

ОТЗЫВ

на диссертацию Быкова Николая Юрьевича на тему “Моделирование процессов образования и роста наноразмерных кластеров в разреженных струйных течениях”, представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.02.05 – “Механика жидкости, газа и плазмы”.

Диссертация Быкова Н.Ю. “Моделирование процессов образования и роста наноразмерных кластеров в разреженных струйных течениях” посвящена актуальным вопросам разработки моделей и методик расчета течений с процессами конденсации, а также исследованию различных классов течений, в объеме которых протекают процессы кластеризации.

Центральное внимание в диссертации отведено построению моделей конденсации для метода прямого статистического моделирования (ПСМ). Следуя разным уровням описания, автор разработал как модели, основанные на выводах классической теории нуклеации и ее модификаций, так и модели, базирующиеся на кинетическом подходе. Предлагаемые модели строятся на основе современных представлений о физике процесса кластеризации с учетом особенностей выбранного численного метода расчета разреженных течений. Наиболее перспективным в настоящий момент считается кинетический подход, предполагающий получение вероятностей протекания реакций роста/распада кластеров как функции индивидуальных параметров сталкивающихся/распадающихся частиц. Предложенная диссертантом кинетическая модель позволяет рассчитать в рамках ПСМ вероятности процессов мономолекулярного/столкновительного распада кластеров и ассоциации частиц при взаимных столкновениях. Разработанный комплекс моделей может быть использован для расчета разреженных и околоконтинуальных течений атомарных/молекулярных газов с процессами конденсации в объеме.

С использованием разработанных математических моделей и алгоритмов диссертант провел численное исследование нескольких классов задач с процессами образования кластеров. В работе рассмотрено стационарное расширение атомарного и молекулярного паров в вакуум, стационарное расширение паров металла при наличии несущего инертного газа, нестационарное расширение пара металла в вакуум с испаряющейся плоской поверхностью. Результаты моделирования и их анализ позволяют существенно расширить понимание особенностей протекания процессов кластерообразования в разреженных течениях, степень влияния процессов конденсации на параметры течения и необходимость их учета при решении тех или иных задач прикладной динамики разреженного газа.

В работе детально исследовано влияние процессов образования кластеров на газодинамические параметры течений. На примере стационарного истечения паров меди/воды из источников, давление и температура газа в которых поддерживаются постоянными, показано, что процесс кластеризации оказывает существенное влияние на параметры течения при объемной доле кластеров более 1%. Такие режимы соответствуют более плотным течениям, характеризуемым малыми числами Кнудсена ($Kn < 0.01$).

bx 09/2 - 300 от 24.12.18

Влияние процесса конденсации сводится к росту поступательной температуры и скорости пара, более быстрому снижению плотности в приосевой области течения. Для разреженных режимов ($Kn > 0.01$) объемная доля кластеров в поле течения незначительна (менее 1%) и процесс кластерообразования не влияет на картину движения пара. Степень разреженности течения определяет и характерные режимы кластерообразования в системе источник-струя. Диссертантом установлено три режима кластеризации: кластеры, наблюдаемые в струе, формируются в основном внутри источника, процессом конденсации в струе можно пренебречь (режим характерен для разреженного течения); кластеры в струе формируются как непосредственно в самой области расширения, так и являются следствием процесса конденсации внутри источника; процессом формирования кластеров в источнике можно пренебречь, основным является процесс конденсации в расширяющейся струе. В ходе исследования получены важные для практического применения данные о самих кластерах – скоростях и внутренних температурах, а также характерных масштабах протекания процесса конденсации. Теоретически подтверждены полученные экспериментально законы подобия для оценки среднего размера кластеров в дальнем поле расширяющихся в вакуум струй.

С точки зрения технологий синтеза наноструктурных пленок методом вакуумного газоструйного осаждения значимыми являются результаты автора, полученные в ходе анализа течения кластеризующегося пара металла в смеси с несущим газом. Диссертант исследовал влияние инертного газа на процесс формирования кластеров в разреженных струях. Показано, что наличие инертного газа способствует интенсификации процесса кластерообразования и увеличивает средний размер кластера в струе. Формирование малых субнаноразмерных кластеров в объеме струи может влиять на динамику роста наноразмерной пленки и учет данного процесса важен для оптимизации соответствующих вакуумных технологий.

Для практического применения важными представляются и выводы, полученные автором в ходе решения задачи о нестационарном расширении паров металла с нагретой поверхности в вакуум с учетом процессов конденсации в объеме. Данная задача моделирует нестационарную струю, испаряемую с плоской поверхности металлической мишени под воздействием наносекундных импульсов лазерного излучения умеренной интенсивности. Автором выявлены характерные режимы кластеризации, установлено влияние процесса конденсации на осевую фокусировку лазерной струи.

В работе выполнен большой объем компьютерных расчетов. Существенная часть вычислений проведена на суперкомпьютере “Торнадо” в СКЦ “Политехнический”. С целью повышения эффективности численного моделирования автор диссертации успешно применил не только известные параллельные алгоритмы расчета, но также предложил собственный оригинальный алгоритм прямых статистически независимых испытаний для моделирования нестационарных течений методом ПСМ. Следует обратить внимание, что все используемое для проведения численных исследований программное обеспечение разработано непосредственно автором диссертации. Большое место диссертант уделил проверке корректности работы программ путем сравнения расчетных данных с аналитическими решениями для предельных случаев и имеющимися экспериментальными данными.

