

УДК 548.1

КЛАССИФИКАЦИЯ СТРУКТУРНЫХ СОСТОЯНИЙ ЛОКАЛЬНОЙ ТРАНЗИТИВНОЙ ОБЛАСТИ СТРУКТУРИРОВАННОГО 3D ПРОСТРАНСТВА

Иванов В.В., Таланов В.М.

*Южно-Российский государственный технический университет, Новочеркасск,
e-mail: valtalanov@mail.ru, valivanov11@mail.ru*

Обсуждается вариант представления основных классов структурных состояний локальной транзитивной области в структурированном 3D пространстве.

Ключевые слова: модулярная 3D Р-ячейка, структурное состояние, локальная транзитивная область

CLASSIFICATION OF THE STRUCTURAL STATES OF LOCAL TRANSITION DOMAIN OF STRUCTURED 2D SPACE

Ivanov V.V., Talanov V.M.

*South-Russian state Engineering University, Novocheerkassk,
e-mail: valtalanov@mail.ru, valivanov11@mail.ru*

As a variant the general classes presentation of the structural states of local transition domain into structured 3D space was discussed.

Keywords: modular 3D P-cell, structural state, local transition domain

Для решения задачи о представлении основных классов возможных структурных состояний локальной транзитивной области в структурированном 3D пространстве будем исходить из следующего.

1. Транзитивная область 3D пространства – результат локального проявления вполне определенных структурных элементов 3D ячейки одного из подпространств гиперпространства [1-7].

2. Структурное состояние транзитивной области может быть обусловлено как кристаллическими компонентами g подструктуры R^3 гиперструктуры R^4 , так и ее возможными фрактальными компонентами f [8-18].

3. Кристаллическая компонента g модулярной структуры R^3 в структурированном (ячейстом) 3D пространстве может быть определена как с помощью дискретной

группы трансляций $\{t_i\}$, так и с помощью непрерывной группы трансляций $\{\tau_i\}$ ($i = 1, 2, 3$) [8-10, 19-26].

4. Фрактальная компонента f структуры R^3 в структурированном 3D пространстве может быть определена i -модулярная гибридная структура (в общем случае $i = 1, 2, 3$) с помощью соответствующих своих генераторов (точечных, линейчатых, поверхностных или их возможных комбинаций) [27-32].

Многообразии вариантов сочетания кристаллической и фрактальной компонент возможных структурных состояний определяется количеством разновидностей определенных подструктур R^3 структуры R^4 .

Число разновидностей 1D подструктур R^1_{1r} и R^1_{1f} в соответствующих R^4 структурах может быть определено по формулам:

$$\begin{aligned} R^4_{4r} &= (P^4_{i=2} C^i_{i-1}) R^1_{1r} = 24 R^1_{1r} \\ R^4_{3r1f} &= (\Pi^3_{i=2} C^{i+1}_{i-1}) R^1_{1r} + (\Pi^3_{i=2} C^i_{i-1}) R^1_{1f} = 18 R^1_{1r} + 6 R^1_{1f} \\ R^4_{2r2f} &= (\Pi^3_{i=2} C^{i+1}_i) R^1_{1r} + (\Pi^3_{i=2} C^{i+1}_i) R^1_{1f} = 12 R^1_{1r} + 12 R^1_{1f} \\ R^4_{1r3f} &= (\Pi^3_{i=2} C^i_{i-1}) R^1_{1r} + (\Pi^3_{i=2} C^{i+1}_{i-1}) R^1_{1f} = 6 R^1_{1r} + 18 R^1_{1f} \\ R^4_{4f} &= (P^4_{i=2} C^i_{i-1}) R^1_{1f} = 24 R^1_{1f} \end{aligned}$$

Аналогично, количество разновидностей 2D и 3D подструктур в соответствующих

R^4 структурах может быть определено по следующим формулам:

$$\begin{aligned}
 R^4_{4r} &= (\Pi^3_{i=2} C^i_{i-1}) R^2_{2r} = 6 R^2_{2r} \\
 R^4_{3r1f} &= (\Pi^3_{i=2} C^3_i) R^2_{2r} + (\Pi^3_{i=2} C^3_i) R^2_{1r1f} = 3 R^2_{2r} + 3 R^2_{1r1f} \\
 R^4_{2r2f} &= (\Pi^3_{i=2} C^i_i) R^2_{2r} + (\Pi^3_{i=2} C^{i+1}_3) R^2_{1r1f} + (\Pi^3_{i=2} C^i_i) R^2_{2f} = R^2_{2r} + 4 R^2_{1r1f} + R^2_{2f} \\
 R^4_{1r3f} &= (\Pi^3_{i=2} C^3_i) R^2_{1r1f} + (\Pi^3_{i=2} C^3_i) R^2_{2f} = 3 R^2_{1r1f} + 3 R^2_{2f} \\
 R^4_{4f} &= (\Pi^3_{i=2} C^i_{i-1}) R^2_{2f} = 6 R^2_{2f}
 \end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned}
 R^4_{4r} &= (P^4_{i=3} C^4_i) R^3_{3r} = 4 R^3_{3r} \\
 R^4_{3r1f} &= (\Pi^3_{i=2} C^i_i) R^3_{3r} + (\Pi^3_{i=2} C^3_i) R^3_{2r1f} = R^3_{3r} + 3 R^3_{2r1f} \\
 R^4_{2r2f} &= (\Pi^3_{i=2} C^2_{i-1}) R^3_{2r1f} + (\Pi^3_{i=2} C^2_{i-1}) R^3_{1r2f} = 2 R^3_{2r1f} + 2 R^3_{1r2f} \\
 R^4_{1r3f} &= (\Pi^3_{i=2} C^3_i) R^3_{1r2f} + (\Pi^3_{i=2} C^i_i) R^3_{3f} = 3 R^3_{1r2f} + R^3_{3f} \\
 R^4_{4f} &= (P^4_{i=3} C^4_i) R^1_{1f} = 4 R^3_{3f}
 \end{aligned}$$

В соответствии с результатами последнего разложения гипотетической R^4 структуры на R^3 подструктуры проанализируем их вероятные структурные состояния с учетом кристаллической и фрактальной компонент или их возможных сочетаний (табл. 1).

Таблица 1
Возможные структурные состояния R^3 подструктур соответствующей R^4 структуры

Возможное структурное состояние R^4 структуры	Возможные структурные состояния четырех R^3 подструктур
$R^4_{4r}(r_1, r_2, r_3, r_4)$	$R^3_{3r} : (r_1, r_2, r_3), (r_1, r_2, r_4), (r_1, r_3, r_4)$ и (r_2, r_3, r_4)
$R^4_{3r1f}(r_1, r_2, r_3, f)$	$R^3_{3r} : (r_1, r_2, r_3),$ $R^3_{2r1f} : (r_1, r_2, f), (r_1, r_3, f)$ и (r_2, r_3, f)
$R^4_{2r2f}(r_1, r_2, f_1, f_2)$	$R^3_{2r1f} : (r_1, r_2, f_1)$ и $(r_1, r_2, f_2),$ $R^3_{1r2f} : (r_1, f_1, f_2)$ и (r_2, f_1, f_2)
$R^4_{1r3f}(r, f_1, f_2, f_3)$	$R^3_{3f} : (f_1, f_2, f_3),$ $R^3_{1r2f} : (r, f_1, f_2), (r, f_1, f_3)$ и (r, f_2, f_3)
$R^4_{4f}(f_1, f_2, f_3, f_4)$	$R^3_{3f} : (f_1, f_2, f_3), (f_1, f_2, f_4), (f_1, f_3, f_4)$ и (f_2, f_3, f_4)

Примечание. r – кристаллическая, а f – фрактальная компоненты структурного состояния.

С учетом характера элементов группы трансляций ячеистого 4D пространства, а также возможных топологических разрывностей модулей фрактальных структур получены основные классы вероятных структурных состояний локальной транзитивной области структурированного 3D пространства (табл. 2).

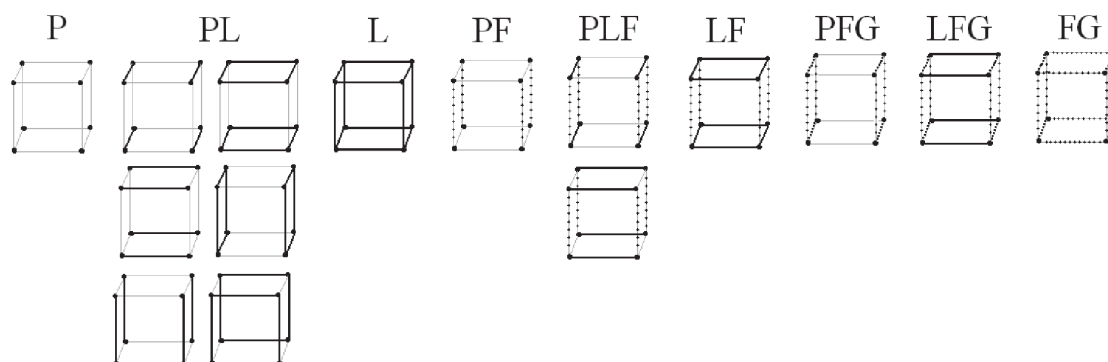
Таблица 2
Основные классы структурных состояний локальной транзитивной области структурированного 3D пространства

Структурное состояние	Классы структурных состояний		Условное обозначение класса
	Разновидности	Наименование	
$(r_1 r_2 r_3)$	$(t_1 t_2 t_3)$	Точечный	P
	$(t_1 t_2 \tau_3) (t_1 \tau_2 t_3) (\tau_1 t_2 t_3)$ $(t_1 \tau_2 \tau_3) (\tau_1 t_2 \tau_3) (\tau_1 \tau_2 t_3)$	Точечно-линейчатые	PL
	$(\tau_1 \tau_2 \tau_3)$	Линейчатый	L
$(r_1 r_2 f)$	$(t_1 t_2 f)$	Точечный фрактальный	PF
	$(t_1 \tau_2 f) (\tau_1 t_2 f)$	Точечно-линейчатые фрактальные	PLF
	$(\tau_1 \tau_2 f)$	Линейчатый фрактальный	LF
$(r_1 f_2 f_3)$	$(t_1 f_2 f_3)$	Точечный фрактальный гибридный	PFG
	$(\tau_1 f_2 f_3)$	Линейчатый фрактальный гибридный	LFG
$(f_1 f_2 f_3)$	$(f_1 f_2 f_3)$	Фрактальный гибридный	FG

Примечание. r и f – кристаллическая и фрактальная компоненты структурного состояния; t и τ – дискретная и непрерывная трансляции как виды реализации генератора кристаллической компоненты.

Условные изображения ячеек для девяти классов структурных состояний локальной транзитивной области структурированно-

го 3D пространства, названия которых использованы в табл.2, приведены на рисунке.



Условные изображения ячеек и обозначения разных классов структурных состояний локальной транзитивной области структурированного 3D пространства (символы: P – точечный, L – линейчатый, F – фрактальный, G – гибридный)

Необходимо отметить, что класс фрактальных гибридных структурных состояний FG в зависимости от вида генератора фрактала в свою очередь состоит из следующих подклассов: фрактальный точечный гибридный (FGp), фрактальный точечно-линейчатый гибридный (FGpl), фрактальный линейчатый гибридный (FGl) и фрактальный точечно-поверхностный гибридный (FGps) [].

По своим индивидуальным геометрико-топологическим характеристикам и размерности транзитивные области разных

классов существенно отличаются между собой. Очевидным образом это проявляется в локальных размерностях транзитивной области 3D пространства с разными классами структурными состояниями и разновидностями R^3 структур. Если принять во внимание следующее: $\text{Dim}_L R^3_{3r} = \sum_i \text{Dim}_L R^1_{ri}$, $\text{Dim}_L R^1_t = 0$, $\text{Dim}_L R^1_l = 1$, $\text{Dim}_L R^1_f = \text{Dim}_L \text{Gen} R^1_f$, то локальные размерности транзитивных областей 3D пространства со всеми возможными структурными состояниями могут быть определены (табл. 3).

Таблица 3
Локальные размерности транзитивных областей ячеистого 3D пространства

Структура	Класс и вид	Структурное состояние	Локальная размерность, Dim_L
R^3_{3r}	P – R^3_{3r}	(t_1, t_2, t_3)	0
	PL – R^3_{2r1r}	(t_1, t_2, t)	1
	PL – R^3_{1r2r}	(t, τ_1, τ_2)	2
	L – R^3_{3r}	(τ_1, τ_2, τ_3)	3
R^3_{2r1f}	PF – R^3_{2r1f}	(t_1, t_2, f)	DimGenf
	PLF – R^3_{1r1r1f}	(t, t, f)	$1 + \text{DimGenf}$
	LF – R^3_{2r1f}	(τ_1, τ_2, f)	$2 + \text{DimGenf}$
R^3_{1r2f}	PFG – R^3_{1r2f}	(t, f_1, f_2)	$\text{DimGenf}_1 + \text{DimGenf}_2$
	LFG – R^3_{1r2f}	(t, f_1, f_2)	$1 + \text{DimGenf}_1 + \text{DimGenf}_1$
R^3_{3f}	FG – R^3_{3f}	(f_1, f_2, f_3)	$\text{DimGenf}_1 + \text{DimGenf}_2 + \text{DimGenf}_3$

Следует отметить, что глобальная размерность структур только с кристаллической компонентой состояния $\text{Dim}_G R^3_{3r} = 3$. Однако, если присутствует хотя бы одна фрактальная компонента состояния структуры, то тогда глобальная размерность ее $\text{Dim}_G R^3_{3r} < 3$.

Таким образом, проанализированы основные классы структурных состояний локальной транзитивной области в структурированном 3D пространстве, представлено символическое описание состояний структур R^3 и определены их локальные и глобальные размерности. Полученные данные

о вероятных структурных состояниях без фрактальной составляющей использованы при интерпретации некоторых особенностей строения модулярных R^3_{3r} структур на основе структурного типа шпинели [33-42]. Данные о структурных состояниях с фрактальной составляющей в 3D пространстве рассматривались как возможные аппроксиманты конфигураций межфазных границ и распределения фаз в объеме антифрикционных композиционных материалов и покрытий в процессе их формирования и последующего трибовоздействия [43-47], химически активных материалов и анодных покрытий [48-50].

Результаты работы получены при поддержке Минобрнауки РФ в рамках государственного задания на проведение НИОКР, шифр заявки №6.8604.2013.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лорд Э.Э., Маккей А.Л., Ранганатан С. Новая геометрия для новых материалов. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. – 264 с.
2. Стюарт Я. Концепции современной математики. / Пер. с англ. Н.И. Плужниковой и Г.М. Цукерман – Мн: Выш. школа, 1980. – 384 с.
3. Иванов В.В., Таланов В.М. // Успехи соврем. естествознания, 2013. – № 7 – С.74-77.
4. Иванов В.В., Таланов В.М. // Успехи соврем. естествознания, 2013. – № 6 – С.61-63.
5. Иванов В.В., Таланов В.М. // Успехи соврем. естествознания, 2013. – № 7 – С.78-81.
6. Иванов В.В., Таланов В.М. // Успехи соврем. естествознания, 2013 – № 6 – С.64-67.
7. Иванов В.В., Таланов В.М. // Успехи соврем. естествознания, 2013. – № 6 – С.68-72.
8. Иванов В.В., Таланов В.М. // Успехи соврем. естествознания, 2012. – № 8. – С.75-77.
9. Иванов В.В., Таланов В.М. // Успехи соврем. естествознания, 2012. – № 10. – С.78-80.
10. Иванов В.В., Таланов В.М. // Успехи соврем. естествознания, 2012. – № 9. – С.74-77.
11. Иванов В.В., Таланов В.М. // Успехи соврем. естествознания, 2012. – № 3. – С.56-57.
12. Иванов В.В., Демьян В.В., Таланов В.М. // Успехи соврем. естествознания, 2012. – № 4. – С.230-232.
13. Иванов В.В., Таланов В.М. // Успехи соврем. естествознания, 2012. – № 11. – С.61-62.
14. Иванов В.В., Таланов В.М. // Соврем. наукоемкие технологии, 2012. – № 11. – С.24-25.
15. Иванов В.В., Таланов В.М. // Успехи соврем. естествознания, 2012. – № 11. – С.63-65.
16. Иванов В.В., Таланов В.М. // Соврем. наукоемкие технологии, 2012. – № 12. – С.16-17.
17. Иванов В.В., Таланов В.М. // Соврем. наукоемкие технологии, 2012. – № 11. – С.22-23.
18. Иванов В.В., Таланов В.М. // Кристаллография, 2013. – Т.58. – № 3. – С. 370-379.
19. Иванов В.В. Комбинаторное моделирование вероятных структур неорганических веществ. – Ростов-на-Дону: Изд-во СКНЦ ВШ, 2003. – 204 с.
20. Иванов В.В., Таланов В.М. // Кристаллография, 2010. – Т.55. – № 3. – С.385-398.
21. Иванов В.В., Таланов В.М. // Журн. неорганической химии, 2010. – Т.55. – № 6. – С.980-990.
22. Иванов В.В., Таланов В.М. // Физика и химия стекла, 2008. – Т.34. – № 4. – С.528-567.
23. Иванов В.В., Таланов В.М. // Наносистемы: Физика, Химия, Математика, 2010. – Т.1. – № 1. – С.72-107.
24. Иванов В.В., Таланов В.М., Гусаров В.В. // Наносистемы: Физика, Химия, Математика, 2011. – Т.2. – № 3. – С.121-134.
25. Иванов В.В., Шабельская Н.П., Таланов В.М., Попов В.П. // Успехи соврем. естествознания, 2012. – № 2. – С. 60-63.
26. Иванов В.В., Шабельская Н.П., Таланов В.М. // Соврем. наукоемкие технологии, 2010. – № 10. – С.176-179.
27. Иванов В.В. // Соврем. наукоемкие технологии. 2013. – № 5. – С.29-31.
28. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2013. – № 8. – С.136-137.
29. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2013. – № 8. – С.134-135.
30. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2013. – № 8. – С.129-130.
31. Иванов В.В., Таланов В.М., Гусаров В.В. // Наносистемы: Физика, Химия, Математика, 2012. Т.3. № 4. С. 82-100.
32. Иванов В.В., Таланов В.М. // Журн. структурн. химии, 2013. Т.54. № 2. С.354-376.
33. Иванов В.В., Ерейская Г.П., Люцедарский В.А. // Изв. АН СССР. Неорган. материалы, 1990. – Т.26, № 4. – С.781-784.
34. Иванов В.В., Ерейская Г.П. // Изв. АН СССР. Неорган. материалы. – 1991. – Т.27, № 12. – С. 2690-2691.
35. Иванов В.В., Таланов В.М. // Phys. Stat. Sol. (a), 1990. – V.122, № 2. – P.K109-112.
36. Иванов В.В., Таланов В.М. // Журн. структурн. химии. – 1992. – Т.33, № 3. – С.137-140.
37. Иванов В.В., Таланов В.М. // Журн. структурн. химии. – 1992. – Т.33, № 5. – С.96-102.
38. Иванов В.В., Таланов В.М. // Неорган. материалы, 1992. – Т.28, № 8. – С.1720-1725.
39. Иванов В.В., Таланов В.М. // Неорган. материалы. – 1992. – Т.28, № 9. – С.2022-2024.
40. Иванов В.В., Таланов В.М. // Неорган. материалы. – 1995. – Т.31, N2. – С.258-261.
41. Иванов В.В., Таланов В.М. // Изв. вузов Сев.-Кавк. регион. Естеств. науки. – 1995. – № 2. – С.38-43.
42. Иванов В.В. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Естеств. науки. – 1996. – N1. – С.67-73.
43. 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. – 132с.
44. Ivanov V.V., Balakai V.I., Ivanov A.V., Arzumanova A.V. // Russian Journal of Applied Chemistry. 2006. T.79. № 4. С.610-613.
45. Ivanov V.V., Balakai V.I., Kurnakova N.Yu., et al. // Russian Journal of Applied Chemistry. 2008. T.81. № 12. С.2169-2171.
46. Balakai V.I., Ivanov V.V., Balakai I.V., Arzumanova A.V. // Russian Journal of Applied Chemistry. 2009. T.82. № 5. С.851-856.
47. Дерлугян П.Д., Иванов В.В., Иванова И.В. и др. // Соврем. наукоемкие технологии. 2013. – № 5. – С.21-24.
48. Bepalova Zh.I., Ivanov V.V., Smirnitckaya I.V., et al. // Russian Journal of Applied Chemistry. 2010. T.83. № 2. С. 242-246.
49. Ivanov V.V., Bepalova Zh.I., Smirnitckaya I.V., et al. // Russian Journal of Applied Chemistry. 2010. T.83. № 5. С. 831-834.
50. Ivanov V.V., Talanov V.M., Shabel'skaya N.P. // Inorganic Materials. 2001. T.37. № 8. С.839-845.