

На правах рукописи

Симакова Ольга Игоревна

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ
И ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ПРИ ИМПУЛЬСНОЙ ЛАЗЕРНОЙ
АБЛЯЦИИ НАНОСЕКУНДНОГО ДИАПАЗОНА**

01.02.05 – механика жидкости, газа и плазмы

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург

2006

Работа выполнена в ГОУ ВПО “Санкт-Петербургский государственный политехнический университет”

Научный руководитель: доктор технических наук,
профессор Лукьянов
Герман Александрович

Официальные оппоненты: доктор технических наук,
старший научный сотрудник
Емельянов Владислав Николаевич

доктор физ.-мат. наук,
профессор Рыдалевская
Мария Александровна

Ведущая организация:
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, г. Санкт-Петербург

Защита состоится “26” декабря 2006 г. в 15 часов на заседании диссертационного совета Д 212.229.07 в ГОУ ВПО “Санкт-Петербургский государственный политехнический университет” по адресу: 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая 29, корп. 1, каф. гидроаэродинамики.

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке ГОУ ВПО “Санкт-Петербургский государственный политехнический университет”.

Автореферат разослан “ _____ ” _____ 2006 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
Д 212.229.07
канд. физ.-мат. наук

Зайцев Д.К.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы диссертации. Выбор темы диссертации стимулирован широким использованием импульсной лазерной абляции (ИЛА) в ряде современных технологий, в том числе технологий получения нанокластеров и наноматериалов. В настоящее время наносекундная лазерная абляция является наиболее пригодным методом напыления тонких пленок со сложной стехиометрией и микрообработки хрупких материалов и мощным инструментом изготовления компонентов микроприборов и микрооптических устройств, очистки поверхностей, сверления отверстий микронного размера и др.

Лазерная абляция - один из основных способов синтеза новых наноматериалов. Разработка эффективных и контролируемых методов синтеза кластеров – малых частиц нанометровых и субнанометровых размеров - является в настоящее время ключевым звеном создания наноматериалов и наноустройств. Во многих случаях нанокристаллические материалы являются более прочными, твердыми и износоустойчивыми, чем соответствующие массивные кристаллы. Именно с помощью ИЛА получены многие данные о свойствах кластеров в газовой фазе, впервые синтезированы такие нанокластеры, как углеродные фуллерены, эндофуллерены, стабильные металлоуглеродные кластеры (met-cars), многослойные фуллерены и ряд других новых стабильных наноструктур.

Во многих из перечисленных приложений газодинамика лазерной абляции играет существенную, а часто и определяющую роль для достижения конечного результата. Знание общей картины течения и газодинамических параметров потока необходимо при проектировании соответствующих технологических процессов, выборе их параметров и оптимизации характеристик.

Помимо большого прикладного значения ИЛА для различных технологий, данная техника является инструментом и фундаментальных исследований. К последним относится, в первую очередь, изучение свойств кластеров различных материалов, которые представляют собой особое состояние вещества и проявляют уникальные свойства, отличные как от свойств составляющих их атомов (молекул), так и свойств массивного материала. При формировании конденсированной фазы именно через

кластеры происходит переход от дискретного электронного энергетического спектра, характерного для атомов и молекул, к зонному. Кроме этого, с помощью ИЛА удастся более точно установить значения критических параметров тугоплавких веществ.

Таким образом, актуальность темы диссертации определяется как потребностями фундаментальных исследований в области изучения свойств материалов нанометровых размеров, так и многочисленными практически важными приложениями, в том числе связанными с разработкой новых методов синтеза нанокластеров и наноматериалов.

Основные цели и задачи работы. Целью работы является решение ряда модельных задач газодинамики конденсирующегося пара при наносекундной ИЛА малых частиц кремния в вакууме и фоновом газе в диапазоне интенсивностей лазерного излучения (ЛИ), соответствующем режиму нормального испарения, включая разработку моделей, алгоритмов и программ расчета, численное моделирование и анализ полученных результатов.

В соответствии с целью сформулированы следующие задачи работы:

1. Адаптация метода прямого моделирования Монте-Карло (ПММК) к задачам моделирования газодинамики импульсной лазерной абляции сферических частиц с образованием кластеров и ИЛА в режиме взрывного вскипания с отрывом жидкого поверхностного слоя.
2. Проведение численных исследований нестационарного истечения атомарного пара в вакуум и газ от сферического источника. Получение систематической информации о временной и пространственной эволюции структуры течения.
3. Численное исследование процессов образования кластеров при нестационарном истечении конденсирующегося пара в вакуум и газ от сферического источника в диапазоне условий, типичном для процессов получения нанокластеров кремния методом ИЛА частиц аэрозоля.
4. Численные исследования процессов образования нанокластеров кремния в быстро охлажденной пространственно-однородной смеси пара кремния и инертного газа.

5. Изучение условий перехода режима ИЛА от нормального испарения к взрывному вскипанию. Численное исследование динамики разлета пара и оторвавшегося при фазовом взрыве жидкого слоя.

Научная новизна работы заключается в следующем:

1. Впервые методом ПММК проведено систематическое и детальное исследование пространственно-временной эволюции структуры и параметров течения при истечении атомарного пара от внезапно включенного сферического источника в вакуум. Установлены основные закономерности течения.
2. Впервые методом ПММК проведено численное исследование пространственно-временной эволюции структуры и параметров течения при истечении атомарного пара (кремний) от внезапно включенного сферического источника в фоновый газ (аргон) применительно к условиям, типичным для процессов получения нанокластеров кремния методом ИЛА частиц аэрозоля.
3. Впервые разработаны ПММК модели и алгоритмы для расчета течений конденсирующегося пара от внезапно включенного сферического источника в вакуум и фоновый газ с полным учетом физических процессов, сопровождающих расширение пара.

Впервые методом ПММК проведено численное исследование пространственно-временной эволюции структуры и параметров течения, закономерностей процессов образования кластеров в условиях, типичных для процессов получения нанокластеров кремния при ИЛА частиц аэрозоля.

4. Впервые проведено численное исследование процессов образования и роста нанокластеров кремния в быстро охлажденной пространственно-однородной смеси пара кремния и инертного газа применительно к условиям технологии получения нанокластеров ($k \cong 10^4$) методом ИЛА частиц аэрозоля.
5. Впервые на базе метода ПММК разработаны модель, алгоритм и программа моделирования импульсной лазерной абляции плоской мишени в вакууме в режиме взрывного вскипания с учетом наличия движущегося жидкого слоя, образующегося при фазовом взрыве, и

проведены численные исследования для кремниевой мишени при разлете продуктов абляции в вакуум.

Достоверность результатов выполненных исследований подтверждена проведенными тестами, сравнением с имеющимися аналитическими данными для простейших модельных задач, а также сравнением полученных результатов с имеющимися в литературе.

Практическая значимость.

Разработанные в диссертации модели и алгоритмы расчета газодинамических и физических процессов при импульсной лазерной абляции твердых мишеней дополняют и развивают существующие модели этого типа. Это определяет научную значимость выполненного исследования.

Разработанные модели и алгоритмы, результаты численных исследований, их анализ и обобщение могут быть использованы при исследованиях и разработках различных научных и промышленных технологий, использующих процессы ИЛА твердых материалов. Наибольшее прикладное значение результаты диссертации имеют для исследований и разработок в области технологий синтеза нанокластеров и наноматериалов методом ИЛА частиц аэрозолей.

На защиту выносятся ряд математических моделей газодинамики наносекундной лазерной абляции твердого материала (на примере кремния) в вакууме и газе и полученные с помощью данных моделей результаты теоретического анализа и обобщения, а именно:

1. Результаты систематического численного моделирования методом ПММК нестационарного истечения атомарного пара в вакуум от внезапно включенного сферического источника в широком диапазоне чисел Кнудсена.
2. Результаты численного исследования методом ПММК задачи о нестационарном истечении атомарного пара от внезапно включенного сферического источника в фоновый газ в диапазоне условий, характерном для технологии получения нанокластеров кремния методом ИЛА малых частиц аэрозоля.

3. Модели, алгоритмы и программы моделирования нестационарных течений конденсирующегося пара от внезапно включенного сферического источника в вакуум и газ на базе метода ПММК и газодинамического приближения (истечение в вакуум). Результаты исследования пространственно-временной эволюции газодинамической структуры течения и характеристик образующихся кластеров в условиях, типичных для получения нанокластеров кремния при ИЛА частиц аэрозоля.
4. Результаты численных исследований кинетики процессов образования и роста нанокластеров кремния в быстро охлажденной пространственно-однородной смеси пара кремния и инертного газа в диапазоне условий технологии получения нанокластеров ($k \cong 10^4$) методом ИЛА малых частиц аэрозоля.
5. Математическая модель ИЛА плоской мишени в вакууме в режиме взрывного вскипания (тепловые модели мишени и оторвавшегося при фазовом взрыве жидкого слоя, газодинамическая модель разлета парового облака). Результаты численного моделирования ИЛА кремниевой мишени при разлете продуктов абляции в вакуум и их анализа.

Апробация работы.

Материалы диссертации были представлены:

- на VII международной конференции “Fullerenes and Atomic Clusters” (27 июня – 1 июля 2005, Санкт-Петербург, Россия);
- на VIII международной конференции по лазерной абляции (COLA, 11 – 16 сентября 2005, Banff, Canada);
- на VI международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ, 26 июня – 1 июля 2006, Санкт-Петербург, Россия);
- на XXV международном симпозиуме по динамике разреженного газа (RGD25, 21 – 28 июля 2006, Санкт-Петербург, Россия);
- на IV российской национальной конференции по теплообмену (23 – 27 октября 2006, Москва, Россия),

а также на семинарах ЦПИ СПбГПУ.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 9 печатных работ.

Структура и объем диссертации. Работа состоит из введения, четырех глав, заключения и списка цитируемой литературы из 184 наименований. Полный объем диссертации – 147 стр.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность вопросов, рассматриваемых в диссертации, представлено современное состояние проблемы моделирования возникающих при импульсной лазерной абляции течений, сформулированы цели и задачи исследования и перечислены основные положения, выносимые на защиту.

Первая глава посвящена описанию используемых в диссертационной работе методов моделирования. Основным инструментом численных исследований в данной работе является метод прямого статистического моделирования Монте-Карло (ПММК). В разделе 1.1 даны общая характеристика ПММК, описание его основных процедур в приложении к задачам сферического расширения конденсирующегося пара от испаряющейся поверхности, а также соображения по выбору численных параметров метода. В разделе 1.2 рассмотрен алгоритм расчета системы уравнений Эйлера для газовой смеси (сферически симметричная задача), приведены результаты проверки сеточной сходимости и тестирования численной схемы.

Во второй главе представлены результаты численного моделирования методом ПММК нестационарного расширения атомарного пара в вакуум (раздел 2.1) и фоновый газ (2.2) от внезапно включенного сферического источника. Данное течение можно рассматривать как приближенную модель разлета пара при ИЛА частиц аэрозоля в вакууме и фоновом газе. В разделе 2.1 приведены результаты систематического и детального численного исследования расширения атомарного пара (модель твердых сфер) в вакуум. Исследование проведено в широком диапазоне чисел Кнудсена $Kn=0.001-100$ ($Kn = \lambda / R_w$, λ - длина свободного пробега атомов испаряющегося вещества у поверхности источника, R_w - радиус источника), охватывающем все возможные режимы течения пара от свободномолекулярного до континуального. В разделе 2.1 приводятся также аналитические

стационарные решения задачи для свободномолекулярного и континуального пределов, получено нестационарное аналитическое решение для $Kn=\infty$. Результаты исследования включают анализ пространственно-временной эволюции структуры течения (рис. 1 и 2).

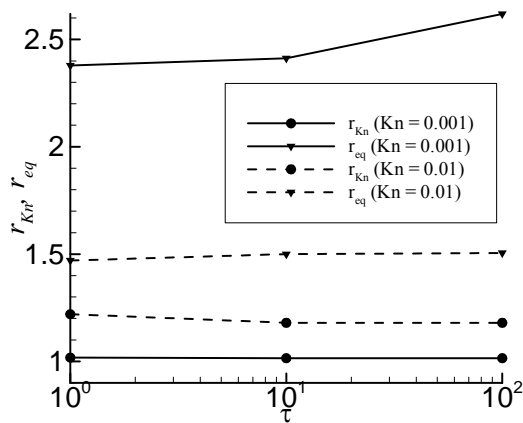


Рис. 1. Изменение положения зоны поступательного равновесия во времени: r_{Kn} – граница кнудсеновского слоя, r_{eq} – внешняя граница равновесного течения

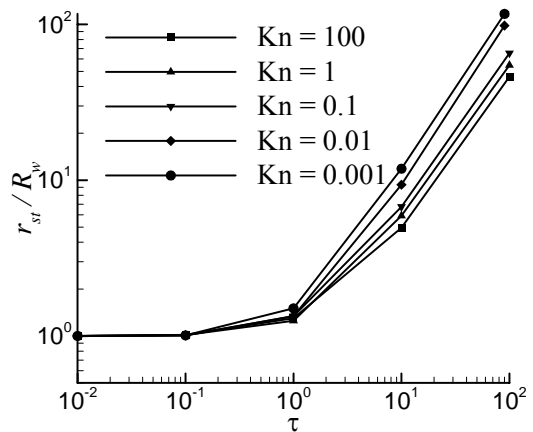


Рис. 2. Изменение протяженности области стационарного течения r_{st} / R_w во времени для различных чисел Кнудсена

Исследование в разделе 2.2 проведено в диапазоне условий, характерном для импульсной лазерной абляции наносекундного диапазона умеренной интенсивности малых (0.1 – 10 мк) частиц аэрозоля. В качестве испаряющегося вещества рассмотрен кремний, в качестве внешнего газа – аргон; температура поверхности кремниевой мишени в 20 раз превышает T аргона (6000К и 300К соответственно). Проанализировано влияние числа Кнудсена и отношения концентраций равновесного пара на поверхности источника и фонового газа на газодинамические параметры течения. На рис. 3 представлена пространственно-временная эволюция числовой плотности смеси и отдельных компонент для варианта расчета $Kn=0.01$, $n_{e1}/n_{20}=10$ (n_{e1} – равновесная концентрация паров кремния у поверхности источника, n_{20} – концентрация невозмущенного внешнего газа), $T_w/T_{20}=20$ (T_w – температура поверхности испарения, T_{20} – температура невозмущенного аргона). Безразмерное время τ определяется как отношение $\tau = t / (\beta R_w)$, где β – величина, обратно пропорциональная наиболее вероятной скорости частиц пара кремния при температуре T_w .

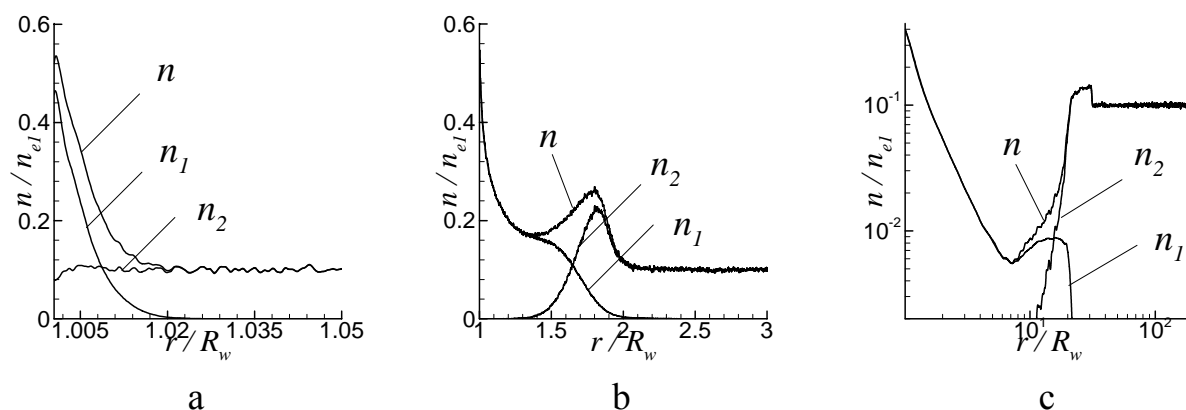


Рис. 3. Распределение концентраций смеси Si+Ar n/n_{eI} , пара Si n_1/n_{eI} и внешнего газа Ar n_2/n_{eI} для $Kn=0.01$, $n_{20}/n_{eI}=0.1$; $\tau=0.01$ (a), 1 (b) и 100 (c)

Третья глава посвящена моделированию газодинамических процессов и процессов образования кластеров кремния при нестационарном расширении конденсирующегося пара от внезапно включенного сферического источника в вакуум и фоновый газ.

В разделах 3.1 и 3.2 рассмотрена задача об истечении в вакуум. Предложены две математические модели: на базе метода ПММК (3.1) и газодинамического приближения Эйлера (3.2).

Модель кластерообразования на базе ПММК включает описание процессов трехчастичной атомной рекомбинации, ассоциации кластеров с атомами и другими кластерами и испарения мономера из кластера. В рассматриваемой модели кластеры являются нейтральными и обладают полностью возбужденными вращательными и колебательными степенями свободы. Колебательно-вращательно-поступательный энергообмен описывается моделью Ларсена-Боргнакке. Исследования выполнены для $Kn=0.01$ и 0.001 (радиус источника $R_w=10^{-6}$ м и 10^{-5} м) и температуры мишени $T_w=6000$ К. Представленные результаты включают анализ влияния процесса конденсации в потоке на газодинамику расширения облака и параметры смеси атомов и кластеров в целом, а также анализ изменения основных характеристик кластеров (их скоростей, поступательных температур и внутренних энергий). Получены массовые спектры кластеров и распределения их массовых долей в пространстве.

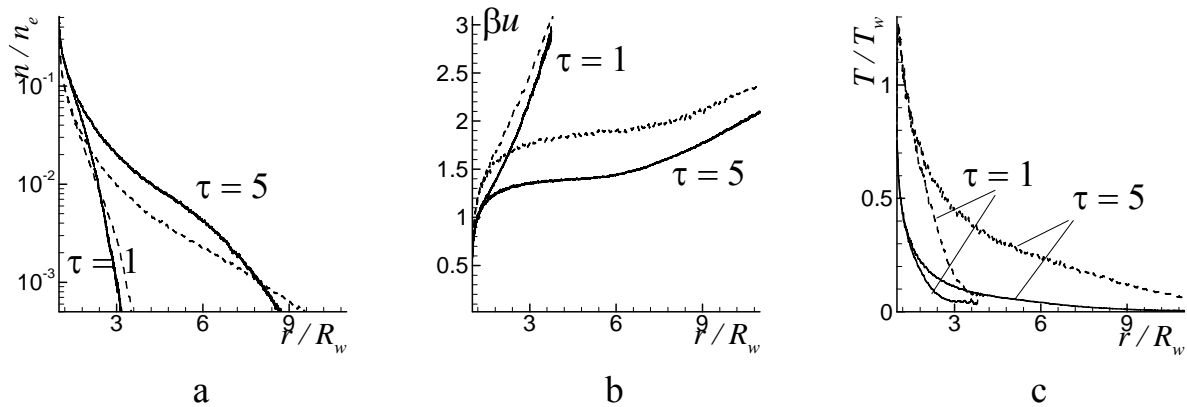


Рис. 4. Профили концентрации n/n_e (а), скорости βu (б) и температуры T/T_w (с) смеси при истечении в вакуум для $Kn=0.001$, $\tau=1$ и 5 : при наличии конденсации в потоке (пунктир), без конденсации (сплошные линии)

Наличие процессов кластерообразования в потоке оказывает существенное влияние на газодинамику смеси. Особенно оно заметно при $Kn=0.001$, когда процессы образования кластеров идут более интенсивно вследствие более высокой частоты столкновений (рис. 4). Значительный нагрев газа у поверхности источника приводит к понижению числа Маха. Толщина дозвукового слоя возрастает примерно в 5 раз.

Кинетическая модель кластеризации в разделе 3.2 учитывает трехчастичную атомную рекомбинацию и диссоциацию димеров, процессы слипания при парных столкновениях кластеров с атомами и процессы испарения атомов из кластеров (рассмотрены две модели испарения кластеров: модель испарения атомов макроскопической сферической частицей и приближенная модель испарения кластера на базе теории переходного состояния). Рассмотрены основные закономерности течения. Проанализировано взаимное влияние газодинамических и кинетических процессов друг на друга, изучены массовые спектры получаемых кластеров. Проведено сравнение результатов моделирования методом ПМК и с помощью приближенной газодинамической модели.

В разделе 3.3. описывается модель нестационарного расширения конденсирующегося пара от внезапно включенного сферического источника в фоновый газ. Модель кластерообразования аналогична описанной в разделе 3.1. Численные исследования выполнены для чисел $Kn=0.1-0.001$ (радиус источника $R_w=10^{-7}-10^{-5}$ м), температуры поверхности источника $T_w=6000$ К, температуры фонового газа (аргона) $T=300$ К, отношения концентраций

равновесного пара на поверхности источника и фонового газа $n_{e1}/n_{20}=10$ и 100 и $\tau \leq 5$.

Модель и алгоритм расчета обеспечивают получение детальной информации о пространственно-временной эволюции средних газодинамических параметров для смеси и ее компонент (атомов и кластеров), а также массовых спектров кластеров и распределений их по внутренней энергии.

Исследовано влияние конденсации пара на газодинамическую структуру и параметры течения. В исследованном диапазоне процесс конденсации приводит к значительному повышению температуры расширяющегося пара. Рассмотрены основные закономерности процессов образования и роста кластеров, изменения их внутренней энергии и массовых спектров.

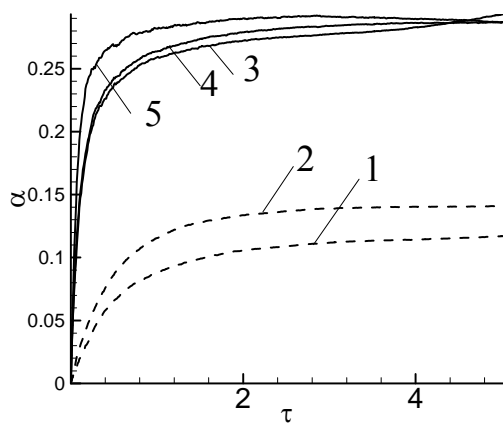


Рис. 5. Зависимости от времени τ массовой доли α : 1 - $Kn=0.01$, $n_{20}/n_{e1}=0$; 2 - $Kn=0.01$, $n_{20}/n_{e1}=0.1$; 3 - $Kn=0.001$, $n_{20}/n_{e1}=0$; 4 - $Kn=0.001$, $n_{20}/n_{e1}=0.01$; 5 - $Kn=0.001$, $n_{20}/n_{e1}=0.1$

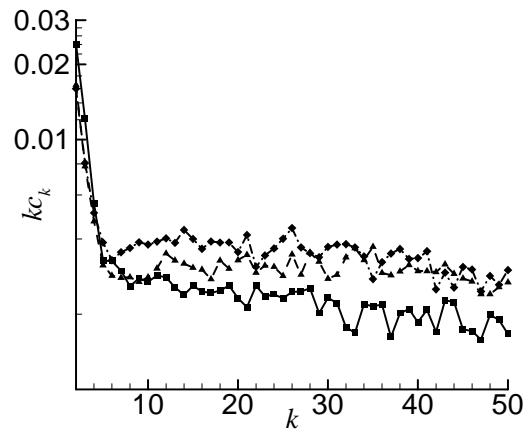


Рис. 6. Массовые спектры кластеров при $Kn=0.001$, $\tau=5$: $n_{20}/n_{e1}=0.1$ (сплошные линии); 0.01 (пунктир); 0 (штрихпунктир)

На рис. 5 представлено изменение во времени суммарной массовой доли кластеров $\alpha = \sum_{k=2}^{\infty} kc_k$ для $Kn=0.01$ и 0.001 и различных плотностей внешнего газа, а на рис. 6 приводятся массовые спектры кластеров kc_k при $Kn=0.001$, $\tau=5$ ($c_k = n_k / \sum_{k=1}^{\infty} kn_k$, k – число атомов в кластере, n_k – концентрация кластеров). Данные графики свидетельствуют о том, что главным параметром, определяющим размер и количество получаемых кластеров в

течение импульса лазерного излучения, является число Kn (радиус источника R_w). Величина массовой доли кластеров после “замораживания” состава для $Kn=0.001$ примерно в 2 раза превышает значение α для $Kn=0.01$.

В разделе 3.4 описана кинетическая модель образования кластеров в пространственно-однородной смеси пара кремния и буферного газа, которая была использована при проведении ЦПИ СПбГПУ исследований для Samsung Electronics Co., Ltd. в рамках проекта “Development of Package of Mathematical Models and Computer Programs for Modelling of Production Processes of Silicon Nanoparticles by the Laser Ablation” (2004). Представлены результаты моделирования процессов образования и роста нанокластеров кремния в диапазоне условий технологии получения нанокластеров ($k \cong 10^4$) методом ИЛА малых частиц аэрозоля.

На рис. 7 представлены результаты расчета эволюции массового спектра нанокластеров кремния. В рамках данной модели функция распределения нанокластеров $kc_k(k)$ при $\tau > 1000$ ($\tau = t/t_0$, где t_0 - среднее время между столкновениями атомов кремния, определенное по

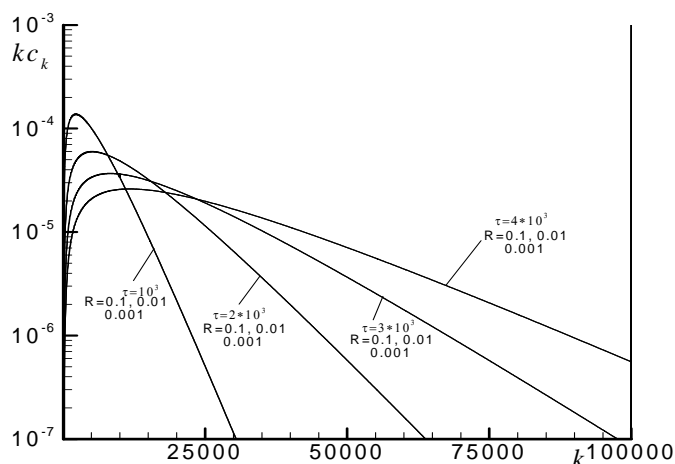


Рис. 7. Эволюция распределения $kc_k(k)$ во времени

начальной концентрации атомного пара) определяется тремя параметрами: (1) начальной концентрацией атомного пара n_{Si0} ; (2) временем t , прошедшим после лазерного импульса; (3) температурой буферного газа. Влияние температуры буферного газа относительно мало. Параметр R на рис. 7 характеризует относительную роль процесса трехчастичной атомной рекомбинации.

В четвертой главе рассмотрена импульсная лазерная абляция плоской кремниевой мишени при переходе от режима нормального испарения к взрывному вскипанию. Учитывается наличие трех групп пространственно разделенных (но взаимосвязанных) процессов, происходящих в объеме

твёрдого тела (поглощение ЛИ и нагрев), на поверхности (испарение и конденсация) и в областях, занятых паром (движение пара).

Модель описывает две последовательные стадии ИЛА плоской мишени: (1) стадию, соответствующую режиму нормального испарения материала с поверхности мишени (рис. 8а); (2) стадию, соответствующую режиму взрывного вскипания поверхностного слоя с отрывом его от мишени (рис. 8б). Общая математическая модель ИЛА соответственно включает в себя тепловые модели мишени и оторвавшегося слоя и

газодинамическую модель движения пара (на базе ПММК). Теплофизическая модель взрывного вскипания аналогична предложенной в работе Андреева С.Н., Орлова С.В., Самохина А.А. “Моделирование взрывного вскипания при импульсном лазерном воздействии” (Труды ИОФАН, 2004. - Т. 60. - С. 127 – 148).

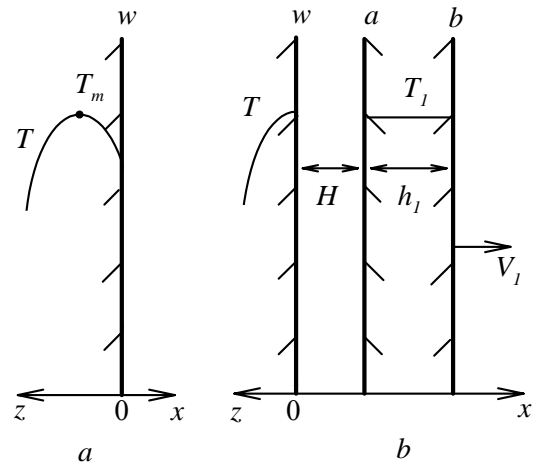


Рис. 8. Схема перехода от режима нормального испарения (а) к режиму взрывного кипения (б)

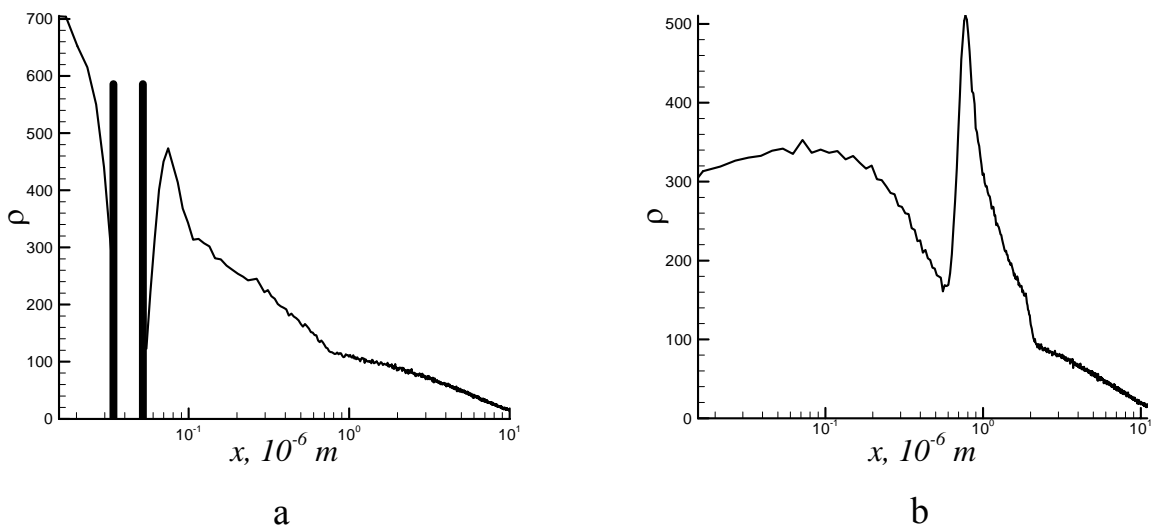


Рис. 9. Профили плотности $\rho(x)$ при $\tau=1.69$ (а) и $\tau=1.715$ (б)

Подробно исследованы пространственно-временная эволюция структуры течения и изменение основных газодинамических параметров. На рис. 9 приведены профили безразмерной плотности пара (ρ отнесена к

равновесной плотности пара при температуре кипения $T_b=3504\text{K}$ и $p_b=10^5\text{ Па}$ ($\rho_b=0.1\text{ кг/м}^3$) в моменты времени, когда слой еще существует ($\tau=t/\tau_L=1.69$) и после полного испарения слоя ($\tau=1.715$) (рассмотрен гауссовский временной профиль интенсивности лазерного излучения с плотностью энергии импульса $E_0=4.75*10^4\text{ Дж/м}^2$ и шириной импульса $\tau_L=1.3*10^{-8}\text{ с}$).

Исследования показали, что режим взрывного вскипания очень чувствителен к величине интенсивности лазерного излучения: даже незначительное смещение интенсивности от пороговой величины в сторону больших значений приводит к резкому увеличению числа отрывающихся с поверхности мишени слоев. Причем последующие отрывы слоев следуют друг за другом практически непрерывно в течение всего времени действия лазерного излучения.

В заключении сформулированы основные результаты и выводы работы:

1. Методом ПММК проведено систематическое исследование пространственно-временной эволюции структуры и параметров течения при истечении атомарного пара (модель твердых сфер) от внезапно включенного сферического источника в вакуум. Изучены основные закономерности течения, получены данные об изменении во времени протяженностей характерных областей течения (кнудсеновского слоя, дозвуковой области, областей квазиравновесного и стационарного течения). Исследование выполнено в диапазоне характерных чисел $\text{Kn} = \lambda_e / R_w = 100 - 0.001$, охватывающем режимы истечения от свободномолекулярного до существенно континуального, и безразмерного времени $\tau \leq 100$ (размер испаренного облака более $300 R_w$).
2. Методом ПММК проведено численное исследование пространственно-временной эволюции структуры и параметров течения при истечении атомарного пара (кремний) от внезапно включенного сферического источника в фоновый газ (аргон, $T=300\text{K}$). Исследование выполнено для источника пара кремния с температурой поверхности $T_w=6000\text{K}$ при характерных числах $\text{Kn} = \lambda_e / R_w = 0.1 - 0.001$, отношении концентраций $n_{e1}/n_{20}=10 - 100$ и $\tau \leq 100$. Изучены основные закономерности течения.

3. Впервые разработаны математическая модель, алгоритм и программа ПММК расширения пара в вакуум и фоновый газ от внезапно включенного сферического источника с учетом процессов образования кластеров. Кинетика образования кластеров учитывает все основные физические процессы, сопровождающие образование кластеров и их трансформацию в версии, предложенной в работе Быкова Н.Ю., Лукьянова Г.А. “Прямое статистическое моделирование импульсной лазерной абляции металлов с процессами кластеризации в испаренном облаке” (Теплофизика и Аэромеханика, №4).

Модель и алгоритм расчета обеспечивают получение средних газодинамических параметров для смеси и отдельных компонент (атомов и кластеров), а также массовых спектров кластеров и распределений их внутренней энергии.

4. Методом ПММК проведены численные исследования истечения конденсирующегося пара в вакуум (на примере пара кремния) при $T_w=6000\text{K}$ и числах $\text{Kn}=0.01$ и 0.001 ($R_w=10^{-6}\text{м}$ и 10^{-5}м соответственно) в диапазоне изменения безразмерного времени $\tau \leq 5$. Впервые получена детальная информация о ходе процессов образования и трансформации кластеров в указанном диапазоне параметров, эволюции во времени радиальных распределений средних параметров смеси и ее компонент, параметров кластеров, включая их массовые спектры и внутреннюю энергию.
5. В рамках газодинамического приближения Эйлера разработана приближенная математическая модель нестационарного расширения пара от внезапно включенного сферического источника с учетом процессов образования кластеров. Модель является “предельной” и позволяет оценить ход процессов образования и распада кластеров в случае, когда кластеры при разлете остаются “горячими”.

Проведены численные исследования для случая разлета пара кремния от источника с радиусом $R_w=10^{-8}-10^{-5}\text{м}$ при $T_w=6000\text{K}$ и $\tau \leq 10$.

6. Методом ПММК проведены численные исследования истечения конденсирующегося пара в фоновый газ (на примере истечения пара кремния в аргон) при числах Кнудсена $\text{Kn}=0.01$ и 0.001 ($R_w=10^{-6}$ и 10^{-5}м), $T_w=6000\text{K}$, $T_{20}=300\text{K}$, $n_{e1}/n_{20}=10$ и 100 в диапазоне изменения $\tau \leq 5$.

Впервые получена детальная информация о ходе процессов образования и трансформации кластеров в указанном диапазоне параметров, эволюции во времени радиальных распределений средних параметров смеси и ее компонент, параметров кластеров, включая их массовые спектры и внутреннюю энергию.

7. В рамках кинетической модели кластерообразования (модифицированные уравнения Смолуховского) для случая пространственно-однородной релаксации проведены численные исследования основных закономерностей процессов образования и роста нанокластеров кремния. Исследования выполнены применительно к условиям процесса получения кластеров с размером 5-10 нм методом ИЛА частиц кремния аэрозоля.
8. Предложена математическая модель, разработаны алгоритм и программа моделирования (на базе метода ПММК) газодинамических и тепловых процессов при импульсной лазерной абляции плоской мишени в вакууме в режиме взрывного вскипания.

Проведены численные исследования газодинамических и тепловых процессов, сопровождающих абляцию плоской кремниевой мишени в вакууме лазерным излучением с шириной импульса $\tau_L=1.3 \cdot 10^{-8}$ с и плотностью энергии $E_0=4 \cdot 10^4$ Дж/м² (режим нормального испарения) и $4.75 \cdot 10^4$ Дж/м² (режим взрывного вскипания).

Публикации по теме диссертации:

1. Симакова, О.И., Лукьянов, Г.А. Прямое статистическое моделирование нестационарного расширения пара в вакуум от сферического источника // Научно-технические ведомости СПбГТУ. - 2006. - №4. - С. 18-21.
2. Kozyrev, S.V., Lukyanov, G.A., Leshchev, D.V., Vakulova (Simakova), O.I., Nikolaeva, L.Yu. Computer Modeling of Gasdynamic Control of Nanoclusters Growth // Fullerenes, Nanotubes, and, Carbon Nanostructures. – 2006. - Vol.14, №2/3. – P. 541-544.
3. Lukyanov, G.A., Khang, Y., Leshchev, D.V., Kozyrev, S.V., Volkov, A.N., Bykov, N.Yu., Vakulova (Simakova), O.I. Modeling of Processes of Clusters Formation under Pulsed Laser Ablation of Carbon Particles in an

- Aerosol // Fullerenes, Nanotubes, and, Carbon Nanostructures. – 2006. - Vol.14, №2/3. – P. 507-512.
4. Lukyanov, G.A., Volkov, A.N., Khang, Y., Kozyrev, S.V., Leshchev, D.V., Bykov, N.Yu., Vakulova (Simakova), O.I. Numerical Modeling of Pulsed Laser Ablation of Carbon Particles in an Aerosol // Book of Abstracts of 8th International Conference on Laser Ablation (September 11 – 16, 2005, Banff, Canada). - P.112.
 5. Lukyanov, G.A., Vakulova (Simakova), O.I. Modeling of processes of clusters formation under vapor expansion into vacuum // Book of Abstracts of 7th Biennial Workshop “Fullerenes and Atomic Clusters” (June 27 – July 1, 2005, Saint-Petersburg, Russia). - P.251.
 6. Быков, Н.Ю., Вакулова (Симакова), О.И., Лукьянов, Г.А. Прямое статистическое моделирование процессов образования кластеров при расширении пара кремния в вакуум от сферического источника // Научные исследования и инновационная деятельность: материалы научно-практической конференции 19-21 июня 2006. – СПб: Изд-во Политехнического университета, 2006. - С. 252-260.
 7. Быков, Н.Ю., Вакулова (Симакова), О.И., Лукьянов, Г.А. Прямое статистическое моделирование процессов образования кластеров при нестационарном расширении пара от импульсного источника // Материалы VI международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (26 июня – 1 июля 2006, Санкт-Петербург, Россия). - С. 84–86.
 8. Lukyanov, G.A., Vakulova (Simakova), O.I. Modelling of Pulsed Laser Ablation of a Solid Target in a Vacuum in the Explosive Boiling Mode // Book of Abstracts of 25th RGD Symposium (July 21-28, 2006, Saint-Petersburg, Russia). - P. 102.
 9. Вакулова (Симакова), О.И., Лукьянов, Г.А. Моделирование взрывного вскипания при импульсном лазерном воздействии на твердую мишень // Труды IV российской национальной конференции по теплообмену. - Москва: Издательский дом МЭИ, 2006. - Т. 4. – С. 51-54.