

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Дубинца Никиты Олеговича**  
«Многомасштабное моделирование структуры и свойств фотоактивных слоев и интерфейсов в органических полупроводниках», представленной на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – «Физика конденсированного состояния»

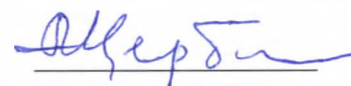
Работа Дубинца Н.О. посвящена моделированию структуры и различных транспортных и фотофизических свойств фотоактивных слоев и интерфейсов в органических и металлоорганических материалах. Работа, помимо своей несомненной актуальности, производит очень хорошее впечатление большим объёмом оригинальных теоретических исследований и численных экспериментов, проведённых её автором, прежде всего, лично и самостоятельно. В работе предложены новые решения самых различных междисциплинарных задач, лежащих на стыке современной физики конденсированного состояния, квантовой химии и программирования. К числу наиболее важных с научно-практической точки зрения достижений автора можно отнести, в частности, создание и реализацию алгоритма представления окружения квантово-механической подсистемы в виде совокупности однотипных фрагментов, а также алгоритма изменения параметров библиотечных фрагментов в соответствии с геометриями исследуемых структур ("потенциалы гибких фрагментов"); исследование практического применения полученных алгоритмов на примере расчетов транспортных и фотофизических свойств фосфоресцентного допанта на основе металлокомплекса иридия, а также эксиплексов на границе разделов слоев различных органических материалов. Результаты диссертации хорошо и успешно апробированы: они представлены в 7 статьях в авторитетных рецензируемых научных журналах, индексируемых в базах данных Web of Science, Scopus, RSCI, и в 10 тезисах в сборниках международных научных конференций.

По содержанию автореферата можно высказать следующее замечание: к сожалению, в нём не описан способ построения теоретических спектров флуоресценции эксиплексов СВР/ВЗРУМРМ, полученных различными методами. В частности, остаётся неясно, учитывалась ли при этом связь электронного перехода с колебаниями комплекса. Высказанное замечание, впрочем, не влияет на общую положительную оценку диссертационной работы, которая полностью соответствует требованиям ВАК и разделу II Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. №842 (ред. от 26.10.2023), предъявляемых к кандидатским диссертациям, а Дубинец Н.О., несомненно, заслуживает присуждения искомой учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – «Физика конденсированного состояния».

Отзыв составил:

к.ф.-м.н. (специальность 02.00.17 – «Математическая и квантовая химия»), старший научный сотрудник кафедры физической химии Химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»

Щербинин Андрей Владимирович



«16» мая 2023 г.

Контактные данные:

119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, стр. 3, химический факультет

Тел.: +7 (495) 939-16-71

e-mail: ascherbinin@qpd.chem.msu.ru



Я, Щербинин Андрей Владимирович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку