

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 α -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. Шуилова, 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 Mg₂Si/Si.

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

Исследование поверхностных гетерослоёв 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. <i>Д. Л. Горошко, Д. В. Фомин, А. С. Гуральник, Н. Г. Галкин</i>	353-360
Пленочная технология полупроводниковых наноматериалов. <i>П. Н. Крылов, И. В. Федотова</i>	361-373
Влияние импульсного лазерного отжига на рост кремния и оптические свойства гетероструктуры Si/ β -FeSi ₂ /Si, изготовленной методами ионной имплантации и молекулярно-лучевой эпитаксии. <i>Е. А. Чусовитин, С. В. Ваванова, И. А. Петрушкин, Н. Г. Галкин, Р. М. Баязитов, Р. И. Баталов, Г. Д. Ивлев, Т. С. Шамирзаев</i>	374-384

Квантово-химические расчеты

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

О конференциях

XII ЕВРОПЕЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ ПО СНИЖЕНИЮ ГОРЮЧЕСТИ ПОЛИМЕРОВ <i>Г. Е. Заиков, Л. Л. Мадюскина, М. И. Арцис</i>	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 $T/T_{fin} \approx 0,7$, 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], прорастивание 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