

УТВЕРЖДАЮ:

Директор ИПСМ РАН

Р.М. Имаев

«07» декабря 2022 г.



ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук (ИПСМ РАН) о диссертации Чернакова Антона Павловича «Круговые призматические дислокационные петли и релаксация напряжений несоответствия в квазиодномерных наногетероструктурах», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.1.8 – Механика деформируемого твердого тела

Актуальность темы диссертации

Наличие в функциональных материалах дефектов является одним из существенных препятствий, стоящих на пути развития современной электроники, оптоэлектроники и нанотехнологий. К негативным эффектам, вызываемым нерегулярностью кристаллических решеток, относятся изменение зонной структуры и снижение механической стойкости наночастиц. В оптоэлектронных приборах наличие даже одной дислокации может приводить к полной неработоспособности изделия. Для того, чтобы иметь возможность прогнозировать наличие и конфигурации дефектов в наногетероструктурах, необходимо строить разнообразные математические модели. По этой причине диссертационная работа Чернакова А.П., посвященная моделированию процесса релаксации напряжений несоответствия с формированием дефектов в наногетероструктурах, является актуальной.

В диссертации представлены модели, построенные в рамках линейной теории упругости и континуальной теории дефектов, описывающие образование круговых призматических дислокационных петель в процессе релаксации напряжений несоответствия в нанопроволоках типа «ядро-оболочка», внедренных нанотрубках и сегментированных нанопроволоках. С помощью этих моделей выявлены критические условия формирования одиночной призматической дислокационной петли на границах раздела материалов в нанопроволоках типа «ядро-оболочка» и внедренных нанотрубках, а для сегментированных нанопроволок – на некотором удалении от межфазной границы. Также с их помощью исследовано равновесное распределение в бесконечном ряде круговых призматических дислокационных петель в нанопроволоках типа «ядро-оболочка». Созданные модели и полученные с их использованием диаграммы позволяют заранее определять параметры наночастиц, при которых в выращенных наноструктурах не образуются дефекты.

Структура и содержание диссертационной работы

Диссертационная работа Чернакова А.П. состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы из 173 наименований и трех приложений. Работа изложена на 110 страницах, включая 25 рисунков.

Во введении обоснована актуальность темы диссертации, сформулированы цели и задачи работы, описаны методы исследования, отмечена теоретическая и практическая значимость работы, ее научная новизна. Также во введении перечислены основные положения, выносимые на защиту, продемонстрирована достоверность полученных результатов, указан личный вклад автора, приведены данные об апробации работы и публикациях автора по теме диссертации.

Первая глава представляет собой обзор публикаций по исследованиям механизмов релаксации напряжений несоответствия в наноразмерных композиционных материалах. При этом особое внимание уделяется протяженным конфигурациям композитов (нанопроволокам, нанотрубкам, нитевидным кристаллам). В обзор включены как фундаментальные, так и прикладные исследования, что позволяет проследить историю становления разрабатываемой автором тематики.

Во второй главе представлено исследование круговых призматических дислокационных петель, зарождающихся в нанопроволоке типа «ядро-оболочка» на границе раздела материалов. Решена граничная задача теории упругости о напряжениях, которые круговая призматическая дислокационная петля создает в бесконечно длинном упругом цилиндре. С использованием этого решения записывается выражение для энергии соответствующего дефекта. Затем, моделируя нанопроволоку типа «ядро-оболочка» как цилиндр с дилатационным включением, автор находит энергию взаимодействия круговой призматической дислокационной петли и ядра нанопроволоки, являющегося источником упругих напряжений. Полученные энергетические величины используются для вычисления работы по зарождению дефекта и установления критических условий, накладываемых на радиусы ядра и оболочки частицы, при которых формирование круговой призматической дислокационной петли становится энергетически выгодным. Приводится диаграмма изменения энергии системы при формировании дефекта. Затем вторая глава сосредотачивается на рассмотрении бесконечного ряда круговых призматических дислокационных петель в нанопроволоке типа «ядро-оболочка». Вычисляется и исследуется энергия взаимодействия двух круговых призматических дислокационных петель в цилиндре со свободной поверхностью. Пользуясь полученными ранее в этой главе результатами, автор находит равновесное расстояние между дефектами в бесконечном ряде. Сравнение расчетных данных с экспериментальным демонстрирует корректность и высокую точность построенной аналитической модели.

В третьей главе рассматривается релаксация напряжений несоответствия во внедренных нанотрубках путем формирования круговых призматических дислокационных петель. Решается граничная задача теории упругости о напряжениях, создаваемых круговой призматической дислокационной петлей, расположенной вокруг цилиндрического канала в бесконечном пространстве. Далее это решение используется для нахождения энергетических характеристик дефекта в такой конфигурации. Вычисляется работа по зарождению круговой призматической дислокационной петли на границе раздела матрицы и внедренной в нее нанотрубки. Приводятся диаграммы изменения энергии системы при формировании одиночного дефекта на межфазной границе для случаев постоянного радиуса полости и постоянного радиуса петли.

В четвертой главе исследуется процесс релаксации напряжений несоответствия в сегментированной нанопроволоке за счет образования круговых призматических

дислокационных петель на некотором удалении от межфазной границы. Автор демонстрирует, что такой механизм может служить эффективным способом релаксации напряжений несоответствия. Для этого вычисляется работа по зарождению дефекта в такой конфигурации. По аналогии с предыдущими главами, строится диаграмма изменения энергии, при помощи которой можно определить, выгодно ли зарождение дефекта энергетически. Приводится график, с помощью которого можно предсказать наличие или отсутствие круговой призматической дислокационной петли вне межфазной границы на произвольном удалении от нее. Полученные графики снабжены обозначениями наиболее часто используемых в полупроводниковой промышленности пар материалов, составляющих композиты, что позволяет непосредственно использовать результаты диссертационной работы Чернакова А.П. в производстве композиционных наночастиц.

В заключении приведены основные результаты работы и сформулированы выводы.

Аннотация в полной мере соответствует содержанию диссертации, корректно и достаточно полно отражает ее основные положения и результаты.

Основные результаты, представляющие научную новизну:

1. Представлены аналитические решения для напряжений, создаваемых круговой призматической дислокационной петлей в бесконечном цилиндре со свободной поверхностью и вокруг цилиндрического канала в бесконечном упругом пространстве.

2. Вычислены упругие энергии круговой призматической дислокационной петли в цилиндре и вокруг цилиндрического канала в бесконечном пространстве.

3. Установлен критерий начала релаксации напряжений несоответствия путем формирования круговых призматических дислокационных петель в нанопроволоках типа «ядро-оболочка», вокруг внедренной нанотрубки и в сегментированной нанопроволоке.

4. Вычислена энергия взаимодействия двух круговых призматических дислокационных петель одного радиуса в цилиндре со свободной поверхностью.

5. Рассчитано расстояние между соседними петлями в равновесном бесконечном ряде круговых призматических дислокационных петель несоответствия на межфазной границе в нанопроволоке типа «ядро-оболочка».

Достоверность результатов диссертации

Достоверность полученных результатов обеспечивается адекватностью выбора методов моделирования физических явлений (линейная теория упругости, континуальная теория дефектов), корректностью постановок задач, строгостью использованного математического аппарата, выполнением граничных условий и условий равновесия, а также хорошим соответствием полученных расчетных данных экспериментальным.

Значимость работы для науки и практики

Научная значимость диссертации Чернакова А.П. состоит в ее вкладе в развитие моделирования наноструктур в области механики неоднородных наноматериалов и физики твердого тела. Практическая значимость диссертации состоит в создании моделей, позволяющих выработать практические рекомендации по выращиванию наноструктур с желаемым уровнем насыщенности дефектами.

Рекомендации по использованию результатов и выводов диссертации

Полученные в диссертации результаты могут быть использованы в Институте проблем машиноведения РАН, Физико-техническом институте имени А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербургском политехническом университете имени Петра Великого, Университете ИТМО, Санкт-Петербургском государственном университете, Институте проблем сверхпластичности металлов РАН, Институте физики металлов УрО РАН, Институте физики прочности и материаловедения СО РАН и в других учреждениях Российской академии наук, высших учебных заведениях и прочих организациях, занимающихся получением и исследованием одномерных композитных наногетероструктур, других наноструктурных материалов.

Апробация работы

Все основные положения диссертации в полном объеме изложены в опубликованных статьях в высокорейтинговых международных журналах. Всего по материалам диссертации опубликовано 12 работ, в том числе 3 статьи в журналах первого квартиля, индексируемых в базах знаний Scopus и Web of Science. Материалы диссертации прошли апробацию на различных конференциях, в том числе международных.

По работе имеются следующие замечания:

1. В оглавлении отсутствует ссылка на первую главу.
2. Не понятен смысл использования различных обозначений для величины собственной дисторсии включения ϵ^* и численно равного ему параметра несоответствия f (формула 2.2).
3. В правой части формулы (2.28) в знаменателе скобки не имеют смысла.
4. На рис.3.3(в) приведены кривые, которые подписаны $a=0$ слева и $a/b=100$ справа, значения 20 и 50 это значения величины a или отношения a/b ?
5. Диаграммы изменения полной энергии, связанной с формированием круговой призматической дислокационной петли (Рис. 2.7, 3.5) полезно было бы выполнить и для других радиусов нанопроволоки. Также на рис. 2.7, 3.5 и 4.3 приведены значения красных и синих линий (-5000, -4000 и т.д.) это значения ΔE ? И в каких они единицах, не совсем понятно из рисунков и подрисуночных подписей.
6. В главе 4 L и z_0 дублируют друг друга, обозначая одно и то же расстояние от межфазной границы до плоскости залегания петли.
7. В качестве рекомендательного характера, разделы «Заключение» и «Список литературы», следовало бы вынести на новые страницы. А также список литературы выровнять по ширине страницы.
8. При решении краевых задач теории упругости для композита предполагается, что модули сдвига и коэффициент Пуассона составляющих имеют одинаковые значения. Хотелось бы, чтобы были обсуждены возможности решения задач и возможные отличия эффектов при различии этих параметров.

Отметим, что замечания носят либо характер пожеланий, либо относятся к технической части, что не влияет на высокую оценку работы. Диссертация Чернакова А.П. «Круговые призматические дислокационные петли и релаксация напряжений несоответствия в квазиодномерных наногетероструктурах» вносит существенный вклад в развитие механики деформируемого твердого тела и континуальных моделей наногетероструктур с дефектами. Диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу,

выполненную на высоком научном уровне. Тема и содержание диссертации соответствуют паспорту специальности 1.1.8 (ранее 01.02.04) – «Механика деформируемого твердого тела». Диссертационная работа отвечает всем требованиям «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 824 от 24.09.2013 (с изменениями и дополнениями), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор Чернаков Антон Павлович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по указанной специальности.

Доклад Чернакова А.П. по диссертации был заслушан и обсужден на заседании научного семинара Института проблем сверхпластичности металлов РАН и получил одобрение участников семинара (протокол № 9 от 21.11.2022 г.).

Отзыв составил:

Доктор физико-математических наук



Назаров Айрат Ахметович,

главный научный сотрудник, заместитель директора по научной работе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук

Докторская диссертация защищена по специальности 01.04.07 – физика твердого тела

Адрес организации: 450001, г. Уфа, ул. Степана Халтурина, 39

Рабочий телефон: (347) 282-37-50

Адрес электронной почты: aanazarov@imsp.ru

Я, Назаров Айрат Ахметович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, их дальнейшую обработку.

Подпись и контактные данные Назарова А.А. удостоверяю:

Начальник отдела кадров ИПСМ РАН



Т.П. Соседкина