

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

6/ 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 окколоконтинуальных 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 сплошносреднему 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 сплошносреднем 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 напыленияnanoструктурных 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

геометрией. Также, как в предыдущих трех частях работы рассматривалось истечение в вакуум из источника с постоянными давлением и температурой через отверстие в бесконечно тонкой стенке. Также исследовалось истечение от реального источника, соответствующего методам осаждения пленок благородных металлов. Численное моделирование важно, поскольку процессы синтеза пленок еще недостаточно изучены. Найдена примерная температурная граница (1400 К), для которой при минимальном расходе гелия кластеры серебра за срезом сопла не образуются. Граница начала образования кластеров при отсутствии подачи гелия соответствует примерно 1700 К. Подача гелия приводит к увеличению степени кластеризации. При разрежении по числу Кнудсена $Kn > 0.01$ основным является процесс кластеризации в источнике с последующим движением кластеров в струе. Причем формирования кластеров в области расширения струи за срезом сопла фиксируется (замораживается) на расстоянии от источников нескольких радиусов выходного отверстия.

В главе 6 развита модель и построен алгоритм для изучения нестационарного процесса лазерной абляции импульсного излучения наносекундного диапазона. Рассматриваемая модель состоит из двух частей: тепловой, описывающей абсорбцию лазерного излучения мишенью, ее нагрев и испарение, и газодинамической, описывающей разлет пара с учетом кластеризации. Соответствующее нестационарное численное моделирование позволяет подробно изучать процессы порядка наномасштабов. Расчеты показали хорошее совпадение с экспериментом по некоторым параметрам, в частности, в задаче моделирования времепролетных распределений атомов в нереагирующем паре. Важно, что впервые продемонстрирован неравновесный характер течения, связанный с отличием поступательных температур мономеров и кластеров. Найдено, что влияние процесса конденсации на газодинамические параметры является слабым при массовой доле кластеров в струе меньше 3%.

Работа выполнена на высоком уровне, можно сделать лишь небольшие замечания.

В диссертации описывается одномерное сферическое расширение пара в вакуум от испаряющейся поверхности. Но не учтены некоторые известные работы, например В.И. Жук, В.А. Рыков. Течение разреженного газа от сферического источника // ЖВМ и МФ, 1976, Т.16. №3. С. 738-749, где авторы решали задачу при малых числах Кнудсена.

На некоторых рисунках приводится сравнение с экспериментами. Во многих случаях совпадение очень хорошее. Но, например, на рис. 3.9. приведена зависимость конечной доли димеров от температуры. При высокой температуре при хорошем качественном соответствии расхождение между опытными данными и расчетами достигает десятков процентов. Не пояснено, чем это вызвано: ошибкой экспериментов,

характером выбранных физических моделей кластеризации, погрешностями вычислений или некоторым сочетанием этих факторов.

Тема работы – течения разреженных газов. Однако результаты в основном относятся к течениям с числом Кнудсена $\text{Kn}=0.01$ и меньше (хотя есть расчеты и вплоть до $\text{Kn}=0.1$). В главе 1 даже при $\text{Kn}=10^{-3}$ степень кластеризации в струе может оказаться малой (доли процентов), поэтому существенна еще меньшая разреженность. Хотелось бы увидеть заключение, что вне переходного режима ($\text{Kn} > 0.1$) для данных классов течений кластеризация незначительна. Но неравновесность для всех режимов играет большую роль.

Высказанные замечания не влияют на весьма высокую оценку диссертации. Диссертационная работа представляет собой законченный научный труд. Можно сказать, что решен ряд крупных задач. На основе кинетического подхода и модифицированных известных моделей нуклеации построен комплекс алгоритмов для прямого численного статистического моделирования. С их помощью изучен ряд струйных течений разреженного газа и паров металлов с кластеризацией, что важно и теоретически, и в практическом смысле.

Работы автора хорошо известны специалистам. Статьи Н.Ю. Быкова опубликованы в авторитетных международных и отечественных журналах, в трудах различных конференций. Особо отметим, что его работы были представлены на всех международных симпозиумах по динамике разреженного газа последних лет (проходящего раз в два года): в Сарагосе (Испания) в 2012 г., в Сиане (Китай) в 2014 г., в Виктории (Канада) в 2016 г. и в Глазго (Великобритания) в 2018 г.

Диссертация Быкова Николая Юрьевича на тему: «Моделирование процессов образования и роста наноразмерных кластеров в разреженных струйных течениях» соответствует основным требованиям, установленным Приказом от 01.09.2016 № 6821/1 «О порядке присуждения ученых степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», соискатель Быков Николай Юрьевич заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.02.05 – механика жидкости, газа и плазмы. Пункт 11 указанного Порядка диссертантом не нарушен.

Член диссертационного совета
доктор физико-математических наук,
профессор, главный научный сотрудник
Вычислительного центра им. А.А Дородницына
Федерального исследовательского центра
«Информатика и управление» РАН

Аристов Владимир Владимирович

29.12.2018

