

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу **Инербаева Талгата Муратовича** *«Моделирование неравновесной зарядовой динамики в полупроводниковых системах методом приведенной матрицы плотности»*, представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия (физико-математические науки)

Диссертационная работа Инербаева Талгата Муратовича посвящена квантово-механическому моделированию неадиабатической динамики электронов и ядер в материалах разной размерности. Актуальность исследования обусловлена быстрым ростом интереса к наночастицам, нанотрубкам, квантовым точкам и двумерным материалам, а также к развитию на их основе полупроводниковых устройств. Исследование квантовых процессов в наноматериалах с помощью теоретического моделирования — важнейший аспект для их понимания. Моделирование позволяет предсказывать и анализировать квантовые процессы, что ускоряет разработку материалов с необходимыми свойствами, избегая при этом дорогостоящих экспериментов. Понимание релаксационных и взаимодействующих процессов на наноуровне также существенно для развития фундаментальной теории квантовых динамических систем. **Актуальность** направления не вызывает сомнения, в связи с чем, автор поставил своей **целью** изучение природы релаксации электронных возбуждений, моделирование спектров оптического поглощения и фотолюминисцентных спектров, исследование эффектов, связанных со спиновой поляризацией, спин-орбитальным взаимодействием и дисперсией электронов в системах различной размерности.

Для достижения цели поставлены следующие задачи:

- Расширить программное обеспечение для учета спин-орбитального взаимодействия (наночастицы CsPbBr_3), спиновой поляризации (легированные структуры TiO_2) и дисперсии электронов (нанопроволоки Si).
- Рассчитать компоненты тензора Редфилда и решить уравнения для матрицы плотности в различных условиях, анализируя неравновесную динамику и фотолюминесценцию.

- Получить и сопоставить спектры оптического поглощения и фотолюминесценции в чистых и легированных кристаллах и наноструктурах при разных температурах.
- Провести сравнительный анализ динамики и спектров для электронов с разным направлением спина в системах с открытой оболочкой.
- Исследовать роль спин-орбитального взаимодействия и дефектов (примеси, легированные переходные и редкоземельные элементы) в оптических свойствах фторидборатов, с сопоставлением с экспериментом.
- Смоделировать скорости неадиабатической релаксации электронов в кремниевых нанопроволоках с учетом дисперсии энергии и влияния не прямых переходов.

При решении поставленных задач были получены **новые** данные, имеющие **научную** значимость:

- Проведено исследование электронных и оптических свойств, и неравновесной электронной динамики наноразмерного кристаллического TiO_2 структуры анатаза, модифицированного атомами переходных металлов V, Co и Ru. В легированных системах атомами ванадия и кобальта зависимость электронной структуры от направления спина приводит к тому, что релаксация подсистемы электронов со спином вверх происходит медленнее, чем в подсистеме со спином вниз.
- На примере наночастицы $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ проведено сравнение путей релаксации через механизмы генерации множественных экситонов, неадиабатической релаксации, излучательной рекомбинации и безызлучательной релаксации, установлена иерархия скоростей прохождения данных процессов.
- На примере наночастицы CsPbBr_3 показано, что спин-орбитальное взаимодействие ускоряет процесс неравновесной релаксации электронных возбуждений путем вовлечения в процесс переходов с переворотом спина.
- Выявлено, что пассивация поверхности и поляроны оказывают влияние на фотолюминесценцию наночастиц CsPbBr_3 . Флуктуации связей между поверхностными атомами и пассивирующими лигандами вызывают коротковолновые колебания оптического поглощения. Заряженные поляроны также способствуют фотолюминесценции в инфракрасном диапазоне.
- Проведено исследование влияния термических эффектов и двойного легирования *p-n* типа наночастиц кремния (SiNC и $\text{Si}_{36}\text{AlP}_{42}$). Проведено моделирование неравновесной релаксации электронных возбуждений в кремниевых

нанопроволоках (SiNW) с учетом возможности непрямых переходов, которые ускоряют процесс благодаря появлению дополнительных безызлучательных каналов релаксации.

-Проведено всестороннее моделирование спектров оптического поглощения и фотолюминесценции антицеолитных боратов с учетом дефектов типа F-центров и легирования атомами переходных (Cu) и редкоземельных металлов (Ce).

Полученные результаты демонстрируют значительный вклад в области моделирования квантовых процессов в наноматериалах и дефектной физики, а также расширяют существующие знания за счет новаторских расчетных подходов, создания программного обеспечения и исследования конкретных эффектов в актуальных системах. Особенно важно отметить, что автор расширил используемый пакет программного обеспечения на случаи систем, в которых учитывается спин-орбитальное взаимодействие, спиновую поляризацию и зависимость состояний электронов от величины квазиимпульса. Все полученные результаты опубликованы в рецензируемых журналах, для которых одним из ключевых критериев оценки является их **научная новизна**. Научное содержание работы опубликовано в 17 статьях, индексируемых в базах данных Web of Science и Scopus, входящих в единый государственный перечень научных изданий (Белый список) и список ВАК. Кроме этого, имеются две главы в книгах, четыре статьи в сборниках конференций, а также выступления на конференциях, индексируемых в базе данных Scopus.

Практическая значимость работы состоит в том, что полученные результаты позволяют не только расширить теоретические представления о квантовых процессах в наноматериалах, но и дают **практические** знания, необходимые для разработки новых материалов и технологических решений в области фотоники, электроники и оптоэлектроники. Результаты по расширению программного обеспечения могут быть применены также для обучения студентов и аспирантов.

Диссертация (с общим объёмом в 314 страниц) состоит из введения, 6 глав, заключения, табличных и иллюстративных материалов (91 рисунка, 21 таблиц) и списка литературы (437 наименований). Кроме этого, в диссертацию включены 8 приложений с дополнительной информацией по расчетам.

Достоверность полученных результатов подтверждается известными законами физики и применением апробированных и хорошо зарекомендовавших

себя методов квантовой химии. Полученные результаты находятся в разумном качественном и количественном согласии с имеющимися экспериментальными данными и расчетными данными других авторов, и не противоречат фундаментальным представлениям физической химии. Сформулированные выводы являются взаимно согласованными и не содержат внутренних противоречий. Результаты работы прошли экспертную апробацию и опубликованы в рецензируемых международных журналах, индексируемых РИНЦ и международными базами Scopus и Web of Science.

Аннотация полностью соответствует содержанию диссертации.

При чтении диссертации и аннотации возникло несколько **вопросов и замечаний**:

1. Известно, спин-орбитальное взаимодействие может снимать запрет по мультиплетности. Однако, запрет по мультиплетности могут снимать и колебания соответствующей симметрией, т.е. колебания могут смешивать электронные состояния, нарушая строгое правило отбора по спину, в том числе и в условиях неадиабатичности. Как колебания могут повлиять на рассматриваемые квантовые процессы и, в частности, на их иерархию?

2. Из представленного материала остается неясным, проводились ли при моделировании различных структур проверка начальных систем на устойчивость, т.е. выполнялись ли расчеты колебательных спектров исследуемых размерных систем с целью определения мнимых частот? Наблюдались ли для каких-либо систем изначальная неустойчивость?

3. Выбранные системы для исследования являются актуальными, но чем обусловлен такой широкий выбор? Можно ли сделать обобщающие выводы для всех исследуемых систем?

4. Нечетко указано, какие именно недостатки автор выявил или исправил по сравнению с ранее опубликованными работами другими авторами.

5. Технические опечатки: в аннотации глава 5 упоминается дважды, одна из них — это глава 6. В диссертации и аннотации литература оформлена не единообразно: иногда ссылка начинается с названия, иногда с имени авторов. Отсутствуют пояснения для некоторых рисунков, например, рис. 2.2. (диссертация) и рис.1 (аннотация) для допированной системы — нет расчетного вертикального

«столбца» в области 2 эВ, тогда как огибающая линия (точки) показывает, что в этой области есть переход.

С учетом вышеизложенного считаю, что по уровню, актуальности, обоснованности, научной новизне и практической значимости диссертационная работа *«Моделирование неравновесной зарядовой динамики в полупроводниковых системах методом приведенной матрицы плотности»* полностью соответствует требованиям, изложенным в пп. 9-14 «Положения о порядке присуждения учёных степеней», утверждённого постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (в действующей редакции), а её автор, **Инербаев Талгат Муратович**, несомненно заслуживает присуждения учёной степени доктора физико-математических наук по специальности 1.4.4 Физическая химия.

Официальный оппонент: главный научный сотрудник, заведующая лабораторией физической химии конденсированных сред Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук, доктор физико-математических наук по специальности 1.4.4 (02.00.04) Физическая химия
Козлова Светлана Геннадьевна

630090, г. Новосибирск, пр. акад. Лаврентьева, д.3

Тел.: 8 9139188209; e-mail: sgk@niic.nsc.ru

06. 11. 2025



Подпись ЗАВЕРЯЮ
УЧ. СЕКРЕТАРЬ ИНХСО РАН
О.А. ГЕРАСЬКО
06 11 2025