

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПОРООБРАЗОВАНИЯ В НЕРАВНОВЕСНЫХ МАЛЫХ ЧАСТИЦАХ НА ОСНОВЕ МЕТОДА ЯЧЕЕЧНОЙ ПЕРКОЛЯЦИИ

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 порообразования в неравновесных малых частицах (МЧ), получаемых путем осаждения из газовой фазы или на начальных этапах электрокристаллизации, актуально как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения. Образование в частицах пор или полостей является важным процессом, влияющим на свойства МЧ. Процессы получения нано- и микрочастиц являются существенно неравновесными. Существенно неравновесной и нестабильной является и структура частиц, образующихся в таких процессах. Эволюция частиц сопровождается структурной релаксацией, изменением их формы и порообразованием. Однако требования, предъявляемые в настоящее время к технологиям получения нано- и микрообъектов, предполагают стабильность (метастабильность) таких объектов и их свойств при определенных условиях в течение заданных промежутков времени. Моделирование структурообразования МЧ является важным инструментом в исследовании данных процессов. Для моделирования порообразования МЧ 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 МЧ моделировался на основе метода клеточных автоматов. В рамках данного метода применялась модель ячеечной перколяции, уточненная авторами на основе задания параметра связности. Объединение метода клеточных автоматов и перколяционной модели позволило описать процессы формо-, поро- и фазообразования в МЧ.

Авторами разработаны перколяционные модели, уточненные на основе задания параметра связности и реализованные на плоских квадратной, треугольной и пространственных кубической и гексагональной решетках. Модели позволяют анализировать наличие связности по одному, по двум и по трем направлениям. Результаты двумерного моделирования могут быть использованы при исследованиях процессов порообразования в различных покрытиях и пленках. Трехмерные модели могут применяться для изучения механизмов порообразования в объемных материалах. Работа выполнена по заданию МО в рамках тем. плана ун-та № 01.2.00 951120.

Литература.

1. Базаров И.П. Термодинамика. — М.: Высшая школа, 1991.
2. Stauffer D., Aharony A. Introduction to Percolation Theory. Taylor & Francis, 1992.