

ОТЗЫВ

научного руководителя на диссертационную работу Рахмонова Хайёма Рауфовича на тему «Первопринципные расчеты геометрических, эластичных и электронных свойств галогенных перовскитов групп CsPbX_3 », представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по научной специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния

Рахмонов Хайём Рауфович в процессе выполнения диссертационного исследования проявил себя как квалифицированный, целеустремленный и самостоятельный исследователь, обладающий необходимой теоретической подготовкой и навыками проведения современных расчетно-теоретических исследований в области физики конденсированного состояния и компьютерного материаловедения.

Диссертационная работа Рахмонова Х. Р. посвящена систематическому исследованию геометрических, упругих и электронных свойств неорганических галогенидных перовскитов CsPbX_3 ($X = \text{I}, \text{Br}, \text{Cl}$), представляющих значительный научный и практический интерес в связи с перспективами их применения в солнечной энергетике, фотодетекторах, светоизлучающих устройствах и других областях современной оптоэлектроники.

Актуальность выбранного направления определяется необходимостью установления фундаментальных закономерностей, связывающих химический состав, фазовое состояние и локальное координационное окружение перовскитных систем с их структурными и электронными характеристиками. Особое значение приобретает исследование механизмов, определяющих структурную и механическую стабильность данных материалов, а также факторов, влияющих на формирование их электронной структуры и ширины запрещенной зоны.

Целью диссертационной работы являлось систематическое исследование влияния свойств матрицы, локального координационного окружения и фазовых переходов на оптоэлектронные свойства систем CsPbX_3 ($X = \text{I}, \text{Br}, \text{Cl}$), а также выявление взаимосвязей между их геометрическими, упругими и электронными свойствами.

Для достижения поставленной цели Рахмоновым Х. Р. выполнен значительный объем квантово-механических расчетов. Исследованы α -, γ - и δ -фазы CsPbX_3 , определены их структурные и энергетические характеристики, проведена оценка механической стабильности на основе расчета упругих констант, исследованы электронная структура и плотность электронных состояний, а также систематически проанализировано влияние фазового состояния и химического состава на ширину запрещенной зоны.

Методологическую основу исследования составили современные первопринципные методы расчета в рамках теории функционала плотности (DFT). Расчеты выполнялись с использованием программного пакета VASP и метода проекционных присоединенных волн (PAW). Для оптимизации структур применялись обменно-корреляционные функционалы PBE и SCAN, а при расчете электронной структуры — SCAN, HSE06 и PBEsol. Использование нескольких расчетных подходов и систематическое сопоставление полученных результатов с доступными экспериментальными данными позволили обоснованно оценить применимость используемых функционалов к исследуемому классу материалов.

В процессе выполнения диссертационной работы Рахмоновым Х. Р. получен ряд новых научных результатов. Установлен механизм замещения изовалентных ионов в γ - и δ -фазах CsPbX_3 и определены наиболее устойчивые конфигурации кристаллической структуры смешанных перовскитов CsPb_2Br , CsPbIBr_2 , CsPb_2Cl , CsPbICl_2 , CsPbBr_2Cl , CsPbBrCl_2 и CsPbIBrCl .

Существенным результатом работы является проведенный автором систематический анализ механической стабильности исследованных соединений посредством вычисления и анализа упругих констант α -, γ - и δ -фаз. В результате установлено, что γ -CsPbBr₃ и δ -CsPbCl₃ не удовлетворяют соответствующим критериям механической стабильности, что указывает на структурную нестабильность данных систем. Автором также проанализированы причины выявленной нестабильности.

Значительная часть исследования посвящена электронной структуре перовскитов CsPbX₃. Проведен сравнительный анализ результатов расчетов с использованием функционалов SCAN, HSE06 и PBEsol. Показано, что в рамках проведенных расчетов PBEsol обеспечивает значения ширины запрещенной зоны, наиболее близкие к имеющимся экспериментальным данным. Исследован вклад длины связи d(Pb–X) и атомных орбиталей в формирование электронной структуры, включая валентную зону и зону проводимости различных структурных фаз.

Особого внимания заслуживает установленная автором сильная корреляция между шириной запрещенной зоны и структурными характеристиками исследованных соединений. Показано, что зависимость ширины запрещенной зоны от длины связи d(Pb–X) наиболее точно описывается полиномом второй степени. При этом систематической корреляции между шириной запрещенной зоны и упругими параметрами в различных фазах CsPbX₃ не обнаружено. На основании проведенного анализа установлено, что длина связи d(Pb–X) может выступать надежным структурным параметром-индикатором для прогнозирования и целенаправленного управления шириной запрещенной зоны исследуемых материалов.

Полученные результаты обладают теоретической и практической значимостью. Теоретическое значение исследования состоит в установлении

взаимосвязей между геометрическими, упругими и электронными свойствами CsPbX_3 ($X = \text{I, Br, Cl}$), включая определение длины связи $d(\text{Pb}-X)$ в качестве структурного индикатора ширины запрещенной зоны. Практическое значение заключается в возможности использования выявленных закономерностей при целенаправленном дизайне смешанных галогенидных перовскитов с оптимизированной шириной запрещенной зоны для создания высокоэффективных солнечных элементов, фотодетекторов и светоизлучающих диодов.

Достоверность представленных в диссертации результатов обеспечивается применением современного теоретического аппарата DFT, общепризнанного программного пакета VASP, контролем сходимости расчетов, использованием нескольких обменно-корреляционных функционалов, а также систематическим сравнением рассчитанных структурных параметров и электронных характеристик с доступными экспериментальными данными.

Следует особо отметить личный вклад Рахмонова Х. Р. в выполнение диссертационного исследования. Соискатель принимал непосредственное участие в постановке задач, проведении компьютерных расчетов и теоретических исследований, анализе и обсуждении результатов квантово-механического моделирования, их физической интерпретации и оформлении диссертационной работы. В процессе подготовки научных публикаций Рахмонов Х. Р. принимал участие в обработке и систематизации результатов и формулировании основных научных выводов.

За период выполнения диссертационной работы Рахмонов Хайём Рауфович продемонстрировал способность самостоятельно работать с современной научной литературой, осваивать и применять сложные методы компьютерного моделирования, анализировать большой объем расчетных

данных, устанавливать физические закономерности и аргументированно интерпретировать полученные результаты.

В процессе совместной научной работы Рахмонов Х. Р. проявил себя ответственным, дисциплинированным и добросовестным исследователем. Ему присущи научная инициативность, целеустремленность, способность критически оценивать полученные результаты и настойчивость в решении поставленных научных задач. Полученный им опыт позволяет считать Рахмонова Х. Р. сформировавшимся самостоятельным научным работником, способным проводить исследования на современном научном уровне.

Результаты диссертационной работы получили достаточную апробацию. Они докладывались и обсуждались на международных и республиканских научных конференциях, симпозиумах и научных семинарах в Республике Таджикистан, Российской Федерации, Японии и Арабской Республике Египет.

По материалам диссертационного исследования опубликовано 8 научных работ, в том числе 3 статьи в журналах, включенных в Перечень рецензируемых научных изданий, рекомендуемых ВАК РФ, 2 статьи в научных изданиях, индексируемых в базе данных Scopus, 2 работы в материалах международных конференций и 1 глава в книге материалов международного симпозиума, индексируемой в базе данных Scopus. Опубликованные работы отражают основные результаты выполненного диссертационного исследования.

Диссертационная работа «Первопринципные расчеты геометрических, эластических и электронных свойств галогенных перовскитов групп CsPbX_3 » представляет собой завершенное научно-квалификационное исследование, в котором на основе комплекса первопринципных расчетов получены новые результаты, направленные на установление

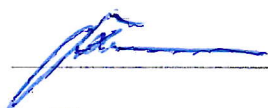
закономерностей взаимосвязи структурных, упругих и электронных характеристик галогенидных перовскитов CsPbX_3 .

Считаю, что Рахмонов Хайём Рауфович обладает необходимой научной квалификацией, сформировался как самостоятельный исследователь и способен квалифицированно ставить и решать актуальные задачи в области физики конденсированного состояния, проводить современные расчетно-теоретические исследования и осуществлять физически обоснованную интерпретацию полученных результатов.

Диссертационная работа Рахмонова Хайёма Рауфовича «Первопринципные расчеты геометрических, эластичных и электронных свойств галогенных перовскитов групп CsPbX_3 » по актуальности, научной новизне, теоретической и практической значимости, достоверности полученных результатов и уровню проведенных исследований соответствует требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор Рахмонов Хайём Рауфович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по научной специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Научный руководитель:

Доктор физико-математических наук
Ведущий научный сотрудник
Лаборатория нейтронной физики имени И.М. Франка
Международная межправительственная научно-исследовательская
организация «Объединенный институт ядерных исследований»
Холмуродов Холмирзо Тагойкулович



/ Х. Т. Холмуродов /

«20»

08

2026 г.

Контактные данные: тел.: +7(916)2219915, e-mail: mirzo@jinf.ru

Специальности, по которой научным руководителем защищена диссертация:
05.13.16 – применение вычислительной техники, математического
моделирования и математических методов в научных исследованиях;
01.04.07 – физика твёрдого тела

Адрес места работы: 141980, Московская обл., г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, 6,
Международная межправительственная научно-исследовательская
организация «Объединенный институт ядерных исследований», Лаборатория
нейтронной физики имени И.М. Франка. Тел.: +7 (496) 216-24-28; e-mail:
[lychag\(at\)nf.jinf.ru](mailto:lychag(at)nf.jinf.ru)

Подпись Холмуродова Холмирзо Тагойкуловича удостоверяю.
Ученый секретарь Лаборатории нейтронной
физики им И.М.Франка Объединенного
института ядерных исследований



А.Ю. Незванов

Лаборатория нейтронной физики имени И.М. Франка, ОИЯИ,
ул. Жолио-Кюри 6, г. Дубна, Московская обл., Россия, 141980
e-mail: scientific_secretary@nf.jinf.ru, тел.: +7 (49621) 6-50-96

