

## ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

Шейнермана Александра Григорьевича о диссертационной работе Бердникова Юрия Сергеевича «Кинетика функций распределения по размерам при эпитаксиальном росте наноструктур», представленной на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Диссертация Ю.С. Бердникова посвящена проблеме расчета функций распределения по размерам для различных эпитаксиальных наноструктур. **Актуальность** работы определяется тем, что оптические, электрические и магнитные свойства ансамблей эпитаксиальных наноструктур существенно зависят от их распределения по размерам и форме и их пространственного расположения. В частности, однородность размеров эпитаксиальных наноструктур оказывается важна для функционирования детекторов и солнечных элементов и устройств памяти на основе квантовых точек, а также электродов солнечных элементов на основе ансамблей нанопроволок. В связи с этим разработка теоретических моделей расчета функций распределения по размерам для различных эпитаксиальных наноструктур несомненно является важной темой исследований как с теоретической, так и с практической точек зрения.

**Во введении** диссертации описываются цели и задачи диссертации, ее актуальность и научная новизна, практическая и теоретическая значимость полученных результатов. **В первой главе**, которая носит обзорный характер, обсуждается взаимосвязь распределения по размерам ансамблей эпитаксиальных островков и нитевидных нанокристаллов с их свойствами и характеристиками устройств на их основе. В этой же главе представлены основы метода балансных уравнений в теории необратимого роста, позволяющего описывать эволюцию функций распределения по размерам поверхностных кластеров в процессе их роста. Этот метод используется в последующих главах для описания роста поверхностных кластеров и нитевидных нанокристаллов. Кроме того, в первой главе подробно обсуждается свойство скейлинга функции распределения.

**Во второй главе** диссертации рассматривается необратимый рост поверхностных кластеров для модельного случая, когда коэффициенты захвата, описывающие интенсивность присоединения атомов к поверхностному кластеру, линейно зависят от количества атомов в кластере. При этом рассматривается как гомогенный рост кластеров в произвольной точке подложки, так и их рост на центрах зарождения (атомах другого материала), распределенных по поверхности подложки с заданной поверхностной плотностью. С помощью метода балансных уравнений рассчитаны распределения кластеров по размерам. Показано, в частности, что полученные распределения хорошо согласуются с экспериментальными зависимостями функций распределения линейных цепочек атомов Al, In, Ga и Mn на подложках кремния (100) с реконструкцией 2x1. Интересно, что для каждого из рассматриваемых осаждаемых материалов результаты моделирования позволили предсказать механизм



зарождения цепочек атомов (гомогенный или гетерогенный).

**В третьей главе** метод балансных уравнений используется для кинетического анализа роста ансамбля нитевидных нанокристаллов InAs на подложке и расчета функций их распределения по длине. Рассматривается рост таких нанокристаллов на подложке с предварительно нанесенными периодическими ансамблями капель золота (служащих центрами зарождения таких нанокристаллов) методами газофазной эпитаксии из металлоорганических соединений и химической пучковой эпитаксии. Полученные в результате анализа распределения нанокристаллов по длине хорошо согласуются с экспериментальными данными. Для случая химической пучковой эпитаксии в модели произведен учет задержки зарождения первого слоя нитевидных нанокристаллов при коллоидном нанесении золотых капель. Установлено, что в последнем случае задержка зарождения вызывает уширение распределений нанокристаллов по длине и их существенную асимметрию. На основе полученных результатов делается вывод о преимуществе получения ансамблей золотых капель путем отжига золотой пленки по сравнению с использованием коллоидных растворов. Кроме того, в третьей главе рассматривается самокаталитический рост нитевидных нанокристаллов InAs на подложках кремния. Рассматривается ситуация, когда рост нанокристаллов InAs сопровождается непрерывным зарождением капель индия на подложке. Автор указывает, что этот процесс сопровождается уширением функций распределения нитевидных нанокристаллов по длине.

**В четвертой главе** предложена кинетическая модель роста нитевидных нанокристаллов GaAs на подложке, в котором в качестве катализатора служат капли галлия. Показано, что в процессе роста нанокристаллов капля галлия может менять свой радиус. Как следствие, радиус нанокристаллов в процессе их роста также может изменяться. Выделены режимы роста нитевидных нанокристаллов, соответствующие увеличению или уменьшению их радиуса в процессе роста, а также фокусировки радиуса и рассчитана эволюция радиуса нанокристаллов во времени в зависимости от потоков атомов галлия и мышьяка. Особый интерес представляет результат о возможности стабилизации радиуса нанокристаллов в процессе их самокаталитического роста.

**Пятая глава** диссертации описывает кинетику формирования островков золота на поверхности подложки InAs(111)В. На основе кинетического уравнения Зельдовича развита модель роста таких островков, описывающая экспериментально наблюдаемое бимодальное распределение островков по размерам.

**В заключении** сформулированы основные результаты диссертации.

**Научная новизна** работы состоит в разработке кинетических моделей роста поверхностных кластеров, нитевидных нанокристаллов и наностроек на подложках. В рамках предложенных моделей выявлен или объяснен ряд значимых эффектов, в частности, эффекты, связанные с образованием близких по длине ансамблей нитевидных нанокристаллов, фокусировкой радиуса таких нанокристаллов в процессе их самокаталитического роста, а также бимодальным распределением наностроек по размерам.



**Обоснованность и достоверность** результатов и научных положений работы обеспечивается использованием общепринятых в физике конденсированного состояния моделей систем и процессов. Методы, предлагаемые и используемые в работе, являются продолжением традиционных подходов. При их разработке используется ряд математически и физически обоснованных допущений. В диссертации проводится систематическое сравнение получаемых результатов с результатами экспериментов.

**Практическая значимость** диссертации состоит в возможности использования эффектов, выявленных с помощью предложенных в работе аналитических методов, при создании новых материалов. Работа позволяет управлять коллективными свойствами ансамблей нитевидных нанокристаллов за счет оптимального выбора условий их роста, а также контролировать форму распределения по размерам твердотельных золотых островков (на подложках InAs(111)B), используемых в качестве каталитических частиц для роста нитевидных нанокристаллов.

**Основные научные результаты** работы опубликованы в 9 рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК РФ. Работа прошла научную апробацию: докладывалась на большом количестве международных конференций и симпозиумов. Автореферат соответствует содержанию диссертации и позволяет составить достаточно полное представление о ней.

По представленной диссертационной работе можно сделать следующие **замечания и комментарии**:

1. В формуле (5.1) для свободной энергии наноструктуры слагаемое, описывающее энергию взаимодействия дислокации в наноструктуре с полем напряжений несоответствия, должно быть пропорционально количеству атомов в островке в степени  $2/3$ , а не в степени  $4/3$ , а знак перед этим слагаемым должен быть отрицательным, а не положительным. Как следствие, зависимость свободной энергии наноструктуры от его размера не должна иметь минимум, и равновесный размер островка должен отсутствовать. Не вполне ясно, может ли предлагаемая модель предсказывать самоограниченный рост наноструктур при отсутствии равновесного размера островков.

2. При расчете свободной энергии островков в работе не учитывается упругое взаимодействие между островками, изменение формы островков в процессе их роста, а также поверхностные напряжения.

3. Точные определения некоторых параметров (например,  $\sigma_s$ ,  $D$ ,  $F$ ) в диссертации не даны, что несколько затрудняет чтение работы.

Сделанные замечания и комментарии не снижают общую высокую оценку работы. Работа имеет существенное теоретическое и практическое значение, обладает новизной и удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым ВАК России к кандидатским диссертациям в соответствии с пунктом 9 “Положения о присуждении ученых степеней”, утвержденного постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 года № 842. Автор диссертационной работы Бердников Юрий Сергеевич несомненно заслуживает присуждения ему ученой степени

кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент,  
доктор физико-математических наук,  
ведущий научный сотрудник  
лаборатории механики наноматериалов и теории дефектов  
Института проблем машиноведения

Российской академии наук

«17.» мая 2017 г.

Шейнерман Александр Григорьевич

Почтовый адрес: 199178, Санкт-Петербург, Большой пр. В.О., 61

Тел.: 8(812)3214764

Email: asheinerman@gmail.com



Подпись Шейнермана А. Г.  
УДОСТОВЕРЯЮ: Помощник Директора  
ИЛМАШРАН

17.05 2017 г.