

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)

Представленная диссертация посвящена актуальной и значимой проблеме современной материаловедения и фотофизики: моделированию неравновесной зарядовой динамики в полупроводниковых наносистемах. Актуальность работы не вызывает сомнений, так как понимание и управление сверхбыстрыми процессами релаксации электронных возбуждений критически важны для разработки нового поколения оптоэлектронных устройств, солнечных элементов и фотокатализаторов.

Работа обладает высокой степенью научной новизны. Автором разработан и успешно применен комплексный теоретический подход, сочетающий методы теории функционала плотности, молекулярной динамики и формализм Редфилда для моделирования неадиабатических процессов. В рамках этого подхода было проведено первопринципное моделирование для широкого спектра систем: оксида титана, легированного переходными металлами, наночастиц и нанопроволок, перовскитных наночастиц MAPbI_3 и CsPbBr_3 и кристаллов аницеолитных боратов.

Личный вклад автора заключается в разработке и адаптации вычислительных методов, проведении масштабных расчетов и интерпретации результатов в тесной связи с экспериментальными данными.

Достоверность полученных результатов не вызывает сомнений. Она обеспечивается использованием хорошо зарекомендовавших себя первопринципных методов моделирования электронной структуры и сравнением результатов расчетов с экспериментальными данными, полученными как из литературных источников, так и в рамках совместных исследований с группами экспериментаторов. В большинстве случаев достигнуто хорошее качественное и во многих случаях и количественное согласие. При сравнении полученных теоретических данных с экспериментальными автор обсуждает ограничения применяемых методов и источников возможных расхождений: погрешности метода теории функционала плотности, различие в размерах модельных систем и стехиометрии пассивирующих поверхностных лигандов с реально исследуемыми в эксперименте, что обусловлено ограничениями вычислительных мощностей.

Работа имеет высокую научную значимость, внося вклад в фундаментальное понимание процессов переноса заряда и релаксации энергии в наноматериалах. Практическая значимость заключается в том, что

результаты и разработанные методики могут быть использованы для целенаправленного дизайна новых материалов с заданными оптоэлектронными свойствами, оптимизации характеристик солнечных элементов, светодиодов, фотодетекторов и фотокатализаторов, а также интерпретации сложных экспериментальных данных (например, спектров поглощения и люминесценции с временным разрешением).

По автореферату диссертационной работы можно сделать следующие замечания, а также возникают вопросы: 1) В работе возбуждающие фотоны характеризуются только энергией, однако известно, что циркулярно поляризованный свет может возбуждать электронные состояния с определённым направлением спина, что может быть использовано для создания спин-поляризованного состояния. Исследовался ли учет поляризации фотонов и как это может повлиять на спектры оптического поглощения? 2) Учитывалось ли в работе изменение закона дисперсии при переходе к объектам разной размерности, в частности, при практической верификации результатов расчета использовались 4 нм монокристаллы, квантовые точки и двумерные максены?

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).

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова»

кандидат физико-математических наук, доцент, старший научный сотрудник кафедры магнетизма физического факультета



Карпенков Дмитрий Юрьевич

«01» декабря 2025 г.

Адрес: 119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, стр. 2, физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова

Телефон: +7 915 437 22 12

Е-mail: karpenkovdy@my.msu.ru

Подпись к ф.-м.н., доцента Карпенкова Дмитрия Юрьевича заверяю

