

Зам. председателю  
диссертационного  
совета 24.1.245.01 при  
Федеральном государственном  
учреждении «Федеральный  
научно-исследовательский  
центр «Кристаллография и  
фотоника» Российской  
академии наук»  
д.ф.-м.н. В.М. Каневскому

Уважаемый Владимир Михайлович!

Федеральное государственное бюджетное учреждение «Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова» Российской академии наук дает свое согласие выступить в качестве ведущей организации и предоставить отзыв на диссертацию Дубинца Никиты Олеговича «Многомасштабное моделирование структуры и свойств фотоактивных слоев и интерфейсов в органических полупроводниках», представляемой на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – «физика конденсированного состояния».

Диссертация будет обсуждаться на семинаре Лаборатории квантовой химии.

Приложение: сведения о ведущей организации.

Директор ИОНХ РАН

Член корреспондент РАН

03.10.2023г



В.К. Иванов

## СВЕДЕНИЯ О ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

по кандидатской диссертации Дубинца Никиты Олеговича  
«Многомасштабное моделирование структуры и свойств фотоактивных слоев и  
интерфейсов в органических полупроводниках»  
по специальности 1.3.8 – «физика конденсированного состояния».

Полное и сокращённое наименование организации	Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова» Российской академии наук
Организационно-правовая форма и ведомственная принадлежность	Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Место нахождения	г. Москва
Почтовый адрес организации с указанием индекса	119991, Россия, г. Москва, Ленинский просп., 31
Телефон с указанием кода города	8(495) 952-07-87
Адрес электронной почты	info@igic.ras.ru
Адрес официального сайта в сети «Интернет»	<a href="http://www.igic.ras.ru/">http://www.igic.ras.ru/</a>
Список основных публикаций работников ведущей организации по теме диссертации в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет (не более 15 публикаций)	<ol style="list-style-type: none"><li>1. Tovbin Y. K. Gibbs Calculations of the Equilibrium Surface Tension in a Vapor–Liquid System // Russian Journal of Physical Chemistry A. – 2018. – Т. 92. № 12. – С. 2424–2434.</li><li>2. Trzhaskovskaya M. B., Yarzhemsky V. G. Dirac–Fock photoionization parameters for HAXPES applications // Atomic Data and Nuclear Data Tables. – 2018. – Т. 119. – С. 99–174.</li><li>3. Zaitsev K. V., Kharcheva A. V., Lam K., Zhanabil Z., Issabayeva G., Oprunenko Y. F., Churakov A. V., Zaitseva G. S., Karlov S. S. Donor-acceptor molecular oligogermanes: Novel properties and structural aspects // Journal of Organometallic Chemistry. – 2018. – Т. 867. – С. 228–237.</li><li>4. D'yachkov E. P., D'yachkov P. N. Gold Nanosolenoids Based on Chiral Nanotubes Calculated Using the Relativistic Linearized Augmented Cylindrical Wave Method // Journal of Physical Chemistry C. – 2019. – Т. 123. № 42. – С. 26005–26010.</li><li>5. D'yachkov P. N., Krasnov D. O. Electronic and transport properties of deformed platinum nanotubes calculated using relativistic linear augmented cylindrical wave method // Chemical Physics Letters. – 2019. – Т. 720. – С. 15–18.</li><li>6. Dolin S. P., Mikhailova T. Y., Breslavskaya N. N. Attempt of Quantum Chemical Modeling of the Structural Phase Transition in the Quasi-One-Dimensional H-Bonded Ferroelectric Crystal of CsH<sub>2</sub>PO<sub>4</sub> and Its Deuterated Analog CsD<sub>2</sub>PO<sub>4</sub> // Russian Journal of Inorganic Chemistry. – 2020. – Т. 65. № 1. – С. 76–80.</li></ol>

7. Doronin S. V., Volykhov A. A., Inozemtseva A. I., Usachov D. Y., Yashina L. V. Comparative Catalytic Activity of Graphene Imperfections in Oxygen Reduction Reaction // Journal of Physical Chemistry C. – 2020.
8. Yarzhemsky V. G., Teterin Y. A., Presnyakov I. A., Maslakov K. I., Teterin A. Y., Ivanov K. E. Many-Electron Effects in Co 3s X-Ray Photoelectron Spectra of Diamagnetic ScCoO<sub>3</sub> and Paramagnetic BiCoO<sub>3</sub> Cobaltites // JETP Letters. – 2020. – Т. 111. № 8. – С. 422–427.
9. Lin Y.-P., Isakoviča I., Gopejenko A., Ivanova A., Začinskis A., Eglitis R. I., D'yachkov P. N., Piskunov S. Time-dependent density functional theory calculations of n- and s-doped TiO<sub>2</sub> nanotube for water-splitting applications // Nanomaterials. – 2021. – Т. 11. № 11.
- Torubaev Y. V., Skabitsky I. V., Anisimov A. A., Ananyev I. V. Long-range supramolecular synthon polymorphism: a case study of two new polymorphic cocrystals of Ph<sub>2</sub>Te<sub>2</sub>-1,4-C<sub>6</sub>F<sub>4</sub>I<sub>2</sub> // CrystEngComm. – 2022. – Т. 24. № 7. – С. 1442–1452.

Директор ИОНХ РАН

Член корреспондент РАН

03.10.2023г



В.К. Иванов