«Утверждаю»
Директор Физико-технического института им. С.А. Азимова Академии наук Республики Узбекистан, д.ф.-м.н., проф.

_____ Х.К. Олимов

«13» ноября 2026 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации на диссертационную работу Рахмонова Хайёма Рауфовича на тему «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 и соответствие темы диссертационного исследования заявленной научной специальности.

Диссертация посвящена расчетному исследованию взаимосвязи кристаллического строения, упругих характеристик и электронной структуры галогенидных соединений $CsPbX_3$ (X = I, Br, Cl). Актуальность темы определяется необходимостью поиска материалов с управляемой шириной запрещенной зоны и устойчивой структурой для фотоэлектрических и оптоэлектронных устройств. Для этих соединений изменение галогенидного состава и структурной модификации существенно влияет как на электронные свойства, так и на механический отклик кристалла.

Особое значение имеет совместный анализ указанных характеристик: подходящие электронные параметры сами по себе не гарантируют устойчивости выбранной структуры. Сопоставление α-, γ- и δ-фаз, а также рассмотрение изовалентных замещений позволяют уточнить возможности направленного изменения свойств цезийсодержащих галогенидных материалов. По объекту, методам и содержанию работа соответствует специальности 1.3.8 — Физика конденсированного состояния.

Степень обоснованности научных положений, выводов и предложений, изложенных в диссертации.

Диссертационная работа Рахмонова Хайёма Рауфовича содержит результаты комплексного первопринципного исследования геометрических, упругих и электронных свойств α-, γ- и δ-фаз $CsPbX_3$. К числу наиболее

значимых научных результатов, представляющих самостоятельный вклад автора, относятся следующие положения:

– на основе сопоставления полных электронных энергий рассмотрены относительная энергетическая предпочтительность α, γ и δ-модификаций $CsPbX_3$ и выбор позиций изовалентного замещения. Для семи смешанных составов $CsPbI_2Br$, $CsPbIBr_2$, $CsPbI_2Cl$, $CsPbICl_2$, $CsPbBr_2Cl$, $CsPbBrCl_2$ и CsPbIBrCl проанализированы конфигурации замещения в неэквивалентных анионных позициях;

– выполнено сопоставление структурных параметров, полученных с функционалами PBE и SCAN, с литературными экспериментальными данными. В пределах рассмотренных структур показана эффективность применения SCAN для описания геометрических характеристик;

– рассчитаны упругие константы и проанализировано выполнение критериев механической устойчивости. В использованном расчетном приближении выявлены нарушения указанных критериев для γ-$CsPbBr_3$ и δ-$CsPbCl_3$. Для γ-$CsPbBr_3$ получено отрицательное значение $C_{66} = -1{,}04$ ГПа, а для δ-$CsPbCl_3$ — $C_{22} = -7{,}13$ ГПа, что конкретизирует характер неустойчивости исследованных конфигураций;

– проведено сравнение электронной структуры и ширины запрещенной зоны с использованием SCAN, HSE06 и PBEsol. Анализ полной и парциальной плотностей состояний позволил рассмотреть орбитальные вклады в формирование валентной зоны и зоны проводимости и проследить изменения при варьировании галогенидного состава и структурной фазы;

– в пределах каждой исследованной фазы выявлена связь ширины запрещенной зоны с длиной связи Pb–X и параметрами решетки. Предложена квадратичная аппроксимация соответствующих зависимостей. Показано, что в представленной выборке отсутствует единая монотонная связь ширины запрещенной зоны с упругими характеристиками и температурой Дебая;

Научная ценность работы заключается в совместном рассмотрении геометрических, упругих и электронных характеристик единого семейства соединений. Такое сопоставление позволяет оценивать возможности структурного регулирования электронных свойств с учетом ограничений механической устойчивости.

Теоретическая и практическая значимости. Теоретическая значимость определяется систематизацией связей между локальной геометрией, упругим откликом и электронной структурой $CsPbX_3$. Особый интерес представляют сопоставление критериев механической устойчивости для различных фаз и анализ длины связи Pb–X как структурного индикатора изменения ширины запрещенной зоны.

Практическая значимость имеет прогностический характер. Полученные данные могут использоваться для предварительного отбора составов и структурных конфигураций при разработке фотодетекторов, светоизлучающих и фотоэлектрических устройств. Непосредственное использование материалов в устройствах потребует последующей экспериментальной проверки их устойчивости и функциональных характеристик.

Результаты целесообразно использовать в научных организациях, занимающихся физикой полупроводников, галогенидных перовскитов и вычислительным материаловедением.

Достоверность и личный вклад.

Исследование выполнено в рамках теории функционала плотности с применением программного пакета VASP и метода PAW. Упругие характеристики определены методом «напряжение–деформация» с использованием VASP и VASPKIT. В работе приведены тест выбора энергии отсечки плосковолнового базиса, параметры расчетных сеток и критерии сходимости.

В дополнении указаны порог максимальной силы 0,01 эВ/Å, критерий электронной сходимости 10^{-6} эВ и сетки k-точек $6 \times 6 \times 6$, $4 \times 4 \times 3$ и $7 \times 3 \times 2$ для α-, γ- и δ-фаз соответственно. Сопоставление расчетов с различными обменно-корреляционными функционалами и доступными экспериментальными данными служит основанием для оценки надежности выявленных тенденций. Количественные результаты и выводы о неустойчивости следует рассматривать применительно к использованным расчетным приближениям.

Согласно разделу о личном вкладе, соискатель непосредственно участвовал в постановке задач, проведении компьютерных расчетов и теоретических исследований, анализе и обсуждении результатов квантово-механического моделирования. Представленный материал демонстрирует владение методами первопринципного исследования структуры и свойств кристаллических материалов.

Во введении сообщается о восьми публикациях по материалам диссертации. Там же указаны три работы в изданиях из перечня ВАК Российской Федерации, две работы в журналах, индексируемых в Scopus, две публикации в материалах международных конференций и одна глава в книге материалов международного симпозиума, индексируемая в Scopus. Данная характеристика приводится по сведениям автора.

Результаты докладывались на международных и республиканских конференциях и научных семинарах, в том числе в Худжанде, Санкт-Петербурге, Дубне, Каире и Душанбе, а также на семинарах Университета Васэда. Представленные сведения свидетельствуют об апробации исследования в научной среде.

Оценка содержания диссертации и степени её завершённости.

Структура и объём диссертации. Диссертация изложена на 113 страницах и включает введение, три главы, общие выводы, дополнение с расчетными параметрами, список обозначений и список литературы из 105 источников. Структура отражает последовательный переход от постановки проблемы и описания методов к расчету свойств и анализу их взаимосвязей.

Во введении обоснована актуальность темы, определены объект и предмет исследования, сформулированы цель и задачи, научная новизна, теоретическая и практическая значимость, положения, выносимые на защиту, а также сведения об апробации и личном вкладе автора.

Первая глава содержит обзор исследований галогенидных перовскитов и их применения в солнечной энергетике и оптоэлектронике. Изложены основы первопринципных расчетов, теории функционала плотности и подхода Кона–Шэма, рассмотрены возможности программного пакета VASP. Глава формирует методическую основу последующих расчетов.

Во второй главе исследованы геометрическое строение и относительные энергии α-, γ- и δ-фаз, рассмотрены энергетически предпочтительные позиции изовалентного замещения. Представлены результаты оптимизации структур с PBE и SCAN. Рассчитанные упругие константы использованы для анализа механической устойчивости и определения производных упругих характеристик. Выявленные неустойчивые расчетные конфигурации обсуждаются с учетом особенностей координационных полиэдров и деформации решетки.

Третья глава посвящена электронной структуре, ширине запрещенной зоны и плотности состояний. Рассмотрены различия результатов SCAN, HSE06 и PBEsol, влияние фазовой модификации и типа галогена. Сопоставление электронных, геометрических и упругих характеристик завершает исследование и связывает результаты второй и третьей глав.

В заключении обобщены основные результаты исследования, сформулированы выводы об особенностях геометрической структуры, механической устойчивости и электронной структуры исследованных фаз и о взаимосвязях между их характеристиками.

При общей положительной оценке работы имеются вопросы, требующих уточнения или дополнительного обсуждения:

1. Представляется целесообразным более подробно обсудить ограничения использованных обменно-корреляционных функционалов при расчёте ширины запрещённой зоны и причины возможного расхождения теоретических и экспериментальных значений.
2. α-, γ- и δ-фазы $CsPbX_3$ структурных перовскитов зависит от температуры, было бы полезно подробнее описать ограничения в подходах, выполненных при заданных структурных условиях, и их влияние на сопоставление с экспериментальными фазовыми переходами.
3. Выявленные взаимосвязи между структурными и электронными характеристиками представляют интерес для разработки материалов с заданными свойствами. Желательно конкретизировать, каким образом полученные результаты для различных фаз $CsPbX_3$ могут быть применены в оптоэлектронных применениях.
4. В диссертационной работе имеются некоторое количество орфографических и стилистических ошибок.

Указанные замечания носят преимущественно уточняющий и рекомендательный характер и не влияют на общую положительную оценку диссертационной работы.

исследования и могут быть предметом обсуждения при защите.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Диссертационная работа Рахмонова Хайёма Рауфовича «Первопринципные расчеты геометрических, эластичных и электронных свойств галогенных перовскитов групп $CsPbX_3$» представляет собой завершенное научное исследование, посвященное решению задачи установления взаимосвязей между кристаллическим строением, упругими и электронными свойствами галогенидных соединений цезия и свинца. Полученные результаты имеют значение для физики конденсированного состояния и вычислительного материаловедения.

По актуальности, научной новизне, обоснованности основных результатов, теоретической и практической значимости диссертация соответствует всем требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям Положением о присуждении ученых степеней, утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, а ее автор — Рахмонов Хайём Рауфович — заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 — Физика конденсированного состояния.

Отзыв обсужден и утвержден на заседании Учёного Совета Физико-технического института им. С.А. Азимова Академии наук Республики Узбекистан «11» ноября 2026 г., протокол № 12.

Присутствовали 20 членов Учёного Совета института. Результаты голосования: за – 20, против - 0, воздержались - 0. Отзыв ведущей организации утверждён единогласно.

Председатель заседания
Учёного Совета _____ **д.ф.-м.н., проф. Х.К. Олимов**

Эксперт _____ **к.ф.-м.н., с.н.с. Р.Р. Кабулов**

Секретарь заседания
Учёного Совета _____ **Ph.D. К.А. Мусаев**

Подписи удостоверяю

Вед. специалист отдела кадров

Физико-технический институт
им. С.А. Азимова Академии наук Республики Узбекистан
Адрес: 100084, Республика Узбекистан, г. Ташкент, ул. Чингиз Айтматов, 2Б.
Тел.: +998 71 233-12-71; +998 71 235-42-91.
E-mail: ftikans@uzsci.net. Сайт: www.fti.uz.

imzosini tasdiqlayman
O`zR FA Fizika-texnika instituti
xodimlar bo`limi