

УДК 548.1

ВЕРОЯТНЫЕ ИЗОСИММЕТРИЙНЫЕ И ДЕФОРМАЦИОННЫЕ СТРУКТУРНЫЕ МОДИФИКАЦИИ ФУЛЛЕРЕНА C₃₆

Иванов В.В.

Лаборатория дизайна новых материалов Южно-Российского государственного технического университета (НПИ);

ФГУП ОКБ «ОРИОН», e-mail: valivanov11@mail.ru

Обсуждаются вероятные изосимметричные и деформационные модификации наноструктур C₃₆ с атомными оболочками гексагональной ветви классификации фуллеренов и их возможное влияние на трибологические свойства покрытий.

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

PROBABLY ISOSYMMETRIC AND DEFORMATIONAL STRUCTURAL MODIFICATIONS OF FULLERENE C₃₆

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 C₃₆ with atomic covers of hexagonal branch of fullerene's classification and the possible influence onto tribologic properties of the coatings were examined.

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

Фуллерен состава C₃₆ является четвертым членом гомологического ряда C_{6(n+2)} фуллеренов (где n = 1,3,4...), формы которых являются производными от полиэдров {(n+2)44} призматического типа и обладают симметрией соответствующих точечных групп D_{(n+2)h}. Для фуллерена C₃₆ с симметрией точечной группы D_{6h} (6/mmm) существуют две топологически различные разновидности двадцатигранников. Один из этих многогранников содержит 3 типа граней (12 треугольных, 2 додекагональных и 6 октагональных) и 2 топологически неэквивалентных типа вершин (24 с топологией {38.12} и 12 с топологией {388}) и реализуется в форме усеченной гексагональной призмы. Второй многогранник содержит 2 типа граней (14 гексагональных и 6 тетрагональных) и 2 топологически

неэквивалентных типа вершин (24 с топологией {466} и 12 с топологией {666}) и реализуется в форме усеченной гексагональной бипирамиды. Обе изосимметричные модификации могут быть получены в результате определенных топологических преобразований гексагональной призмы с симметрией D_{6h}.

Для представления полиэдров используем следующие символичные 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 гексагональной призмы и стелешн-дизайна определенных граней гексагональнопризматической бипирамиды можно получить следующую цепочку изосимметричных конфигураций (рис. 1):

гексагональная призма Нр – <12, 18, 8> →

усеченная гексагонпризма tНр – <36, 54, 20> →

гексагональнопризматическая бипирамида НрbiPyг – <18, 36, 20> →

усеченная гексагонбипирамида tНbiPyг – <36, 54, 20> →

гексагонбипирамида НbiPyг – <8, 18, 12> .

Методом анализа фундаментальной области точечной группы симметрии можно перечислить группы симметрии всех возможных симметрично неэквивалентных разновидностей молекул фуллерена, ко-

торые 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 форм молекул фуллерена C_{36} представлены D_{6h} в фундаментальной области для двух на рис. 2.

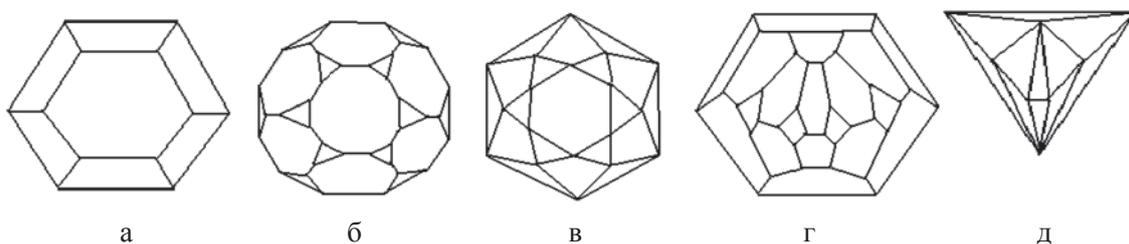


Рис. 1. Проекция Шлегеля для изосимметричных (D_{6h}) полиэдров: H_{cp} (а), tH_{cp} (б), H_{pbipy} (в), tH_{bipy} (г) и H_{bipy} (д)

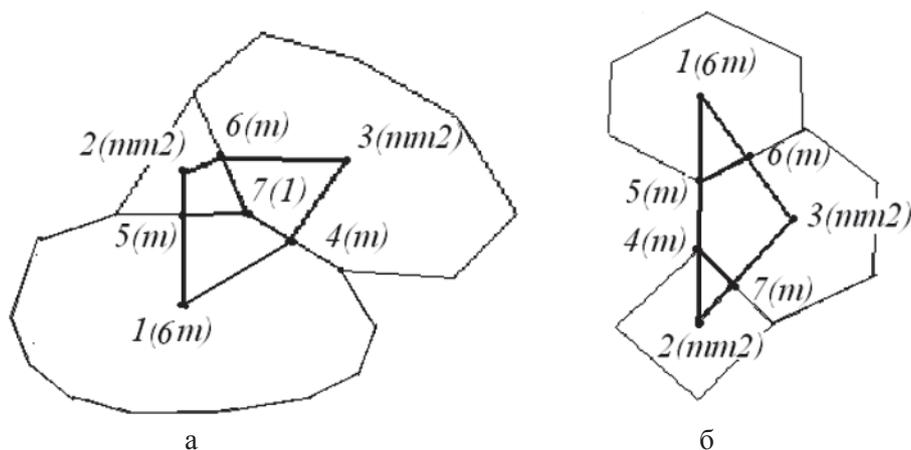


Рис. 2. Соотношения структурных элементов деформационных модификаций фуллеренов C_{36} полученных в фундаментальной области точечной группы D_{6h} для tH_{cp} (а) и для tH_{bipy} (б)

Вероятные структурные состояния молекулы фуллерена C_{36}

Структурный элемент *	Размерность	Симметрия орбиты	Собственная симметрия
<i>Фуллерен в форме усеченной гексагональной призмы</i>			
1	1	6/mmm	6mm
2, 3			mm2
4, 5, 6			m
7			1
1-5, 2-5, 2-6, 3-6, 3-4, 1-4	2	6/mmm	m
4-7, 5-7, 6-7			1
2-6-7-5, 3-6-7-4, 1-5-7-4	3	6/mmm	1
<i>Фуллерен в форме усеченной гексагональной бипирамиды</i>			
1	1	6/mmm	6mm
2, 3			mm2
4, 5, 6, 7			m
1-6, 2-6, 2-7, 3-7, 3-4, 1-5	2	6/mmm	m
5-6, 4-7			1
1-5-6, 3-4-7, 4-5-6-2-7	3	6/mmm	1

Результаты анализа вероятных структурных состояний двух изосимметричных молекул приведены в таблице. Используемые обозначения структурных элементов фундаментальной области точечной группы D_{6h} для фуллеренов состава C_{36} указаны на рис. 2,а и 2,б, соответственно.

В заключение отметим, что при модифицировании композиционных покрытий наноалмазным порошком фазовая и структурная разупорядоченность углеродсодержащих наночастиц на их поверхности после трибовоздействия может быть обусловлена как слоистыми фрагментами графитоподобных структур, так и наличием, в частности, фуллереноподобных наночастиц с симметрией группы D_{6h} или ее вероятных деформационных модификаций. В этом случае все эти наночастицы могут рассматриваться как компоненты покрытия, проявляющие свойства твердых смазочных материалов и эффективно влияющие на трибологические свойства поверхности материала или покрытия при трении [7].

Это 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., Arzumanoва A.V. // Russian Journal of Applied Chemistry. – 2009. – Т. 82. – № 5. – С. 851–856.

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

6. Ivanov V.V., Balakai V.I., Kurnakova N.Yu., Arzumanoва 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.