

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации 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».

Диссертационная работа Дубинца Н.О. посвящена разработке и тестированию методики многомасштабного моделирования структуры и свойств фотоактивных слоёв и интерфейсов в органических полупроводниках. Тема работы весьма актуальна, поскольку предсказательное моделирование свойств органических полупроводников может значительно ускорить разработку новых материалов для органических светоизлучающих диодов (OLED) и органических солнечных батарей. Основное внимание в работе уделяется моделированию влияния окружения на электронные и оптические свойства молекул органических полупроводников. В работе сопоставлены гибридные методы, позволяющие учесть такое влияние: QM/MM, QM/EFP и FMO, и показано, что метод QM/EFP показывает наилучшее согласие с экспериментом для исследованных систем. Разработаны алгоритмы эффективного представления исследуемых систем в виде совокупности фрагментов, методика для подстройки параметров библиотечных EFP-фрагментов в соответствии с геометриями исследуемых молекул в конкретной структуре, создана онлайн-база данных энергии возбуждения в конденсированной среде. Разработанные оригинальные алгоритмы и методики применены к ряду качественно различных систем: ДНК, фосфоресцирующим допантам в аморфной матрице органического светодиода, эксиплексам на границе раздела двух светоизлучающих органических полупроводников, комплексам сопряжённого полимера с фуллереном. В работе получен внушительный массив расчётных данных, а разработанные алгоритмы должны существенно улучшить точность описания оптических свойств органических полупроводниковых материалов. Таким образом, работа производит весьма положительное впечатление.

Вместе с тем, к автореферату имеется ряд замечаний. Основным замечанием является некоторая небрежность при его оформлении. Встречаются грамматические и стилистические ошибки, отсутствуют ссылки на рисунки. Кроме того, встречаются неточности в использовании понятий, например, «молекула цитозина в комплексе b-ДНК», а понятия «связанные энергии» и «связанная схема» (стр. 13) не объяснены. Однако, данные замечания не влияют на положительное восприятие работы.

Знакомство с авторефератом позволяет заключить, что представленная диссертационная работа является завершенным научным исследованием. Работа удовлетворяет всем требованиям раздела II «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ №842 от 24.09.2013 г., предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор, Дубинец Никита Олегович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – физика конденсированного состояния.

Сосорев Андрей Юрьевич  / Сосорев А. Ю.

к.ф.-м.н. (специальность 02.00.06 –
Высокомолекулярные соединения),
научный сотрудник, заведующий лаборатории
Фото- и электрофизики органических
полупроводников ФГБУН «Институт
синтетических полимерных материалов им. Н.С.
Ениколопова» РАН
Телефон: +7 (495) 332-58-27
Почтовый адрес: 117393, Москва,
Профсоюзная улица, 70
e-mail: sosorev@ispm.ru

«24» ноября 2023 г.

Согласен на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку, а также на размещение моего отзыва на веб-сайте диссертационного совета в сети Интернет.

Подпись к.ф.-м.н., н.с. Сосорева Андрея Юрьевича заверяю,
ученый секретарь ИСПМ РАН

к.х.н.

email: getmanovaev@ispm.ru

тел. +7 (495) 332-58-27;

www.ispm.ru

 / Гетманова Е.В.

