

УДК 501:548.1

## СТРУКТУРНЫЕ СОСТОЯНИЯ ВЕРОЯТНЫХ НАНОРАЗМЕРНЫХ ФРАГМЕНТОВ И СТРУКТУР КВАЗИКРИСТАЛЛОВ И АПЕРИОДИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛОВ

**Иванов В.В.***АО ОКБ «ОРИОН», Новочеркасск, e-mail: valivanov11@mail.ru*

Обсуждаются особенности структурных состояний вероятных наноразмерных фрагментов и структур квазикристаллов и аперриодических структур кристаллов. Сформулированы принципы модулярного строения возможных наноразмерных фрагментов, на основе которых могут быть получены наноструктуры, структуры квазикристаллов и аперриодических кристаллов. Проанализированы вероятные структурные состояния поверхности и объема материалов, учитывающие кристаллическую и наноразмерную компоненты. Представлены разновидности состояний трехмерных структур кристаллов, квазикристаллов и кристаллов с аперриодическими структурами ( $r_1, r_2, r_3$ ), двумерных ( $r_1, r_2, n_3$ ), одномерных ( $r_1, n_2, n_3$ ) и нульмерных наноструктур ( $n_1, n_2, n_3$ ). Сформулированы принципы формирования наноразмерных состояний детерминистических модулярных структур.

**Ключевые слова:** модулярная структура, кристалл, квазикристалл, аперриодическая структура кристалла, наноструктура, структурные состояния

## STRUCTURAL STATES OF THE POSSIBLE NANO-DIMENSIONAL FRAGMENTS AND THE STRUCTURES OF THE QUAZI-CRYSTALS AND APERIODIC CRYSTALS

**Ivanov V.V.***J-SC SDTU «ORION», Novocheerkassk, e-mail: valivanov11@mail.ru*

The structural states of the possible nano-dimensional fragments and the structures of the crystals, quazi-crystals and aperiodic crystal structures are discussed. Principles of modular building of possible nano-dimension fragments were formulated and on the basis of it's the nanostructures, quazi-crystal and aperiodic crystal structures are may be received. The possible structural states on the surface and into volume of materials accounted the crystal and nano-dimension components were analyzed. Varieties states of the 3D crystal, quazi-crystal structures and the crystal with aperiodic structures ( $r_1, r_2, r_3$ ), 2D ( $r_1, r_2, n_3$ ), 1D ( $r_1, n_2, n_3$ ) and 0D nanostructures ( $n_1, n_2, n_3$ ) were presented. The forming principles of nano-dimension states of the deterministic modular structures were formulated, too.

**Keywords:** modular structure, crystal, quazi-crystal, aperiodic crystal structure, nanostructure, structural states

В работах [1, 2] с учетом принципа модулярного строения наноструктур рассмотрены вопросы выбора модуля для модулярного дизайна и алгоритм комбинаторного моделирования вероятных модулярных структур. В качестве структурного модуля предложены совокупности атомов, расположенные в  $n$  вершинах полигонов (где  $n = 3 - 6, 8, 10, 12$ ), или полиэдров, грани которых представляют собой вышеперечисленные полигоны или их комбинации.

Сформулируем принципы модулярного строения возможных наноструктурных фрагментов, на основе которых могут быть выведены наноструктуры, структуры квазикристаллов и аперриодических кристаллов. Сформулируем принципы формирования наноразмерных состояний детерминистических модулярных структур и проанализируем вероятные состояния поверхности и объема материалов, учитывающие кристаллическую и наноразмерную компоненты.

### Принципы формирования модулярных наноструктурных состояний

Для структурных состояний с максимальным количеством наноразмерных компонент в [3] сформулированы следующие принципы формирования наноразмерных состояний.

*Принцип модулярного строения наноструктур:* любая наноструктура может быть представлена из одинаковых модулей или ограниченного набора разных модулей, строение и форма которых содержит структурную информацию о самой наноструктуре.

*Принцип иерархии модулей наноструктур:* наноструктура может быть представлена как модулярная из своих структурных фрагментов или модулей (в частности, из нульмерных модулей-нанообъектов).

*Принцип детерминистичности множества полученных локальных наноструктур в структурированном пространстве:* упорядоченное множество идентичных локальных наноструктур, полученных из нанообъектов в одинаковых ячейках пространства, представляет собою детерминистическую наноструктуру.

*Принцип структурной совместимости разносортных нанообъектов* для получения соответствующего разбиения. В результате дизъюнктивного объединения множества нанообъектов разного сорта внутри каждой ячейки происходит их полное или частичное упорядочение, а образующаяся детерминистическая наноструктура характеризуется соразмерными с параметрами ячеек периодами идентичности.

*Принцип ограниченного роста локальных наноструктур при усложнении их состава:* с увеличением числа сортов структурно совместимых нанообъектов локальная наноструктура ограниченно эволюционирует из ячейки в окружающее ячеечное пространство.

Сформулированные принципы были использованы при интерпретации свойств поверхности композиционных покрытий [4–19].

### Структурные состояния

Структурные состояния в ячейке структурированного 3D пространства определяются кристаллическими компонентами  $\gamma$  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  $\{t_i\}$  нанообъектов. В работах [20–31] получены основные разновидности классов структурных состояний локальной транзитивной области структурированного пространства с кристаллической и наноразмерной компонентами: состояния трехмерных структур кристаллов, квазикристаллов и кристаллов с аперриодическими структурами  $(r_1 r_2 r_3)$ , двумерных  $(r_1 r_2 n_3)$ , одномерных  $(r_1 n_2 n_3)$  и нульмерных наноструктур  $(n_1 n_2 n_3)$ .

*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 одноперриодические группы  $G_1^3$  для  $R_1^3$ -структур, группы стержней) [52 – 56]. Для описания симметрии локальных  $R_0^3$ -структур используются 3D аперриодические группы  $G_0^3$ , точечные группы. Перечислим возможные виды состояний элементов этого класса модулярных  $R_{nm}^3$ -структур:

- $(r r r)$  – 3D-кристалл из атомных цепочек, слоев,
- $(rrr_n)$  – 3D-кристалл из 1D-наночастиц, наночастиц,
- $(r r r_p)$  – 3D-кристалл из 1D локальных фракталов,
- $(r r_n r_n)$  – 3D-кристалл из 2D наноразмерных частиц,
- $(rr_n r_p)$  – 3D-кристалл из 1D-наночастиц и 1D локальных фракталов,
- $(r r_f r_p)$  – 3D-кристалл из локальных 2D фракталов,
- $(r_n r_n r_n)$  – 3D-кристалл из наноразмерных частиц,
- $(r_n r_n r_p)$  – 3D-кристалл из 2D-наночастиц и 1D локальных фракталов,

$(r_n r_f r_p)$  – 3D-кристалл из локальных наноразмерных 2D фракталов,

$(r_f r_f r_p)$  – 3D-кристалл из локальных 3D фракталов.

Факт существования аперриодических (несоразмерных) кристаллов и квазикристаллов [33–37] требует использовать более точное понимание периодичности  $n$  в  $R_n^m$ -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  $R_n^m$ -структур можно рассматривать  $R_{(s,o)}^m$ -структуры. Структуры вида  $R_{(3,0)}^3$  эквивалентны  $R_3^3$ -структурам. Структуры  $R_{(3,n_o)}^3$  (где  $n_o = 2, 1, 0$ ) и  $R_{(n_s,3)}^3$  (где  $n_s = 2, 1, 0$ ) можно объединить в группу аперриодических структур (1D, 2D и 3D, соответственно). Однако  $R_{(3,n_o)}^3$ -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  $R_{(n_s,3)}^3$  (при значениях  $n_s < 3$ ) формально могут считаться несоразмерными. Известные 1D, 2D и 3D квазикристаллы [33–37] могут быть отнесены к модулярным структурам вида  $R_{(2,1)}^3$ ,  $R_{(1,2)}^3$  и  $R_{(0,3)}^3$  соответственно.

*Структурные состояния  $(r_1 r_2 n_3)$ .* Из 16-ти разновидностей структурных состояний локальной области структурированного 3D пространства 6 состояний реализуются только из двух ориентационно независимых кристаллических компонент. Варианты описания симметрии  $R_{(s,o)}^3$ -структур с этими состояниями существенно зависят от вида и способа реализации третьей компоненты. Для описания симметрии детерминистических  $R_{(s,o)}^3(r_1 r_2 n_3)$ -структур с определенной ориентационной и позиционной упорядоченностью высоко симметричных нанообъектов могут быть использованы группы  $G_3^3$ . Если нанообъекты низко симметричны и ориентационно или позиционно разупорядочены в структурах вида  $R_{(3,2)}^3$  или  $R_{(2,3)}^3$ , то симметрия их описывается с помощью пространственных  $G_3^3$  или слоевых групп  $G_2^3$  (слоевые гр.  $G_2^3$ , ленточные гр.  $G_{2,1}^3$ , точечные слоевые гр.  $G_{2,0}^3$ , точечные ленточные гр.  $G_{2,1,0}^3$ ). Перечислим возможные виды состояний элементов этого класса модулярных  $R_{nm}^3$ -структур:

$(r r n)$  – 3D структура из упорядоченных цепочек нанообъектов в 2D пространстве,

$(r r n_i)$  – 3D структура из упорядоченных цепочек кристаллических нанообъектов в 2D пространстве,

$(r r n_f)$  – 3D структура из упорядоченных цепочек фрактальных нанообъектов в 2D пространстве,

$(r r_n n)$  – 3D структура из 1D-фрагментов нанообъектов,

$(r r_n n_f)$  – 3D структура из 1D-фрагментов кристаллических нанообъектов,

$(r r_n n_f)$  – 3D структура из 1D-фрагментов фрактальных нанообъектов,

$(r r_f n)$  – 3D структура из нанообъектов, упорядоченных по f- и г-закону,

$(r r_f n_f)$  – 3D структура из кристаллических нанообъектов, упорядоченных по f- и г-закону,

$(r r_f n_f)$  – 3D структура из фрактальных нанообъектов, упорядоченных по f- и г-закону,

$(r_n r_n n)$  – 3D структура из 1D-фрагментов нанообъектов, упорядоченных в 2D пространстве,

$(r_n r_n n_f)$  – 3D структура из 1D-фрагментов кристаллических нанообъектов, упорядоченных в 2D пространстве,

$(r_n r_n n_f)$  – 3D структура из 1D-фрагментов фрактальных нанообъектов, упорядоченных в 2D пространстве,

$(r_n r_f n)$  – 3D структура из нанообъектов, упорядоченных по f-закону в 1D пространстве,

$(r_n r_f n_f)$  – 3D структура из кристаллических нанообъектов, упорядоченных по f-закону в 1D пространстве,

$(r_n r_f n_f)$  – 3D структура из фрактальных нанообъектов, упорядоченных по f-закону в 1D пространстве,

$(r_f r_f n)$  – 3D структура из нанообъектов, упорядоченных по f-закону в 2D пространстве,

$(r_f r_f n_f)$  – 3D структура из кристаллических нанообъектов, упорядоченных по f-закону в 2D пространстве,

$(r_f r_f n_f)$  – 3D структура из фрактальных нанообъектов, упорядоченных по f-закону в 2D пространстве,

$(r_f r_f n_f)$  – 3D структура из фрактальных нанообъектов, упорядоченных по f-закону в 2D пространстве.

*Структурные состояния*  $(r_1 n_2 n_3)$ . В локальной области структурированного 3D пространства только 6 разновидностей структурных состояний реализуются из двух некристаллических компонент.

Для описания симметрии  $R^3_{(3,0)}(r_1 n_2 n_3)$ -структур с определенной ориентационной и позиционной упорядоченностью высоко симметричных нанообъектов могут быть использованы группы  $G^3_3$ .

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  $G^3_1$  (стержневые гр.  $G^3_1$ , точечные стержневые гр.  $G^3_{1,0}$ ), соответственно.

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  $O \leq 2$ , для описания используются соответствующие группы классов симметрии:  $R^2_{(2,2)}$ ,  $R^2_{(2,1)}$  и  $R^2_{(2,0)}$  (плоские гр.  $G^2_2$ ),  $R^2_{(1,2)}$  (гр. бордюров  $G^2_1$ , точечные гр. бордюров  $G^2_{1,0}$ ),  $R^1_{(1,1)}$  и  $R^1_{(1,0)}$  (линейные гр.  $G^1_1$ ),  $R^2_{(0,2)}$  (точечные 2D гр. или розеточные гр.  $G^2_0$ ),  $R^1_{(0,1)}$  (точечные 1D гр.  $G^1_0$ ) и  $R^0_{(0,0)}$  (точечные 0D гр.  $G^0_0$ ). Перечислим возможные виды состояний элементов этого класса модулярных  $R_{\text{мн}}^3$ -структур:

$(r n n)$  – 3D структура из упорядоченных 2D наночастиц,

$(r n n_f)$  – 3D структура упорядоченных 2D наночастиц структуры,

$(r n n_f)$  – 3D структура из упорядоченных 2D локальных фракталов,

$(r_n n_n)$  – 3D структура из упорядоченного 2D наночастицы структуры,

$(r_n n_n)$  – 3D структура из упорядоченного нанообъекта из 1D-фрагмента структуры и 1D локального фрактала,

$(r_n n_n)$  – 3D структура из упорядоченного 2D локального фрактала,

$(r_n n n)$  – 3D структура из 2D наночастиц и упорядоченных в 1D пространстве наночастиц,

$(r_n n n_f)$  – 3D структура из 1D наночастиц и 1D наночастиц структуры, упорядоченных в 1D пространстве,

$(r_n n n_f)$  – 3D структура из 1D наночастиц и 1D локальных фракталов, упорядоченных в 1D пространстве наночастиц,

$(r_n n_f n_f)$  – 3D структура из 2D наночастиц структуры, упорядоченных в 1D пространстве,

$(r_n n_f n_f)$  – 3D структура из 1D наночастиц структуры и 1D локального фрактала, упорядоченных в 1D пространстве,

$(r_n n_f n_f)$  – 3D структура из 2D локальных фракталов, упорядоченных в 1D пространстве наночастиц,

$(r_f n n)$  – 3D структура из 2D наночастиц, упорядоченных в 1D пространстве по f-закону,

$(r_f n n_f)$  – 3D структура из 1D наночастиц и 1D наночастиц структуры, упорядоченных в 1D пространстве по f-закону,

$(r_f n n_f)$  – 3D структура из 1D наночастиц и 1D локальных фракталов, упорядоченных в 1D пространстве по f-закону,

$(r_f n_f n_f)$  – 3D структура из 2D наночастиц структуры, упорядоченных в 1D пространстве по фрактальному закону,

$(r_f n_f n_f)$  – 3D структура из 1D наночастиц структуры и 1D локального фрактала, упорядоченных в 1D пространстве по f-закону,

$(r_f n_f n_f)$  – 3D структура из 2D локальных фракталов, упорядоченных в 1D пространстве по f-закону,

$(r_f n_f n_f)$  – 3D структура из 2D локальных фракталов, упорядоченных в 1D пространстве по f-закону.

*Структурные состояния* ( $n_1 n_2 n_3$ ). Из 10-ти классов вероятных структурных состояний класс ( $n n n$ ) характеризует возможные структурные состояния, включающие в себя в основном только наноразмерную компоненту. Симметрия детерминистических модулярных структур  $R_{nnn}^3$  может описываться пространственными  $G^3$  слоевыми  $G^3$ , стержневыми  $G^3$ , точечными  $G^3$  группами [20, 32]. Перечислим возможные виды состояний элементов наноразмерного класса, из которых могут быть получены модулярные  $R_{nnn}^3$ -структуры:

- ( $n n n$ ) – 3D-наночастица,
- ( $n n n_f$ ) – 3D-нанообъект из 1D-фрагмента структуры,
- ( $n n n_f$ ) – 3D-нанообъект из 1D локального фрактала,
- ( $n n_f n_f$ ) – 3D- нанообъект из 2D нанофрагментов структуры,
- ( $n n_f n_f$ ) – 3D-нанообъект из 1D-фрагмента структуры и 1D локального фрактала,
- ( $n n_f n_f$ ) – 3D-нанообъект из 2D локальных фракталов,
- ( $n_f n_f n_f$ ) – 3D-нанообъект из 3D-нанофрагментов структуры,
- ( $n_f n_f n_f$ ) – 3D-нанообъект из 2D-нанофрагмента структуры и 1D локального фрактала,
- ( $n_f n_f n_f$ ) – 3D-нанообъект из 1D-нанофрагмента структуры и 2D локального фрактала,
- ( $n_f n_f n_f$ ) – 3D локальный фрактал.

Отметим, что все элементы последних трех разновидностей структурных состояний (2D-наноструктуры с состояниями ( $r_1 r_2 n_3$ ), 1D-наноструктуры с состояниями ( $r_1 n_2 n_3$ ) и 0D-наноструктуры с состояниями ( $n_1 n_2 n_3$ )) предназначены для получения разных типов детерминистических модулярных структур в процессе заполнения ячеек структурированного 3D пространства.

### Выводы

Сформулированы принципы модулярного строения возможных наноструктурных фрагментов, на основе которых могут быть получены наноструктуры, структуры квазикристаллов и аперриодических кристаллов. Проанализированы вероятные структурные состояния поверхности и объема материалов, учитывающие кристаллическую и наноразмерную компоненты. Представлены разновидности состояний трехмерных структур кристаллов, квазикристаллов и кристаллов с аперриодическими структурами ( $r_1 r_2 r_3$ ), двумерных ( $r_1 r_2 n_3$ ), одномерных ( $r_1 n_2 n_3$ ) и нульмерных наноструктур ( $n_1 n_2 n_3$ ). Сформулированы принципы формирования наноразмерных состояний детерминистических модулярных структур.

### Список литературы

1. Иванов В.В., Таланов В.М., Гусаров В.В. // Наносистемы: Физика, Химия, Математика, 2011. – Т. 2, № 3. – С. 121–134.
2. Иванов В.В., Таланов В.М. // Наносистемы: Физика, Химия, Математика, 2010. – Т. 1, № 1. – С. 72–107.
3. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 7. – С. 96–99.
4. Беспалова Ж.И., Смирницкая И.В., Иванов В.В., и др. // Журн. прикладной химии, 2010. – Т. 83. – Вып. 2. – С. 244–248.
5. Иванов В.В., Арзуманова А.В., Балакай И.В., Балакай В.И. // Журн. прикладной химии, 2009. – Т. 82. – Вып. 5. – С. 797–802.
6. 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», 2006. – 112 с.
7. Щербаков И.Н. Иванов В.В. 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.
8. Дерлугян П.Д., Иванов В.В., Иванова И.В. и др. // Соврем. наукоемкие технологии. 2013. – № 5. – С. 21–24.
9. Иванов В.В. // Междунар. журнал прикладных и фундаментальных исследований, 2013. – № 10(3). – С. 493.
10. Дерлугян П.Д., Иванов В.В., Иванова И.В. и др. // Соврем. наукоемкие технологии. 2013. – № 4. – С. 26–29.
11. Дерлугян П.Д., Иванов В.В., Иванова И.В. и др. // Соврем. наукоемкие технологии. 2013. – № 4. – С. 30–33.
12. Дерлугян П.Д., Иванов В.В., Иванова И.В. и др. // Соврем. наукоемкие технологии. 2013. – № 5. – С. 25–28.
13. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2013. – № 7. – С. 82–84.
14. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2013. – № 7 – С. 85–87.
15. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2013. – № 8 – С. 131–133.
16. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал = Research Journal of International Studies, 2013. – № 8-1. – С. 65–66.
17. Ivanov V.V. // International journal of experimental education, 2014. – № 4. – Part 2. – С. 58–59.
18. Ivanov V.V. // International journal of experimental education, 2014. – № 4. – Part 2. – С. 59–60.
19. Балакай В.И., Иванов В.В. // Евразийский Союз Ученых / Евразийский Союз Ученых (ЕСУ). – М., 2014. – № 7. – Часть 1. Технические науки. – С. 60–61.
20. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 7. – С. 93–95.
21. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 7. – С. 126–128.
22. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 9. – С. 92–97.
23. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 12. – С. 79–84.
24. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 12(2). – С. 90–93.
25. Ivanov V.V., Talanov V.M. // Crystallography Reports, 2013. – V. 58. – № 3. – P. 383–392.
26. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 4. – С. 105–108.
27. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 5. – С. 146–149.
28. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 7. – С. 121–123.
29. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 7. – С. 124–125.
30. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 12. – С. 84–90.
31. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 12(2). – С. 94–97.
32. Заморзаев А.М. Теория простой и кратной антисимметрии. – Кишинев: Штиинца, 1976. – 283 с.
33. Levine D., Steinhardt P.J. // Phys. Rev. B., 1986. – V. 34, № 2. – P. 596–616.
34. Socolar J.E.S., Steinhardt P.J. // Phys. Rev. B., 1986. – V. 34, № 2. – P. 617–647.
35. Janot Ch., Dubois J.-M., De Boissien M. // Am. J. Phys., 1989. – V. 57, № 11. – P. 972–987.
36. Steurer W. // Z. Krist., 1990. – V. 190. – P. 179–234.
37. Mackay A.L. // J. Non-Crystalline Solids, 1987. – V. 97/98. – P. 55–62.