

УДК 539.2-022.532

В.А. Лиопо, С.И. Саросек, С.С. Секержицкий, А.В. Никитин

ФРАКТАЛЬНЫЕ СТРУКТУРЫ. МОДЕЛИ ШАРОВЫХ УПАКОВОК

Показано, что в рамках плотнейших упаковок построить объёмную структуру, включающую только тетраэдрические пустоты невозможно. Используя моделирование на основании атомных тетраэдров, можно построить линейчатые структуры висцерного типа, разветвления которых приводят к структурам типа фрактальных кластеров. Аналогичные системы могут быть построены на основе структурных атомных октаэдров.

Введение

Ричард Фейнман 23 декабря 1959 г. прочел в Калифорнийском университете свою знаменитую рождественскую лекцию «Внизу полным-полно места: приглашение в новый мир физики», в которой осветил два подхода создания наноматериалов: «сверху-вниз» и «снизу-вверх» [1]. Подход «сверху-вниз» заключается в том, что исходные тела измельчают до наночастиц. Этот способ реализован в различных технологических методах [1]. При подходе «снизу-вверх» наночастицы получают путем конденсации частиц из газовой или жидкой (растворы, расплавы) фаз. В результате образуются новые объекты с новыми свойствами, которые можно прогнозировать путем изменения условий формирования ансамблей. Оба эти подхода облегчают решение проблемы миниатюризации объектов [1].

Методом «снизу-вверх» можно создавать объекты, которые не существуют в природе, и создавать из них блоки наноматериалов. Для наноразмерных наночастиц справедливы принципы плотнейших упаковок [1].

Принципы плотнейших упаковок

Плотнейшие шаровые упаковки при сохранении решеточной симметрии могут существовать в двух вариантах. В первом случае плотноупакованные слои укладываются один на другой по типуABCABCABC....., при этом образуются гранецентрированная кубическая (ГЦК) решетка (рис. 1а). Во втором случае упаковка создана по типуABABAB.....и называется гексагональной плотной упаковкой (ГПУ). Данная упаковка показана на рисунке 1б. Кроме решеточных систем возможны образования структур смешаннослойного типа, например,ABCBCACAB.....[2;4;5].

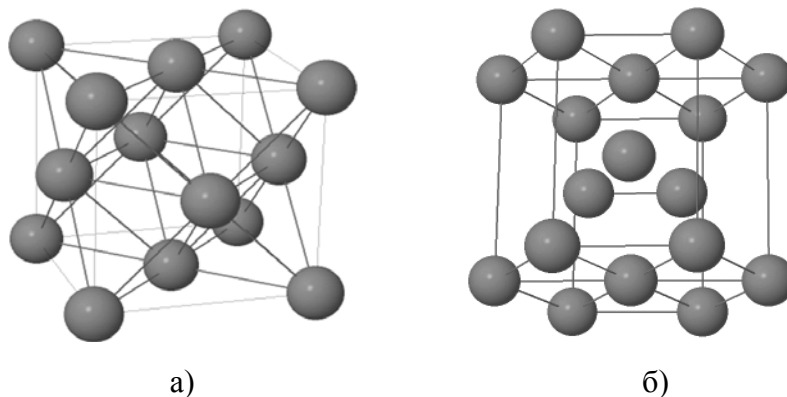


Рисунок 1 – Плотнейшие упаковки: ГЦК (а), ГПУ (б)

Во всех указанных случаях между шарами в упаковках имеются пустоты, координированные либо шестью шарами, либо четырьмя. В первом случае центры шаров, соединённые прямолинейными отрезками, формируют октаэдр, и пустота называется октаэдрической (рис. 2а), а во втором центры четырех шаров формируют тетраэдр, то есть пустота тетраэдрическая (рис 2б).

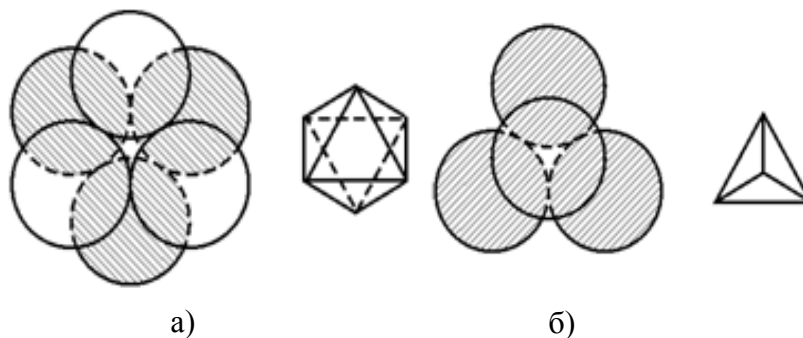


Рисунок 2 – Пустоты в плотнейших упаковках:
а) октаэдрическая, б) тетраэдрическая

На каждый атом шаровой упаковки приходится две тетраэдрические и одна октаэдрическая пустоты. В октаэдрическую пустоту, созданную шарами радиуса R , можно поместить, не искажая октаэдр, шар с радиусом $r_{\text{окт}} = R(\sqrt{2} - 1) \approx 0,41R$. В тетраэдрическую пустоту можно поместить шар с радиусом $r_{\text{тет}} = 0,5R(\sqrt{6} - 2) \approx 0,225R$. Естественно, что при такой упаковке шаров с разными размерами возникают пустоты меньшего размера. Для них можно подобрать шары, которыми эти новые пустоты будут заполнены, но при этом коэффициент компактности возрастает незначительно.

Если в плотнейших упаковках одинаковых шаров коэффициент компактности, определенный отношением объема шаров к общему объему системы, равен 0,74, то при заполнении всех тетраэдрических пустот коэффициент компактности принимает значение 0,76. При заполнении всех октаэдрических пустот коэффициент компактности – 0,79, если заполнены и тетраэдрические и октаэдрические пустоты то 0,81.

Так как тетраэдрическая пустота меньше, чем октаэдрическая, была предложена методика упаковки шаров по тетраэдрической схеме [2]. Тетраэдрическая конфигурация является плотнейшей упаковкой четырёх шаров в пространстве. Данная конфигурация показана на рисунке 3.

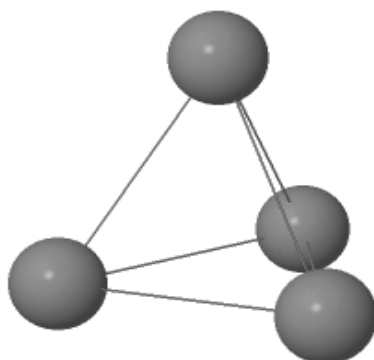


Рисунок 3 – Тетраэдрическая
конфигурация шаров

Однако плотно прилегающими друг к другу тетраэдрами нельзя заполнить всё пространство. Стратегия упаковки шаров в тетраэдрические комплекты до тех пор, пока это возможно, приводит к тому, что наступает ситуация, когда возникает такая конфигурация шаров, которая уже неспособна «поглотить» очередной шар без увеличения просвета между ними (рис. 4).

Такая упаковка шаров известна, как «жадный» алгоритм [3]. Таким образом, хотя «жадный» алгоритм и порождает оптимальную упаковку шаров в небольшой области, размеры которой не превосходят нескольких их диаметров, в конечном счете он приводит к коэффициенту компактности меньше, чем 0,74.

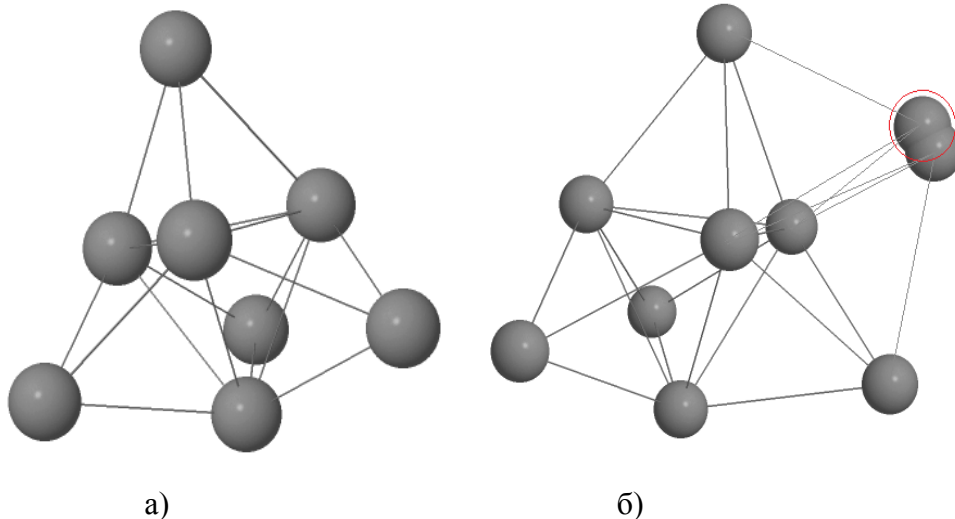
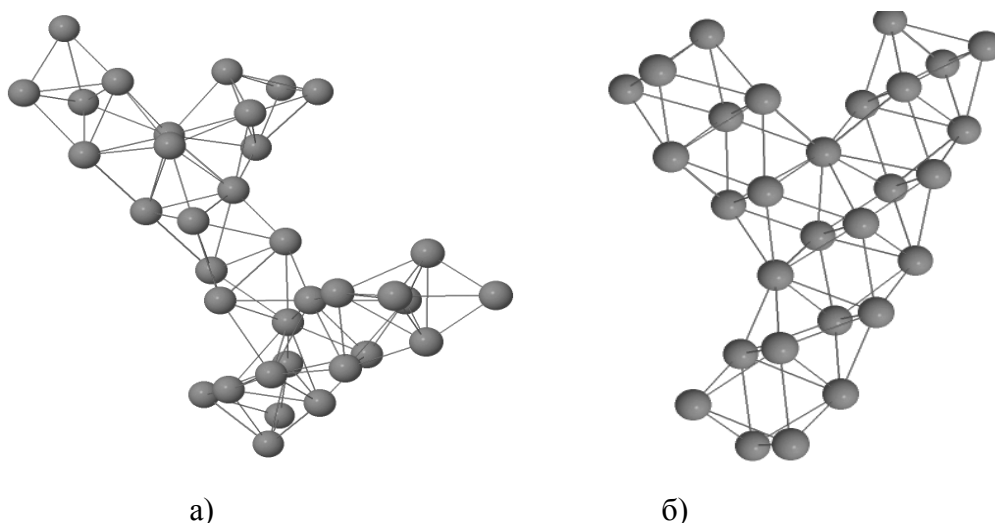


Рисунок 4 – Начальный а) и конечный этап б) «жадного» алгоритма

Получение фрактальных структур

Выполненные нами исследования показали, что «жадный» алгоритм может создавать линейные структуры висцерного типа. Причем эти структуры могут иметь ответвления, то есть создавать фрактальные кластеры. Если коэффициент компактности рассчитывается на отношение частей объёма всех шаров внутри тетраэдра к объёму этого тетраэдра, то он равен 0,776. Если этот коэффициент рассчитывается как отношение объёма всех шаров в тетраэдрической цепочке к минимальному объёму, в которой эту конструкцию можно поместить, то коэффициент компактности принимает значение 0,65.

Построить по тетраэдрическому мотиву сплошную конструкцию невозможно, но грани тетраэдров на начальной цепочке могут служить для создания ответвлений (рис. 5а). На каждом из этих ответвлений может возникнуть новая ветвь, то есть создастся конструкция фрактального кластера. Аналогично структуру можно получить при соединении структурных октаэдров их общей гранью. Цепочка таких октаэдров, как и цепочка тетраэдров, может иметь макроскопические размеры, то есть и в первом, и во втором случае возникают структуры типа вискеро́в. Как и для тетраэдрической конструкции, цепочки октаэдров могут создавать фрактальные кластеры, как это показано на рисунке 5б.



**Рисунок 5 – Построение фрактального кластера:
на основе тетраэдров а) и октаэдров б)**

Заключение

Проведённые исследования показали, что на основании атомных тетраэдров или на основании атомных октаэдров пространственные (объемные) структуры построить невозможно. Из этих отдельно взятых атомных структурных полиэдров образуются атомные конфигурации висцерного типа. Разветвления этих вискеро́в рассмотрены в обоих указанных случаях. При этом будут созданы структуры типа фрактальных кластеров. Подчеркивается, что коэффициент компактности шаровых упаковок для структурных полиэдров указанных типов, рассчитанный только с учетом частей шаров, входящих в полиэдр, некорректен. Определение величины коэффициента компактности должно учитывать минимальный объем, в котором могут размещаться рассматриваемые структуры.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Фейнман, Р.Ф. Внизу полным-полно места: приглашение в новый мир физики / Р.Ф. Фейнман // Рос. хим. журн. (Ж. Рос. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева). – 2002. – Т. XLVI, № 5.
2. Конвей, Дж. Упаковка шаров, решетки и группы : в 2-х т. Т. 1. Пер. с англ. / Дж. Конвей, Н. Слоэн. – М. : Мир, – 1990. – 415 с.
3. Слоэн, Н. Упаковка шаров / Н. Дж. А. Слоэн // В мире науки. Scientific American Издание на русском языке, март 1984. – № 3. – С. 72–82.
4. Лиопо, В.А. Характеристики координационных сфер упаковок / В.А. Лиопо [и др.] // Вестник БрГУ им. А.С. Пушкина. 2010. – С. 4. – № 2. – 2010. – С. 23–31.
5. Белов, Н.В. Очерки по структурной минералогии / Н.В. Белов. – М.: Недра. 1976. – 344 с.

V.A. Liopo, S.I. Sarosek, S.S. Sekerzhitsky, A.V. Nikitin. Fractal Structures. Model of Ball Packages

It is shown that within the close packing it is impossible to construct volumetric structure that includes only tetrahedral emptiness. Using the modeling on the basis of atomic tetrahedral we can construct line structures of whisker type, which branching leads to structures such as fractal clusters. Similar systems can be built based on the atomic structure octahedrons.

Рукапіс паступіў у рэдкалегію 15.06.2011 г.