

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Кочаева Алексея Ивановича

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

Диссертация Кочаева А.И. посвящена исследованию влияния межслойного ковалентного связывания на строение, устойчивость, физические свойства и избирательную ионную проницаемость вертикальных двухслойных боруглеродных гетероструктур, рекомендуемых для создания элементной базы наноэлектроники и ионроники, с помощью построения многомасштабных моделей, охватывающих метод функционала плотности, молекулярную динамику и континуальную теорию упругости.

Прогресс последнего десятилетия в получении низкоразмерных структур и материалов привел к бурному развитию научной междисциплинарной области на стыке физики конденсированного состояния, физического материаловедения и физической химии, что послужило толчком к появлению новых конструкторских и функциональных решений на наномасштабном уровне. Из подобных материалов стоит выделить наноаллотропы бора. Двумерные борофены из-за своих уникальных связей демонстрируют большую вариативность электронных и тепловых свойств, даже по сравнению с графеном. Одной из самых сложных задач при синтезе подобных материалов является нахождение оптимальной стабильной структуры.

В диссертации автором представлены новые результаты теоретических исследований на разных масштабных уровнях. Автором были разработаны новые методики вычисления упругих постоянных, объединяющие методику функционала плотности и связывающих орбиталей. Показано присутствие пьезоэлектрического эффекта в металлической борофен-графеновой вертикальной гетероструктуре и полупроводниковой борофен-графениленовой и т.д. Автором было засвидетельствовано возникновение ковалентных связей между двумя монослойными материалами без оказания давления и (или) пассивирования.

Диссертационное исследование выполнено в рамках ряда проектов, что говорит об его актуальности. Апробация результатов диссертационного исследования проведена на ряде профильных конференций и представлена в высокорейтинговых журналах.

Можно отметить, что приведенное на странице 31 утверждение «В структурном смысле это абсолютно одинаковые материалы, поскольку они имеют одинаковый химический состав на одну элементарную ячейку.

Основное отличие же заключается в относительном расположении гексагональных бор-углеродных кластеров» не является корректным так как в данном случае речь идет о полиморфизме.

Приведенное замечание не снижает ценности работы.

Данная диссертация является законченной научно-квалификационной работой, выполненной на актуальную тему, соответствует всем требованиям. Соискатель Кочаев А.И. заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния.

Заведующий лабораторией «Металлы
и сплавы при экстремальных
воздействиях» Уфимского
университета науки и технологий

Корзникова Елена Александровна



08.11.2024г.

Доктор физико-математических наук,
доцент, профессор Академии наук
Республики Башкортостан

Научная специальность, по которой
защищена диссертация: 01.04.07 –
физика конденсированного состояния

450076, Республика Башкортостан, г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32, e-mail:
elena.a.korznikova@gmail.com, телефон: + 7(347)229-96-16

Подпись Корзниковой Е.А. заверяю
М.П.



Корзниковой Е.А.
яю «08» 11 2024г.
Заместитель директора общего отдела УУНИТ Т.Шам
Тимбаева Т.Р.