

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Дубинца Никиты Олеговича**

«Многомасштабное моделирование структуры и свойств фотоактивных слоев и интерфейсов в органических полупроводниках», представленной на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – «физика конденсированного состояния».

Работа Дубинца Н.О. посвящена актуальной проблеме многомасштабного моделирования структуры и свойств органических полупроводниковых материалов, а также комплексов ДНК. В настоящее время известен огромный массив соединений, которые могут успешно применяться в светоизлучающих и фотовольтаических устройствах, однако экспериментальные исследования таких соединений требуют больших усилий и ресурсов. Вследствие этого возникает проблема разработки методики адекватного предсказательного подхода для описания структуры, оптических и зарядово-транспортных свойств материалов, выполненных на основе данных молекул. Разработанные и успешно протестированные в диссертационной работе Дубинца Н.О. алгоритмы и подходы позволяют добиться приемлемой точности многомасштабного моделирования органических пи-сопряженных молекул и могут применяться для более широкого круга исследований.

Среди наиболее ярких результатов работы Дубинца Н.О. стоит отметить высокую скорость расчетов и низкое требование к вычислительным ресурсам для модифицированного автором QM/EFP подхода, а также хорошее согласие с экспериментальными данными, что делает данный метод практически применимым для поиска новых пи-сопряженных соединений для органической электроники.

Также в работе представлено большое число альтернативных методов расчета, выполнено сравнение их с предложенным Дубинцом Н.О. модифицированным QM/EFP подходом, показано, что данный подход является наиболее удобным для выполнения расчетов в области органической электроники.

Результаты работы опубликованы в 7 статьях в международных рецензируемых научных изданиях из списка ВАК, а также обсуждены на национальных и международных конференциях. Ряд статей опубликован в высокорейтинговых международных журналах, а в нескольких из них диссертант выступает первым автором.

Тема диссертационного исследования раскрыта, поставленные задачи решены, а положения, выносимые на защиту, имеют научную новизну и практическую значимость.

Вместе с тем имеются следующие замечания:

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

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

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.

Отмеченные замечания не влияют на общую положительную оценку диссертационной работы.

Считаю, что представленная работа по своей актуальности, научной обоснованности, научной новизне и практической значимости отвечает всем критериям и требованиям раздела II положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года №842, а её автор, Дубинец Никита Олегович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – физика конденсированного состояния.

Доктор физико-математических наук,
профессор кафедры общей физики и
волновых процессов физического
факультета ФГБОУ ВО «Московский
государственный университет имени
М.В.Ломоносова»

27.11.2023

Паращук Дмитрий Юрьевич

Паращук Дмитрий Юрьевич

Шифр специальности: 01.04.21 «Лазерная физика»

Тел.: +7 (495) 939-22-28

e-mail: paras@physics.msu.ru

Россия, 119991, ГСП-1, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 62

Я, Паращук Дмитрий Юрьевич, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Подпись Паращука Д.Ю. заверено.

Заместитель
Начальник *а*
отдела кадров



Н.А. Крыжановская