

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Кочаева Алексея Ивановича** «*Многомасштабное моделирование физических характеристик двухслойных ковалентно-связанных бор-углеродных гетероструктур*», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния

Разработка эффективных методик выращивания и функционализации слоев двумерных (2D) конденсированных систем (графена, гексагонального нитрида бора  $h$ -BN, силицена, борофена и др.), детальная диагностика атомных и электронных свойств этих систем экспериментальными и теоретическими методами, а также их успешное применение в ряде нанотехнологий для создания различных устройств является в настоящее время одним из важнейших направлений исследований в физике конденсированного состояния и современном научном материаловедении. Значительный интерес представляют вертикальные гетероструктуры, получаемые из этих двумерных материалов. В связи с этим ведутся работы по тестированию их устойчивости в широком температурном диапазоне. Прогноз воспроизводства требуемых физических свойств при их использовании в различных областях науки и техники достаточно благоприятный. Ожидается, что с дальнейшим развитием нанотехнологий они смогут прийти на замену традиционным материалам в функциональной электронике, возобновляемой энергетике, биосовместимых технологиях. Фактически именно в результате создания вертикальных гетероструктур стало возможным появление такого перспективного направления в наноэлектронике как твистроника.

В диссертационной работе **Кочаева Алексея Ивановича** выполнено развернутое теоретическое исследование бор-углеродных интерфейсов, образующихся в результате объединения монослоев двумерных материалов с различной симметрией и геометрией решетки в вертикальную гетероструктуру. В отличие от получивших широкое научное обсуждение Ван-дер-Ваальсовых вертикальных гетероструктур, контактирование в рассматриваемых бор-углеродных вертикальных гетероструктурах сопровождается возникновением ковалентного связывания между атомами бора и углерода из двумерных монослоев борофена и графена, что, как показано соискателем, наделяет соответствующие гетероструктуры интересными физическими свойствами. Установлено, что борофен-графеновая вертикальная гетероструктура имеет наибольшее значение модуля Юнга среди известных двумерных материалов и вертикальных гетероструктур. Это обстоятельство справедливо позволило автору дополнить квантово-механические исследования свойств бор-углеродных интерфейсов изучением возможности их практического использования в качестве прочных полупроницаемых мембран в процессах осмоса, что придает диссертационной работе последовательный и завершенный характер. Положительной оценки заслуживает соответствие, пусть и качественное, между проделанной вычислительной работой автора и независимым экспериментом. На основе данного соответствия преодолевается неопределенность в выборе обменно-корреляционного функционала в расчетах электронной структуры с помощью функционала плотности. Также следует отметить, что на основе сравнения энергий межслойного взаимодействия сформулированы рекомендации по способу и типу пассивации борофен-графеновых двухслойных материалов. Показано, что полное одностороннее (со стороны графена) гидрирование борофен-графеновой гетероструктуры

обладает упрочняющим эффектом и способно предотвратить нежелательный переход между двумерными углеродными фазами (от графена к графенилену).

Диссертационная работа **Кочаева Алексея Ивановича** безусловно обладает новизной и практической значимостью. Результаты работы апробированы на международных и всероссийских конференциях и в полной мере представлены в журналах из списков Scopus и Web of Science, значительная часть из которых опубликована в журналах первого квартала. В качестве замечания на автореферат диссертации следует отметить следующее: из текста автореферата неясно, каким образом практически может быть реализовано комбинирование монослоев борофена и графена, приводящее к появлению соответствующей гетероструктуры. Данное замечание не снижает ценности работы.

Как следует из автореферата, диссертационная работа **Кочаева Алексея Ивановича** соответствует всем требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям, ее содержание соответствует требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней, а ее автор **Кочаев Алексей Иванович**, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры электроники твёрдого тела физического факультета ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет»,

Виноградов Александр Степанович

Служебный адрес, телефон:

198504 Санкт-Петербург, Старый Петергоф, СПбГУ,

ул. Ульяновская, д.1; (812) 428-43-52; e-mail: [a.vinogradov@spbu.ru](mailto:a.vinogradov@spbu.ru)

