

ОТЗЫВ

официального оппонента, доктора физико-математических наук, доцента, заведующего кафедрой судебной экспертизы и физического материаловедения ФГАОУ ВО «Волгоградский государственный университет» Борознина Сергея Владимировича на диссертационную работу Кочаева Алексея Ивановича по теме «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.

Тематика диссертационной работы Кочаева Алексея Ивановича посвящена моделированию низкоразмерных тонкопленочных соединений двумерного бора с двумерными углеродными материалами на нескольких пространственно-временных масштабах. Актуальность выбранного направления исследований определяется, прежде всего, уникальностью изучаемых бор-углеродных вертикальных интерфейсов, имеющих ковалентный характер межслоевой связи, обеспечивающих им устойчивость по отношению к внеплоскостным колебаниям атомов, высочайшую упругость и прочность. При этом толщина таких соединений остается на уровне псевдо-однослойных двумерных материалов типа дихалькогенидов переходных металлов, что значительно меньше толщин многослойных вертикальных гетероструктур, удерживаемых связями Ван-дер-Ваальса. Протяженные ковалентно-связанные пленки углеродных и бор-нитридных двумерных материалов получают, в настоящее время, с помощью давления или пассивирования водородом и фтором. Характерной особенностью таких соединений является формирование именно двухслойной пленки. Независимо от того какое количество слоев графена было подвержено давлению или пассивации, формируется одна двухслойная алмазоподобная пленка с уникальными значениями жесткости и прочности. Та же самая особенность

образовывать одну двухслойную пленку фиксировалась в экспериментах с бор-нитридными структурами. Разработка одновременно прочных и тонких покрытий безусловно является актуальным направлением исследований, а возможности современных нанотехнологий по их производству позволяют получать такие пленочные покрытия достаточно протяженных размеров.

Автором настоящего диссертационного исследования формулируются положения о том, что формирование межслойных ковалентных связей возможно не только между парой двумерных материалов одного типа и строения, но также между разнородными монослойными материалами с отличающейся симметрией и неодинаковым химическим составом без приложения давления и пассивирования. В связи с этим научная новизна темы диссертационного исследования не вызывает никаких сомнений. Очевидной новизной и практической значимостью обладает обнаруженная автором зависимость способа пассивирования бор-углеродных бислойных структур на силу межслоевого сцепления (в отличие от ковалентных биграфена и двухслойных бор-нитридных слоев проблема выбора стороны пассивирования не стоит), а также обнаруженный отрицательный продольный пьезоэлектрический эффект. Определенной новизной и значимостью обладают оригинальные вычислительные алгоритмы, реализующие в полной мере механический критерий устойчивости. Они защищены соответствующими государственными свидетельствами о регистрации программ для ЭВМ. Логичным выглядит проведенный в диссертации научно-технический анализ перспектив использования предложенных материалов в качестве ион-селективных мембран. Дело в том, что такие мембраны должны быть тонкими и прочными, а существующие между бором и углеродом межслоевые ковалентные связи в точности обеспечивают выполнение этих требований. С этой целью автор переходит к рассмотрению процессов на большем пространственном масштабе, привлекая аппарат молекулярно-динамических расчетов.

Таким образом, используемый автором многомасштабный подход позволил добиться необходимой точности расчетов для объяснения полученных и предсказания новых научных фактов. Автор приводит сравнение с известными экспериментальными результатами. Обнадеживающе выглядит качественное совпадение характера зависимостей измеренной в эксперименте интегральной энергетической чувствительности недавно синтезированной гидрированной со стороны бора борофен-графеновой структуры и вычисленным в настоящей работе коэффициентом поглощения гидрированного борофен-графена.

В связи с вышесказанным считаю, что выносимые на защиту положения и основные выводы диссертационного исследования являются достаточно обоснованными и хорошо проработанными.

Анализ приведенных в Приложении Е публикаций автора показал, что их содержание действительно соответствует описываемым в диссертации результатам. Кроме того, опубликованные в высокорейтинговых журналах работы вызывают широкий общественный интерес, что выражается в многочисленном цитировании работ автора со стороны других ученых.

Диссертация состоит из введения, семи глав, заключения, списка условных обозначений и списка цитируемой литературы. Всего 286 страниц машинописного текста, оформленного согласно требованиям ГОСТ. **Во введении** автором обозначаются цель и задачи работы, излагается научная новизна, практическая ценность, методология, а также сформулированы основные теоретические положения. **В первой главе** представлен литературный обзор низкоразмерных вертикальных гетероструктур, образованных вертикальным способом контактирования двумерных материалов. Описаны структура и свойства Ван-дер-Ваальсовых и не Ван-дер-Ваальсовых вертикальных гетероструктур. **Вторая глава** полностью посвящена описанию квантово-механическому аппарату моделирования, используемого в большинстве расчетов. Развитие соответствующих идей, с помощью которых можно исследовать устойчивость тех или иных химических

соединений, получило в Главе 3. В ней излагается подход к определению того, является ли рассматриваемая структура стабильной в энергетическом, динамическом и механическом отношениях. Для проверки критериев устойчивости вычисляются энергии формирования, частоты собственных колебаний и упругие постоянные. Четвертая глава посвящена описанию собственных подходов к вычислениям упругих постоянных и скоростей распространения продольных, поперечных и изгибных упругих волн в двумерных материалах и вертикальных гетероструктурах. В пятой главе представлены результаты моделирования вертикального контакта графена с борофеном, равновесные параметры ячейки борофен-графеновой гетероструктуры, а также результаты проверки на устойчивость с помощью предложенных критериев. В этой же главе рассмотрены поверхностные дефекты борофен-графеновой структуры и их влияние на электронные, оптические и упругие характеристики. В шестой главе представлены результаты исследований дефектов борофен-графена вакансионной природы. При этом рассмотрены случаи как точечных локализованных дефектов, так и комплексов дефектов, имеющих определенный повторяющийся порядок. Также представлены результаты моделирования борофен-графенилена и результаты проверки на устойчивость. В седьмой главе автором описаны результаты молекулярно-динамического моделирования ионного транспорта через нанопоры в борофен-графене. На примере рассчитанных ионных токов и вольт-амперных характеристик продемонстрированы выпрямительные свойства мембран, изготовленных из бор-углеродных гетероструктур. В заключении диссертации сформулированы выводы по полученным результатам.

К диссертации имеются некоторые замечания:

1. Не получил обсуждения в диссертации продольный пьезоэлектрический эффект. Как следует из данных Таблицы 6 текста диссертации, вычисленные значения компонентов тензора пьезоэлектрических констант свидетельствуют о наличии отрицательного

продольного пьезоэлектрического эффекта. Однако обсуждение этот эффект не получил. Не сравнено его значение с соответствующими величинами для Ван-дер-Ваальсовых двумерных пьезоэлектриков. В том числе автор не сообщает, как меняются знаки коэффициентов при повороте ячейки относительно осей координат.

2. В диссертации крайне скупо приведены сведения о проверке используемых численных методов и алгоритмов на сходимость. Тем не менее эти сведения были бы полезны для компьютерного моделирования нанокластеров и квантовых точек «бор-углерод».

3. Автор описывает борофен-графенилен как гетероструктуру, полученную после создания периодической перфорации в борофен-графене (пункт 6.2, стр. 159). С точки зрения составных частей – это соединение пористого борофена со слоем пористого графена. Однако об образовании пористого слоя борофена с предложенным типом полых колец на металлических подложках пока не сообщалось. Стабильные борофеновые 2D полиморфы, как правило, содержат гексагональные кольца. Возможность синтеза уединенного борофена необходимо дополнительно обосновывать.

Замечания не носят принципиального характера и не ставят под сомнение защищаемые положения и основные результаты.

Диссертационная работа Кочаева Алексея Ивановича на тему «Многомасштабное моделирование физических характеристик двухслойных ковалентно-связанных бор-углеродных гетероструктур» является логично-выстроенной законченной научно-квалификационной работой, в которой содержатся научно-обоснованные рекомендации и решения по созданию принципиально нового класса низкоразмерных гетероструктур для развития полупроводниковой микро- и наноэлектроники на предприятиях Российской Федерации. Работа удовлетворяет всем требованиям пунктов 9-11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации N 842 от 24 сентября

2013 г. (в действующей редакции), а ее автор заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент: доктор физико-математических наук по научной специальности 1.3.11 – физика полупроводников, доцент, заведующий кафедрой судебной экспертизы и физического материаловедения, ФГАОУ ВО «Волгоградский государственный университет»,



Борознин Сергей Владимирович

24.10.2024

ФГАОУ ВО «Волгоградский государственный университет», кафедра судебной экспертизы и физического материаловедения, заведующий кафедрой, Россия, 400062, Волгоградская область, г. Волгоград, просп. Университетский, д. 100 Тел: +7 (8442) 460-263, Факс: +7 (8442) 461-848, E-mail: ob.otdel@volsu.ru

Подпись Борознина С.В. удостоверяю

