

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 посвящена комплексному теоретическому исследованию и компьютерному моделированию неравновесных процессов релаксации электронных возбуждений в широком классе полупроводниковых материалов с использованием развитого автором метода приведённой матрицы плотности в рамках формализма Редфилда. Центральной задачей работы является описание динамики "горячих" носителей заряда — электронов и дырок, — возникающих после фотовозбуждения, с учётом их взаимодействия с колебаниями кристаллической решётки. В исследовании детально анализируются ключевые фотопроцессы, включая безызлучательную релаксацию, излучательную и безызлучательную рекомбинацию, а также генерацию множественных экситонов, и их влияние на оптические свойства материалов, такие как спектры поглощения и фотолюминесценции. Особое внимание уделено роли квантово-механических эффектов, а именно спиновой поляризации в легированных оксидах титана и спин-орбитального взаимодействия в перовскитных нанокристаллах, которые оказывают решающее влияние на скорости релаксационных процессов. Работа вносит значительный вклад в понимание фундаментальных механизмов, определяющих эффективность перспективных материалов для фотовольтаики, фотокатализа и оптоэлектроники.

Автореферат четко описывает научную проблему, решению которой посвящена диссертационная работа: ограниченность адиабатического приближения при описании динамики горячих носителей заряда в полупроводниках, что критически важно для фундаментального понимания и практических приложений (фотовольтаика, фотокатализ, квантовые компьютеры, оптоэлектроника). Обоснование актуальности темы носит междисциплинарный характер и подкреплено ссылками на ведущие работы в области. Постановка задач логично вытекает из цели исследования и охватывает как методологические аспекты (расширение программного обеспечения), так и конкретные системы (наносистемы TiO_2 , кремниевые наночастицы и нанопроволоки, перовскиты MAPbI_3 и CsPbBr_3 , антицеолитные бораты).

Диссертация имеет четкую структуру: введение, шесть глав, заключение. В первой главе изложен теоретический фундамент – формализм приведенной матрицы плотности Редфилда, применение методов DFT и молекулярной динамики. Последующие главы посвящены конкретным материалам:

1. TiO_2 : детально исследовано влияние поверхностного Ru-допирования, V- и Co-легирования на спектры поглощения и релаксационные пути. Важным результатом является установление различной динамики для спин-вверх/спин-вниз подсистем.
2. Наночастицы Si: проанализированы температурные эффекты в нанокристаллах, роль совместного легирования Al/P.
3. Перовскиты: впервые установлена иерархия времен релаксации в $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$, исследована роль спин-орбитального взаимодействия в CsPbBr_3 .
4. Антицеолитные бораты: идентифицированы конкретные типы F-центров как причина окраски, исследованы механизмы фотолюминесценции в Cu- и Se-легированных системах.
5. Влияние дисперсии электронов на скорость неадиабатической релаксации в кремниевых нанопроволоках.

Ведущий специалист