

УДК 548.3:669.018

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

<sup>1,2</sup>Дерлугян П.Д., <sup>1,2</sup>Иванов В.В., <sup>1</sup>Иванова И.В.,

<sup>1,2</sup>Логинов В.Т., <sup>1</sup>Данюшина Г.А.

<sup>1</sup>ФГУП ОКТБ «ОРИОН, Новочеркасск;

<sup>2</sup>Южно-Российский государственный технический университет,  
Новочеркасск, e-mail: valivanov11@mail.ru

Обсуждается возможная структурно-фазовая разупорядоченность углеродсодержащих наночастиц в антифрикционных композиционных покрытиях, модифицированных наноалмазом. Рассматриваются вероятные изосимметричные и деформационные модификации наноструктур с атомными оболочками октаэдрической 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 FULLERENE'S WITH COVERS BY OCTAHEDRAL  
BRANCH CLASSIFICATION INTO ANTIFRICTION  
COMPOSITIONAL COATINGS**

<sup>1,2</sup>Derlugyan P.D., <sup>1,2</sup>Ivanov V.V., <sup>1</sup>Ivanova I.V.,

<sup>1,2</sup>Loginov V.T., <sup>1</sup>Danyushina G.A.

<sup>1</sup>FGUE SDTU «ORION», Novochoerkassk;

<sup>2</sup>South-Russian state engineering university, Novochoerkassk, e-mail: valivanov11@mail.ru

The possible structural phase disordering of carbon containing nanoparticles into antifriction compositional coats modified by nanodiamond was discussed. The probably isosymmetric and deformational modifications of nanostructures with atomic covers of octahedral branch of fullerene's classification and the possible influence onto tribologic properties of the coatings were examined.

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

При трении поверхностные слои гетерогенных антифрикционных материалов и композиционных покрытий (КП) переходят в фазово-разупорядоченное состояние [1-3], которое, благодаря наличию межфазных «дефектов» и ультрадисперсных компонентов, способствует проявлению эффекта синергизма. В соответствии с синергической моделью «концентрационной волны» [4] скорость линейного износа и коэффициент трения КП зависят от относительной величины эффекта синергизма, который определяется размерным и наноструктурным факторами. Для КП разного фазового состава наноструктурный параметр, характеризующий объемную долю наночастиц фаз твердых компонент трибосопряженных поверхностей, принимает значения в интервале от 0,03 до 0,17 [5-16]. На основе анализа фазово-разупорядоченного состояния трибосопряженных поверхностей в соответствии с методиками [17-24] и количе-

ственного учета вероятного эффекта синергизма свойств компонентов КП возможен целенаправленный выбор эффективных модификаторов [8, 9].

Данная работа посвящена анализу возможной структурно-фазовой разупорядоченности углеродсодержащих наночастиц в антифрикционных КП, модифицированных наноалмазом. Рассмотрены некоторые из вероятных наноструктур с атомными оболочками фуллеренов октаэдрической ветви классификации, представленной в [25].

Топологические преобразования октаэдра определяются известными соотношениями между полиэдрами-изогонами (рис. 1):

октаэдр  $O\{3333\} \rightarrow$  усеченный октаэдр  $tO\{466\} \rightarrow$  кубооктаэдр  $CO\{3434\} \rightarrow$  усеченный куб  $tC\{388\} \rightarrow$  куб  $C\{444\}$ .

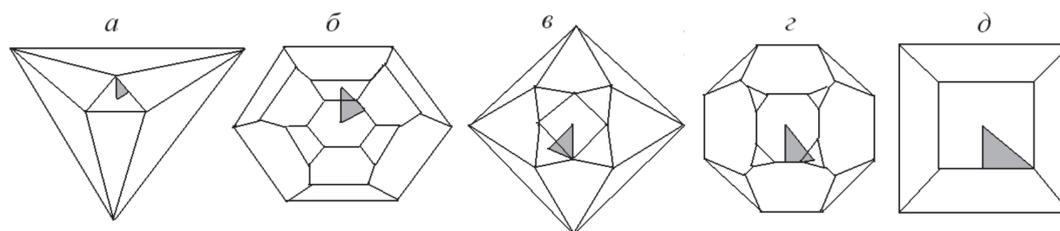


Рис. 1. Проекция оболочек и фундаментальные области группы симметрии  $O_h$  для  $O\{3333\}$  (а) и его топологических производных из основной ветви преобразований:  $tO\{466\}$  (б),  $CO\{3434\}$  (в),  $tC\{388\}$  (z) и  $C\{444\}$  (д)

Возможны также следующие преобразования с сохранением симметрии октаэдра  $O_h$ :

кубооктаэдр  $CO\{3434\} \rightarrow$  усеченный  
кубооктаэдр  $tCO\{468\}$   
 $\rightarrow$  ромбокубооктаэдр  $RCO\{3444\}$ ,  
усеченный октаэдр  $tO\{466\} \rightarrow$   
 $\{2\{3.8.12\} + \{3.12.12\}\} \rightarrow \{3436\}$ .

Характеристики всех полученных выше полиэдров с симметрией октаэдра  $O_h$ , в том числе расчетные значения диаметра соответствующих им фуллеренов и возможные составы оболочек углеродсодержащих наноструктур в соответствии с [25], представлены в табл. 1.

Таблица 1  
Характеристика полиэдров с симметрией  $O_h$  [25]

Полиэдр	Количество			Состав фуллерена	Диаметр фуллерена, нм	Общая формула состава оболочек наноструктур
	вершин	ребер	граней			
$O\{3333\}$	6	12	8	$C_6$	0,19	$C_{6+24z}$
$tO\{366\}$	24	36	14	$C_{24}$	0,27	$C_{24z}$
$CO\{3434\}$	12	24	14	$C_{30}$	0,29	$C_{12+24z}$
$tC\{388\}$	24	36	14	$C_{24}$	0,26	$C_{24z}$
$C\{444\}$	8	12	6	$C_8$	0,20	$C_{8+24z}$
$tCO\{468\}$	48	72	26	$C_{48}$	0,35	$C_{24z}$
$RCO\{3444\}$	24	48	26	$C_{24}$	0,26	$C_{24z}$
$2\{3.8.12\} + \{3.12.12\}$	72	108	38	$C_{72}$	0,41	$C_{24z}$
$\{3436\}$	36	72	38	$C_{36}$	0,31	$C_{12+24z}$

Аналогичные данные для полиэдров с кубической симметрией могут быть получены при анализе фундаментальной области точечной группы  $O_h$ . Симметрический комплекс группы содержит центр симметрии, 12 поворотных осей симметрии 2-го порядка, 4 инверсионные оси симметрии 3-го порядка, 6 поворотных осей симметрии 4-го порядка и 12 плоскостей симметрии  $m$ .

Фундаментальная область группы – замкнутая неправильная трехгранная пирамида, ребрами которой являются ближайшие друг к другу оси симметрии 2-го, 3-го и 4-го порядка (рис. 2). Положение вершин вероятных многогранников и их локальная симметрия в фундаментальной области точечной группы  $O_h$  представлены на рис. 3.

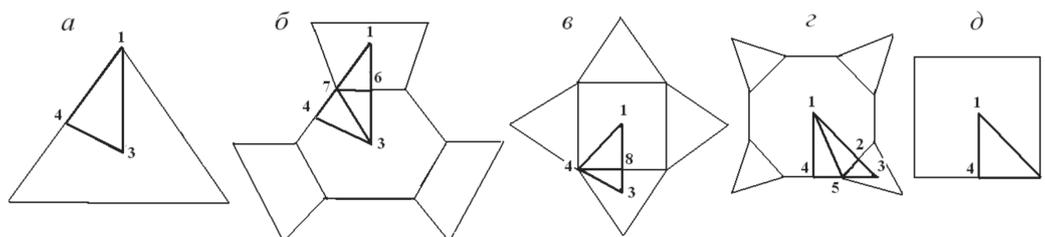


Рис. 2. Соотношения структурных элементов модификаций фуллеренов с симметрией  $O_h$ :  $C_6 - O\{3333\}$  – (а),  $C_{24} - tO\{366\}$  – (б),  $C_{12} - CO\{3434\}$  – (в),  $C_{24} - tC\{388\}$  – (z),  $C_8 - C\{444\}$  – (д)

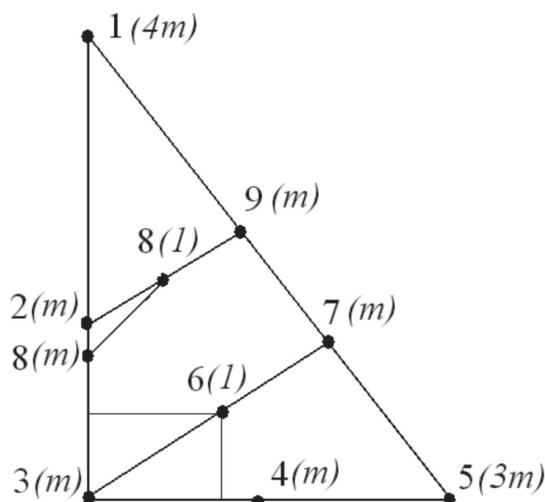


Рис.3. Положение вершин вероятных многогранников и их локальная симметрия в фундаментальной области точечной группы симметрии  $O_h$ : 1 –  $O\{3333\}$ , 2 –  $tO\{366\}$ , 3 –  $CO\{3434\}$ , 4 –  $tC\{388\}$ , 5 –  $C\{444\}$ , 6 –  $tCO\{468\}$ , 7 –  $RCO\{3444\}$ , 8 – многогранник с топологией вершин  $(2\{3.8.12\}+\{3.12.12\})$ , 9 – многогранник  $\{3436\}$

В [26] методом анализа фундаментальных областей точечной группы симметрии перечислены группы симметрии всех возможных симметрично неэквивалентных разновидностей молекул фуллеренов, которые могут возникнуть в результате ее непрерывных деформаций. В частности, для молекулы фуллерена  $C_{60}$  авторами выделено 23 различных типа структурных элементов, которым соответствуют 23 типа симметрично неэквивалентных разновидностей молекулы [26]. Аналогичный анализ с ис-

пользованием данных о структурных элементах (рис. 2) для получения вероятных деформационных модификаций может быть проведен и для других молекул фуллеренов, например, для двух изосимметричных молекул состава  $C_{24}$  (табл. 2). Используемые в таблице 2 обозначения структурных элементов фундаментальной области точечной группы  $O_h$  для фуллеренов состава  $C_{24}$  в форме усеченного октаэдра и в форме усеченного куба указаны на рис.2,б и 2,г, соответственно.

Таблица 2  
Возможные структурные состояния молекулы фуллерена  $C_{24}$

Структурный элемент *	Размерность	Симметрия орбиты	Собственная симметрия
Фуллерен в форме усеченного октаэдра			
1	1	$m \bar{3}m$	4mm
3			3m
4			mm2
6, 7			m
1-6, 1-7, 3-6, 3-4, 4-7	2	$m \bar{3}m$	m
3-7, 6-7			1
1-6-7, 3-6-7, 3-4-7	3	$m \bar{3}m$	1
Фуллерен в форме усеченного куба			
1	1	$m \bar{3}m$	4mm
3			3m
4			mm2
2, 5			m
1-2, 1-4, 2-3, 3-5, 4-5	2	$m \bar{3}m$	m
1-5, 2-5			1
1-2-5, 3-2-5, 1-4-5	3	$m \bar{3}m$	1

Для обеих изосимметричных модификаций молекулы фуллерена  $C_{24}$  выделено 15 различных типов структурных элементов (табл. 2). Отметим, что этим элементам соответствуют 15 типов симметрично неэквивалентных деформационных модификаций, которые также образуют 15 пар изосимметричных модификаций.

Таким образом, установлено, что при модифицировании КП нанодiamondом фазовая и структурная разупорядоченность углеродсодержащих наночастиц на их поверхности после трибовоздействия может быть обусловлена, в частности, наличием фуллереноподобных наночастиц с диаметром менее 0,5 нм с симметрией группы  $O_h$  и их вероятных деформационных модификаций. Все углеродсодержащие наночастицы в соответствии с синергической моделью могут рассматриваться как «фазы» твердой компоненты, проявляющие свойства твердых смазочных материалов и эффективно влияющие на трибологические свойства КП [8, 9]. Это косвенно подтверждается, в частности, результатами трибологических испытаний соответствующих твердосмазочных антифрикционных покрытий, полученных с использованием наночастиц алмаза [27].

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Иванов В.В. Комбинаторное моделирование вероятных структур неорганических веществ. – Ростов-на-Дону: Изд-во СКНЦ ВШ, 2003. – 204 с.
2. Иванов В.В. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. 2001. – №3. – С. 60-61.
3. Иванов В.В. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. Спецвыпуск. Проблемы трибоэлектрохимии. – 2005. – С. 128-130.
4. Иванов В.В., Иванов А.В., Щербаков И.Н., Башкиров О.М. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. – 2005. – №3. – С. 46-49.
5. Иванов В.В., Логинов В.Т., Башкиров О.М. Щербаков И.Н., Марченко С.И. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. – 2003. – №3. – С. 54-55.
6. Иванов В.В., Башкиров О.М., Щербаков И.Н. и др. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. Спецвыпуск. Композиционные материалы. – 2005. – С. 50-52.
7. Balakai V.I., Ivanov V.V., Balakai I.V., Arzumano-va A.V. // Russian Journal of Applied Chemistry. 2009. – Т.82. – №.5. – С. 851-856.
8. Иванов В.В., Щербаков И.Н. Моделирование композиционных никель-фосфорных покрытий с антифрикцион-ными свойствами. – Ростов н/Д: Изд-во журн. «Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион», 2008. – 112 с.
9. Щербаков И.Н., Иванов В.В., Логинов В.Т. и др. Химическое конструирование композиционных материалов и покрытий с антифрикционными свойствами. – Ростов н/Д: Изд-во журн. «Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки», – 2011. – 152 с.
10. Иванов В.В., Щербаков И.Н., Иванов А.В., Башкиров О.М. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. 2005. – №4. – С. 62-64.
11. Иванов В.В., Щербаков И.Н. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. – 2008. – № 3. – С. 113-115.
12. Иванов В.В., Щербаков И.Н. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. – 2008. – № 4. – С. 116-118.
13. Ivanov V.V., Balakai V.I., Ivanov A.V., Arzumano-va A.V. // Russian Journal of Applied Chemistry. 2006. Т.79. – № 4. – С. 610-613.
14. Иванов В.В., Щербаков И.Н. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. – 2010. – №5. – С. 72-75.
15. Ivanov V.V., Balakai V.I., Kurmakova N.Yu., Arzumano-va A.V., Balakai I.V., // Russian Journal of Applied Chemistry. – 2008. – Т.81. – № 12. – С. 2169-2171.
16. Щербаков И.Н., Иванов В.В. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. – 2011. – №5. – С. 47-50.
17. Иванов В.В., Таланов В.М. // Наносистемы: Физика, Химия, Математика. 2010. Т.1. №1. С. 72-107.
18. Иванов В.В., Таланов В.М., Гусаров В.В. // Наносистемы: Физика, Химия, Математика. 2011. Т.2. – № 3. – С. 121-134.
19. Иванов В.В., Таланов В.М., Гусаров В.В. // Наносистемы: Физика, Химия, Математика. 2012. – Т.3. – № 4. – С. 82-100.
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. // Журн. структурн. химии. 2013. – Т.54. – №2. – С. 354-376.
24. Иванов В.В., Таланов В.М. // Кристаллография. 2013. – Т.58. – № 3. – С. 370-379.
25. Кустов Е.Ф., Нефедов В.И., Карелина М.С. и др. // Журн. неорганической химии, 2006. – Т.51. – №11. – С. 1906-1915.
26. Talanov V.M., Fedorova N.V. // In: Handbook on Fullerene. Synthesis, Properties and Applications. – N-Y: Nova Science Publishers, Inc., 2012. Ch.3. P. 151-195.
27. Патент №2473711 РФ / Г.Е. Трофимов, И.Н. Щербаков, М.Ю. Шевченко, В.Т. Логинов, П.Д. Дерлугян, Ф.П. Дерлугян, В.В. Иванов. – Оpubл. 27.01.2013. Бюл. № 3.

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