

## Отзыв

на автореферат диссертации Н. О. Дубинца «МНОГОМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ФОТОАКТИВНЫХ СЛОЕВ И ИНТЕРФЕЙСОВ В ОРГАНИЧЕСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – физика конденсированного состояния.

Диссертация Н. О. Дубинца, посвящена разработке новых эффективных светоизлучающих, фотовольтаических и хемосенсорных устройств, а используемые в работе моделирование и квантово-химические расчеты, несомненно, являются «золотым стандартом» в подобного рода исследованиях. В своей работе соискатель использует различные современные методы и подходы, позволяющие решить поставленные задачи. В рамках проведенного исследования автором проделана впечатляющая работа: написан скрипт для представления исследуемой системы в виде совокупности фрагментов для EFP расчетов (данный алгоритм автоматически определяет вид фрагментов, находит его в базе данных фрагментов и может добавить в случае отсутствия в нем); написан скрипт для изменения EFP параметров фрагмента (алгоритм использует ранее рассчитанные EFP параметры для газовой фазы и применяет/корректирует их на основе «реальной» геометрии); создана онлайн база данных энергий возбуждения в конденсированной среде (по сравнению с аналогичными базами данных, предложенная автором рассматривает различные методики описания окружения, а также представляет большее число физических параметров). На примере простых моделей Н.О. Дубинцу удалось успешно протестировать предложенную методику многомасштабного моделирования структуры и свойств фотоактивных слоев и интерфейсов в органических полупроводниках.

Диссертационная работа Н.О. Дубинца имеет важную практическую значимость – предложенные методы компьютерного моделирования могут быть применены для расчетов спектроскопических свойств новых функциональных материалов, а теоретическое моделирование позволит значительно сократить затраты времени и материальных ресурсов на проведение экспериментов. Созданные методики в настоящее время применяются сотрудниками ФНИЦ «Кристаллография и фотоника».

По автореферату можно сделать 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.

Полученные в диссертационной работе результаты полностью соответствуют поставленным целям и задачам, и могут быть использованы в дальнейших исследованиях в этой области. Важно отметить, что результаты были апробированы на конференциях и опубликованы в ведущих международных журналах. Сделанные замечания не оказывают влияния на высокую оценку диссертационной работы. Работа Н. О. Дубинца полностью соответствует требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а сам соискатель заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – «Физика конденсированного состояния».

« 20 » 11 2023 г.

Младший научный сотрудник лаборатории функциональных материалов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, к.х.н.  
(02.00.04 – Физическая химия)

Левицкая Алина Ибрагимовна

*Полное наименование организации:* Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова Казанского Научного центра РАН.

*Адрес:* 420088, Россия, Республика Татарстан, город Казань, ул. Ак. Арбузова, д.8.

*e-mail:* april-90@mail.ru

*тел.:* (843)2727343

Я, Левицкая Алина Ибрагимовна, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета и их дальнейшую обработку.

