

О СИСТЕМНЫХ ЗАКОНАХ И ПОНЯТИЯХ

Н. Л. Смирнова

Московский Государственный Университет, Москва, snl194@mail.ru

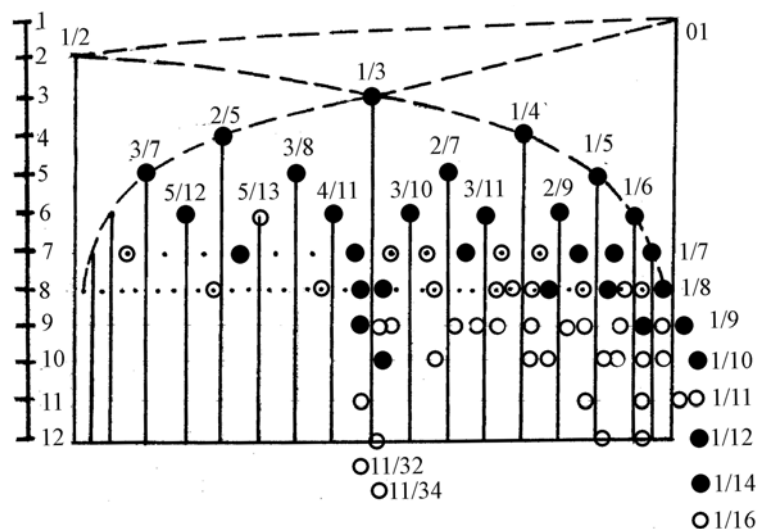
Каждая наука рассматривает систему элементов, которые комбинируются, образуя систему объектов. Планета Земля состоит из химических элементов, которые, комбинируясь, образуют объекты – химические вещества. Природные химические вещества, имеющие кристаллическую структуру, называются минералами, а не имеющие кристаллической структуры называются минералоидами. К последним относятся газообразные, жидкие, аморфные вещества, стекла, смолы и др. Вода кристаллическая – минерал, жидкая – минералоид, и та и другая относятся к одному минеральному виду проле. Идеальная кристаллическая структура минералов характеризуется симметрией (пространственной группой), кратностью и симметрией позиций, координатами атомов. Идеальной кристаллической структуре соответствует идеальная кристаллохимическая формула, состоящая из качественной и количественной части.

Наряду с точечными нуль-мерными (нон-мерными) элементами (атом, вакансия, кластер, вершина, ребро, n-гон, координационная сфера и т.д.) в кристаллической структуре можно выделить 1-мерные линейные, 2-мерные плоские, 3-мерные каркасные элементы, образующие стержень, цепочку, ленту, спираль, сетку, слой, пакет, пачку, каркас и т.д.. Кристаллическая структура может быть представлена в виде совокупности частей: элементарных и других ячеек, блоков, фрагментов разной мерности, величины, формы, различно расположенных. Эти составляющие также образуют системы.

В природе нет реальных идеальных кристаллических структур. Все они имеют **дефекты**, различающиеся качественным составом и количественным содержанием. Дефекты – это элементы и части, которые замещают элементы и части данной структуры, в частности вакантные. Замещение атомных дефектов на вакансии и наоборот означает внедрение-вычитание дефектов. Дефекты размещаются статистически, но могут упорядочиваться, в результате чего возникают кристаллические структуры с новым порядком, а, следовательно, образуются новые минералы с новой структурой, относящиеся к новым минеральным видам.

Конструктивно-минальная концепция – это одно из представлений об организации систем. Нами концепция разрабатывается более 50 лет. Конструктивно-минальная концепция опирается на универсальное понятие изоморфизм, в основе которого лежит преобразование замещения и свойство замещаемости одних объектов (их элементов, частей, связей, интерфейсов, способов их соединения, чередования) на другие. Полусиноним минала – компонент, формула, конструктивного преобразования – упорядочение. Таким образом, конструктивно-минальная концепция – это учение об образовании, и преобразовании систем в результате упорядоченного замещения, упорядоченного изоморфизма. Конструктивно-минальная концепция предполагает, в частности, что все структуры образуются из простейшей структуры в результате упорядоченного замещения элементов, связей, способов их комбинирования. Под простейшей структурой понимаем структуру с идентичными элементами и их идентичным взаимодействием. **Преобразование** при изоморфизме может быть статистическим (DD, OD), частично, полностью упорядоченным при смене беспорядка на порядок (DO), одного порядка на другой порядок (OO). При конструктивных преобразованиях образуются ряды сверхструктур, политипов, гетерополитипов, гомологов, полисомов, модулярных структур, гомологических классов и др. **Минал** (например, атом, кластер, блок, модуль, деталь, фрагмент, дефект деформационный, вакансия, пора и др.) может

быть точечным и 1–3-мерным (линейным, спиральным; сеткой, слоем, интерфейсом плоским, сферическим, гофрированным; каркасным). Минал (например, элементарная ячейка, ее часть и др.) может быть структурным (сминал). Сминал состоит из инвариантной части структуры, отображается сохраняющейся частью формулы, рисунка, спектра-последовательности, и вариантной частью – меняющейся. Сминалы с идентичной инвариантной частью относятся к сводному сминалу. Периоды (параметры ячейки), которые параллельны интерфейсам сминалов, должны быть приблизительно такими же (гомологический G класс), или кратными (F класс).



Ранее рассмотрены координатные спектры структурных типов (СТ) кристаллических структур высшей и средних сингоний и преобразование составляющих их сминалов [Смирнова, 1967]. Представляем некоторые сминалы широко распространенных СТ в виде буквенных формул (спектров). Выделяем 5 позиций, где **A** и **B** позиции двух сеток из 3-гонов (плотноупакованные слои), **c** – центр октаэдра (**o**), **b** и **a** – центры тетраэдров (**t**). Гомологический класс СТ α -Fe – Cu (A_1) образован сводным сминалом $AbcaB = AtotB$. При полном заполнении всех позиций сминал реализован в СТ: $FeFeFeFeFe$, α -Fe, $CsClCsClCs$, $CsCl$, $NaNaTiTiNa$, $NaTi$, $CuMnCuAlCu$, Cu_2MnAl , $ReBBRe$, ReB_3 и др. При вакантности (\square) позиций **b** и **a** реализованы сминалы $A\square\square B$, например, СТ $Po\square Po\square Po$, α -Po, $Cl\square Na\square Cl$, $NaCl$, $As\square Ni\square As$, $NiAs$. При вакантности позиций **b**, **c** и **a** реализованы сминалы СТ: $A\square\square\square B$, $Cu\square\square\square Cu$, Cu медь, $Mg\square\square\square Mg$, Mg . Возможны две разные комбинации из разных сминалов: $A\square\square B\square\square\square A$, $I\square Cd\square I\square\square\square I$, CdI_2 , $A\square\square B\square\square\square C$, $Cl\square Cd\square Cl\square\square\square Cl$, $CdCl_2$. Возможность замещения позиции **A** на позицию **C** приводит к возможности образования рядов СТ постоянного и переменного состава (политипов, гетерополитипов). При вакантности позиций **c** реализованы сминалы СТ: $Ab\square aB$, $CaF\square FCa$, CaF_2 флюорит. При вакантности позиций **c** и **a** реализованы сминалы СТ: $Ab\square\square B$, $CC\square\square C$, C алмаз, Si кремний, $SZn\square\square S$, ZnS сфалерит и вюртцит, SiC . При вакантности одной тетраэдрической позиции **b** реализован сминал СТ: $A\square caB$, $Zn\square LiCuZn$, $CuLiZn$ и т.д. Гомологический класс СТ α -Fe - Cu (A_1) образован также сминалом второго типа $AbacA = AnppA$, где **b** и **c** – центры тригональных призм (**n**), и **a** – центр ребра (**p**). Позиция **p** – центр гексагона из **n**. При заполнении всех позиций образуется сминал СТ: $AbacA$, $LiLiNLiLi$, Li_3N . При вакантности позиции **a** реализуется сминал СТ: $Ab\square cA$, $AlB\square BAl$, AlB_2 , при вакантности позиций **a** и **b** реализован сминал СТ: $A\square\square cA$, $Mo\square\square CMo$, MoC , $Ni\square\square AsNi$, $NiAs$. СТ $NiAs$ содержит сминалы первого и второго типа. Гомологический класс СТ корунда (A_3) образован сводными сминалами $A_3b_3ccca_3B_3$, $AAAb_3c_3aaaB_3$ с частичным расщеплением позиций и производными сминалами СТ: $A_3b_3ccca_3B_3$, $O_3\square_3Al_2\square_1\square_3O_3$, Al_2O_3 корунд, $Fe_3\square_3N\square_2\square_3Fe_3$, Fe_3N , $AAAb_3c_3aaaB_3$, $AAA\square_3C_3\square_3A_3$, $SSS\square_3Fe_3\square_3S_3$, FeS , $AAA\square_3\square_3\square_3A_3$, $AlWAl\square_3\square_3\square_3Al_3$, WAl_5 , $AAA\square_3\square_3a\square_2A_3\square_3C_1\square_2\square_3A_3$, $OKO\square_3\square_3S\square_2O_3\square_3Al_1\square_2\square_3O_3$, $KAl(SO_4)_2$, квасцы. Гомологический класс СТ шпинели (A_4) образован сводными сминалами $AA_3bb_3cc_3aa_3BB_3$ и $AA_3b_3aa_3c_3AA_3$ и их производными: $AA_3\square_4\square_4\square_4BB_3$, $AuCu_3\square_4\square_4\square_4AuCu_3$, Cu_3Au , $AA_3\square_4c\square_3\square_4BB_3$, $CaO_3\square_4Ti\square_3\square_4CaO_3$, $CaTiO_3$ перовскит, $AA_3\square_4c\square_3\square_4BB_3\square_4c\square_3\square_4CC_3$, $KCl_3\square_4Pt\square_3\square_4KCl_3\square_4\square_4\square_4KCl_3$, K_2PtCl_6 , $AA_3b_3c_3c_3b_3BB_3$,

$O_4Mg_3Al_3Mg_3O_4$, $MgAl_2O_4$ шпинель, $VB_3c_4c_3c_4AA_3$, $O_4c_4c_1Al_3c_4O_4$, $MgAl_2O_4$ шпинель.

Представляем сокращенную запись формул последовательностей сминалов из букв **A, B, C** при разной длине формул. В формулах позиции **A** замещены на позиции **A, B, C**, цифры – длина последовательностей. **1 – AAAAAA, 2 – AB, 3 – ABC, 4 – ABAC, 5 – ABAB, 6 – ABABAC, 6 – ABACBC.** Возможно замещение в последовательности позиции **A** на позиции **A, B, C** с линиями симметрии типа **m** (м), типа ***** (ч и н): **Abc*aBac*bA, A*bc*aB*ca*bC*, A*bcaBacbA*cbaC.** Формулы, спектры сминалов и их комбинаций в СТ позволяют классифицировать упорядоченные изоморфы и прогнозировать новые структурные типы. Применение конструктивно-минальной концепции возможно во всех системах.

Для изучения сходства **количественных n-арных отношений** во всех системах нами ранее была предложена универсальная плоская complicationная схема (ПКС Вейса-Брокочи-Гольдшмидта-Фарей-Смирновой). В [Горбунков, 1988] изучено влияние конфигурации резонатора (g_1, g_2) на пространственную структуру основной моды лазерного излучения. Проявление частотного вырождения мод пустого резонатора имеет место при выполнении условия $\arccos\sqrt{g_1g_2} = \pi q/s$, где q/s – несократимая дробь. Определены значения q/s соответствующие наиболее ярко проявляющимся вырожденным конфигурациям резонатора в координатах g_1 и $|\beta_0|^2$. Вставляем реализованные бинарные отношения q/s со знаком плюс в линейную complicationную схему (ЛКС). Знаком минус приводим пропущенные не реализованные отношения. Полужирно выделяем отношения в рядах 3-6, звездочкой обозначаем отношения со значением $|\beta_0|^2 \leq 0/8$.

1/2, -6/13, -5/11, -9/20, -4/9, +7/16, +3/7*, +5/12*, -7/17+9/22, +2/5*, +7/18*, +5/13, +3/8*, -7/19, +11/30, +4/11*, +5/14*, +6/17*, +7/20*, -8/23, +9/26, -10/29, +11/32, +1/3*, +11/34, -10/31, +9/28. -8/25, +7/22*, +6/19, +5/16*, +4/13, +11/36, -7/23, +3/10*, +5/17, +7/24, -9/31, +11/38, +2/7*, +9/32, -7/25, +5/18*, -8/29, +11/40, +3/11*, +7/26, +4/15, +9/34, +5/19, +1/4*, +5/21, +9/38, +4/17, +7/30, +3/13, +5/22*, -7/31, +9/40, +2/9*, +7/32, -5/23, +3/14*, +4/19, +5/24, -6/29, +7/34, +1/5*, +7/36, -6/31, +5/26, -4/21, +3/16*, -5/27, +7/38, +2/11*, +5/28, +3/17, +1/6*, -3/19, +5/32, +2/13, +3/20*, -4/27, +5/34, +1/7*, +3/22, +2/15, +1/8*, -2/17, +3/26, +1/9*, +1/10*, +1/11, +1/12*, +1/14*, +1/16.

На рис. показана ЛКС в виде ПКС. Приводим только вторую половину схемы ПКС, так как первая половина не реализована полностью. Слева пишем номера рядов. Выделяем темными кружками реализованные отношения со значением $|\beta_0|^2 \leq 0,8$. Светлые кружки имеют значение $|\beta_0|^2$ более 0.8. Отношения на рис. указаны частично. Определяем долю реализованных отношений в рядах 3–16: на первом месте указываем номер ряда, на втором – число теоретических отношений, на третьем – число реализованных отношений, на четвертом долю реализованных отношений от числа теоретических. Число теоретических отношений приводим только для второй половины схемы: 0-0 /0/, 1-0 /0/, 2-1 /0/, 3-1 /1-1/, 4-2 /2-1/, 5-4 /4-1/, 6-8 /7-0.875/, 7-16 /11-0.687/, 8-32 /14-0.438/, 9-64 /13-0.203/, 10-128 /9-0.070/, 11-256 /5-0.020/, 12-512 /4-0.0078/, 13-1024 /1-0.00098/, 14-2048 /2-0.00098/, 15-4096 /0-0/, 16-8192 /1-0.00012/. Таким образом, ряды 3–5 реализованы на 100 %, ряды 6, 7 на 88, 68 %, ряды 8–11 на 44, 20, 7, 2 %, ряды 12–16 на 0.8, 0.1, 0.1, 0.00, 0.01 %. Последовательность разностей в рядах 3–16 – 0, 0, 12, 20, 24, 24, 13, 5, 1.2, 0.7, 0.0, 0.1, -0.01 %.

Использование системных законов и понятий полезно при преподавании разных наук.