

ОТЗЫВ

научного консультанта на диссертационную работу

Кочаева Алексея Ивановича

«Многомасштабное моделирование физических характеристик двухслойных ковалентно-связанных бор-углеродных гетероструктур», представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния

Диссертация Алексея Ивановича Кочаева посвящена важной задаче в современной физике конденсированного состояния – исследованию условий, при которых двумерные материалы, образованные из неслоистых прекурсоров, сохраняют свои свойства на протяжении длительного времени, не подвергаясь разрушению, распаду или превращению в нанотрубки и объемные частицы-кластеры. В работе рассматриваются механизмы обеспечения их устойчивости в течение продолжительного периода и модификации свойств за счёт функционализации, пассивации и др. манипуляций.

Предложенный автором метод стабилизации борофеновых материалов заключается в установлении протяженного контакта с материалами типа графен путем создания вертикальных гетероструктур. Главной особенностью разрабатываемых структур является образование химических связей между двумерными материалами. Эти ковалентные вертикальные соединения могут быть сформированы между однотипными парами двумерных материалов (например, двухслойный графен, двухслойный борофен, двухслойный нитрид бора) при повышенном давлении и активном пассивировании.

Кочаевым А.И. показано, что ковалентные связи могут образоваться между полосковым борофеном и графеном, отличающимися, как известно, симметрией. При этом этот процесс сцепления может осуществляться без их сдавливания и пассивирования. Более сильное по сравнению с Ван-дер-Ваальсовым межслойное взаимодействие в такой новой структуре приводит к более существенному изменению свойств индивидуальных монослоев.

Автором проведено систематическое исследование энергетических, электронных, упругих, пьезоэлектрических и оптических свойств борофен-графеновых и борофен-графениленовых гетероструктур с помощью многомасштабного моделирования, включающего методику функционала плотности, молекулярную динамику и континуальную теорию упругости. Выполнено подробное исследование влияния на эти свойства со стороны поверхностной пассивации и растягивающих деформаций. Показана возможность их существования в подвешенном состоянии. Продемонстрировано, что наличие периодических сквозных вакансий не приводит к разрушению ковалентных бор-углеродных связей.

Автором идентифицированы особенности предложенных вертикальных гетероструктур, которые включают распределение заряда на обеих поверхностях и в области сквозных вакансионных дефектов. Эти особенности делают перфорированные борофен-графены многообещающими для использования в осмотических нанофлюидных приложениях, а также позволяют рассматривать их в качестве потенциальных ион-селективных мембран.

Диссертация представляет собой структурированную и содержательную работу. Достоверность проведенных исследований подтверждается согласованием в рамках многомасштабного подхода и сопоставлением расчётов с экспериментальными данными для борофен-графеновых структур.

Настоящая диссертационная работа является результатом продолжительной научной работы автора с 2009 по 2023 год. В 2012 г. Кочаевым А.И. была досрочно (до официальной даты окончания обучения в аспирантуре Ульяновского государственного технического университета) защищена диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по теме: «Математическое моделирование процессов распространения чистых мод упругих волн в кристаллах и супракристаллах». В период с 2013 по 2016 г. Кочаев А.И. обучался в докторантуре Ульяновского государственного технического университета. В течение 2009-2019 г.г.

Кочаев А.И. работал на должностях ассистента, старшего преподавателя и доцента на кафедре «Физика» в Ульяновском государственном техническом университете. С 2019 года по настоящее время автор работает в должности старшего научного сотрудника НОЦ «Кремний-углеродные нанотехнологии» Ульяновского государственного университета. В течение этого периода он активно занимается научной деятельностью, публикуя свои работы в ведущих мировых изданиях и участвуя в различных научных проектах.

Научные результаты, представленные в диссертации Кочаева А.И., обладают существенной новизной и практической ценностью. Они опубликованы в престижных журналах, индексируемых базами Web of Science, Scopus и рекомендованными ВАК РФ для опубликования основных научных результатов на соискание ученой степени доктора наук. Результаты проведенных исследований опубликованы в 52 научных изданиях, 37 из которых изданы в журналах, индексируемых в международных базах Web of Science или Scopus (16 из них в журналах 1-ого квартиля), 4 – в журналах из списка ВАК, индексируемых в РИНЦ, и 2 свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ, 2 – в учебных изданиях, 4 – в трудах конференции. Результаты работы докладывались на конференциях.

Автор диссертации отмечался наградой Правительства Ульяновской области (2011 г.), благодарственным письмом (2017 г.) и стипендией Губернатора Ульяновской области (2022 г.), дипломами научных конкурсов Московского физического общества (2011 г.) и выставки Научно-технического творчества молодежи (2011 г.). Имеет весомый для молодого ученого опыт руководства научными проектами, финансируемыми РФФИ, РНФ и Минобрнауки РФ. Активно ведет редакторскую работу, являясь рецензентом научных журналов издательств Elsevier, ACS, Wiley.

Диссертация А.И. Кочаева свидетельствует о его высокой квалификации в качестве ученого, чьи научные исследования получают признание на международном уровне. Полученные научные результаты, разработанный многомасштабный подход и сформулированные научные положения

позволяют расширить понимание атомистических процессов формирования исследуемых конденсированных веществ. По моему мнению, представленная диссертация полностью соответствует требованиям для получения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния, и ее автор, Алексей Иванович Кочаев, заслуживает присуждения указанной ученой степени.

Научный консультант:

доктор физико-математических наук (по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния), профессор кафедры теоретической физики; ведущий научный сотрудник лаборатории моделирования диффузионных процессов Научно-образовательного центра «Кремний-углеродные нанотехнологии», ФГБОУ ВО «Ульяновский государственный университет»

Сибатов Ренат Тимергалиевич
06.06.2024

ФГБОУ ВО «Ульяновский государственный университет», Россия, 432017, г. Ульяновск, ул. Льва Толстого, 42, тел: (8422) 67-50-54, e-mail: ren_sib@bk.ru

Подпись Сибатова Р.Т. удостоверяю

