

УТВЕРЖДАЮ

Директор ФГБУН Институт
общей и неорганической химии
им. Н.С. Курнакова

Российской академии наук,

д.х.н., чл.-корр. РАН Иванов

Владимир Константинович



ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

федерального государственного бюджетного учреждения науки
«Институт общей и неорганической химии» им. Н.С. Курнакова
Российской академии наук

на диссертационную работу **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» в
диссертационный совет 24.1.245.01. при ФНИЦ «Кристаллография и
фотоника» РАН.

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 эксиплексов 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), поляризационных (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. Работа Н.О. Дубинца, 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. Все приведенные доводы определяют несомненную **актуальность и практическую значимость** диссертационной работы Н.О. Дубинца.

Диссертационная работа Н.О. Дубинца имеет традиционную структуру: она состоит из введения, трех глав, списка литературы (222 наименования); она изложена на 159 страницах. Текст диссертации проиллюстрирован 59 рисунками, 14 таблицами.

Во введении содержится постановка цели и задач диссертационной работы, формулируется актуальность ее темы, рассматривается новизна и практическая ценность полученных результатов, а также формулируются положения, выносимые на защиту.

Первая глава представляет собой литературный обзор, в котором рассмотрены практические результаты применения различных квантово-химических, молекулярно-динамических и комбинированных методов для моделирования органических, кристаллических и биоактивных систем. Представлены границы применения используемых методов расчета, описаны основные понятия QM/MM и EFP подходов.

Вторая глава посвящена описанию методики расчёта и исследуемых соединений. В главе приведено описание алгоритма разбиения системы на фрагменты, продемонстрирована методика изменения параметров библиотечных EFP фрагментов в соответствии с «реальными» геометриями, исследовано влияния способов окружения при моделировании структур в конденсированной среде на примере молекулы цитозина в водной среде и в комплексе b-ДНК. В главе приведено практическое применение ранее описанных алгоритмов на примере расчетов транспортных свойств, синглетных и триплетных спектров для фосфоресцентного OLED допанта IrMDQ, а также для спектральных свойств эксиплексов, образующихся на интерфейсах между слоями. подобраны пары донор – акцептор (фуллерен + политиофен) с поглощением одного из полупроводников в ближней ИК области и образующей эксиплекс с переносом заряда.

В **третьей главе** представлены результаты тестирования алгоритма представления исследуемых систем в виде совокупности фрагментов, а также методики для изменения параметров библиотечных EFP фрагментов в соответствии с геометриями исследуемых структур. Выполнен анализ точности различных способов описания окружения при моделировании структур в конденсированной среде на примере молекулы цитозина в водной среде и в молекуле b-ДНК. Выполнено многомасштабное атомистическое моделирование синглетных и триплетных спектров для фосфоресцентного OLED допанта IrMDQ и спектров флуоресценции для эксиплексов, образующихся на границе разделов слоев ВЗРУМРМ и СВР.

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.

По нашему мнению, **научная новизна** работы заключается в следующих основных результатах:

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.

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.

Автореферат достаточно полно отражает содержание диссертационной работы.

Таким образом, актуальность, научная новизна и практическая значимость диссертационной работы Н.О. Дубинца не вызывают сомнений. Результаты, полученные диссертантом, могут быть использованы в таких научно-исследовательских организациях, как Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Институт высокомолекулярных соединений РАН, Институт

проблем химической физики РАН, Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН и др.

По диссертации Н.О. Дубинца следует сделать следующее замечание:

В тексте диссертации основное внимание уделено описанию методики расчетов и их результатам при некотором недостатке сопоставления результатов вычислений с экспериментальными данными и трактовки имеющихся экспериментов.

Необходимо подчеркнуть, что приведенные замечания не снижают положительной оценки работы, а диссертация Н.О. Дубинца представляет собой законченное научное исследование, выполненное на высоком научном уровне и обладающее неоспоримой научной новизной и практической значимостью.

Заключение.

Таким образом, диссертационная работа Н.О. Дубинца «Многомасштабное моделирование структуры и свойств фотоактивных слоев и интерфейсов в органических полупроводниках», представленная на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – «физика конденсированного состояния», является законченным научно-квалификационным исследованием, которое по актуальности, объёму 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.

Диссертационная работа Дубинца Никиты Олеговича «Многомасштабное моделирование структуры и свойств фотоактивных слоев и интерфейсов в органических полупроводниках» была заслушана, а отзыв был обсужден на семинаре лаборатории квантовой химии (Протокол №2 от 27.10.2023г.).

Отзыв составил, доктор химических наук, профессор, главный научный сотрудник лаборатории квантовой химии ФГБУН Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН Дьячков Павел Николаевич.

«30» октября 2023 г.

д.х.н., проф.,
гл.н.с. лаборатории квантовой химии
Института общей
и неорганической химии
им. Н.С. Курнакова РАН

П.Н. Дьячков

119991, Москва, Ленинский проспект, д. 31

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова» Российской академии наук.

Тел.: +7-495-952-07-87

E-mail: info@igic.ras.ru

