

УДК 548.1

ЭВОЛЮЦИОННАЯ МОДЕЛЬ ФОРМИРОВАНИЯ ИНВЕРСИОННО МОДУЛИРОВАННЫХ МОДУЛЯРНЫХ СТРУКТУР КРИСТАЛЛОВ

Иванов В.В.

Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) им. М.И. Платова, Новочеркасск, e-mail: valivanov11@mail.ru

Предложена эволюционная модель формирования инверсионно модулированных модулярных структур кристаллов из нульмерных структурных модулей и соответствующая ей система генетических структурных кодов. Модулированные структуры могут быть сформированы на модулярных структурах из определенного центрального нульмерного модуля. Генетический структурный код включает описание геометрии и топологии структурного модуля как генератора структуры, а также описания стадий формирования модулированной структуры с центром инверсии. Процесс формирования модулированных модулярных структур соответствует определенному эволюционному закону развития в предварительно структурированном ячеистом пространстве. Система генетических структурных кодов предназначена для выявления особенностей формирования многообразия модулированных структур, полученных на определенной модулярной структуре, для идентификации структурных модулей – генераторов вероятных модулированных модулярных структур, для выявления взаимосвязей геометрических и топологических свойств генератора и аналогичных свойств соответствующих ему модулированных структур.

Ключевые слова: структурный модуль, генератор структуры с центром инверсии, модулярные структуры, модулированные структуры, структурный код, генетический код кристалла

EVOLUTIONARY MODEL OF THE FORMING OF THE INVERSION MODULATED MODULAR CRYSTAL STRUCTURES

Ivanov V.V.

Platov South-Russian State Polytechnic University (NPI), Novocherkassk, e-mail: valivanov11@mail.ru

The evolutionary model of the forming of inversion modulated modular crystal from 0D structural modules and the corresponding system of the genetic structural codes has been moved. The modulated structures may be formed on modular from the certain central 0D module. The descriptions of geometry and topology of the structural module as a generator of all axially modulated structure and the forming stages of the modulated structure with inversion center are included into genetic structural code. The forming process of the modulated modular structures corresponds to evolutionary law of the development into cellular space is the main part of the code. Codes system is intended for peculiarities identification of the modulated structure forming received on a particular modular structure, and for identification of structural modules as a generators of the possible modulated structures, and for revealing of geometric and topologic properties of all generators and analogical properties of the all corresponding modulated structures.

Keywords: structural module, generator of structure with inversion centre, modular structures, modulated structures, structural code, genetic code of crystal

Методы комбинаторного моделирования модульных структур кристаллов используются для получения новых модульных структур с вероятными топологиями модулей, производными от модуля «материнской» структуры, идентификации генетической взаимосвязи этих модульных структур с исходной структурой, разработки общих алгоритмов и кодов структурного формирования [1, 2, 13 – 20]. для достижения этих целей необходимо последовательно решить совокупность комбинаторных задач, в том числе и задачу выбора структурного модуля – одну из значимых комбинаторных задач. Решение данной задачи осуществляется разбиением кристаллического 3D пространства на ячейки произвольной формы – поликубы (полимино) с последующим их заполнением модулями (молекулами или атомным ансамблем), удовлетворяющими определенным условиям [13 – 16].

С другой стороны структурные модули, которые могут быть использованы для модульного дизайна, можно получить в результате разбиения кристаллического пространства на одинаковые подпространства–ячейки. В этих ячейках окажутся идентичные структурные единицы – модули, связанные между собой достаточно простыми и вполне определенными элементами симметрии (плоскости отражения, поворотные оси, центр инверсии) [7 – 9, 12, 22].

Модулярные и инверсионно модулированные модулярные структуры

Проведем сравнительный анализ генетического кода некоторой модулярной структуры в соответствии с символикой, введенной в [2 – 6, 10, 11]:

$$R_3^3 \{M(G_0^3)(\|i\|, m, \|k\|)\} [S(LC)_1 (G_3^3(z))]$$

со структурным кодом той же модулярной структуры

$$R_3^3 \{M(G_0^3)(\|CP\|)\} [(LC)_3^3 (G_3^3(z))].$$

Используемые выше обозначения [11]:

$M(G_0^3)$ – состав модуля с локальной симметрией G_0^3 ,

$\|CP\|$ – матрица кодов упаковки модулей, заданная одним из возможных способов,

LC – решеточный комплекс, в соответствии с образом которого упаковка данных модулей обладает симметрией G_3^3 ,

$\|i\|$ – матрица индексов ветвления центрального модуля M (первичного ядра модулярной структуры), которая определяется количеством его вершин (i_v), ребер (i_r) и граней (i_g), т.е. $\|i\| = (i_v, i_r, i_g)$, и характеризует вид инверсионности,

$m [0,1,2,\dots]$ – целочисленный индекс, характеризующий размерный параметр локальной структуры (модулированность модулярной структуры),

$\|k\|$ – матрица индексов ветвления вторичных ядер, изоморфная матрице индексов ветвления $\|i\|$.

Идентичность структуры символьных записей кодов позволяет свести анализ к сравнению информационной значимости двух групп символов ($\|i\|, m, \|k\|$) и ($\|CP\|$).

Для фиксированного варианта разбиения 3D пространства использование матриц индексов ветвления и индексов роста при значениях $m = 0$ и 1 приводит к заполнению соседних пространственных ячеек и образованию плотных локальных структур, трансляция которых в определенных пространственных направлениях приводит к образованию определенных модулярных структур (табл. 1, рис. 1).

Установлено, что для каждого варианта разбиения пространства симметрия $G_3^3(z)$ образующихся по законам транскрипции и эволюции полиэдрических модулярных структур $R_3^3(T_{im}, E_k)$ и характеристики занятых полиэдрами решеточных комплексов находятся во взаимно однозначном соответствии (см. табл. 1).

При значениях параметра m больше 1 возможно образование локальных структур с пустыми пространственными ячейками, которые на стадии трансляции приводят к образованию модулированных модулярных структур. Это происходит и при заполнении изогональных ячеек определенной геометрии и топологии из числа возможных в комбинации изогонов (табл. 2, рис. 1).

Упаковка модулей в концентрационно модулированных модулярных структурах соответствует кодам их упаковки, представляемой матрицей $\|CP\|$ структурного кода. В данном случае для множества модулярных R_3^3 -структур может быть установлен изоморфизм информационных данных, закодированных в ($\|i\|, m, \|k\|$) и ($\|CP\|$). Однако многообразие вариантов модулированных модулярных R_3^3 -структур определяется множеством вариантов структурированного ячеистого 3D пространства, которое используется в эволюционной модели для получения модулярных структур (см. табл.2). Геометрия и топология модуля, а также ограничения, накладываемые на плотность упаковки этих модулей в матрицах $\|CP\|$ кодов модулярных структур, существенно снижают их возможное число.

Таблица 1

Возможные характеристики модулярных структур из изогональных пространственных ячеек

Изогон, его вершинная топология и симметрия	Комбинация изогонов (как вариант разбиения пространства)	Занятый изогоном решеточный комплекс и его симметрия	Матрица значений $\ i\ $ и m , представленных в виде $((i_v, i_r, i_g) m)$	Симметрия модулярной структуры (z)
Тригональная призма {344} ($\bar{4}3m$)	12 {344}	G (6m2) $\sqrt{2}D_{2z}$ (2mm)	((005)0); ((605)1); ((095)1)	P6/mmm (2) I4 ₁ /amd (8)
Куб {444} (m3m)	8 {444}	P (m3m)	((006)0); ((806)1); ((012.5)1)	Pm3m (1)
Гексагональная призма {644} (6/mmm)	6 {644}	P (6/mmm)	((008)0); ((012.8)0); ((012.8)1)	P6/mmm (1)
Усеченный октаэдр {466} (m3m)	4 {466}	I (m3m)	((008)0)	Im3m (2)

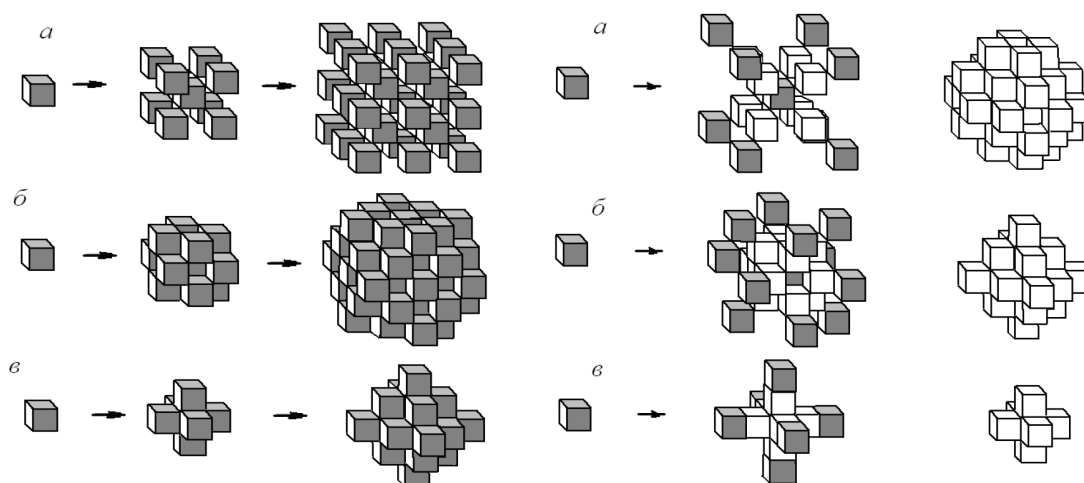


Рис. 1. Слева – динамика роста гексаэдрических R^3 -структур, характеризующихся матрицей значений $\|i\|$ и m , представленной в виде $((i_r i_g i_b) m)$, и эволюционирующих с помощью вершин – $((8.0.0)0)$ (а), с помощью ребер – $((0.12.0.)0)$ (б) и с помощью граней $((0.0.6)0)$ (в). Справа – рост гексаэдрических R^3 -структур, характеризующихся матрицей значений $\|i\|$ и m , представленной в виде $((i_r i_g i_b) m)$, и эволюционирующих с помощью вершин – $((8.0.0)1)$ (а), с помощью ребер – $((0.12.0.)1)$ (б) и с помощью граней $((0.0.6)1)$. Справа показаны конфигурации пустот – «пор» – для соответствующих микропористых структур

Таблица 2

Возможные характеристики модулированных модулярных структур из занятых изогональных пространственных ячеек в соответствующей комбинации изогонов

Топология занятого изогона	Занятый решеточный комплекс и его симметрия	Комбинация изогонов	Матрица $\ i\ , m$ в виде $((i_r i_g i_b) m)$	Симметрия модулярной структуры (z)
{333}	$F_2 (43m)$ $E2z (3m)$	$8\{333\}+6\{3333\}$	$((006)0)$ $((031)0)$	$Fm3m (8)$ $P6_3/mmc (4)$
{3333}	$F (m3m)$ $P_c (6m2)$	$6\{3333\}+8\{333\}$	$((0120)0)$ $((062)0)$	$Fm3m (4)$ $P6_3/mmc (2)$
{344}	$G (6m2)$ $2G2z (3)$	$4\{344\}+4\{644\}$ $8\{344\}+2\{644\}$	$((032)0)$ $((065)1)$	$P6/mmm (2)$ $P6/m (8)$
{444}	$C (4/m)$	$4\{444\}+6\{344\}$	$((802)0)$ $((042)0)$	$Pm3m (2)$
{644}	$P (6/mmm)$	$4\{644\}+4\{344\}$	$((062)0)$	$P6/mmm (1)$
{366}	$D (43m)$	$6\{366\}+2\{333\}$	$((004)0)$	$Fd3m (8)$
{844}	$P (4/mmm)$	$4\{844\}+2\{444\}$	$((006)0)$	$P4/mmm (1)$
{12.44}	$P (6/mmm)$	$4\{12.44\}+2\{344\}$	$((008)0)$	$P6/mmm (1)$
{3434}	$P (m3m)$	$4\{3434\}+2\{3333\}$	$((080)0)$	$Pm3m (1)$
{3444}	$F (m3m)$ $P (m3m)$	$3\{3444\}+\{444\}+\{333\}$ $2\{3444\}+\{3434\}+2\{444\}$	$((606)0)$ $((006)0)$	$Fm3m (4)$ $Pm3m (1)$
{466}	$F (m3m)$	$2\{466\}+\{3434\}+2\{366\}$	$((080)0)$	$Fm3m (4)$
{468}	$P (m3m)$	$2\{468\}+\{466\}+\{444\}$	$((006)0)$	$Pm3m (1)$
	$F (m3m)$	$2\{468\}+\{388\}+\{366\}$	$((006)0)$	$Fm3m (4)$
	$I (m3m)$	$2\{468\}+2\{844\}$	$((080)0)$	$Im3m (2)$

Генетическая принадлежность и модулярная сложность структур

Генетические структурные коды вида $\{M(G^3_0)(\|i\|, m, \|k\|)\} [S(LC)_1(G^3_3(z))]$ содержат информацию, которая существенно расширяет понимание генетической принадлежности и модулярной сложности структур. Это информация о локальной структуре в виде алгоритма ее формирования $(\|i\|, m, \|k\|)$ и информация об особенностях геометрии и топологии модуля-зародыша M , генетически предопределяющая модулярную сложность структур. Проиллюстрируем данное утверждение на примере некоторых модульных структур.

В соответствии с основными положениями структурной кристаллографии и кристаллохимии представление модульной R^3_3 -структуры кристалла может быть осуществлено с помощью описания состава и конфигурации d -мерного модуля $M_{d, 3-d}$ и закона его упаковки в 3D пространстве в $(3-d)$ кристаллографически независимых направлениях. Тогда код этих структур может быть представлен следующим образом:

$$R^3_3 \{M_{d, 3-d}(G^3_d)(CP)^3_{3-d}\} [(LC)^3_3(G^3_3(z))].$$

Кристаллохимическую часть описания R^3_3 -структуры (описание в фигурных скобках) можно выразить через описания подструктур меньшей размерности и представить следующим образом:

$$R^3_3 \{R^2_2 \{R^1_1 \{R^0_0\}\}\}.$$

В данном представлении

$$R^2_2 \{M_{d, 2-d}(G^2_d)(CP)^2_{2-d}\}, \text{ где } (d = 0, 1),$$

$$R^2_2 \{M_{2, 0}\} \text{ при } d = 2;$$

$$R^1_1 \{M_{d, 1-d}(G^1_d)(CP)^1_{1-d}\}, \text{ где } (d = 0),$$

$$R^1_1 \{M_{1, 0}\} \text{ при } d = 1;$$

$$R^0_0 \{M_{0, 0}\} \text{ при } d = 0.$$

Рассмотрим одно из возможных представлений R^2_2 -подструктур R^3_3 -структуры через 0-мерные модули $M_{0,2}$: $R^2_2 \{M_{0,2}(G^2_0)(CP)^2_2\}$. Код упаковки модулей $(CP)^2_2$, в которой содержится основная структурная информация, может быть представлен разными способами [4].

Способ 1. Представление (CP) в виде описания закона чередования модулей $M_{0,2}$ вдоль независимых кристаллографических направлений в 2D пространстве.

Способ 2. Представление (CP) в виде описания характеристик решеточного комплекса $(LC)^2_2$, в соответствии с которым упакованы модули $M_{0,2}$ в R^2_2 -структуре.

Способ 3. Представление (CP) в виде закона заполнения определенных ячеек 2D

пространства структурно совместимыми с этими ячейками модулями $M_{0,2}$.

Для описания упаковочного кода $(CP)^2_2$ модулей $M_{0,2}$ в слоях удобно использовать третий способ. В этом случае вид его описания зависит от способа разбиения пространства.

Если в качестве модулей $M_{0,2}$ выступают изогоны $\{I\}$ (в частности, полигоны (Pg) в случае атомных слоев или полиэдры (Ph) в случае двухслойных упаковок), то упаковочный код может быть представлен комбинацией изогонов $\{CI\}$ с указанием характеристик типа заполняемого изогона $\{I\}$, т.е. кристаллохимической топологии T его окружения аналогичными изогонами и позиционной симметрией S :

$$R^2_2 \{ \{CI\}_{\{I\}(T-S)} \},$$

где группа симметрии $S = G^3_0$.

В данном случае комбинацию изогонов $\{CI\}$, которые полностью заполняют 2D пространство, можно рассматривать как вариант его изогонального разбиения на ячейки типа $\{I\}$. Тогда для того, чтобы охарактеризовать процесс формирования R^2_2 -структуры, от ее пространственного и симметричного описания с помощью характеристик T и S необходимо перейти к представлению, основанному на описании соответствующих эволюционных законов: $(T-S) \otimes (\|i\|, m)$, где $(\|i\|, m)$ может рассматриваться как матрица значений $((i_{v_2}, i_2, i_1), m)$ для $\{Ph\}$ и как матрица значений $((i_{v_2}, i_1), m)$ для $\{Pg\}$.

Окончательно для символического представления R^2_2 -структуры в виде ее генетического кода имеем

$$R^2_2 \{M_{0,2}(G^2_2)[CI]_{\{I\}(\|i\|, m)}\}.$$

Необходимо отметить, что эволюционная модель формирования модулярных 3D структур и символичные образы их, представленные в виде генетических кодов, обладают следующими свойствами:

1) соответствие определенному многообразию «беспористых» модулярных структур, структурные коды которых изоморфны соответствующим генетическим кодам и обладают идентичными генетическими связями,

2) соответствие некоторому многообразию модулярных структур и возможность идентификации соответствующих структурных кодов и генетических связей между ними,

3) возможность получения множества вариантов структурирования пространства и такого же множества многообразий инверсионно модулированных модулярных структур с соответствующими им сетками генетических взаимосвязей,

4) возможность определения принципиально новых эволюционных взаимосвязей

между структурами, существенно дополняющих информацию, записанную в их структурных кодах,

5) применимость для кодирования R_n^m -структур с размерностью $m < 3$.

Указанные свойства информационных кодов могут быть использованы для компактной символьной записи модульных структур, их идентификации, систематизации и классификации, выявления новых генетических связей другими модульными структурами, вывода новых инверсионно модулированных модулярных R_n^m -структур. Можно также предположить, что проанализированные выше модулированные структуры являются идеализированным вариантом представления определенных структурных состояний, возникающих в результате реализации фазово-разупорядоченного состояния на поверхности и в объеме композиционных материалов и покрытий [3, 23, 24]. Результаты анализа некоторых из этих состояний были, в частности, использованы при расчете величины эффекта синергизма при трении и износе для некоторых композиционных покрытий [21, 25 – 31].

Выводы

Предложена эволюционная модель формирования инверсионно модулированных модулярных структур кристаллов из 0D структурных модулей и соответствующая ей система генетических структурных кодов. Модулированные структуры могут быть сформированы на модулярных структурах из определенного центрального 0D модуля. Генетический структурный код включает описание геометрии и топологии модуля как генератора структуры, а также описания стадий формирования модулированной структуры с центром инверсии. Процесс формирования модулированных модулярных структур соответствует определенному эволюционному закону развития в предварительно структурированном ячеечном пространстве. Система генетических структурных кодов предназначена для выявления особенностей формирования многообразия модулированных структур, полученных на определенной модулярной структуре, для идентификации структурных модулей – генераторов вероятных модулированных модулярных структур, для выявления взаимосвязей геометрических и топологических свойств генератора и аналогичных свойств соответствующих ему инверсионно модулированных структур.

Список литературы

1. Журавлев В.Г., и др. // Кристаллография, 2002. – Т.47. – № 6. – С. 976–981.

2. Иванов В.В. Комбинаторное моделирование вероятных структур неорганических веществ. – Ростов-на-Дону: Изд-во СКНЦ ВШ, 2003. – 204 с.

3. Иванов В.В. // Междунар. журн. прикладных и фундаментальных исследований. – 2015. – № 8 (Часть 5). – С.884–888.

4. Иванов В.В. // Междунар. журнал прикладных и фундаментальных исследований. – 2016. – № 5 (4). – С. 551–559.

5. Иванов В.В., Демьян В.В., Таланов В.М. // Междунар. журн. эксп. образования. – 2010. – № 11. – С.153–155.

6. Иванов В.В., Демьян В.В., Таланов В.М. // Успехи соврем. естествознания. – 2012. – № 4. – С.230–232.

7. Иванов В.В., Таланов В.М. // Успехи соврем. естествознания. – 2012. – № 8. – С.75–77.

8. Иванов В.В., Таланов В.М. // Успехи соврем. естествознания. – 2012. – № 10. – С.78–80.

9. Иванов В.В., Таланов В.М. // Успехи соврем. естествознания. – 2012. – № 9. – С.74–77.

10. Иванов В.В., Таланов В.М. // Наносистемы: Физика, Химия, Математика. – 2010. – 1, № 1. – С.72–107.

11. Иванов В.В., Таланов В.М., Гусаров В.В. // Наносистемы: Физика, Химия, Математика, 2012. – 3, № 4. – С.82–100.

12. Лорд Э.Э., Маккей А.Л., Ранганатан С. Новая геометрия для новых материалов. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. – 264 с.

13. Малеев, А.В. // Кристаллография. – 2002. – Т.47. – № 5. – С.797–801.

14. Малеев А.В. // Кристаллография. – 2001. – Т.46. – № 1. – С.19–24.

15. Малеев А.В., Житков И.К., Рау В.Г. // Кристаллография. – 2005. – Т.50. – № 5. – С.788–796.

16. Малеев А.В. // Кристаллография. – 2001. – Т.46. – № 1. – С.165–167.

17. Рау, В.Г., и др. // Кристаллография. – 2002. – Т.47. – № 5. – С.793–796.

18. Рау В.Г., Рау Т.Ф. // Кристаллография. – 2003. – Т.48. – № 2. – С.199–202.

19. Рау В.Г., Пугаев А.А., Рау Т.Ф. // Кристаллография. – 2006. – Т.51. – № 1. – С.8–16.

20. Рау В.Г. // Кристаллография. – 2000. – Т.45. – № 2. – С.231–234.

21. Balakai V.I., Ivanov V.V., Shcherbakov I.N. // American Scientific Journal. – 2016. – V.6. – no.6. – pp. 27–29.

22. Ferraris G., Makovicky E., Merlino S. Crystallography of modular structures. – IUC Oxford Science Publications, 2008. – 370 p.

23. Ivanov V.V. // Eastern European Scientific Journal. – 2016. – no.4 – pp.202–205.

24. Ivanov V.V. // Eastern European Scientific Journal. – 2016. – no.4 – pp.205–208.

25. Ivanov V.V. // Int. journal of experimental education. – 2014. – no. 4. – Part 2. – pp.58–59.

26. Ivanov V.V. // Int. journal of experimental education. – 2014. – no. 4. – Part 2. – pp.59–60.

27. Ivanov V.V. // European Journal of Natural History. – 2015. – no. 3. – pp.36–37.

28. Ivanov V.V., Derlugian P.D., Ivanova I.V., et al. // Eastern European Scientific Journal. – 2016. – no.2 – pp. 203–206.

29. Ivanov V.V., Derlugian P.D., Ivanova I.V., et al. // Eastern European Scientific Journal. – 2016. – no.2. – pp. 207–210.

30. Shcherbakov I.N., Ivanov V.V. // European Journal of Natural History, 2015. – № 3. – pp. 48.

31. Shcherbakov I.N., Ivanov V.V. // Eastern European Scientific Journal, 2016. – № 2. – pp. 199–202.