

## МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ ФАЗО- И ПОРООБРАЗОВАНИЯ В НЕРАВНОВЕСНЫХ МАЛЫХ СИСТЕМАХ

Лиманова Н.И., Талалова Е.А.

Тольяттинский государственный университет, каф. прикладной математики и информатики, Россия, 445667, Самарская обл., г. Тольятти, ул. Белорусская, 14, тел. (8482) 53-95-14, E-mail: [Nataliya.I.Limanova@gmail.com](mailto:Nataliya.I.Limanova@gmail.com)

Моделирование механизмов фазо- и порообразования в неравновесных малых системах актуально как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения. Разработанные модели можно с успехом применить, например, для исследования процессов структурообразования в малых металлических частицах (ММЧ), получаемых путем осаждения из газовой фазы или на начальных этапах электрокристаллизации. Подобные малые системы являются неравновесными напряженными структурами. Образование в них пор или полостей является важным процессом, влияющим на их свойства. В процессе эволюции состояние частицы претерпевает значительные изменения, характер которых напрямую зависит от ее начального состояния и условий релаксации. В данной работе начальное состояние частицы моделируется как аморфное с дефектом дисклинационного типа и с избыточным свободным объемом. Обычно диффузионные процессы направлены таким образом, что частица, первоначально находящаяся в неравновесном состоянии, релаксирует к равновесному или метастабильному состоянию. В ММЧ наблюдаются некоторые особенности протекания релаксационных процессов, что связано с тем, что частица обладает развернутыми границами и неоднородными напряжениями. Эволюция частиц сопровождается структурной релаксацией, изменением их формы и порообразованием. Для моделирования порообразования ММЧ авторы взяли за основу теорию неравновесного массопереноса [1] и теорию перколяции [2]. Однако обычная модель ячеечной перколяции в данном случае является весьма упрощенной и не описывает адекватно многоступенчатых механизмов образования кристаллов сложной формы. В данной работе процесс эволюции неравновесных ММЧ моделировался на базе клеточных автоматов с применением модели ячеечной перколяции, уточненной нами на основе задания параметра связности. Результаты моделирования позволили в явном виде получить зависимости вероятностей перколяции от вероятности случайного заполнения на квадратных, треугольных, гексагональных и кубических решетках с различными условными линейными размерами. Полученные расчетным путем значения пределов перколяции соответствуют теоретическим данным [2,3] для всех типов рассмотренных решеток. При этом было обнаружено, что полученные зависимости существенно различаются для случаев одномерной, двумерной и трехмерной перколяции.

### Литература.

1. Базаров И.П. Термодинамика. — М.: Высшая школа, 1991.
2. Stauffer D., Aharony A. Introduction to Percolation Theory. Taylor & Francis, 1992.
3. Grimmett G. Percolation. — Berlin: Springer-Verlag, 1999.