

УДК 533.6.011

ПРЯМОЕ СТАТИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ОБРАЗОВАНИЯ И РОСТА КЛАСТЕРОВ ПРИ РАСШИРЕНИИ ПАРА ОТ ВНЕЗАПНО ВКЛЮЧЕННОГО СФЕРИЧЕСКОГО ИСТОЧНИКА

Н. Ю. Быков, Г. А. Лукьянов, О. И. Симакова

Центр перспективных исследований Санкт-Петербургского государственного
политехнического университета, 195251 Санкт-Петербург
E-mails: nbykov2006@yandex.ru, vakulova@inbox.ru

Рассмотрены процессы образования кластеров кремния при расширении пара в окружающем инертном газе от внезапно включенного сферического источника. Для описания разлета пара и процесса конденсации используется метод прямого статистического моделирования. Предложена модель кластеризации, включающая описание реакций, приводящих к росту и распаду кластеров, и соответствующих процессов энергообмена. Рассмотрены основные закономерности формирования кластеров при разлете пара в газе.

Ключевые слова: кластеры, математическое моделирование, конденсация, нанотехнология.

Введение. Исследование процесса образования и роста кластеров при расширении пара в газе с низким давлением важно для различных приложений, к числу которых относятся, например, синтез кластеров и кластерных материалов из пара, получаемого в результате интенсивного испарения конденсированных веществ [1, 2]. Большой интерес, в частности, представляют задачи о разлете и конденсации пара, образующегося при лазерном испарении малых твердых частиц аэрозолей [3, 4]. В общем случае подобные задачи весьма сложны, поскольку для их теоретического исследования необходимо описание большого количества разнообразных взаимосвязанных физических процессов включая поглощение излучения, нагрев, плавление и испарение вещества, разлет образующегося пара с учетом процессов кластерообразования. Сложность и многопараметричность таких задач, как правило, затрудняют исследование общих закономерностей процессов образования кластеров при интенсивном расширении пара, поэтому наряду с решением сложных реалистичных задач необходимы решения задач в более простых модельных постановках.

В настоящей работе в модельной постановке рассмотрена задача об образовании кластеров при расширении пара кремния в буферном газе (аргоне) от сферического внезапно включенного источника (ВВИ) при условиях, характерных для импульсной лазерной абляции малых частиц аэрозолей. Модель ВВИ является одной из простейших моделей нестационарной газовой динамики и достаточно широко используется при исследовании релаксационных процессов в импульсных струйных течениях [5, 6]. До сих пор возможность детального изучения процессов образования и роста кластеров в условиях интенсивного

неравновесного расширения пара была ограничена отсутствием соответствующих моделей процессов кластерообразования, адекватно описывающих эти процессы в целом (начиная с процесса образования димеров) с учетом совокупности упругих и неупругих процессов взаимодействия частиц пара. В последнее время появились варианты таких моделей [7–9], основанные на методе прямого статистического моделирования (ПСМ) и включающие описание процессов столкновения частиц и энергообмена между ними с различной степенью приближенности.

В данной работе в качестве алгоритма расчета процесса движения пара выбран вариант метода ПСМ, использованный в [7, 10] при моделировании разлета продуктов лазерной абляции плоской мишени. Модель образования и роста кластеров, предложенная в [7], применялась для расчета разлета пара в вакууме. В настоящей работе представлена полная модель кластеризации в случае расширения пара в окружающем инертном газе с низким давлением.

Математическая модель и постановка задачи. Для моделирования течения конденсирующегося пара использован алгоритм ПСМ со схемой столкновений без временного счетчика [11]. Область моделирования представляет собой пространство между испаряющейся сферической поверхностью и внешней границей, находящейся на достаточно большом расстоянии от поверхности сферы: $L = R_\infty - R_w$ (R_w — радиус сферы; R_∞ — радиус внешней границы).

Начальные и граничные условия формулируются следующим образом. В начальный момент времени ($t = 0$) область моделирования ($r > R_w$) заполнена фоновым газом (аргоном) с концентрацией n_2 и температурой T_2 , атомы пара в ней отсутствуют. При $t = 0$ с поверхности ($r = R_w$) начинается испарение газа (атомов кремния). Для описания испарения используется закон Герца — Кнудсена, в соответствии с которым поток испаряющихся атомов кремния равен

$$F^+ = \frac{1}{4} n_s u_{av} = \frac{p_s(T_w)}{(2\pi m k_B T_w)^{1/2}}.$$

Здесь n_s , p_s — концентрация и давление насыщенного пара при температуре поверхности T_w ; $u_{av} = (8k_B T_w / (\pi m))^{1/2}$ — средняя тепловая скорость испаряющихся атомов; k_B — постоянная Больцмана; m — масса атома. Для определения давления $p_s(T_w)$ используется уравнение Клапейрона — Клаузиуса [12]. В рассматриваемой модели ВВИ температура T_w , а следовательно, и поток F^+ со временем не меняются.

Предполагается, что для испаряющихся с поверхности частиц при $t > 0$ функция распределения по скоростям постоянна во времени и является полумаксвелловской:

$$f_w^+ = \frac{F^+}{2\pi} \left(\frac{1}{RT_w} \right)^2 \exp \left(- \frac{v_r^2 + v_\varphi^2 + v_\theta^2}{2RT_w} \right) = \frac{n_s}{(2\pi RT_w)^{3/2}} \exp \left(- \frac{v_r^2 + v_\varphi^2 + v_\theta^2}{2RT_w} \right), \quad v_r > 0.$$

Здесь v_r , v_φ , v_θ — компоненты тепловой скорости частиц; R — газовая постоянная. Частицы, возвращающиеся на поверхность источника, исключаются из процесса моделирования, что соответствует условию их полной конденсации. Частицы, достигающие внешней границы области моделирования $r = R_\infty$, также исключаются из расчета (сверхзвуковая выходная граница).

В модели кластеризации предполагается, что все частицы являются нейтральными, кластеры образуются в результате столкновений частиц. В модели учитываются следующие процессы:

- 1) упругое столкновение атомов: $A + A \longrightarrow A' + A'$;
- 2) рекомбинация атомов: $A + A + A \longrightarrow A'_2 + A'$;
- 3) ассоциация кластера и атома: $A_i + A \longrightarrow A'_k$ ($k = i + 1$);

- 4) ассоциация кластеров: $A_i + A_j \longrightarrow A'_k$ ($k = i + j$);
 5) испарение мономера из кластера: $A_k \longrightarrow A'_{k-1} + A'$.

Здесь штрихом отмечены частицы после столкновения; A — атом кремния.

При наличии буферного газа необходим учет следующих реакций:

- упругое столкновение атомов буферного газа: $B + B \longrightarrow B' + B'$;
 — упругое столкновение атомов кремния и буферного газа: $A + B \longrightarrow A' + B'$;
 — трехчастичная рекомбинация: $A + A + B \longrightarrow A'_2 + B'$;
 — упругое столкновение кластеров и атомов буферного газа: $A_k + B \longrightarrow A'_k + B'$.

Здесь B — атом буферного газа.

Для описания столкновений частиц используется модель твердых шаров. Параметрами кластера A_k являются число атомов k , масса m_k , радиус r_k , поступательная скорость v_k , внутренняя энергия $E_{int,k}$ и энергия связи $E_b(k)$. В соответствии с моделью жидкой сферической капли [1] радиус кластера определяется по формуле

$$r_k = r_w k^{1/3}, \quad r_w = (3m/(4\pi\rho))^{1/3},$$

где r_w — радиус Вигнера — Зейтса; ρ — плотность кластерообразующего материала.

В рассматриваемой модели предполагается, что кластеры обладают полностью возбужденными вращательными и колебательными степенями свободы. Внутренняя энергия кластера A_k представляется в виде

$$E_{int,k} = E_{r,k} + E_{v,k}, \quad E_{r,k} = \zeta_r k_B T_{r,k}/2, \quad E_{v,k} = \zeta_v k_B T_{v,k}.$$

Здесь $E_{r,k}$, $E_{v,k}$ — энергии вращательных и колебательных степеней свободы; ζ_r , ζ_v — числа вращательных и колебательных степеней свободы; $T_{r,k}$, $T_{v,k}$ — вращательная и колебательная температуры кластера. Для димера $\zeta_r = 2$, $\zeta_v = 1$, для других кластеров $\zeta_r = 3$, $\zeta_v = 3k - 6$. Предполагается, что $T_{r,k} = T_{v,k} = T_{int,k}$ ($T_{int,k}$ — внутренняя температура кластера A_k).

Для определения энергии связи $E_b(k)$ использованы данные [13], аппроксимированные формулой

$$E_b(k)/k = 4,5 - 12,384 \exp(-k^{2/3})$$

(величина E_b измеряется в электронвольтах).

Модель испарения основана на использовании приближенной (оценочной) формулы теории Райса — Рамспергера — Касселя, определяющей скорость распада многоатомных молекул (см. процесс (5)). В соответствии с этой формулой частота испарения атома из кластера определяется следующим образом:

$$\nu = \nu_0 k_s \exp(-\zeta_v \Delta E_b / E_{v,k}), \quad \Delta E_b = E_b(k) - E_b(k-1)$$

(ν_0 — характерная частота колебаний; k_s — число поверхностных атомов). В проведенных расчетах $k_s = k$ (вследствие малого размера получаемых кластеров), $\nu_0 = 10^{13} \text{ с}^{-1}$.

Модель энергообмена, сопровождающего рассматриваемые процессы, основана на модели Ларсена — Боргнакке [11], подробно описанной в работе [7].

Для анализа и представления результатов моделирования использованы следующие безразмерные параметры:

$$\frac{n}{n_s}, \quad \frac{u}{(2RT_w)^{1/2}} = \beta u, \quad \frac{T}{T_w}, \quad c_k = n_k / \sum_{k=1}^{\infty} k n_k, \quad \tau = \frac{t}{t_0}.$$

Здесь u — средняя скорость потока; β — величина, обратно пропорциональная наиболее вероятной скорости частиц пара; c_k — объемная доля кластера A_k ; $t_0 = R_w / \sqrt{2RT_w} = \beta R_w$ — характерное “газодинамическое” время.

Для конкретных веществ (в данном случае кремния и аргона) при заданной начальной функции распределения по скоростям и заданных скоростях реакций образования и распада кластеров исследуемое течение (поле относительных параметров) однозначно определяется следующими параметрами: числом Кнудсена $\text{Kn} = \lambda_s/R_w$ (λ_s — длина свободного пробега атомов кремния, определенная по равновесной концентрации пара n_s); безразмерным временем $\tau = t/(\beta R_w)$; отношением концентраций пара и фонового газа n_s/n_2 ; отношением температур T_w/T_2 .

Результаты моделирования и их анализ. Моделирование выполнено для сферического источника атомарного пара кремния при $T_w = 6000$ К и числах Кнудсена $\text{Kn} = 0,01$ ($R_w = 10^{-6}$ м) и $\text{Kn} = 0,001$ ($R_w = 10^{-5}$ м). Характерное отношение температур пара кремния и аргона $T_w/T_2 = 20$.

Сначала рассмотрим газодинамическую структуру и параметры течения. На рис. 1 представлены профили концентрации n/n_s , скорости βu и температуры T/T_w для смеси кремния и аргона при $\text{Kn} = 0,001$, $n_2/n_s = 0,1$ и $\tau = 5$ для вариантов расчета с учетом и без учета конденсации. На рис. 1, а приведены также профили концентрации пара кремния и аргона для случая течения при наличии конденсации.

Основные закономерности истечения газа в затопленное пространство от ВВИ известны [5, 6]. В каждый момент времени газодинамическая структура течения определяется мгновенными положениями трех характерных газодинамических разрывов (рис. 1, а): первичной (головной) ударной волны УВ1, распространяющейся во внешнем газе; контактной поверхности КП, разделяющей пар и внешний газ, и вторичной ударной волны УВ2, формирующейся в процессе истечения пара. Истекающий пар играет роль сферического поршня. В рамках предлагаемой модели контактная поверхность КП представляет собой слой смешения пара и внешнего газа. В качестве положения контактной поверхности принимается радиус r_k , при котором концентрации паров кремния и аргона равны. Указанные

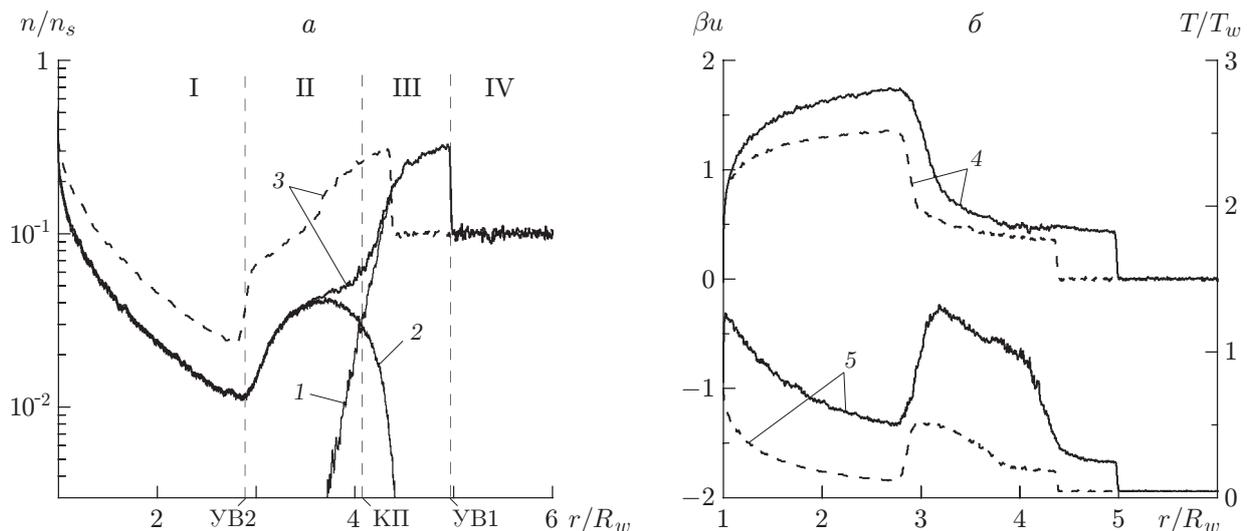


Рис. 1. Профили концентрации n/n_s смеси и отдельных компонентов (а), а также скорости βu и температуры T/T_w смеси (б) при $\text{Kn} = 0,001$, $n_2/n_s = 0,1$, $\tau = 5$:

сплошные линии — при наличии конденсации в потоке; штриховые — в отсутствие конденсации; 1 — концентрация аргона; 2 — концентрация кремния; 3 — концентрация смеси аргона и кремния; 4 — скорость смеси аргона и кремния; 5 — температура смеси аргона и кремния; I–IV — области течения (I — область сверхзвукового свободного расширения пара; II — область сжатого слоя пара; III — область сжатого слоя аргона; IV — область невозмущенного внешнего газа)

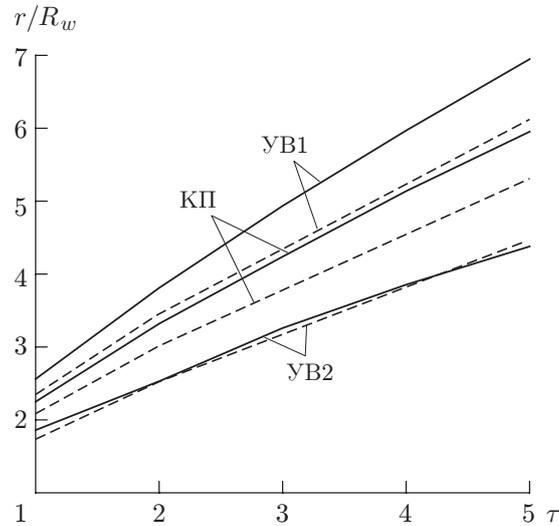


Рис. 2. Траектории движения характерных поверхностей для $Kn = 0,001$, $n_2/n_s = 0,01$ при наличии конденсации в потоке (сплошные линии) и в ее отсутствие (штриховые линии)

три разрыва разделяют четыре области течения: область сверхзвукового свободного расширения пара I, область сжатого слоя пара II, область сжатого слоя аргона III и область невозмущенного внешнего газа IV (рис. 1, *a*). С течением времени радиус контактной поверхности r_k увеличивается. При этом масса аргона, вытесняемого паром, также увеличивается. Поток импульса от источника остается постоянным. Таким образом, с течением времени скорость движения внешнего газа в области III уменьшается, а ударная волна УВ1 затухает. В области I газодинамические параметры изменяются так же, как при истечении пара в вакуум от сферического источника [6]: плотность, температура и давление уменьшаются, а скорость растет. Область I ограничена скачком уплотнения (УВ2), на котором сверхзвуковой поток пара превращается в дозвуковой. При переходе через этот скачок плотность, температура и давление возрастают, а скорость уменьшается.

На рис. 2 представлены траектории движения ударных волн УВ1, УВ2 и контактной поверхности КП при $Kn = 0,001$, $n_2/n_s = 0,01$ для вариантов расчета с учетом и без учета конденсации. С течением времени скачок, соответствующий УВ1, и контактная поверхность монотонно удаляются от источника с уменьшающейся скоростью, а скачок, соответствующий УВ2, достигает стационарного положения, которое зависит от величины n_2/n_s : с уменьшением n_2/n_s предельное (стационарное) расстояние вторичной ударной волны УВ2 от источника увеличивается.

Данные, представленные на рис. 1, 2, показывают, что при $Kn = 0,001$ конденсация пара в целом оказывает сильное влияние на структуру и параметры течения. Конденсация достаточно слабо влияет на размер области свободного расширения I, но приводит к существенному увеличению размера области сжатого слоя II. В результате размер всей области течения возрастает. В области I конденсация и сопровождающее ее тепловыделение приводят к повышению температуры (см. рис. 1, *b*) и уменьшению концентрации смеси (см. рис. 1, *a*). При этом давление смеси увеличивается, в результате чего скорость разлета пара возрастает (см. рис. 1, *b*). Конденсация пара с образованием малых кластеров начинается в непосредственной близости от поверхности источника, где плотность пара максимальна. Для $Kn = 0,001$ максимум температуры $T \simeq 1,25T_w$ при $\tau > 1$ достигается в точке $r/R_w \simeq 1,1$ (на рис. 1, *b* этот максимум не виден из-за большого масштаба графика).

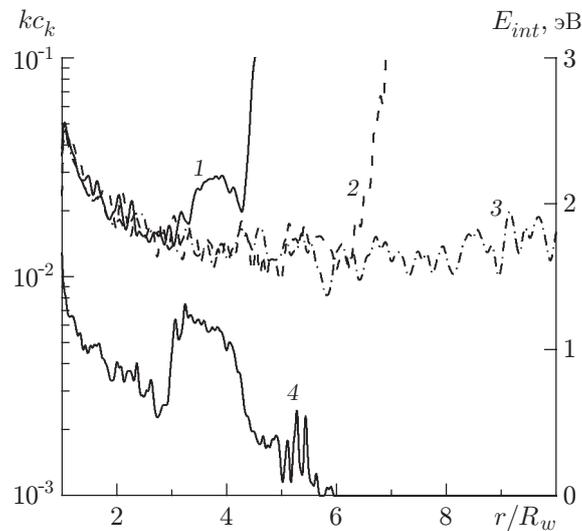


Рис. 3. Профили массовой доли $kc_k(r/R_w)$ кластеров A_k ($k = 2$) (1–3), а также изменение их внутренней энергии (4) при $\text{Kn} = 0,001$, $\tau = 5$:
1, 4 — $n_2/n_s = 0,1$; 2 — $n_2/n_s = 0,01$; 3 — $n_2/n_s = 0$

Сильный нагрев пара при конденсации приводит к значительному уменьшению числа Маха в области I. Перед ударной волной УВ2 число Маха $M \approx 2,5$ (в случае отсутствия конденсации $M \approx 4,2$). Существенное уменьшение числа Маха перед ударной волной УВ2 приводит к уменьшению величины сжатия и нагрева пара на этой волне. Суммарное влияние конденсации на параметры в области II проявляется в значительном уменьшении концентрации и росте температуры.

Рассмотрим особенности изменения параметров компонентов смеси (атомов и кластеров). На рис. 3 показано изменение внутренней энергии E_{int} кластеров A_k ($k = 2$) в потоке при $\tau = 5$, $\text{Kn} = 0,001$, $n_2/n_s = 0,1$ (кривая 4). В прилегающей к поверхности источника области I свободного расширения пара ($r \leq 3R_w$) значение E_{int} уменьшается, при этом влияние окружающего газа на E_{int} отсутствует. Во вторичной ударной волне ($r/R_w \approx 3$) внутренняя энергия кластеров резко возрастает, а в сжатом слое пара ($r/R_w \approx 3 \div 4$) медленно уменьшается. Далее вниз по потоку расположен сжатый слой внешнего газа (область III), температура которого выше, чем в невозмущенном аргоне, но значительно ниже, чем в облаке кремния. Столкновения с относительно холодными частицами внешнего газа приводят к быстрому уменьшению внутренней энергии кластеров.

Сравнение распределений $kc_k(r/R_w)$ ($k = 2$) при различных значениях плотности внешнего газа (кривые 1–3 на рис. 3) показывает, что в области свободного расширения облака кремния массовые доли всех кластеров, как и иные параметры пара, не зависят от параметра n_2/n_s и их распределения аналогичны распределениям в случае истечения в вакуум. Для всех размеров кластеров зависимости $kc_k(r/R_w)$ качественно одинаковы. Как малые кластеры ($k = 2, 3$), так и крупные кластеры образуются вблизи поверхности источника в плотной части области свободного расширения. После достижения максимума (на рис. 3 этот максимум не виден из-за большого масштаба графика) для кластеров A_k ($k = 2 \div 10$) значения kc_k в области свободного расширения монотонно уменьшаются.

В области II, содержащей основную массу испаряемого вещества, происходят сжатие и нагрев пара, а также изменение внутренней энергии кластеров. Это оказывает существенное влияние на изменение массовых долей кластеров, причем характер изменения kc_k для мелких и крупных кластеров существенно различен. В области II конкурируют про-

цессы слипания, интенсивность которых возрастает с увеличением плотности кремния, и процессы испарения кластеров (скорость испарения существенно возрастает из-за скачкообразного роста температуры кластеров в области II). В результате массовая доля малых кластеров увеличивается (см. рис. 3), а массовая доля крупных кластеров уменьшается.

Область III заполнена, главным образом, аргоном в сжатом состоянии, температура которого значительно меньше, а концентрация значительно выше температуры и концентрации пара кремния в области II. В область III проникает лишь малая доля атомов и кластеров кремния. При этом по мере удаления от контактной поверхности КП вниз по течению состав пара кремния изменяется: доля атомов уменьшается, а доля кластеров увеличивается. В результате наблюдается увеличение массовой доли кластеров (см. рис. 3), что не является следствием конденсации; столкновения частиц кремния в этой зоне течения отсутствуют из-за малой концентрации пара кремния.

На рис. 4 представлено изменение во времени суммарной (по всему объему облака пара) массовой доли кластеров α при $\text{Kn} = 0,010; 0,001$ и различных плотностях внешнего газа. В рассмотренных условиях присутствие внешнего газа оказывает незначительное влияние на суммарную степень конденсации пара, поскольку конденсация происходит в основном в пределах области свободного расширения пара и завершается к моменту времени $\tau = 1 \div 2$ в результате установления стационарного режима течения в плотной зоне потока, прилегающей к источнику. После “замораживания” состава пара при $\text{Kn} = 0,001$ значение суммарной степени конденсации примерно в два раза превышает значение α при $\text{Kn} = 0,01$.

Распределение массовой доли кластеров по их размерам $kc_k(k)$, осредненное по объему облака, при $\tau = 5$, $\text{Kn} = 0,010; 0,001$ приведено на рис. 5 для $n_2/n_s = 0; 0,1$. При $\text{Kn} = 0,01$ размер получаемых кластеров достаточно мал, с увеличением k массовая доля кластеров

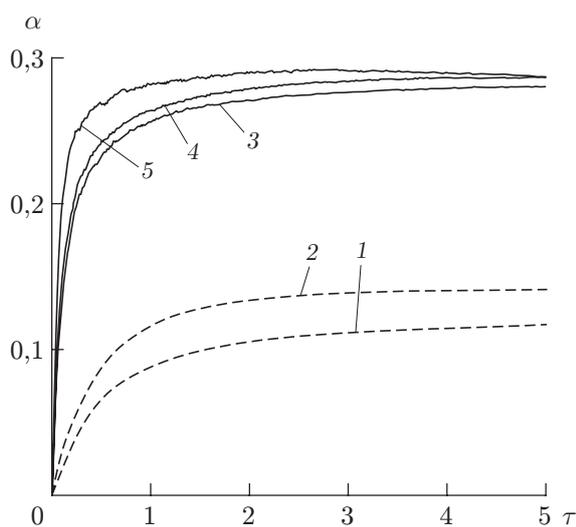


Рис. 4

Рис. 4. Зависимость суммарной массовой доли кластеров α от времени τ :
1, 2 — $\text{Kn} = 0,01$ (1 — $n_2/n_s = 0$; 2 — $n_2/n_s = 0,1$); 3–5 — $\text{Kn} = 0,001$ (3 — $n_2/n_s = 0$;
4 — $n_2/n_s = 0,01$; 5 — $n_2/n_s = 0,1$)

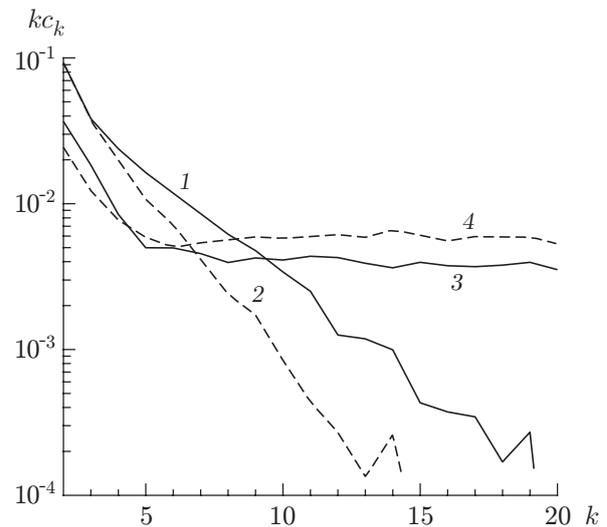


Рис. 5

Рис. 5. Зависимость $kc_k(k)$ при $\tau = 5$:
1, 2 — $\text{Kn} = 0,01$ (1 — $n_2/n_s = 0,1$; 2 — $n_2/n_s = 0$); 3, 4 — $\text{Kn} = 0,001$ (3 — $n_2/n_s = 0,1$;
4 — $n_2/n_s = 0$)

быстро уменьшается. Значение $kc_k > 0,001$ характерно для кластеров с $k < 10 \div 12$. Наличие окружающего газа практически не оказывает влияния на массовую долю димеров и тримеров, но приводит к увеличению значения kc_k для кластеров с $k \geq 4$. При $\text{Kn} = 0,001$ распределение $kc_k(k)$ имеет иной характер. Массовая доля димеров и тримеров остается наибольшей, для кластеров с $k > 4$ распределение $kc_k(k)$ в диапазоне $k = 4 \div 50$ близко к равномерному. Влияние параметра n_2/n_s на распределение $kc_k(k)$ незначительно. При меньших значениях Kn следует ожидать эволюции распределения $kc_k(k)$ в зависимость с максимумом при некотором значении $k_m \gg 1$.

Число Кнудсена, которое в рассматриваемых условиях является основным критерием подобия, характеризующим процесс конденсации пара, можно представить в виде

$$\text{Kn} = \frac{\lambda_s}{R_w} = \frac{1}{\sqrt{2} n_s \sigma_1 R_w} = \frac{k_B T_w}{\sqrt{2} \sigma_1 p_s R_w},$$

где p_s — давление равновесного пара кремния на поверхности источника при $T = T_w$; σ_1 — сечение столкновения атомов кремния. Из последнего соотношения следует, что при $T_w = \text{const}$ число Кнудсена определяется значением $p_s R_w$. Результаты расчетов, представленные на рис. 4, свидетельствуют о том, что суммарная массовая доля кластеров α пропорциональна Kn^{-s} , где $s < 1$ (при $\text{Kn} = 0,010 \div 0,001$ $s \simeq 0,3$).

Представленные результаты расчетов процесса образования кластеров при лазерном испарении частиц аэрозоля ($R_w = 10^{-7} \div 10^{-5}$ м) дают общее представление об эволюции структуры и параметров течения вблизи малой частицы при ее испарении под действием лазерного излучения, а также об основных закономерностях процессов образования кластеров в таком течении. Исследованная модель внезапно включенного сферического источника приближенно моделирует разлет пара в вакууме или газе от испаряющейся частицы только на начальной стадии интенсивного испарения. Разлет облака пара, образовавшегося от одиночной частицы после завершения ее испарения, описывается иной моделью, учитывающей конечную длительность лазерного импульса. В более детальной постановке необходимо учитывать изменение размеров частицы, эволюцию ее теплового состояния и временную зависимость интенсивности лазерного излучения.

Как показали расчеты, в рассмотренной модели разлета конденсирующегося пара в окружающем газе влияние внешнего газа на процесс конденсации незначительно. Однако это не означает, что при быстром испарении малых частиц внешний газ не влияет на конденсацию. Существенное влияние окружающего газа на процесс конденсации возможно (и проявляется при достаточно высокой плотности внешнего газа) на последующей изобарической (диффузионной) стадии расширения пара в газ.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Смирнов Б. М.** Процессы в плазме и газах с участием кластеров // Успехи физ. наук. 1997. Т. 167, № 11. С. 1169–1200.
2. **Смирнов Б. М.** Генерация кластерных пучков // Успехи физ. наук. 2003. Т. 173, № 6. С. 609–648.
3. **Копытин Ю. Д.** Воздействие лазерного и ВЧ-излучений на воздушную среду / Ю. Д. Копытин, Е. Т. Протасевич, Л. К. Чистякова, В. И. Шишковский. Новосибирск: Наука. Сиб. издат. фирма, 1992.
4. **Lukyanov G. A., Khang Y., Leshchev D. V., et al.** Modeling of processes of clusters formation under pulsed laser ablation of carbon particles in an aerosol // Fullerenes, Nanotubes, Carbon Nanostruct. 2006. V. 14, N 2/3. P. 507–512.

5. **Чекмарев С. Ф.** Импульсные течения газа в сверхзвуковых соплах и струях. Новосибирск: Ин-т теплофизики СО АН СССР, 1989.
6. **Дулов В. Г.** Газодинамика процессов истечения / В. Г. Дулов, Г. А. Лукьянов. Новосибирск: Наука. Сиб. отд-ние, 1984.
7. **Быков Н. Ю., Лукьянов Г. А.** Прямое статистическое моделирование импульсной лазерной абляции металлов с процессами кластеризации в испаренном облаке // Теплофизика и аэромеханика. 2006. Т. 13, № 4. С. 569–582.
8. **Itina T. E., Sentis M., Marine W.** Synthesis of nanoclusters by nanosecond laser ablation: Direct simulation Monte Carlo // Appl. Surf. Sci. 2006. V. 252. P. 4433–4438.
9. **Zeifman M. I., Garison B. J., Zhigilei L. V.** Combined molecular dynamics — direct simulation Monte Carlo computation study of laser ablation plume evolution // J. Appl. Phys. 2002. V. 92, N 4. P. 2181–2193.
10. **Быков Н. Ю., Лукьянов Г. А.** Моделирование импульсной лазерной абляции твердого материала на базе тепловой модели мишени и прямого статистического моделирования разлета пара // Теплофизика и аэромеханика. 2003. Т. 10, № 3. С. 401–410.
11. **Bird G. A.** Molecular gas dynamics and direct simulation of gas flows. Oxford: Clarendon Press, 1994.
12. **Bulgakov A. V., Bulgakova N. M.** Gas-dynamic effects of the interaction between a pulsed laser-ablation plume and the ambient gas: analogy with an underexpanded jet // J. Phys. D: Appl. Phys. 1998. V. 31. P. 693–703.
13. **Bei Liu, Zhong-Yi Lu, Bicaï Pan, et al.** Ionization of medium-sized silicon clusters and the geometries of the cations // J. Chem. Phys. 1998. V. 109, N 21. P. 9401–9409.

Поступила в редакцию 11/XII 2007 г.
