

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

Никитенко Владимира Роленовича

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.

Актуальность темы и цель диссертационной работы. Множество теоретических исследований было выполнено в области моделирования структур и свойств различных фотоактивных допантов и эксиплексов на границе раздела многослойных органических материалов в светоизлучающих, фотовольтаических и хемосенсорных устройствах. Результаты этой работы критически важны для решения проблемы предсказательного моделирования новых эффективных светоизлучающих и фотовольтаических устройств.

Моделирование различных допантов и предсказание возможности образования эксиплексов с разделенными зарядами в смесях органических полупроводников открывает возможность повышения эффективности органических солнечных батарей и фоточувствительных элементов. С другой стороны, термически активированная задержанная флуоресценция в донорно-акцепторных эксиплексах позволяет утилизировать до 100% электрогенерированных зарядов в органических светоизлучающих устройствах. Изучение условий, при которых целевые состояния образуются с максимальной эффективностью, является значимой проблемой. Учет образования триплетов особенно актуален, если принять во внимание масштаб времен жизни эксиплексов с переносом заряда (десятки и сотни мкс).

Стоит отметить, что только за 2022 год по данной тематике было опубликовано 14 работ, охватывающих такие важные темы, как светоизлучающие устройства (OLED) для световых индикаторов; термически активированная

задержанная флуоресценция (TADF); состояния с переносом заряда; эффективность и стабильность светоизлучающих и фотовольтаических устройств.

В настоящее время отсутствует универсальный подход для моделирования структуры с спектральными свойствами слоев и интерфейсах в органических фотоустройствах. Методы квантовой химии, в частности теория функционала плотности, позволяет проводить расчеты лишь в газовой фазе, без учета окружения. С другой стороны, молекулярно-динамическое моделирование, позволяющее явно учитывать геометрию большого числа молекул, использует эмпирические параметры для силовых полей, расчет которых является сильно трудоемкой задачей и часто приводит к большим разногласиям с экспериментальными данными. Таким образом, диссертационную работу Н.О. Дубинца следует признать *актуальной*.

Целью представленной работы является разработка и тестирование методики многомасштабного моделирования структуры и свойств фотоактивных слоев и интерфейсов в органических полупроводниках.

Для достижения поставленной цели автором были решены следующие **задачи**:

1. Разработка эффективного алгоритма представления исследуемых систем в виде совокупности фрагментов. Автоматизация и тестирование полученного алгоритма.
2. Создание алгоритма для изменения параметров библиотечных EFP фрагментов в соответствии с геометриями исследуемых структур. Автоматизация и тестирование полученного алгоритма на примере совокупности производных муравьиной кислоты (FaOO, FaON, FaNN) .
3. Изучение влияния способов описания окружения при моделировании структур в конденсированной среде на примере молекулы цитозина в водной среде.
4. Исследование практического применения полученных алгоритмов на примере расчетов спектральных свойств и энергий возбуждения для молекулы цитозина в комплексе β -ДНК.
5. Создание онлайн базы данных энергий возбуждения в конденсированной среде.

6. Исследование практического применения полученных алгоритмов на примере расчетов транспортных свойств, синглетных и триплетных спектров для фосфоресцентного OLED допанта IrMDQ.
7. Исследование практического применения полученных алгоритмов на примере моделирования процесса образования эксиплексов на границе разделов слоев ВЗРУМРМ и СВР.
8. Предсказательное моделирование модифицированных комплексов фуллерен + олигоотиофен, способных к образованию эксиплексов с переносом заряда, что позволит существенно улучшить свойства фотовольтаических устройств на их основе.

Оценка содержания диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, трех глав, основных глав и выводов, списка публикаций по теме диссертации из 17 наименований и списка литературы из 222 наименования. Общий объем диссертации – 159 страниц, включая 59 рисунков и 14 таблиц. Названия всех основных разделов, в которых приводятся литературные данные и обсуждаются результаты собственных исследований соискателя, в полной мере соответствуют своему содержанию.

Личный вклад автора состоит в сборе и анализе литературы по теме диссертационного исследования, разработки и автоматизации алгоритмов разбиения системы на фрагменты и изменения параметров фрагмента в зависимости от геометрии, многомасштабном моделировании молекулы цитозина в воде и в b-ДНК, фосфоресцентного допанта в различных матрица, эксиплексов на границе разделов, обработке полученных результатов расчётов, написании статей. Сформулированные автором *положения, выносимые на защиту и выводы*, отражают суть проведенных исследований.

Научная новизна. По мнению оппонента, все основные результаты были получены соискателем в рамках данного цикла исследований. Отмечаю, что содержательная часть диссертационной работы соответствует заявленной цели исследования и сформулированным задачам, по каждой из которых соискателю удалось достичь научно- и практически значимых результатов. Так, автором впервые предложены алгоритмы поиска EFP фрагментов в созданной им базе данных EFP фрагментов, впервые предложен метод изменения параметров

«эталонного» EFP фрагмента в зависимости от реальной геометрии системы. В том числе показано, что его предложенный модифицированный EFP подход является наиболее точным и менее ресурсозатратным по сравнению с ранее использованными методами.

Достоверность полученных результатов и выводов. В диссертационной работе Н.О. Дубинца предложен и протестирован модифицированный EFP подход, основанный на разработанных Н.О. Дубинцом алгоритмах построения системы из совокупности фрагментов и преобразовании параметров данных фрагментов в зависимости от геометрии системы. Достоверность полученных теоретических результатов подтверждается их соответствием с экспериментальными данными, полученных из литературных данных.

Работа прошла хорошую апробацию; материалы диссертации опубликованы в 7 высокорейтинговых международных научных журналах, а также в качестве устных, стендовых сообщений и обсуждались на всероссийских и международных конференциях. Автореферат и публикации полностью представляют содержание диссертации.

Теоретическая и практическая значимость работы. Предложенные и протестированные автором работы алгоритмы позволяют существенно сократить вычислительные ресурсы для исследования спектральных свойств фотоактивных материалов без потери точности. Созданная онлайн база данных энергий возбуждения в конденсированной среде, рассматривает различные методики описания окружения, а также представляет большее число физических параметров, по сравнению с аналогичными базами данных.

Вопросы и замечания по работе.

1. Известно, что при вычислении энергий электронных (дырочных) состояний в органических материалах необходимо учитывать взаимодействие с большим числом окружающих атомов. В диссертации не обоснован выбор радиуса 7 ангстрем, за пределами которого моделирование не выполняется.
2. Формулировки положений, выносимых на защиту (особенно п. п.1 и 2), недостаточно подчёркивают научную новизну полученных результатов (формулировки типа «улучшить...», «ускорить...»).

3. Текст работы местами читается с трудом и содержит опечатки.

Высказанные замечания и вопросы не снижают общую положительную оценку представленного научного исследования и не влияют на общее положительное впечатление от диссертационной работы Н.О. Дубинца.

Заключение. Таким образом, диссертационную работу Н.О. Дубинца можно квалифицировать как работу по разработке и тестированию методики многомасштабного моделирования структуры и свойств фотоактивных слоев и интерфейсов в органических полупроводниках.

Представленное диссертационное исследование соответствует паспорту заявленной научной специальности 1.3.8. – «физика конденсированного состояния»

Диссертационная работа Н.О. Дубинца «Многомасштабное моделирование структуры и свойств фотоактивных слоев и интерфейсов в органических полупроводниках» представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует требованиям п. 9-14 «Положения о присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. №842), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидат наук. Автор работы, Дубинец Никита Олегович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – физика конденсированного состояния.

Отзыв составил: Никитенко Владимир Роленович

Доктор физико-математических наук,
профессор отделения нанотехнологий
в электронике, спинтронике и фотонике
ФГАОУ ВО «Национального
исследовательского ядерного
университета «МИФИ»

Адрес: Россия, 115409, г. Москва,
Каширское шоссе, д. 31
Тел.: +7 495 788-5699
e-mail: vnikitenko@mephi.ru

Дата «10» ноября 2023 г.

Подпись удостоверяю
Заместитель начальника отдела
документационного обеспечения
НИЯУ МИФИ

В. М. Самородов

