ПРИОРИТЕТНОЕ НАПРАВЛЕНИЕ III.19. Общая механика, динамика космических тел, транспортных средств и управляемых аппаратов; биомеханика; механика жидкости, газа и плазмы, неидеальных и многофазных сред; механика горения, детонации и взрыва

Программа III.19.1. Математические проблемы нелинейных моделей движения сложных сред (координаторы акад. Л. В. Овсянников, докт. физ.-мат. наук А. П. Чупахин).



**Рис. 19.** Распределение ионов при t = 0 (1, 2) и t = 1 (3, 4): x < 0 (1), x > 0 (2), x = -1 (3) и x = 1, 2 (4).



l - t = 0; 2 - 4 - t = 1 (2) и (3) расчет на основе приближенных моделей (холодная плазма и «Water bag»); 4 - расчет по полной модели.

В Институте гидродинамики им. М. А. Лаврентьева изучены характеристические свойства и классы решений нелинейных уравнений длинноволновой аппроксимации, описывающие течения квазинейтральной плазмы. Для одномерного кинетического уравнения квазинейтральной бесстолкновительной плазмы определены скорости распространения возмущений и сформулированы условия обобщенной гиперболичности. В классе бегущих волн построены решения кинетической модели с критическим слоем, при этом потенциал электрического поля задается произвольно. В фазовой плоскости траектории движения частиц имеют характерную форму «кошачий глаз». Показано, что бегущие волны являются устойчивыми по линейному приближению лишь в случае малого изменения потенциала электрического поля. Предложены дифференциальные законы сохранения, аппроксимирующие исходную интегродифференциальную модель. Известные гидродинамические пределы (холодная плазма и «Water bag») являются частными случаями этой системы. На основе предложенных уравнений выполнены численные расчеты распространения волн в плазме, возникающие в результате распада начального разрыва (рис. 19, 20). Показан эффект кинетического опрокидывания функции распределения, т. е. формирование двух горбов, аналогичное развитию неустойчивости Кельвина-Гельмгольца в сдвиговом потоке жилкости.

В том же Институте выведены нелинейные интегродифференциальные модели, описывающие движение тонкого слоя идеальной жидкости в открытом канале с вертикальным или горизонтальным сдвигом скорости, и установлена их математическая эквивалентность. Сформулированы необходимые и достаточные условия гиперболичности уравнений движения. Показано соответствие условий гиперболичности интегродифференциальных уравнений теории длинных волн классическим критериям устойчивости сдвиговых потоков идеальной жидкости. Построен специальный класс решений нелинейных интегродифференциальных уравнений горизонтально-сдвигового движения жидкости в открытом канале в приближении теории мелкой воды. Этот класс решений характеризуется линейной связью между интегральными инвариантами Римана и задается гиперболической системой двух дифференциальных уравнений с двумя параметрами.

Показано, что в рамках линейной теории волн симметричные трехмерные бегущие волны образуются в результате наложения двух систем плоских волн, амплитуды которых равны, а волновые векторы симметричны относительно некоторой прямой. Если эти условия не выполняются, то результирующая система трехмерных волн будет асимметричной. Задача об асимметричных волнах является гораздо более сложной. Ее трудность обусловлена тем,

что в асимметричных волнах направление движения жидких частиц значительно отклоняется от направления движения волны. Более того, траектории жидких частиц могут демонстрировать сложное хаотическое поведение. Это обстоятельство существенно осложняет анализ, так как траектории жидких частиц являются характеристиками системы дифференциальных уравнений, моделирующих волновое движение. Для отыскания асимметричных периодических волн исходная задача была редуцирована к системе из двух нелинейных уравнений для возвышения волны и сужения потенциала течения на свободную поверхность. Полученная нелинейная система решалась с помощью итерационной схемы Нэша-Мозера. Доказано существование асимметрических периодических волн, распространяющихся с постоянной скоростью по поверхности бесконечно глубокого потока идеальной несжимаемой жидкости. Полученные решения характеризуются тем, что поток жидких частиц на свободной поверхности является эргодическим. Обнаружен эффект бокового дрейфа массы в асимметричном волновом движении.

## Программа III.19.2. Нелинейные волны и турбулентность в многофазных потоках (координатор член-корр. РАН С. В. Алексеенко)

В Институте теплофизики им. С. С. Кутателадзе проведен цикл аналитических, расчетных и экспериментальных работ по моделированию гидродинамических процессов в проточном тракте гидротурбин как на докавитационных режимах, так и на режимах с развитой кавитационной каверной. Опыты показали, что модификацией профилей скоростей на входе в отсасывающую трубу можно предотвратить образование интенсивного прецессирующего вихревого жгута в конусе отсасывающей трубы и подавить связанные с ним мощные пульсации потока. Адаптация моделей физических процессов и соответствующих модулей пакета программ σ-Flow и последующие расчеты позволили с хорошей точностью описать полученные экспериментальные данные (рис. 21, 22). Расчеты нестационарного течения в модели реальной гидротурбины, проведенные для ряда режимов, хорошо предсказывают спектральный состав пульсаций давления на стенке отсасывающей трубы гидротурбины (рис. 23).



**Рис. 21.** Распределение величины продольных пульсаций скорости при обтекании гидрокрыла NACA0015.

*а* — эксперимент, *б* — расчет.



**Рис. 22.** Распределение осевой компоненты скорости в поперечном сечении за коленом модели отсасывающей трубы.

а — эксперимент, б — расчет.

В том же Институте разработана и апробирована модификация метода анемометрии по изображениям частиц для измерения мгно-

венных трехкомпонентных векторных полей скорости в объеме потока жидкости или газа. Суть метода состоит в измерении перемещения частиц в потоке за короткое время между вспышками лазера. Восстановление поля скорости происходит путем обработки трехмерных (объемных) изображений трассеров, восстановленных методами томографической реконструкции из зарегистрированных проекций. Основное преимущество метода — возможность бесконтактных невозмущающих измерений мгновенных значений вектора скорости на трехмерной сетке. В результате исследования точности реконструкции и ошибки определения смещения частиц по модельным искусственным изображениям показано, что существуют оптимальные значения параметров эксперимента. Предложено и реализовано несколько алгоритмических оптимизаций, позволяющих уменьшить время обработки данных. Показано, что применение графических процессоров (GPU) позволяет повысить производительность обработки данных. Опытный образец измерительной системы был создан и применен для диагностики турбулентной затопленной струи, вытекающей в узкий канал, что позволило получить пространственное распределение среднего поля скорости и мгновенные поля скорости в области измерения.





### Программа III.19.3. Гидродинамика процессов в природных системах и технических устройствах: теоретическое, экспериментальное и численное моделирование (координатор член-корр. РАН В. В. Пухначев)

В Институте гидродинамики им. М. А. Лаврентьева предложен метод последовательных приближений для построения решения задачи о распаде разрыва малой амплитуды. В линейном приближении этого метода получается задача Коши для линейной гиперболической системы. Ее решение представляет собой линии разрыва, разделенные областями, в которых решение является постоянным. Основное внимание уделяется первому и второму приближениям этого метода, в рамках которых разрывы, получаемые в линейном приближении, разделяются на устойчивые ударные волны и волны разрежения. В качестве конкретного примера проведен анализ качественно различных режимов течения, возникающих при решении задачи о разрушении плотины для модели двухслойной мелкой воды со свободной границей (рис. 24).

В том же Институте для капель различных масел, находящихся в равноплотном спиртововодном растворе (матрице), ранее было обнаружено, что если две капли обладают поверхностным натяжением и находятся на расстоянии порядка их размеров, то независимо от масштаба системы происходит их медленное взаимное сближение. Показано, что капли движутся циклически по сценарию покой-разгон-торможение с временем цикла порядка одной сотой секунды и средней скоростью порядка одной миллионной метра в секунду. Полное время сближения капель — около десяти тысяч секунд (рис. 25). Видно, что рассчитанные и экспериментальные расстояния между центрами капель различаются только на заключительном этапе сближения, что можно объяснить неучетом гидродинамического взаимодействия капель.

Предложена математическая модель обтекания замкнутых включений (солевых диапиров, массивов мерзлоты, газогидратов) потоком агрессивного флюида (относительно пресной или теплой водой, теплым газом). Унос вещества (абляция) с поверхности включения предполагается пропорциональным касательной составляющей скорости обтекания. Задача сводится к нахождению гармонической функции и формы поверхности включения, на которой задано краевое условие смешанного типа. Получены аналитические решения некоторых плоских задач. Для общего случая построен алгоритм численного решения, основанный на методе конечных элементов. Разработанная математическая модель не имеет аналогов и может быть применена к описанию ряда процессов: конвективного тепло- и массопереноса, разложения газогидратов и других, имеющих диффузионную природу.











*1* — эксперимент, *2* — результаты расчетов.

# Программа III.19.4. Аэротермодинамика высокоскоростных летательных аппаратов (координатор докт. физ.-мат. наук А. Н. Шиплюк)

В Институте теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича показано, что в широком диапазоне чисел Рейнольдса  $(\text{Re} = 10^3 - 10^9)$  вязкость оказывает существенное влияние на структуру течения в области взаимодействия ударных волн. Эффекты вязкости приводят к формированию зоны, в которой не выполняются соотношения Рэнкина-Гюгонио. Существование этой зоны позволяет непрерывным образом осуществить переход газодинамических параметров за ножкой Маха к параметрам за отраженной ударной волной через дозвуковую область течения, что невозможно в рамках невязкой трехволновой теории Неймана. Эти результаты согласуются с предположением Штернберга о существовании «поп-Rankine-Hugoniot zone». При числе Рейнольдса Re > 1,6.109 наблюдается прообраз «сверхзвуковой заплатки», соответствующий конфигурации течения, полученной в рамках невязкой модели Гудерлея. Размер этой локальной сверхзвуковой зоны составляет порядка 200 длин свободного пробега в набегающем потоке. Однако в большинстве практических приложений реализуются числа Рейнольдса Re~10<sup>4</sup>—10<sup>7</sup>, что на несколько порядков меньше, чем Re = = 1,6·10<sup>9</sup>. В плоскости (угол поворота потока давление) при увеличении числа Рейнольдса численное решение уравнений Навье-Стокса постепенно приближается к кривой, соответствующей решению Гудерлея (рис. 26).

В том же Институте впервые продемонстрирована реальная возможность управления течением в воздухозаборнике с помощью высоковольтного поверхностного электрического разряда и изучено влияние этого процесса на интегральные характеристики воздухозаборника (рис. 27, а, б). Показано, что поверхностный плазменный разряд существенно изменяет положение ударных волн и структуру течения на внешних поверхностях сжатия воздухозаборного устройства. Воздействие разряда приводит к тому, что воздухозаборник переходит из нерасчетного в расчетный режим течения с фокусированием скачка на передней кромке обечайки. Более того, перед входом в канал исчезает взаимодействие косых скачков уплотнения и сжатие происходит в головном скачке уплотнения и последующей системе слабых волн сжатия (рис. 27, в, г). В результате этого исчезает развитая отрывная зона на внутренней поверхности обечайки. Влияние разряда сопровождается также заметным увеличением толщины пограничного слоя на входе в канал воздухозаборника, что при определенных условиях может затруднить его запуск. При достаточно большой мощности (7 кВт) разряда удалось получить увеличение коэффициента восстановления полного давления и коэффициента расхода воздуха примерно на 6 %.

Разработан способ активного управления несжимаемым турбулентным погранич-



Рис. 26. Эволюция структуры ударной волны в зависимости от числа Рейнольдса.



**Рис. 27.** Разряд на поверхности воздухозаборника при мощности 3 кВт (*a*) и 7 кВт (*б*) и положение ударных волн с разрядом (*в*) и без (*г*) при  $M = 2,5, \alpha = 5^{\circ}$ .

ным слоем на обтекаемой поверхности путем использования распределенного вдува воздуха через уникальную по своим свойствам мелкоперфорированную проницаемую стенку. Продемонстрирована высокая эффективность воздействия на пограничный слой указанного способа, позволяющего снизить местный коэффициент трения  $C_f$  на обтекаемой плоской поверхности на 70 %, что с учетом энергетиче-



**Рис. 28.** Изменение коэффициента поверхностного трения в зависимости от коэффициента вдува.

ских затрат на процесс вдува обеспечивает уменьшение полного аэродинамического сопротивления указанной поверхности на 4,5— 5 % (рис. 28). При этом устойчивое снижение  $C_{\rm f}$  наблюдается даже вниз по потоку от проницаемого образца, что является дополнительным резервом уменьшения полного сопротивления (рис. 29).



**Рис. 29.** Распределение местного коэффициента трения по длине обтекаемой поверхности.

 $C_{\rm b} = 0,002755$  (1, экспериментальные данные на перфорированном участке), 0 (2, на непроницаемой поверхности); 3 — расчет.

## Программа III.19.5. Физические проблемы управления газодинамическими течениями (координатор докт. физ.-мат. наук А. А. Маслов)

В Институте теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича обнаружено резкое увеличение относительной дальнобойности сверхзвуковой струи (относительной длины сверхзвукового участка струи) для микросопел диаметром менее 60 мкм (рис. 30). Эффект вызван подавлением вязкостью всех процессов возникновения и усиления неустойчивости микроструи, что позволит создавать плотные массивы сверхзвуковых микроструй, эффективно воздействующих на течения в различных микроустройствах и процессах.

В экспериментах по теплообмену в стальном микроканале при протекании суспензии наночастиц диоксида кремния в этиловом спирте получено значительное превышение величины теплоотдачи над ожидаемой величиной по макроскопической модели Максвелла и подтвержден эффект влияния наноразмера частиц на интенсивность теплообмена (рис. 31). Использование наножидкостей в микроканалах позволит уменьшить размеры теплообменных устройств микроэлектроники и микромеханики. Совместно с Институтом вычислительного моделирования разработана технология численного анализа гидроаэродинамической устойчивости поперечно-периодических течений. Показано, что волнистость (оребрение) стенок канала замедляет нарастание полосчатых структур в зоне перехода к турбулентности, способствуя увеличению ламинарной области (рис. 32).

Показано, что термоанемометрический метод может быть успешно использован для измерений скорости потока наноразмерных порошков (рис. 33). Установлено, что в наноразмерном порошке выполняется закон Кинга (рис. 34). Обнаружено, что теплоотвод в порошке от нагретой нити датчика термоанемометра существенно выше, чем в воздухе. Показано, что термоанемометрический способ позволяет измерять среднеквадратичные пульсации в течении нанопорошка. В проведенных экспериментах обнаружено существование пограничного слоя в потоке нанопорошка как на стенке круглого вертикального канала, так и на



**Рис. 30.** Примеры измерения динамического давления (*a*, *б*) (*1*—*6* — результаты измерений относительной длины сверхзвукового участка для нескольких микросопел, *7*, *8* — обобщенные данные для макроструй) и микротрубка Пито.



**Рис. 31.** Измерительный комплекс (*a*) и результаты измерений теплоотдачи для суспензии наночастиц диоксида кремния в этиловом спирте (б). *1* — измерения, *2* — расчет.

вогнутой пластине. Показана возможность проведения амплитудно-частотных измерений в пограничном слое дисперсной фазы. В том числе установлено существование области дестабилизации возмущений внутри порошковой среды. При возбуждении звука в нанопорошках в пространстве воздух—поверхность порошка наблюдаются стоячие и бегущие волны различного вида. Волны (с генерацией высших гармоник) обнаружены также и внутри порошка. Определена скорость звука в нанопорошке диоксида кремния — 50—70 м/с.



**Рис. 32.** Расчетная сетка в канале с поперечно-периодическим сечением (*a*) и изолинии максимального нарастания полосчатых структур в плоском (черные линии) и оребренном (красные линии) каналах (*б*).



Рис. 33. Структура нанодисперсного порошка.



**Рис. 34.** Зависимость числа Нуссельта от корня из скорости не зависит от перегрева нити.  $a_w = 0,2$  (1), 0,4 (2), 0,6 (3), 0,8 (4), 1 (5).

# Программа III.19.6. Детонационные и ударно-волновые процессы в газовых, гетерогенных и конденсированных средах и управление ими для создания новых технологий (координатор акад. В. М. Титов)

В Институте гидродинамики им. М. А. Лаврентьева принципиально усовершенствован метод восстановления газодинамических параметров детонационного течения по данным рентгенографического эксперимента с использованием в качестве источника синхротронного излучения. Метод заключается в совмещении решения газодинамической задачи с определением параметров уравнения состояния продуктов взрыва, обеспечивающих наилучшее совпадение пространственного распределения параметров течения с измеренной в эксперименте рентгеновской тенью. Результатом является восстановление полей газодинамических характеристик (плотности, давления, вектора скорости) для детонации зарядов бензотрифуроксана и зарядов на основе пластифицированного ТАТБ (рис. 35).

В том же Институте предложен усовершенствованный бесконтактный метод измере-

ния электрической проводимости немагнитных металлов и сплавов в условиях импульсного нагружения, основанный на экспериментальном определении характера затухания вихревых токов в исследуемом образце. Проведены эксперименты по определению проводимости меди на дисках из медной фольги толщиной 50 мкм, диаметрами 10,5, 14, 20 мм. Для варьирования амплитуды давления использовались цилиндрические заряды насыпной плотности из гексогена, аммонита 6ЖВ, смесей аммонита 6ЖВ с содой, пластического ВВ диаметром 80 мм и высотой 200 мм. Получена зависимость электрического сопротивления меди от давления в диапазоне до 16 ГПа (рис. 36). Установлен немонотонный характер этой зависимости с максимумом в районе 11 ГПа, а также тот факт, что изменение проводимости фольги происходит синхронно с моментом ее нагружения.



Рис. 35. Пространственные распределения параметров и их значения при детонации цилиндрического заряда пластифицированного ТАТБ диаметром 20 мм — 1,85 г/см<sup>3</sup> через 3 мкс от момента инициирования. *а*, *б* — плотность, *в* — давление, *г* — массовая скорость в системе детонационного фронта (длина стрелок пропорциональна скорости). Точкой обозначена звуковая граница — *D* = |*v*|+*c*.



Рис. 36. Зависимость электрического сопротивления меди от давления.

### Программа III.19.7. Гидродинамика высокоскоростных нестационарных процессов в однородных, многокомпонентных и многофазных средах (динамика состояний, фазовые и структурные изменения при высоких плотностях энергии) (координатор докт. физ.-мат. наук В. К. Кедринский)

В Институте гидродинамики им. М. А. Лаврентьева (совместно с ИНХ и ИФПМ) в результате анализа дифрактограмм покрытий, синтезированных на циркониевых и титановых мишенях при их взаимодействии с высокоскоростными кумулятивными потоками смесейпрекурсоров  $3H_2BO_3 + ZrO_2 + 5C$  и  $3ZrO_2 +$ + В<sub>4</sub>С + 2Н<sub>3</sub>ВО<sub>3</sub>, во всех случаях зафиксирован синтез диборида циркония ZrB<sub>2</sub>, свободные элементы которого в исходной смеси отсутствовали. В результате рентгенофазового анализа покрытий, синтезированных на титановых подложках при их взаимодействии с высокоскоростными кумулятивными потоками, содержащими неметаллические компоненты (С, В + аммиачная селитра), показано, что основными фазами в образцах покрытий являются гексагональная и кубическая фазы карбида титана — α- и β-ТіС. Показано, что максимальные значения микротвердости покрытий лежат в диапазоне 35-44 ГПа. По созданной физико-математической модели процесса практически для всех вариантов смесей были получены оценки давлений и температур, реализующихся при кумулятивном синтезе.

В Институте гидродинамики им. М. А. Лаврентьева показано, что предвзрывное состояние вулканических систем, входящих (по интенсивности взрывных извержений) в классификацию А. Lacroix (1908), по структурному признаку идентично схемам диафрагменных и электромагнитных гидродинамических ударных труб, а динамика состояния сжатой тяжелой магмы за фронтом волны декомпрессии во многих аспектах аналогична динамике состояния обычных жидкостей при взрывном характере их ударно-волнового нагружения и может быть описана системой единых газодинамических законов сохранения с широким спектром кинетических соотношений, учитывающих особенности развивающихся в магме физических процессов. В результате численного анализа динамики состояния магмы, выполненного в рамках такого подхода, обнаружено принципиальное влияние диффузии и микрокристаллитов-ядер кавитации на структуру формирующихся в магме полей декомпрессии и массовой скорости: модель постоянной массы газа в пузырьках определяет классический профиль волны декомпрессии P(z) (*a*, t = 0,15 c), распространяющейся от свободной поверхности столба магмы (z = 1000 м) (рис. 37); неограниченный диффузионный процесс и увеличение плотности ядер кавитации за счет микрокристаллитов приводит к формированию двухволновой структуры с предвестником ( $\delta$ , t = 0,5 c); в профиле массовой скорости U(z) выделяется зона с практически пятикратным скачком массовой скорости ( $\delta$ ).

В том же Институте разработан трехмерный вариант метода LBE для многокомпонентных сред, находящихся в электрическом поле, с возможностью фазового перехода жидкость-пар. Построены кривые сосуществования (бинодали) для чистой жидкости и бинарной смеси жидкость-растворенный газ, полученные при LBE-моделировании, и спинодаль для бинарной смеси. Выполнен трехмерный расчет динамики состояния бинарной смеси жидкий диэлектрик-растворенный газ при мгновенном наложении сильного электрического поля. Показано, что при значениях электрического поля выше критического первоначально однородная бинарная смесь распадается на компоненты жидкий диэлектрик-парогазовые каналы, ориентированные вдоль электрического поля. При этом каналы газовой фазы растут как за счет испарения жидкого вещества, так и за счет диффузии растворенного газа внутрь канала.

В Институте гидродинамики им. М. А. Лаврентьева экспериментально установлено, что характер прецессии вихря внутри цилиндрической камеры существенным образом определяется выходными условиями истечения жидкости из камеры. В камере с полностью открытым выходом и осесимметричными входными условиями реализуется прецессия вихревого ядра с прямолинейной осью, описывающей поверхность конуса. При нарушении осевой симметрии на выходе ось вихря приобретает спиралевидную форму. Наличие сопла локализует прецессию и предотвращает ее проникновение внутрь камеры. Полученные результаты дают качественно новые представления о гидродинамике сильно закрученных течений.



**Рис. 37.** Профили волны декомпрессии *P* и массовой скорости *U* в потоке магмы для двух физических моделей (моменты времени выбраны для каждой модели произвольно).

*а* — масса газа в пузырьках const (0,15 c); *б* — диффузионный процесс неограничен, микрокристаллиты увеличили плотность ядер в зоне насыщения на порядок (0,5 c).

## Программа III.19.8. Плазмо- и электрохимические методы переработки углеводородного и минерального сырья (координатор член-корр. РАН М. Р. Предтеченский)

В Институте теплофизики им. С. С. Кутателадзе на основе экспериментальных и теоретических исследований установлено, что одним из основных механизмов лазерной абляции при высоких интенсивностях излучения (более 1 ГВт/см<sup>2</sup>) является взрывное испарение (называемое также фазовым взрывом). Механизм обусловлен глубоким перегревом расплавленного слоя материала в область метастабильных состояний и носит ярко выраженный пороговый характер. Однако условия перехода от поверхностного испарения мишени к



Рис. 38. Зависимость глубины абляции графита от плотности энергии  $F_0$  лазерных импульсов длительностью 7 нс на длине волны 532 нм (точки — эксперимент, сплошная линия — расчет). Другие линии соответствуют расчетным значениям максимальной толщины расплавленного углерода без учета (штриховая линия) и с учетом (штрихпунктирная линия) нагрева излучением лазерной плазмы.

взрывной абляции изучены пока слабо, отсутствует адекватная модель фазового взрыва, что затрудняет контролируемое использование этого режима лазерной абляции (рис. 38). Выполнено экспериментальное и теоретическое исследование абляции графита наносекундными лазерными импульсами в широком диапазоне условий облучения от режима поверхностного испарения до развитой взрывной абляции. Найдено, что при интенсивности ~3 ГВт/см<sup>2</sup> происходит резкое увеличение эффективности абляции и импульса отдачи плазмы. Выполнен теоретический анализ излучения расширяющейся углеродной плазмы и разработана модель лазерной абляции с учетом дополнительного нагрева мишени излучением плазмы. Показано, что наблюдаемые в режиме фазового взрыва глубины абляции не могут быть объяснены классической тепловой моделью и необходимо учитывать переизлучение энергии плазмой. Установлено, что режим взрывной абляции реализуется лишь для небольших размеров пятна облучения (площадь менее ~0,1 мм<sup>2</sup>). Показано, что размерный эффект обусловлен характером разлета плазмы на начальных стадиях — для малых пятен разлет является сферическим и сопровождается быстрым падением давления над поверхностью и, соответственно, сильным перегревом поверхностного слоя. Результаты существенно расширяют имеющиеся представления о поведении вещества в экстремальных условиях мощного импульсного нагрева.

#### Программа III.19.9. Неравновесные процессы в потоках разреженного газа и плазмы при синтезе наноструктур (координатор акад. А. К. Ребров)

В Институте теплофизики им. С. С. Кутателадзе разработаны взаимодополняющие модели, описывающие процессы, происходящие в металлических пленках под действием ультракоротких импульсов лазерного облучения в схеме прямой печати. Лазерно-индуцированный перенос материала вдоль луча (LIFT) привлекает все больше внимания в качестве альтернативы литографическим методам для прямой печати различных микро- и оптоэлектронных устройств. Его достоинством является возможность переноса любого вида материалов (от металлов до биологических тканей) при подходящих условиях облучения, выбор которых требует глубокого понимания процессов, происходящих в веществе при его облучении и переносе на подложку-акцептор. Разработанные модели позволили детально исследовать динамику нагрева вещества ультракороткими лазерными импульсами, его термодинамическую эволюцию и формирование термоупругих волн на начальной стадии переноса металлических пленок, а также отрыв материала от подложки-донора и его распад на слои и/или парокапельную смесь. Показано, что модель, основанная на двухтемпературном представлении материала в условиях сверхбыстрого нагрева и уравнениях термоупругости (ДТ—ТУ), является быстрым и эффективным инструментом анализа поведения материала на



**Рис. 39.** Результаты МД-моделирования для плотности энергии в импульсе 1,5 Дж/см<sup>2</sup>.

Темные точки — твердый материал, более светлые расплав. Импульс воздействует слева, со стороны стеклянной подложки. Начальные границы кристалла показаны светлыми линиями. Под действием возникающих в кристалле напряжений стекло продавливается на несколько нанометров.

стадии нагрева и предсказания его дальнейшей эволюции, тогда как молекулярно-динамическое (МД) моделирование, будучи более трудоемким, позволяет детально изучить динамику отрыва материала от подложки и его распада на стадии переноса. Выполнено ДТ-ТУ-моделирование нагрева пленок золота, хрома и цинка толщиной 40 нм для известных экспериментальных условий, что позволило объяснить наблюдаемое различие в морфологии перенесенных микроструктур. С помощью МДмоделирования изучены особенности переноса пленок золота и хрома в зависимости от условий облучения (рис. 39). Продемонстрировано, что ДТ-ТУ-модель адекватно описывает поведение вещества на стадии сверхбыстрого нагрева (рис. 40). Разработанные модели имеют универсальный характер и могут быть применены для изучения процесса LIFT различных материалов при адекватном выборе параметров моделирования.

В том же Институте предложена технология утилизации попутного нефтяного газа путем конверсии в водород и углеродные матрицы. Конверсия реализована в дуговом разряде постоянного тока с графитовыми электродами. Подача метана в реактор осуществляется через один из электродов специальной формы. В зависимости от геометрии этого электрода удается синтезировать различные типы углеродных наноструктур: многослойные углеродные нанотрубки (при использовании наночастиц палладия в качестве катализатора); нанокристаллический графит, углеродный конденсат со случайным типом гибридизации электронных оболочек (сажа) (рис. 41). Водород предполагается использовать в качестве энергоносителя для обеспечения энергетической инфраструктуры скважины. Параметры электродуговой установки: мощность 2 кВт, максимальный расход метана 2 л/мин.

В том же Институте на основе модифицированной модели однослойной адсорбции Ленгмюра проведено численное моделирование формирования нанодисперсных композитов, условий роста нитевидных кристаллов, особенностей молекулярных процессов на поверхности жидкости, описание возникновения капиллярной конденсации на наноуровне, эмиссии димеров с подложки в процессе вакуумного осаждения. Установлено, что при совместной конденсации двухкомпонентного пара на



Слева — результаты МД-моделирования; справа — ДТ—ТУ-моделирования. Результаты хорошо согласуются по максимальному уровню напряжений, достигаемому на стадии нагрева.

одной подложке стационарные режимы формирования нанодисперсных композитов не существуют. Показано, что помимо указанных в известных работах Е. И. Гиваргизова, условия роста нитевидных кристаллов могут возникнуть при определенном сочетании энергии взаимной связи атомов конденсирующегося материала и их энергии адсорбции к подложке  $\varepsilon_S$ . Установлено, что микрошероховатость поверхности конденсации, возникающая, например, при деформации поверхности жидкости или при совместной конденсации двух паров, смещает равновесие пар—конденсат, влияет на скорость массообмена. Установлена также связь между вычисленными слоями поверхностных сгущений Гиббса и массообменом этой поверхности с паровой средой. Показано, что капиллярная конденсация — макроскопическое явление и зарождается на наноуровне вследствие того, что микрошероховатость поверхности, а именно ступени роста, стимулирует локальную адсорбцию примесей. Наконец, получены детальные результаты по явлению эмиссии наночастиц с поверхности конденсации, обнаруженному в экспериментах ранее. Это создает предпосылки для разработки принципиально новой технологии получения наноматериалов.



Рис. 41. Углеродные наноструктуры, синтезированные при пиролизе метана в электрической дуге.