

УДК 548.3:669.018

**ВЕРОЯТНЫЕ ИЗОСИММЕТРИЙНЫЕ И ДЕФОРМАЦИОННЫЕ
МОДИФИКАЦИИ ФУЛЛЕРЕНОВ С ОБОЛОЧКАМИ ТЕТРАЭДРИЧЕСКОЙ
ВЕТВИ КЛАССИФИКАЦИИ В АНТИФРИКЦИОННЫХ
КОМПОЗИЦИОННЫХ ПОКРЫТИЯХ**

^{1,2}Дерлугян П.Д., ^{1,2}Иванов В.В., ¹Иванова И.В., ^{1,2}Логинов В.Т., ²Торопков И.А.

¹ФГУП ОКТБ «ОРИОН»;

²Южно-Российский государственный технический университет, e-mail: valivanov11@mail.ru

Проанализированы вероятные изосимметричные и деформационные модификации некоторых наноструктур с атомными оболочками тетраэдрической ветви классификации фуллеренов и их возможное влияние на трибологические свойства покрытий.

Ключевые слова: структурно-фазовая разупорядоченность, композиционные покрытия, наноалмаз, наноструктуры, атомные оболочки фуллеренов

**PROBABLY ISOSYMMETRIC AND DEFORMATIONAL MODIFICATIONS
OF FULLERENES WITH COVERS BY TETRAHEDRAL BRANCH CLASSIFICATION
IN TO ANTIFRICTION COMPOSITIONAL COATINGS**

^{1,2}Derlugyan P.D., ^{1,2}Ivanov V.V., ¹Ivanova I.V., ^{1,2}Loginov V.T., ²Toropkov I.A.

¹FGUE SDTU «ORION»;

²South-Russian state engineering university, e-mail: valivanov11@mail.ru

The probably isosymmetric and deformational modifications of some nanostructures with atomic covers of tetrahedral branch of fullerene's classification and the possible influence onto tribologic properties of the coatings were analyzed.

Keywords: structural phase disordering, compositional coatings, nanodiamond, nanostructures, fullerenes atomic covers

Тетраэдр T и его усеченная форма – лавесовский тетраэдр $L'T$ – обладают симметрией группы T_d ($43m$) и являются достаточно компактными полиэдрами. Как устойчивые структурные фрагменты они зарекомендовали себя, в частности, в тетраэдрических и октатетраэдрических структурах различных классов неорганических соединений (фазы Лавеса в интерметаллидах [1], многочисленные твердые растворы со структурой шпинели [2–13] и др.). Отметим, что наличие в структурах веществ фрагмента в виде лавесовского тетраэдра или комплекса из пяти соединенных вершинами тетраэдров могут обусловить чрезвычайно низкие величины межатомных расстояний типа Me-Me, необычные орбитальные или магнитные упорядоченные состояния и другие структурные особенности [14–18].

В соответствии с [19–23] трибологические свойства поверхности композиционных покрытий (КП) существенно зависят от эффекта синергизма, который определяется, в частности, наноструктурным параметром, характеризующим объемную долю наночастиц фаз твердых компонент трибосопряженных поверхностей. В зависимости от фазового состава КП величина этого параметра составляет 0,03–0,17 [24–28]. При использовании наноалмаза в качестве модификатора поверхности покрытия в процессе трения возможно образование различных фуллеренов, в том числе и с тетраэдрическими оболочками. Проанализируем их вероятные изосимметричные и деформационные модификации.

Топологические преобразования тетраэдра за счет сплиттинг-преобразования его вершин могут быть представлены следующим образом (рис. 1):

тетраэдр $T\{333\} \rightarrow$ усеченный тетраэдр $tT(L'T)\{366\} \rightarrow$ октаэдр $O\{3333\} \rightarrow$ дуальный тетраэдр $T^d\{333\} \rightarrow$ дуальный усеченный тетраэдр $tT^d(L'T^d)\{366\}$;

усеченный тетраэдр $tT(L'T)\{366\} \rightarrow$ усеченный тетраэдр Лавеса $tL'T$
($2\{36.12\} + \{3.12.12\}$) \rightarrow 20-гранник ($2\{336\} + \{3636\}$).

Характеристики всех полученных выше полиэдров с кубической симметрией тетраэдра или октаэдра, в том числе расчетные значения диаметра соответствующим

им фуллеренов и возможные составы оболочек углеродсодержащих наноструктур в соответствии с [29], представлены в табл. 1.

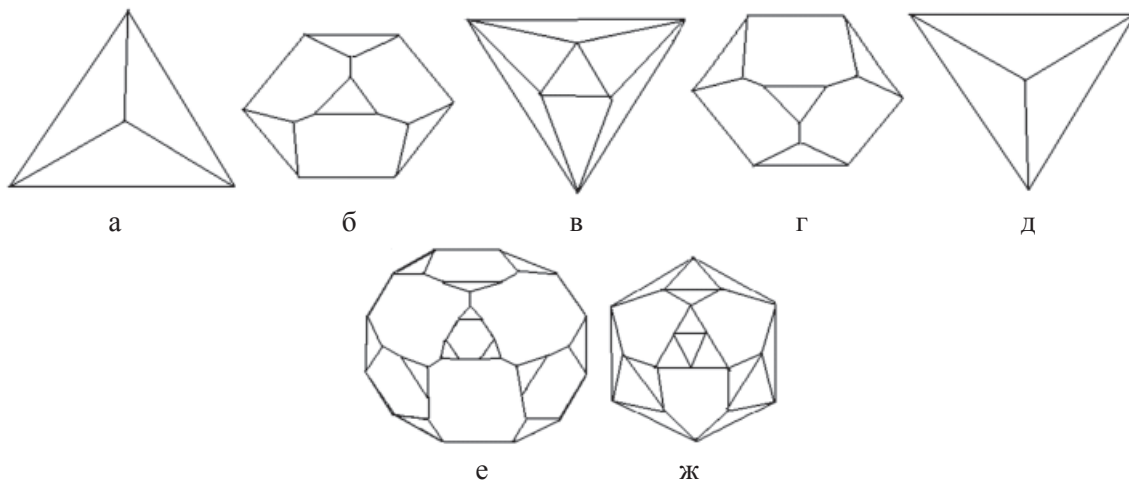


Рис. 1. Проекция оболочек для тетраэдра $T\{333\}$ (а) и его топологических производных из основной ветви сплиттинг-преобразования вершин: $tT(L'T)\{366\}$ (б); $O\{3333\}$ (в); $tT^u(L'T^u)\{366\}$ (г); $T^u\{333\}$ (д) $tL'T 2\{36.12\} + \{3.12.12\}$ (е); 20-гранник $2\{336\} + \{3636\}$ (ж)

Таблица 1

Характеристика полиэдров

Полиэдр и его симметрия	Количество			Состав фуллерена	Диаметр фуллерена, нм	Общая формула состава оболочек наноструктур
	вершин	ребер	граней			
$T\{333\}$ (T_d)	4	6	4	C_4	0,17	C_{4+12z}
$tT(L'T)\{366\}$ (T_d)	12	18	8	C_{12}	0,22	C_{12z}
$O\{3333\}$ (O_h)	6	12	8	C_6	0,19	C_{6+12z}
$tL'T 2\{36.12\} + \{3.12.12\}$ (T_d)	36	54	20	C_{36}	0,31	C_{12z}
$2\{336\} + \{3636\}$ (T_d)	18	36	20	C_{18}	0,26	C_{6+12z}

Аналогичные данные для указанных выше полиэдров с кубической симметрией могут быть получены при анализе фундаментальной области точечной группы T_d . Симметрический комплекс группы содержит центр симметрии, 6 поворотных осей симметрии 2-го порядка, 4 поворотные оси симметрии 3-го порядка, 3 инверсионные оси симметрии 4-го порядка и 6 плоскостей симметрии m . Фундаментальная область группы – неправильная трехгранная пирамида, ребрами которой являются ближайшие друг к другу оси симметрии 2-го и 3-го порядка (рис. 2). В [30] методом анализа фундаментальных областей точечной группы перечислены группы симметрии всех возможных симметрично неэквивалентных разновидностей молекул фуллеренов, которые могут возникнуть в результате ее непрерывных деформаций. В соответствии с этим методом для молекул фуллеренов C_{12} , C_{18} и C_{36} выделены различные типы структурных элементов, которым соответ-

ствуют симметрично неэквивалентные разновидности (табл. 2). В таблице используются обозначения структурных элементов, приведенные на рис. 2, б-з.

Таким образом вероятно, что при модифицировании КП наноалмазом фазовая и структурная разупорядоченность углеродсодержащих наночастиц на их поверхности после трибовоздействия может быть обусловлена наличием как слоистых фрагментов графитоподобных структур, так и фуллереноподобных наночастиц с симметрией группы T_d и ее возможных деформационных модификаций. Все эти наночастицы могут рассматриваться как частицы твердой компоненты покрытия, проявляющие свойства твердых смазочных материалов. В частности, это косвенно подтверждается результатами трибологических испытаний соответствующих твердосмазочных антифрикционных покрытий, полученных с использованием наночастиц алмаза [34].

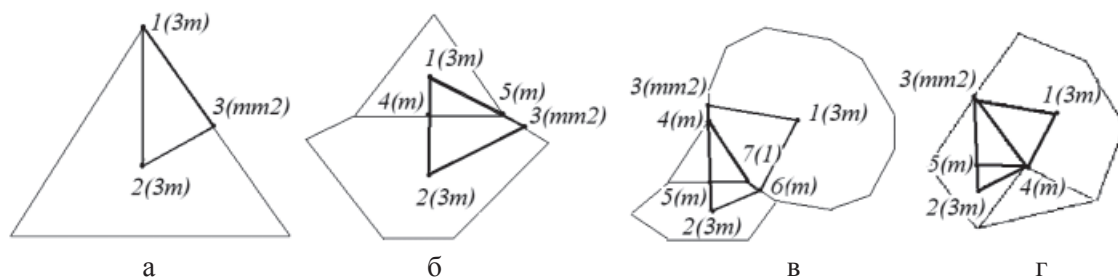


Рис. 2. Структурные элементы и их локальная симметрия в фундаментальной области точечной группы T_d :
 $a - T\{333\}$; $b - tT(L'T)\{366\}$; $v - (2\{36.12\} + \{3.12.12\})$; $z - 20\text{-гранник } (2\{336\} + \{3636\})$

Таблица 2
 Структурные состояния молекул фуллеренов C_{12} , C_{18} и C_{36} .

Структурный элемент	Размерность	Симметрия орбиты	Собственная симметрия
<i>Фуллерен C_{12} (форма $tT\{366\}$)</i>			
1, 2	1	$\bar{4}3m$	3m
3			mm2
4, 5			m
1-4, 3-5, 2-3, 1-5, 2-4	2	$\bar{4}3m$	m
4-5			1
1-4-5, 2-4-5-3	3	$\bar{4}3m$	1
<i>Фуллерен C_{36} (форма $tL'T(2\{36.12\} + \{3.12.12\})$)</i>			
1, 2	1	$\bar{4}3m$	3m
3			mm2
4, 5, 6			m
7			1
1-6, 1-3, 3-4, 4-5, 2-5, 3-6	2	$\bar{4}3m$	m
4-7, 5-7, 6-7			1
1-3-4-7-6, 2-5-7-6, 4-5-7	3	$\bar{4}3m$	1
<i>Фуллерен C_{18} (форма 20-гранника $(2\{336\} + \{3636\})$)</i>			
1, 2	1	$\bar{4}3m$	3m
3			mm2
4, 5			m
1-3, 1-4, 3-5, 2-5, 2-4	2	$\bar{4}3m$	m
3-4, 4-5			1
1-3-4, 3-4-5, 2-4-5	3	$\bar{4}3m$	1

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ, соглашение № 14.U01.21.1078.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Урусов В.С. Теоретическая кристаллохимия. – М.: Изд-во МГУ, 1987. – 275 с.
2. Иванов В.В. Комбинаторное моделирование вероятных структур неорганических веществ. – Ростов-на-Дону: Изд-во СКНЦ ВШ, 2003. – 204 с.
3. Ivanov V.V., Talanov V.M. // Crystallography Reports. – 2010. – Т. 55, № 3. – С. 362–376.
4. Ivanov V.V., Talanov V.M. // Russian Journal of Inorganic Chemistry. – 2010. – Т. 55, № 6. – С. 915–924.
5. Ivanov V.V., Talanov V.M. // Glass Physics and Chemistry. – 2008. – Т. 34, № 4. – С. 401–435.
6. Bepalova Zh.I., Ivanov V.V., Smirnitckaya I.V., et al. // Russian Journal of Applied Chemistry. – 2010. – Т. 83. – № 2. – С. 242–246.
7. Ivanov V.V., Bepalova Zh.I., Smirnitckaya I.V., et al. // Russian Journal of Applied Chemistry. – 2010. – Т. 83. – № 5. – С. 831–834.
8. Ivanov V.V., Talanov V.M., Shabel'skaya N.P. // Inorganic Materials. – 2001. – Т. 37. – № 8. – С. 839–845.
9. Ivanov V.V., Talanov V.M. // Physica Status Solidi (A) Applied Research. – 1990. – Т. 122. – № 2. – К109.
10. Иванов В.В., Таланов В.М. // Журнал структурной химии. – 1992. – Т. 33. – № 5. – С. 96–102.

11. Иванов В.В., Таланов В.М. // Неорганические материалы. – 1992. – Т.28. – № 8. – С. 1720–1725.
12. Иванов В.В., Таланов В.М. // Неорганические материалы. – 1995. – Т.31. – № 2. – С. 258–261.
13. Иванов В.В. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Естеств. науки. – 1996. – №1. – С. 67–73.
14. Ivanov V.V., Talanov V.M., Shirokov V.B., Talanov M.V. // *Inorganic Materials*. – 2011. – Т.47. – № 9. – С. 990–998.
15. Таланов В.М., Широков В.Б., Иванов В.В., Таланов М.В. // Междунар. журн. эксп. образования. – 2011. – № 4. – С. 89–90.
16. Таланов В.М., Широков В.Б., Иванов В.В., Таланов М.В. // Междунар. журн. эксп. образования. – 2011. – № 4. – С. 90–92.
17. Talanov V.M., Shirokov V.B., Ivanov V.V., Talanov M.V. // *Acta Crystallographica. A*. – 2011. – Vol. 67. – P. 805.
18. Таланов В.М., Широков В.Б., Иванов В.В., Таланов М.В. // Кристаллография. – 2013. – Т. 58. – № 1. – С. 101–112.
19. Иванов В.В. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. – 2001. – № 3. – С. 60–61.
20. Иванов В.В. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. Спецвыпуск. Проблемы трибозлектрохимии. – 2005. – С. 124–126.
21. Balakai V.I., Ivanov V.V., Balakai I.V., Arzumanoва A.V. // *Russian Journal of Applied Chemistry*. – 2009. – Т.82. – № 5. – С. 851–856.
22. 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.
23. 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. – 152 с.
24. Иванов В.В., Иванов А.В., Щербаков И.Н., Башкиров О.М. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. – 2005. – № 3. – С. 46–49.
25. Иванов В.В., Щербаков И.Н., Иванов А.В., Башкиров О.М. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. – 2005. – № 4. – С. 62–64.
26. Ivanov V.V., Balakai V.I., Ivanov A.V., Arzumanoва A.V. // *Russian Journal of Applied Chemistry*. – 2006. – Т. 79. – № 4. – С. 610–613.
27. Ivanov V.V., Balakai V.I., Kurnakova N.Yu., Arzumanoва A.V., Balakai I.V., // *Russian Journal of Applied Chemistry*. – 2008. – Т. 81. – № 12. – С. 2169–2171.
28. Щербаков И.Н., Иванов В.В. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. – 2011. – № 5. – С. 47–50.
29. Кустов Е.Ф., Нефедов В.И., Карелина М.С. и др. // Журн. неорганической химии. – 2006. – Т.51, – № 11. – С. 1906–1915.
30. Talanov V.M., Fedorova N.V. // In: *Handbook on Fullerene. Synthesis, Properties and Applications*. – N-Y: Nova Science Publishers, Inc., 2012. – P. 151–195.
31. Иванов В.В., Таланов В.М. // Наносистемы: Физика, Химия, Математика. – 2010. – Т.1. – № 1. – С. 72–107.
32. Иванов В.В., Таланов В.М., Гусаров В.В. // Наносистемы: Физика, Химия, Математика. – 2011. – Т.2. – № 3. – С. 121–134.
33. Иванов В.В., Таланов В.М., Гусаров В.В. // Наносистемы: Физика, Химия, Математика. – 2012. – Т.3. – № 4. – С. 82–100.
34. Патент № 2473711 РФ / Трофимов Г.Е., Щербаков И.Н., Шевченко М.Ю., Логинов В.Т., Дерлугян П.Д., Дерлугян Ф.П., Иванов В.В. – Опубл. 27.01.2013. – Бюл. № 3.