

Отзыв научного руководителя

о диссертационной работе Дубинца Никиты Олеговича
«Многомасштабное моделирование структуры и свойств фотоактивных слоев
и интерфейсов в органических полупроводниках» на соискание ученой
степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.03.08 -
физика конденсированного состояния.

В 2013 г. Н. О. Дубинец окончил кафедру физики конденсированных сред Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ» по специальности прикладная математика и информатика. В 2015 году окончил магистратуру НИЯУ «МИФИ» по направлению ядерные физика и технологии. С 2012 г. работает в Центре фотохимии РАН ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН в должности инженера-исследователя, с 2018 г. по настоящее время работает в должности младшего научного сотрудника. С 2015 по 2019 г. обучался в аспирантуре НИЯУ «МИФИ». За период обучения в аспирантуре Дубинец Н.О. своевременно и в полном объеме выполнял учебный план, успешно сдал кандидатские экзамены.

В диссертационной работе Дубинца Н.О. разработан алгоритм, позволяющий представлять исследуемую систему в виде совокупности фрагментов. Данный алгоритм повышает точность моделирования «больших» систем, состоящих из повторяющихся элементов, в частности полимеров или органических полупроводников. Разработана методика изменения EFP параметров библиотечных фрагментов, которая позволяет существенно ускорить расчеты, а также увеличить их точность, по сравнению с ранее использованными подходами. Показана эффективность применения модифицированного QM/EFP подхода для моделирования спектральных свойств органических полупроводников, в частности, моделирования матричного слоя с допантом, а также моделирования процесса образования эксиплексов на границе разделов. Предсказаны возможные пары донор-акцептор, способные к образованию эксиплекса с переносом заряда, что позволит существенно улучшить свойства фотовольтаических устройств на их основе. Создана онлайн база данных энергий возбуждения в конденсированной среде, которая, по сравнению с аналогичными базами данных, рассматривает различные методики описания окружения, а также представляет большее число физических параметров.

Предложенные методы компьютерного моделирования могут быть применены для расчетов спектроскопических свойств новых функциональных материалов для использования в оптических сенсорах, органической электронике и молекулярных компьютерах. Теоретическое

моделирование позволит значительно сократить затраты времени и материальных ресурсов на проведение экспериментов.

Представленная Н.О. Дубинцом к защите диссертационная работа является цельным и законченным теоретическим исследованием. Полученные в работе результаты достоверны и подтверждаются соответствием экспериментальным данным. Работа доложена на 2 молодежных конкурсах научных работ ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН в 2018 и в 2021 и удостоена именной премии им. Б.К. Вайнштейна (2018) и 1-ой премии (2021). Результаты, полученные в диссертационной работе, были опубликованы в 7 статьях в международных журналах и доложены на 10 международных и российских конференциях.

Дубинец Н.О. является сложившимся грамотным исследователем в области физики конденсированного состояния. Отличается ответственным и критическим подходом к своей научной-исследовательской деятельности и получаемым результатам. Глубокие знания методов квантовой химии, молекулярной динамики и физической химии в целом позволяют Н.О. Дубинцу успешно ориентироваться в вопросах расчетов параметров строения молекул и их спектроскопических свойств.

Отзыв дан для представления в Диссертационный совет 24.1.245.01 (Д 002.144.01) в связи с защитой Н.О. Дубинцом диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по теме «Многомасштабное моделирование структуры и свойств фотоактивных слоев и интерфейсов в органических полупроводниках» по специальности 1.3.8 – «физика конденсированного состояния».

Научный руководитель
д. х. н. профессор



Багатурьянц А.А.