

УТВЕРЖДАЮ:



Директор ИПСМ РАН,

Член-корреспондент РАН

Р.Р. Мулюков

«20» ноября 2017 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук (ИПСМ РАН)

на диссертационную работу Смирнова Андрея Михайловича

«Дислокационные модели релаксации напряжений несоответствия в цилиндрических, сферических и плоских композитных структурах», представленную на соискание степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.04 – Механика деформируемого твердого тела

Актуальность темы диссертации. Одно из важных направлений развития современной нанотехнологии составляет разработка и применение композитныхnanoструктур типа составных наночастиц и нанопроволок со структурой «ядро-оболочка», плоских гетероструктур и т.д. Такие объекты находят широкое применение в фотонике, электронике, катализе и т.д. Свойства композитных nanoструктур зависят не только от химического состава, но и от геометрии фаз, наличия упругих деформаций и внутренних механических напряжений, а также от присутствия дефектов кристаллической структуры. Экспериментальные и теоретические исследования показывают, что присутствие дефектов в композитных nanoструктурах, так же, как и в nanoструктурах других типов, значительно влияет на их электронные, оптические и механические свойства.

Дефекты композитных nanoструктур возникают главным образом в процессе их синтеза как результат релаксации напряжений несоответствия, вызванных различием параметров решетки компонент. Поэтому выяснение возможных механизмов релаксации напряжений несоответствия, видов и параметров образующейся при этом дефектной структуры представляет собой одну из важных задач обеспечения необходимых свойств композитных nanoструктур.

В связи с этим, диссертационная работа Смирнова А.М., в которой исследованы процессы релаксации напряжений несоответствия путем зарождения дислокаций несоответствия в цилиндрических, сферических и плоских композитных структурах, определены критические условия релаксации, при которых она становится энергетически выгодной, является актуальным научным исследованием.

Общая характеристика работы

Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, списка используемых источников (97 наименований) и приложений. Объем диссертации составляет 174 страницы.

Во введении обоснована актуальность темы диссертации, сформулированы цели и задачи исследования, научная новизна и практическая значимость работы, сформулированы основные положения, выносимые на защиту.

Первая глава представляет собой обзор литературы, в котором автор анализирует предшествующие теоретические модели, описывающие дефекты в композитных наноструктурах, экспериментальные данные о видах дефектов, наблюдавшихся в композитных наноструктурах, и об их влиянии на функциональные свойства композитных наноструктур.

Во второй главе получено решение граничной задачи теории упругости о напряженно-деформированном состоянии композитной нанопроволоки с включением в виде длинного параллелепипеда. В отличие от имеющегося в литературе анализа подобной структуры, автор отошел от предположения плоской деформации и рассмотрел более общий случай, когда включение испытывает собственную трехмерную дилатацию. Полученное решение использовано для анализа следующих возможных моделей релаксации напряжений несоответствия в композитных нанопроволоках с включением в виде длинного параллелепипеда путем образования дислокаций: скольжение полных или частичных дислокаций несоответствия в оболочках и ядрах нанопроволоки, переползание полных дислокаций несоответствия в оболочке, зарождение диполей полных и частичных дислокаций несоответствия с вершиной включения. С этой целью рассчитывается изменение энергии системы по сравнению с бездефектным состоянием в зависимости от положения дислокаций, и определяются энергетический барьер для возникновения дефекта и положение его энергетически наиболее выгодного расположения. Показано, что во всех случаях зарождения одиночных дислокаций имеется энергетический барьер, его величина составляет несколько электронвольт на один нанометр длины дефекта. При образовании диполей полных или частичных дислокаций энергетический барьер ниже или может даже отсутствовать.

В этой же главе проведено сравнение критических условий зарождения прямоугольных и круговых призматических дислокационных петель в полых и сплошных наночастицах и нанопроволоках типа «ядро-оболочка», а также критических условий зарождения прямоугольных призматических дислокационных петель и прямолинейных дислокаций несоответствия в двух- и трехслойных наногетероструктурах. Выявлена энергетически наиболее предпочтительная конфигурация дислокаций несоответствия, зарождающихся в композитных наноструктурах. Проведено сравнение композитных наноструктур по степени устойчивости к зарождению дислокаций несоответствия.

В третьей главе рассмотрена релаксация напряжений несоответствия в композитных наноструктурах на основе нитридов металлов III группы за счет образования дислокаций несоответствия путем призматического или базисного скольжения. Проведено сравнение критических условий зарождения дислокаций несоответствия путем базисного или призматического скольжения. Дано сравнение изотропного и трансверсально-изотропного приближений для описания процессов релаксации напряжений несоответствия в III-нитридных гетероструктурах. Приведено сравнение экспериментальных данных о дислокационной структуре III-нитридных гетероструктур и результатов теоретических расчетов.

Заключение содержит основные результаты и выводы работы.

В результате проведенных исследований диссертантом показано, что полые нанопроволоки и наночастицы более устойчивы к образованию дислокаций несоответствия, и более выгодным является образование диполей дислокаций несоответствия. Показано, что в III-нитридных структурах в зависимости от угла между направлением роста структур и полярной осью возможны различные механизмы релаксации напряжений несоответствия, а именно, зарождение дислокаций в результате либо базисного, либо призматического скольжения.

Полученные в диссертационной работе результаты в полной мере отвечают критерию **научной новизны**. В работе впервые даны количественные оценки полного изменения энергии при зарождении прямоугольных и круговых призматических дислокационных петель, полных и частичных дислокаций несоответствия и их диполей. Новым представляется также теоретический анализ критических условий формирования дислокаций несоответствия путем призматического скольжения с учетом симметрии кристаллической решетки в гетероструктурах на основе нитридов металлов III группы. В работе получено аналитическое решение в замкнутой форме для напряженно-деформированного состояния композитной нанопроволоки с ядром в виде длинного параллелепипеда, которое было использовано при описании процессов релаксации.

Практическая значимость работы заключается в возможности использования результатов теоретических расчетов для уменьшения количества дорогостоящих экспериментов, необходимых для получения композитных структур с прогнозируемым составом дефектов.

Обоснованность и достоверность научных результатов, выводов и рекомендаций не вызывает сомнений, так как результаты работы получены с применением современных взаимодополняющих научных методов исследования, а полученные результаты теоретических расчетов согласуются с экспериментальными данными.

К диссертационной работе имеются следующие замечания и пожелания.

1. Анализ показывает, что для зарождения дефектов существует энергетический барьер, то есть, до занятия положения, в котором дефект приводит к выигрышу энергии, он проходит положения с повышением энергии. Было бы полезно обсудить, каким образом возможно преодоление этого энергетического барьера образующейся дислокацией, возможно ли это при умеренных температурах или потребует высокой температуры для активации.

2. В композитных структурах важным является не только несоответствие параметров решетки, но и различие упругих модулей. При расчете напряжений несоответствия молчаливо предполагается равенство упругих модулей составляющих. Понятно, что решение и без того сложной математической задачи становится чрезвычайно трудным, если учитывать еще и различие упругих модулей. Однако было бы полезно качественно оценить, к каким изменениям могли бы привести эти отличия, сопоставима ли их роль с ролью несоответствия решеток и т.д.

3. В разделе 2.1.3 анализируются, среди прочих, зависимости энергии полной дислокации, зарождающейся скольжением и переползанием, от положения в объеме композита. Ясно, что, когда дислокация находится в одной и той же точке, независимо от пути ее прихода в это положение изменение энергии должно быть одним и тем же. Было бы полезно напрямую показать, что это так, тем самым обеспечив дополнительную демонстрацию достоверности проведенных расчетов.

4. В разделе 3.1 исследуется случай зарождения дислокаций несоответствия на базисных и призматических плоскостях скольжения в III-нитридных композитных структурах. Известно, что напряжения, необходимые как для зарождения, так и для переползания дислокаций по базисной и призматической плоскостям, могут значительно отличаться. Было бы полезно обсудить, как учет данного факта может повлиять на результаты вычислений, сделанных на основе построенной модели.

Указанные замечания не снижают ценности выполненной работы и не влияют на ее положительную оценку. Представленная диссертация выполнена на высоком научном уровне, обоснованность сформулированных в ней положений и выводов не вызывает

сомнений. Представленная диссертационная работа является полностью законченным научным исследованием, основные полученные результаты отражены в восьми научных статьях в изданиях из перечня ВАК или приравненных к перечню ВАК, в том числе в международном журнале первого квартиля.

Заключение

Содержание диссертационной работы соответствует паспорту специальности 01.02.04 – Механика деформируемого твердого тела. Автореферат диссертации соответствует ее содержанию, отражает актуальность темы исследования, ее цели и задачи, в также научную новизну, практическую значимость и достоверность научных результатов.

Диссертационная работа А.М. Смирнова является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение задач механики деформируемого твердого тела, имеющих значение для развития механики наноразмерных объектов, которые важны для таких смежных областей как физика твердого тела и материаловедение.

Ведущая организация, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук, считает, что диссертация «Дислокационные модели релаксации напряжений несоответствия в цилиндрических, сферических и плоских композитных структурах» удовлетворяет всем требованиям ВАК и соответствует пункту 9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного Постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013 г. (ред. от 28.08.2017), предъявляемым к диссертациям, а ее автор Смирнов Андрей Михайлович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.04 – Механика деформируемого твердого тела.

Диссертационная работа была обсуждена, и настоящий отзыв одобрен на расширенном семинаре лаборатории «Нелинейная физика и механика материалов» ИПСМ РАН, протокол № 4 от 10.11.2017 г.

Заместитель директора
по научной работе ИПСМ РАН
доктор физико-математических наук
E-mail: aanazarov@imsp.ru

Назаров Айрат Ахметович

Заведующий лабораторией
нелинейной физики и механики
материалов
доктор физико-математических наук
E-mail: dmitriev.sergey.v@gmail.com

Дмитриев Сергей Владимирович

20 ноября 2017 г.

Подписи А.А. Назарова и С.В. Дмитриева удостоверяю:

Начальник отдела кадров



Т.П. Соседкина

Адрес ведущей организации:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук, 450001, Республика Башкортостан, г.Уфа, ул. Степана Халтурина, 39, тел.: 8(347)223-64-07, факс: 8(347)282-37-59, e-mail: imsp@imsp.ru