УДК 548.1

ВЛИЯНИЕ ТИПА МЕХАНИЗМА ЛОКАЛЬНОГО ПРОЯВЛЕНИЯ СТРУКТУРНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ 4D P-ЯЧЕЙКИ НА ГЕОМЕТРИКО-ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И СТРУКТУРНЫЕ СОСТОЯНИЯ ТРАНЗИТИВНОЙ ОБЛАСТИ 3D ЯЧЕИСТОГО ПРОСТРАНСТВА

Иванов В.В., Таланов В.М.

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

Обсуждается возможное влияние механизма локального проявления структурных элементов 4D P-ячейки на геометрико-топологические свойства и структурные состояния транзитивной области 3D ячеистого пространства.

Ключевые слова: модулярная 4D P-ячейка, структурный элемент, транзитивная область, 3D ячеистое пространство, структурное состояние

INFLUENCE OF THE LOCAL MANIFESTATION MECHANISM TYPE OF 4D P-CELL STRUCTURAL ELEMENTS UPON GEOMETRICAL AND TOPOLOGIC PROPERTIES AND STRUCTURAL STATES TOO OF THE TRANSITION DOMAIN IN 3D CELLULAR SPACE

Ivanov V.V., Talanov V.M.

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

The possible influence of the local manifestation mechanism of 4D P-cell structural elements upon geometrical and topologic properties and structural states too of the transition domain of 3D cellular space was discussed.

Keywords: modular 4D P-cell, structural element, transition domain, 3D cellular space, structural state

Проанализируем возможное влияние типа механизма локального проявления структурных элементов 4D P-ячейки на геометрико-топологические свойства и структурные состояния транзитивной области 3D ячеистого пространства. Для этого рассмотрим некоторые топологические характеристики структурированного пространства, представляющего собой клеточный комплекс. В соответствии с теоремой Эйлера целочисленная характеристика конечного клеточного комплекса K

$$\chi(K) = \sum_{n=0}(-1)^n \alpha_n,$$

где α_n – число n-мерных клеток комплекса (или n-мерных структурных элементов полиэдра), является гомологическим, гомотопическим и топологическим инвариантом и не зависит от способа разбиения пространства на клетки (ячейки) [1, 2].

С другой стороны эйлерова характеристика может быть представлена следующим образом:

$$\chi(K) = \sum_{n=0}(-1)^n b^n,$$

где b^n – n-мерное Бетти число комплекса K, а эйлерова характеристика $\chi(K)$ является топологическим инвариантом n-мерного полиэдра и равна числу попарно негомологичных циклов в нем.

Для компактного n-мерного полиэдра $\chi(K) = 2$. В связи с этим будем рассматривать функцию

$$(\chi(K) + x)^n = (2 + x)^n$$

и соответствующее разложение этой функции в ряд Маклорена

$$2^n + n\,2^{n-1}x + C_n^2\,2^{n-2}x^2 + C_n^3\,2^{n-3}x^3 + \ldots + C_n^m\,2^{n-m}x^m + \ldots + C_n^n\,2^0 x^n,$$

с областью сходимости $|x| < 2$. Здесь C_n^m – биномиальные коэффициенты, численно равные количеству сочетаний из n по m.

В соответствии с формулой Эйлера-Пуанкаре имеем корреляцию с эйлеровой характеристикой $\chi(K)$, если в алгебраической сумме коэффициентов ряда Маклорена

$$\sum_{i=0}^{n}(-1)^i C_i^m 2^{i-m} = 1$$

учитывать все структурные элементы выпуклого n-мерного полиэдра с размерностями $m < n$, а также и сам полиэдр.

Если n-мерный полиэдр определен в единичной ячейке n-мерного пространства, т.е. в клетке, построенной на интервалах [0,1] n 1D подпространств, то $x = 1$. Тогда общее количество всех структурных элементов n-мерного полиэдра с размерностями $m < n$ с учетом самого полиэдра равно

$$N_{str.\,el.} = [(2 + x)^n - 1] = (3^n - 1).$$

Общее количество определенных структурных элементов с размерностью $n' < n$, составляющих n-мерную фигуру, можно определить по следующей формуле:

$$N_{str.el.,n'} = C_n^{n'} 2^{n-n'} .$$

Общее количество определенных структурных элементов (т.е. с определенными размерностями $n' < n$) n-мерных фигур, плотно упакованных в nD пространстве, которые имеют общую вершину, может быть рассчитано с учетом замены $(n\text{–}n') \to n'$ по аналогичной формуле $N_{str.el.,n',c.p.} = C_n^{n'} 2^{n'}$.

В соответствии с теоремой Штейница существует выпуклый многогранник с любой наперед заданной сеткой, составленной его ребрами. В частности, для выпуклых шестигранников существует 7 типов сеток, одной из которых является кубическая. Куб – правильный многогранник, один из пяти тел Платона, является изоэдром с квадратными гранями и изогоном (многогранником с топологически идентичными вершинами). Куб – параллелоэдр, позволяющий получить нормальное разбиение [1]. При плотной упаковке в 3D пространстве из его ребер образуется кубическая сетка, а из геометрических центров – кубическая решетка. По аналогии с нормальным разбиением в 3D пространстве на кубические ячейки существуют нормальные разбиения гиперпространств на соответствующие гиперкубические ячейки [2]. Топологические характеристики некоторых n–мерных фигур приведены в табл. 1.

Для определения влияния механизма локального проявления 4D Р-ячейки на геометрико-топологические свойства и структурные состояния транзитивной области 3D пространства будем рассматривать механизм замещения структурного элемента пространственной Р-ячейки и механизм внедрения в область существования этого элемента. Оба типа механизма проявления гиперпространства в ячеистом 3D пространстве сопровождаются изменением геометрико-топологических характеристик его Р-ячеек, в частности, изменением объемной концентрации ее определенных структурных элементов (вершин, ребер). Эти изменения охватывают определенную локальную область пространства – транзитивную область, включающую также и замещающий (или внедренный) структурный элемент 4D Р-ячейки.

Таблица 1

Топологические характеристики некоторых n–мерных фигур

<table>
<tr><td rowspan="4">Фигура</td><td colspan="5">Общее количество определенных структурных элементов плотно упакованных в nD пространстве n-мерных фигур, имеющих общую вершину</td><td rowspan="4">Мерность пространства плотно упакованных фигур, n'</td></tr>
<tr><td colspan="5">Общее количество определенных структурных элементов фигуры, $N_{str.\,el.}$</td></tr>
<tr><td colspan="5">Структурные элементы и их размерности n'</td></tr>
<tr><td>вершина (0)</td><td>ребро (1)</td><td>грань (2)</td><td>3D куб</td><td>4D куб</td></tr>
<tr><td>точка</td><td>1</td><td>2</td><td>4</td><td>8</td><td>16</td><td>0</td></tr>
<tr><td>отрезок</td><td>2</td><td>1</td><td>4</td><td>12</td><td>32</td><td>1</td></tr>
<tr><td>квадрат</td><td>4</td><td>4</td><td>1</td><td>6</td><td>24</td><td>2</td></tr>
<tr><td>3D куб</td><td>8</td><td>12</td><td>6</td><td>1</td><td>8</td><td>3</td></tr>
<tr><td>4D куб</td><td>16</td><td>32</td><td>24</td><td>8</td><td>1</td><td>4</td></tr>
</table>

В предположении о сохранении объема пространственной Р-ячейки в процессах проявления в ней структурных элементов 4D Р-ячейки (т.е. $\Delta V = 0$) будем рассматривать следующие характеристики транзитивной области.

1. Усредненное изменение объемной концентрации вершин $\Delta C_v = (\Delta N_v / V_{яч.})$.

В 3D P-ячейке (примитивной кубической ячейке) N_v =1.

2. Относительное изменение суммарной длины ребер всех структурных компонентов транзитивной области $\Delta L_r = (\Delta L_p/L_p)$.

В 3D P-ячейке L_p = 3a , где a – метрический параметр кубической ячейки.

Влияние механизма проявления структурных элементов P-ячейки 4D пространства на объемную концентрацию вершин и суммарную длину ребер всех компонентов транзитивной области представлено в табл. 2. Очевидно, что при реализации механизма замещения объемная концентрация вершин закономерно увеличивается с уменьшением мерности замещаемого структурного элемента и увеличением мерности элемента-заместителя. При реализации механизма внедрения величина изменения характеристики C_v транзитивной области более существенна (табл. 2). Для характеристики ΔL_r транзитивной области качественный характер изменений для одного и другого механизма аналогичен, однако он усложняется при совпадении мерности структурных элементов 3D и 4D P-ячеек (табл. 2).

Приведем примеры некоторых классов веществ [3-25], структурные особенности которых в локальной области могут быть интерпретированы в рамках возможного влияния одного из механизмов проявления структурных элементов гипотетической 4D P-ячейки.

Таблица 2

Влияние механизма проявления структурных элементов P-ячейки 4D пространства на удельные геометрические характеристики транзитивной области

Структурные элементы		Удельные геометрические характеристики транзитивной области			
		Механизм замещения		Механизм внедрения	
3D ячейка	4D ячейка	Cv	Lr	Cv	Lr
вершина	вершина	1,000	3,00	-	-
	ребро	1,123	4,20	1,250	4,83
	грань	1,375	4,34	1,500	4,81
	ячейка	1,875	6,43	2,000	7,10
ребро	вершина	0,917	4,71	1,083	4,12
	ребро	1,000	3,00	-	-
	грань	1,167	4,49	1,333	4,74
	ячейка	1,500	6,72	1,667	7,96
грань	вершина	0,833	4,97	1,056	5,88
	ребро	0,888	4,42	1,111	5,05
	грань	1,000	3,00	-	-
	ячейка	1,222	7,89	1,444	8,66
ячейка	вершина	0,741	6,83	1,037	9,93
	ребро	0,778	5,22	1,074	7,24
	грань	0,852	4,54	1,148	5,43
	ячейка	1,000	3,00	-	-

В модулярных структурах на основе структурного типа шпинели с использованием модуля состава AB_2X_4 [3-12] также могут быть получены шпинелоиды-гомологи, принадлежащие, в частности, рядам окисления $A_{n+2}(B_2X_4)_{3n}$, $A_{2n+1}(B_2X_4)_{2n}$, $A_{3n+3}(B_2X_4)_{3n}$, $A_{3n+1}(B_2X_4)_{4n}$ и ряду восстановления вида $A_{2n-1}(B_2X_4)_{4n}$ [8, 12]. Изменение вершинной топологии тетраэдров от 4(2) к 2(2)-2(3) в плоскостях сдвига приводит к изменению в предполагаемой транзитивной области объемной концентрации вершин ΔC_v = 0,187, а изменение вершинной топологии октаэдров от 6(2) к 3(2)-3(3) – к изменению ΔC_v = 0,100.

В системах сложных оксидов переходных металлов с октаэдрическими структурами известны гомологические ряды окисления: Me_nO_{n-1} (Me – Cr, V), Me_nO_{2n-1} (Me – Ti, Mn, V, Nb), Me_nO_{3n-1} и Me_nO_{3n-2} (Me – W, Mo), V_nO_{5n-2}, Me_nO_{8n-3} (Me – V, Nb), и гомологические ряды восстановления Me_nO_{n+1} и Me_nO_{2n+1} (Me – V, Nb) [8, 13-15]. Эти гомологические ряды характеризуют фазы кристаллографического сдвига и, как показано в [16, 17], могут быть представлены следующим образом: ряды окисления – $Me_{3F(n)-F(n-2)}O_{F(n)}$ и $Me_{2F(n)-F(n-2)}O_{F(n)}$, ряды восстановления – $Me_{F(n)+F(n+1)}O_{F(n)}$ и $Me_{F(n)+F(n-1)}O_{F(n)}$, где F(*n*) – числа Фибоначчи. Определена область вероятного существования оксидов переходных металлов с октаэдрическими структурами состава Me_aO_b : $(1+t) \le (b/a) \le \le (3-t)$, где $t \cong 0,62$ – численное выражение золотого сечения [2] Установлено, что изменение вершинной топологии октаэдров от 6(2) к 3(2)–3(3) в плоскостях сдвига приводит к изменению в предполагаемой транзитивной области объемной концентрации вершин на величину $DC_v = 0,125$.

В литийсодержащих фазах внедрения на основе олова и свинца существуют две гомологические серии структур $Li_{3n-2}Me_n$ и $Li_{5n-2}Me_n$ ($n = 2 - 6$, $\propto$ Me – S*n*, Pb), которые в [8, 18, 19] представлены как следствие одномерного и двумерного кристаллографического сдвига в структурах исходных металлов. При изменении порядкового номера *n* от 2 до 6 величина параметра изменения атомной плотности DC_v для гомологов двух рядов закономерно возрастает от 0,333 до 0,455 (в сравнении с гомологом при $n = 1$).

Упорядоченные твердые растворы внедрения лития в гексагональный графит образуют серию структур состава Li_xC (где x = 1/6, 1/8, 1/10, 1/12, 1/14, 1/18) [8, 20, 21]. Упорядоченные твердые растворы внедрения лития в диоксид металла образуют в свою очередь серию структур состава Li_xMeO_2 (где x = 1/3, 1/4, 1/6, 1/9, 1/12, 1/16) [8]. Параметр изменения атомной плотности DC_v для представителей этих двух серий структур принимает значения в интервале 0,056 – 0,187 и 0,021 – 0,111, соответственно.

Для карбидов некоторых переходных металлов возможно образование упорядоченных фаз состава Me_aC_b, где $(b/a) = 1-x_0$, а параметр x_0, характеризующий отклонение от стехиометрии, может принимать определенные значения, например, 1/4 (V_4C_3), 1/6 (V_6C_5) и 1/8 (V_8C_7) [21-25]. Соответствующие значения параметра изменения атомной плотности $DC_v = -0,250, -0,167$ и $-0,125$.

Таким образом, перечисленные выше примеры локального изменения атомной плотности формально могут быть интерпретированы как различные варианты возможного проявления некоторых структурных элементов гипотетической гиперячейки в структурированном 3D ячеистом кристаллическом пространстве.

Результаты работы получены при поддержке Минобрнауки РФ в рамках государственного задания на проведение НИОКР, шифр заявки N6.8604.2013.

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. – 384с.

3. Иванов В.В., Таланов В.М. // Журн. структурн. химии. – 1992. – Т.33, № 3. – С.137-140.

4. Иванов В.В., Таланов В.М. // Журн. структурн. химии. – 1992. – Т.33, № 5. – С.96-102.

5. Иванов В.В., Таланов В.М. // Неорган. материалы, 1992. – Т.28, № 8. – С.1720-1725.

6. Иванов В.В., Таланов В.М. // Неорган. материалы.- 1992. – Т.28, № 9. – С.2022-2024.

7. Иванов В.В., Таланов В.М. // Неорган. материалы. – 1995. – Т.31, N2. – С.258-261.

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

9. Иванов В.В., Таланов В.М. // Кристаллография, 2010. Т.55, № 3. С.385-398.

10. Иванов В.В., Таланов В.М. // Журн. неорганической химии, 2010. Т.55, № 6. С.980-990.

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

12. Иванов В.В., Таланов В.М. // Физика и химия стекла, 2008. Т.34. № 4. С.528-567.

13. Уэллс А. Структурная неорганическая химия. В 3-х томах. – М.: Мир, 1987/88. – Т.1. – 408с.; Т.2. – 696 с.; Т.3. – 564 с.

14. Иванов В.В.. Ерейская Г.П., Люцедарский В.А. // Изв. АН СССР. Неорган. материалы, 1990. – Т.26, № 4. – С. 781-784.

15. Иванов В.В.. Ерейская Г.П, // Изв. АН СССР. Неорган. материалы. – 1991. – Т.27, № 12. – С. 2690-2691.

16. Иванов В.В., Таланов В.М. //Изв. вузов Сев.-Кавк. регион. Естеств. науки. – 1995. – № 2. – С.38-43.

17. Иванов В.В. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Естеств. науки.- 1996.- N1. – С.67-73.

18. Урусов В.С. Теоретическая кристаллохимия. – М.: МГУ, 1987. – 276с.

19. Крипякевич П.И. Структурные типы интерметаллических соединений. – М.: Наука, 1977. – 290 с.

20. Иванов В.В., Щербаков И.Н., Иванов А.В. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. – 2010. – № 2. – С.91-98.

21. 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. – 112с.

22. Тот Л. Карбиды и нитриды переходных металлов. – М.: Мир, 1974. – 294с.

23. Пирсон У. Кристаллохимия и физика металлов и сплавов. – М.: Мир, 1977. – Ч.1. – 420с.; Ч.2. – 472с.

24. Иванов В.В., Щербаков И.Н., Иванов А.В., Марченко С.И. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. – 2008. – № 5. – С. 67-69.

25. 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. – 132 с.

26. Иванов В.В., Таланов В.М. // Успехи соврем. естествознания, 2013 – № .7 – С.64-.67

27. Иванов В.В., Таланов В.М., Гусаров В.В. // Наносистемы: Физика, Химия, Математика, 2011. Т.2. № 3. С.121-134.

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

29. Иванов В.В., Таланов В.М. // Журн. структурн. химии, 2013. Т.54. № 2. С.354-376.