

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Инербаева Талгата Муратовича «Моделирование неравновесной зарядовой динамики в полупроводниковых системах методом приведенной матрицы плотности», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия (физико-математические науки).

Диссертация, представленная к защите, посвящена актуальной и научно значимой теме, связанной с изучением неравновесной зарядовой динамики в функциональных наноматериалах, а именно в легированных структурах диоксида титана, наночастицах и нанопроволоках кремния, перовскитных наночастицах MAPbI_3 и CsPbBr_3 и антицеолитных боратах. Работа выполнена на высоком теоретическом и методологическом уровне и представляет собой комплексное исследование процессов релаксации электронных возбуждений с использованием современных методов квантовой химии и физики твердого тела.

Актуальность работы обусловлена широким применением исследованных материалов в таких перспективных областях, как фотокатализ, оптоэлектроника, сенсорика и водородная энергетика. Понимание микроскопических механизмов переноса и релаксации заряда, включая влияние легирующих примесей, спин-орбитального взаимодействия и квантового ограничения, имеет ключевое значение как для оптимизации эффективности данных материалов, так и разработки новых.

Цель диссертационного исследования заключается в изучении природы релаксации электронных возбуждений, моделировании оптических и фотолюминесцентных спектров, а также анализа эффектов спиновой поляризации и дисперсии носителей. Для достижения поставленной цели автором решен широкий круг задач, включающих развитие программного обеспечения для учета спин-орбитального взаимодействия и спиновой поляризации, моделирование динамики возбуждений в наноструктурах различной размерности, а также численное решение уравнений Редфилда для описания неадиабатических процессов.

Методологическая база исследования является надежной и современной. Автор активно применяет методы теории функционала плотности, а также методы исследования неравновесной динамики возбужденных состояний на основе матрицы плотности и неадиабатической молекулярной динамики. Из автореферата следует, что автор провёл обширный цикл теоретических исследований, используя современные методы - в частности, подход на основе приведённой матрицы плотности и теорию функционала плотности, - что позволило ему последовательно и аргументированно обосновать основные положения, выносимые на защиту. Результаты опубликованы в авторитетных рецензируемых журналах, индексируемых в Web of Science и Scopus, что подтверждает их научную значимость и

востребованность в мировом научном сообществе.

Таким образом, диссертационная работа Инербаева Талгата Муратовича «Моделирование неравновесной зарядовой динамики в полупроводниковых системах методом приведенной матрицы плотности», представляет собой законченное научное исследование и удовлетворяет требованиям пп. 9-14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. №842 (в действующей редакции), а ее автор, Инербаев Талгат Муратович, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия (физико-математические науки).

Ведущий научный сотрудник Центра Компьютерного моделирования неорганических и композитных наноразмерных материалов ИБХФ РАН

кандидат физико-математических наук

Попов Захар Иванович

Подпись Попова З.И. заверяю

Ученый секретарь ИБХФ РАН

Скалацкая Светлана Ивановна

02.12.2025

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук (ИБХФ РАН)

Российская Федерация, 119334, г.Москва, ул. Косыгина, д. 4

e-mail: ibcp@sky.chph.ras.ru

тел.: +7(495) 939-7439