

Сведения о научном руководителе, давшем отзыв на диссертацию

Фамилия, имя, отчество	Ученая степень	Наименование организации, являющейся основным местом работы на момент защиты диссертации	Должность, занимаемая им в этой организации
Холмуродов Холмирозо Тагойкулович	Доктор физико-математических наук	Лаборатория нейтронной физики им. И. М. Франка, Объединенного института ядерных исследований	Ведущий научный сотрудник

Список основных публикаций по теме диссертации в рецензируемых научных изданиях

1. Kholmurodov K.T., Ibragimova S.A., Gladyshev P.P., Vannikov A.V., Tameev A.R., Zelenyuk T.Yu. Molecular Dynamics Simulations of Perovskites: The Effect of Potential Function Representation on Equilibrium Structural Properties // *Open Journal of Physical Chemistry*. — 2015. — Vol. 5. — P. 110–121. DOI: 10.4236/ojpc.2015.54012. Работа посвящена MD-моделированию перовскитных структур и влиянию вида межатомного потенциала.
2. Zelenyuk T.Yu., Kholmurodov K.T., Tameev A.R., Vannikov A.V., Gladyshev P.P. et al. Molecular Dynamics Study of Perovskite Structures with Modified Interatomic Interaction Potentials // *High Energy Chemistry*. — 2016. — Vol. 50, No. 5. — P. 400–405. DOI: 10.1134/S0018143916050209. Исследуются перовскитные структуры ABX₃ и оптимизация потенциалов межатомного взаимодействия методом молекулярной динамики.
3. Zelenyuk T.Yu., Rakhmonov Kh.R., Kholmurodov K.T., Gladyshev P.P., Tameev A.R. Comparative Characterization of Relaxed Organic-Inorganic Hybrid Perovskite Structures Using Molecular Dynamic Simulation and X-ray Diffraction Data // *High Energy Chemistry*. — 2018. — Vol. 52, No. 5. — P. 433–439. DOI: 10.1134/S0018143918050168. Это работа по гибридным MAPbX₃ (X = I, Cl, Br), где сопоставляются MD-моделирование и рентгеноструктурные данные.
4. Nematov D.D., Burhonzoda A.S., Husenzoda M., Kholmurodov K.T. et al. First Principles Analysis of Crystal Structure, Electronic and Optical Properties of CsSn_{1-x}Br_x Perovskite for Photoelectric Applications // *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. — 2021. — Vol. 15, No. 3. — P. 532–536. DOI: 10.1134/S1027451021030149. DFT-исследование структурных, электронных и оптических свойств CsSn_{1-x}Br_x.
5. Nematov D.D., Kholmurodov K.T., Yuldasheva D.A., Rakhmonov Kh.R. et al. Ab-initio Study of Structural and Electronic Properties of Perovskite Nanocrystals of the CsSn[Br_{1-x}I_x]₃ Family // *HighTech and Innovation Journal*. —

2022. — Vol. 3, No. 2. — P. 140–150. DOI: 10.28991/HIJ-2022-03-02-03. Рассмотрены CsSnBr_3 , CsSnBr_2I , CsSnBrI_2 и CsSnI_3 и влияние концентрации йода на геометрию и электронные свойства.
6. Burkhonzoda A.S., Nematov D.D., Husenzoda M.A., Kholmurodov K.T., Shokir F. Структурные, электронные и оптические свойства орторомбического перовскита CsPbBr_3 , легированного I // *Политехнический вестник. Серия: Интеллект. Инновации. Инвестиции*. — 2022. Работа посвящена DFT-исследованию влияния легирования йодом на структурные, электронные и оптические свойства CsPbBr_3 .
7. Burkhonzoda A.S., Nematov D.D., Husenzoda M.A., Kholmurodov K.T. et al. Структурные, электронные и оптические свойства перовскитов семейства $\text{CsPbBr}_{3-x}\text{Cl}_x$ ($x = 0, 0.25, 1, 1.25, 1.5$). — 2022. В работе используется FP-LAPW/DFT в WIEN2k для исследования электронных и оптических характеристик смешанных перовскитов $\text{CsPbBr}_{3-x}\text{Cl}_x$.
8. Nematov D., Burkhonzoda A., Kholmurodov K. Phonopy Calculations of Thermodynamic Properties and Phase Transitions of CsSnI_3 Based on SCAN-relaxed Structures // *Innovation Discovery*. — 2024. — Vol. 1, No. 2. — Article 17. DOI: 10.53964/id.2024017. Исследованы α -, β -, γ - и δ -модификации CsSnI_3 , их структурная стабильность, термодинамические свойства и фазовые переходы.
9. Nematov D., Ashurov A., Burkhonzoda A., Raufov I., Kholmurodov K. Preparation of Air Stable Lead-free CsSnI_3 Perovskites: Synthesis Based on CsI and SnCl_2 Solutions // *Journal of Modern Nanotechnology*. — 2024. — Vol. 4. — Article 7. DOI: 10.53964/jmn.2024007. В отличие от большинства расчетных работ, здесь рассматривается синтез и морфология кристаллов и пленок CsSnI_3 , а также проблема их стабильности на воздухе.
10. Nematov D.D., Burkhonzoda A.S., Kurboniyon M.S., Zafari U., Kholmurodov K.T., Brik M.G., Yamamoto T. et al. The Effect of Phase Changes on Optoelectronic Properties of Lead-Free CsSnI_3 Perovskites // *Journal of Electronic Materials*. — 2025. — Vol. 54. — P. 1634–1644. DOI: 10.1007/s11664-024-11683-9. Рассматривается влияние α -, β -, γ - и δ -фаз CsSnI_3 на электронные и оптические свойства с использованием первопринципных расчетов.

Ученый секретарь диссертационного совета
(шифр диссозвета)



Табаров С.Х.
(инициалы, фамилия)