

## ОТЗЫВ

председателя 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

Моделирование течений разреженного газа с учетом образования кластеров необходимо для многих современных приложений: технологий синтеза кластеров и напыления кластерных покрытий, нашедших применение в биомедицине, аэрокосмической технике, машиностроении, легкой и пищевой промышленности; для оценки параметров дисперсной фазы в дальнем поле струй ракетных двигателей; для интерпретации астрономических наблюдений параметров окolloядерных атмосфер комет. Для описания течений разреженных газов в последние годы наиболее подходящим инструментом стал метод прямого статистического моделирования (ПСМ). Он позволяет описывать процессы, происходящие при сильных отклонениях от равновесия, моделировать течения газов в условиях, когда подходы механики сплошной среды неприменимы. Благодаря росту вычислительных мощностей и развитию современных высокопроизводительных методов вычислений метод ПСМ нашел применение при расчете входа космических аппаратов в верхние слои атмосферы, моделировании течений в микро- и нано-электромеханических устройствах, применяемых в электронике, машиностроении, метрологии, медицине и многих современных технологиях. Теоретические основы метода ПСМ достаточно подробно разработаны для описания процессов, происходящих при столкновениях атомов и молекул: обмена импульсом и энергией, химических реакций. При этом теоретические модели, описывающие процессы образования и роста кластеров, в настоящее время развиты недостаточно. Исследование, представленное в диссертации, направлено на заполнение данного пробела: построение теоретических моделей процессов кластерообразования и их применения для расчета различных течений. Таким образом, тема исследования, несомненно, является актуальной.

### Основные результаты

В первой главе диссертации проведен подробный обзор теоретических моделей для описания химических реакций и процессов образования и роста кластеров, используемых в методе ПСМ. Отмечены недостатки существующих моделей процессов кластерообразования, сформулированы основные требования, предъявляемые к моделям. В частности, модель должна учитывать отклонение от термического равновесия, описывать процессы энергообмена, сопровождающие реакции ассоциации/распада частиц, включать прямые и обратные реакции; вероятности процессов не должны зависеть от макропараметров течения; в предельных случаях модель должна воспроизводить известные законы; модель должна обеспечивать удовлетворительное совпадение с экспериментальными данными.

С учетом сформулированных критериев во второй главе предложены модели конденсации, основанные как на кинетическом подходе, так и на модификациях

09/2 - 308 от 28.12.2018

классической теории нуклеации. Кинетическая модель конденсации использует ТСЕ (total collision energy) подход, предложенный Г.Бердом для моделирования химических реакций в методе ПСМ. Основная идея – выразить вероятности процессов роста/распада кластеров через параметры констант скорости соответствующих реакций, которые считаются известными из эксперимента или траекторных расчетов. Преимущества кинетической модели: она не требует вычисления поступательной температуры пара в ячейке и может быть использована для расчета термически неравновесных разреженных течений. Другая модель, предложенная в диссертации, основана на модификации классической теории нуклеации. Ее преимущество состоит в том, что она не использует понятие поверхностного натяжения кластера. Однако модель сохраняет часть недостатков классической теории, в том числе является однотемпературной. Построен алгоритм для расчетов методом ПСМ разреженных течений с процессами образования и роста кластеров, проведена верификация кинетической модели и алгоритма расчета на примере решения задач об истечении в вакуум струй водяного пара и паров меди. Показано хорошее согласие расчетов с экспериментом.

Разработанные модели использованы для численного исследования стационарных разреженных струй атомарного (меди, серебро) и молекулярного (вода) паров, расширяющихся в вакуум через отверстие в бесконечно тонкой стенке из источников, давление и температура в которых поддерживаются постоянными. Исследование выполнено в широком диапазоне чисел Кнудсена. Обнаружены заметные отклонения от равновесия как в разреженных, так и в более плотных течениях; показано, что с уменьшением числа Кнудсена процесс образования кластеров может оказывать существенное влияние на газовую динамику. Предложена классификация режимов течения в зависимости от степени разреженности газа. Проведен анализ закона подобия Хагены, согласно которому средний размер частиц является функцией давления и температуры пара в источнике и диаметра выходного отверстия. Для разреженной струи пара меди данный закон подобия в целом выполняется, однако показано, что нижняя граница параметра подобия Хагены для оценки отсутствия процессов формирования кластеров в струйных течениях достаточно условна.

Исследовано истечение разреженной смеси пара серебра с инертным газом (гелий) в вакуум из источника с реальной геометрией, используемой в методах осаждения пленок благородных металлов. Установлена немонотонная зависимость расхода пара металла через выходное отверстие источника от расхода несущего газа. Определены оптимальные режимы подачи инертного газа; установлен диапазон параметров, при котором начинается процесс формирования кластеров непосредственно в расширяющейся в вакуум струе.

Разработана оригинальная модель и алгоритм для расчета нестационарного процесса лазерной абляции материалов импульсами излучения умеренной интенсивности наносекундного диапазона. Модель включает в себя тепловую часть, основанную на решении нестационарного уравнения теплопроводности, и газодинамическую часть, основанную на моделировании методом ПСМ течения от испаряющейся поверхности с процессами формирования кластеров в объеме струи. Впервые продемонстрирован ряд эффектов для нестационарной лазерной струи: показан односкоростной режим течения

мономеров и субнаноразмерных кластеров в струе, продемонстрированы эффекты неравновесности течения, связанные с процессом кластерообразования.

Перечисленные выше результаты являются **новыми**. Степень обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации, не вызывает сомнений. **Достоверность** полученных результатов обоснована тем, что разработанные модели и алгоритмы были верифицированы путем сопоставления результатов с экспериментальными данными и результатами моделирования других авторов, получено хорошее качественное и количественное совпадение результатов. В предельных случаях решения совпадают с известными аналитическими решениями.

**Теоретическая и практическая значимость** результатов состоит в разработке комплекса теоретических моделей и алгоритмов для описания течений с учетом образования и роста кластеров. Предложенный комплекс может быть использован для расчета широкого круга разреженных течений в областях вакуумных технологий и аэрокосмической техники, а также при исследовании атмосфер комет и планет. Разработанная модель импульсной лазерной абляции может быть использована в современных технологиях напыления пленок.

Основные результаты, выносимые на защиту, прошли серьезную апробацию и полностью опубликованы в рецензируемых изданиях.

По содержанию диссертации можно сделать следующие замечания:

1. В кинетической теории коэффициент (константа) скорости процесса определяется как сечение столкновения, осредненное с некоторым (чаще всего максвелловским) распределением частиц по скорости/энергии:

$$K(T) = \int f(g, E) g^3 \sigma(g, \chi) dg$$

$f$  – функция распределения по скорости и внутренней энергии,  $g$  – модуль безразмерной относительной скорости сталкивающихся частиц,  $E$  – безразмерная внутренняя энергия,  $\sigma$  – сечение столкновения,  $\chi$  – угол рассеяния; выражение записано с точностью до константы перед интегралом. В предложенной автором модели сечение, в свою очередь, представляется как сечение упругого столкновения, умноженное на вероятность неупругого процесса. При выводе соотношения (2.22) путем некоторых преобразований коэффициент скорости реакции сводится к произведению вероятности, осредненной с максвелловским распределением по энергии (скорости),  $\bar{p}$ , и величины  $\bar{\sigma}c$ , представляющей собой осредненное по скоростям сечение упругого столкновения. То есть, по сути, интеграл от произведения функций, зависящих от скорости, сводится к произведению интегралов от этих функций. Такой переход в общем случае некорректен и требует обоснования. Возможно, при выводе ТСЕ модели Г. Берд приводил какие-то доводы, но в диссертации нет обсуждения пределов применимости данного перехода. Было бы полезно дать комментарий о предположениях, использованных при выводе выражения (2.22) и соответствующих выражений для других реакций. Возможно, более корректным

- методом построения сечения (вероятности) процесса было бы применение обратного преобразования Лапласа непосредственно к выражению (2.15).
2. Некоторые предположения и формулы требуют дополнительного обоснования или хотя бы заслуживают комментария, например,
    - стр. 56: «вероятность ассоциации мономера и кластера не зависит от относительной скорости частиц, а определяется только размером кластера»;
    - предположение о полностью диффузном отражении кластеров с полной аккомодацией энергии (стр. 98, 171, 184);
    - следует прокомментировать, как получены формулы (1.9), (2.31), (2.35). В частности, (1.9) существенно используется при моделировании.
  3. Диапазон чисел Кнудсена, рассмотренный в большинстве задач, достаточно близок к континуальному режиму. Хотелось бы понять, насколько целесообразно применять метод ПСМ в данных условиях. Возможно ли применение более экономичных с вычислительной точки зрения методов, основанных на континуальном подходе? Этот вопрос заслуживает обсуждения.
  4. Очень интересный результат диссертационной работы – классификация режимов течения в зависимости от разреженности и параметров модели конденсации. Для практических приложений было бы полезно составить «карту» режимов, позволяющую делать приближенные оценки режима течения, не решая задачу.
  5. Есть ряд замечаний стилистического и редакционного плана:
    - довольно сложно анализировать рисунки; на части рисунков есть не все обозначения; при обсуждении эффекта разреженности было бы полезно указывать число Кнудсена на рисунках или хотя бы в подписях к рисункам; вместо номеров кривых можно было бы использовать сокращенные названия моделей;
    - некоторые обозначения сначала появляются в тексте (например, параметр подобия Хагены в табл. 4.1), а поясняются заметно позже. Параграф 4.5 было бы уместно поместить в начале главы 4 (по крайней мере, запись закона подобия и определения параметров);
    - есть погрешности в пунктуации.
  6. В диссертации отсутствует пункт, явно выделяющий результаты, полученные автором в ряде совместных работ. Это несколько затрудняет оценку личного вклада автора.

Перечисленные недостатки не снижают научной ценности работы в целом; часть замечаний может рассматриваться как рекомендации для определения направлений дальнейшей работы автора. Диссертация является законченной научно-квалификационной работой, вносящей заметный вклад в развитие методов моделирования течений разреженных газов с учетом образования кластеров, содержит новые результаты, представляющие научный и практический интерес. Работа имеет продуманную структуру, исследования обладают внутренним единством, выполнены на высоком научном уровне.

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.

Председатель диссертационного совета

Доктор физ.-мат. наук, профессор,  
профессор кафедры  
гидроаэромеханики СПбГУ



Кустова Елена Владимировна

28.12.2018