

Отзыв научного руководителя

о работе Мартынова Артура Ильича «Моделирование неадиабатического переноса экситона между ковалентно связанными молекулярными логическими вентилями», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 Физическая химия (физико-математические науки)

Мартынов Артур Ильич окончил федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский университет «Московский институт электронной техники» в 2018 году и в том же году поступил в очную аспирантуру НИУ МИЭТ. В 2022 году был прикреплен в качестве соискателя к химическому факультету федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова», где им был сдан экзамен по специальности 1.4.4 Физическая химия. Научно-исследовательская работа выполнена в лаборатории молекулярной спектроскопии кафедры физической химии Химического факультета МГУ

Диссертационная работа Мартынова А.И. посвящена решению фундаментальной проблемы передачи сигналов между молекулярными логическими вентилями (МЛВ) путем разработки и теоретического исследования нового экситонного механизма коммуникации на основе неадиабатического переноса локализованного электронного возбуждения между ковалентно-связанными МЛВ. Для достижения этой цели была разработана модифицированная модель Биксона-Джортнера-Плотникова, в которой спектральная плотность аппроксимирована функцией Пекара, и которая позволяет за конечное время и с приемлемой точностью рассчитывать константы скорости неадиабатических переходов в больших органических молекулах, что было невозможно при использовании традиционных методов. Разработанная модель была реализована в виде программы NATRC, верифицирована на ряде органических молекул и применена для исследования динамики экситонов в модельных системах на основе цепей тетратиафульвалена (TTF) и соединений TTF с 3Н-тиаксантеном и дибензо-BODIPY. Это в свою очередь позволило продемонстрировать высокую эффективность и перспективность экситонной передачи сигнала для создания масштабируемых молекулярных логических систем.

В ходе работы Мартынов А. И. продемонстрировал умение работать с обширными объемами литературных источников и развил свои навыки поиска необходимой информации, освоил теоретический аппарат модели Биксона-Джортнера-Плотникова, ознакомился с математическим аппаратом модели Пекара для спектральной плотности,

научился правильно подбирать методы квантово-химического моделирования для решения определенной задачи и корректно применять их на практике. К группе освоенных методов относятся такие методы как МКССП, MCQDPT, DFT, TD-DFT, включая применение DFT и TD-DFT с учетом растворителя в рамках PCM модели. В процессе работы докторант повысил свои навыки программирования на Fortran, написав и отладив программу NATRC для расчета констант скорости неадиабатических переходов.

Результаты исследовательской работы Мартынова А.И. изложены в 4 научных статьях в рецензируемых научных изданиях, индексируемых в базах данных Web of Science, Scopus и RSCI. Многочисленные доклады на международных и российских конференциях опубликованы в семи сборниках. За время работы над докторандским исследованием Мартынов А.И. проявил себя как специалист с высоким уровнем теоретических знаний и практическими навыками, способный самостоятельно ставить и решать научные задачи, проводить анализ и систематизацию материала, проявляя ответственность, трудолюбие и инициативность в ходе исследовательской работы.

Как научный руководитель считаю, что представленная Мартыновым А.И. докторандская работа выполнена на высоком научном уровне и представляет собой целостное исследование, выполненное на современном уровне, полученные результаты являются оригинальными и достоверными, а выводы обоснованными и вносят существенный вклад в разработку способов коммуникации между МЛВ и разработку метода расчета констант скорости неадиабатических переходов и соответствует требованиям пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете им М.В. Ломоносова, предъявляемых к докторандским работам на соискание ученой степени кандидата наук.

Доцент кафедры физической химии,
химического факультета федерального
государственного бюджетного
образовательного учреждения высшего
образования «Московский государственный
университет имени М.В.Ломоносова»
(химический факультет МГУ)
Кандидат физико-математических наук
(специальность 02.00.17 математическая и
квантовая химия)

16.06.2025

Белов Александр Сергеевич
Москва г. Ленинские Горы ул,
1, з. +7 (495) 939-12-86
asbelov@phys.chem.msu.ru