

# Том 11, № 3 (2009)

## Содержание

### Математическое моделирование физико-химических процессов

Моделирование кинетики кластеров повреждений в нагруженных материалах.

*Д. В. Алексеев, Г. А. Казунина* 283-288

Математическое моделирование движения пузырька в потоке жидкости около нагретой поверхности металла.

*С. С. Макаров, В. Б. Дементьев, Е. В. Макарова* 289-296

Исследование деформированного состояния  $\alpha$ -железа методом молекулярной динамики.

*И. Л. Нагорных, И. Н. Бурнышев, В. В. Бесогонов* 297-302

### Кластеры, кластерные системы и материалы

Применение углеродных нанотрубок в составе разрушающегося теплозащитного покрытия.

*А. В. Вахрушев, К. В. Сермягин* 303-309

Наноструктурные особенности биокремния морского происхождения.

*А. Н. Галкина, С. С. Вознесенский, Ю. Н. Кульчин, А. А. Сергеев* 310-314

Синтез, морфология и каталитические свойства наночастиц кобальта.

*Xiao-hong JIANG, Rui-qing WANG, Wen-xian WEI, Lu-de LU, С. В. Чуйко* 315-321

Синтез и оценка каталитической активности нанодисперсного оксалата меди.

*Xiao-hong JIANG, Li-fen CHEN, Wen-xian WEI, Lu-de LU, С. В. Чуйко* 322-328

О способе координации диметилформамида гадолинием (III) в смешаннолигандном комплексе.

*М. А. Шумилова, А. В. Трубачев* 329-333

### Межфазные слои и процессы взаимодействия в них

In situ ДОС и ХПЭЭ исследования десорбции и роста в системе Si(111)/2D Mg<sub>2</sub>Si/Si.

*К. Н. Галкин, С. А. Доценко, Н. Г. Галкин* 334-344

Исследование поверхностных гетерослоев методом локальной электрохимической импедансной спектроскопии.

*А. С. Гнеденков, С. Л. Синебрюхов, Д. В. Маишталяр, С. В. Гнеденков* 345-352

- Электрические свойства двумерных слоев железа на упорядоченных фазах Si(111)7x7 и Si(111)2x2-Fe.  
*Д. Л. Горошко, Д. В. Фомин, А. С. Гуральник, Н. Г. Галкин* 353-360
- Пленочная технология полупроводниковых наноматериалов.  
*П. Н. Крылов, И. В. Федотова* 361-373
- Влияние импульсного лазерного отжига на рост кремния и оптические свойства гетероструктуры Si/ $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>/Si, изготовленной методами ионной имплантации и молекулярно-лучевой эпитаксии.  
*Е. А. Чусовитин, С. В. Ваванова, И. А. Петрушкин, Н. Г. Галкин, Р. М. Баязитов, Р. И. Баталов, Г. Д. Ивлев, Т. С. Шамирзаев* 374-384

### **Квантово-химические расчеты**

- Теоретические расчеты электронной структуры дихлоридов кадмия и свинца.  
*А. И. Калугин, В. В. Соболев, Е. В. Баранова, И. В. Востриков, В. Вал. Соболев* 385-390
- Зондирование нижних зон проводимости графита с помощью характеристических потерь электронов.  
*В. В. Соболев, Е. А. Антонов, В. Вал. Соболев* 391-397
- Влияние активных частиц на структуру полярных жидкостей.  
*Н. В. Хохряков, В. И. Кодолов* 398-402
- Квантово-механический расчет структуры, электронных свойств и стабильности наночастиц оксида титана.  
*А. Н. Чибисов, А. О. Бизюк* 403-407

### **О конференциях**

- XII ЕВРОПЕЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ ПО СНИЖЕНИЮ ГОРЮЧЕСТИ ПОЛИМЕРОВ  
*Г. Е. Заиков, Л. Л. Мадюскина, М. И. Арцис* 408-410

УДК 539.375:51.72

**МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ КЛАСТЕРОВ ПОВРЕЖДЕНИЙ  
В НАГРУЖЕННЫХ МАТЕРИАЛАХ**

АЛЕКСЕЕВ Д.В., КАЗУНИНА Г.А.

Кузбасский государственный технический университет, 650000, г. Кемерово,  
ул. Весенняя, 28

**АННОТАЦИЯ.** При помощи моделирования кластерной структуры элементарных повреждений вероятностным клеточным автоматом исследовано поведение случайных процессов «число элементарных повреждений» и «число кластеров элементарных повреждений». Показано, что на временах, превышающих  $T/T_{fm} \approx 0,7$ , в поведении корреляционных функций этих случайных процессов наблюдаются особенности, которые можно интерпретировать как предвестники перехода эволюции системы на стадию, непосредственно предшествующую разрушению.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** кластеры элементарных повреждений, вероятностный клеточный автомат, кинетика накопления повреждений.

**ВВЕДЕНИЕ**

Прогнозирование разрушения нагруженных материалов по характеристикам импульсной эмиссии (электромагнитной, акустической) сталкивается со следующей принципиальной трудностью. Случайный процесс импульсной эмиссии несет информацию о кинетическом процессе накопления повреждений, фиксирует образование новых, и «прорастание» уже имеющихся повреждений, однако, характеристики импульсной эмиссии не несут непосредственной информации о пространственном распределении элементарных повреждений, тогда как для прогнозирования разрушения именно пространственное распределение повреждений представляет главный интерес [1–2]. Кинетика накопления повреждений также остается еще недостаточно изученной. Например, при описании накопления повреждений до сих пор используются модели случайных процессов с независимыми приращениями (пуассоновский, другие марковские процессы), хотя при помощи статистики нормированного размаха Херста для импульсной электромагнитной эмиссии нагруженных материалов установлено, что процесс накопления повреждений нельзя считать марковским [3–4].

В настоящее время для исследования процесса накопления повреждений и их пространственного распределения широко используются разнообразные методы компьютерного моделирования, например: моделирование кластеров, случайно размещаемых трещин - отрезков с учетом их ориентации [5, 6], проращивание затравочных дефектов на целочисленной решетке методами случайного блуждания [7], и т. п.

В то же время, по данным акустической эмиссии известно, что микротрещины в нагруженных материалах образуются преимущественно на мезоскопическом уровне, а их средний размер составляет  $(1,4 - 28,4) \cdot 10^{-6}$  м, поэтому процесс перехода разрушения на макроскопический уровень может быть описан без обращения к подробностям динамики отдельных элементарных актов, опираясь только на геометрические характеристики кластерной структуры. Простейшими моделями такого типа являются перколяционные модели [5], в которых переход на стадию макроскопического разрушения характеризуется единственным параметром – концентрацией разорванных связей. Важно, что перколяционные кластеры повреждений имеют сложную хаотическую структуру и описываются геометрически как фракталы – геометрические объекты с дробной размерностью [9], что согласуется с экспериментальными исследованиями структуры поверхности разрушения реальных материалов. Однако, как отмечено в [10], более реалистичная перколяционная