

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Кочаева Алексея Ивановича

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

С учетом важности развития нанотехнологичных отраслей производства с одной стороны и в зависимости от фактора высокой стоимости экспериментов по синтезу и исследованию низкоразмерных структур с другой, особую роль приобретают методы теоретического анализа, в том числе моделирование с применением компьютерных инструментов. Как следует из текста автореферата, тематика диссертационной работы соискателя ученой степени доктора физико-математических наук Кочаева А.И. направлена на многомасштабное моделирование вертикальных ковалентно-связанных бор-углеродных гетероструктур, образованных соединением материалов одноатомной толщины. В отличие от двухслойных углеродных алмазоподобных пленок, уже вызвавших интерес исключительной прочностью, устойчивое существование борофен-графеновых вертикальных гетероструктур не требует постоянно действующего сдавливающего усилия, что несомненно облегчает их практическое применение. Соискателем проанализированы условия межслойной раскристаллизации, переводящей борофен-графеновую гетероструктуру в Ван-дер-Ваальсовое соединение. Данный результат проливает свет на то, каким образом выбор стороны пассивирования борофен-графеновой гетероструктуры повлияет на величину межслойного сцепления. Ценность данного результата, на мой взгляд, состоит в том, что любые дальнейшие исследования двухслойных пленок, образованных, в общем случае, различными двумерными материалами, следует проводить с учетом данного обстоятельства. Вычисленные значения пьезоэлектрических коэффициентов гетероструктур свидетельствуют о наличии пьезоэлектрического отклика как в плоскости двумерной пленки, так и



