

УДК 548.1

ИНФОРМАЦИЯ И СТРУКТУРА: МОДУЛЯРНЫЙ ДИЗАЙН ДВУМЕРНЫХ НАНОСТРУКТУР И ФРАКТАЛЬНЫХ РЕШЕТОК

В. В. Иванов¹, В. М. Таланов¹, В. В. Гусаров^{2,3}

¹Южно-Российский государственный технический университет (Новочеркасский политехнический институт)

²Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет)

³Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе Российской академии наук
valtanov@mail.ru, victor.v.gusarov@gmail.com

PACS 81.05.Zx

Обсуждается принцип модулярного строения и предложена система структурных и генетических информационных кодов двумерных наноструктур. Сформулировано положение о связи информационных кодов и структур. Предложены эволюционные модели формирования двумерных наноструктур и фрактальных структур в двумерном пространстве. Проанализированы вероятные топологические взаимосвязи двумерных наноструктур. Показана возможность формирования фуллереноподобных наночастиц из некоторых сконструированных предфракталов путем их свертки на сферической поверхности.

Ключевые слова: информация, структурный код, генетический структурный код, фрактальные структуры, эволюционно-итерационная модель, двумерные наноструктуры.

1. Введение

Понятие информации определяется как «сведения об окружающем мире и протекающих в нем процессах» [1]. В химии информация выступает, отчасти, как знание о структуре вещества. При этом структура вещества в общем случае рассматривается как иерархически организованная [2]. Взаимодействие веществ может быть представлено в рамках «конфигурационного» языка, включающего программы формирования связей, приводящих к образованию более крупных агрегатов (программы комплементарности) [3, 4]. Комплементарность структурных единиц вещества закодирована содержащейся в них информацией (зарядом, полярностью, размерами, нуклеофильностью и т.д.). Следует отметить, что агрегирование структурных единиц в наносистемах происходит по особым программам [5]. Структура регистрирует информацию и выступает как память пути образования наноразмерного объекта. Рост структуры в общем случае происходит по ветвящимся путям в конфигурационном пространстве.

В данной работе в продолжение исследования [6] приведенные выше общие положения конкретизируются в предлагаемых эволюционных моделях формирования двумерных наноструктур и детерминистических фрактальных решеток с дробной размерностью. Следует отметить, что такие структуры, обладая рядом уникальных химических и физических свойств, представляют большой интерес для создания новых функциональных наноматериалов, в том числе, катализаторов, сорбентов и материалов для энергетики. В связи с этим исследования, ориентированные на разработку методов структурного и физико-химического конструирования подобных наноматериалов крайне актуальны.

2. Информационные коды наноструктур

В общем случае под информационным кодом кристаллической структуры можно понимать ее символьное описание, в котором содержится информация о геометрии и кристаллохимической топологии определенных модулей и законе их упаковки в трех кристаллографических независимых направлениях. Данная информация о кристаллической структуре, представленная в символьном виде, является необходимой и достаточной для получения ее графического изображения, а, следовательно, и для определения ее пространственной симметрии и последующей идентификации.

В случае полигонных или полиэдрических наноструктур символьное описание их с помощью информационных кодов может быть упрощено. Характер упаковки структурных модулей (полигонов или полиэдров) в двух кристаллографических независимых направлениях полностью определяется геометрией и кристаллохимической топологией полигонов. Поэтому в символьном описании полигонных наноструктур достаточно указать их вид и необходимые топологические характеристики структурного модуля. Таким образом, информационные коды наноструктур, полученные с помощью комбинаторного модулярного дизайна, в данной работе будут представлены трехпозиционной символьной записью вида: $N_{(\Sigma\{P\})(T)}$. В информационном коде на первой позиции (N) стоит символ, характеризующий разновидность наноструктуры, например: L (линейная), C (циклическая) или S (спиральная) — для одномерно-периодических наноструктур и их производных, P (плоская) или Ci (цилиндрическая) — для двумерных дважды периодических наноструктур и их производных. На второй позиции символами ($\Sigma\{P\}$) представлена информация о геометрии полигона $\{Pg\}$ или полиэдра $\{Ph\}$ (или, в общем случае, их комбинации), выполняющих в данной наноструктуре роль структурного модуля. Последняя позиция предоставлена для информации о топологии полигонов или полиэдров, образующих данную наноструктуру.

Приведем примеры информационных кодов некоторых тетрагонных наноструктур. Одномерно-периодическая наноструктура и ее производные с одинаковыми топологическими характеристиками тетрагонов: $L_{\{4\}(2(2)-2(1))}$ — линейная, $C_{6\{4\}(2(2)-2(1))}$ — циклическая шестизвенная, $S_{6\{4\}(2(2)-2(1))}$ — спиральная с шагом спирали из шести тетрагонов. Двумерная дважды периодическая плоская тетрагонная наноструктура и ее производные: $P_{\{4\}(4(3))}$, $P_{\{4\}(2(3)-2(2))}$ и $P_{\{4\}(4(2))}$ — плоские, основанные на сетке 4444 с разными топологическими характеристиками тетрагонов, Наноструктура с информационным кодом $Ci_{6\{4\}(4(4))}$ — цилиндрическая (нанотрубка), основанная на упаковке в направлении оси цилиндра шестизвенных циклических лент с кодом $C_{6\{4\}(4(2))}$.

Генетический код структуры может быть представлен в виде структурного кода, символьное описание которого дополнено информацией о происхождении и процессе формирования данной структуры из определенного модуля — генератора структуры — с описанием его локальной геометрии и топологии. Символьное описание генератора определяется характеристиками конкретной эволюционной модели формирования наноструктуры и должно кроме описания его геометрии и топологии включать описание закона эволюционного роста n -подструктур из подструктуры 1-го поколения (собственно генератора).

Как будет показано ниже, между структурным кодом и наноструктурой должно выполняться условие взаимно однозначного соответствия. В случае соотношения «генетический структурный код и структура» допускается гомеоморфизм, т.е. одна и та же наноструктура может быть сформирована не единственным способом.

3. Эволюционная модель формирования двумерных наноструктур

В качестве основы для получения локальной структуры может быть выбран один из типов универсальных оптимумов, в частности, полигоны или полиэдры. В их вершинах могут располагаться элементарные структурно-химические единицы [2]: атомы (ионы), электронейтральные или заряженные вакансии и атомные комплексы, в частности, молекулы. Процедура создания локальной структуры R_{loc} из этих универсальных оптимумов $\{P\}$ определяется законом $T_{im} : R_{loc} = L_{\{P\},im}(\{P\}_i, T_{im})$, а процедура размножения подобных локальных структур — эволюционным законом $T_k : R_{\{P\}im} = R_{loc}(T_k)$ [7]. В общем случае процесс получения совокупностей атомов, которые соответствуют образующимся структурам с дальним порядком, может быть записан следующим образом:

$$R = L_{\{P\},im}(\{P\}_i, (T_{im}, T_k)), \quad (1)$$

где: $\{P\} = \{Pg\}$ или $\{Ph\}$ — символ типа изогона — «ядра» локальной структуры: или полигон вида $\{n\}$ или полиэдр типа призмы $\{n44\}$; i — индекс ветвления «ядра», который определяется типом изогона и способом ветвления (посредством вершин i_v , ребер (сторон) i_r или граней i_g изогона); m [0, 1, 2, ...] — целочисленный индекс, характеризующий размерный параметр локальной структуры и численно равный количеству изогонов-«звеньев» между «ядрами» в ветви структуры, при этом относительное «межъядерное» расстояние в единицах размерного параметра изогона в направлении ветвления равно $(m+1)$; $k \leq i-1$ — индекс ветвления вторичных «ядер».

Цикл работы генератора (1) (одна генерация ветвлений «ядер») определяет параметр идентичности структуры дальнего порядка в направлении ветвления, а количество этих циклов — протяженность упорядоченной структуры. Тип промежуточных между «ядрами» изогонов-«звеньев» определяется типом «ядер», а индексы их ветвления считаются следующими: $i_v = i_r = i_g = 1$. Для «ядер» в виде полигонов $\{n\}$ имеем $v = r = n$, а возможные значения индексов ветвления $i_v = i_r \leq n$. Для полиэдров-«ядер» $\{n44\}$ в соответствии с формулой Эйлера имеем $n = g = r - v + 2$, а возможные значения индексов ветвления $i_v \leq (2 + r - n)$, $i_r \leq (n + v - 2)$ и $i_g \leq n$. В процессе размножения локальных структур R_{lok} допускается сращивание соседних ветвей структуры между собой за счет вторичных изогонов-«ядер», обуславливающее образование $R_{\{P\}im}$ -структур, элементы которых полностью или частично заполняют предоставленное им пространство. В случае ограничения роста ветвей другими ветвями этой же структуры образуются фрактальные структуры — кластеры или дендримеры [5].

Для полигонных и полиэдрических структур параметр ветвления «ядра» i (совместно с параметром $k = i-1$) определяет метрическую размерность структуры дальнего порядка $R_{\{P\}im}$ и форму ячейки. Параметр m определяет размеры этой ячейки в единицах размерного параметра «ядра» в направлении его ветвления. Для получения полигонных структур в качестве исходных элементов рассматривали только полигоны с $n = 3, 4, 6, 8$ и 12 , а для получения полиэдрических структур — полиэдры призматического вида $\{n44\}$. Закон генерирования структур с помощью этих элементов определим следующим образом:

$$R_{\{Pg\}nm} = L_{\{Pg\},nm}(\{Pg\}_n, (T_{nm}, T_{n-1})), \quad (2)$$

$$R_{\{Ph\}(n/2)m} = L_{\{Ph\},(n/2)m}(\{Ph\}_{n/2}, (T_{(n/2)m}, T_{(n/2)-1})) \quad (3)$$

В случае генерирования двумерных однослойных структур (2) (табл. 1) в качестве вершин элементов-полигонов можно рассматривать атомы. При генерировании двумерных двухслойных базовых структур (3) (табл. 2) в качестве геометрических центров элементов рассматриваются геометрические центры соответствующих полиэдров. Для всех вариантов

полученных совокупностей элементарных структурно-химических единиц в виде полигонных или полиэдрических слоев перфорированного и не перфорированного типа рассмотрено условие топологической идентичности вершин в кристаллохимическом смысле (табл. 1, 2).

ТАБЛИЦА 1. Двумерные однослойные базовые структуры (двумерные сетки по Шлефли) и соответствующие им варианты $R_{\{Pg\}im}$ -структур

Базовая структура	Характеристики полигона-«ядра»		Характеристика $R_{\{Pg\}im}$ -структуры	
	Символ	Симметрия	Обозначение структуры	Топология полигонов
333333	{3}	3m	$R_{\{3\}30}$	3(6)
			$R_{\{3\}31}$	3(5)
33336	{3}	3m	$R_{\{3\}32}$	3(4)
	$\{6\} \cup 6\{3\}$	6mm	$R_{\{6\} \cup 6\{3\}60}$	3(3), 6(1)
33344	$\{4\} \cup 2\{3\}$	mm2	$R_{\{4\} \cup 2\{3\}40}$	4(2), 3(3)
33434	$\{3\} \cup \{3\}$	mm2	$R_{\{3\} \cup \{3\}40}$	3(3)
444	{4}	4mm	$R_{\{4\}40}$	4(4)
			$R_{\{4\}41}$	4(3)
			$R_{\{4\}40}$	4(2)
3636	{3}	3m	$R_{\{3\}30}, R_{\{3\}31}$	3(2)
	{6}	6mm	$R_{\{6\}60}$	6(2)
	$\{6\} \cup 3\{3\}$	3m	$R_{\{6\} \cup 3\{3\}30}$	6(2), 3(2)
3464	$\{4\} \cup \{3\}$	m	$R_{\{4\} \cup \{3\}20}$	4(2), 3(1)
	$\{6\} \cup 3\{4\}$	3m	$R_{\{6\} \cup 3\{4\}30}$	6(1), 4(2)
666	{6}	6mm	$R_{\{6\}30}$	6(3)
488	{8}	8mm	$R_{\{8\}40}$	8(2)
	$\{8\} \cup \{4\}$	4mm	$R_{\{8\} \cup \{4\}40}$	8(2), 4(1)
46.12	$\{6\} \cup \{4\}$	m	$R_{\{6\} \cup \{4\}30}$	6(1), 4(1)
	$\{12\} \cup 3\{6\}$	3m	$R_{\{12\} \cup 3\{6\}30}$	12(1), 6(1)
	$\{12\} \cup 3\{4\}$	3m	$R_{\{12\} \cup 3\{4\}30}$	12(1), 4(1)
3.12.12	{12}	12mm	$R_{\{12\}60}$	12(2)
	$\{12\} \cup 3\{3\}$	3m	$R_{\{12\} \cup 3\{3\}30}$	12(2), 3(1)

4. Эволюционная модель формирования фрактальных решеток

Представителями фракталов с конечным ветвлением и определенной симметрией являются, в частности, детерминистические фрактальные решетки, построенные из затравки в виде определенного фрагмента двумерной решетки. Конструкция таких фрактальных решеток полностью описывается заданием геометрического генератора и итерационной процедуры. Бесконечное повторение итерации дает полную фрактальную решетку [8-10].

Геометрическим генератором фрактальных решеток может быть фрагмент двумерных дважды периодических полигонных $R_{\{Pg\}im}$ -структур, в частности, тетрагонных $R_{\{4\}im}$ -структур, соответствующих двумерной сетке 4444 или ее производным. Предполагается, что в вершинах тетрагона могут располагаться атомы, комплексные частицы, или определенные локальные совокупности атомов одного или нескольких сортов — молекулы, кластеры.

ТАБЛИЦА 2. Двумерные двухслойные базовые структуры (полиэдрические слои) и соответствующие им варианты $R_{\{Ph\}im}$ -структур

Комбинации полиэдров-изогонов	Характеристика полиэдра-«ядра»		Характеристика $R_{\{Ph\}im}$ -структуры	
	Символ	Симметрия	Обозначение структуры	Топология полиэдров
4{333} + 3{3333}	{333}	43m	$R_{\{333\}30}$	4(4)
	{3333}	m3m	$R_{\{3333\}60}, R_{\{3333\}30}$	6(3)
6{344}	{344}	3m	$R_{\{344\}30}$	6(6)
			$R_{\{344\}31}$	6(5)
4{344} + {644}	{344}	3m	$R_{\{344\}32}$	6(4)
	{644} \cup 6{344}	6/mmm	$R_{\{644\} \cup 6\{344\}60}$	6(3), 12(1)
3{344} + 2{444}	{444} \cup 2{344}	mmm	$R_{\{444\} \cup 2\{344\}40}$	8(2), 6(3)
3{344} + 2{444}	{344} \cup {344}	mmm	$R_{\{344\} \cup \{344\}40}$	6(3)
4{444}	{444}	m3m	$R_{\{444\}40}$	8(4)
			$R_{\{444\}41}$	8(3)
			$R_{\{444\}40}$	8(2)
2{344} + 2{644}	{344}	3m	$R_{\{344\}30}, R_{\{344\}31}$	6(2)
	{644}	6/mmm	$R_{\{644\}60}$	12(2)
	{644} \cup 3{344}	3m	$R_{\{644\} \cup 3\{344\}30}$	12(2), 6(2)
{344} + 2{444} + +{644}	{444} \cup {344}	mm2	$R_{\{444\} \cup \{344\}20}$	8(2), 6(1)
	{644} \cup 3{444}	3m	$R_{\{644\} \cup 3\{444\}30}$	12(1), 8(2)
3{644}	{644}	6/mmm	$R_{\{644\}30}$	12(3)
{444} + 2{844}	{844}	8/mmm	$R_{\{844\}40}$	16(2)
	{844} \cup {444}	mm2	$R_{\{844\} \cup \{444\}40}$	16(2), 8(1)
{444} + {644} + +{12.44}	{644} \cup {444}	mm2	$R_{\{644\} \cup \{444\}30}$	12(1), 8(1)
	{12.44} \cup 3{644}	3m	$R_{\{12.44\} \cup 3\{644\}30}$	24(1), 12(1)
	{12.44} \cup 3{444}	3m	$R_{\{12.44\} \cup 3\{444\}30}$	24(1), 8(1)
{344} + 2{12.44}	{12.44}	12/mmm	$R_{\{12.44\}60}$	24(2)
	{12.44} \cup 3{344}	3m	$R_{\{12.44\} \cup 3\{344\}30}$	24(2), 6(1)

Процедура формирования генератора G из квадратного фрагмента тетрагонной $R_{\{4\}im}$ -структуры определяется законом T_{ik} :

$$G = L_{N\{4\},i,k}(N\{4\}_I, T_{ik}), \quad (4)$$

а процедура получения самоподобных фрактальных решеточных n -структур — итерационным законом T_n :

$$F_{N\{4\}ik} = G(T_n) = L_{N\{4\},i,k}(N\{4\}_I, T_{ik}, T_n). \quad (5)$$

где N — количество тетрагонов {4} в квадратном фрагменте со стороной b ; I — характеристика «ядра» двумерной тетрагонной структуры, которая определяет способ его ветвления (посредством вершин i_v или сторон i_r тетрагона); $k = b^{-1}$ — коэффициент самоподобия генерируемой фрактальной $F_{N\{4\}ik}$ -структуры; n — целочисленный индекс, характеризующий количество применяемых итераций, где $n = 1$ соответствует генератору.

Фрактальная (хаусдорфова) размерность D решетки в соответствии с [8] может быть определена из соотношения $D = \ln N(\ln b)^{-1}$, где N — число тетрагонов в генераторе, b — сторона генератора (в относительных единицах). Тогда, если $(b^2 - N)$ — число лакун

в квадратном генераторе, то $D = \ln(b^2 - N)(\ln b)^{-1}$ — лакунарная размерность фрактальной решетки, характеризующая возможное дополнение данной фрактальной решетки до двумерной тетрагонной $R_{\{4\}im}$ -структуры. Это дополнение может образоваться в процессе формирования основной фрактальной $F_{N\{4\}ik}$ -структуры за счет «захвата» структурных элементов с определенным набором размерных характеристик и в этом случае также, по видимому, будет обладать фрактальными свойствами. В таблицах 3 и 4 приведены основные характеристики представителей двух групп фрактальных $F_{N\{4\},i,k}$ -структур.

ТАБЛИЦА 3. Характеристики некоторых фрактальных $F_{N\{4\},i,k}$ -структур, основанных на фрагментах тетрагонных $R_{\{4\}im}$ -структур

Характеристики генератора $G_{N\{4\},i,k}$					Размерность фрактальной структуры	
Информационный код генератора	Форма	Симметрия, G_0^2	N	$b^2 - N$	Локальная, $D_{BL} = D$	Лакунарная, D_G
$G_{3\{4\},2(r),1/2}$		m	3	1	1,585	0
$G_{2\{4\},1(r),1/2}$		2mm	2	2	1,000	1,000
$G_{12\{4\},2(r),1/4}$		m	12	4	1,792	1,000
$G_{8\{4\},1(v),1/4}$		2mm	8	8	1,500	1,500

5. Обсуждение результатов

5.1. Двумерные полигонные и полиэдрические наноструктуры

Динамика образования простых $R_{\{Pg\}im}$ -структур (т.е. из полигонов $\{3\}$, $\{4\}$ и $\{6\}$) и особенности их эволюции в процессе роста характеризуют их топологические характеристики. Фрагменты некоторых $R_{\{4\}im}$ -структур представлены на рис. 1. Очевидно, что только структуры с минимальными значениями параметра m состоят из полигонов с топологически идентичными вершинами.

Двумерные полигонные структуры получены данным методом из набора возможных $R_{\{Pg\}im}$ -структур при значениях индексов $i = n$ и $m = 0$ или 1 (см. табл. 1). Однако только часть структурных представителей этого набора соответствуют одиннадцати полигонным структурам с топологически идентичными вершинами полигонов (двумерным сеткам в обозначениях Шлефли). В частности, двумерным сеткам 33336, 488 и 666 соответствуют только структуры $R_{\{3\}32}$, $R_{\{8\}40}$ и $R_{\{6\}30}$ (рис.2). Кроме того, большинство гетерополигонных структур могут быть получены только в том случае, если в качестве «ядра» $R_{\{Pg\}im}$ -структуры выбраны объединения двух разных типов полигонов (см. табл. 1, структуры 2 — 4, 6, 7, 9–11) (рис. 3).

Отметим, что для большинства полигонных структур возможны два или более вариантов их образования. Данная многовариантность может быть обусловлена особенностями роста и эволюции структуры из заданного полигона или гетерополигонного модуля. Эти особенности являются результатом наличия как минимум двух типов ветвления «ядер»: ветвление с помощью вершин i_v или ветвление с помощью сторон i_r полигона (см. табл. 1),

ТАБЛИЦА 4. Характеристики некоторых фрактальных $F_{N\{4\},i,k}$ -структур, основанных на фрагментах тетрагонных $R_{\{4\}im}$ -структур

Характеристики генератора $G_{N\{4\},i,k}$					Размерность фрактальной структуры	
Информационный код	Форма	Симметрия, G^2_0	N	$b^2 - N$	Локальная, $D_{BL} = D$	Лакунарная, D_G
$G_{5\{4\},4(r),1/3}$		4mm	5	4	1,465	1,262
$G_{5\{4\},3(r),1/3}$		m	5	4	1,465	1,262
$G_{5\{4\},2(r),1/3}$						
$G_{5\{4\},4(v),1/3}$		4mm	5	4	1,465	1,262
$G_{5\{4\},2(v),1/3}$		m	5	4	1,465	1,262
$G_{5\{4\},1(v),1/3}$						
$G_{20\{4\},4(r),1/6}$		4mm	20	16	1,465	1,262
$G_{20\{4\},4(v),1/6}$						
$G_{20\{4\},4(r),1/6}$		4mm	20	12	1,548	1,431
$G_{20\{4\},4(v),1/6}$				52	1,114	1,770

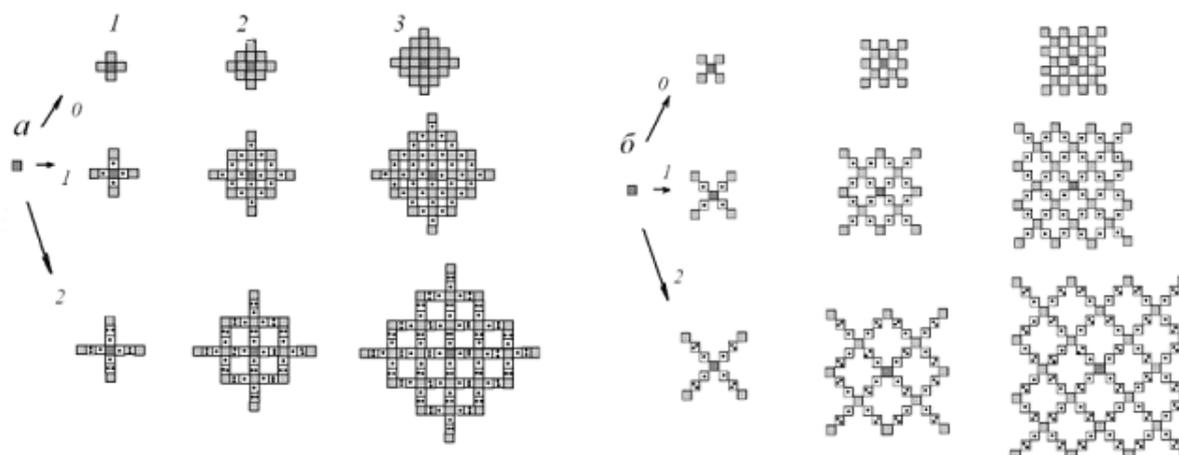


РИС. 1. Динамика роста тетрагонных $R_{\{4\}im}$ -структур, отличающихся количеством тетрагонов-«звеньев» ($m = 0, 1$ и 2) и способом ветвления тетрагонов-«ядер» (с помощью сторон $i_r = 4$ (а) или с помощью вершин $i_v = 4$ (б))

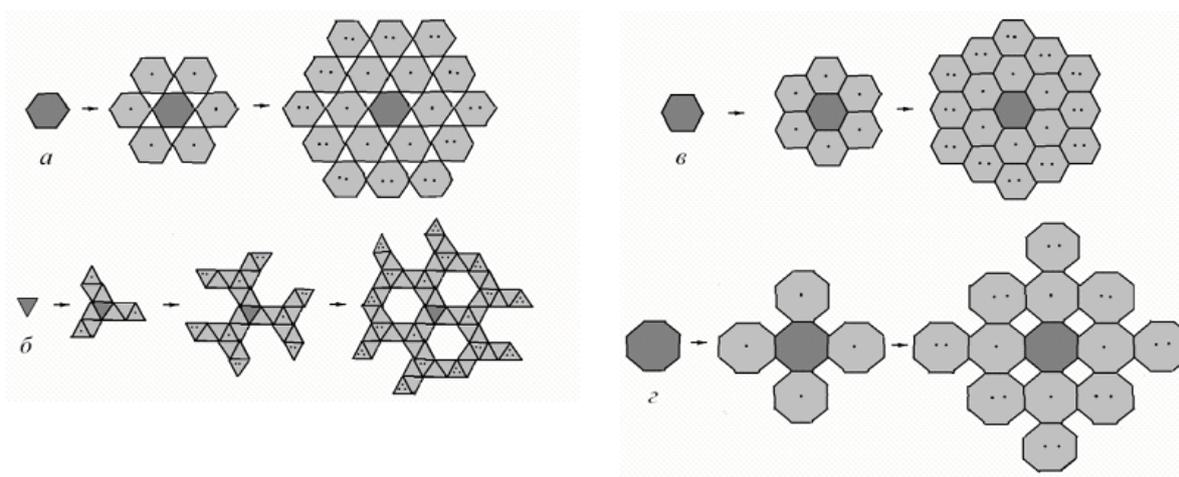


РИС. 2. Динамика роста $R_{\{Pg\}im}$ -структур, соответствующих сеткам 3636 (а), 33336 (б), 666 (в) и 488 (г)

а также многовариантностью ветвления вторичных «ядер» $R_{\{Pg\}im}$ -структур при пересечении в них соседних ветвей.

Полиэдрические слои, соответствующие двумерным двухслойным базовым структурам, получены из 11 двумерных полигонных структур. Все они могут быть представлены как результат размножения локальных $R_{\{Ph\}im}$ -структур, образованных из полиэдров призматического вида $\{n44\}$ или их возможных объединений (табл. 2), по аналогии с полигонными структурами (см. табл. 1). Исключение представляет октаэдрический слой, представленный из тетраэдров $\{333\}$, из октаэдров $\{3333\}$ или их возможного объединения ($4\{333\} \cup 3\{3333\}$) (см. табл. 2).

Таким образом, дизайн в соответствии с геометрико-топологическим способом вывода вероятных двумерных структур отражает рост и эволюцию структуры из заданного изогона-модуля (полигона или полиэдра). В зависимости от условий образования и размножения исходной локальной структуры, а также пересечения ближайших ветвей роста $R_{\{P\}im}$ -структуры, имеем более широкое многообразие соответствующих им вероятных

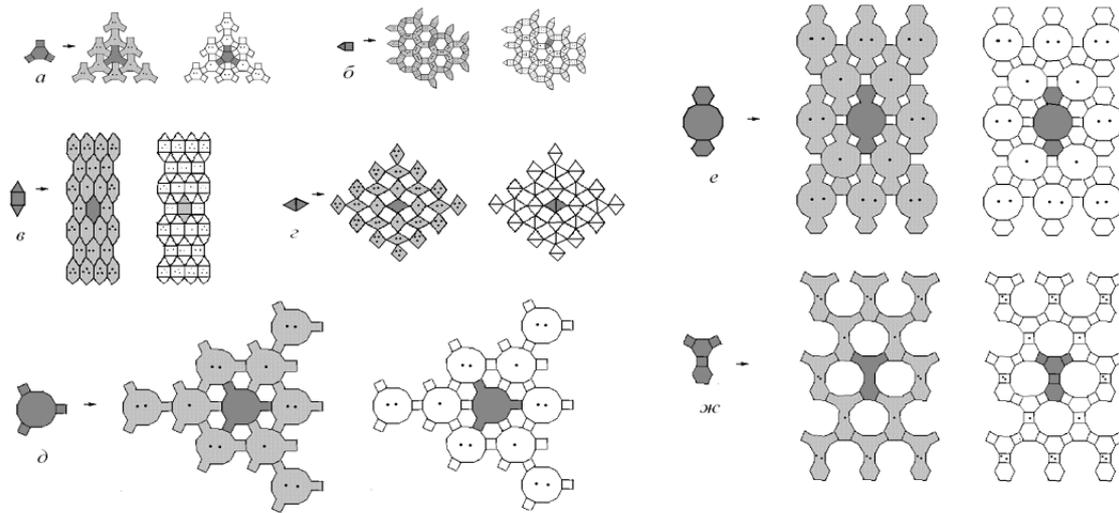


РИС. 3. Формирование из гетерополигональных «ядер» $R_{\{Pg\}im}$ -структур, соответствующих сеткам 3464 (а, б), 33344 (в), 33434 (г) и 468 (д, е, ж)

двумерных структур. При этом не все они являются структурами с топологически идентичными вершинами изогонов, а, следовательно, не все соответствуют двумерным базовым структурам, которые характеризуются кристаллографически эквивалентными позициями для элементарных структурно-химических единиц.

5.2. Детерминистические фрактальные решетки на квадратной сетке

Очевидно, в частности, что $F_{5\{4\},i,k}$ -структуры основаны на разных фрагментах тетрагональных $R_{\{4\}im}$ -структур, отличаются информационными кодами генераторов и их симметрией, однако по остальным характеристикам, в том числе и фрактальным размерностям, не идентифицируются. При этом также очевидно, что это существенно разные $F_{5\{4\},i,k}$ -структуры (рис. 4, 5). В определенной степени такой же вывод можно сделать и относительно $F_{20\{4\},i,k}$ -структур (рис. 6).

Различными являются и дополнения этих структур. Это становится очевидным после сравнительного анализа их лакунарных спектров на диаграммах вида $\lg N_{ln} - \lg D_{ln}^{отн}$, где N_{ln} — число лакун l -й группы с определенным относительным диаметром $D_{ln}^{отн}$ для предфрактала n -го поколения, $D_{ln}^{отн} = (S_{ln}^{отн})^{1/2}$ и в общем случае определяется из относительной площади лакун [8]. Все $F_{5\{4\},i,k}$ -структуры отличаются по своим лакунарным спектральным характеристикам, которые в определенном смысле можно считать диагностическими (рис. 7, б-г).

На диаграммах вида $(N/b^2) - D$ значения фрактальных размерностей анализируемых F -структур и известной структуры $F_{8\{4\},3(r),1/3}$, представляющей собой классический квадратный ковер Серпинского с $k = 1/3$ [9], находятся на одной прямой (рис. 8). Необходимо отметить, что эта прямая занимает промежуточное положение между двумя другими прямыми, которые аппроксимируют два множества значений для соответствующих n -х членов гомологических рядов ковров Серпинского: $F_{(6+2n)\{4\},I,(3(2+n))^{-1/2}}$ -структур и $F_{(4+4n)\{4\},I,1/(2+n)}$ -структур ($n = 1, 2, 3, \dots$) [8, 9].

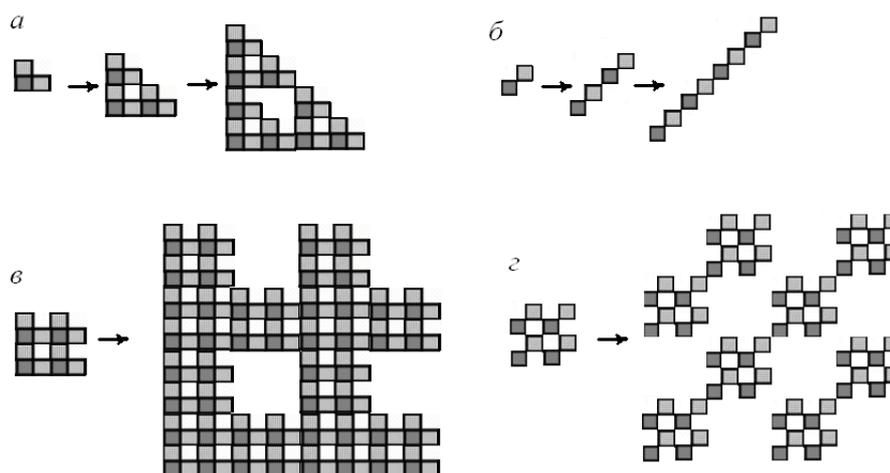


Рис. 4. Предфракталы второго и третьего поколения, полученные из генератора $L_{5\{4\},4(r),1/3}$ (а) и производного от него $L_{5\{4\},I,1/3}$ (б), а также детерминистические фрактальные решетки, полученные за один шаг итерационного построения из генераторов $L_{20\{4\},4(v),1/6}$ (в) и $L_{20\{4\},4(v),1/6}$ (г)

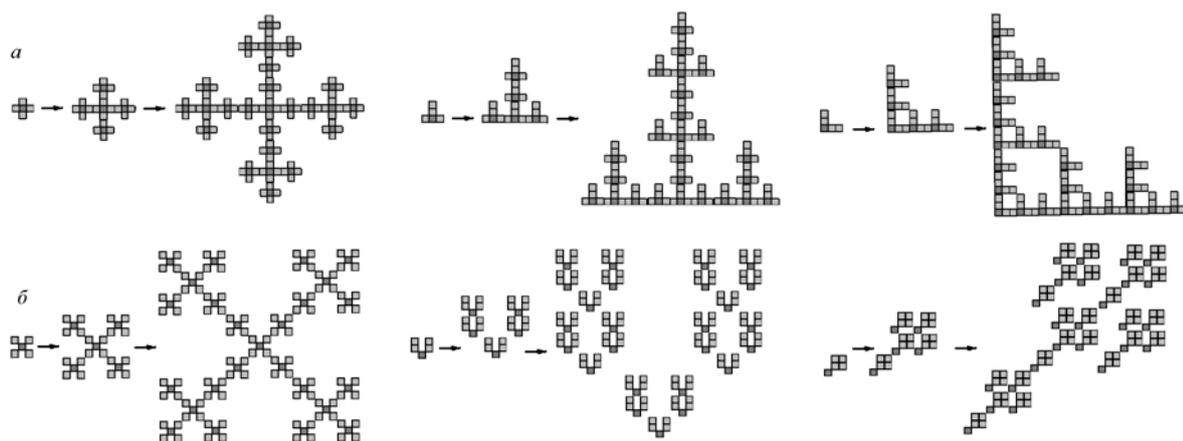


Рис. 5. Предфракталы второго и третьего поколения, полученные из генераторов $L_{5\{4\},4(r),1/3}$ (а), $L_{5\{4\},4(v),1/3}$ (известный как фрактал Вичека [1]) (б) и производных от них типа $L_{5\{4\},I,1/3}$

5.3. Гомологические соотношения и топологические преобразования двумерных наноструктур

Если в качестве вершин полигонов в некоторых полигонных сетках рассматривать не атомы, а более сложные структурно-химические единицы, в частности, совокупности атомов в виде полигонов с определенной пространственной ориентацией [2], то между этими сетками (исходной и преобразованной) имеем гомологическое соотношение. Из числа однослойных базовых наноструктур гомологическими преобразованиями связаны следующие пары:

$$4444 (\{4\}) \rightarrow 488; 333333 (\{6\}) \rightarrow 666; 666 (\{3\}) \rightarrow 312.12; 3636 (\{4\}) \rightarrow 612.$$

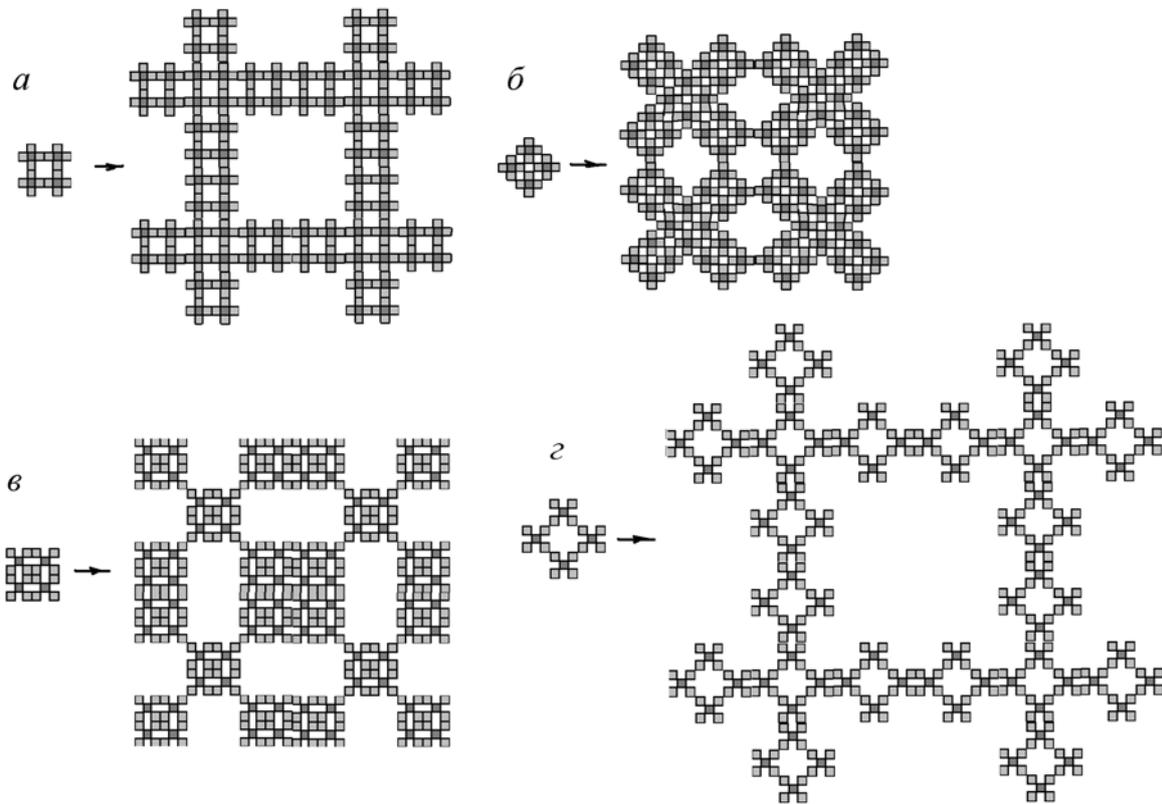


РИС. 6. Детерминистические фрактальные решетки с симметрией 4mm, полученные за один шаг итерационного построения из соответствующего генератора: $L_{20\{4\},4(r),1/6}$ (а), $L_{20\{4\},4(r),1/6}$ (б), $L_{20\{4\},4(v),1/6}$ (в) и $L_{20\{4\},4(v),1/6}$ (г)

Полигоны, которые использованы для получения соответствующего гомолога, выделены в скобках. Гомологическими преобразованиями связаны и соответствующие этим базовым наноструктурам $R_{\{Pg\}im}$ -структуры:

$$R_{\{4\}40} \rightarrow R_{\{8\}40}; R_{\{3\}30} \rightarrow R_{\{6\}30}; R_{\{6\}30} \rightarrow R_{\{12\}30}; R_{\{6\} \cup \{3\}30} \rightarrow R_{\{12\} \cup \{6\}30}.$$

Указанные выше переходы от одного гомолога к другому можно рассматривать как непрерывное (топологическое) преобразование, связанное с расщеплением узлов двумерных сеток на n узлов в виде вершин определенным образом пространственно ориентированных полигонов $\{n\}$. Непрерывное расширение площадей этих полигонов без изменения их ориентации при некоторых фиксированных размерах его сторон приводит к получению определенных последовательностей полигонных сеток:

$$\begin{aligned} 4444 (\{4\}) &\rightarrow 488 \rightarrow 4444 \rightarrow 488 \rightarrow 4444, \\ 333333 (\{6\}) &\rightarrow 666 \rightarrow 3636 \rightarrow 3.12.12 \rightarrow 666, \\ 666 (\{3\}) &\rightarrow 312.12 \rightarrow 3636 \rightarrow 666 \rightarrow 333333, \\ 3636 (\{4\}) &\rightarrow 4612 \rightarrow 3464 \rightarrow 666. \end{aligned}$$

Аналогичные гомологические соотношения имеются и между некоторыми полиэдрическими наноструктурами и соответствующими им $R_{\{Ph\}im}$ -структурами:

$$\begin{aligned} 4\{444\} (\{444\}) &\rightarrow (\{444\} + 2\{844\}), R_{\{444\}40} \rightarrow R_{\{844\}40}; \\ 6\{344\} (\{644\}) &\rightarrow 3\{644\}, R_{\{344\}30} \rightarrow R_{\{644\}30}; \\ 3\{644\} (\{344\}) &\rightarrow (\{344\} + 2\{12.44\}), R_{\{644\}30} \rightarrow R_{\{12.44\}30}; \\ (2\{344\} + 2\{644\}) (\{444\}) &\rightarrow (\{444\} + \{644\} + \{12.44\}), R_{\{644\} \cup \{344\}30} \rightarrow R_{\{12.44\} \cup \{644\}30}. \end{aligned}$$

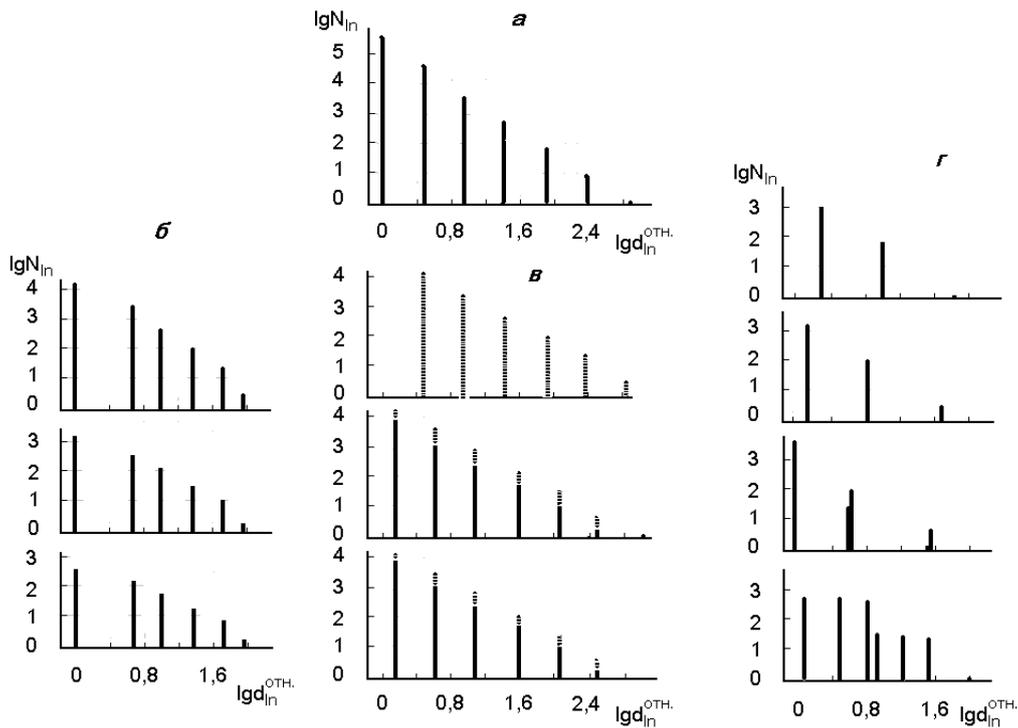


Рис. 7. Диаграммы вида $\lg N_{ln} - \lg D_{ln}^{OTH}$ и $(N/b^2) - D$ для $F_{5\{4\},i,1/3}$ -структур (б, в) и $F_{20\{4\},i,1/6}$ -структур (г) в сравнении с соответствующими характеристиками ковра Серпинского $F_{8\{4\},3(r),1/3}$ (а)

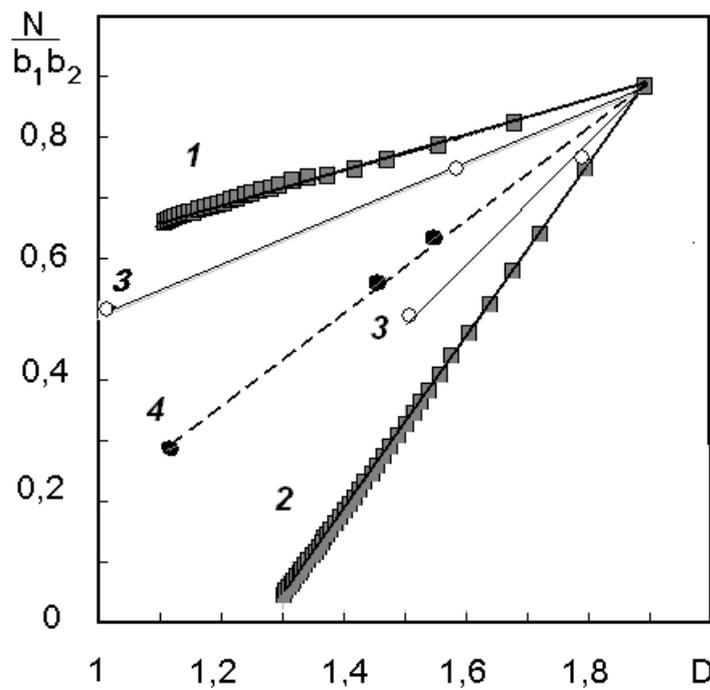


Рис. 8. Диаграмма вида $(N/b^2) - D$ для двух гомологических серий фрактальных структур $F_{(6+2n)\{4\},I,(3(2+n))}^{-1/2}$ (1), $F_{(4+4n)\{4\},I,1/(2+n)}$ (2) и для анализируемых детерминистических фрактальных решеток (3) и (4)

В данном случае для получения соответствующего гомолога полиэдры, указанные в скобках после каждой исходной комбинации, рассматриваются в базовой наноструктуре вместо ребер, перпендикулярных полиэдрическому слою.

Для полиэдрических наноструктур возможные топологические преобразования могут быть записаны следующим образом:

$$\begin{aligned} 4\{444\} (\{444\}) &\rightarrow (\{444\} + 2\{844\}) \rightarrow 4\{444\} \rightarrow (\{444\} + 2\{844\}) \rightarrow \{444\}, \\ 6\{344\} (\{644\}) &\rightarrow 3\{644\} \rightarrow (2\{344\} + 2\{644\}) \rightarrow (\{344\} + 2\{12.44\}) \rightarrow 644, \\ 3\{644\} (\{344\}) &\rightarrow (\{344\} + 2\{12.44\}) \rightarrow (2\{344\} + 2\{644\}) \rightarrow 3\{644\} \rightarrow \{344\}, \\ (2\{344\} + 2\{644\}) (\{444\}) &\rightarrow (\{444\} + \{644\} + \{12.44\}) \rightarrow (\{344\} + \{644\} + 2\{444\}) \rightarrow 3\{644\}. \end{aligned}$$

Топологические преобразования определяются известными соотношениями между полиэдрами-изогонами: куб $\{444\} \rightarrow$ усеченный куб $\{388\} \rightarrow$ кубооктаэдр $\{3434\} \rightarrow$ усеченный октаэдр $\{466\} \rightarrow$ октаэдр $\{3333\}$, а также тетраэдр $\{333\} \rightarrow$ усеченный тетраэдр $\{366\} \rightarrow$ октаэдр $\{3333\} \rightarrow$ усеченный дуальный тетраэдр $\{366\} \rightarrow$ дуальный тетраэдр $\{333\}$ [11].

6. Заключение

Основные результаты комбинаторного дизайна двумерных структур можно свести к следующим положениям.

1. С помощью метода модулярного дизайна получено многообразие двумерных полигонных структур.

2. Проведен анализ возможностей геометрико-топологического подхода к получению базовых структур. Установлено целенаправленное и алгоритмизированное формирование структур в априори структурированном (ячейстом) пространстве путем заполнения его в соответствии с определенными эволюционными правилами.

3. Предложена информационно-итеративная модель формирования детерминистических фрактальных решеток в двумерном пространстве с помощью генераторов $L_{N\{4\},i,k}$ в виде симметричного фрагмента тетрагонной $R_{\{4\}im}$ -структуры. Получены два множества $F_{N\{4\},i,k}$ -структур с коэффициентами самоподобия $k = 1/3$ и $1/6$.

4. Показано, что информационный код генератора в виде $L_{N\{4\},i,k}$ необходимо дополнить информацией о локальной симметрии (G_0^2) генератора и вероятном лакунарном спектре как индивидуальной характеристики фрактальной структуры $F_{N\{4\},i,k}$.

5. Детерминистические фрактальные решетки могут служить матрицами для формирования дискретных фрактальных структур, обладающих свойствами, подобными свойствам канторовых множеств. Показана возможность образования простейших фракталов $F_{5\{4\},i,1/3}$ 7-го поколения и $F_{20\{4\},i,1/6}$ 3-го поколения.

6. Между некоторыми двумерными базовыми наноструктурами и соответствующими им $R_{\{P\}im}$ -структурами установлены гомологические соотношения. Определены ряды двумерных базовых наноструктур, которые связаны друг с другом непрерывными топологическими преобразованиями.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Министерства образования и науки (Федеральная целевая программа «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2012 годы», ГК № 16.516.11.6073).

Литература

- [1] Словарь русского языка / Под редакцией А.П. Евгеньевой. — М.: Русский язык, 1981. — 674 с.
- [2] Гусаров В.В. Статика и динамика поликристаллических систем на основе тугоплавких оксидов // Автореф. дис. . . . докт. хим. наук, СПб., 1996. — 44 с.
- [3] Лен Ж.-М. Супрамолекулярная химия: концепции и перспективы. — Новосибирск: Наука, 1998. — 334 с.
- [4] Алесковский В.Б. Информация как фактор самоорганизации и организации вещества // Журнал общей химии. — 2002. — Т. 72, № 4. — С. 611–616.
- [5] Таланов В.М., Ерейская Г.П., Юзюк Ю.И. Введение в химию и физику наноструктур и наноструктурированных материалов. — М.: Изд-во «Академия естествознания», 2008. — 389 с.
- [6] Иванов В.В., Таланов В.М. Принцип модулярного строения наноструктур: информационные коды и комбинаторный дизайн // Наносистемы: физика, химия, математика. — 2010. — № 1. — С. 72–107.
- [7] Иванов В.В. Комбинаторное моделирование вероятных структур неорганических веществ. — Ростов-на-Дону: Изд-во СКНЦ ВШ, 2003. — 204 с.
- [8] Фракталы в физике / Под ред. Л. Пьетронеро и Э. Тозатти. — М.: Мир, 1988. — 420 с.
- [9] Федер Е. Фракталы. — М.: Мир, 1991. — 260 с.
- [10] Третьяков Ю.Д. Дендриты, фракталы и материалы // Соросовский образовательный журнал. — 1998. — № 11. — С. 96–102.
- [11] Урусов В.С. Теоретическая кристаллохимия. — М.: МГУ, 1987. — 276 с.