

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”

Актуальность выполненного исследования.

В настоящее время происходит интенсивное развитие технологий синтеза нанокластеров и напыления наноразмерных покрытий. Интерес к подобным технологиям вызван как разнообразием новых физических эффектов, наблюдающихся в нанокластерах и наноразмерных покрытиях, так и перспективами использования наноструктурированных материалов в твердотельной наноэлектронике.

Одними из наиболее эффективных методов напыления покрытий являются импульсная лазерная аблация (ИЛА) и метод газоструйного напыления. Для оптимизации процессов, происходящих при вышеприведенных технологиях напыления и синтеза, необходимо изучение механизма формирования кластеров. Вопрос о формировании кластеров имеет фундаментальное значение и на данный момент времени полностью не решен. Для его решения необходима разработка моделей, алгоритмов и программ расчета, адекватных физике явлений, происходящих при данных технологических процессах. Влияние процесса кластерообразования на параметры разреженных струй также не является полностью решенным. В связи с этим, необходимы целенаправленные исследования, посвященные решению данных вопросов.

Настоящая диссертационная работа как раз и посвящена теоретическому исследованию поставленных проблем, что делает ее весьма актуальной и своевременной.

Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения и списка литературы из 266 наименований, изложена на 277 страницах, включает 86 рисунков и 9 таблиц. Во введении обоснована актуальность темы, сформулированы цели и задачи работы, основные научные положения, выносимые на защиту, практическая важность работы. В первой главе приведено обоснование выбора метода прямого статистического моделирования (ПСМ), использованного для расчета разреженных струйных

09/2-307 от 27.12.2018

течений, и кратко изложены основы ПСМ. Проведен анализ работ, связанных с моделированием в рамках ПСМ. Во второй главе предложена оригинальная кинетическая модель конденсации для метода ПСМ, описывающая реакции образования / распада димеров и последующего роста / распада кластеров. В последующих главах представлены результаты ПСМ расчетов истечения паров воды в вакуум, стационарного истечения паров меди в вакуум, разреженного течения пара металла в инертном газе и моделирование расчета течений, возникающих при ИЛА. В заключении сформулированы наиболее важные результаты и выводы работы.

Наиболее важные научные результаты работы следующие:

- (1) Показано, что для разреженных режимов течения (характерные числа Кнудсена $Kn > 0.01$) объемная доля кластеров в расширяющихся в вакуум струях составляет менее 1%. Процесс кластеризации не оказывает существенного влияния на параметры течения. Течение является неравновесным с точки зрения отличия поступательных и внутренних температур кластеров от температуры пара. Основным размером наблюдаемых кластеров является димер.
- (2) Установлено, что для более плотных режимов течения ($Kn < 0.01$) объемная доля кластеров в расширяющейся струе может превышать 1% и оказывать существенное влияние на параметры течения. Процесс образования кластеров, сопровождаемый выделением скрытой теплоты конденсации в поток, приводит к росту температуры и поступательной скорости пара и более быстрому падению плотности пара в струе. Скорости атомов и кластеров и их поступательные температуры приблизительно совпадают. Наблюдается неравновесность течения, связанная с отличием внутренней температуры кластеров от поступательной температуры пара.
- (3) Показано, что процесс образования кластеров замораживается на некотором расстоянии от источника, порядка нескольких радиусов выходного отверстия. Данное расстояние зависит от размера кластера и увеличивается с ростом числа мономеров в кластере.
- (4) Для разреженной струи пара меди установлено соответствие среднего размера наблюдаемых в струе кластеров закону подобия Хагены, согласно которому средний размер частиц является функцией давления и температуры пара в источнике и диаметра выходного отверстия.
- (5) Установлено, что при импульсной лазерной абляции скорости мономеров и формируемых кластеров в поле течения оказываются приблизительно

одинаковыми. Для разреженных режимов течение является неравновесным. При этом поступательные и внутренние температуры кластеров и поступательная температура пара мономеров различаются. Большая степень неравновесности наблюдается в областях, прилегающих к фронту расширяющегося пара. Установлено, что при объемной доли кластеров в поле течения менее 1% процесс кластеризации не оказывает влияния на газодинамические параметры нестационарной струи.

Практическая значимость результатов диссертации состоит в: разработанном автором комплексе моделей и алгоритмов расчета образования и роста кластеров в разреженных течениях для метода ПСМ, который может использоваться для численного решения широкого круга прикладных задач - для оптимизации параметров технологий синтеза кластеров и напыления кластерных покрытий, оценки параметров дисперсной фазы в дальнем поле струй ракетных двигателей, интерпретации астрономических наблюдений параметров околосидерных атмосфер комет. Полученные данные о количественном влиянии процесса образования и роста кластеров в поле течения на газодинамические параметры струи могут использоваться для построения приближенных методик расчета и оценки параметров наноразмерных кластеров, формируемых в разреженных струях, истекающих в вакуум. Разработанная модель импульсной лазерной абляции может быть использована в расчетах процессов синтеза кластеров и напыления пленок наносекундными импульсами лазерного излучения.

Обоснованность и достоверность выводов и заключений работы следует из использования автором известных математических методов и подходов, сравнением с имеющимися экспериментальными данными и с результатами расчетов, выполненных другими авторами с использованием метода ПСМ, проведенными внутренними тестами и сопоставлением с имеющимися аналитическими решениями для предельных случаев.

В качестве замечаний по диссертационной работе следует отметить:

- Автором рассматривается процесс димеризации, как тройная рекомбинация мономеров, в ходе которой третий мономер отводит избыточную энергию (стр. 49, 102, 145, 172, 218). При этом упускается из рассмотрения, что существует канал образования димеров из двух мономеров с испусканием фотона с энергией равной энергии перехода между двумя колебательными уровнями димерного состояния. В результате испускания фотона димер становится более устойчивым. Фотоны, испущенные димерами и кластерами, состоящими из более чем двух мономеров, могут быть поглощены другими

димерами и кластерами, что способствует установлению равновесной температуры в кластерном ансамбле, которая, в общем случае, будет отличаться от температуры поступательного движения. Аналогичное рассмотрение можно провести для вращательных степеней свободы димерных и кластерных состояний, которые могут испускать и поглощать фотоны соответствующих энергий. Автору необходимо было оценить вероятности этих процессов.

- Обратные реакции (реакции распада димера на два мономера, распад кластера) также могут происходить при поглощении фотонов. Эти каналы распада автором не рассматривались и их вероятности не оценивались. Учитывался только канал распада кластеров, связанный со столкновениями.

- В главе 6 автором исследовалось нестационарное истечение в вакуум паров металла от поверхности источника под действием короткого лазерного импульса. Было найдено, что скорости мономеров и кластеров растут почти линейно вдоль оси течения струи (рис.6.11, стр.238, рис.6.14, стр.241, рис.6.19, стр.244). На рис.6.12, 6.15, 6.16, 6.20 представлены распределения температуры вдоль оси течения. Поступательные температуры кластеров и мономеров и внутренние температуры кластеров растут с увеличением расстояния от поверхности источника. Возникает вопрос о причинах данного роста. Если для оценки параметров струи автор использует распределение Максвелла - Больцмана (6.20), то линейный рост скорости мономеров и кластеров и рост температуры в струе должен быть ограничен.

Несмотря на сделанные замечания, диссертационная работа производит хорошее впечатление.

Основные результаты работы полностью опубликованы в ведущих научно-технических журналах (30 печатных работ, в том числе 16 статей в рецензируемых журналах из списка ВАК, 18 работ, индексируемые Scopus) и прошли апробацию на многочисленных научно-технических конференциях в России и за рубежом.

Диссертационная работа в целом отличается высоким уровнем выполненных теоретических исследований и проведенных расчетов. Рассмотренная диссертация является законченной научной работой. В ходе выполнения работы автор плодотворно сотрудничал с рядом ведущих российских групп. Диссертация хорошо структурирована, написана грамотным языком, содержит обширную библиографию по теме, рисунки наглядно иллюстрируют использованные модели и полученные результаты.

Учитывая изложенное, считаю, что представленная диссертационная работа содержит целый ряд новых фундаментальных и прикладных научных результатов, вносит существенный вклад в понимание процессов кластерообразования, происходящих в разреженных струйных течениях.

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 диссидентом не нарушен.

Луцев Леонид Владимирович



член диссертационного совета,

доктор физико-математических наук,

старший научный сотрудник

ФГБУН «Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе»

194021, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26

E-mail: l_lutsev@mail.ru

25 декабря 2018 г.



Подпись д.ф.-м.н. Луцева Л.В. заверяю:

Отдел кадров ФГБУН «Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе»



Киселева И.Н.