

### Отзыв официального оппонента

О диссертационной работе Смирнова Андрея Михайловича «Дислокационные модели релаксации напряжений несоответствия в цилиндрических, сферических и плоских композитных структурах», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.04 – Механика деформируемого твердого тела.

#### Актуальность работы

Диссертация Смирнова А.М. посвящена теоретическому исследованию процессов релаксации напряжений несоответствия за счет образования различных дислокаций в достаточно широком спектре композитных наноструктур: в полых и сплошных композитных наночастицах и нанопроволоках с ядром круглого сечения, сплошных нанопроволоках с симметрично расположенным ядром квадратного сечения и двух- и трехслойных пластинах. Все типы композитных наноструктур, рассматриваемых в работе, вызывают большой научный интерес, а многослойные пластины, к тому же, имеют разнообразное практическое применение.

В настоящее время активно рассматривается возможное использование композитных наночастиц при создании устройств накопления и передачи информации, сенсоров и солнечных батарей, а также в медицине и химии. Неоднородные нанопроволоки обладают уникальными электронными и оптическими свойствами, в связи с чем их применению, в частности, в наноразмерных транзисторах, устройствах передачи информации и логических устройствах, посвящено большое количество работ, выполненных в России и за рубежом. III-нитридные гетероструктуры уже сейчас являются основой для массово производимых светодиодов и лазеров, а также перспективны в качестве основы при создании мощных транзисторов с высоким напряжением пробоя.

Релаксация напряжений несоответствия в композитных наноструктурах важна с нескольких точек зрения. Во-первых, экспериментально показано, что напряженное состояние и дефектность композитных наночастиц значительно влияют на их химические свойства. Во-вторых, наличие дислокаций в наночастицах и нанопроволоках не может не отразиться на их электронных и оптических свойствах. В-третьих, хорошо известно, что образование дислокаций в нитридных гетероструктурах губительным образом сказывается на характеристиках приборов, созданных на их основе: резко снижает квантовый выход светодиодов и лазеров за счет увеличения вероятности безызлучательной рекомбинации на дислокациях, а также уменьшает подвижность электронов в канале и увеличивает ток утечки транзистора.

Исходя из вышесказанного, тема диссертационной работы Смирнова А.М. представляется весьма актуальной.

## Новизна и достоверность результатов и выводов

Смирнов А.М. в своей работе получил аналитическое решение для поля напряжений в композитной нанопроволоке с симметрично расположенным ядром квадратного поперечного сечения с трехмерным дилатационным несоответствием. И на основе этого решения впервые теоретически изучил возможное зарождение частичных и полных дислокаций несоответствия и их диполей в композитныхnanoструктурах такого рода.

В рамках рассматриваемой работы проведены количественные оценки изменений энергии композитных наночастиц и нанопроволок типа «ядро-оболочка», а также двух- и трехслойных пластин при зарождении в них прямоугольных призматических дислокационных петель. Полученные оценки позволили определить оптимальные размеры и положение образующихся дислокационных петель в зависимости от параметров структур.

В диссертации также подробно изучен процесс релаксации напряжения несоответствия в полуполярных и неполярных III-нитридных гетероструктурах за счет образования дислокаций несоответствия путем базисного и призматического скольжения с учетом кристаллической симметрии этих материалов. Для III-нитридных гетероструктур проведено сравнение полученных результатов с имеющимися экспериментальными данными.

Достоверность полученных в диссертации результатов обусловлена грамотным применением подходов и моделей, общепринятых в современной механике. Корректность выполнения теоретического анализа подтверждена сравнением полученных результатов с результатами численных расчетов, проведенных в коммерческих математических пакетах, а также с имеющимися экспериментальными данными. Кроме того, разработанные модели в предельных случаях совпадают с уже известными.

## Научная и практическая значимость работы

Научная и практическая значимость диссертации Смирнова А.М. несомненна и частично отмечена в предыдущих разделах отзыва. Стоит дополнить, что на основе результатов рассматриваемой работы можно построить модели релаксации композитных nanoструктур, описывающие не только возможность образования дислокаций, но и эволюцию распределения напряжений в них, к примеру, в процессе их роста, что, в свою очередь, позволит лучше контролировать параметры получаемых nanoструктур и сократить количество дорогостоящих экспериментов при разработке различных приборов.

С практической точки зрения наиболее значимой частью работы представляется исследование зарождения дислокаций несоответствия в полуполярных и неполярных III-нитридных плоских структурах, которые в ближайшее время могут получить широкое применение в промышленности.

## Общая характеристика работы

Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, списка литературы (97 наименований), 7 приложений, изложена на 174 страницах, содержит 78 рисунков.

Во введении приводится обоснование актуальности выбранной темы исследования, степени ее разработанности, а также сформулированы цели и задачи исследования и основные положения, выносимые на защиту. Показаны научная и практическая значимость работы, ее достоверность. Описаны методы исследования. Отмечен личный вклад автора.

Первая глава носит обзорный характер и описывает имеющиеся в литературе результаты теоретических и экспериментальных исследований дефектов в композитных наноструктурах и их влияния на свойства данных структур.

Во второй главе приведено решение граничной задачи теории упругости о напряженно-деформированном состоянии длинного цилиндра с симметрично расположенным ядром квадратного поперечного сечения. Дано теоретическое описание процессов релаксации напряжений несоответствия в композитных наноструктурах (полых и сплошных композитных наночастицах и нанопроволоках типа «ядро-оболочка» с ядрами, имеющими круглое или квадратное поперечное сечение, двух- и трехслойных пластинах) за счет зарождения полных или частичных дислокаций несоответствия и их диполей, круговых и прямоугольных призматических дислокационных петель. Определены критические условия зарождения дислокаций несоответствия различной конфигурации в композитных наноструктурах.

В третьей главе приведено описание релаксации напряжений несоответствия в III-нитридных плоских структурах за счет образования дислокаций несоответствия путем базисного или призматического скольжения, определены критические условия их формирования. Дано сравнение изотропного и трансверсально-изотропного приближений для описания процессов релаксации напряжений несоответствия в III-нитридных плоских структурах. Приведено сравнение теоретических расчетов с экспериментальными данными.

В заключении приведены основные выводы работы.

## Замечания

1. На стр. 26 в обзоре литературы обсуждается влияние ориентации направления роста нанопроволоки относительно кристаллографических осей, однако не указан даже тип кристаллической решетки материала нанопроволоки.
2. В разделе 2.1 диссертации рассматривается скольжение частичных и полных дислокаций несоответствия в композитной нанопроволоке с квадратным сечением ядра (Рис. 25, стр. 44). При этом выделяются два возможных варианта скольжения в параллельных плоскостях, отстоящих на вектор Бюргерса от интерфейса ядро/оболочка вглубь ядра или оболочки. Выбор этих двух плоскостей скольжения никак не объясняется в тексте работы.

3. Раздел 2.2 посвящен изучению условий формирования прямоугольных призматических дислокационных петель в различных композитных наноструктурах, однако мотивация изучения петель именно такой формы в диссертации отсутствует.
4. На стр. 91 имеется ссылка на Рис. 45г. Такой рисунок в работе отсутствует.
5. В разделе 3.1 при расчете критических толщин для формирования дислокаций несоответствия в полуполярных и неполярных III-нитридных структурах автор использует 4 системы координат (Рис. 55, стр. 115). Одна из этих систем ("X"Y"Z") является лишней. Имел смысл ограничиться тремя системами координат, чтобы дополнительно не запутывать вывод конечных выражений.
6. На Рис. 56 (стр. 122) представлены рассчитанные значения критических толщин III-нитридных гетероструктур, однако в тексте диссертации не указаны значения физических параметров материалов, использованные при этих расчетах.
7. Представленные на Рис. 56 (стр. 122) зависимости критической толщины III-нитридных гетероструктур от угла отклонения направления роста от полярной оси 'c' интересны тем, что в случае нулевого угла отклонения, дислокации несоответствия в базисной плоскости имеют конечную, достаточно низкую критическую толщину. Хотя очевидно, что при нулевом угле отклонения сдвиговые напряжения в базисной плоскости исчезают, и образование базисных дислокаций несоответствия становится невозможным. Обсуждение данного вопроса в тексте диссертации было бы весьма уместным.

Указанные замечания не являются принципиальными, относятся в большей степени к стилю оформления, и не меняют общую положительную оценку работы. Диссертация является законченным актуальным исследованием, содержит новые достоверные результаты, имеющие научное и практическое значение. Результаты работы опубликованы в 8-ми статьях в научных журналах из списка ВАК и докладывались автором на большом количестве российских и международных конференций. Автореферат правильно и достаточно полно отражает содержание диссертации.

Таким образом, диссертационная работа Смирнова Андрея Михайловича «Дислокационные модели релаксации напряжений несоответствия в цилиндрических, сферических и плоских композитных структурах» является законченной научно-квалификационной работой, удовлетворяет требованиям ВАК и соответствует п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением правительства РФ № 842 от 24.09.2013 г. (ред. от 28.08.2017 г.), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.04 – «Механика деформируемого твердого тела», а ее автор заслуживает присуждения искомой степени.

Официальный оппонент,  
кандидат физико-математических наук (01.04.10),  
инженер-программист ООО «Софт-Импакт»

Рудинский Михаил Эдуардович

27.11.2017 Рудинский

Контактная информация:

Общество с ограниченной ответственностью «Софт-Импакт»,

194156, Россия, г. Санкт-Петербург, проспект Энгельса 27,

корпус 12-в, офис 405, веб-сайт: <http://www.softimpact.ru>

Тел.: +7 (812) 320-43-90

E-mail: contact@softimpact.ru

Подпись руки Рудинского М. Э. заверена.



Михаил Шалеев 8. Н., Руководитель  
директор ООО "Софт-Импакт"