

Отзыв на автореферат диссертации

Дубинца Никиты Олеговича

«Многомасштабное моделирование структуры и свойств фотоактивных слоев и интерфейсов в органических полупроводниках», представленной к защите на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – «физика конденсированного состояния».

Диссертационная работа Дубинца Н.О. посвящена разработке, апробированию и доведению до практического использования для целей многомасштабного моделирования структуры и свойств фотоактивных слоев и интерфейсов в органических полупроводниках нового гибридного вычислительного метода квантовой химии QM/EFP.

Актуальность работы обусловлена следующими обстоятельствами. Теоретическое компьютерное моделирование позволяет значительно сократить затраты времени и материальных ресурсов на проведение экспериментальных исследований. Однако давно стало ясно, что современные вычислительные мощности теоретической химии существенно уступают по сложностям биологических и искусственно созданных объектов, структуру и свойства которых необходимо предсказывать теоретическими методами. Поэтому широкое распространение получили гибридные расчетные методы, когда ключевое звено сложной системы рассчитывается, более или менее, точным методом квантовой химии, тогда как его обширное окружение, в частности, растворитель или твердая подложка, на которой адсорбирован квантовый объект, рассчитываются более простым методом. В частности, широкое распространение получил метод QM/MM, который в качестве более простого и менее ресурсозатратного вычислительного метода использует метод молекулярной механики (ММ). Однако ограниченность его использования вызвана необходимостью предварительной разработки, так наз, силового поля (СП), поскольку универсальных СП не существует ввиду широкого разнообразия химических систем, требующих исследования. В этом отношении метод EFP (эффективных фрагментных потенциалов), является более универсальным по сравнению с методом ММ и предполагает использование значительно меньшего числа эмпирических параметров.

Научная новизна работы состоит в том, автором разработан и автоматизирован компьютерный алгоритм, который предполагает разбиение исследуемой сложной химической системы на фрагменты для EFP расчетов, а также алгоритм для изменения EFP параметров, ранее разработанных для газовой фазы, с целью их применения в условиях требуемого реального окружения. Впервые представленные в данной работе алгоритмы является более точным по сравнению с ранее используемыми методиками. Для практического использования новой гибридной методики расчетов создана онлайн база данных энергий возбуждения фрагментов в конденсированной среде, которая, по сравнению с аналогичными базами данных, рассматривает различные методики описания окружения, а также включает большее число физических параметров.

Научно-практическая значимость работы. Предложенные методы компьютерного моделирования применимы для расчетов спектроскопических свойств новых функциональных материалов, используемых в оптических сенсорах, органической электронике и молекулярных компьютерах. Причем, следует отметить, что созданные автором методики в настоящее время уже нашли свое практическое применение в работах сотрудников ФНИЦ «Кристаллография и фотоника».

Автором выполнена трудоемкая, требующая высокой научной квалификации работа по созданию нового гибридного метода расчете спектральных характеристик сложных структур и

материалов. Материала, содержащегося в автореферате достаточно для суждения о том, что выводы, сделанные в результате работы, являются *достоверными*, а разработанные алгоритмы и методика являются *перспективными* для дальнейшего практического использования. Кроме того, следует отметить широкое представление материалов диссертации на международных и отечественных научных конференциях.

Из замеченных в автореферате недостатков отмечу, что автором часто используется термин экциплекс с переносом заряда, который требует определения.

Однако указанные замечания не снижают общую высокую оценку работы. Представленный научный труд по своему объему, актуальности, новизне, научной и практической значимости отвечает требованиям, предъявляемым ВАК РФ к кандидатским диссертациям («Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденное постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. №842). Считаю, что автор представленной диссертационной работы - Дубинец Никита Олегович – без сомнения заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – физика конденсированного состояния.

«16» ноября 2023 г.

Ведущий научный сотрудник лаборатории сенсорики Центра Фотохимии РАН ФНИЦ «Кристаллография и Фотоника» РАН, доцент, кандидат химических наук (по специальности 02.073 (02.00.04) (физическая химия)

Авакян Виталий Гайкович

тел.: +7 (495) 936-77-53, e-mail:avak@photonics.ru,

Центр Фотохимии РАН ФГУ «Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва. 119421, ул. Новаторов, д.7а, корп.1.

Я, Авакян Виталий Гайкович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета и их дальнейшую обработку.

