ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

на диссертацию Рахмонова Хайёма Рауфовича
«Первопринципные расчеты геометрических, эластичных и электронных свойств галогенных перовскитов групп $CsPbX_3$», представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности
1.3.8 — физика конденсированного состояния

Актуальность темы исследования

Диссертация посвящена расчётному исследованию связи химического состава и кристаллической структуры с упругими и электронными свойствами галогенидов свинца $CsPbX_3$, где X = I, Br, Cl. Рассмотрены кубическая α-фаза, орторомбическая перовскитная γ-фаза и неперовскитная δ-модификация, а также варианты изовалентного замещения галогенов. Работа выполнена в Физико-техническом институте им. С. У. Умарова Национальной академии наук Таджикистана.

Актуальность исследования связана с необходимостью совместного анализа электронной структуры и устойчивости материалов, рассматриваемых для фотоэлектрических и оптоэлектронных применений. Изменение галогенного состава позволяет варьировать ширину запрещённой зоны, но одновременно меняет геометрию координационного окружения свинца и механический отклик решётки. Поэтому сопоставление этих характеристик в рамках согласованной расчётной схемы представляет интерес для физики конденсированного состояния и вычислительного материаловедения.

Таким образом, тема диссертации актуальна и соответствует специальности 1.3.8 — физика конденсированного состояния. Исследование имеет фундаментальное значение для понимания взаимосвязи состава, структуры и свойств галогенидных перовскитов и создаёт основу для последующего поиска материалов с заданными характеристиками для оптоэлектроники.

Структура и содержание диссертации

Представленный текст диссертации содержит 113 страниц и включает введение, три главы, общие выводы, дополнение с вычислительными параметрами, список обозначений и библиографический список из 105 нумерованных позиций. Во введении сформулированы цель и задачи, положения, выносимые на защиту, заявленная научная новизна, сведения об апробации и личном вкладе автора.

Первая глава содержит обзор перовскитных материалов для солнечной энергетики и используемых подходов теории функционала плотности. Рассмотрены уравнения Кона—Шэма, обменно-корреляционные приближения и принципы выполнения расчётов в программном пакете VASP.

Во второй главе сопоставляются энергии и структурные параметры α-, γ- и δ-фаз $CsPbX_3$. Анализируются неэквивалентные позиции замещения галогенов для семи смешанных составов, результаты оптимизации с функционалами PBE и SCAN, тензоры упругости и условия механической устойчивости. На основе упругих характеристик оцениваются модули упругости, скорости звука и температуры Дебая.

Третья глава посвящена ширине запрещённой зоны и плотности электронных состояний. Сопоставлены результаты SCAN, HSE06 и PBEsol на оптимизированных структурах, обсуждается вклад орбиталей Pb и галогенов. Отдельно рассмотрены зависимости ширины запрещённой зоны от параметров решётки и длины связи Pb–X, а также предполагаемые связи электронных и упругих характеристик.

Научная новизна и значение результатов

Научная ценность диссертации определяется систематическим сопоставлением геометрических, упругих и электронных характеристик девяти сочетаний химического состава и структурной модификации $CsPbX_3$. В рамках общей исследовательской задачи автором рассмотрены энергетическая предпочтительность фаз, особенности локального окружения свинца и изменение электронной структуры при замещении галогена. Сравнение функционалов PBE и SCAN для оптимизации геометрии, а также SCAN, HSE06 и PBEsol для расчёта электронных свойств представляет самостоятельный методический интерес.

К числу значимых результатов следует отнести определение энергетически предпочтительных конфигураций изовалентного замещения в исследованном наборе смешанногалогенидных структур, сопоставление упругих характеристик различных фаз и анализ вклада атомных орбиталей в состояния у краёв запрещённой зоны. Эти результаты дополняют представления о влиянии галогенного состава и структурной модификации на свойства $CsPbX_3$. Полученные данные могут использоваться при планировании дальнейших расчётных и экспериментальных исследований, в том числе при изучении деформационного изменения электронной структуры и способов стабилизации перспективных фаз.

Обоснованность и достоверность результатов

Обоснованности результатов способствуют использование методов теории функционала плотности, сопоставление нескольких обменно-корреляционных приближений и сравнение с доступными экспериментальными данными. Автором проведена проверка зависимости параметров решётки $CsPbBr_3$ от энергии отсечки плосковолнового базиса. В дополнении приведены критерии сходимости по силам и электронной энергии, состав валентных оболочек и сетки *k*-точек, характеризующие использованную расчётную схему.

Сильной стороной работы является последовательное рассмотрение структуры, механического отклика и электронной подсистемы исследуемых соединений. Анализ полной и парциальной плотности состояний позволяет обсуждать полученные зависимости на уровне атомных орбиталей и межатомного взаимодействия. Такая постановка задачи придаёт работе внутреннее единство. Отдельные вопросы к численным данным и границам применимости обобщений изложены в замечаниях.

Замечания по диссертационной работе

1. Границы применимости аппроксимаций. Зависимости ширины запрещённой зоны от структурных параметров в разделе 3.2 построены по трём составам для каждой фазы. Квадратичный полином способен интерполировать такой набор точек, поэтому было бы полезно отдельно обсудить его прогностические возможности. Дополнительные расчёты промежуточных составов или деформированных структур фиксированного состава позволили бы разграничить влияние химической природы галогена и длины связи и проверить переносимость предложенных зависимостей.

2. Учёт релятивистских эффектов. В методической части желательно явно указать, учитывалось ли спин-орбитальное взаимодействие, и обсудить его возможное влияние на сравнительную точность SCAN, HSE06 и PBEsol. Для свинецсодержащих соединений такое пояснение существенно для интерпретации ширины запрещённой зоны. Вывод о предпочтительности функционала следует соотнести с конкретной расчётной схемой и условиями сопоставления с экспериментом (таблица 3.1, с. 74).

3. Интерпретация механической устойчивости. Полученное для γ-$CsPbBr_3$ отрицательное значение C_{66} = −1,04 ГПа (таблица 2.7, с. 59) заслуживает более подробного обсуждения. Желательно показать чувствительность этого результата к шагу деформации и точности релаксации, учитывая отмеченную автором возможность вычислительной погрешности на с. 69. Также полезно пояснить соотношение упругой устойчивости и энергетической предпочтительности фазы. Обсуждение

наклонов октаэдров на с. 64–66 можно было бы дополнить анализом углов Pb –X–Pb, поскольку индекс Баура характеризует разброс длин связей.

4. Терминология и оформление. Следует уточнить употребление термина «гибридные» применительно к полностью неорганическим соединениям $CsPbX_3$, проверить обозначение C_{14} в кубическом блоке таблицы 2.7 и устранить отдельные редакционные неточности.

Автореферат, публикации и личный вклад

Автореферат в целом отражает содержание диссертации и её основные результаты. В нём приведён перечень восьми публикаций, в том числе пяти журнальных статей. Результаты исследований обсуждались на международных и республиканских научных конференциях и семинарах.

Личный вклад соискателя, согласно представленным материалам, состоит в участии в постановке задач, выполнении компьютерных расчётов, теоретических исследованиях, анализе и обсуждении полученных результатов. Содержание диссертации свидетельствует о владении автором методами первопринципного моделирования и способности решать исследовательские задачи в области физики конденсированного состояния.

Заключение

Диссертация Рахмонова Хайёма Рауфовича «Первопринципные расчеты геометрических, эластичных и электронных свойств галогенных перовскитов групп $CsPbX_3$» представляет собой завершённую научно-квалификационную работу, посвящённую решению задачи сравнительного первопринципного описания структурных, упругих и электронных характеристик галогенидных перовскитов. Полученные результаты имеют значение для развития представлений о взаимосвязи химического состава, кристаллической структуры и физических свойств рассматриваемого класса материалов.

Высказанные замечания требуют уточнения методического описания и границ применимости отдельных выводов. Вместе с тем совокупность результатов по структуре, энергетике замещения и физическим свойствам исследуемых соединений даёт основание для положительной оценки диссертации. Замечания не отменяют научной ценности работы.

Считаю, что по актуальности темы, объёму выполненных исследований, научной новизне и значимости полученных результатов диссертационная работа отвечает требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям Положением о присуждении учёных степеней, утверждённым постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 «О порядке присуждения учёных степеней», а её автор, Рахмонов Хайём Рауфович, заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 — физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент

Карцев Алексей Иванович

PhD по теоретической физике,

ведущий научный сотрудник Центра квантовых метаматериалов

Московского института электроники и математики

им. А. Н. Тихонова Национального исследовательского

университета «Высшая школа экономики»

Адрес: Россия, г. Москва, ул. Таллинская, д. 34

Электронная почта: *akartsev@hse.ru*

_____ / Карцев А.И. / «22» октября 2026 г.

Подпись заверяю

ВЕДУЩИЙ СПЕЦИАЛИСТ
ОТДЕЛЕНИЯ ПО КАДРОВОМУ АДМИНИСТРИРОВАНИЮ
УПРАВЛЕНИЯ ПЕРСОНАЛА
ЖИЛКОВА Ю.С. 22.10.2026