

УДК 629

**ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ И ВОЗМОЖНЫЕ СОСТОЯНИЯ
МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СТРУКТУР, ВКЛЮЧАЮЩИХ
КРИСТАЛЛИЧЕСКУЮ КОМПОНЕНТУ**

Иванов В.В.

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

Обсуждаются особенности организации и возможные состояния многокомпонентных структур, включающих кристаллическую компоненту.

Ключевые слова: структурное состояние, кристаллическая компонента, модуль, симметрия

**PECULIARITIES ORGANIZATION AND THE POSSIBLE STATES OF THE
POLYCOMPONENTS STRUCTURES INCLUDING THE CRYSTAL COMPONENT**

Ivanov V.V.

FGUE SDTU «ORION», Novocherkassk, e-mail:valivanov11@mail.ru

The peculiarities organization and the possible states of the polycomponents structures from crystal component are discussed.

Keywords: structural state, crystal component, module, symmetry

Структурные состояния в ячейке структурированного 3D пространства определяются кристаллическими компонентами g модулярной структуры с помощью дискретной $\{t_i\}$ или непрерывной группы трансляций $\{\tau_i\}$ ($i = 1, 2, 3$), ее возможными наноразмерными n компонентами с помощью дискретной группы трансляций $\{t_i\}$ нанобъектов [1-7] и фрактальными f компонентами с помощью задания соответствующих генераторов [8-25]. Проанализируем вероятные структурные состояния детерминистических модулярных структур со всеми этими компонентами в 3D пространстве.

С учетом характера элементов группы трансляций структурно совместимыми сочетаниями компонент могут быть получены основные классы вероятных структурных состояний локальной области структурированного 3D пространства [8-11] (табл. 1).

Примечание к таблице: g , n и f – кристаллическая, наноразмерная и фрактальная компоненты структурного состояния; t и τ – дискретная и непрерывная трансляции как виды реализации генератора кристаллической компоненты.

Структурные состояния ($r_1 r_2 r_3$). Симметрия кристаллических структур может описываться не только пространственными группами класса G_3^3 (R_3^3 -структуры), но и группами симметрии, которые учитывают отсутствие периодичности в расположении модулей в одном (3D дважды периодические группы G_2^3 для R_2^3 -структур, слоевые группы) или в двух независимых направлениях (3D одноперидические группы G_1^3 для R_1^3 -структур, группы стержней) [26 – 30]. Для описания симметрии локальных R_0^3 -структур используются 3D аперидические группы G_0^3 , точечные группы.

Таблица 1

Основные классы структурных состояний локальной области структурированного 3D пространства

Структурное состояние	Классы структурных состояний		Условное обозначение класса
	Разновидности	Наименование	
$(r_1 r_2 r_3)$	$(t_1 t_2 t_3)$	Точечный	P
	$(\tau_1 t_2 t_3)$	Точечно-линейчатый	PL
	$(\tau_1 \tau_2 t_3)$	Плоскостной	PI
	$(\tau_1 \tau_2 \tau_3)$	Объемный	V
$(r_1 r_2 n_3)$	$(t_1 t_2 n_3)$	Точечный наноразмерный	PN
	$(t_1 \tau_2 n_3)$	Точечно-линейчатые наноразмерные	PLN
	$(\tau_1 \tau_2 n_3)$	Плоскостной наноразмерный	PIN
$(r_1 r_2 f_3)$	$(t_1 t_2 f_3)$	Точечный фрактальный	PF
	$(t_1 \tau_2 f_3)$	Точечно-линейчатые фрактальный	PLF
	$(\tau_1 \tau_2 f_3)$	Плоскостной фрактальный	PIN
$(r_1 f_2 n_3)$	$(t_1 f_2 n_3)$	Точечный нанофрактальный	PNF
	$(\tau_1 f_2 n_3)$	Линейчатый нанофрактальный	LNF
$(r_1 f_2 f_3)$	$(t_1 f_2 f_3)$	Точечный фрактальный гибридный	PFG
	$(\tau_1 f_2 f_3)$	Линейчатый фрактальный гибридный	LFG
$(r_1 n_2 n_3)$	$(t_1 n_2 n_3)$	Точечный наноразмерный	PNN
	$(\tau_1 n_2 n_3)$	Линейчатый наноразмерный	LNN

Факт существования аperiодических (несоразмерных) кристаллов и квазикристаллов [29] требует использовать более точное понимание периодичности n в R^m_n -структурах. Нарушение закона упаковки асимметричных модулей в модулярной структуре или их разупорядоченность могут быть связаны в общем случае с возникновением как позиционной так и ориентационной разупорядоченности. Формально позиционную упорядоченность n_s и ориентационную упорядоченность n_o можно рассматривать как две независимые компоненты периодичности n . В связи с этим вместо R^m_n -структур можно рассматривать $R^m_{(s,o)}$ -структуры (табл.2). Структуры вида

$R^3_{(3,3)}$ эквивалентны R^3_3 -структурам. Структуры $R^3_{(3,n_o)}$ (где $n_o = 2, 1, 0$) и $R^3_{(n_s,3)}$ (где $n_s = 2, 1, 0$) можно объединить в группу аperiодических структур (1D, 2D и 3D, соответственно). Однако $R^3_{(3,n_o)}$ -структуры, которые характеризуются позиционной упорядоченностью модулей, должны обладать кристаллографической симметрией – симметрией Федоровских групп G^3_3 , даже если локальная симметрия модуля не является кристаллографической. Структуры вида $R^3_{(n_s,3)}$ (при значениях $n_s < 3$) формально могут считаться несоизмерными. Известные 1D, 2D и 3D квазикристаллы [27 – 31] могут быть отнесены к модульным структурам вида $R^3_{(2,1)}$, $R^3_{(1,2)}$ и $R^3_{(0,3)}$ соответственно.

Таблица 2

Возможные группы симметрии для описания $R^m_{(s,o)}$ -структур с различными ориентационно и позиционно упорядоченными структурными фрагментами (атомами, наночастицами, локальными фракталами)

Параметры упорядоченности		Позиционная упорядоченность, S			
		3	2	1	0
Ориентационная упорядоченность, O	3	$R^3_{(3,3)}$ (пр. гр. G^3_3)	$R^3_{(2,3)}$ (слоевые гр. $G^3_{2,2}$, ленточные гр. $G^3_{2,1}$, точечные слоевые гр. $G^3_{2,0}$, точечные ленточные гр. $G^3_{2,1,0}$)	$R^3_{(1,3)}$ (стержневые гр. G^3_1 , точечные стержневые гр. $G^3_{1,0}$)	$R^3_{(0,3)}$ (точечные 3D гр. G^3_0)
	2	$R^3_{(3,2)}$ (пр. гр. G^3_3)	$R^2_{(2,2)}$ (плоские гр. G^2_2)	$R^2_{(1,2)}$ (гр. бордюров $G^{(2)}_{1,1}$, точечные гр. бордюров $G^2_{1,0}$)	$R^2_{(0,2)}$ (точечные 2D гр. или розеточные гр. G^2_0)
	1	$R^3_{(3,1)}$ (пр. гр. G^3_3)	$R^2_{(2,1)}$ (плоские гр. G^2_2)	$R^1_{(1,1)}$ (линейные гр. G^1_1)	$R^1_{(0,1)}$ (точечные 1D гр. G^1_0)
	0	$R^3_{(3,0)}$ (пр. гр. G^3_3)	$R^2_{(2,0)}$ (плоские гр. G^2_2)	$R^1_{(1,0)}$ (линейные гр. G^1_1)	$R^0_{(0,0)}$ (точечные 0D гр. G^0_0)

Структурные состояния (r_1, r_2, n_3) и (r_1, r_2, f_3) . Из 16-ти разновидностей структурных состояний локальной области структурированного 3D пространства 6 состояний реализуются только из двух ориентационно независимых кристаллических компонент (табл.1). Варианты описания симметрии $R^3_{(s,o)}$ -структур с этими состояниями существенно зависят от вида и способа реализации третьей компоненты. Для описания симметрии детерминистических $R^3_{(s,o)}(r_1, r_2, n_3)$ -структур с определенной ориентационной и позиционной упорядоченностью высоко симметричных нанообъектов могут быть использованы группы G^3_3 (табл. 2). Если нанообъекты низко симметричны и ориентационно или позиционно разупорядочены в структурах вида $R^3_{(3,2)}$ или $R^3_{(2,3)}$, то симметрия их описывается с помощью пространственных G^3_3 или слоевых групп G^3_2 , соответственно. Описа-

ние симметрии детерминистических $R^3_{(s,o)}(r_1, r_2, f_3)$ -структур с фрактальной компонентой проводится аналогичным образом в случае высоко симметричного (G^3_3) и низко симметричного локального фрактала (G^3_2).

Структурные состояния (r_1, f_2, n_3) , (r_1, f_2, f_3) и (r_1, n_2, n_3) . В локальной области структурированного 3D пространства только 6 разновидностей структурных состояний реализуются из двух некристаллических компонент (табл.1). Варианты описания симметрии детерминистических $R^3_{(s,o)}(r_1, n_2, n_3)$, $R^3_{(s,o)}(r_1, f_2, n_3)$ и $R^3_{(s,o)}(r_1, f_2, f_3)$ -структур существенно зависят от способа реализации наноразмерной и фрактальной компонент структурного состояния. Для описания симметрии $R^3_{(3,o)}(r_1, n_2, n_3)$ -структур с определенной ориентационной и позиционной упорядоченностью высоко симметричных нанообъектов могут быть

использованы группы G^3_3 (табл. 2). Если нанообъекты низко симметричны и ориентационно или позиционно разупорядочены в структурах вида $R^3_{(3,1)}$ или $R^3_{(1,3)}$, то симметрия их описывается с помощью пространственных G^3_3 или стержневых групп G^3_{12} , соответственно. В случае детерминистических $R^3_{(3,0)}(r_1 f_2 f_3)$ -структур описание аналогично (для высоко симметричного локального фрактала – группы G^3_3 , а для низко симметричного – G^3_{12}).

В случае реализации частичной упорядоченности в $R^3_{(S,0)}$, $R^2_{(S,0)}$ и $R^1_{(S,0)}$ -структурах, т.е. при значениях параметров S и $O \in \mathbb{Z}$, для описания используются соответствующие группы классов симметрии, указанные в табл. 2.

Данные о возможных состояниях многокомпонентных структур с наноразмерной и фрактальной компонентами в 3D пространстве рассматривались как возможные абстракции конфигураций межфазных границ и распределения фаз в объеме антифрикционных композиционных материалов и покрытий в процессе их формирования и последующего трибологического воздействия. Ранее эти представления были использованы при целенаправленном поиске и интерпретации трибологических свойств поверхности композиционных материалов и покрытий [32–40], свойств химически активных материалов и анодных покрытий [41–43].

Список литературы

1. Иванов В.В. // Междунар. журнал прикладных и фундаментальных исследований, 2013. №10(3). – С.493.
2. Дерлугян П.Д., Иванов В.В., Иванова И.В. и др. // Соврем. наукоемкие технологии. 2013. – №4. – С.26-29.
3. Дерлугян П.Д., Иванов В.В., Иванова И.В. и др. // Соврем. наукоемкие технологии. 2013. – №4. – С.30-33.
4. Дерлугян П.Д., Иванов В.В., Иванова И.В. и др. // Соврем. наукоемкие технологии. 2013. – №5. – С.25-28.
5. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2013. – №7. – С.82-84.
6. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2013. – №7. – С.85-87.
7. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2013. – №8. – С.131-133.
8. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2013. – №11. – С.61-65.
9. Иванов В.В. // Соврем. наукоемкие технологии. 2013. – №9. – С.89-93.
10. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал, 2013. – №7-1. – С.26-28.
11. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – №4. – С.105-108.
12. Иванов В.В. // Соврем. наукоемкие технологии. 2013. №5. С.29-31.
13. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2013. №8. С.136-137.
14. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2013. №8. С.134-135.

15. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2013. – №8. – С.129-130.
16. Дерлугян П.Д., Иванов В.В., Иванова И.В., и др. // Соврем. наукоемкие технологии. 2013. – №10. – С.158-160.
17. Дерлугян П.Д., Иванов В.В., Иванова И.В., и др. // Соврем. наукоемкие технологии. 2013. – №10. – С.161-163.
18. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал, 2013. – №7-1. – С.28-30.
19. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал, 2013. – №7-1. – С.31-33.
20. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал, 2013. – №7-1. – С.30-31.
21. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал, 2013. – №7-1. – С.33-35.
22. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал, 2013. – №8-1. – С.25-27.
23. Дерлугян П.Д., Иванов В.В., Иванова И.В., и др. // Соврем. наукоемкие технологии. 2013. – №9. – С.86-88.
24. Иванов В.В. // Междунар. журнал прикладных и фундаментальных исследований, 2013. №10(3). – С.493-494.
25. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал, 2013. – №7-1. – С.35-37.
26. Заморзаев А.М. Теория простой и кратной антисимметрии. Кишинев: Штиинца. 1976. – 283 с.
27. Levine D., Steinhardt P.J. // Phys. Rev. B., 1986. V.34, N.2. P.596-616.
28. Socolar J.E.S., Steinhardt P.J. // Phys. Rev. B., 1986. V.34, N.2. P.617-647.
29. Janot Ch., Dubois J.-M., De Boissien M. // Am. J. Phys., 1989. V.57, N.11. P.972-987.
30. Steurer W. // Z. Krist., 1990. V.190. S.179-234.
31. Mackay A.L. // J. Non-Crystalline Solids, 1987. V.97/98. P.55-62.
32. Иванов В.В., Щербаков И.Н. Моделирование композиционных никель-фосфорных покрытий с антифрикционными свойствами. – Ростов н/Д: Изд-во журн. «Иzv. вузов. Сев.-Кавк. регион», 2008. – 112 с.
33. Щербаков И.Н., Иванов В.В., Логинов В.Т. и др. Химическое наноконструирование композиционных материалов и покрытий с антифрикционными свойствами. Ростов н/Д: Изд-во журн. «Иzv. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки», 2011. 132с.
34. Иванов В.В., Арзуманова А.В., Иванов А.В., Балакай В.И. // Журн. прикладной химии, 2006. – Т.79. – Вып.4. – С.619-621.
35. Иванов В.В., Курнакова Н.Ю., Арзуманова А.В., и др. // Журн. прикладной химии, 2008. – Т.81. – Вып. 12. – С.2059-2061.
36. Иванов В.В., Арзуманова А.В., Балакай И.В., Балакай В.И. // Журн. прикладной химии, 2009. – Т.82. – Вып. 5. – С.797-802.
37. Иванов В.В., Щербаков И.Н. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. – 2011. – №3. – С.54-57.
38. Иванов В.В., Щербаков И.Н. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. – 2011. – №5. – С.47-50.
39. Дерлугян П.Д., Иванов В.В., Иванова И.В. и др. // Соврем. наукоемкие технологии. 2013. – №5. – С.21-24.
40. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал, 2013. – №8-1. – С.70-71.
41. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал, 2013. – №8-1. – С.72-73.
42. Беспалова Ж.И., Иванов В.В., Смирницкая И.В., и др. // Журн. прикладной химии, 2010. – Т.83. – Вып.2. – С.244-248.
43. Беспалова Ж.И., Иванов В.В., Смирницкая И.В., и др. // Журн. прикладной химии, 2010. – Т.83. – Вып.5. – С.779-782.