CHEMICAL SCIENCES

УДК 548.1 «ГИПЕРПРОСТРАНСТВЕННОЕ» ПРЕДСТАВЛЕНИЕ СТРУКТУРНЫХ СОСТОЯНИЙ ПОВЕРХНОСТИ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ И ПОКРЫТИЙ

Иванов В.В.

Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) им.М.И. Платова, AO «ОКТБ «ОРИОН», Новочеркасск, e-mail:valivanov11@mail.ru

Обсуждаются возможности гиперпространственного представления структурных состояний поверхности [(r r), (n n), (f f)_{2D conf} (f f)*_{size}, ((r r)_f + (n n)_f)_{site}] композиционных материалов и покрытий для анализа величины эффективного размерного параметра, определяющего отклонение аддитивных поверхностных свойств материалов от соответствующих объемных свойств. Представление включает символьные описания структурных состояний кристаллической (r r) и наноразмерной ((n n) компонент, вероятных квазифрактальных конфигураций межфазных границ (f f)_{2D conf} квазифрактальных size-распределений (f r)_f + (n n)_f)_{size} и site-распределении ((r r)_f + (n n)_f)_{size} элементов на поверхности композита. Предполагается, что некоторые из проанализированных вариантов комплексных состояний могут быть результатом реализации определенного фазово-разупорядоченного состояния поверхности композиционных материалов и покрытий и использованы при оценке величины синергического эффекта проявления антифрикционных свойств компонентами компонентами композита при трении и износе.

Ключевые слова: структурные состояния поверхности, композиционные материалы и покрытия, кристаллическая и наноразмерная компоненты, квазифрактальные конфигурации межфазных границ, size- и site-распределения элементов, фазоворазупорядоченное состояние поверхности

«HYPERSPATIAL» REPRESENTATION OF THE SURFACE STRUCTURAL STATES OF A COMPOSITE MATERIALS AND COATINGS

Ivanov V.V.

Platov South-Russian state polytechnic university (NPI), J-SC «SDTU «ORION», Novocherkassk, e-mail: valivanov11@mail.ru

The possibilities of hyper-spatial representation to the surface structural states $[(r r), (n n), (f f)_{2p \text{ com}^p}$ (f f)*_{size}, $((r r)_r + (n n)_r)_{site}]$ of the composite materials and coatings for the analysis of the effective values of the dimension parameter which determines the deviation of additive material surface properties from its volume properties were discussed. This representation includes the symbolic descriptions of the structural states of the crystal (r r) and nanosized ((n n) components, probable the quazi-fractal configurations of inter-phase boundaries (f f)_{2pcon}, quazi-fractal size-distributions (f f)*_{size} and site-distributions ((r r)_r + (n n)_r)_{site} of the elements onto composite surface. It is expected that some of these analyzed variants of the complex structural states can be the result of a certain phase disordered state of the surface composite materials and coatings and were used in assessing the magnitude of synergy manifestations of anti-frictional properties by composite components under friction and wear.

Keywords: structural state of the surface, composite materials and coatings, crystal and nano-size components, quazi-fractal configurations of inter-phase boundaries, the site, and size elements distribution, phase disordered state of the surface

Возможности формирования структурированного пространства путем разбиения его на модулярные ячейки и моделирования невырожденных модулярных структур проанализированы в [9, 10]. Некоторые из этих структур с кристаллической, фрактальной и наноразмерной компонентами в 2D пространствах в [1 − 5, 7, 8, 11, 16] рассматривались как возможные абстракции сайз-распределения фаз и конфигурации межфазных границ на поверхности композиционных материалов. Сформулированы принципы их формирования, определены размерные характеристики возможных многокомпонентных структурных состояний систем [6, 12, 17]. В [7] для описания комплексного структурного состояния поверхности композиционного материала предложено учитывать состояния классов

(r r), (n n) и некоторые фрактальные компоненты класса (f f). Однако, при этом не учитывалось возможное влияние состояний внутренних слоев материала на комплексное состояние поверхности композита, в частности, на условный размерный параметр поверхности, что является целью данной работы. Для достижения этой цели необходимо решить следующие задачи:

1) описание всех структурных состояний поверхности, указанных в 10-мерном гиперпространственном представлении и определение размерного параметра <D> поверхности,

2) определение влияния дополнительных по отношению к поверхности возможных компонент объемных структурных состояний на размерный параметр <D> поверхности. Проанализируем некоторые особенности гиперпространственного представления структурных состояний поверхности материалов и методику определения размерного параметра для поверхности с учетом возможных состояний в объеме этого же материала.

Гиперпространственное представление поверхностных структурных состояний

В общем случае методика гиперпространственного представления возможных структурных состояний (10-мерной на поверхности [(r r), (n n), (f f)_{2D conf}, (f f)*_{size}, ((r r)_f + (n n)_f)_{site}] и 15-мерной в объеме материала [(r r r), (n n n), (f f f)_{3D conf}, (f f f)*_{size}, ((r r r)_f + (n n n)_f)_{site}] включает в себя следующие процедуры:

- описание структурных состояний из кристаллической ((r r) и (r r r)) и наноразмерной ((n n) и (n n n)) компонент композита,

– описание вероятных квазифрактальных конфигураций межфазных границ (f f)_{2Dconf} и (f f f)_{3Dconf} которые являются 2D и 3D оболочками системы элементов детерминистических модулярных структур с соответствующими фрактальными состояниями,

 – описание вероятных квазифрактальных 1D, 2D или 3D распределений элементов по позициям детерминистических модулярных структур (описания siteраспределений

$$(f f)_{site} = (f f)^*) \varkappa (f f f)_{site} = = (f f f)^*),$$

– описание вероятных квазифрактальных 1D, 2D или 3D распределений элементов r и n по размерам (описания sizeраспределений на поверхности (r r)_{f, size} и (n n)_{f, size} и в объеме композита (r r r)_{f, size} и (n n n)_{f, size}). Приведем пример выбора необходимых

Приведем пример выбора необходимых для анализа поверхности некоторого кристаллического наноразмерного квазифрактального объекта структурных состояний в виде 5х6–матрицы: Приведем более подробные описания указанных в матрице 2D состояний.

1. Класс кристаллический, подкласс Р состояния (r r):

(r r) – 2D кристалл из упорядоченных в слое цепочек асимметричных модулей,

(г г_n) – 2D кристалл из упорядоченных цепочек нанофрагментов и асимметричных модулей,

 $(r r_f) - 2D$ кристалл из упорядоченных цепочек локальных фракталов и асимметричных модулей,

 $(r_n r_n) - 2D$ кристалл из упорядоченных в слое цепочек нанофрагментов и цепочек модулей,

 $(r_n r_f) - 2D$ кристалл из упорядоченных цепочек локальных фракталов и нанофрагментов,

(r_f r_f) – 2D кристалл из упорядоченных в слое цепочек локальных фракталов.

2. Класс наноразмерный, подкласс N состояния (n n):

(n n) – 2D нанообъект из упорядоченных в слое цепочек наночастиц

 $(n n_r) - 2D$ нанообъект из упорядоченных цепочек нанофрагментов структуры и наночастиц,

(n n_f) – 2D нанообъект из упорядоченных цепочек нанофракталов и наночастиц,

 $(n_r n_r) - 2D$ нанообъект из упорядоченных в слое цепочек нанофрагментов структуры,

 $(n_{r} n_{f}) - 2D$ нанообъект из упорядоченных цепочек нанофрагментов структуры и нанофракталов,

 $(n_{f} n_{f}) - 2D$ нанообъект из упорядоченных в слое цепочек нанофракталов.

3. Класс фрактальный, подкласс F состояния (f f):

(f f) - 2D фрактальный объект из упорядоченных в слое асимметричных фракталов,

 $(f f_r) - 2D$ фрактальный объект из упорядоченных в слое цепочек фрактальных фрагментов и асимметричных фракталов,

$$\begin{vmatrix} (rr) \\ (nn) \\ (ff)_{2Dconf} \\ (ff)_{site} = (ff)^{*} \\ (rr)_{f}, (nn)_{f,size} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} (rr) & (rr_{f}) & (rr_{f}r_{f}) & (rr_{n}) & (r_{n}r_{n}) & (r_{n}r_{f}) \\ (nn) & (nn_{r}) & (n_{r}n_{r}) & (nn_{f}) & (n_{f}n_{f}) & (n_{r}n_{f}) \\ (ff) & (ff_{r}) & (f_{r}f_{r}) & (ff_{n}) & (f_{n}f_{n}) & (f_{r}f_{n}) \\ (ff) & (fr_{f}) & (r_{f}r_{f}) & (fn_{f}) & (n_{f}n_{f}) & (r_{f}n_{f}) \\ (rr_{f}) & (r_{f}r_{f}) & (r_{n}r_{f}) & (nn_{f}) & (n_{f}n_{f}) & (n_{r}n_{f}) \\ \end{vmatrix} .$$

$(f f_n) - 2D$ фрактальный объект из упорядоченных в слое цепочек наноструктурированных фракталов и асимметричных фракталов,

 $(f_r f_r) - 2D$ фрактальный объект из упорядоченных в слое цепочек фрактальных фрагментов,

 $(f_r f_n) - 2D$ фрактальный объект из упорядоченных в слое цепочек фрактальных фрагментов и наноструктурированных фракталов,

 $(f_n f_n) - 2D$ фрактальный объект из упорядоченных в слое цепочек наноструктурированных фракталов.

4. Класс сопряженный фрактальному, подкласс F* состояния (f f)*:

(f f) – 2D фрактальный объект из упорядоченных в слое асимметричных фракталов,

(f r_f) – 2D фрактальный объект из упорядоченных в слое цепочек локальных фракталов и асимметричных фракталов,

 $(f n_f) - 2D$ фрактальный объект из упорядоченных в слое цепочек нанофракталов и асимметричных фракталов,

 $(r_{f} r_{f}) - 2D$ фрактальный объект из упорядоченных в слое цепочек локальных фракталов.

 $(r_{f} n_{f}) - 2D$ фрактальный объект из упорядоченных в слое цепочек локальных фракталов и нанофракталов,

 $(n_f n_f) - 2D$ нанофрактальный объект из упорядоченных в слое цепочек нанофракталов.

5. Класс наноразмерный, подкласс N, только состояния (n n).:

 $(n n_f) - 2D$ нанообъект из наночастиц, упорядоченных в цепочке по фрактальному закону,

 $(n_r n_f) - 2D$ нанообъект из нанофрагментов структуры и наночастиц, упорядоченных в цепочке по фрактальному закону,

 $(n_{\rm f} n_{\rm f}) - 2D$ нанообъект из наночастиц, упорядоченных в слое по фрактальному закону,

6. Класс кристаллический, подкласс Р, только состояния (r r),

(r r_f) – 2D кристалл из асимметричных модулей, упорядоченных в цепочке по фрактальному закону,

 $(r_n r_f) - 2D$ кристалл из нанофрагментов и асимметричных модулей, упорядоченных в цепочке по фрактальному закону,

 $(r_{f}, r_{c}) - 2D$ кристалл из асимметричных модулей, упорядоченных в слое по фрактальному закону.

Дополнительными по отношению к поверхности возможными компонентами объемных структурных состояний могут быть следующие 1D объекты:

(r)		(r)	(r_{f})	(\mathbf{r}_{n})
(n)		(nn)	(n_{f})	(n)
$(f)_{1Dconf}$	=	(ff)	(f)	(f_n)
$(f)_{site} = (f)^*$		(ff)	(f)	(n_{f})
$(r)_{f},(n)_{f,size}$		(rr_{f})	(-)	(n_{f})

Приведем подробные описания указанных в матрице состояний 1D объектов с указанием их классовой принадлежности.

1. Класс кристаллический, подкласс Р состояния (r):

(r) – 1D кристалл из упорядоченных в цепочке асимметричных модулей,

(r_n) – 1D кристалл из упорядоченных в цепочке нанофрагментов,

(r_f) – 1D кристалл из упорядоченных в цепочке локальных фракталов.

2. Класс наноразмерный, подкласс N состояния (n):

(n) – 1D нанообъект из упорядоченных в цепочке наночастиц,

 $(n_r) - 1D$ нанообъект из упорядоченных в цепочке нанофрагментов структуры,

(n_f) – 1D нанообъект из упорядоченных в цепочке нанофракталов.

3. Класс фрактальный, подкласс F состояния (f):

(f) – 1D фрактальный объект из упорядоченных в цепочке асимметричных фракталов,

(f_r) – 1D фрактальный объект из упорядоченных в цепочке фрактальных фрагментов,

 $(f_n) - 1D$ фрактальный объект из упорядоченных в цепочке наноструктурированных фракталов.

4. Класс сопряженный фрактальному, подкласс F* состояния (f)*:

(f) – 1D фрактальный объект из упорядоченных в цепочке асимметричных фракталов,

(r_f) – 1D фрактальный объект из упорядоченных в цепочке локальных фракталов,

(n_f) – 1D фрактальный объект из упорядоченных в цепочке нанофракталов.

5. Класс наноразмерный, подкласс N, только состояния (n).:

(n_f) – 1D нанообъект из наночастиц, упорядоченных в цепочке по фрактальному закону.

6. Класс кристаллический, подкласс Р, только состояния (r).:

(r_f) – 1D кристалл из асимметричных модулей, упорядоченных в цепочке по фрактальному закону.

Формально учет этих дополнительных состояний для поверхности означает «гиперпространственную» поправку – учет влияния на размерный параметр <D> объемных характеристик структурного состояния материала или покрытия: 1.1.2.5

$$\begin{vmatrix} (\mathbf{rr}) \\ (\mathbf{nn}) \\ (\mathbf{ff})_{2\text{Dconf}} \\ (\mathbf{ff})_{\text{site}} = (\mathbf{ff})^* \\ (\mathbf{rr})_{f}, (\mathbf{nn})_{f,\text{size}} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} (\mathbf{r}) \\ (\mathbf{n}) \\ (\mathbf{f})_{1\text{Dconf}} \\ (\mathbf{f})_{1\text{Dconf}} \\ (\mathbf{f})_{1\text{Dconf}} \\ (\mathbf{f})_{1\text{Dconf}} \\ (\mathbf{ff})_{2\text{Dconf}} \\ (\mathbf{fff})_{3\text{Dconf}} \\ (\mathbf{fff})_{3\text{Dconf}} \\ (\mathbf{fff})_{1\text{Site}} = (\mathbf{fff})^* \\ (\mathbf{rrr})_{f}, (\mathbf{nn})_{f,\text{size}} \end{vmatrix} = \left(\begin{vmatrix} (\mathbf{rrr}) \\ (\mathbf{nnn}) \\ (\mathbf{fff})_{3\text{Dconf}} \\ (\mathbf{fff})_{1\text{Site}} \\ (\mathbf{rrr})_{f}, (\mathbf{nnn})_{f,\text{size}} \end{vmatrix}$$

Необходимые структурные состояния – компоненты состояний в 15-мерном представлении описания – могут быть перечислены:

. .

$$(\mathbf{r} \mathbf{r} \mathbf{r}) - (\mathbf{r} \mathbf{r} \mathbf{r}), (\mathbf{r} \mathbf{r} \mathbf{r}_{f}), (\mathbf{r}_{r} \mathbf{r}_{r}_{f}), (\mathbf{r}_{n} \mathbf{r}_{n} \mathbf{r}_{r}_{f}), (\mathbf{r} \mathbf{r} \mathbf{r}_{n}), (\mathbf{r}_{n} \mathbf{r}_{r}_{r} \mathbf{r}_{r}_{f}), (\mathbf{r} \mathbf{r}_{n} \mathbf{r}_{n}), (\mathbf{r}_{n} \mathbf{r}_{n} \mathbf{r}_{n}), (\mathbf{r}_{n} \mathbf{r}_{n} \mathbf{r}_{n}), (\mathbf{r}_{n} \mathbf{r}_{n} \mathbf{r}_{n}); (\mathbf{n} \mathbf{n} \mathbf{n}) - (\mathbf{n} \mathbf{n} \mathbf{n}), (\mathbf{n} \mathbf{n} \mathbf{n}_{r}), (\mathbf{n} \mathbf{r}_{n} \mathbf{n}_{n}), (\mathbf{n}_{n} \mathbf{n}_{n} \mathbf{n}_{r}), (\mathbf{n} \mathbf{n} \mathbf{n}_{r}), (\mathbf{n} \mathbf{n}_{n} \mathbf{n}_{r}), (\mathbf{n} \mathbf{n}_{r} \mathbf{n}_{r}), (\mathbf{n}_{r} \mathbf{n$$

Условный размерный параметр D_i для каждого i-го структурного 3D состояния может быть рассчитан по формуле $D_i = 0.5(d_r D(r) + d_f D(f) + d_n D(n))_i$, где d_r , d_f и d_n – количества соответствующих компонент одного сорта. Значения для кристаллической компоненты D(r) = 1, для фрактальной компоненты совпадают с фрактальной размерностью:

$$D(f) = DimR_{f} = Dim (GenR_{f}) < 1$$
,

для наноразмерной компоненты

$$D(n) = (/n_o) < 1,$$

если средний размер нанообъекта <n> меньше, чем n₀ = 100 нм [6].

Пример методики расчета размерного параметра <D>. Для предполагаемого структурного 2D состояния поверхности некоторого композиционного материала

$$[(\mathbf{r}_{n} \mathbf{r}_{f}), (\mathbf{n}_{n} \mathbf{n}_{f}), (\mathbf{f}_{r} \mathbf{f}_{n})_{2D \text{ conf}}, (\mathbf{r}_{f} \mathbf{n}_{f})_{\text{site}}, (\mathbf{r}_{n} \mathbf{r}_{f})_{f}, (\mathbf{n}_{n} \mathbf{n}_{f})_{f \text{ size}}]$$

и связанного с ним 3D состояния в объеме

$$[(r_n r_f r_n), (n_n n_f n_n), (f_r f_n f_n)_{3D \text{ conf}}, (r_f n_f n_f)_{\text{site}}, (r_n r_f r_f)_{f}, (n_n n_f n_f)_{f \text{ size}}]$$

имеем:

– среднее значение параметра для 2D состояния

$$_{2D} = (1/12)(6 D(r) + 10 + +(2/3) ,$$

- среднее значение параметра для 3D состояния

$$_{3D} = (1/12)(8 D(r) + 16 < D(n)) +$$

+12 $) = (2/3) + (4/3) < D(n)_1 +$
+ $.$

Тогда среднее значение параметра только для третьих координат 3D состояния

$$_{1D} = (1/12)(2 D(r) + 6 < D(n)) + 4 < D(f) > 1 = (1/6) + 0.5 < D(n)_2 + (1/3) < D(f)_3 >,$$

а среднее значение параметра для поверхности с учетом объемной поправки

$$< D_{\text{поверхности}} > = (2/3)(< D_{2D} + < D_{1D}).$$

Таким образом, в зависимости от возможного «продолжения» поверхности композиционного материала (кристалл, нанообъект, квазифрактал) в третьем («гиперпространственном») измерении эффективное значение размерного параметра $< D_{nobepxhoctu} >$ может отличаться от формального значения $< D >_{2D}$. Отметим, что результаты анализа возможных видов структурных состояний и оценка размерного параметра необходимы для учета его возможного влияния на некоторые аддитивные поверхностные свойства соответствующего композиционного материала. В частности, отклонение значения параметра для анализируемого многофазного объекта (за счет ультрадисперсного состояния и квазифрактальной конфигурации межфазных границ) от величины мерности пространства, в котором этот объект существует, может обусловить эффект синергизма свойств компонентов [10, 13 – 15, 18].

Выводы

Рассмотрены возможности гиперпространственного представления структурных состояний поверхности композиционных материалов и покрытий для анализа величины эффективного размерного параметра, определяющего отклонение аддитивных поверхностных свойств материалов от соответствующих его объемных свойств. Представление включает символьные описания структурных состояний кристаллической (r r) и наноразмерной ((n n) компонент, вероятных квазифрактальных конфигураций межфазных границ (f f)2Dconf, квазифрактальных size-распределений (f f)*size и siteраспределений ((r r)f + (n n)f)site элементов на поверхности композита. Установлено, что некоторые из проанализированных вариантов комплексных состояний могут быть результатом реализации определенного фазово-разупорядоченного состояния поверхности композиционных материалов и покрытий и использованы при оценке величины синергического эффекта проявления антифрикционных свойств компонентами композита при трении и износе.

Список литературы

 Дерлугян П.Д., Иванов В.В., Иванова И.В. и др. Фрактальные структуры 2D пространства как возможные аппроксиманты конфигураций межфазных границ и распределения фаз на поверхности антифрикционных композиционных покрытий // Соврем. наукоемкие технологии. – 2013.- №.9. – С.86–88.

2. Иванов В.В. Фрактальные структуры как возможные абстракции сайз-распределения фаз и конфигурации межфазных границ на поверхности антифрикционных композиционных покрытий // Междунар. журнал прикладных и фундаментальных исследований. – 2013. №10(3). – С.493–494.

3. Иванов В.В. Возможные пространственные компоненты структурных состояний поверхности композиционных материалов и покрытий// Успехи соврем. естествознания. – 2014. – №.7. – С.126–128.

4. Иванов В.В. Особенности организации и возможные состояния многокомпонентных структур, включающих кристаллическую компоненту // Успехи соврем. естествознания. – 2014. – №.7. – С.93–95.

 Иванов В.В. Комплексные компоненты состояний кристаллического фрактального наноразмерного класса детерминистических модулярных структур композитов // Успехи соврем. естествознания. – 2014. – №.12. – С.84–90.

6. Иванов В.В. Размерные характеристики возможных состояний многокомпонентных структур, включающих фрактальную и наноразмерную компоненту // Успехи соврем. естествознания. – 2014. – №.7. – С.121–123.

7. Иванов В.В. Возможные состояния модулярных структур кристаллических, наноразмерных и фрактальных объектов на поверхности антифрикционных композиционных покрытий // Соврем. наукоемкие технологии, 2015. – № 8. – С.24–27.

 Иванов В.В. Возможные состояния распределения модулярных структур кристаллических, наноразмерных и фрактальных объектов в объеме антифрикционных композиционных материалов // Соврем. наукоемкие технологии, 2015. – № 5. – С.16–19.

9. Иванов В.В., Таланов В.М. Разбиение и структурирование пространства, описание процесса формирования модульного кристалла // Успехи соврем. естествознания. – 2012. – №8. – С.75–77.

10. Иванов В.В., Таланов В.М. Разбиение структурированного 3D пространства на модулярные ячейки и моделирование невырожденных модулярных структур // Успехи соврем. естествознания. – 2012. – №10. – С.78–80.

11. Иванов В.В., Щербаков И.Н. Моделирование антифрикционных свойств композиционных покрытий с учетом вероятных конфигураций межфазных границ // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки. – 2011. – №3. – С.54–57.

12. Ivanov V.V. Possible states of the modular structures with nano-dimensional component into compositional coatings with anti-frictional properties // Eastern European Scientific Journal. -2016. -N.1 – pp. 192–195.

13. Ivanov V.V. "Concentration waves" model for the tribologic system CM1/LL,o/CM2 // International journal of experimental education. $-2014. - N_{\rm D} 4. -$ Part 2. -p.58-59.

14. Ivanov V.V. "Concentration waves" model for the tribologic system CM1/o/CM2 // International journal of experimental education. $-2014. - N_{\rm D} 4. -$ Part 2. -p.59-60.

15. Ivanov V.V. Analysis of synergic effect in compositional coatings with taking into consideration the solid component of the counter-body and the liquid lubricant // European Journal of Natural History. $-2015. - N \odot 3. - C.36-37.$

16. Ivanov V.V., Derlugian P.D., Ivanova I.V., et al. Fractal structures as a possible abstractions of the site and size-distributions of phases and a possible approximants of the interphase borders configurations onto surface of the composites // Eastern European Scientific Journal. -2016. -N.2 – pp. 203–206.

17. Ivanov V.V., Ivanova I.V. Structural states of the surface of compositional coatings with nano-dimensional and fractal components // Eastern European Scientific Journal. -2016. - N.1 - pp. 195-198.

18. Shcherbakov I.N., Ivanov V.V. Analysis of synergic effect in compositional Ni-P-coatings // European Journal of Natural History. -2015. $-N_{\odot} 3$. -C.48.