

УДК 501:548.1

КОМПЛЕКСНЫЕ СТРУКТУРНЫЕ СОСТОЯНИЯ КАК ФОРМАЛЬНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ВАРИАНТОВ ФАЗОВО-РАЗУПОРЯДОЧЕННОГО СОСТОЯНИЯ ПОВЕРХНОСТИ КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА ПРИ ТРЕНИИ И ИЗНОСЕ

Иванов В.В.*АО «ОКТБ «ОРИОН», Новочеркасск, e-mail: valivanov11@mail.ru*

Предложена концепция комплексных структурных состояний поверхности композиционного материала как формализованного представления вариантов реализации фазово-разупорядоченного состояния при трении и износе. Рассмотрены основные его компоненты – состояния фазовой, структурно-фазовой и структурной разупорядоченности. Проанализированы взаимосвязи данных компонентов разупорядоченности с вариантами упорядоченности структурных элементов кристаллических структур и квазикристаллов, наноразмерных фрагментов и наноструктур, а также фрактальных структур. Фрактальные структуры могут рассматриваться как возможные аппроксиманты конфигураций межфазных границ и сайз-распределения кристаллических фаз и наноразмерных частиц на поверхности и в объеме антифрикционных композиционных материалов. В связи с этим комплексные структурные состояния включают кристаллическую, наноразмерную и фрактальную компоненты. Многообразие различных вариантов комплексных структурных состояний определяется комбинаторным методом.

Ключевые слова: комплексное структурное состояние, фазово-разупорядоченное состояние, композиционный материал, кристаллическая структура, наноструктура, фрактальная структура

COMPLEX STRUCTURAL STATES AS A FORMAL VARIANTS PRESENTATION OF THE PHASE DISORDERED SURFACE STATE OF THE COMPOSITIONAL MATERIAL BY FRICTION AND WEAR

Ivanov V.V.*J-SC SDTU «ORION», Novocherkassk, e-mail: valivanov11@mail.ru*

Complex structural states conception of the compositional material surface as a formal variants presentation of realization of the phase disordered by friction and wear was offered. The main its components – states of phase, structural phase and structural disordering were considered. The possible correlations of these disordering components with all variants of ordering of the structural elements of crystal structures and quazi-crystals, nano-dimension fragments and nanostructures and fractal structures were analyzed, too. Fractal structures as a possible approximants of the inter-phase borders configurations and size-distributions of the crystal phases and nano-dimension particles onto surface and into volume of anti-friction compositional materials are considered. Therefore the complex structural states are included the crystal, nano-dimensional and fractal components. The multitude of different variants of the complex structural states may be determined by combinatorial method.

Keywords: complex structural state, phase disordered state, compositional material, crystal structure, nanostructure, fractal structure

В концептуальной системе химии твердофазных материалов «фазовый состав – микроструктура – фазово-разупорядоченное состояние – свойство» под специфическим состоянием понимают комплексное состояние в материале, включающее фазовую, структурную и структурно-фазовую разупорядоченности [1–3]. Использование данного элемента концептуальной системы позволяет выявить корреляционную связь между фазовым составом и микроструктурными характеристиками, с одной стороны, и макроскопическими свойствами материала с другой [3, 4]. Однако, отсутствие формализованного представления о фазово-разупорядоченном состоянии материала не позволяет от качественных описательных моделей перейти к полуколичественным прогнозным моделям описания свойств поверхности и объема композитов.

Состояние фазовой разупорядоченности

Состояние фазовой разупорядоченности возникает в материале тогда, когда элементы соответствующей ему химической системы при данных термодинамических условиях самопроизвольно распределяются по двум и более фазам разного состава и, как правило, с разной структурой [2, 4–13]. При этом распределения каждой из этих фаз в объеме материала (сайт-распределения) могут быть любыми: от квазиупорядоченного до полностью разупорядоченного (хаотичного), а распределения микрочастиц фаз по размерам (сайз-распределения) могут иметь квазинепрерывный или дискретный характер. Необходимо отметить, что в любом случае в объеме материала образуется 3D сетка межфазных границ, конфигурации разнообразных ячеек которой могут быть аппроксимированы предфрактальными замкнутыми поверхностями. Соответствен-

но на поверхности материала, которая может рассматриваться как сечение его объема, имеем 2D сетки межфазных границ, аппроксимантами для которых являются системы квазиупорядоченных замкнутых фрактальных кривых. Таким образом, квазифрактальный характер сайт- и сайз-распределений каждой из фаз материала и конфигураций межфазных границ являются необходимыми атрибутами состояния фазовой разупорядоченности [2, 3, 9–13].

Состояние структурной разупорядоченности

Состояние структурной разупорядоченности в узком смысле означает наличие в многоподрешеточных структурах некоторых фаз разупорядоченности определенных структурных элементов – атомов – по одной или нескольким подрешеткам данной структуры [2]. Статическая структурная разупорядоченность предполагает равномерное распределение одного или более сортов атомов по кристаллографически эквивалентным позициям (структуры твердых растворов замещения или внедрения [14–16]). Динамическая структурная разупорядоченность характерна для структур, в которых имеются подвижные ионы, статистически распределенные по существенно большему числу кристаллографических позиций, которые и образуют структурные каналы для них (структуры деления, в частности, ионные проводники [17–31]).

Состояние структурной разупорядоченности в широком смысле реализуется в структурах, в которых по крайней мере в одном кристаллографическом направлении наблюдается разупорядоченное расположение определенных структурных элементов [32]. Такое состояние характерно для атомных трехмерных m -упорядоченных структур R_m^3 (где $m < 3$ и означает число кристаллографических направлений, в которых атомы упорядочены). Примеры видов структур: R_2^3 , R_1^3 и полностью разупорядоченная аморфная структура R_0^3 . Для модульных, в том числе и модулярных, структур различают не только позиционную (p), но и ориентационную (or) упорядоченности, т.к. модули не обладают, как атомы, сферической симметрией [2]. Поэтому модулярные структуры вида $R_{p,or}^3$, где параметры упорядоченности $p < 3$ и $or < 3$ (структуры кристаллов, квазикристаллов, аперриодических кристаллов) – обладают структурной разупорядоченностью модулей. Примеры видов 3D структур: частично разупорядоченные модулярные структуры $R_{3,2}^3$, $R_{3,1}^3$, $R_{3,0}^3$, $R_{2,3}^3$, $R_{2,2}^3$, $R_{2,1}^3$, $R_{2,0}^3$, $R_{1,3}^3$, $R_{1,2}^3$, $R_{1,1}^3$, $R_{1,0}^3$, $R_{0,3}^3$, $R_{0,2}^3$, $R_{0,1}^3$ и полностью разупорядоченная квазиаморфная моду-

лярная структура $R_{0,0}^3$. Примеры видов 2D структур: частично разупорядоченные модулярные структуры $R_{2,1}^2$, $R_{2,0}^2$, $R_{1,2}^2$, $R_{1,1}^2$, $R_{1,0}^2$, $R_{0,2}^2$, $R_{0,1}^2$ и полностью разупорядоченная аморфная модулярная структура $R_{0,0}^2$.

Состояние структурно-фазовой разупорядоченности

В процессе достаточно интенсивных внешних воздействий на композиционный материал, в частности, при трении и износе, некоторые фазы в его поверхностных слоях могут перейти в ультрадисперсное состояние и/или в состояние с другой структурной модификацией за счет фазовых превращений, в том числе и обратимых фазовых переходов второго рода [2, 3, 33–37].

В первом случае наноразмерные частицы некоторых фаз в продуктах износа могут принять участие в процессе трения и существенно повлиять на его характеристики. Ранее теоретически было установлено, что образующиеся в процессе трения наноструктуры твердых фаз, которые по своим формам близки к сфере или цилиндру, выполняют функцию твердосмазочных материалов и способствуют снижению коэффициента трения [3, 5–11, 33–37]. Такими наноразмерными частицами могут быть 2D наноструктуры N_m^2 (N_2^2 , N_1^2 и аморфная N_0^2) и 1D наноструктуры N_1^1 (N_1^1 и разупорядоченная наноструктура N_0^1), где n означает число кристаллографических направлений, в которых упорядочены сферически симметричные элементы структур. Если структурные элементы наноразмерных частиц не обладают сферической симметрией, то возможно образование модульных и даже модулярных наноструктур вида $N_{p,or}^2$, где параметры упорядоченности $p < 3$ и $or < 3$ (структуры 2D кристаллов, квазикристаллов, аперриодических кристаллов). Примеры видов 2D структур: частично разупорядоченные модулярные наноструктуры $N_{2,1}^2$, $N_{2,0}^2$, $N_{1,2}^2$, $N_{1,1}^2$, $N_{1,0}^2$, $N_{0,2}^2$, $N_{0,1}^2$ и полностью разупорядоченная аморфная модулярная наноструктура $N_{0,0}^2$. Необходимо отметить, что частично разупорядоченные модулярные наноструктуры $R_{2,1}^2$, $R_{2,0}^2$, $R_{1,2}^2$, $R_{1,1}^2$, $R_{1,0}^2$, $R_{0,2}^2$ и $R_{0,1}^2$ с кристаллическим законом упорядочения модулей являются частным случаем соответствующих модулярных наноструктур вида $N_{p,or}^2$, в которых формально возможны и другие законы упорядочения, например, фрактальный.

Во втором случае – при вероятных обратимых фазовых превращениях поверхностных фаз – вновь образующиеся за счет состояния структурно-фазовой разупорядоченности фазы даже после перехода в исходное структурное состояние существенно

изменяют конфигурацию межфазных границ, что усиливает общее состояние фазовой разупорядоченности на поверхности композиционного материала [3, 37].

Комплексные структурные состояния

На основании представленных выше рассуждений можно предположить, что фазово-разупорядоченному состоянию формально соответствует определенное комплексное структурное состояние. Оно включает в себя, кроме очевидной кристаллической g компоненты, также наноразмерную n и фрактальную f . Множество вероятных структурных 1D состояний детерминистических модулярных структур композитов включает три основных состояния ($r_g \equiv g$, $n_n \equiv n$, $f_f \equiv f$) и три пары из сопряженных состояний (r_n и n_r , r_f и f_r , n_f и f_n). Возможные пространственные компоненты структурных состояний на поверхности и в объеме композитов проанализированы в работах [38–48]. Установлено, что 10 классов структурных состояний (gg , gn , gnn , nnn , gr , grf , grf , nnf , nff и gnf) содержат всего 165 вариантов реализации комбинаторно различных состояний в 3D пространстве.

Сформулированы принципы формирования возможных структурных состояний из фрактальных компонент с учетом полугрупповых свойств множества соответствующих 1D генераторов [49] и из наноразмерных компонент с учетом свойств множества соответствующих нанобъектов [50]. Проанализированы размерные характеристики возможных состояний многокомпонентных структур, включающих фрактальную и наноразмерную компоненты, и их влияние на свойства системы [51, 52].

Ранее были проанализированы характеристики вероятных детерминистических гибридных фрактальных структур с двумя и более точечными или линейными генераторами, в которых реализуется одно из состояний grf , nff или fff [53–60]. Значения локальной и лакунарной размерностей каждой фрактальной структуры могут быть использованы при определении квазиупорядоченных сайт-распределений определенных фаз по поверхности композиционных покрытий, сайз-распределений поверхностных фаз и конфигурационных характеристик межфазных границ [61–72]. На основе этого можно оценить поверхностную долю твердого смазочного компонента и рассчитать трибологические свойства покрытия в соответствии с синергической моделью [3, 37, 73, 74].

Выводы

Предложена концепция комплексных структурных состояний поверхности ком-

позиционного материала как формализованного представления вариантов реализации фазово-разупорядоченного состояния при трении и износе. Рассмотрены состояния фазовой, структурно-фазовой и структурной разупорядоченности – основные компоненты фазово-разупорядоченного состояния. Проанализированы взаимосвязи данных компонентов разупорядоченности с вариантами упорядоченности структурных элементов кристаллических структур и квазикристаллов, наноразмерных фрагментов и наноструктур, а также фрактальных структур. Фрактальные структуры могут рассматриваться как возможные аппроксиманты конфигураций межфазных границ и распределения кристаллических фаз и наноразмерных частиц на поверхности и в объеме антифрикционных композиционных материалов. В связи с этим комплексные структурные состояния поверхности композиционного материала включают кристаллическую, наноразмерную и фрактальную компоненты.

Список литературы

1. Иванов В.В. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. – Спецвыпуск. Проблемы трибозлектрохимии. – 2005. – С. 128–130.
2. Иванов В.В. Комбинаторное моделирование вероятных структур неорганических веществ. – Ростов н/Д: Изд-во СКНЦ ВШ, 2003. – 204 с.
3. 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.
4. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал = Research Journal of International Studies, 2013. – № 8–1. – С. 67–70.
5. 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.
6. Иванов В.В., Марченко С.И. // Научная мысль Кавказа. – Спецвыпуск, 2006. – С. 87–89.
7. Иванов В.В., Беспалова Ж.И., Смирницкая И.В. и др. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Естеств. науки. – 2008. – Спецвыпуск: Проблемы электрохимии и экологии – С. 52–56.
8. Иванов В.В., Щербаков И.Н., Иванов А.В., Марченко С.И. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. – 2008. – № 5. – С. 67–69.
9. Кукоз Ф.И., Иванов В.В., Балакай В.И., Христофорида М.П. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. – 2008. – № 4. – С. 123–128.
10. Иванов В.В., Арзуманова А.В., Балакай И.В., Балакай В.И. // Журн. прикладной химии, 2009. – Т. 82. – Вып. 5. – С. 797–802.
11. Иванов В.В., Щербаков И.Н. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. – 2010. – № 3. С. 73–77.
12. Беспалова Ж.И., Иванов В.В., Смирницкая И.В. и др. // Журн. прикладной химии, 2010. – Т. 83. – Вып. 2. – С. 244–248.
13. Беспалова Ж.И., Иванов В.В., Смирницкая И.В. и др. // Журн. прикладной химии, 2010. – Т. 83. – Вып. 5. – С. 779–782.
14. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал = Research Journal of International Studies, 2013. – № 8–1. – С. 70–71.
15. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал = Research Journal of International Studies, 2013. – № 8–1. – С. 72–73.

16. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал = Research Journal of International Studies, 2013. – № 8–1. – С. 73–74.
17. Иванов В.В., Колomoец А.М. // Изв. АН СССР. Неорган. материалы. – 1987. – Т. 23, № 3. – С. 501–505.
18. Иванов В.В., Колomoец А.М., Выборнов В.Ф., Швецов В.С. // Изв. АН СССР. Неорган. материалы. – 1988. – Т. 24, № 2. – С. 299–302.
19. Иванов В.В., Скалозубов Д.М. // Изв. АН СССР. Неорган. материалы. – 1989. – Т. 25, № 7. – С. 1205–1206.
20. Иванов В.В., Колomoец А.М., Швецов В.С. // Электрохимия. – 1990. – Т. 26, № 2. – С. 183–185.
21. Иванов В.В., Скалозубов Д.М. // Изв. АН СССР. Неорган. материалы, 1990. – Т. 26, № 7. – С. 1773–1775.
22. Иванов В.В., Швецов В.С. // Изв. АН СССР. Неорган. материалы, 1990. – Т. 26, № 8. – С. 1734–1736.
23. Иванов В.В., Скалозубов Д.М. // Ионные расплавы и твердые электролиты. Киев, 1990. – Вып. 5. – С. 85–87.
24. Иванов В.В., Скалозубов Д.М. // Изв. АН СССР. Неорган. материалы. – 1990. – Т. 26, № 11. – С. 2383–2388.
25. Иванов В.В., Скалозубов Д.М. // Изв. АН СССР. Неорган. материалы. – 1991. – Т. 27, № 12. – С. 2682–2684.
26. Иванов В.В. // Неорган. материалы. – 1992. – Т. 28, № 1. – С. 220–221.
27. Иванов В.В. // Неорган. материалы, 1992. – Т. 28, № 1. – С. 344–349.
28. Иванов В.В., Скалозубов Д.М. // Неорган. материалы. – 1992. – Т. 28, № 2. – С. 369–375.
29. Иванов В.В. // Неорган. материалы. – 1992. – Т. 28, № 3. – С. 665–667.
30. Иванов В.В. // Соврем. наукоемкие технологии. – 2013. – № 4. – С. 72–74.
31. Иванов В.В. // Соврем. наукоемкие технологии. – 2013. – № 4. – С. 75–77.
32. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания. – 2014. – № 7. – С. 93–95.
33. Иванов В.В., Башкиров О.М., Марченко С. И. и др. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. – Спецвыпуск. Композиционные материалы. – 2005. – С. 15–17.
34. Иванов В.В., Щербаков И.Н., Иванов А.В. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. – 2010. – № 1. – С. 84–87.
35. Иванов В.В., Попов С. В. // Междунар. науч.-иссл. журнал = Research Journal of International Studies, 2014. – № 1(20). – Часть 1. – С. 8–10.
36. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 5. – С. 146–149.
37. 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.
38. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал = Research Journal of International Studies, 2013. – № 7–1. – С. 26–28.
39. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 4. – С. 105–108.
40. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 7. – С. 126–128.
41. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 9. – С. 92–97.
42. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 12. – С. 79–84.
43. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 12. – С. 90–93.
44. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 12. – С. 84–90.
45. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 12(2). – С. 90–93.
46. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 12(2). – С. 94–97.
47. Дерлугян П.Д., Иванов В.В., Иванова И.В., Шишка В.Г. // Успехи соврем. естествознания, 2015. – № 1. – С. 13–15.
48. Дерлугян П.Д., Иванов В.В., Иванова И.В., Шишка В.Г. // Успехи соврем. естествознания, 2015. – № 1. – С. 16–18.
49. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 7. – С. 100–104.
50. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 7. – С. 96–99.
51. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 7. – С. 121–123.
52. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 7. – С. 124–125.
53. Дерлугян П.Д., Иванов В.В., Иванова И.В. и др. // Соврем. наукоемкие технологии. – 2013. – № 10. – С. 158–160.
54. Дерлугян П.Д., Иванов В.В., Иванова И.В. и др. // Соврем. наукоемкие технологии. – 2013. – № 10. – С. 161–163.
55. Иванов В.В. // Соврем. наукоемкие технологии. 2013. – № 5. – С. 29–31.
56. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2013. – № 8. – С. 136–137.
57. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2013. – № 8. – С. 134–135.
58. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2013. – № 8. – С. 129–130.
59. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2013. – № 11. – С. 61–65.
60. Иванов В.В. // Соврем. наукоемкие технологии. 2013. – № 9 – С. 89–93.
61. Дерлугян П.Д., Иванов В.В., Иванова И.В. и др. // Соврем. наукоемкие технологии. 2013. – № 9. – С. 86–88.
62. Иванов В.В. // Междунар. журнал прикладных и фундаментальных исследований, 2013. – № 10(3). – С. 493–494.
63. Иванов В.В. // Междунар. журнал прикладных и фундаментальных исследований, 2013. – № 10(3). – С. 493–494.
64. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал = Research Journal of International Studies, 2013. – № 7–1. – С. 35–37.
65. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал = Research Journal of International Studies, 2013. – № 7–1. – С. 28–30.
66. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал = Research Journal of International Studies, 2013. – № 7–1. – С. 31–33.
67. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал = Research Journal of International Studies, 2013. – № 7–1. – С. 30–31.
68. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал = Research Journal of International Studies, 2013. – № 7–1. – С. 33–35.
69. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал = Research Journal of International Studies, 2013. – № 8–1. – С. 25–27.
70. Иванов В.В. // Междунар. журнал прикладных и фундаментальных исследований, 2013. – № 10(3). – С. 493.
71. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 4. – С. 105–108.
72. Щербаков И.Н., Попов С. В., Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал = Research Journal of International Studies, 2014. – № 3(22). – Часть 2. – С. 22–23.
73. Ivanov V.V. // International journal of experimental education, 2014. – № 4. – Part 2. – С. 58–59.
74. Ivanov V.V. // International journal of experimental education, 2014. – № 4. – Part 2. – С. 59–60.