

УДК 548.1

**ВЕРОЯТНЫЕ ИЗОСИММЕТРИЙНЫЕ И ДЕФОРМАЦИОННЫЕ СТРУКТУРНЫЕ МОДИФИКАЦИИ ФУЛЛЕРЕНА  $C_{18}$ <sup>1</sup>**

**Иванов В.В.**

*ФБГОУ ВПО «Южно-Российский государственный технический университет»,  
Новочеркасск, e-mail: valivanov11@mail.ru;  
ФГУП ОКБ «ОРИОН», Новочеркасск*

Обсуждаются вероятные изосимметричные и деформационные модификации наноструктуры  $C_{18}$  с атомными оболочками тригональной ветви классификации фуллеренов и их возможное влияние на трибологические свойства композиционных покрытий.

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

**PROBABLY IZOSYMMETRIC AND DEFORMATIONAL STRUCTURAL MODIFICATIONS OF FULLERENE  $C_{18}$**

**Ivanov V.V.**

*South-Russian state engineering university, Novocherkassk e-mail: valivanov11@mail.ru;  
FGUE SDTU «ORION», Novocherkassk*

The probably isosymmetric and deformational modifications of  $C_{18}$  nanostructures with atomic covers of trigonal branch of fullerene's classification and the possible influence onto tribologic properties of the compositional coatings were discussed.

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

<sup>1</sup> Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ, соглашение № 14.U01.21.1078.

Фуллерен состава  $C_{18}$  является первым членом гомологического ряда  $C_{6(n+2)}$  фуллеренов (где  $n = 1, 3, 4, \dots$ ), формы которых являются производными от полиэдров  $\{(n+2)44\}$  призматического типа и обладают симметрией соответствующих точечных групп  $D_{(n+2)h}$ . Для фуллерена  $C_{18}$  строение которого описывается симметрией точечной группы  $D_{3h}$  ( $\bar{6}m2$ ), существуют две топологически различимые разновидности одиннадцатигранников. Один из этих многогранников содержит 3 топологически неэквивалентных типа граней (6 тригональных, 2 гексагональных и 3 октагональных), 2 типа вершин (12 вершин с топологией  $\{368\}$  и 6 вершин с топологией  $\{388\}$ ) и реализуется в форме усеченной тригональной призмы. Второй многогранник также содержит 3 топологически неэквивалентных типа

граней (2 тригональные, 6 гексагональных и 3 тетрагональных), 2 типа вершин (12 вершин с топологией  $\{466\}$  и 6 вершин с топологией  $\{366\}$ ) и реализуется в форме усеченной тригональной бипирамиды. Обе изосимметричные модификации могут быть получены в результате определенных топологических преобразований тригональной призмы с симметрией  $D_{3h}$ .

Для представления полиэдров будем использовать следующие символичные обозначения:  $Ph - \langle n_v, n_r, n_h \rangle$ , где  $Ph$  – имя полиэдра,  $n_v, n_r$  и  $n_h$  – количество вершин, ребер и граней, соответственно. Тогда в результате сплиттинг-преобразования вершин тригонпризмы и стелейшн-дизайна определенных граней тригональнопризматической бипирамиды можно получить следующую цепочку изосимметричных конфигураций (рис. 1):



Рис. 1. Проекция Шлегеля для изосимметричных ( $D_{3h}$ ) полиэдров:  $Tr$  (а),  $tTr$  (б),  $TrbiPyr$  (в),  $tTbiPyr$  (г) и  $TbiPyr$  (д)

Методом анализа фундаментальной области точечной группы симметрии можно перечислить группы симметрии всех возможных симметрично 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  $D_{3h}$  в фундаментальной области для двух форм молекул фуллерена  $C_{18}$  представлены на рис. 2.

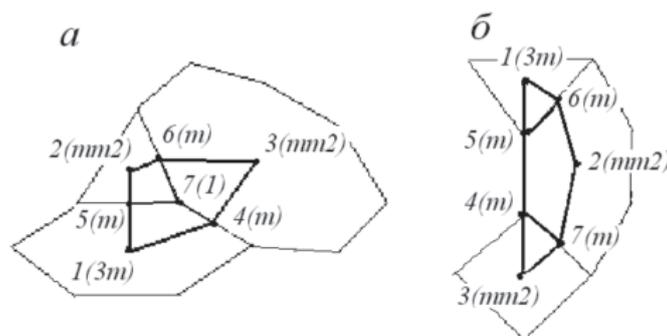


Рис. 2. Соотношения структурных элементов деформационных модификаций фуллеренов  $C_{18}$ , полученных в результате анализа фундаментальной области точечной группы  $D_{3h}$  для tGr (а) и для tTbPyr (б)

Результаты анализа вероятных структурных состояний двух изосимметричных молекул приведены в таблице 1. Используемые в таблице 1 обозначения структурных элементов фундаментальной области точечной группы  $D_{3h}$  для фуллеренов состава  $C_{18}$  указаны на рис. 2, а и 2, б, соответственно.

С определенной степенью вероятности можно предположить, что при модифицировании композиционных покрытий наномалмазным порошком фазовая и структурная разупорядоченность углеродсодержащих наночастиц на их поверхности после трибоздействия может быть обусловлена как

слоистыми фрагментами графитоподобных структур, так и наличием фуллереноподобных наночастиц с симметрией группы  $D_{3h}$  или ее вероятных деформационных модификаций (ромбоздрических, ромбических, моноклинных и триклинных) [2-7]. Все эти углеродсодержащие наночастицы могут рассматриваться как компоненты покрытия, проявляющие свойства твердых смазочных материалов [7]. Их относительная устойчивость при воздействии со стороны трибосопряженной поверхности может быть обусловлена возможностью самовосстанавливания формы за счет обратимых фазовых превращений [8-14].

Таблица 1

Вероятные структурные состояния молекулы фуллерена  $C_{18}$

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

В связи с этим в соответствии с синергической моделью «концентрационной волны» [2-4] они могут эффективно влиять на трибологические свойства поверхности при трении. Данное предположение косвенно подтверждается, в частности, результатами трибологических испытаний соответствующих твердосмазочных антифрикционных покрытий, полученных с использованием наночастиц алмаза [15].

#### 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. T.82. №5. С. 851-856.
5. Ivanov V.V., Balakai V.I., Ivanov A.V., Arzumanova A.V. // Russian Journal of Applied Chemistry. 2006. T.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. T.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.