

УДК 548.1

ВЕРоятные ИЗОСИММЕТРИЙНЫЕ И ДЕФОРМАЦИОННЫЕ СТРУКТУРНЫЕ МОДИФИКАЦИИ ФУЛЛЕРЕНА C₁₈¹

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 C₁₈ 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 C₁₈

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 C₁₈ 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.

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

Фуллерен состава C₁₈ является первым 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 C₁₈ строение которого описывается симметрией точечной группы D_{3h} (6m2), 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 – <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 тригонпризмы и стелейшн-дизайна определенных граней тригональнопризматической бипирамиды можно получить следующую цепочку изосимметричных конфигураций (рис. 1):

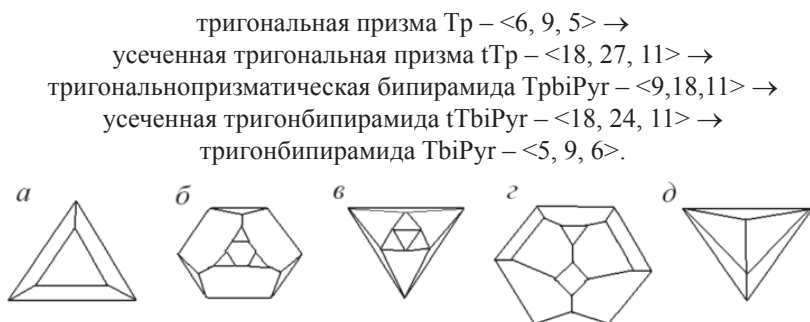


Рис. 1. Проекция Шлегеля для изосимметричных (D_{3h}) полиэдров: Tr (а), tTr (б), TrbiPyr (в), tTbiPyr (г) и TbiPyr (д)

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.

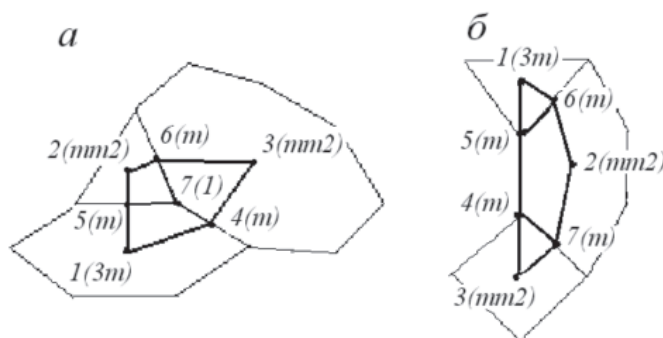


Рис. 2. Соотношения структурных элементов деформационных модификаций фуллеренов C_{18} , полученных в результате анализа фундаментальной области точечной группы D_{3h} для tTr (а) и для $tTbipy$ (б)

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 | 3 | $\bar{6}m2$ | 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 | 3 | 6m2 | 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.