

ОТЗЫВ

члена диссертационного совета 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

Диссертационная работа посвящена актуальным проблемам исследования характера формирования наноразмерных кластеров в разреженных струях. Процессы конденсации играют важную роль в изучении напыления кластерных покрытий. В основе методов синтеза порошков лежит технология истечения струй паров металла в вакуум.

Диссертация производит весьма благоприятное впечатление, здесь помещены результаты многолетних исследований по численному моделированию на основе метода статистического моделирования (ПСМ) различных структурных кластерных образований в струях при истечении газа и паров металла и при лазерной абляции.

Диссертационная работа состоит из Введения, шести глав содержательной части, Заключения и Списка литературы. Во Введении указывается, в чем состоит актуальность работы, определяется ее основная цель, конкретизируются задачи, отмечается новизна и практическая ценность, говорится о подтверждении достоверности полученных результатов, четко отмечен личный вклад автора в совместных статьях, формулируются положения, выносимые на защиту, приведены сведения об апробации работы, о структуре диссертации, о количестве публикаций, которое удовлетворяет необходимым требованиям, кратко определяется содержание диссертационной работы.

В главе 1 дается краткий обзор численных методов, используемых в динамике разреженных газов, основное внимание сосредоточено на применяемом автором методе прямого статистического моделирования (ПСМ). Представлен обзор литературы, посвященный моделированию конденсации в струях на основе ПСМ. Описываются модели столкновений и энергообмена, а также химических реакций, используемые в ПСМ. Определены требования к моделям образования и роста кластеров.

Во главе 2 подробно обсуждается предложенная кинетическая модель конденсации. Здесь вероятности роста (и распада) кластеров выражаются через константы соответствующих реакций. Важно, что данная кинетическая модель может быть использована при расчете неравновесных течений. Также представлена классическая модель нуклеации и ее допустимая модификация, не использующая понятие поверхностного натяжения кластера. Являясь однотемпературной, она тем не менее позволяет проводить адекватное моделирование, что показало сравнение с опытными

by 09/2-3 от 09.01.19

данными по изучению истечения водяного пара и паров меди. Также рассматриваются параллельные алгоритмы, предложенные для изучаемых проблем методом ПСМ.

В главах 3, 4 и 5 приводятся многочисленные результаты расчетов стационарных задач об истечении в вакуум различных струй. Соответственно здесь рассматривались пары воды, пары металла (меди) и смесь благородного металла и инертного газа. Представлен подробный анализ полученных данных.

Для струй молекулярного газа (паров воды) изучалось осесимметрическое течение через отверстие в бесконечно тонкой стенке от источника с постоянными давлением и температурой, а также течение от испаряющейся сферической поверхности. Расчеты проводились для переходных и околоконтинуальных режимов течения. Диапазон температур 373-493 К. Важно, что обнаружено существенное отличие внутренних температур кластеров и от поступательной температуры пара, и от внутренней температуры мономеров. Показан эффект «замораживания» мольных долей кластеров, что проявляется на некотором расстоянии от источника.

Для струйного осесимметрического истечения паров меди через круглое отверстие задача ставилась аналогично изучаемой при струйном истечении водяного пара. Температура варьировалась в пределах 2500-2700 К. Параллельный алгоритм основан на статической декомпозиции расчетной области. Результаты относятся к переходному и к близкому к сплошнородному режимам. Для чисел Кнудсена $Kn > 0.01$ показана слабая кластеризация. При $Kn < 0.01$ объемная доля кластеров в струе составляет 1% и более, процесс кластеризации влияет на газодинамические параметры течения. Было обнаружено, что и в переходном, и в сплошнородном режимах проявляется неравновесность течения, обусловленная различием внутренней температуры кластеров и поступательной температуры пара. Показано, что и ниже так называемой границы Хагены (при достаточном разрежении) все же присутствуют кластеры со средним размером 2.2 мономера.

При изучении истечения смеси гелий-серебро получены интересные результаты, которые могут получить практическое применение, поскольку изучаемые течения входят в комплекс методов, используемых для напыления наноструктурных пленок. При подаче данного инертного газа в источник наблюдалось изменение газодинамических параметров в струе. Показано, что добавление гелия в источник приводит к росту общего давления и увеличению потока кластерообразующего металла через выходное отверстие на 40%. Наблюдалось ускорение атомов серебра в струйном течении. При режиме течения с большим разрежением наблюдался следующий эффект: скорости атомов гелия и атомов серебра отличались друг от друга. В данной задаче изучались варианты с различной

