УДК 548.1

ВЕРОЯТНЫЕ ИЗОСИММЕТРИЙНЫЕ И ДЕФОРМАЦИОННЫЕ СТРУКТУРНЫЕ МОДИФИКАЦИИ ФУЛЛЕРЕНА C_{30}

Иванов В.В.

Лаборатория дизайна новых материалов Южно-Российского государственного технического университета (НПИ);
ФГУП ОКТБ «ОРИОН», e-mail: valivanov11@mail.ru

Обсуждаются вероятные изосимметрийные и деформационные модификации наноструктур C_{30} с атомными оболочками пентагональной ветви классификации фуллеренов и их возможное влияние на трибологические свойства покрытий.

Ключевые слова: изосимметрийные модификации, деформационные модификации, фуллерен, композиционные покрытия, наноструктура

PROBABLY ISOSYMMETRIC AND DEFORMATIONAL STRUCTURAL MODIFICATIONS OF FULLERENE C_{30}

Ivanov V.V.

Laboratory of design of the novel materials of South-Russian state engineering university (NPI);
FGUE SDTB «ORION», e-mail: valivanov11@mail.ru

The probably isosymmetric and deformational modifications of nanostructures $C_{30}$with atomic covers of tetrahedral branch of fullerene's classification and the possible influence onto tribologic properties of the coatings were discussed.

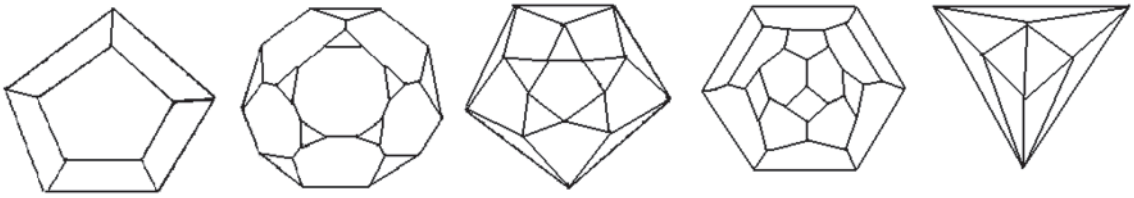
Keywords: isosymmetric modifications, deformational modifications, fullerene, compositional coatings, nanostructure

Фуллерен состава C_{30} является третьим членом гомологического ряда $C_{6(n+2)}$ фуллеренов (где $n = 1, 3, 4\ldots$), формы которых являются производными от полиэдров $\{(n+2)44\}$ призматического типа и обладают симметрией соответствующих точечных групп $D_{(n+2)h}$. Для фуллерена C_{30} с симметрией некристаллографической точечной группы D_{5h} ($\bar{1}0m2$) существуют две топологически различимые разновидности семнадцатигранников. Один из этих многогранников содержит 3 типа граней (10 треугольных, 2 декагональных и 5 октагональных) и 2 топологически неэквивалентных типа вершин (20 с топологией {38.10} и 10 с топологией {388}) и реализуется в форме усеченной пентагональной призмы. Второй многогранник тоже содержит 3 типа граней (2 пентагональных, 10 гексагональных и 5 тетрагональных) и 2 топологически неэквивалентных типа вершин (20 с топологией {466} и 10 с топологией {566}) и реализуется в форме усеченной пентагональной бипирамиды. Обе изосимметрийные модификации могут быть получены в результате определенных топологических преобразований пентагональной призмы с симметрией D_{5h}.

Для представления полиэдров используем следующие символьные обозначения: Ph – $<n_v, n_r, n_h>$, где Ph – имя полиэдра, n_v, n_r и n_h – количество вершин, ребер и граней, соответственно. Тогда в результате сплиттинг-преобразования вершин пентагональной призмы и стелейшн-дизайна определенных граней тригональнопризматической бипирамиды можно получить следующую цепочку изосимметричных конфигураций (рис. 1):

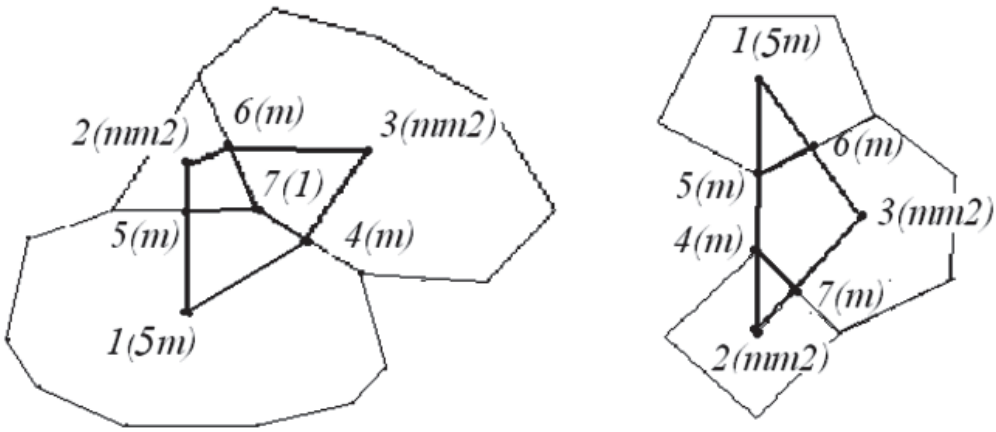
пентагональная призма Pp – <10, 15, 7> →
усеченная пентагонпризма tPp – <30, 45, 17> →
пентагональнопризматическая бипирамида PpbiPyr – <15, 30, 17> →
усеченная пентагонбипирамида tPbiPyr – <30, 45, 17> →
пентагонбипирамида PbiPyr – <7, 15, 10> .

Методом анализа фундаментальной области точечной группы симметрии можно перечислить группы симметрии всех возможных симметрийно неэквивалентных разновидностей молекул фуллерена, которые могут возникнуть в результате ее непрерывных деформаций [1]. Для этого необходимо выделить все структурные элементы области с разной размерностью и локальной симметрией. Соотношения таких структурных элементов группы D_{5h} в фундаментальной области для двух форм молекул фуллерена C_{30} представлены на рис. 2.



а б в г д

Рис. 1. Проекции Шлегеля для изосимметричных (D_{3h}) полиэдров: Pp (а), tPp (б), PpbiPyr (в), tPbiPyr (г) и PbiPyr (д)



а б

Рис. 2. Соотношения структурных элементов деформационных модификаций фуллеренов C_{30}, полученных в фундаментальной области точечной группы D_{5h} для tPp (а) и для tPbiPyr (б)

Вероятные структурные состояния молекулы фуллерена C_{30}

Структурный элемент *	Размерность	Симметрия орбиты	Собственная симметрия
Фуллерен в форме усеченной пентагональной призмы			
1	1	$\bar{1}0m2$	5m
2, 3			mm2
4, 5, 6			m
7			1
1–5, 2–5, 2–6, 3–6, 3–4, 1–4	2	$\bar{1}0m2$	m
4–7, 5–7, 6–7			1
2–6–7–5, 3–6–7–4, 1–5–7–4	3	$\bar{1}0m2$	1
Фуллерен в форме усеченной пентагональной бипирамиды			
1	1	$\bar{1}0m2$	5m
2, 3			mm2
4, 5, 6, 7			m
1–6, 2–6, 2–7, 3–7, 3–4, 1–5	2	$\bar{1}0m2$	m
5–6, 4–7			1
1–5–6, 3–4–7, 4–5–6–2–7	3	$\bar{1}0m2$	1

Результаты анализа вероятных структурных состояний двух изосимметрийных молекул приведены в таблице. Используемые обозначения структурных элементов фундаментальной области точечной группы D_{5h} для фуллеренов состава C_{30} указаны на рис. 2, *а* и 2, *б,* соответственно.

Можно предположить, что при модифицировании композиционных покрытий наноалмазным порошком фазовая и структурная разупорядоченность углеродсодержащих наночастиц на их поверхности после трибовоздействия может быть обусловлена, в частности, наличием подобных фуллереноподобных наночастиц с симметрией группы D_{5h} или ее вероятных деформационных модификаций. Все эти наночастицы могут рассматриваться как компоненты покрытия, проявляющие свойства твердосмазочных материалов и, следовательно, эффективно влияющие на трибологические свойства поверхности при трении [2–8]. Возможные непрерывные и обратимые структурные фазовые превращения фаз компонентов покрытий, в частности и фуллереноподобных наночастиц, могут быть идентифицированы в соответствии с методиками, представленными в работах [8–14].

Данное предположение об эффективности модифицирования косвенно подтверждается, в частности, результатами трибологических испытаний соответствующих твердосмазочных антифрикционных покрытий, полученных с использованием наночастиц алмаза [15].

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ, соглашение № 14.U01.21.1078.

Список литературы

1. Talanov V.M., Fedorova N.V. // In: Handbook on Fullerene. Synthesis, Properties and Applications. – N-Y: Nova Science Publishers, Inc. – 2012. – Ch.3. – P. 151–195.

2. Иванов В.В., Иванов А.В., Щербаков И.Н., Башкиров О.М. // Изв. вузов. Сев-Кавк. регион. Техн. науки. – 2005. – № 3. – С. 46–49.

3. Иванов В.В., Щербаков И.Н. Моделирование композиционных никель-фосфорных покрытий с антифрикционными свойствами. – Ростов н/Д: Изд-во журн. «Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион», 2008. – 112 с.

4. Balakai V.I., Ivanov V.V., Balakai I.V., Arzumanova A.V. // Russian Journal of Applied Chemistry. – 2009. – Т. 82. – № 5. – С. 851–856.

5. Ivanov V.V., Balakai V.I., Ivanov A.V., Arzumanova A.V. // Russian Journal of Applied Chemistry. – 2006. – Т. 79. – № 4. – С. 610–613.

6. Ivanov V.V., Balakai V.I., Kurnakova N.Yu., Arzumanova A.V., Balakai I.V. // Russian Journal of Applied Chemistry. – 2008. – Т. 81. – № 12. – С. 2169–2171.

7. Щербаков И.Н., Иванов В.В., Логинов В.Т. и др. Химическое конструирование композиционных материалов и покрытий с антифрикционными свойствами. – Ростов н/Д: Изд-во журн. «Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки», 2011. – 152 с.

8. Иванов В.В. Комбинаторное моделирование вероятных структур неорганических веществ. – Ростов-на-Дону: Изд-во СКНЦ ВШ, 2003. – 204 с.

9. Иванов В.В., Таланов В.М. // Физика и химия стекла. – 2008. – Т. 34. – № 4. С. 528–567.

10. Иванов В.В., Таланов В.М. // Наносистемы: Физика, Химия, Математика. – 2010. – Т. 1. – № 1. – С. 72–107.

11. Иванов В.В., Таланов В.М. // Кристаллография. – 2010. – Т. 55. – № 3. – С. 385–398.

12. Иванов В.В., Таланов В.М. // Журн. неорганической химии. – 2010. – Т. 55. – № 6. С. 980–990.

13. Иванов В.В., Таланов В.М., Гусаров В.В // Наносистемы: Физика, Химия, Математика. – 2011. – Т. 2. – № 3. – С. 121–134.

14. Иванов В.В., Таланов В.М., Гусаров В.В. // Наносистемы: Физика, Химия, Математика. – 2012. – Т. 3. – № 4. – С. 82–100.

15. Патент № 2473711 РФ / Трофимов Г.Е., Щербаков И.Н., Шевченко М.Ю., Логинов В.Т., Дерлугян П.Д., Дерлугян Ф.П., Иванов В.В. – Опубл. 27.01.2013. Бюл. № 3.