

## О Т З Ы В

**официального оппонента на диссертационную работу Бердникова Юрия Сергеевича «Кинетика функции распределения по размерам при эпитаксиальном росте наноструктур», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - физика конденсированного состояния**

Распределение по размерам - важнейшая характеристика массивов наноструктур, формирующихся при эпитаксиальном росте, во многом определяющая свойства данных структур и перспективность их использования в современных устройствах наноэлектроники, оптоэлектроники и нанобиосенсорике. Развитие теоретических методов, позволяющих находить зависящую от времени функцию распределения по размерам, соответствующую определенному типу наноструктур и условиям роста, необходимо для совершенствования технологии получения массивов наноструктур с заданными свойствами. В диссертационной работе Бердникова Ю.С. получены аналитические выражения для функций распределения по размерам кластеров на поверхности кристалла и вертикально-ориентированных нитевидных нанокристаллов (ННК). Предложена модель эволюции капли галлия при самокаталитическом росте ННК арсенида галлия, указывающая на существование пяти различных режимов роста ННК. Полученные теоретические результаты допускают качественное и количественное сопоставление с экспериментом. Ряд результатов представляет интерес как для развития теории роста наноструктур, так и для оптимизации выбора технологических параметров синтеза наноструктур. В связи с вышесказанным, диссертационная работа Бердникова Ю.С. является, несомненно, **актуальной** и значимой как в научном, так и в прикладном отношении.

Диссертационная работа содержит введение, пять глав и заключение.

Во **введении** обоснована актуальность темы исследований, сформулирована цель работы и основные задачи.

В **первой (обзорной) главе** приведены примеры влияния распределения нанообъектов по размерам на различные свойства наноструктур и кратко изложены



основные результаты теории необратимого роста (агрегации) кластеров на поверхности кристалла. Указано на отсутствие в имеющейся литературе точного решения кинетических уравнений для концентраций кластеров, дающего функцию распределения по размерам, удовлетворяющую гипотезе скейлинга.

Во **второй главе** исследовано распределение по размерам кластеров (островков) образующихся и растущих на поверхности кристалла при постоянном потоке адсорбирующихся атомов (мономеров), в отсутствие десорбции адатомов и отрыва атомов от края островка. Рассмотрены два механизма формирования кластеров: гомогенный механизм, при котором минимальный кластер образуется при встрече в произвольном месте на поверхности двух мигрирующих адатомов, и гетерогенный механизм, при котором образование минимального кластера и его дальнейший рост происходят на неподвижном центре нуклеации, например, на точечном дефекте поверхности. Полагалось, что кинетические коэффициенты, характеризующие способность кластеров данного размера захватывать мономеры, линейно зависят от размера кластера. Данное предположение в случае гетерогенного роста позволило получить точное решение цепочки кинетических уравнений для концентраций кластеров. В случае гомогенного роста получено приближенное решение, справедливое при достаточно быстрой поверхностной диффузии адатомов (при не слишком малых степенях покрытия поверхности). В обоих случаях полученные решения дают аналитические выражения для функций распределения по размерам, которые в пределе больших размеров кластеров обладают свойством скейлинга. Функция распределения в случае гомогенного роста является монотонно убывающей, а при гетерогенном росте функция распределения либо монотонно убывает, либо имеет максимум в зависимости от значения константы димеризации. Полученные функции распределения сопоставлены с распределениями по размерам цепочек атомов металлов на поверхности Si(100)-2x1, полученными в эксперименте.

**Третья глава** посвящена теоретическому исследованию распределений по длине НК полупроводниковых соединений АЗВ5. Полагается, что рост НК определяется диффузией атомов III группы по боковым граням НК. Для нахождения функций распределения используется подход, подобный развитому во второй главе диссертации. Здесь под кластером данного размера понимается НК



данной длины,  $L$ , измеряемой в количестве монослоев, а кинетическому коэффициенту сопоставляется скорость роста ННК. Если длина ННК не превосходит диффузионной длины адатома,  $\lambda$ , то скорость роста пропорциональна  $L$ , в противном случае она пропорциональна  $\lambda$ . Рост массива ННК, таким образом, описывается цепочкой кинетических уравнений с коэффициентами, линейно зависящими от длины ННК (при  $L < \lambda$ ), либо с постоянными коэффициентами (в случае  $L > \lambda$ ). Отмеченная аналогия роста ННК и кластеров позволила автору использовать результаты второй главы для описания статистических свойств массивов ННК. Показано, что рост относительно коротких ННК ( $L < \lambda$ ) характеризуется квадратичной зависимостью дисперсии длины ННК от средней длины, а для длинных ННК ( $L > \lambda$ ) – линейной зависимостью. Задержка роста ННК на начальном этапе и формирование новых капель-катализаторов (при самокаталитическом росте ННК) приводят к асимметричному распределению ННК по длине и к увеличению дисперсии.

В **четвертой главе** проводится теоретическое исследование кинетики самокаталитического роста ННК на примере ННК арсенида галлия. Основное внимание уделяется анализу процессов, ведущих к изменению размера капли-катализатора, являющейся резервуаром галлия, и, следовательно, к изменению радиуса ННК у вершины ННК. Сформулировано уравнение, связывающее изменение размера капли с результирующими потоками мышьяка и галлия, поступающими в каплю за счет адсорбции на поверхность капли и диффузии по боковым граням ННК и встраивающимися в ННК при отложении кристаллических слоев под каплей. Данное уравнение дополнено уравнением для скорости изменения концентрации мышьяка в капле и уравнением, связывающим скорость удлинения ННК со скоростью образования зародышей двумерных островков под каплей. Анализ указанных уравнений показал, что, в зависимости от величин адсорбционных потоков мышьяка и галлия, температуры роста и начального радиуса капли, существуют пять различных режимов роста ННК, характеризующихся различным поведением радиуса капли со временем. Существенно, что для двух режимов имеет место наблюдаемый в эксперименте эффект саморегулирования – стремление в процессе роста радиусов ННК к стационарному значению, не



зависящему от начальных размеров капель. На качественном уровне определены условия роста, способствующие реализации данного эффекта.

В пятой главе предложена модель формирования островков золота при напылении золота на поверхность  $\text{InAs}(111)\text{B}$  при относительно низких температурах. Образование и рост островков описываются в рамках макроскопической модели, в которой частоты отрыва атомов от островков определяются зависимостью энергии образования островка от размера островка. Полагается, что энергия образования островка имеет максимум при критическом размере, а также минимум при некотором размере, большем критического, и, далее, неограниченно увеличивается с увеличением размера. Данное предположение позволило автору воспроизвести наблюдаемое в эксперименте замедление роста островков и вторичную нуклеацию островков, что отражается в переходе от мономодального распределения островков по размерам к бимодальному распределению с возвращением к мономодальному распределению при больших временах роста.

В заключении сформулированы основные результаты работы.

К наиболее значимым **новым результатам** следует отнести:

- В предположении о линейной зависимости кинетического коэффициента кластера от размера получены аналитические выражения для функций распределения по размерам кластеров, образующихся на субмонослойной стадии осаждения атомов на сингулярной грани кристалла при сильных отклонениях от равновесия. Показано, что в пределе больших отношений коэффициента диффузии адатомов к адсорбционному потоку полученные функции распределения обладают свойством скейлинга.
- Впервые метод кинетических уравнений применен для исследования распределения по размерам нитевидных нанокристаллов (ННК). Показано, что диффузионно–стимулированный каталитический рост относительно коротких ННК характеризуется квадратичной зависимостью дисперсии длины ННК от средней длины, а рост длинных ННК – линейной зависимостью.
- Предложена согласованная модель самокаталитического роста ННК арсенида галлия, учитывающая изменение объема капли галлия при росте.



Модель предсказывает существование пяти различных режимов роста, причем для двух режимов имеет место эффект саморегулирования объема капли, наблюдаемый в эксперименте.

**Обоснованность и достоверность** научных положений, результатов и выводов, полученных в диссертационной работе, обеспечивается хорошим согласием представленных в работе результатов с имеющимися экспериментальными данными и с результатами других теоретических исследований. Предлагаемые в работе модели могут быть использованы для оптимизации технологии синтеза наноструктур с заданными свойствами, что свидетельствует о **практической значимости** работы.

По содержанию работы можно сделать следующие **замечания**:

1. В работе не указаны причины, по которым в случае гомогенного образования островков функция распределения имеет вид монотонно убывающей зависимости. Обычно такое поведение функции распределения связывается с ограничениями на встраивание адатомов в островки. В предложенной модели ограничения на встраивание отсутствуют, и, казалось бы, функция распределения должна иметь стандартный вид кривой с максимумом.

2. Сопоставление функции распределения, полученной с учетом эффекта продолжающейся нуклеации капель катализатора, с экспериментальными результатами (Рис. 3.12) проведено без ссылок на работы, в которых данные результаты опубликованы, и без указания параметров модели.

3. В предложенной модели самокаталитического роста ННК (глава 4) для скорости образования зародышей на вершине ННК используется классическая формула Зельдовича. В то же время, анализ возможных режимов роста проводится при очень малом размере критического зародыша (три атома), когда корректность использования формулы Зельдовича неочевидна.

4. Неясно, каким образом получено третье слагаемое в правой части выражения (5.1), пропорциональное размеру островка в степени три четвертых. Автору следовало бы привести вывод данного выражения, либо, если данное выражение известно, привести ссылки на соответствующие публикации.

5. К сожалению, текст диссертации написан не вполне строгим научным языком. Часто встречаются небрежно составленные фразы и жаргонные

выражения. Название диссертации представляется неудачным. Вместо “кинетика функции распределения”, следовало бы использовать “эволюция функции распределения”.

### **Общая характеристика диссертационной работы**

В целом, несмотря на отмеченные недостатки и замечания, представленная диссертационная работа Бердникова Ю.С. выполнена на высоком научном уровне и является законченной научно - квалификационной работой, выполненной на актуальную тему. Результаты работы, выносимые на защиту, прошли апробацию на 13 Международных конференциях и опубликованы в 9 статьях, входящих в перечень ВАК.

Автореферат полностью отражает содержание диссертации.

Учитывая актуальность выполненных исследований, научную новизну и практическую значимость полученных результатов, считаю, что представленная диссертационная работа удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым ВАК к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - «Физика конденсированного состояния», а Юрий Сергеевич Бердников заслуживает присуждения искомой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - «Физика конденсированного состояния».

Официальный оппонент,  
доцент кафедры физики полупроводников  
Национального исследовательского  
Томского государственного университета,  
доктор физико-математических наук



Ю.Ю. Эрвье

10 мая 2017 г.

