КРИСТАЛЛОГРАФИЯ, 2013, том 58, № 3, с. 370–379

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

УДК 548.1

КОНСТРУИРОВАНИЕ ФРАКТАЛЬНЫХ НАНОСТРУКТУР НА ОСНОВЕ СЕТОК КЕПЛЕРА–ШУБНИКОВА

© 2013 г.
В. В. Иванов, В. М. Таланов

Южно-Российский государственный технический университет, Новочеркасск

E-mail: valtalanov@mail.ru

Поступила в редакцию 13.02.2012 г.

Предложена система информационных кодов для детерминистических фрактальных решеток и множеств мультифрактальных кривых. Методом итерационного модулярного дизайна получены серии детерминистических фрактальных решеток с генераторами в виде фрагментов 2*D*-структур и серии мультифрактальных кривых (на основе некоторых сеток Кеплера—Шубникова), обладающих свойствами канторова множества. Определены основные характеристики фрактальных структур и их лакунарные спектры. Сформулирован принцип иерархии модулей регулярных фрактальных структур.

DOI: 10.7868/S0023476113030077

ВВЕДЕНИЕ

Известно, что кристаллическая структура любого вещества может быть представлена в виде структурных фрагментов – модулей, определенным образом упорядоченных в 3*D*-пространстве [1–14]. Данное утверждение можно считать формулировкой *принципа модульного строения кристаллов*. Использование этого принципа лежит в основе большинства методов модульного дизайна структур кристаллов, наноструктур и наноструктурированных материалов [13–25].

Некоторые структуры имеют составной характер и слагаются из модулей – “кирпичиков” для более сложных фрагментов этих же структур, т.е. модулей другого, более высокого иерархического уровня [13, 14, 18–30]. В частности, в наноматериале B_6O строительным модулем является B_{12}-икосаэдр, а центры 12-ти изолированных и слегка деформированных икосаэдров, упакованных вокруг центрального икосаэдрического модуля, образуют кубооктаэдр {3434} [25]. В структуре ромбоэдрического β-бора вокруг центрального икосаэдрического кластера B_{12} расположены 12 других B_{12}-икосаэдров, центры которых образуют вершины суперикосаэдра {33333}. В структуре содалита $Na_4Al_3(SiO_4)_3Cl$ тетраэдрические структурные единицы TX_4 объединяются в супертетраэдроны состава $T_{10}X_{18}$, геометрические центры которых образуют усеченный октаэдр {466} [26]. В структуре $Cd_4In_{16}S_{33} \cdot (H_2O)_{20}(C_{10}H_{28}N_4)_{25}$ тетраэдрические структурные единицы TX_4 объединяются в более крупные супертетраэдроны состава $T_{20}X_{33}$ и образуют переплетающиеся кристобалитоподобные сетки с крупными порами [27]. На основании этих и других данных сформулирован *принцип структурной иерархии модулей* [29, 30].

Для модулярных структур, т.е. структур, состоящих из одинаковых ячеек – модулей, удовлетворяющих определенным топологическим условиям [31–35], отмеченные выше принципы в общем случае могут быть сформулированы следующим образом.

Принцип модулярного строения кристаллов: структура любого вещества может быть представлена из модулей с определенными топологическими характеристиками, позволяющими получить вполне определенное множество генетически связанных между собой модулярных структур, отличающихся от инициальной структуры позиционной и ориентационной упорядоченностью модулей в 3*D*-пространстве [34]. В соответствии с этим принципом разработан метод комбинаторного модулярного дизайна, реализованный на примере получения множества модулярных структур шпинелеподобных фаз [33–35].

Принцип иерархии модулей модулярных структур: модулярная структура вещества может быть представлена в виде множества определенных модулярных структур, модули которых принадлежат разным уровням структурной иерархии. В соответствии с этим принципом разработан метод итерационного модулярного дизайна 2*D*-наноструктур и фрактальных структур в топологическом 2*D*-пространстве [36–39].

В настоящей работе проанализирована возможность проведения итерационного модулярного дизайна на примере регулярных фрактальных структур [37, 39] и с учетом принципа структурной иерархии модулей предложено уточнение модели формирования детерминистических фрактальных решеток и упорядоченных в 2*D*-пространстве мультимножеств замкнутых фрактальных кривых.

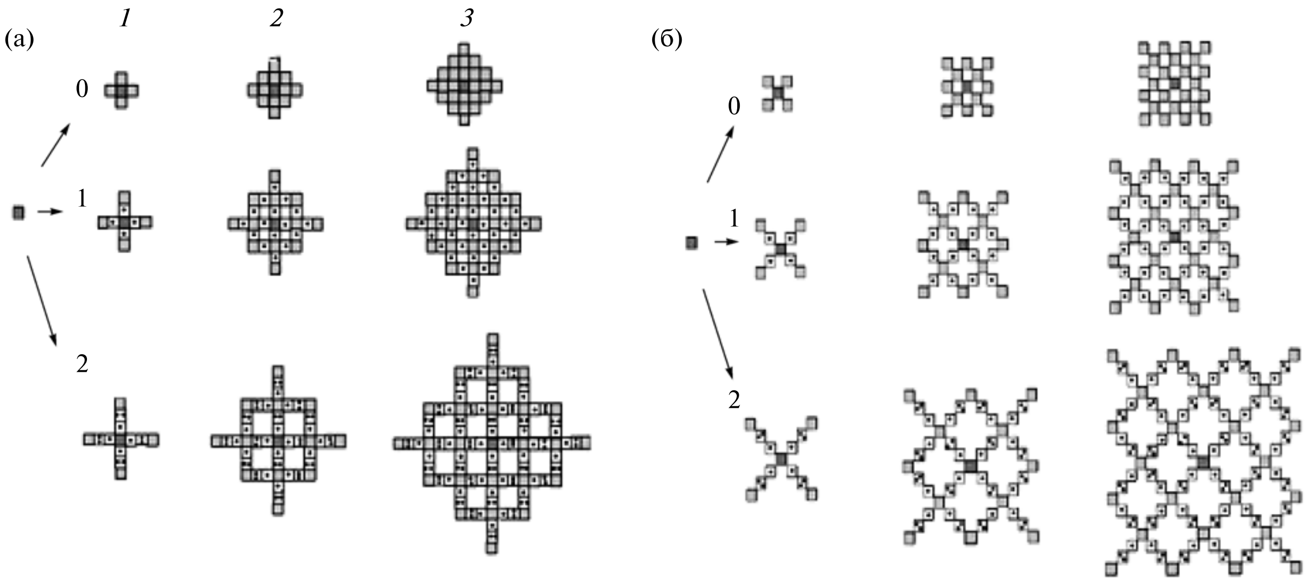


Рис. 1. Динамика роста иерархических тетрагонных $R_{\{4\}im}$-структур, различающихся количеством {4}-гонов-"звеньев" (m = 0, 1 и 2) и способом ветвления {4}-гонов-"ядер" (с помощью сторон $i_r = 4$ (а) или с помощью вершин $i_V = 4$ (б)) [39].

ПРИНЦИПЫ МОДУЛЯРНОГО СТРОЕНИЯ РЕГУЛЯРНЫХ ФРАКТАЛЬНЫХ СТРУКТУР

Представителями фракталов с конечным ветвлением и определенной симметрией являются, в частности, детерминистические фрактальные структуры, построенные из затравки в виде определенного фрагмента 2D-структуры. Конструкция таких фрактальных структур полностью описывается заданием геометрического генератора и итерационной процедуры. Бесконечное повторение процедуры итерации дает полную фрактальную структуру [40, 41].

Геометрическим генератором фрактальных структур может быть фрагмент 2D дважды периодических полигонных $R_{\{Pg\}im}$-структур, в частности тетрагонных $R_{\{4\}im}$-структур, соответствующих 2D-сетке 4444 или ее производным [36, 38, 39]. Динамика образования простых $R_{\{Pg\}im}$-структур из полигонов {4} и особенности их эволюции в процессе роста описывают их топологические характеристики. Фрагменты некоторых $R_{\{4\}im}$-структур представлены на рис. 1. Только структуры с минимальными значениями параметра m состоят из полигонов с топологически идентичными вершинами. Предполагается, что в вершинах {4}-гона могут располагаться атомы, комплексные частицы, или определенные локальные совокупности атомов одного или нескольких сортов — молекулы, кластеры.

Известны фрактальные кривые, которые могут быть получены методом итераций, заданных соответствующим генератором, и в бесконечном их повторении имеют бесконечную длину и полностью заполняют 2D-пространство (кривая Гилберта, кривая дракона, кривая Пеано и др.) [42—48]. Наряду с ними известны также замкнутые фрактальные кривые, полученные аналогичным итерационным методом, длина которых при бесконечном выполнении итерационного закона также становится бесконечной, а их площадь изменяется, но принимает определенное конечное значение (например, снежинка Коха, построенная на треугольнике) [42—44, 46, 48].

Главной особенностью фрактальных структур является их иерархическая организованность в соответствующем метрическом пространстве. Свойство бесконечного самоподобия означает точную масштабную инвариантность геометрически регулярной фрактальной структуры относительно набора последовательных операций отображений подобия методом итераций.

Формально в рамках итерационного метода существуют два принципиально разных подхода к формированию регулярной фрактальной структуры F: инъективный и сюръективный [49—51]. В рамках инъективного подхода предполагается вложение образа сжатой структуры ImF_i в подобный элемент структуры F_i. В результате бесконечной итерационной процедуры образы ImF_i компактной фрактальной структуры $F^{(2)}$ становятся точками. В рамках сюръективного подхода предполагается такое расширение генератора, при котором возможно вложение его прообраза G_i в структурный элемент подобного ему образа ImG_i. В результате бесконечной итерационной процедуры полный образ ImG_i бесконечно размерной фрактальной структуры $F^{(2)}$ содержит упорядоченные в $2D$-пространстве структурные элементы в форме генератора G. Отметим, что в обоих подходах при конечном числе итераций формируются предфракталы (компактные или конечноразмерные соответственно), состоящие из самоподобных модулей. Однако только при сюръективном подходе к формированию предфракталов процесс их образования подобен росту поверхностных фрактальных структур из одинаковых модулей, размеры которых коррелируют с размерами молекул, атомных кластеров, наночастиц и других атомных ассоциатов.

Замкнутые фрактальные кривые задаются на прямолинейном отрезке, в частности на стороне $\{n\}$-гона генератором в виде ломаной кривой с определенным коэффициентом самоподобия. При последовательном инъективном отображении ее образов в отрезки-прообразы на периметре образуется замкнутая предфрактальная кривая. Если в качестве инициального множества рассматривать некоторые $2D$-сетки Кеплера–Шубникова [52], узлы которых удовлетворяют условию топологической эквивалентности окружения $\{n\}$-телами и лакунами, то получим соответствующее упорядоченное в $2D$-пространстве множество фрактальных кривых $\{F^{(1)}\}$. Их пересечения образуют множество упорядоченных в $2D$-пространстве точек, в общем случае изоморфное множеству узлов инициальной $2D$-сетки. Множество $\{F^{(1)}\}$ можно одновременно рассматривать в качестве квазифрактальной границы как растущей поверхностной фазы, так и остального, лакунарного пространства, которое является дополнением до $2D$-пространства. В некоторых случаях лакунарные кривые распадаются на множества самоподобных фрактальных кривых, обладающие свойствами канторова множества [49, 50].

Результаты предварительного анализа особенностей модулярного строения регулярных фрактальных структур [40–48] позволяют сформулировать следующие принципы.

Принцип модулярного строения регулярных фрактальных структур: любая регулярная фрактальная структура может быть представлена из одинаковых минимальных модулей, строение и форма которых содержат структурную информацию как о самой фрактальной структуре, так и о любом ее предфрактале. Такие модули выполнят функцию генератора $G \equiv F_1$ модулярной фрактальной структуры и, в частности, любого ее предфрактала n-го поколения: $F_n(F_1)$, где n – количество итераций.

Принцип иерархии модулей регулярных фрактальных структур: самоподобная (регулярная) фрактальная структура может быть представлена как модулярная из любых ее предфракталов. В частности, модулярное строение каждого предфрактала n-го поколения F_n может быть представлено модулями – предфракталами предыдущих поколений: $F_n(F_{n-1}(F_{n-2}(F_{n-3} \ldots (F_1)\ldots)))$, а сами модули классифицируются по сложности в иерархической последовательности

$$F_n \subset F_{n-1} \subset F_{n-2} \subset F_{n-3} \subset \ldots \subset F_1.$$

Сформулированные принципы положены в основу эволюционной модели формирования детерминистических фрактальных структур с дробной размерностью и упорядоченных в $2D$-пространстве мультимножеств замкнутых фрактальных кривых. Отметим, что лакунарные спектры фракталов и мультифракталов могут представлять интерес в связи с определением вероятных распределений по размерам микро- и наночастиц, захваченных в процессе роста основной поверхностной фазы.

ДЕТЕРМИНИСТИЧЕСКИЕ ФРАКТАЛЬНЫЕ РЕШЕТКИ

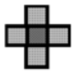
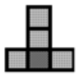
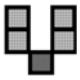
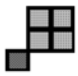
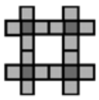
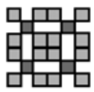
Эволюционная модель формирования детерминистических фрактальных решеток. Процедура формирования генератора G из квадратного фрагмента тетрагонной $R_{\{4\}im}$-структуры определяется законом транскрипции T_{ik}: $G = L_{N\{4\},\, i,\, k}\,(N\{4\}_I, T_{ik})$, а процедура получения самоподобных фрактальных решеточных n-структур (предфракталов) – итерационным законом T_n:

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

где N – количество тетрагонов {4} в квадратном фрагменте пространства со стороной b; I – характеристика "ядра" двумерной тетрагонной структуры, которая определяла 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 [37] 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 $2D$-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 (спектром) размерных характеристик и в этом случае также, по-видимому, будет обладать фрактальными свойствами.

Таблица 1. Характеристики некоторых фрактальных иерархических $F_{N\{4\},i,k}$-структур, основанных на модулях тетрагонных $R_{\{4\}im}$-структур

Характеристики генератора $G = L_{N\{4\},i,k}$					Размерность фрактальной структуры	
Информационный код	Форма	Симметрия, G_0^2	N	$b^2 - N$	Локальная, $D_{BL} = D$	Лакунарная, D_G
$L_{5\{4\},4(r),1/3}$		$4mm$	5	4	1.465	1.262
$L_{5\{4\},3(r),1/3}$		m	5	4	1.465	1.262
$L_{5\{4\},2(r),1/3}$						
$L_{5\{4\},4(v),1/3}$		$4mm$	5	4	1.465	1.262
$L_{5\{4\},2(v),1/3}$		m	5	4	1.465	1.262
$L_{5\{4\},1(v),1/3}$						
$L_{20\{4\},4(r),1/6}$		$4mm$	20	16	1.465	1.262
$L_{20\{4\},4(v),1/6}$						
$L_{20\{4\},4(r),1/6}$		$4mm$	20	12	1.548	1.431
$L_{20\{4\},4(v),1/6}$				52	1.114	1.770

В табл. 1 приведены основные характеристики представителей двух групп фрактальных $F_{N\{4\},i,k}$-структур (при N равном 5 и 20).

Анализ характеристик детерминистических фрактальных решеток на квадратной сетке. $F_{5\{4\},i,k}$-структуры, основанные на разных фрагментах тетрагонных $R_{\{4\}im}$-структур, различаются информационными кодами генераторов и их симметрией, однако по остальным характеристикам, в том числе и фрактальным размерностям, не идентифицируются. При этом очевидно, что $F_{5\{4\},i,k}$-структуры существенно разные (рис. 2). В определенной степени такой же вывод можно сделать и относительно $F_{20\{4\},i,k}$-структур (рис. 3).

Различными являются и дополнения этих структур. Это становится очевидным после сравнительного анализа их лакунарных спектров на диаграммах вида $\lg N_{\ln} - \lg d_{\ln}^{\text{отн}}$, где $N_{\ln}$ — число лакун l-й группы с определенным относительным диаметром $d_{\ln}^{\text{отн}}$ для предфрактала n-го поколения, $d_{\ln}^{\text{отн}} = (S_{\ln}^{\text{отн}})^{1/2}$ и в общем случае определяется из относительной площади лакун [42]. Все $F_{5\{4\},I,k}$-структуры различаются по своим лакунарным спектральным характеристикам, которые в определенном смысле можно считать диагностическими.

На диаграммах вида $(N/b^2)–D$ значения фрактальных размерностей анализируемых F-структур

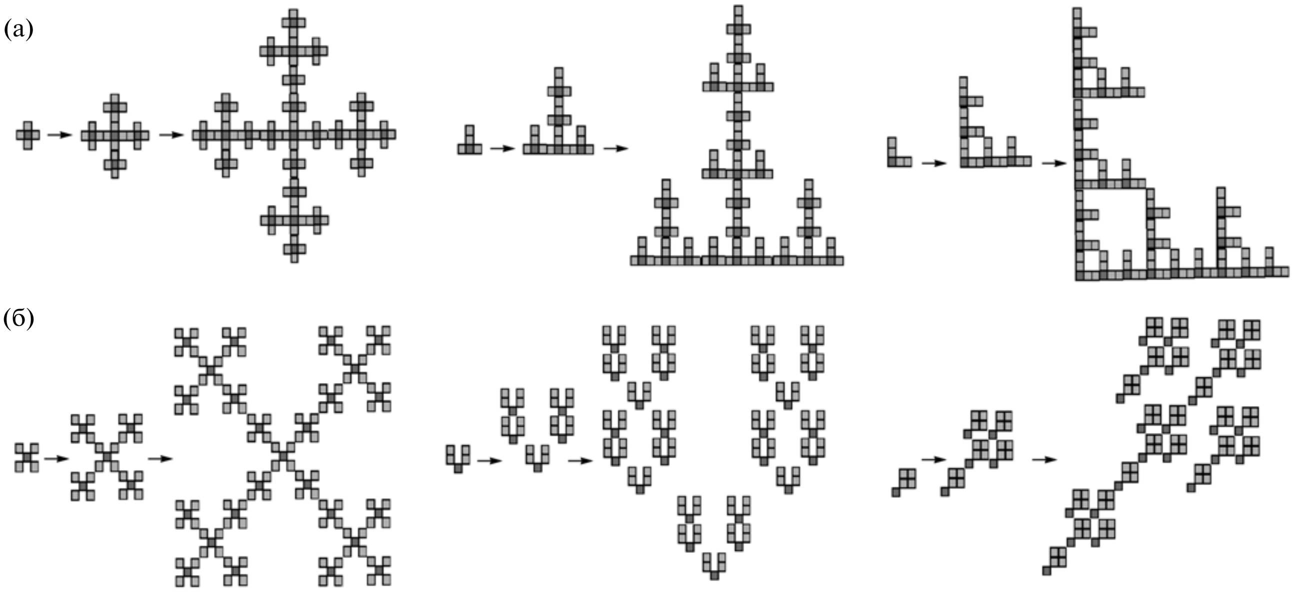


Рис. 2. Предфракталы 2-го и 3-го поколения, полученные из генераторов $L_{5\{4\}, 4(r), 1/3}$ (а), $L_{5\{4\}, 4(v), 1/3}$ (известный как фрактал Вичека [41]) (б) и производных от них типа $L_{5\{4\}, I, 1/3}$.

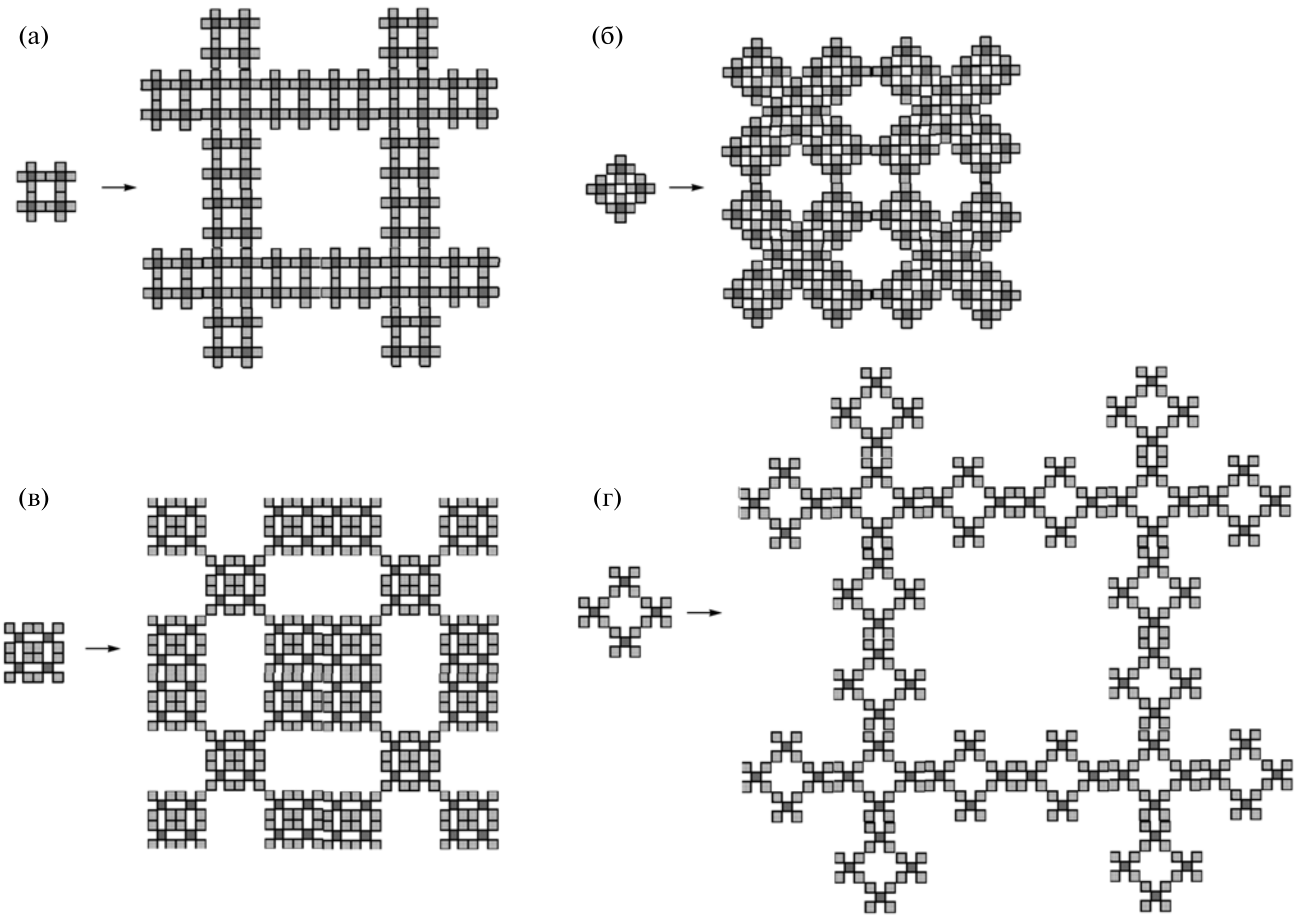


Рис. 3. Детерминистические фрактальные решетки с симметрией 4*mm*, полученные за один шаг итерационного построения из соответствующего генератора: $L_{20\{4\}, 4\circledR, 1/6}$ (а), $L_{20\{4\}, 4\circledR, 1/6}$ (б), $L_{20\{4\}, 4(v), 1/6}$ (в) и $L_{20\{4\}, 4(v), 1/6}$ (г).

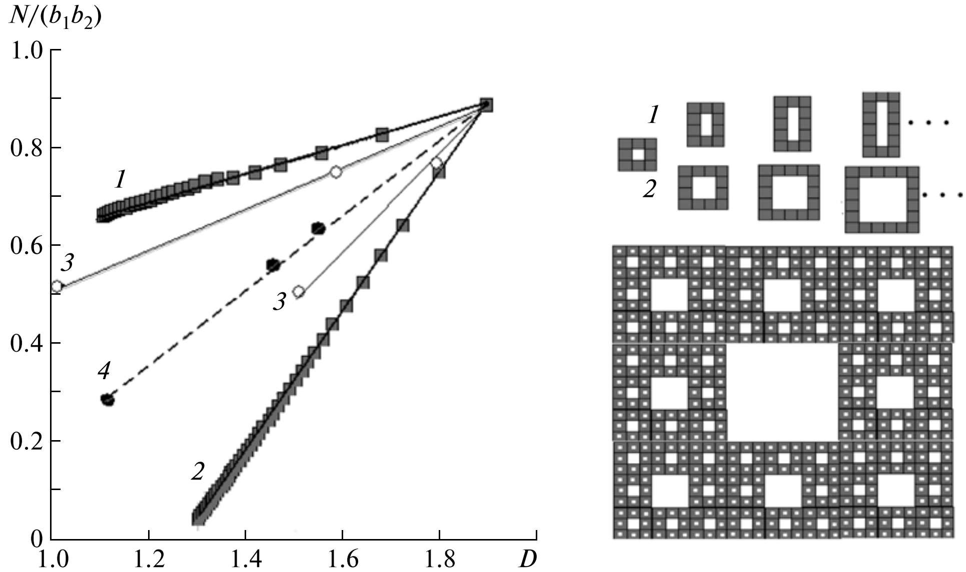


Рис. 4. Диаграмма вида $(N/b^2)–D$ для двух гомологических серий фрактальных структур $F^{-1/2}_{(6+2n)\{4\}, I, (3(2+n))}$ (*1*), $F_{(4+4n)\{4\}, I, 1/(2+n)}$ (*2*), производных от ковра Серпинского, и для анализируемых детерминистических фрактальных решеток $F_{5\{4\}, i, 1/3}$ (*3*) и $F_{20\{4\}, i, 1/6}$ (*4*).

и известной структуры $F_{8\{4\}, 3®, 1/3}$, представляющей собой классический квадратный ковер Серпинского со значением $k = 1/3$ [38], находятся на одной прямой (рис. 4). 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: $F^{1/2}_{(6+2n)\{4\}, I, 1/(3(2+n))}$-структур и $F_{(4+4n)\{4\}, I, 1/(2+n)}$-структур ($n = 1, 2, 3, ...$) [37, 38].

Полученные с помощью итерационного модулярного дизайна на тригонной сетке детерминистические фрактальные решетки с $F_{N\{3\}, i, k}$-структурами также соотносятся с гомологической серией фрактальных структур вида $F^{1/2}_{(6+2n)\{3\}, I, 1/(3(2+n))}$ и $F_{(3+3n)\{3\}, I, 1/(2+n)}$ и классической треугольной косынкой Серпинского $F_{3\{3\}, 3(r), 1/3}$ [37, 38].

Отметим, что многообразие формально возможных детерминистических фрактальных решеток, полученных методом итерационного модулярного дизайна, определяется многовариантностью разбиения $2D$-пространства (образами для которого могут служить сетки Кеплера и их производные) и многовариантностью выбранных в качестве генератора фрагментов соответствующих однослойных и двухслойных полигонных $2D$-структур. Данному многообразию детерминистических фрактальных решеток изоморфно многообразие наборов их геометрико-топологических характеристик, в том числе лакунарных спектров. Последние могут быть использованы как аппроксиманты для интерпретации особенностей статистических распределений микро- и наночастиц определенных фаз в поверхностных слоях гетерофазных материалов.

МУЛЬТИФРАКТАЛЬНЫЕ МНОЖЕСТВА ЗАМКНУТЫХ КРИВЫХ

Процедура формирования генератора G на отрезке – стороне многоугольника $\{Pg\} = \{N\}$ – задается законом T_k: $G = L_{K(1/l)}$, а процедура получения фрактальной кривой – итерационным законом T_i. Тогда фрактальная кривая n-го поколения: $F_{\{Pg\},n} = G(T_{i=n}) = F_{K(1/l)}\{Pg\}_n(G_2^2)$, где K – коэффициент самоподобия, n – количество итераций (значение $n = 0$ соответствует исходному многоугольнику, $n = 1$ – генератору), G_2^2 – симметрия фигуры, образованной замкнутой фрактальной кривой, в соответствии с обозначениями, принятыми в [53].

Рассмотрим некоторые свойства множеств генерируемых замкнутых фрактальных кривых вида $F_{K(1/l)}\{Pg\}(T - G_2^2)$, образующихся на некоторых двухцветных $2D$-сетках Кеплера–Шубникова [52].

Фрактальные кривые с генератором $L_K(3/4)$ обладают следующими свойствами [40, 41]:

– длина кривой на i-м шаге итерации $L_{F\{N\}, n} = (1/l)^n L_{\{N\}, 0}$;

– площадь кривой, построенной на многоугольнике $\{N\}$ со стороной a и площадью $S_{\{N\}, 0}$, зависит от количества итераций n, т.е. $S_{F\{N\},i} = S_{\{N\},0} \pm 3^{1/2}(a/6)^2\sum_{i=0}^{\infty}(4K)^i$, где знаки $\pm$ указыва-

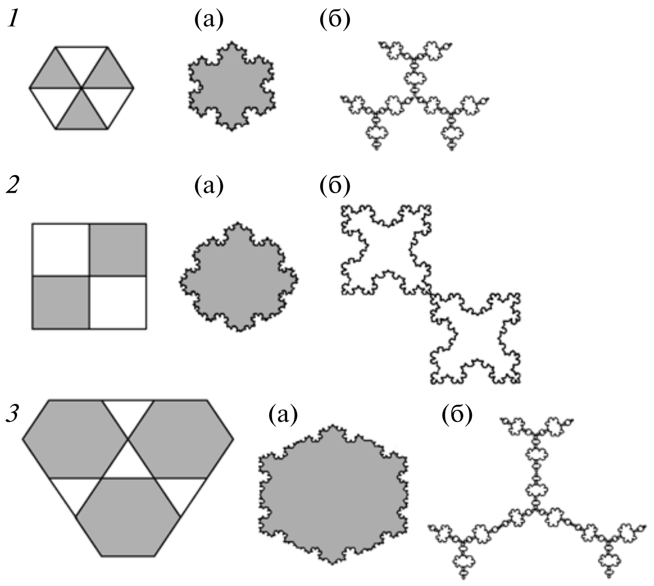


Рис. 5. Формы снежинок Коха $F_{K(4/3)}\{Pg\}$ (а) и лакунарных замкнутых кривых $MF_{\bar{K}(4/3)}\{Pg\}$ (б), соответствующих фрагментам сеток Кеплера 3^6 (*1*), 4^4 (*2*) и 3636 (*3*).

ют два возможных варианта изменения площади многоугольника $\{N\}$ при итерации;

– размерность кривой D определяется из уравнения $N = (1/l)^D$, где генератор $1/l = 4/3$, следующим образом: $D = \ln 4/\ln 3 = 1.2618 > 1$.

Множества замкнутых фрактальных кривых $MF_{K(4/3)}\{Pg\}(G_2^2)$, построенные на периметре $\{N\}$-тел (темных $\{Pg\}$), образуют совокупности фигур, представляющих собой упаковки определенных снежинок Коха в $2D$-пространстве. Множества замкнутых фрактальных кривых $MF_{\bar{K}(4/3)}\Sigma\{Pg\}(G_2^2)$, построенные на периметре $\{N\}$-лакун (светлых $\{Pg\}$), образуют совокупность лакунарных фигур, дополняющие соответствующие множества $MF_{K(4/3)}\{Pg\}(G_2^2)$ до $2D$-пространства (рис. 5).

Отметим, что в случае треугольных лакун генерируемое с помощью генератора Коха множество лакунарных кривых представляет собой результат его расслоения на мультимножество кривых $MF_{K(4/3)}\Sigma\{Pg\}(G_2^2)$, каждая из которых состоит из определенного множества самоподобных (с коэффициентом подобия 2/9) замкнутых кривых в виде двух сросшихся с частичным наложением снежинок Коха $F_{K(4/3)}\{3\}(p6mm)$. На рис. 6 представлены изображения множеств лакунарных кривых – мультифракталов третьего поколения, полученных внутри одной, двух и четырех тригональных лакун, характерных для некоторых $2D$-сеток. Очевидно, что конфигурация и основные геометрико-топологические характеристики образующихся мультимножеств замкнутых лаку-

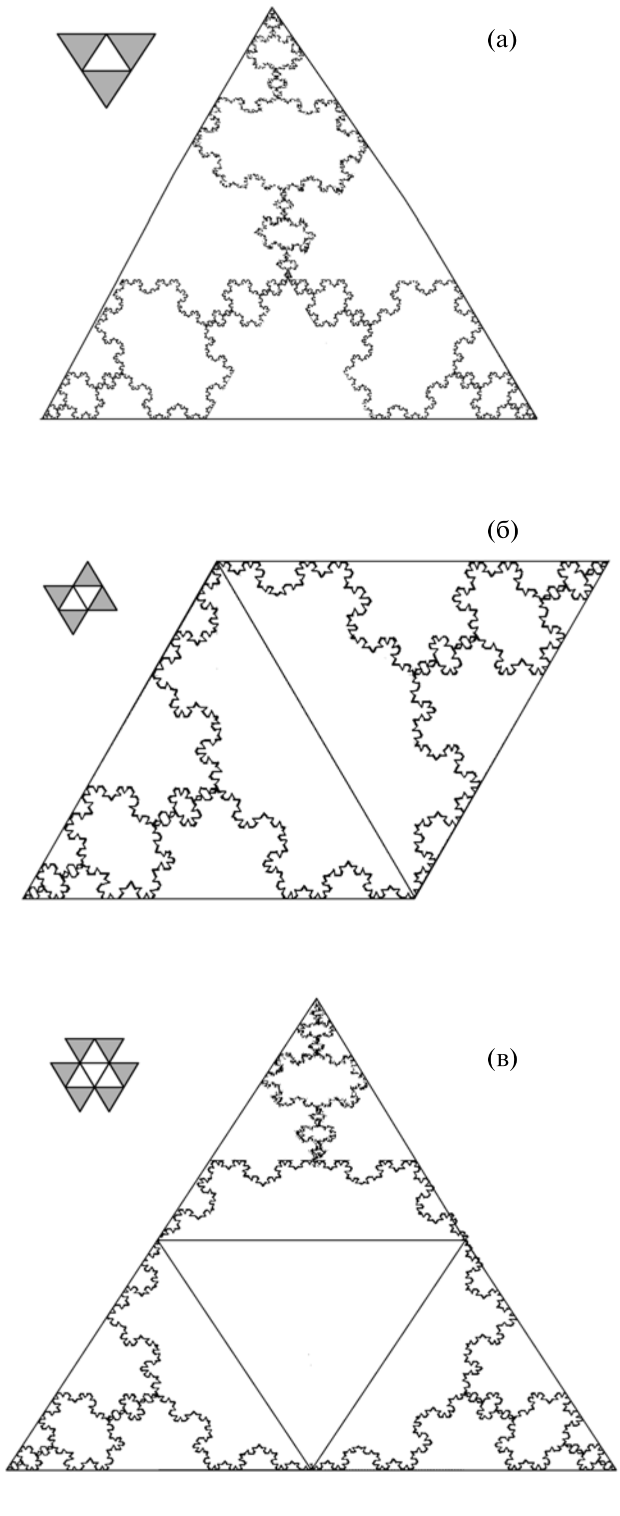
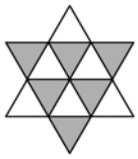
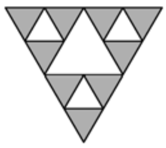
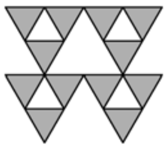
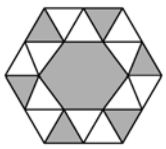
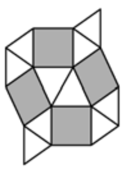
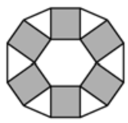
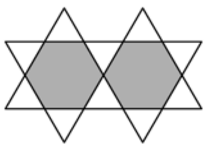


Рис. 6. Формирование множества фрактальных кривых $MF_{\bar{K}(4/3)}\{3\}(p3m1)$ (совокупности из трех мультифракталов $MF_{\bar{K}(4/3)}2\{3\}(p2mm)$) внутри $\{3\}$-лакуны (а); $MF(_{K(4/3)}2\{3\}(p2mm)$ внутри $2\{3\}$-лакуны (б); $MF_{\bar{K}(4/3)}4\{3\}(p2mm)$ (совокупности $\{6\}$-снежинки Коха $F_{K(4/3)}\{6\}(p6mm)$ и трех мультифракталов $MF_{\bar{K}(4/3)}2\{3\}(p2mm)$) внутри $4\{3\}$-лакуны (в).

Таблица 2. Характеристики некоторых иерархических структур из фрактальных кривых, полученных на двухцветных сетках Кеплера–Шубникова, содержащих тригоны

Сетка Кеплера и ее симметрия	Характеристика сетки Кеплера–Шубникова		Характеристика структур из фрактальных кривых	
	Форма фрагмента	Код 2D-структуры	$F_{K(4/3)}\{Pg\}(G_2^2)$ из $\{Pg\}$-тел	$MF_{\bar{K}(4/3)}\ \Sigma\{Pg\}(G_2^2)$ из $\{Pg\}$-лакун
333333 ($p6mm$)		$P\{3^6\}(3(3))(p3m1)$	плотная упаковка снежинок Коха $F_{K(4/3)}\{3\}(p6mm)$	упорядоченное множество мультифракталов $MF_{\bar{K}(4/3)}\{3\}(p3m1)$
		$P\{3^6\}(1(3)–2(2))(p3)$	пористая упаковка снежинок Коха $F_{K(4/3)}\{3\}(p6mm)$	упорядоченное множество мультифракталов $MF_{\bar{K}(4/3)}\{3\}(p3m1)$ и $MF_{\bar{K}(4/3)}4\{3\}(p3m1)$ (1 : 1)
		$P\{3^6\}(1(3)–2(2))(pm)$	пористая упаковка снежинок Коха $F_{K(4/3)}\{3\}(p6mm)$	
33336 ($p6$)		$P\{3^46\}(6(1)+3(1))(p6)$	упаковка снежинок Коха $F_{K(4/3)}\{3\}(p6mm)$ и $F_{K(4/3)}\{6\}(p6mm)$ (2 : 1)	упорядоченное множество мультифракталов $MF_{\bar{K}(4/3)}2(3\}(p2mm)$
34334 ($p4gm$)		$P\{3^34^2\}(4(2))(p4gm)$	упаковка снежинок Коха $F_{K(4/3)}\{4\}(p4mm)$	упорядоченное множество мультифракталов $MF_{\bar{K}(4/3)}2\{3\}(p2mm)$
3464 ($p6mm$)		$P\{34^26\}(4(2))(p6mm)$	пористая упаковка снежинок Коха $F_{K(4/3)}\{4\}(p4mm)$	упорядоченное множество мультифракталов $MF_{\bar{K}(4/3)}\{3\}(p3m1)$ и $MF_{\bar{K}(4/3)}\{6\}(p6mm)$ (2 : 1)
3636 ($p6mm$)		$P\{3^26^2\}(6(2))(p6mm)$	плотная упаковка снежинок Коха $F_{K(4/3)}\{6\}(p6mm)$	упорядоченное множество мультифракталов $MF_{\bar{K}(4/3)}\{3\}(p3m1)$

нарных кривых полностью определяются соответствующими характеристиками двухцветных сеток Кеплера–Шубникова, содержащими светлые треугольники ({3}-лакуны) (табл. 2).

Некоторые характеристики фрактальных структур, изоморфных соответствующим сеткам Кеплера–Шубникова, представлены в табл. 2. Канторово множество точек M, общих для смежных фрактальных кривых, и само множество фрактальных кривых имеют одинаковую мощность, равную мощности континуума [51].

На рис. 7 представлены некоторые изоморфные определенным сеткам Кеплера–Шубникова упорядоченные в 2D-пространстве множества фрактальных структур. Эти множества одновременно могут рассматриваться и как упаковки фракталов в виде определенных снежинок Коха $F_{K(4/3)}\{Pg\}(G_2^2)$, и как упорядоченные множества лакунарных мультифракталов $MF_{\bar{K}(4/3)}\{3\}(p3m1)$ или $MF_{\bar{K}(4/3)}2\{3\}(p2mm)$.

Отметим, что для всех представленных упорядоченных множеств лакунарных фрактальных

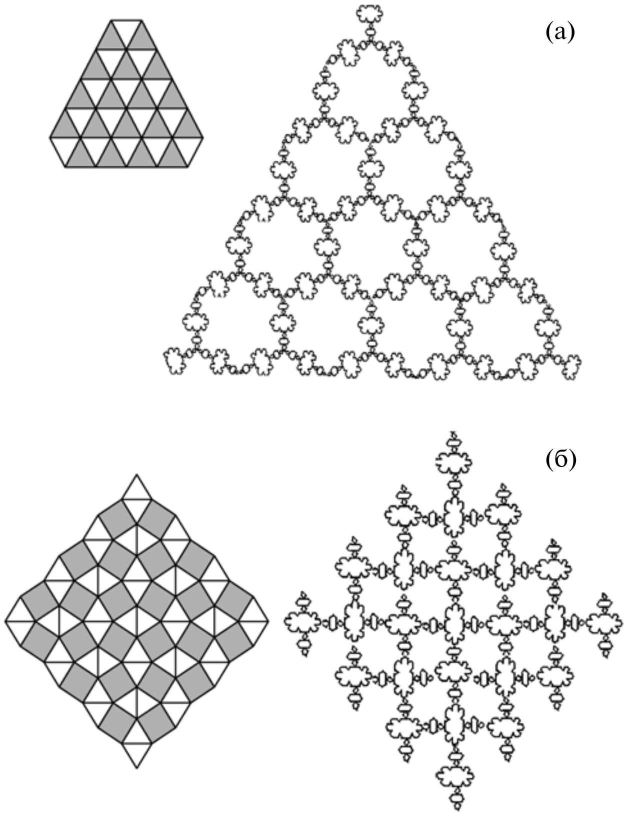


Рис. 7. Сетки 3^6-(3(3)) (а), 343^24-(4(2)) (б), соответствующие упорядоченные множества плотноупакованных снежинок Коха $F_{K(4/3)}\{3\}(p6mm)$ (а), $F_{K(4/3)}\{4\}(p4mm)$ (б) и дополняющих их до $2D$-пространства лакунарных мультифракталов $MF_{\bar{K}(4/3)}\{3\}(p3m1)$ (а) и $MF_{\bar{K}(4/3)}2\{3\}(p2mm)$ (б).

кривых характерны ажурные решеточные конструкции, структурным элементом которых являются самоподобные фракталы.

Размерность лакунарных структур, образующихся внутри тригонов, может быть определена следующим образом: $\mathrm{Dim}\,F^{(2)} = \lim_{i\to\infty} k^{1/2}\Sigma S_i$. Для множеств фрактальных кривых $MF_{\bar{K}(4/3)}\{3\}$, $MF_{\bar{K}(4/3)}2\{3\}$ и $MF_{\bar{K}(4/3)}4\{3\}$ относительные площади поверхности, занятые лакунами, соответственно равны $\Sigma S_i = 3\Sigma 2^{i-1}k^i$, $\Sigma S_i = 5k + \Sigma 2^{i-2}k^{i-1}$ и $\Sigma S_i = 8k + 3\Sigma 2^{i-4}k^{i-1}$ с коэффициентом самоподобия $k = 1/9$.

Для косынки Серпинского $F_{3\{3\},\,3(r),\,1/3}$ и производных от нее двух фрактальных структур гомологической серии $F_{(3+3n)\{3\},\,I,\,1/(2+n)}$ при $n = 1$ и 2 лакунарная размерность определяется проще: $\mathrm{Dim}\,F^{(2)} = k^{1/2}\Sigma S_i$, где относительные площади поверхности, занятые лакунами, соответственно равны $\Sigma S_i = \Sigma 3^{i-1}k^i$ ($k = 1/4$), $\Sigma S_i = 3\Sigma 6^{i-1}k^i$ ($k = 1/9$) и $\Sigma S_i = 6\Sigma 10^{i-1}k^i$ ($k = 1/16$).

Сравнительным анализом спектров установлено подобие лакунарных характеристик множеств фрактальных кривых $MF_{\bar{K}(4/3)}\{3\}$, $MF_{\bar{K}(4/3)}2\{3\}$ и $MF_{\bar{K}(4/3)}4\{3\}$ с фрактальной структурой $F_{6\{3\},\,I,\,1/3}$, производной от классической косынки Серпинского.

В предположении, что инициальная лакуна, в которой могут разместиться атомы, имеет размер не более 100 нм, физически фрактальными структурами могут быть предфракталы не выше 3-го поколения (для классической салфетки Серпинского – не выше 6-го поколения).

Таким образом, полученные множества замкнутых фрактальных кривых характеризуются определенными свойствами. Законом итерации определяется размерность фрактальной кривой. Мультифрактальные множества, полученные на соответствующих множествах $2D$-сеток, могут служить аппроксимантами для описания, в частности распределения ультрадисперсных частиц фаз и особенностей конфигурации межфазных границ на поверхности материалов.

ВЫВОДЫ

Сформулированы принципы модулярного строения фрактальных структур в $2D$-пространстве. Предложена система информационных кодов для детерминистических фрактальных решеток $F_{N\{4\}ik} = L_{N\{4\},\,i,\,k}(N\{4\}_I,\ T_{ik},\ T_n)$ и множеств мультифрактальных кривых $MF_{K(4/3)}\{Pg\}(G_2^2)$.

Предложена информационно-итеративная модель формирования детерминистических фрактальных решеток в $2D$-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 $1/6$. Показано, что информационный код генератора в виде $L_{N\{4\},\,i,\,k}$ следует дополнить информацией о локальной симметрии (G_0^2) генератора. Детерминистические фрактальные решетки могут служить матрицами для формирования дискретных фрактальных структур, обладающих свойствами, подобным свойствам канторова множества. Показана возможность образования простейших предфракталов: фракталов $F_{5\{4\},\,i,\,1/3}$ 7-го поколения и $F_{20\{4\},\,i,\,1/6}$ 3-го поколения.

Методом итерационного модулярного дизайна получены *серии мультифрактальных кривых* (на основе ряда сеток Кеплера–Шубникова), обладающих свойствами канторова множества. Определены основные характеристики фрактальных структур и их лакунарные спектры, которые представляют интерес, в частности, в связи с определением вероятных распределений по размерам микро- и наночастиц, захваченных в процессе роста основной поверхностной фазы.

Результаты работы могут быть использованы в области теоретической и структурной кристаллохимии поверхности кристаллов и фаз, образующихся на границе раздела твердое тело–жидкость и твердое тело–газ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Бокий Г.Б.* Кристаллохимия. М.: Наука, 1960. 358 с.
2. *Ормонт Б.Ф.* Структуры неорганических веществ. М.; Л.: Гостехиздат, 1950. 968 с.
3. *Пирсон У.* Кристаллохимия и физика металлов и сплавов. М.: Мир, 1977. Ч. 1. 420 с.; Ч. 2. 472 с.
4. *Брэгг У., Кларингбулл Г.* Кристаллическая структура минералов. М.: Мир, 1967. 391с.
5. *Parthe E.* Crystal Chemistry of Tetrahedral Structures. New York: Acad. Press., 1964. 349 p.
6. *Нараи-Сабо И.* Неорганическая кристаллохимия. Изд-во АН Венгрии, Будапешт, 1969. 504 с.
7. *Corter E.W.* // J. Solid State Chem. 1970. № 1. P. 279.
8. *Вайнштейн Б.К., Фридкин В.М., Инденбом В.М.* Современная кристаллография. Структура кристаллов. М.: Наука, 1979. Т. 2. 360 с.
9. *Белов Н.В.* Очерки по структурной минералогии. М.: Недра, 1986. 360 с.
10. *Асланов Л.А.* Строение атомов, молекул, кристаллов. М.: МГУ, 1985. 121 с.
11. *Зоркий П.М.* Симметрия молекул и кристаллических структур. М.: МГУ, 1986. 232 с.
12. *O'Keeffe M., Hyde B.G.* // Proc. Roy. Soc. London. A. 1980. V. 295. P. 553.
13. *Урусов В.С.* Теоретическая кристаллохимия. М.: МГУ, 1987. 276 с.
14. *Уэллс А.* Структурная неорганическая химия. В 3-х т. М.: Мир, 1987/88. Т. 1. 408 с.; Т. 2. 696 с.; Т. 3. 564 с.
15. *Борисов С.В.* // Кристаллография. 2000. Т. 45. № 5. С. 779.
16. *Смирнова Н.Л.* // Кристаллография. 2004. Т. 49. № 4. С. 628.
17. *Смирнова Н.Л.* // Кристаллография. 2005. Т. 50. № 1. С. 16.
18. *Лен Ж.-М.* Супрамолекулярная химия: концепции и перспективы. Новосибирск: Наука, 1998. 334 с.
19. *Илюшин Г.Д.* Моделирование процессов самоорганизации в кристаллообразующих системах. М.: УРСС, 2003. 376 с.
20. *Ilyshin G.D., Blatov V.A., Zakutkin Yu.A.* // Acta Cryst. B. 2002. V. 58. P. 948.
21. *Бульенков Н.А., Тытик Д.Л.* // Изв. АН. Сер. хим. 2001. № 1. С. 1.
22. *Shevchenko V.Ya., Mackay A.L.* // Glass Phys. Chem. 2008. V. 34. № 1. P. 1.
23. *Shevchenko V.Ya., Krivovichev S.V.* // Struct. Chem. 2008. V. 19. P. 571.
24. *Ferey G.* // J. Solid State Chem. 2000. V. 152. P. 37.
25. *Hubert H., Devouarad B., Garvie L.A.J. et el.* // Nature. 1998. V. 391. P. 376.
26. *O'Keeffe M., Eddaoudi M., Hailan Li et el.* // J. Solid State Chem. 2000. V. 152. P. 3.
27. *Hailan Li, Kim J., Groy T.L. et el.* // J. Am. Chem. Soc. 2001. V. 123. P. 4867.
28. *Шевченко В.Я., Блатов В.А., Илюшин Г.Д.* // Физика и химия стекла 2009. Т. 35. № 1. С. 3.
29. *Таланов В.М., Ерейская Г.П., Юзюк Ю.И.* Введение в химию и физику наноструктур и наноструктурированных материалов. М.: Академия естествознания, 2008. 389 с.
30. *Лорд Э.Э., Маккей А.Л., Ранганатан С.* Новая геометрия для новых материалов. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. 264 с.
31. *Ferraris G., Makovicky E., Merlino S.* Crystallography of modular structures. IUC Oxford Science Publications, 2008. 370 p.
32. *Иванов В.В.* Комбинаторное моделирование вероятных структур неорганических веществ. Ростов-на-Дону: СКНЦ ВШ, 2003. 204 с.
33. *Иванов В.В., Таланов В.М.* // Физика и химия стекла. 2008. Т. 34. № 4. С. 528.
34. *Иванов В.В., Таланов В.М.* // Кристаллография. 2010. Т. 55. № 3. С. 385.
35. *Иванов В.В., Таланов В.М.* // Журн. неорган. химии. 2010. Т. 55. № 6. С. 980.
36. *Иванов В.В., Шабельская Н.П., Таланов В.М.* // Современные наукоемкие технологии. 2010. № 10. С. 176.
37. *Иванов В.В., Демьян В.В., Таланов В.М.* // Междунар. журн. эксперим. образования. 2010. № 11. С. 153.
38. *Иванов В.В., Таланов В.М.* // Наносистемы: физика, химия, математика. 2010. Т. 1. № 1. С. 72.
39. *Иванов В.В., Таланов В.М., Гусаров В.В.* // Наносистемы: физика, химия, математика. 2011. Т. 2. № 2. С. 282.
40. Фракталы в физике / Под ред. Пьетронеро Л., Тозатти Э. М.: Мир, 1988. 420 с.
41. *Федер Е.* Фракталы. М.: Мир, 1991. 260 с.
42. *Whyte L.L., Wilson F.C., Wilson D.* Hierahical Structures. New York: Elsevier, 1990.
43. *Mandelbrot B.B.* The Fractal Geometry of Nature. M.H. Freeman and Co. 1982. 468 p.
44. *Falconer K.J.* Fractal Geometry. Mathematical Foundations and Applications. J. Wiley and Sons, 1995. 352 p.
45. *Ролдугин В.И.* // Успехи химии. 2003. Т. 72. № 10. С. 931.
46. *Peitgen H.G., Richter T.* The Beauty of Fractals. New York: Springer, 1986.
47. *Sander L.M.* // Sci. Am. 1987. V. 256. P. 94.
48. *Prusincevicz P. Lindenmayer A.* The algorithmic Beauty of Plants. New York: Springer, 1990.
49. *Бурбаки Н.* Теория множеств. М.: Мир, 1965. 455 с.
50. *Биркгоф Г., Барти Т.* Современная прикладная алгебра. М.: Мир, 1976. 400 с.
51. Общая алгебра. В 2-х т. / Под ред. Скорнякова Л.А. М.: Наука, 1990. Т. 1. 592 с.; 1991. Т. 2. 480 с.
52. *Смирнова Н.Л.* // Кристаллография. 2009. Т. 54. № 5. С. 789.
53. Современная кристаллография. В 4-х т. Симметрия кристаллов. Методы структурной кристаллографии. М.: Наука, 1980. Т. 1. 524 с.