

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМО- И ФАЗООБРАЗОВАНИЯ МАЛЫХ ЧАСТИЦ ЭЛЕКТРОЛИТИЧЕСКОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ

Лиманова Н.И., Талалова Е.А.

Тольяттинский государственный университет,
ф-т Математики и информатики, каф. Прикладной математики и информатики,
Россия, 445667, Самарская обл., г. Тольятти, ул. Белорусская, 14, тел. (8482) 53-95-14.
E-mail: N.Limanova@tltsu.ru

Исследование механизмов формо- и фазообразования малых металлических частиц (ММЧ), получаемых на начальных этапах процесса электрокристаллизации, является весьма актуальным. Например, увеличение пор, наблюдающееся при росте микрокристаллов, может оказаться полезным при получении пористых материалов, катализаторов, адсорбентов и нежелательным при создании металлических покрытий и пленок. Для моделирования формо- и фазообразования ММЧ авторы взяли за основу теорию тепло-массопереноса, теорию перколяции [1] и теорию клеточных автоматов. Однако обычная модель ячеечной перколяции в данном случае является весьма упрощенной и не описывает адекватно многоступенчатых механизмов образования кристаллов сложной формы.

Авторами предложено моделировать процессы формо- и фазообразования ММЧ, связанные с появлением и модификацией их внутренних и внешних границ, на основе задания параметра связности. В рамках модели клеточных автоматов каждая клетка имеет определенный размер и является пространственным кубом, количество атомов в котором изменяется в процессе диффузии. Соответственно, изменяется свободный объем и пространственная связность с соседними клетками автомата. Наличие связности по трем направлениям анализируется на каждом шаге построения модели диффузии путем сравнения коэффициента связности с пределами перколяции. Для идентификации кластеров и определения порога перколяции классический алгоритм Хошена-Копельмана [2] был модифицирован. Результаты моделирования показали, что трехмерный предел перколяции задает предельное значение свободного объема, при котором вещество клетки находится в конденсированном состоянии внутри частицы, двумерный определяет предельное значение свободного объема, при котором клетка находится в связном состоянии на поверхности частицы, при этом поверхность может быть как внешней, так и внутренней. В случае, когда значение свободного объема превышает предел трехмерной перколяции для внутренних клеток, высока вероятность зарождения поры, которая моделировалась появлением внутренней границы и стока вакансий. Полученные результаты соответствуют экспериментальным данным.

Работа выполнена по заданию МО в рамках тем. плана ун-та № 01.2.00 951120.

Литература.

1. *Stauffer D., Aharony A.* Introduction to Percolation Theory. Taylor & Francis, 1992.
2. *Hoshen J., Kopelman R.* Percolation and cluster distribution // Phys. Rev. B. Vol. 14, № 8, 1976, pp. 3438-3445.