

УДК 548.3:548.1

МОДЕЛИРОВАНИЕ КВАЗИФРАКТАЛЬНЫХ КОНФИГУРАЦИЙ МЕЖФАЗНЫХ ГРАНИЦ МЕТОДОМ ИТЕРАЦИИ ПРЯМОУГОЛЬНЫХ ГЕНЕРАТОРОВ НА 2D СЕТКАХ

Иванов В.В., Таланов В.М.

Лаборатория дизайна новых материалов Южно-Российского государственного технического университета, e-mail: valtalanov@mail.ru, valivanov11@mail.ru

Обсуждены методика и некоторые результаты моделирования вероятных конфигураций межфазных границ на поверхности композиционных материалов, полученные методом итерации прямоугольных генераторов на определенных сетках Кеплера-Шубникова.

Ключевые слова: итерационное моделирование, генератор, сетки Кеплера-Шубникова, квазифрактальные кривые, лакунарные спектры

MODELING OF QUAZI-FRACTAL CONFIGURATIONS OF THE INTERPHASE BORDERS BY ITERATION METHOD OF RECTANGULAR GENERATORS ON 2D NETS

Ivanov V.V., Talanov V.M.

Laboratory of novel materials design, South-Russian state Engineering University, e-mail: valtalanov@mail.ru, valivanov11@mail.ru

The method and some modeling results of the possible configurations of inter-phase borders onto surface of a compositional materials received by iteration of rectangular generators on the definite Kepler-Shubnikov's nets were discussed.

Keywords: iteration modeling, generator, Kepler-Shubnikov's nets, quasi-fractal curves, lacunar spectrum

Бесконечная итерация определенных генераторов G , в том числе и прямоугольных (в частности, видоизмененной кривой Коха $K(5/3)$), на отрезке конечной длины приводит к формированию бесконечной фрактальной линии. Для моделирования с помощью этого метода вероятных конфигураций межфазных границ на поверхности композиционных покрытий достаточно получить предфрактал на совокупности простых геометрических 2D-фигур, которые можно рассматривать в качестве сечений 3D-многогранников – простейших аппроксимантов формы микрочастиц фаз [1, 2].

Для моделирования могут быть использованы некоторые из сеток Кеплера-Шубникова, которые включают в себя тетрагоны {4} (т.е. квадраты) в виде тел и/или лакун (например, сетки, производные от сеток Ке-

плера 4444, 488, 46.12) [3]. В этом случае может быть получена информация не только о квазифрактальном характере межфазных границ и их относительной поверхностной концентрации, но и о лакунарных характеристиках поверхности (распределении по поверхности и дискретном лакунарном спектре в виде гистограмм). Для анализа возможных конфигураций использованы результаты модулярного дизайна полигонных и фрактальных структур в 2D-пространстве [4-6] и методика формирования мультифрактальных множеств замкнутых кривых, упорядоченных в 2D-пространстве с использованием 2D-сеток [7, 8].

Прямоугольный генератор $K(5/3)$ может рассматриваться как первый член двух гомологических рядов прямоугольных генераторов $K((n+4)/(n+2))$ и $K((4n+1)/(2n+1))$, где $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$ (рис. 1).

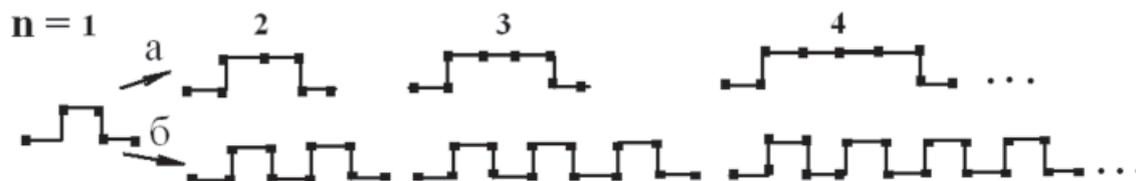


Рис. 1. Изображения первых четырех членов гомологических рядов прямоугольных генераторов Коха $K((n+4)/(n+2))$ (а) и $K((4n+1)/(2n+1))$ (б)

При многократном действии генератора $K(5/3)$ на периметр ячейки квадратной сетки $4 \square 4 \square$ (где символ \square означает лауну) с топологией тетрагонов $4(2)$ из $\{4\}$ -тел формируются упорядоченные в 2D-пространстве

четыреугольные снежинки с топологией связности вершин $4(3)$, а $\{4\}$ -лакуны с вершинной топологией $4(2)$ превращаются в канторову пыль (с лакунарной топологией $4(2)$ и $2(2)-2(1)$ в соотношении 1:4) (рис. 2).

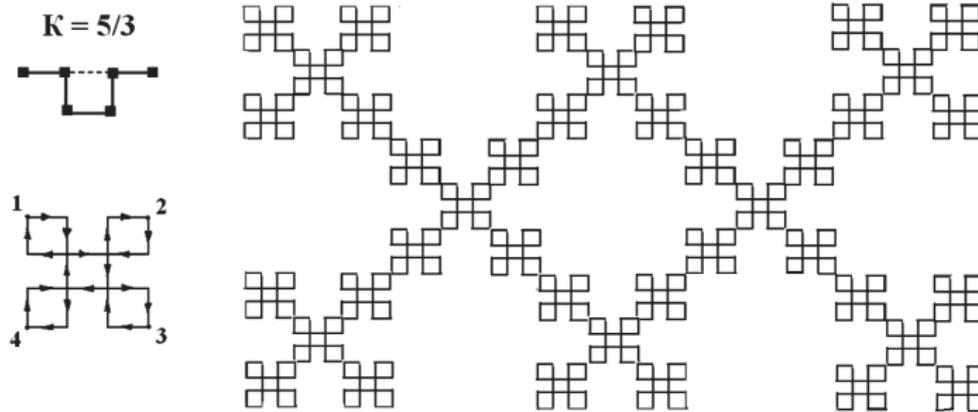


Рис. 2. Изображения прямоугольного генератора $K(5/3)$, схемы его действия внутри 4-лакуны сетки Кеплера-Шубникова $4 \square 4 \square$ и фрагмента лакунарного предфрактала 3-го поколения

При действии прямоугольных генераторов следующих членов гомологического ряда $K((n+4)/(n+2))$ на сетку $4 \square 4 \square$ происходит закономерное затупление вершин снежинок Коха, а в канторовой пыли вторичные лакуны приобретают вершинную топологию $1(2)-3(1)$ и образуют изолированные пары. При действии прямоугольных генераторов членов гомологического ряда $K((4n+1)/(2n+1))$ на сетку $4 \square 4 \square$ происходит закономерное расщепление вершин снежинок Коха, а в канторовой пыли лакуны также закономерно изменяют вершинную топологию до $1(2)-3(1)$.

В гомологических рядах генераторов $K((n+4)/(n+2))$ и $K((4n+1)/(2n+1))$ с каждым i -м поколением длина замкнутой фрактальной кривой возрастает по соответствующим законам $L_i = (n+4)L_{i-1}/(n+2)$ и $L_i = (4n+1)L_{i-1}/(2n+1)$. Фрактальные размерности кривых $D = \ln(n+4)/\ln(n+2)$ и $D = \ln(4n+1)/\ln(2n+1)$ при $n \rightarrow \infty$ закономерно уменьшаются от 1,465 до значения 1,001.

Отметим, что для других сеток Кеплера-Шубникова, содержащих связанные между собой вершинами или изолированные $\{4\}$ -лакуны, результаты действия генераторов – членов указанных гомологических рядов – аналогично. Отличия состоят лишь в разной конфигурации снежинок из $\{n\}$ -тел и топологии связности квадрат-

ных лакун в соответствующих предфракталах. Однако именно эти отличия при использовании разных сеток Кеплера-Шубникова для аппроксимации формы микрочастиц поверхностных фаз определяют многообразие конфигураций квазифрактальных межфазных границ и разнообразие лакунарных характеристик [7, 8].

Список литературы

1. Урусов В.С. Теоретическая кристаллохимия. – М.: МГУ, 1987. – 276 с.
2. Лорд Э.Э., Маккей А.Л., Ранганатан С. Новая геометрия для новых материалов. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. – 264 с.
3. Смирнова Н.Л. О сетках Кеплера-Шубникова // Кристаллография. – 2009. – Т. 54. № 5. – С. 789–794.
4. Иванов В.В., Шабельская Н.П., Таланов В.М. Информация и структура в наномире: модулярный дизайн двумерных полигонных и полиэдрических наноструктур // Совр. наукоемкие технологии. – 2010. – №10. – С. 176–179.
5. Иванов В.В., Демьян В.В., Таланов В.М. Информация и структура в наномире: модулярный дизайн фрактальных структур в двумерном пространстве // Междунар. журн. эксп. образования. – 2010. – №11. – С. 153–155.
6. Иванов В.В., Таланов В.М., Гусаров В.В. Информация и структура в наномире: модулярный дизайн двумерных наноструктур и фрактальных решеток. Наносистемы: Физика, Химия, Математика. – 2011. – Т.2, № 3. – С. 121–134.
7. Иванов В.В., Таланов В.М. Формирование мультифрактальных множеств замкнутых кривых, упорядоченных в двумерном пространстве на сетках Кеплера-Шубникова // Современные наукоемкие технологии. – 2012. – №2. – С. 76–78.
8. Иванов В.В., Щербаков И.Н., Таланов В.М. Формирование множеств замкнутых фрактальных кривых, упорядоченных в двумерном пространстве на сетках Кеплера // Современные наукоемкие технологии. – 2012. – №1. – С. 54–55.