

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

О соответствии диссертационной работы «Моделирование неравновесной зарядовой динамики в полупроводниковых системах методом приведенной матрицы плотности» Инербаева Талгата Муратовича профилю диссертационного совета Д 24.1.038.02 и требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям

Комиссия в составе д.ф.-м.н., доц. Квашнина Дмитрия Геннадьевича; д.ф.-м.н. Кривнова Валерия Яковлевича; д.х.н., профессора Дьячкова Павла Николаевича и д.ф.-м.н., профессора Чернозатонского Леонида Александровича, констатирует, что диссертационная работа **«Моделирование неравновесной зарядовой динамики в полупроводниковых системах методом приведенной матрицы плотности»** по теме, постановке задач, методам исследования и полученным результатам соответствует специальности 1.4.4. Физическая химия (физико-математические науки).

Комиссия отмечает следующие **основные научные результаты** диссертационной работы и ее **новизну**:

1. Впервые промоделированы процессы релаксации электронных возбуждений с учётом спиновой поляризации. На примере кристалла анатазе TiO_2 , легированного ванадием, показана зависимость электронной структуры от ориентации спина, которая приводит к замедленной релаксации подсистемы электронов со спином, направленным вверх, по сравнению с подсистемой со спином вниз.
2. Впервые проведено сравнение различных каналов релаксации электронных возбуждений — генерации множественных экситонов, неадиабатической диссипации, излучательной и безызлучательной рекомбинации — на примере наночастицы $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ и установлена иерархия их временных масштабов.
3. Впервые показан эффект ускорения неравновесной релаксации за счёт активации спин-флип переходов при учете спин-орбитального взаимодействия на примере наночастиц CsPbBr_3 .

4. Проведено теоретическое исследование влияния поверхностной пассивации и формирования поляронов разного знака на фотолюминесцентные свойства перовскитных наночастиц CsPbBr_3 . Установлено, что флуктуации длин связей между поверхностными атомами и пассивирующими лигандами вызывают фемтосекундное "мерцание" оптического поглощения, а образование положительных и отрицательных поляронов приводит к появлению фотолюминесценции в инфракрасной области спектра.
5. Впервые были учтены не прямые переходы в процессе моделирования неравновесной релаксации электронных возбуждений в кремниевых нанопроводах. Полученный эффект влияет на ускорение релаксации за счёт дополнительных безызлучательных каналов, обусловленных взаимодействием с фононами.
6. Впервые выполнено изучение учета F-центров, легирования переходными (Cu) и редкоземельными (Ce) элементами, на спектры оптического поглощения и фотолюминесценции антицеолитных боратов. Результаты моделирования позволяют интерпретировать наблюдаемые оптические особенности и прогнозировать пути управления их светоизлучающими свойствами.

Достоверность полученных результатов подтверждена сопоставлением расчётных данных с доступными экспериментальными исследованиями, включая как собственные, так и литературные данные, а также с теоретическими результатами, полученными в других научных группах. Наблюдается согласие с данными, опубликованными в мировой литературе, что свидетельствует о корректности используемых методов и моделей.

Практическая и научная значимость результатов диссертационной работы

Работа посвящена развитию теоретических и вычислительных методов для описания неравновесной динамики электронных возбуждений в полупроводниковых материалах с учётом спин-орбитального взаимодействия, спиновой поляризации и дисперсии энергии электронов. Проведено систематическое моделирование процессов релаксации и спектров оптического поглощения и фотолюминесценции в материалах различной размерности — от

объёмных кристаллов до наноструктур, — что позволило раскрыть роль ключевых физических механизмов: спин-флип переходов, формирования поляронов, дефектных состояний и непрямых зонных переходов.

Получены результаты, позволяющие интерпретировать экспериментальные спектроскопические данные и указывающие на пути направленного управления оптическими и люминесцентными свойствами перспективных материалов. Результаты работы применимы при разработке эффективных оптоэлектронных устройств, включая светодиоды, солнечные элементы, детекторы излучения и квантовые источники света на основе оксида титана, перовскитов, кремниевых наноструктур и легированных боратов, что определяет практическую и научную значимость результатов данной работы.

Основные результаты диссертационной работы изложены в статьях в рецензируемых научных журналах физико-химической направленности, рекомендованных ВАК РФ:

1. Inerbaev, T.M., Hoefelmeyer J. D., Kilin D. S. Photoinduced charge transfer from titania to surface doping site // **The Journal of Physical Chemistry C.** – 2013. – т. 117, No 19. – с. 9673—9692.
2. Chen, J., Schmitz, A., Inerbaev, T., Meng, Q., Kilina, S., Tretiak, S., Kilin, D. S. First-principles study of *p-n*-doped silicon quantum dots: charge transfer, energy dissipation, and time-resolved emission // **Journal of Physical Chemistry Letters.** — 2013. – т. 4, No 17. – с. 2906—2913.
3. Huang S., Inerbaev, T., Kilin D. S. Excited state dynamics of Ru₁₀ cluster interfacing anatase TiO₂ (101) surface and liquid water // **Journal of Physical Chemistry Letters.** — 2014. – т. 5, No 16. – с. 2823—2829.
4. Brown, S. L., Vogel, D. J., Miller, J. B., Inerbaev, T.M., Anthony, R. J., Kortshagen, U. R., Kilin, D. S., Hobbie, E. K. Enhancing silicon nanocrystal photoluminescence through temperature and microstructure // **The Journal of Physical Chemistry C.** – 2016. – т. 120, No 33. – с. 18909—18916.
5. Jensen S. J., Inerbaev, T.M., Kilin D. S. Spin unrestricted excited state relaxation study of vanadium(IV)-doped anatase // **Journal of Physical Chemistry C.** – 2016. – т. 120, No 11. – с. 5890—5905.
6. Vogel, D. J., Kryjevski, A., Inerbaev, T.M., Kilin, D.S. Photoinduced single- and

- multiple-electron dynamics processes enhanced by quantum confinement in lead halide perovskite quantum dots // **Journal of Physical Chemistry Letters**. – 2017. – Т. 8, No 13. – с. 3032—3039.
7. Jensen, S. J., Inerbaev, T.M., Abuova, A. U., Kilin, D. S. Spin unrestricted nonradiative relaxation dynamics of cobalt doped anatase nanowire // **The Journal of Physical Chemistry C**. – 2017. – Т. 121, No 30. – с. 16110–16125.
 8. Han, Y., Vogel, D. J., Inerbaev, T.M., May, P. S., Berry, M. T., Kilin, D. S. Photoinduced dynamics to photoluminescence in Ln^{3+} ($\text{Ln} = \text{Ce}, \text{Pr}$) doped β - NaYF_4 nanocrystals computed in basis of non-collinear spin DFT with spin-orbit coupling // **Molecular Physics**. – 2018. – Т. 116, 5–6. – с. 697–707.
 9. Forde A., Inerbaev, T.M., Kilin D. Spinor dynamics in pristine and Mn^{2+} -doped CsPbBr_3 NC: Role of spin-orbit coupling in ground- and excited-state dynamics // **The Journal of Physical Chemistry C**. – 2018. – Т. 122, No 45. – с. 26196–26213.
 10. Forde, A., Inerbaev, T.M., Hobbie, E. K., Kilin, D. S. Excited-state dynamics of a CsPbBr_3 nanocrystal terminated with binary ligands: sparse density of states with giant spin-orbit coupling suppresses carrier cooling // **Journal of the American Chemical Society**. – 2019. – Т. 141, No 10. – с. 4388–4397.
 11. Fatima, Han, Y., Vogel, D. J., Inerbaev, T.M., Oncel, N., Hobbie, E. K., Kilin, D. S. Photoexcited electron lifetimes influenced by momentum dispersion in silicon nanowires // **The Journal of Physical Chemistry C**. – 2019. – Т. 123, No 12. – с. 7457–7466.
 12. Fatima, Vogel, D. J., Han, Y., Inerbaev, Talgat M., Oncel, N., Kilin, D. S. First-principles study of electron dynamics with explicit treatment of momentum dispersion on Si nanowires along different directions // **Molecular Physics**. – 2019. – Т. 117, 17. – с. 2293–2302.
 13. Forde, A., Inerbaev, T.M., Kilin, D. S. Spectral signatures of positive and negative polarons in lead-halide perovskite nanocrystals // **The Journal of Physical Chemistry C**. – 2020. – Т. 124, No 1. – с. 1027–1041.
 14. Bekker, T. B., Inerbaev, T. M., Yelissev, A. P., Solntsev, V. P., Rashchenko, S. V., Davydov, A. V., Shatskiy, A. F., Litasov, K. D. Experimental and ab initio studies of intrinsic defects in “antizeolite” borates with a $\text{Ba}_{12}(\text{BO}_3)^{6+}$ framework

- and their influence on properties // **Inorganic Chemistry**. – 2020. – т. 59, No 18. – c. 13598–13606.
15. Bekker, T. B., Yelissev, A. P., Solntsev, V. P., Davydov, V.A., Inerbaev, T. M., Rashchenko, V. S., Kostyukov, I. A. The influence of co-doping on the luminescence and thermoluminescence properties of Cu-containing fluoride borate crystals // **CrystEngComm**. – 2021. – т. 23, No 37. – c. 6599–6609.
 16. Inerbaev, T. M., Han, Y., Bekker, T. B., Kilin, D. S. Mechanisms of photoluminescence in copper-containing fluoride borate crystals // **The Journal of Physical Chemistry C**. – 2022. – т. 126, No 14. – c. 6119–6128.
 17. Inerbaev, T. M., Han, Y., Bekker, T. B., Kilin, D. S. Photoluminescence in cerium-doped fluoride borate crystals // **The Journal of Physical Chemistry C**. – 2023. – т. 127, No 19. – c. 9213–9224.
 18. Pillai, S.T., Fischer, T., Clikeman T.T., Esbenshade, J., Berdanier, C.; Rohwer, H., Jastram, M., Kang, W., Balasanthiran, C., Spanjers, C.S., Inerbaev, T., Kilin, D.S., Rioux, R.M., Hoefelmeyer, J.D. Single site metal ions on the surface of TiO₂ Nanorods - A platform for theoretical and experimental investigation / **ACS Symposium Series: Photoinduced Processes at Surfaces and in Nanomaterials**. – 2015, – Vol. 1196, p. 103–116.
 19. Inerbaev, T., Forde, A., Jensen, S.J., Kilin, D. Spin-unrestricted and spinor nonradiative relaxation dynamics in functionalized semiconductors // **ACS Symposium Series: Computational Photocatalysis: Modeling of Photophysics and Photochemistry at Interfaces**. – 2019. – Vol. 1331, Chapter 1, – p. 1–22.
 20. Inerbaev, T., Kilin, D. S., Hoefelmeyer, J. Atomistic simulation of dissipative charge carrier dynamics for photocatalysis // **MRS Online Proceedings Library**. – 2012. Vol. 1390, No 1. – Article 00851.
 21. Forde, A., Inerbaev, T., Kilin, D.S. Role of cation-anion organic ligands for optical properties of fully inorganic perovskite quantum dots // **MRS Advances**. – 2018. – Vol. 3, No 59, p. 3255–3261.
 22. Fatima, Vogel, J., Inerbaev, T., Oncel, N., Kilin, D. S. First-principles study of charge carrier dynamics with explicit treatment of momentum dispersion on Si nanowires along $\langle 211 \rangle$ crystallographic directions. – **MRS Advances** – 2018. – Vol. 3 No 59, p. 3477–3482.

23. Fatima, Forde, A., Inerbaev, T., Oncel, N., Kilin, D. S. Time-resolved optical properties of SiNW oriented in $\langle 211 \rangle$ crystallographic direction // **MRS Advances**. – 2019. – Vol. 4, – p. 2009-2014.

Помимо данных публикаций, автором опубликованы тезисы 19-ти докладов международных конференций.

Публикации основных научных результатов диссертации соответствуют требованиям пунктов 11 и 13 «Положения о присуждении ученых степеней» (утверждено Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. №842 с изменениями Постановления Правительства РФ от 21.04.2016 г. № 335, в ред. Постановления Правительства РФ от 01.10.2018 г. № 1168).

Диссертация Инербаева Т.М. отвечает требованиям пунктов 9, 14 «Положения о присуждении ученых степеней» (утверждено Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. № 842, в ред. Постановления Правительства РФ от 01.10.2018 г. № 1168), а также пунктам 1, 5, 7, 10 и 11 паспорта научной специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Диссертация не содержит заимствованных материалов и результатов без ссылок на авторов и источники заимствования. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения о работах, опубликованных соискателем ученой степени. Текст диссертации, представленной в диссертационный совет, идентичен тексту диссертации, размещенному на сайте ИБХФ РАН.

На основании вышеизложенного комиссия рекомендует диссертационному совету Д 24.1.038.02 принять к защите диссертационную работу Инербаева Талгата Муратовича **«Моделирование неравновесной зарядовой динамики в полупроводниковых системах методом приведенной матрицы плотности»** на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Комиссия рекомендует утвердить в качестве официальных оппонентов:

- доктора физико-математических наук **Томилина Феликса Николаевича**, старшего научного сотрудника Института физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук (ИФ СО РАН)

обособленное Федеральное подразделение государственного бюджетного научного учреждения «Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук» (ФИЦ КНЦ СО РАН);

- доктора физико-математических наук, **Фомина Юрия Дмитриевича**, ведущего научного сотрудника Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской Академии Наук;
- доктора физико-математических наук, **Козлову Светлану Геннадьевну**, заведующую лабораторией физической химии конденсированных сред Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук (ИНХ СО РАН).

В качестве ведущей организации – Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Кемеровский государственный университет"

Председатель комиссии
д.ф.-м.н., доцент



Квашнин Д.Г.

Члены комиссии:
д.ф.-м.н.



Кривнов В.Я.

д.х.н., проф.



Дьячков П.Н.

д.ф.-м.н., проф.



Чернозатонский Л.А.

02.09.2025