間發現在這兩者之間，存在有另一個彼此不相交的週期最小曲面，此曲面所對應的 θ 角度大約在 38 度左右，由於在這個全新的三度週期最小曲面中，朝著 x、y、z 三個方向都是螺旋孔洞，而英文字“gyrate”的意義是以螺旋的方式行進，因此余恩稱這

種三度週期最小曲面為 gyroid，直譯為「類螺旋體」。另外還有一個一維的最小曲面稱為 helicoid，可譯為「類螺旋體」。本文將 gyroid 譯為「多孔螺旋三度週期最小曲面」，或簡稱為「多孔螺旋曲面」、「多孔類螺旋體」。

一般來說，要利用魏爾斯特拉斯方程來產生這三種曲面的空間圖像，

需要用到複數積分，並非易事。然而我們可以用下列三個三角函數的隱函數方程式，分別來近似 P、D、G 三種曲面：

$$\cos x + \cos y + \cos z = 0$$

$$\cos x \cos y \cos z + \sin x \sin y \sin z = 0$$

$$\cos x \sin y + \cos y \sin z + \cos z \sin x = 0$$

利用這些三角函數的隱函數公式，我們在圖二繪出這三個曲面的近似結構，讀者應該不難看出這些曲面的基本特徵。現在的計算機上有許多現成的數學繪圖軟體，可以直接輸入公式，就產生隱函數方程式所對應的三度空間曲面。本文的 3D 模擬圖皆是利用 matlab 軟體所繪製的，其他像是蘋果電腦上所附的 grapher 也可以輕鬆繪出這些曲面，若

是能夠配合動態的旋轉，可以更容易認識這些曲面的立體結構。

這三個曲面將空間切割成兩個全等，但互不相通各自連續的區域，我們在圖 1 與圖

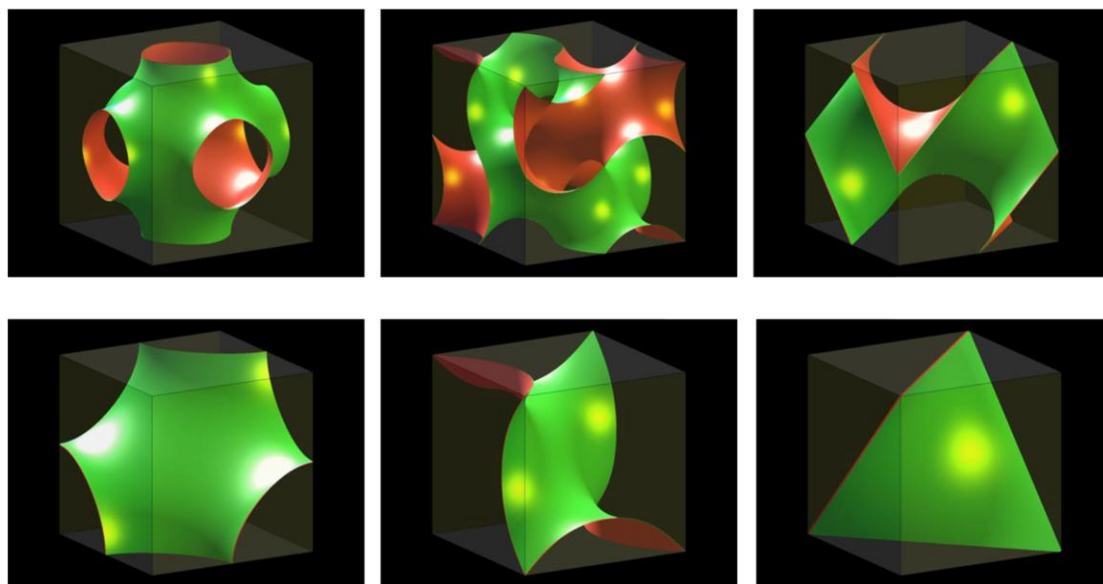


圖 3：P、G、D 型三度週期最小曲面。第一列含有一個晶胞；第二列則是一個晶胞；第三列則是不可進一步化約的最小的重複單元。

3 中，將三度週期最小曲面的兩側，屬於不互相連的兩個連續區域，用綠與紅兩種不同顏色表示。由於這些區域彎來復去，前後左右上下都是彼此連通的，感覺起來很像迷宮，在英文的文獻中常稱其中一個區域為一個 Labyrinth，就是迷宮之意，三度週期最小曲面中有兩個全等的連續迷宮。除此，屬於同一家族的 P、D、G 曲面還有另一個特性：隨著角度 θ 的改變，曲面並沒有發生擠壓或是伸張，用數學術語來說，這種變換是等度量的 (isometric)。這一點會反應在最後我們所做出來的近似串珠三度週期最小曲面上，也就是這三種曲面的類石墨烯體的局部結構基本上是一樣的。

我們在圖 2 中依序繪出含有 $2 \times 2 \times 2$ 八個單元的 P 與 G 曲面，以及含有 $1 \times 1 \times 1$ 一個單元的 D 曲面。而在圖 2 中的第一列，我們給出含有 $1 \times 1 \times 1$ 一個晶胞的 P 與 G 曲面，以及含有 $1/8$ 個晶胞的 D 曲面；圖 3 的第二列則是再將第一列的大小縮小為其 $1/8$ 。

實際在製作最小曲面時，我們不可能製作一個真正無限延伸的體系，那會佔滿整個世界，我們的目標是製作一個 $2 \times 2 \times 2$ 八個單元的模型，這可以有許多的可能選擇，圖 2 與圖 3 所示僅是一種可能的情形，由於基本長條單元的選擇，我們將製作的多孔螺旋型以及鑽石曲面的串珠模型，與圖 2 及圖 3 中的 G 型與 D 型曲面切割方式會有些出入，以 G 型曲面串珠模型為例，實際上比較接近圖 3 中所切割的 G 型曲面，上面與兩個側面 xz 與 yz 所切的位置稍有不同，所以整個結構並非是正立方體，而時稍微向 z 方向延長一些。圖 4 的右側，我麼也給出與 xz、yz 平行的側切面，以及與 xy 平面平行的上切面，四個側切面與上下兩切面的紋路並不一樣。

我們還刻意地繪晶胞所對應的立方體，

方便讀者的想像，這三個週期最小曲面在晶胞邊緣上的曲線形狀。特別是在圖二中，最小的單元對應到一個所謂的猴子鞍點 (monkey saddle)。在這些點附近，曲面是平的，兩個主曲率皆為零，有時稱為平點 (flat points)。對應到的「類石墨烯體」模型，在平點附近會用由一個蒽 (coronene) 的結構來

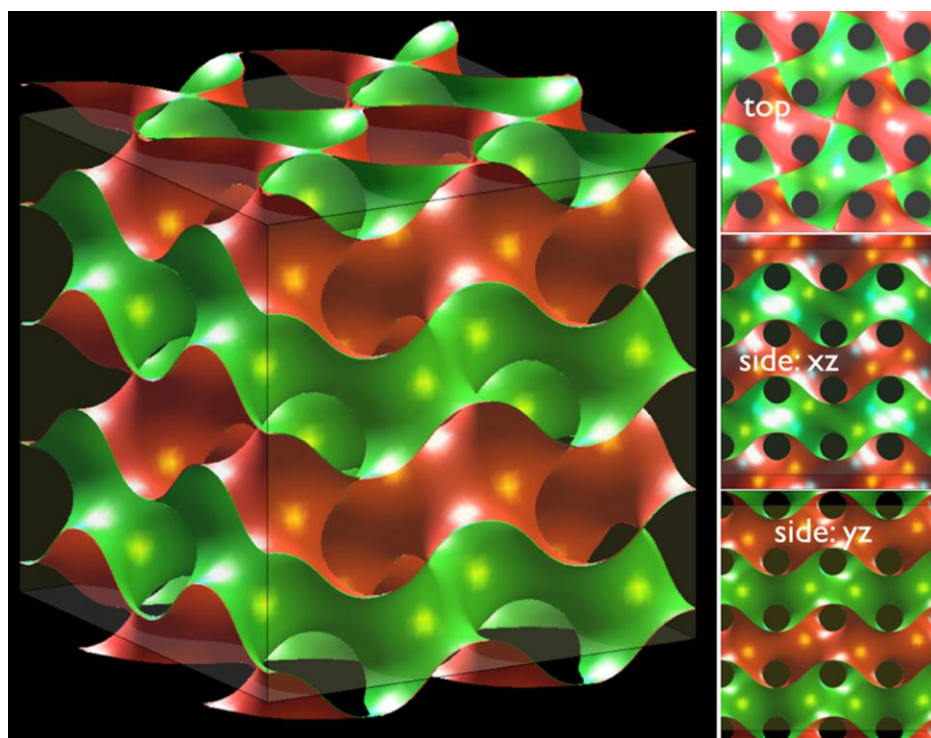


圖 4：多孔螺旋最小曲面：這是本計劃所將製作實際的串珠模型，比 $2 \times 2 \times 2$ 八個晶胞沿 z 方向上下各多出約 0.25 個單位，實際所對應到的 G 曲面區域，以及從三個方向朝此區域所看到的圖像，讀者可以跟首頁的串珠模型圖相比較。

近似 (圖 5)，蒽的中文有幾種不同的翻譯，例如暈苯、六苯並苯、蒽。環繞在蒽周圍有六個八邊形，分別交替地朝向 x、y、z 方向，這個結構特徵可以當做製作串珠模型時，隨時用以檢查結構是否正確。由於所有的八邊型是完全是全等的，不同的是有三分之一的八邊型面向 x 方向，另外三分之一則朝向 y

方向，剩下的則朝向 z 方向，所以可以用顏色來區分這三類的八邊形，如圖 5 所示，我們分別用藍、紅、紫三種顏色來區別，以方便製作時，隨時檢查之用。讀者完全可以有自己所設計的配色方式，這也是串珠模型與一般分子模型一個不一樣的地方，相同的分子模型，可以有各種配色方法，以呈現製作者對色彩的感覺與想法。

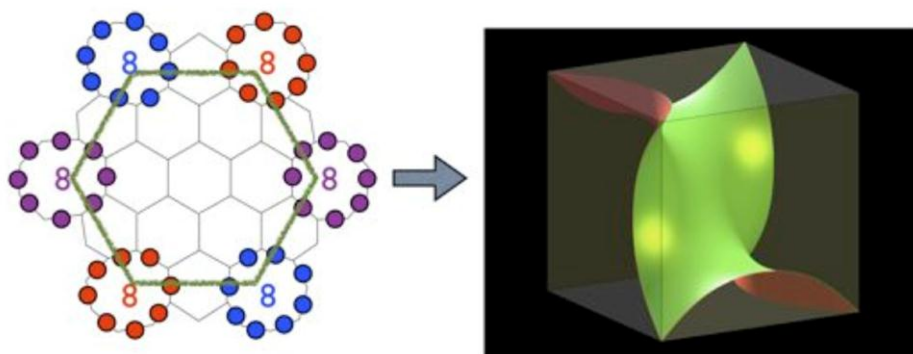


圖 5：猴子鞍點由一個六苯並苯結構單元近似。猴子鞍點 (monkey saddle) 與一般常見的鞍點 (saddle) 步一樣，一般的鞍點是在馬的背部，人坐上去，兩腳橫跨在兩側，前後的方向向上。但是這種鞍點不適合猴子來乘坐，因為猴子有一條長長的尾巴，所以除了兩個向下方向讓腳橫跨，還需要第三個方向讓尾巴垂下，圖右所示便是多孔螺旋週期最小曲面中的這種猴子鞍點。

■ 結論

本文介紹 P、D、G 三種週期最小曲面的立體幾何，以及曲面的平均與高斯曲率等相關概念。對這些立體幾何的初步認識有助於建構這些模型的實作，對於了解這類型奈米材料的空間幾何有是有幫助的，在下一篇文章「三度週期最小曲面的串珠模型 (下) 」中，我們將仔細解釋 D 與 G 兩種結構串珠模型的實作¹⁸。

■ 致謝

本文作者感謝臺灣大學新興物質與前瞻元件科技研究中心與量子科學與工程中心對於本計劃的支持，並感謝國科會支持我們持續在科學與藝術交叉領域中進行探索。

■ 參考文獻

1. Saranathan V.; Osuji, C.O.; Mochrie, S.G.; Noh, H.; Narayanan, S.; Sandy, A.; Dufresne, E.R. *Proc. Natl. Acad. Sci. U S A.* **2010**, 107, 11676-81.
2. Schoen, A. H. *NASA Technical Note No. D-5541*, Washington DC, **1970**.
3. Schoen, A. H. *Interface Focus*, **2012**, 2, 658-668.
4. Hyde, S. T.; O'Keefe, M; Proserpio, D. M. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2008**, 47, 7996-8000.
5. Hyde, S. T.; Andersson, S.; Blum, Z.; Lidin, S.; Larsson, K.; Landh, T.; Ninham, B. W. *The Language of Shapes – The role of curvature in condensed matter physics, chemistry and biology*, Elsevier, **1997**.
6. 金必耀, 左家靜 *珠璣科學系列 科學月刊* **2012**, 72-73, 230-233, 386-388, 556-558, 714-717.

7. 金必耀, 莊宸, 左家靜 *化學季刊* **2008**, 57, 316-324.
8. 金必耀 *化學季刊* **2012**, 70, 271-279.
9. Chuang, C.; Jin, B.-Y.; Wei, W.-C.; Tsou, C.-C. *Proceedings of Bridges: Mathematical Connections in Art, Music, and Science*, **2012**, 503-506.
10. Chuang, C.; Jin, B.-Y.; Wei, W.-C. 2012 *Joint Mathematical Meetings Exhibition of Mathematical Art*, ed. by R. Fathauer and N. Selikoff, Tessellations Publishing **2012**, 17.
11. Jin, B.-Y.; Chuang, C.; Tsou, C.-C. *Proceedings of Bridges: Mathematics, Music, Art, Architecture, Culture*, **2010**, 391-394.
12. Chuang, C.; Jin, B.-Y.; Tsou, C.-C. *Proceedings of Bridges: Mathematics, Music, Art, Architecture, Culture*, **2011**, 523-526.
13. The Beaded Molecules website, <http://thebeadedmolecules.blogspot.com>.
14. Jin, B.-Y.; Chuang, C.; Tsou, C.-C. *J. Chin. Chem. Soc.* **2010**, 57, 316-324.
15. Chuang, C.; Jin, B.-Y.; Tsou, C.-C.; Tang, N. Y.-Wa; Cheung, M. P. S.; Cuccia, L. A. *J. Chem. Edu.* **2012**, 89, 414-416.
16. Tsou, C.-C.; Chuang, C.; Jin, B.-Y. *Proceedings of Bridges: Mathematical Connections in Art, Music, and Science* **2013**, 495-498.
17. Horibe, K.; Jin, B.-Y.; Tsou, C.-C. *Proceedings of Bridges: Mathematical Connections in Art, Music, and Science* **2014**, 503-508.
18. 金必耀, 大家一起做多孔螺旋與鑽石型三度週期最小曲面的串珠模型 (下) — 實作 · *臺灣化學教育* **2014**。