

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.245.01 НА БАЗЕ
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УЧРЕЖДЕНИЯ «ФЕДЕРАЛЬНЫЙ
НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР «КРИСТАЛЛОГРАФИЯ И ФОТОНИКА»
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК» ПО ДИССЕРТАЦИИ
ДУБИНЦА НИКИТЫ ОЛЕГОВИЧА НА СОИСКАНИЕ УЧЁНОЙ СТЕПЕНИ
КАНДИДАТА ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 29 ноября 2023 г., протокол № 12.

О присуждении **Дубинцу Никите Олеговичу**, гражданину Российской Федерации, учёной степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Многомасштабное моделирование структуры и свойств фотоактивных слоев и интерфейсов в органических полупроводниках» по специальности 1.3.8. – «физика конденсированного состояния» принята к защите 28.09.2023 г., протокол № 9, диссертационным советом 24.1.245.01, созданным на базе Федерального государственного учреждения «Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук» (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН), Федерального государственного бюджетного учреждения «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» (НИЦ «Курчатовский институт»), 119333, г. Москва, Ленинский проспект, дом 59. Диссертационный совет 24.1.245.01 создан приказом Федеральной службы по надзору в сфере образования и науки № 105/нк от 11.04.2012 г.

Соискатель **Дубинец Никита Олегович**, 25.06.1991 года рождения, в 2015 г. окончил Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»» по направлению «Ядерная физика и технологии» с присвоением квалификации «магистр». С 2015 г. по 2019 г. **Дубинец Н.О.** обучался в аспирантуре ФГАОУ ВО «НИЯУ МИФИ».

В настоящее время **Дубинец Н.О.** работает в лаборатории квантовой химии и молекулярного моделирования Центра фотохимии РАН, ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Федерального государственного бюджетного учреждения «Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» (НИЦ «Курчатовский институт») в должности научного сотрудника.

Диссертационная работа выполнена в лаборатории квантовой химии и молекулярного моделирования Центра фотохимии РАН, ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Федерального государственного бюджетного учреждения «Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» (НИЦ «Курчатовский институт»).

Научный руководитель – **Багатурьянц Александр Александрович**, доктор химических наук, профессор, главный научный сотрудник лаборатории квантовой химии и молекулярного моделирования Центра фотохимии РАН, ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН (до момента увольнения 3 ноября 2022 г.).

Официальные оппоненты:

Никитенко Владимир Роленович – доктор физико-математических наук, профессор отделения нанотехнологий в электронике, спинтронике и фотонике Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»;

Григорьев Федор Васильевич – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории вычислительных систем и прикладных технологий

программирования Научно-исследовательского вычислительного центра Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»;

— дали **положительные отзывы** на диссертацию.

Ведущая организация **Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт общей и неорганической химии» им. Н.С. Курнакова Российской академии наук** (г. Москва,) в своём **положительном отзыве**, подписанном доктором химических наук, профессором, главным научным сотрудником лаборатории квантовой химии ИОНХ РАН Дьячковым Павлом Николаевичем и утвержденном доктором химических наук, членом-корреспондентом РАН, директором ИОНХ РАН Ивановым Владимиром Константиновичем, указала, что диссертационная работа Дубинца Никиты Олеговича, в которой разработаны и протестированы методики многомасштабного моделирования структуры и свойств фотоактивных слоев и интерфейсов в органических полупроводниках, стоит в ряду первых исследований, демонстрирующих перспективность подобных подходов. Область исследований новых материалов для фотоники и электроники активно развивается в последние несколько десятилетий. Разработка таких материалов для светоизлучающих и фотовольтаических устройств представляет собой важную актуальную задачу. Стоит отметить, что образование экциплексов на границе раздела многослойных органических материалов является одним из универсальных механизмов функционирования таких устройств. В настоящее время существуют различные подходы для расчетов параметров молекул в фотоактивных системах, в частности способы описания структур растворителей / окружения возбуждающейся молекулы. Данные подходы строятся на представлении окружения в виде точечных зарядов, либо в виде молекулярно-механических силовых полей. Ещё одним вариантом являются так называемые «фрагментные» методы, в частности EFP (Эффективные фрагментные потенциалы), FMO (Фрагментные молекулярные орбитали), в которых система делится на фрагменты, и рассчитывается их взаимодействия. Метод EFP является одним из перспективных, точных и менее вычислительно затратным способом описания различных систем. Он представляет собой потенциал, рассчитанный из первых принципов, в котором полная межмолекулярная энергия системы определяется как сумма электростатических (кулоновских), поляризонных (индукционных), дисперсионных взаимодействий, а также обменного отталкивания и энергии переноса заряда. Так как метод EFP «строит» исследуемую систему из фрагментов, которые зачастую являются одинаковыми для различных систем (к примеру, ароматические циклы), то, для существенного ускорения вычислений, рационально использовать готовые базы данных EFP параметров фрагментов. Однако, в данном случае возникает проблема для «нежестких» фрагментов, геометрия которых может существенно изменяться. В связи с вышеуказанным, **актуальность и практическая значимость** работы не вызывают сомнений.

В работе автором разработан и автоматизирован (написан скрипт) алгоритм, который представляет исследуемый комплекс в виде совокупности фрагментов для EFP расчетов, а затем склеивает данные фрагменты обратно. Данный скрипт автоматически определяет вид фрагментов, а также находит его в базе данных фрагментов, либо добавляет его. Данные операции не были реализованы в ранее применяемых аналогичных программах. Также в работе создан и автоматизирован (написан скрипт) алгоритм для изменения EFP параметров фрагмента, который использует ранее рассчитанные EFP параметры для газовой фазы и применяет/корректирует их на основе «реальной» геометрии. Данный алгоритм впервые представлен в данной работе, а также является более точным по сравнению с ранее используемыми подходами. Была 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.

Достоверность полученных в работе Н.О. Дубинца результатов подтверждается обоснованным использованием набора теоретических методов и подходов, адекватностью выбора расчетного приближения поставленным задачам, непротиворечивостью полученных результатов, их соответствию современным фундаментальным научным представлениям, взаимной согласованностью результатов, а также согласием с имеющимися экспериментальными и литературными данными. Работа прошла хорошую апробацию; материалы диссертации представлялись в качестве устных, стендовых сообщений и обсуждались на всероссийских и международных конференциях.

Таким образом, диссертационная работа Н.О. Дубинца «Многомасштабное моделирование структуры и свойств фотоактивных слоев и интерфейсов в органических полупроводниках», представленная на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – «физика конденсированного состояния», является законченным научно-квалификационным исследованием, которое по актуальности, объему материала, новизне, практической значимости и достоверности полученных результатов соответствует требованиям ВАК Минобрнауки России (раздел 2 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. №842), а ее автор Дубинец Никита Олегович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – «физика конденсированного состояния».

По теме диссертационной работы опубликовано 7 статей в рецензируемых научных журналах. Результаты представлены в 10 докладах национальных и международных научных конференций. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем ученой степени работах.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Dubinets N.O., Slipchenko L. V. Effective Fragment Potential Method for H-Bonding: How to Obtain Parameters for Nonrigid Fragments // *Journal of Physical Chemistry A*. — 2017. — V. 121. — Issue 28. — P. 5301–5312.

2. Odinkov A. V., Dubinets N.O., Bagaturyants A.A. Pyefp: Automatic decomposition of the complex molecular systems into rigid polarizable fragments // *J Comput Chem*. — 2018. — V. 39. — Issue 13. — P. 807–814.

3. N.O. Dubinets, A.Y. Freidzon, A.A. Bagaturyants Use of effective fragment potentials for simulation of excited states in an inhomogeneous environment // *International Journal of Quantum Chemistry*. — 2020. — V. 120. — P. 1–10.

4. A.Y. Freidzon, N.O. Dubinets, A.A. Bagaturyants Theoretical Study of Charge-Transfer Exciplexes in Organic Photovoltaics // *J. Phys. Chem. A*. — 2022. — V. 126. — Issue 13. — P. 2111–2118.

5. Sosorev A.Y., Dominskiy D.I., Dubinets N.O. Charge Transport in Organic Semiconducting Crystals Exhibiting TADF: Insight from Quantum Chemical Calculations // *Crystals*. — 2023. — V. 13. — Issue 1. — P. 1–15.

На диссертацию и автореферат поступило **6 положительных отзывов**.

1. Катин Константин Петрович – д.ф.-м.н., профессор отделения нанотехнологий в электронике, спинтронике и фотонике офиса образовательных программ Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ», – **без замечаний**.

2. Щербинин Андрей Владимирович – к.ф.-м.н., старший научный сотрудник кафедры физической химии химического факультета Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова, отметил следующее замечание:

К сожалению, в автореферате не описан способ построения теоретических спектров флуоресценции эксиплексов СВР/ВЗРҮМРМ, полученных различными методами. В частности, остаётся неясно, учитывалась ли при этом связь электронного перехода с колебаниями комплекса.

3. Сосорев Андрей Юрьевич – к.ф.-м.н., научный сотрудник, заведующий лабораторией фото- и электрофизики органических полупроводников Института синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, отметил следующее замечание:

Основным замечанием является некоторая небрежность при оформлении автореферата. Встречаются грамматические и стилистические ошибки, отсутствуют ссылки на рисунки. Кроме того, встречаются неточности в использовании понятий, например, «молекула цитозина в комплексе b-ДНК», а понятия «связанные энергии» и «связанная схема» (стр. 13) не объяснены.

4. Авакян Виталий Гайкович – к.х.н., ведущий научный сотрудник лаборатории сенсорики Центра фотохимии РАН ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, отметил следующее замечание:

Автором часто используется термин эксиплекс с переносом заряда, который требует определения.

5. Парашук Дмитрий Юрьевич – д.ф.-м.н., профессор кафедры общей физики и волновых процессов физического факультета Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова, отметил следующие замечания:

1) Название диссертационной работы не вполне точно, так в работе исследованы не только фотоактивные (следовало бы уточнить этот термин) молекулы, а зарядовотранспортные и биомолекулы.

2) Стоило бы раскрыть термин эксиплекс и как он связан с термином – комплекс с переносом заряда.

3) Автореферат имеет ряд погрешностей по оформлению: немало опечаток, стилистически некорректных фраз (например, предпоследний абзац на 1-й стр.) и терминов (например, «органический фотовольтаик»), нет ссылок на рисунки, не все аббревиатуры раскрыты (например, QM, OLED), OLED следует называть органическим светодиодом, ряд небрежных «калек» с английского (например, «временно зависящее уравнение»), рис. 13 слишком мелкий.

6. Левицкая Алина Ибрагимовна – к.х.н., младший научный сотрудник лаборатории функциональных материалов Института органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, отметила следующие замечания:

1) Соискатель допускает некоторую вольность в выборе речевых оборотов («Для сохранения электронейтральности фрагментов, места разрывов связей были заткнуты водородами»).

2) Из текста автореферата не очень понятен принцип выбора модельных соединений, для которых проводилось данное исследование.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что оппоненты являются ведущими специалистами в области органической электроники,

физики конденсированного состояния и квантовой химии, а в ведущей организации активно проводятся теоретические исследования строения, свойств и динамики конденсированных фаз различной природы методами квантовой химии и статистической физики.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований разработан и автоматизирован в виде пакета компьютерных программ алгоритм, который представляет исследуемый органический комплекс в виде совокупности отдельных фрагментов для проведения расчетов методом эффективного фрагментного потенциала и последующей обратной сборки фрагментов в комплекс. Данный пакет программ автоматически определяет вид фрагмента, а далее либо находит его в базе данных уже распознанных фрагментов, либо добавляет в базу новую запись, что не было реализовано в ранее применяемых аналогичных программах. Создан и автоматизирован в виде пакета компьютерных программ алгоритм для изменения параметров фрагмента, используя предварительно рассчитанные методом эффективного фрагментного потенциала параметры для газовой фазы с возможностью их коррекции на основе «реальной» геометрии комплекса. Этот алгоритм представлен впервые и демонстрирует большую точность расчётов, по сравнению с известными используемыми алгоритмами. Автором была создана база данных (доступная онлайн через информационную сеть Интернет) энергий возбуждения различных органических соединений в конденсированной среде, которая, по сравнению с аналогичными базами данных, содержит информацию о различных методиках описания окружения исследуемой системы и большее число физических параметров представленных в базе данных соединений.

Автором показана эффективность применения модифицированного подхода совместного использования квантовомеханических расчётов и метода эффективного фрагментного потенциала для моделирования спектральных свойств органических полупроводников, в частности, моделирования матричного слоя с допантом, а также моделирования процесса образования эксиплексов на границе разделов слоев в органических полупроводниках.

Предсказаны возможные пары PC61BM + [NMe₂-PPT]6 и PC61BM + [PEDOT]8, способные к образованию эксиплекса с переносом заряда и необходимые для улучшения свойств фотовольтаических устройств на основе данных донорно-акцепторных пар.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что предложенные методы компьютерного моделирования могут быть эффективно применены при расчетах спектральных свойств новых функциональных материалов для перспективных оптических сенсоров, органической электроники и молекулярных компьютеров.

Значение полученных соискателем результатов исследований для практики подтверждается тем, что разработанный им модифицированный подход совместного использования квантовомеханических расчётов и метода эффективного фрагментного потенциала подход, по сравнению с оригинальными подходами, способен значительно ускорить выполнение с высокой точностью и в хорошем согласии с экспериментальными данными многомасштабного моделирования структуры и спектральных свойств слоев и интерфейсов в органических полупроводниках с целью поиска новых эффективных материалов для светоизлучающих и фотовольтаических устройств.

Оценка достоверности результатов диссертационной работы выявила, что разработанные автором работы алгоритмы проверены на большом количестве задач (расчеты энергий возбуждения молекулы цитозина в воде и в b-ДНК, расчеты спектров люминесценции фосфоресцентного допанта в различных матрицах, расчеты спектров флуоресценции эксиплексов, образующихся на границе разделов в органических полупроводниках) хорошо согласуются с экспериментальными данными. Описания

оригинальных и сторонних программах и анализе полученных результатов, подробном анализе литературных данных по системам, описанным в диссертационной работе, подготовке материалов для публикаций и представлении научных докладов на национальных и международных научных конференциях.

В ходе защиты диссертации не было высказано **критических замечаний** по содержанию работы. Соискатель Дубинец Н.О. ответил на все заданные ей в ходе заседания уточняющие вопросы.

Диссертация отвечает на ключевые вопросы поставленной научной проблемы и соответствует критерию внутреннего единства. Объединяющим фактором и основной идейной линией является модификация QM/EFP подхода для применения его при многомасштабном моделировании структуры и спектральных свойств различных фотоактивных материалов и интерфейсов. Разработанные алгоритмы и полученные с их помощью результаты имеют большое значение для органической электроники.

Диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая полностью соответствует критериям, установленным Положением о порядке присуждения учёных степеней, утверждённым постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (в действующей редакции).

На заседании 29 ноября 2023 года диссертационный совет принял решение присудить Дубинцу Никите Олеговичу ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – «физика конденсированного состояния».

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 18 человек, из них 6 докторов наук по специальности 1.3.8. – «физика конденсированного состояния», участвовавших в заседании, из 25 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 17, против – 0, недействительных бюллетеней – 1.

Заместитель председателя диссертационного совета,
доктор физико-математических наук,

В.М. Каневский

Учёный секретарь диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук

К.В. Фролов

«29» ноября 2023 г.

Учёный секретарь
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
кандидат физико-математических наук



А.Е. Крюкова