

УДК 629

ПРИНЦИПЫ ФОРМИРОВАНИЯ ВОЗМОЖНЫХ СТРУКТУРНЫХ СОСТОЯНИЙ ИЗ НАНОРАЗМЕРНЫХ КОМПОНЕНТ С УЧЕТОМ СВОЙСТВ МНОЖЕСТВА СООТВЕТСТВУЮЩИХ НАНООБЪЕКТОВ

Иванов В.В.

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

Обсуждаются принципы формирования возможных структурных состояний из наноразмерных компонент с учетом свойств множества соответствующих нанобъектов.

Ключевые слова: структурное состояние, модуль, наночастица, наноструктура

PRINCIPLES OF THE POSSIBLE STRUCTURAL STATES FORMING FROM NANO-DIMENSIONAL COMPONENTS WITH ACCOUNT OF THE QUALITIES OF THE CORRESPONDING NANOOBJECTS SET

Ivanov V.V.

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

The principles of the possible structural states forming from nanodimensional components with account of the qualities of the corresponding nanoobjects set are discussed.

Keywords: structural state, module, nanoparticle, nanostructure

Структурные состояния в ячейке структурированного 3D пространства определяются возможными состояниями транзитивной области в ее объеме [1-4], которые могут быть обусловлены как кристаллическими компонентами g модулярной структуры, так и ее возможными наноразмерными n и фрактальными f компонентами [4-17]. Кристаллическая компонента g модулярной структуры определяется с помощью дискретной $\{t_i\}$ или непрерывной группы трансляций $\{\tau_i\}$ ($i = 1, 2, 3$) [18-20]. Фрактальная компонента f структуры определяется как i -модулярная гибридная структура с помощью соответствующих своих генераторов (точечных, линейчатых, поверхностных или их возможных комбинаций) [11-15, 17-22]. Наноразмерная компонента

n структуры определяется с помощью дискретной группы трансляций $\{t_i\}$ нанобъектов (нульмерных структурных фрагментов, наночастиц) [23-29].

Проанализируем вероятные структурные состояния детерминистических модулярных структур с наноразмерной компонентой в 3D пространстве. С учетом характера элементов группы трансляций могут быть получены основные классы вероятных структурных состояний локальной транзитивной области структурированного 3D пространства [4] (таблица). Примечание к таблице: g , n и f – кристаллическая, наноразмерная и фрактальная компоненты структурного состояния; t_i и τ_i – дискретная и непрерывная трансляции как виды реализации генератора кристаллической компоненты.

Основные классы структурных состояний локальной транзитивной области структурированного 3D пространства с наноразмерной компонентой

Структурное состояние	Классы структурных состояний		Условное обозначение класса
	Разновидности	Наименование	
$(r_1 r_2 n_3)$	$(t_1 t_2 n_3)$	Точечный наноразмерный	PN
	$(\tau_1 t_2 n_3)$	Точечно-линейчатые наноразмерные	PLN
	$(\tau_1 \tau_2 n_3)$	Планарный наноразмерный	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
$(r_1 n_2 n_3)$	$(t_1 n_2 n_3)$	Точечный наноразмерный	PNN
	$(\tau_1 n_2 n_3)$	Линейчатый наноразмерный	LNN
$(f_1 f_2 n_3)$	$(f_1 f_2 n_3)$	Нанофрактальный гибридный	NFG
$(f_1 n_2 n_3)$	$(f_1 n_2 n_3)$	Наноразмерный фрактальный	NNF
$(n_1 n_2 n_3)$	$(n_1 n_2 n_3)$	Наноразмерный	N

Некоторые принципы структурной организации нанобъектов, сформулированные в результате обобщения известного экспериментального материала, приведены в книге [30]: метрический принцип, принцип допустимости некристаллографических осей симметрии, принцип допустимости когерентного сопряжения неевклидовых наноструктур с живой материей, модулярный принцип строения наноструктур, принцип структурной иерархии, принцип структурной неоднородности сложноорганизованных наночастиц.

В [31, 32] с учетом принципа модулярного строения наноструктур рассмотрены вопросы выбора модуля для модулярного дизайна и алгоритм комбинаторного моделирования. В качестве структурного модуля предложены совокупности атомов, расположенные в вершинах полигонов. Полигоны являются одними из хорошо известных универсальных оптимумов в 2D пространстве. В 3D пространстве аналогичную роль выполняют полиэдры, грани которых представляют собой вышеперечисленные полигоны. Представители обоих видов универсальных оптимумов являются достаточно компактными образованиями. В структурной кристаллографии и структурной неорганической химии они известны давно как неизолированные фрагменты атомных сеток или полиэдрических слоев огромного множества кристаллических структур [33-35]. Методом комбинаторного модулярного дизайна сконструированы вероятные 1D одноперiodические $L_{\{Pg\}(T)}$ и 2D дважды периодические наноструктуры (полностью заполненные $P_{\{\Sigma\{Pg\}\}(T)}$ и частично заполненные полигонные наноструктуры $P_{\{\Sigma\{Pg\}\}(T)}$ из топологически идентичных полигонов и соответствующие им плоские $C_{\{Pg\}(T)}$ и объемные циклические $C_{\{P\}(T)}$ и винтовые $S_{\{P\}(T)}$ наноструктуры [20, 31, 32]. Информационные коды наноструктур представлены трехпозиционной символьной записью вида:

$$N_{\{\Sigma\{P\}\}(T)}$$

На первой позиции (N) стоит символ, характеризующий разновидность наноструктуры, например: L (линейная), C (циклическая) или S (спиральная) – для одномерно-периодических наноструктур и их производных, P (плоская) или Су (цилиндрическая) – для 2D дважды периодических наноструктур и их производных. Символами $\{\Sigma\{P\}\}$ обозначена информация о геометрии N-гонов в определенной $\{P\}$ -комбинации (полигонов $\{Pg\}$ или по-

лиэдров $\{Ph\}$), выполняющих в данной наноструктуре роль модуля. Последняя позиция – кристаллохимическая топология полигонов или полиэдров, образующих наноструктуру [31].

Обсудим основные принципы формирования структурных состояний из наноразмерных компонент с учетом свойств множества соответствующих нанобъектов [36]. Будем рассматривать наноразмерные объекты $N_{\{\Sigma\{P\}\}(T)}$ в геометрическом 3D пространстве.

Рассмотрим структурные состояния с максимальным количеством наноразмерных компонент (n_1, n_2, n_3) класса N (табл. 1). В общем случае формирование наноструктурного состояния в ячейке с реперами (a,b,c) ортогонального 3D пространства может быть сложным. Для формирования простой наноструктуры в пространственной ячейке в форме параллелепипеда необходимо, чтобы для нанобъектов выполнялись следующие условия:

1. Будем считать, что состояния с наноразмерными компонентами реализуются для идентичных нанобъектов в каждой ячейке структурированного 3D пространства. Периоды идентичности в трех независимых направлениях совпадают с реперами пространственного параллелепипеда, т.е. $I_i = i$ (где $i = a, b, c$). Тогда очевидно, что

1) множество $\{N_i\}$ нанобъектов вида $N_{\{\Sigma\{P\}\}(T)}$ в ячейках такое, что дополнение к нему есть пустое множество, т.е.

$$\{N_i\}' = \emptyset, \emptyset' = \{N_i\}$$

и обладает свойством инволютивности:

$$(\{N_i\}')' = \{N_i\};$$

2) для множества $\{N_i\}$ выполняются законы де Моргана:

$$(\cap \{N_i\})' = \cup \{N_i\}',$$

$$(\cup \{N_i\})' = \cap \{N_i\}';$$

3) на основании высказываний 1) и 2) – множество нанобъектов N_i есть покрытие множества $\{N_i\}$.

Все эти условия относятся к нанобъектам $N_{\{\Sigma\{P\}\}(T)}$ одной пространственной ячейки, характеризующей элементарную ячейку детерминистической наноструктуры.

2. Если состояния с наноразмерными компонентами реализуются для двух сортов нанобъектов вида $N_{\{\Sigma\{P\}\}(T)}$ в каждой ячейке структурированного 3D пространства. Периоды идентичности в трех независимых направлениях могут не совпадать с репе-

рами пространственного параллелепипеда, т.е. $I_i = i$ (где $i = a, b, c$). Элементарная ячейка детерминистической наноструктуры содержит две и более пространственные ячейки. Тогда два множества нанообъектов $\{N_{i,1}\}$ и $\{N_{i,2}\}$ обладают следующими свойствами:

1) являются дополнениями друг для друга, т.е.

$$\{N_{i,1}\}' = \{N_{i,2}\}, \{N_{i,2}\}' = \{N_{i,1}\}$$

и обладают свойствами инволютивности:

$$(\{N_{i,1}\}')' = \{N_{i,1}\}, (\{N_{i,2}\}')' = \{N_{i,2}\}$$

и коммутативности:

$$\{N_{i,1}\} \cap \{N_{i,2}\} = \{N_{i,2}\} \cap \{N_{i,1}\},$$

$$\{N_{i,1}\} \cup \{N_{i,2}\} = \{N_{i,2}\} \cup \{N_{i,1}\};$$

2) для них выполняются законы де Моргана:

$$(\cap \{N_{i,1}\})' = \cup \{N_{i,1}\}' = \cup \{N_{i,2}\},$$

$$(\cap \{N_{i,2}\})' = \cup \{N_{i,1}\},$$

$$(\cup \{N_{i,1}\})' = \cap \{N_{i,1}\}' = \cap \{N_{i,2}\},$$

$$(\cup \{N_{i,2}\})' = \cap \{N_{i,1}\};$$

3) они подчиняются модулярному и дистрибутивному закону:

$$\{N_{i,1}\} \cap (\cup N_{i,2}) = \cup (\{N_{i,1}\} \cap \{N_{i,2}\}),$$

$$\{N_{i,1}\} \cup (\cap \{N_{i,2}\}) = \cap (\{N_{i,1}\} \cup N_{i,2});$$

4) они являются покрытием множества $\{N_i\}$, если

$$\{N_i\} = \{N_{i,1}\} \cup \{N_{i,2}\},$$

а покрытие множества $\{N_i\}$ есть его разбиение, если

$$\{N_{i,1}\} \cap \{N_{k,1}\} = \emptyset \text{ и } \{N_{i,1}\} \cap \{N_{k,1}\} = \emptyset, \\ \text{при } i \neq k.$$

3. В случае обобщения на j сортов нанообъектов вида $N_{(\Sigma\{P_i\})\{T\}}$ в каждой ячейке структурированного 3D пространства имеем j множеств нанообъектов $\{N_{i,j}\}$, которые

1) являются дополнениями друг для друга, т.е.

$$\{N_{i,k}\}' = \{N_{i,j}\}, \{N_{i,j}\}' = \{N_{i,k}\}, \text{ для каждо-} \\ \text{го } i \text{ при } k \neq j;$$

2) удовлетворяют законам де Моргана:

$$(\cap \{N_{i,k}\})' = \cup \{N_{i,k}\}' = \cup \{N_{i,j}\},$$

$$(\cap \{N_{i,j}\})' = \cup \{N_{i,k}\},$$

$$(\cup \{N_{i,k}\})' = \cap \{N_{i,k}\}' = \cap \{N_{i,j}\},$$

$$(\cup \{N_{i,j}\})' = \cap \{N_{i,k}\} \text{ для каждого } i \text{ при} \\ k \neq j;$$

3) подчиняются дистрибутивному закону:

$$\cap_i (\cup_j \{N_{i,j}\}) = \cup_j (\cap_i \{N_{i,j}\}),$$

4) они являются покрытием множества $\{N_{i,j}\}$, если

$$\{N_{i,j}\} = \{N_{i,1}\} \cup \{N_{i,2}\} \cup \dots \cup \{N_{i,j}\},$$

а покрытие множества $\{N_{i,j}\}$ есть его разбиение, если объединение $\cup \{N_{i,j}\}$ дизъюнктивное, т.е. $\{N_{i,j}\} \cap \{N_{i,k}\} = \emptyset$ для каждого i при $k \neq j$.

На основании изложенного выше сформулируем следующие принципы формирования наноразмерных состояний.

1. Принцип модулярного строения наноструктур: Любая наноструктура $N_{(\Sigma\{P_i\})\{T\}}$ может быть представлена из одинаковых минимальных модулей (полигонов $\{Pg\}$ или полиэдров $\{Ph\}$) или ограниченного набора разных минимальных модулей, строение и форма которых содержит структурную информацию о самой наноструктуре.

2. Принцип иерархии модулей наноструктур: Наноструктура $N_{(\Sigma\{P_i\})\{T\}}$ может быть представлена как модулярная из своих структурных фрагментов или модулей (полигонов $\{Pg\}$ или полиэдров $\{Ph\}$). В частности, модулярное строение каждой наноструктуры может быть представлено нульмерными модулями-нанообъектами или их модульными блоками, а модули классифицируются по сложности в иерархической последовательности:

$$N_n \subset N_{n-1} \subset N_{n-2} \subset \dots \subset N_1.$$

3. Принцип детерминистичности множества полученных локальных наноструктур в структурированном пространстве: Упорядоченное множество идентичных локальных наноструктур, полученных из нанообъектов вида $N_{(\Sigma\{P_i\})\{T\}}$ в одинаковых единичных ячейках предварительно структурированного пространства, представляет собою детерминистическую наноструктуру. Детерминистическая наноструктура включает в себя множество локальных наноструктур, которые упорядочены в 3D пространстве в соответствии с собственной локальной симметрией и элементов симметрии дискретной группы трансляций $T(t_1, t_2, t_3)$ ячеистого 3D пространства [31, 32].

4. Принцип структурной совместимости разносортных нанообъектов для получения соответствующего разбиения. В результате дизъюнктивного объединения множеств нанообъектов $N_{(\Sigma\{P_i\})\{T\}}$ разного сорта внутри

каждой пространственной ячейки происходит их полное или частичное упорядочение, такое, что образующаяся детерминистическая наноструктура характеризуется соразмерными с параметрами ячеек периодами идентичности, а упорядочение соответствует определенному закону упаковки разноразмерных нанобъектов.

5. Принцип ограниченного роста (эволюционирования) локальных наноструктур при усложнении их состава: С увеличением числа сортов структурно совместимых нанобъектов вида $N_{\{P\}(T)}$ локальная наноструктура ограничено эволюционирует из инициальной ячейки в окружающее ячеистое пространство в соответствии со своим возможным вариантом разбиения и законом упаковки разноразмерных нанобъектов.

Данные о структурных состояниях 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. Сформулированные выше принципы ранее были использованы при целенаправленном поиске и интерпретации трибологических свойств поверхности композиционных материалов и покрытий [20-22, 37-47], свойств химически активных материалов и анодных покрытий [48-52].

Список литературы

1. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2013. – №11. – С.61-65.
2. Иванов В.В. // Соврем. наукоемкие технологии. 2013. – №.9 – С.89-93.
3. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал, 2013. – №7-1. – С.26-28.
4. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – №.4. – С.105-108.
5. Иванов В.В. // Соврем. наукоемкие технологии. 2013. №.5. С.29-31.
6. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2013. №8. С.136-137.
7. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2013. №8. С.134-135.
8. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2013. – №8. – С.129-130.
9. Дерлугян П.Д., Иванов В.В., Иванова И.В., и др. // Соврем. наукоемкие технологии. 2013.- №.10. – С.158-160.
10. Дерлугян П.Д., Иванов В.В., Иванова И.В., и др. // Соврем. наукоемкие технологии. 2013.- №.10. – С.161-163.
11. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал, 2013. – №7-1. – С.28-30.
12. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал, 2013. – №7-1. – С.31-33.
13. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал, 2013. – №7-1. – С.30-31.
14. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал, 2013. – №7-1. – С.33-35.
15. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал, 2013. – №8-1. – С.25-27.
16. Дерлугян П.Д., Иванов В.В., Иванова И.В., и др. // Соврем. наукоемкие технологии. 2013.- №.9. – С.86-88.
17. Иванов В.В. // Междунар. журнал прикладных и фундаментальных исследований, 2013. №10(3). – С.493-494.
18. Иванов В.В., Таланов В.М. // Успехи соврем. естествознания, 2012. – №3. – С.56-57.
19. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал, 2013. – №7-1. – С.35-37.
20. Иванов В.В. Комбинаторное моделирование вероятных структур неорганических веществ. Ростов-на-Дону: Изд-во СКНЦ ВШ, 2003. – 204с.
21. 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.
22. 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. «Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки», 2011. 132 с.
23. Иванов В.В. // Междунар. журнал прикладных и фундаментальных исследований, 2013. №10(3). – С.493.
24. Дерлугян П.Д., Иванов В.В., Иванова И.В., и др. // Соврем. наукоемкие технологии. 2013. – №.4. – С.26-29.
25. Дерлугян П.Д., Иванов В.В., Иванова И.В., и др. // Соврем. наукоемкие технологии. 2013. – №.4. – С.30-33.
26. Дерлугян П.Д., Иванов В.В., Иванова И.В., и др. // Соврем. наукоемкие технологии. 2013.- №.5. – С.25-28.
27. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2013. – №7. – С.82-84.
28. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2013. – №.7 – С.85-87.
29. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2013. – №.8 – С.131-133.
30. Таланов В.М., Ерейская Г.П., Юзюк Ю.И. Введение в химию и физику наноструктур и наноструктурированных материалов – М.: Изд-во «Академия естествознания», 2008. – 389 с.
31. Иванов В.В., Таланов В.М., Гусаров В.В. // Наносистемы: Физика, Химия, Математика, 2011. Т.2. № 3. С.121-134.
32. Иванов В.В., Таланов В.М. // Наносистемы: Физика, Химия, Математика, 2010. Т.1. №1. С.72-107.
33. Урусов В.С. Теоретическая кристаллохимия – М.: МГУ, 1987. – 276 с.
34. Уэллс А. Структурная неорганическая химия. В 3-х томах. – М.: Мир, 1987/88, Т.1. – 408 с.; Т.2. – 696 с.; Т.3. – 564 с.
35. Урусов В.С. Энергетическая кристаллохимия – М.: Наука, 1975. – 336 с.
36. Бурбаки Н. Теория множеств. – М.: Мир. 1965. – 455 с.
37. Иванов В.В., Арзуманова А.В., Иванов А.В., Балакай В.И. // Журн. прикладной химии, 2006. – Т.79. – Вып.4. – С. 619-621.
38. Кукоз Ф.И., Балакай В.И., Иванов В.В., и др. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. – Спецвыпуск. – 2007. – С.94-99.
39. Кукоз Ф.И., Иванов В.В., Балакай В.И., и др. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. – 2007. – № 5. – С. 56-58.
40. Кукоз Ф.И., Иванов В.В., Балакай В.И., Христофориди М.П. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. – 2008. – № 4. – С. 123-128.
41. Иванов В.В., Курнакова Н.Ю., Арзуманова А.В., и др. // Журн. прикладной химии, 2008. – Т.81. – Вып. 12. – С.2059-2061.
42. Иванов В.В., Арзуманова А.В., Балакай И.В., Балакай В.И. // Журн. прикладной химии, 2009. – Т.82. – Вып. 5. – С.797-802.
43. Бырылов И.Ф., Иванов В.В. // Междунар. журнал прикладных и фундаментальных исследований, 2013. №11(2). – С.136-137.
44. Бырылов И.Ф., Иванов В.В. // Междунар. журнал прикладных и фундаментальных исследований, 2013. №11(2). – С.137-138.
45. Иванов В.В., Щербаков И.Н. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. – 2011. – №3. – С.54-57.
46. Иванов В.В., Щербаков И.Н. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. – 2011. – №5. – С.47-50.
47. Дерлугян П.Д., Иванов В.В., Иванова И.В. и др. // Соврем. наукоемкие технологии. 2013.- №.5. – С.21-24.
48. Иванов В.В., Беспалова Ж.И., Смирницкая И.В., и др. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Естеств. науки. – 2008. – Спецвыпуск: Проблемы электрохимии и экологии – С. 52-56.
49. Беспалова Ж.И., Иванов В.В., Смирницкая И.В., и др. // Журн. прикладной химии, 2010. – Т.83. – Вып.2. – С.244-248.
50. Беспалова Ж.И., Иванов В.В., Смирницкая И.В., и др. // Журн. прикладной химии, 2010. – Т.83. – Вып.5. – С.779-782.
51. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал, 2013. – №8-1. – С.70-71.
52. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал, 2013. – №8-1. – С.72-73.