

УДК 501:548.1

ОПИСАНИЕ ВОЗМОЖНЫХ СТРУКТУРНЫХ СОСТОЯНИЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ И НАНОРАЗМЕРНЫХ ОБЪЕКТОВ И ВАРИАНТОВ ХАРАКТЕРА ИХ САЙТ- И САЙЗ-РАСПРЕДЕЛЕНИЙ НА ПОВЕРХНОСТИ КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА ИЛИ ПОКРЫТИЯ ПРИ ТРЕНИИ И ИЗНОСЕ

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

Предложены варианты описания возможных структурных состояний кристаллических и наноразмерных объектов и характера их сайт- и сайз-распределений на поверхности композиционного материала или покрытия при трении и износе. Рассмотрены основные компоненты описания состояний объектов и вероятные характеры их упорядоченности. Проанализированы взаимосвязи вероятных характеров упорядоченности/разупорядоченности кристаллических, наноразмерных объектов и фрактальных структур. Фрактальные структуры могут рассматриваться как возможные аппроксиманты конфигураций межфазных границ, сайт- и сайз-распределений объектов на поверхности и в объеме антифрикционных композиционных материалов. В связи с этим структурные состояния включают кристаллические, наноразмерные объекты и фрактальные законы их распределения. Многообразие различных вариантов структурных состояний определяется комбинаторным методом.

Ключевые слова: структурное состояние, композиционный материал, кристаллический объект, наноразмерный объект, фрактальная структура, фрактальный закон распределения

DESCRIPTION OF THE POSSIBLE STRUCTURAL STATES OF THE CRYSTAL AND NANO-DIMENSION OBJECTS AND VARIANTS OF ITS SITE- AND SIZE-DISTRIBUTIONS ONTO SURFACE AND INTO VOLUME OF THE COMPOSITIONAL MATERIALS OR COATINGS BY FRICTION AND WEAR

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

The description of the possible structural states of the crystal and nano-dimension objects and variants of its site – and size-distributions onto surface and into volume of the compositional materials or coatings by friction and wear were offered. The main components of description of the objects and the possible characters of its distributions were considered. The possible correlations of these ordering/disordering characters of the crystal, nano-dimension objects and fractal structures were analyzed. Fractal structures as a possible approximants of the inter-phase borders configurations, site – 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 structural states are included the crystal and nano-dimensional objects and fractal laws of its distributions. The multitude of different variants of these structural states may be determined by combinatorial method.

Keywords: structural state, compositional material, crystal object, nano-dimensional object, fractal structure, fractal laws of distribution

Комплексное структурное состояние поверхности композита при трении и износе полностью определяется фазово-разупорядоченным состоянием многофазного материала, включающим фазовую и структурно-фазовую разупорядоченности, а также структурную разупорядоченность в отдельных фазах [1–3].

Состояние фазовой разупорядоченности характеризуется самопроизвольным распределением при определенных термодинамических условиях элементов химической системы по двум и более фазам разного состава и структуры [2, 4–11]. Распределение каждой из фаз в материале (сайт-распределение) может быть любое: от упорядоченного до полностью разупорядоченного, а распределение микрочастиц фаз по размерам (сайз-распределения) – может иметь квазинепрерывный или дискретный

характер. При этом в объеме материала образуется 3D-сетка межфазных границ, конфигурация которой может быть аппроксимирована системой упорядоченных предфрактальных замкнутых поверхностей. Соответственно, системы квазипорядоченных замкнутых фрактальных кривых являются аппроксимантами для 2D-сетки межфазных границ. Следовательно, состояние фазовой разупорядоченности предопределяет квазифрактальный характер конфигураций межфазных границ, а также сайт- и сайз-распределений каждой из фаз на поверхности и в объеме материала [2, 3, 7–11].

Состояние структурно-фазовой разупорядоченности возникает и при достаточно интенсивных внешних воздействиях 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 обратимых фазовых переходов второго рода [2, 3, 12–15]. В первом случае наноразмерные частицы некоторых фаз (2D-наноструктуры N_m^2 и 1D-наноструктуры N_m^1) в продуктах износа могут принять участие в процессе трения и существенно повлиять на его характеристики (m означает число кристаллографических направлений, в которых упорядочены сферически симметричные элементы структур) [3, 5–9, 12–15]. Если структурные элементы наноразмерных частиц не обладают сферической симметрией, то образуются модулярные наноструктуры вида $N_{p,or}^2$. Во втором случае – образующиеся за счет обратимых переходов фазы существенно изменяют конфигурацию межфазных границ, что усиливает общее состояние фазовой разупорядоченности на поверхности композиционного материала [3, 15].

Состояние структурной разупорядоченности предполагает наличие в многоподрешеточных структурах определенных фаз разупорядоченности атомов по одной или нескольким подрешеткам данной структуры [2]. Наличие или отсутствие структурных каналов и распределенных в них мобильных ионов отличает динамическую структурную разупорядоченность в структурах деления от статической структурной разупорядоченности в структурах твердых растворов замещения или внедрения [16–24].

Если по крайней мере в одном кристаллографическом направлении в атомной трехмерной m -упорядоченной структуре R_m^3 наблюдается разупорядоченное расположение определенных структурных элементов, то имеем структуры $R_{2,2}^3$, $R_{1,1}^3$ и полностью разупорядоченную аморфную структуру R_0^3 . Для модулярных структур различают позиционную (p) и ориентационную (or) упорядоченности. Поэтому модулярные структуры вида $R_{p,or}^3$ могут быть частично разупорядоченными модулярными структурами $R_{3,2,2}^3$, $R_{3,1,1}^3$, $R_{3,0,0}^3$, $R_{2,2,2}^3$, $R_{2,2,1}^3$, $R_{2,0,0}^3$, $R_{1,3,0}^3$, $R_{1,2,0}^3$, $R_{1,1,1}^3$, $R_{1,0,0}^3$, $R_{0,3,0}^3$, $R_{0,2,0}^3$, $R_{0,1,0}^3$ или полностью разупорядоченной структурой $R_{0,0,0}^3$. Частично разупорядоченные модулярные наноструктуры $R_{p,or}^2$ с кристаллическим законом упорядочения модулей являются частным случаем соответствующих модулярных наноструктур вида $N_{p,or}^2$, в которых формально возможен и фрактальный закон упорядочения [25].

Концепция комплексных структурных состояний

На основании описанных выше возможных разновидностей фаз и вероятных

законов их распределения можно предположить, что фазово-разупорядоченному состоянию формально может соответствовать определенное комплексное структурное состояние. Оно должно включать в себя кроме очевидной кристаллической r компоненты также наноразмерную n и фрактальную f компоненты. В 1D-пространстве множество вероятных структурных состояний детерминистических модулярных структур композитов состоит из трех основных состояний (кристалл с атомной структурой $r_f \equiv r$, нанообъект $n_n \equiv n$, локальный фрактал $f_f \equiv f$) и трех пар сопряженных между собой состояний:

- кристалл из нанообъектов r_n и нанообъект с кристаллической структурой n_r ,
- кристалл из локальных фракталов r_f и фрактал с кристаллической структурой f_r ,
- нанообъект с фрактальной структурой n_f и фрактал из нанообъектов f_n .

Возможные пространственные компоненты структурных состояний на поверхности и в объеме композитов проанализированы в [26–36]. Установлено существование 10 разных классов структурных состояний: кристаллический rr , кристаллический наноразмерный rn , наноразмерный кристаллический nr , наноразмерный nn , кристаллический фрактальный rf , кристаллический фрактальный гибридный rff , фрактальный гибридный fn , наноразмерный фрактальный nf , наноразмерный фрактальный гибридный nff и кристаллический наноразмерный фрактальный rnf . Эти классы состояний 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 [37] и из наноразмерных компонент с учетом свойств множества соответствующих нанообъектов [38]. В работах [39, 40] проанализированы размерные характеристики возможных состояний многокомпонентных структур, включающих фрактальную и наноразмерную компоненты, и их влияние на свойства системы. Значения размерностей каждой фрактальной структуры могут быть использованы при определении квазиупорядоченных сайт-распределений определенных фаз по поверхности композиционных покрытий, сайз-распределений поверхностных фаз и характеристик конфигураций межфазных границ и расчета трибологических свойств поверхности покрытий в соответствии с синергической моделью [3, 15, 41–55].

Концепция структурных состояний кристаллических и наноразмерных объектов

Предположим, что любая из трех компонент (r , n и f) может быть включена в описание состояний реально существующих объектов (кристаллических фаз, нанообъектов), а также законов их сайт- и сайз-распределений на поверхности и в объеме композиционного материала или покрытия.

Для поверхности могут быть использованы основные 2D-состояния: rr – для кристаллических фаз, nn – для наноразмерных структур и ff – для законов распределения их межфазных границ. Тогда формальное описание конкретного структурного состояния поверхности будет выглядеть следующим образом: **(rr, nn, ff)**. Возможные варианты их реализации:

– для кристаллических фаз – rr , r_n , r_{n_n} , r_{r_r} , r_{r_r} , r_{n_r} , r_{r_n} , r_{o_r} , r_{r_o} , r_{o_r} , r_{o_o} ;

– для наноструктур – nn , n_n , n_{n_r} , n_{r_n} , n_{r_r} , n_{r_n} , nn_o , n_{n_o} , n_{r_o} , n_{o_n} , n_{o_n} ;

– для конфигурации межфазных границ – ff , f_n , f_{f_n} , f_{f_n} , f_{f_n} , f_{f_n} ;

где индексы r , n , f и o характеризуют кристаллический (периодический), наноразмерный, фрактальный и случайный (хаотический, только для фаз) законы распределения, соответственно. Всего $10 \times 10 \times 6 = 600$ комбинаторно различных вариантов описаний структурных состояний поверхности.

Для объема можно использовать 3D-состояния: rrr – для кристаллических фаз, nnn – для наноразмерных структур и fff – для законов распределения их межфазных границ. Формальное описание конкретного структурного состояния объема материала будет выглядеть следующим образом: **(rrr, nnn, fff)**. Возможные варианты их реализации для кристаллов, наноструктур и конфигураций межфазных границ определяются аналогично вариантам реализации на поверхности. Всего с учетом случайного варианта распределения фаз в одном, двух или трех независимых направлениях можно представить $20 \times 20 \times 10 = 4000$ комбинаторно различных вариантов описаний структурных состояний в объеме композиционного материала.

Отметим, что для квазифрактальных конфигураций межфазных границ вариант случайной их реализации не учитывается, т.к. их аппроксимантами являются детерминистические фрактальные R^3_{ff} – структуры, существующие в детерминированном предварительно структурированном 3D-пространстве, а также R^2_{ff} – структуры – в любом его 2D-подпространстве.

Выводы

Предложены варианты описания возможных структурных состояний кристаллических и наноразмерных объектов, а также характера их сайт- и сайз-распределений на поверхности композиционного материала или покрытия при трении и износе. Рассмотрены основные компоненты описания состояний объектов и вероятные характеры их упорядоченности. Проанализированы взаимосвязи вероятных характеров упорядоченности или разупорядоченности кристаллических, наноразмерных объектов и фрактальных структур. Фрактальные структуры можно рассматривать как аппроксиманты конфигураций межфазных границ, сайт- и сайз-распределений объектов на поверхности и в объеме антифрикционных композиционных материалов и покрытий. В связи с этим структурные состояния описывают кристаллические, наноразмерные объекты и фрактальные законы их распределения.

Список литературы

1. Беспалова Ж.И., Иванов В.В., Смирницкая И.В. и др. // Журн. прикладной химии, 2010. – Т. 83. – Вып. 5. – С. 779–782.
2. Дерлугян П.Д., Иванов В.В., Иванова И.В. и др. // Соврем. наукоемкие технологии. 2013. – № 10. – С. 158–160.
3. Дерлугян П.Д., Иванов В.В., Иванова И.В. и др. // Соврем. наукоемкие технологии. 2013. – № 10. – С. 161–163.
4. Дерлугян П.Д., Иванов В.В., Иванова И.В. и др. // Соврем. наукоемкие технологии. 2013. – № 9. – С. 86–88.
5. Дерлугян П.Д., Иванов В.В., Иванова И.В., Шишка В.Г. // Успехи соврем. естествознания, 2015. – № 1. – С. 13–15.
6. Дерлугян П.Д., Иванов В.В., Иванова И.В., Шишка В.Г. // Успехи соврем. естествознания, 2015. – № 1. – С. 16–18.
7. Иванов В.В. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. – Спецвыпуск. Проблемы трибозлектрохимии. – 2005. – С. 128–130.
8. Иванов В.В. Комбинаторное моделирование вероятных структур неорганических веществ. – Ростов н/Д: Изд-во СКНЦ ВШ, 2003. – 204 с.
9. 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.
10. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал = Research Journal of International Studies, 2013. – № 8-1. – С. 67–70.
11. Иванов В.В., Марченко С.И. // Научная мысль Кавказа. – Спецвыпуск, 2006. – С. 87–89.
12. Иванов В.В., Щербаков И.Н., Иванов А.В., Марченко С.И. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. – 2008. – № 5. – С. 67–69.
13. Иванов В.В., Арзуманова А.В., Балакай И.В., Балакай В.И. // Журн. прикладной химии, 2009. – Т. 82. – Вып. 5. – С. 797–802.
14. Иванов В.В., Щербаков И.Н. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. – 2010. – № 3. – С. 73–77.
15. Иванов В.В., Щербаков И.Н., Иванов А.В. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. – 2010. – № 1. – С. 84–87.
16. Иванов В.В., Попов С.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал = Research Journal of International Studies, 2014. № 1(20). – Часть 1. – С. 8–10.

17. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 5. – С. 146–149.
18. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал = Research Journal of International Studies, 2013. – № 8–1. – С. 70–71.
19. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал = Research Journal of International Studies, 2013. – № 8–1. – С. 72–73.
20. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал = Research Journal of International Studies, 2013. – № 8–1. – С. 73–74.
21. Иванов В.В., Коломеец А.М. // Изв. АН СССР. Неорган. материалы. – 1987. – Т. 23, № 3. – С. 501–505.
22. Иванов В.В. // Неорган. материалы. – 1992. Т. 28, – № 1. – С. 220–221.
23. Иванов В.В. // Неорган. Материалы. – 1992. Т. 28, – № 1. – С. 344–349.
24. Иванов В.В. // Неорган. материалы. – 1992. Т. 28, – № 3. – С. 665–667.
25. Иванов В.В. // Соврем. наукоемкие технологии. – 2013. – № 4. – С. 75–77.
26. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания. – 2014. – № 7. – С. 93–95.
27. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал = Research Journal of International Studies, 2013. – № 8–1. – С. 25–27.
28. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 4. – С. 105–108.
29. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 7. – С. 126–128.
30. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 9. – С. 92–97.
31. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 12. – С. 79–84.
32. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 12. – С. 90–93.
33. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 12. – С. 84–90.
34. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 12(2). – С. 90–93.
35. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 12(2). – С. 94–97.
36. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 7. – С. 100–104.
37. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 7. – С. 96–99.
38. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 7. – С. 121–123.
39. Иванов В.В. // Междунар. журнал прикладных и фундаментальных исследований, 2013. – № 10(3). – С. 493.
40. Иванов В.В. // Междунар. журнал прикладных и фундаментальных исследований, 2013. – № 10(3). – С. 493–494.
41. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал = Research Journal of International Studies, 2013. – № 7–1. – С. 35–37.
42. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал = Research Journal of International Studies, 2013. – № 7–1. – С. 28–30.
43. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал = Research Journal of International Studies, 2013. – № 7–1. – С. 31–33.
44. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал = Research Journal of International Studies, 2013. – № 7–1. – С. 30–31.
45. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал = Research Journal of International Studies, 2013. – № 7–1. – С. 33–35.
46. Иванов В.В. // Междунар. науч.-иссл. журнал = Research Journal of International Studies, 2013. – № 8–1. – С. 25–27.
47. Иванов В.В. // Междунар. журнал прикладных и фундаментальных исследований, 2013. № 10(3). – С. 493.
48. Иванов В.В. // Успехи соврем. естествознания, 2014. – № 4. – С. 105–108.
49. Кукоз Ф.И., Иванов В.В., Балакай В.И., Христофориди М.П. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. – 2008. – № 4. – С. 123–128.
50. Беспалова Ж.И., Иванов В.В., Смирницкая И.В. и др. // Журн. прикладной химии, 2010. – Т. 83. – Вып. 2. – С. 244–248.
51. 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.
52. Ivanov V.V. // International journal of experimental education, 2014. – № 4. – Part 2. – P. 58–59.
53. Ivanov V.V. // International journal of experimental education, 2014. – № 4. – Part 2. – P. 59–60.