

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Мартынова Артура Ильича на тему «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)

Диссертационная работа А. И. Мартынова посвящена теоретическому описанию и моделированию процессов передачи сигнала в молекулярных логических устройствах. Автор предлагает использовать неадиабатический перенос локализованного экситона в качестве механизма коммуникации между молекулярными логическими вентилями (МЛВ), а также им был предложен новый вариант модели Биксона-Джортнера-Плотникова, которая позволяет за полиномиальное время с приемлемой точностью рассчитывать константы скорости неадиабатических переходов.

Актуальность, во-первых, обусловлена тем, что на текущий момент неизвестен механизм обмена сигнала МЛВ, при котором система была бы масштабируемой. Во-вторых, разработка упрощенного метода расчета констант скорости неадиабатических переходов имеет самостоятельную ценность для развития методов квантовой химии. *Достоверность* результата подтверждается использованием современных методов квантовой химии и верификацией модели на большом массиве известных из литературы экспериментальных данных.

Автором предложена оригинальная модификация модели БДП, использующая аппроксимацию спектральной плотности функцией Пекара. Это позволило существенно расширить энергетический диапазон применимости теории (до $15000\text{--}20000\text{ см}^{-1}$) и, что особенно важно, перейти от экспоненциальной к полиномиальной зависимости времени счета от размера системы. Проведен теоретический анализ влияния симметрии на составляющие константы скорости внутренней конверсии. Получен вывод о том, что для переходов между состояниями разных неприводимых представлений достаточно учитывать лишь член первого порядка. При выполнении работы автором создан программный комплекс NATRC, который может стать полезным инструментом для широкого круга исследователей, занимающихся фотохимией и спектроскопией.

Проведено исследование экситонной динамики на модельных молекулах: конденсированных цепях тетратиафульвалена (ТТФ) и соединений ТТФ с 3Н-тиаксанта и дибензо-BODIPY. Показано, что скорость миграции экситона в предложенных структурах на порядки превышает скорость его релаксации, что является необходимым условием функционирования логического устройства.

К автореферату есть следующие вопросы и замечания, которые не являются критическими:

1. В работе предложена модельная молекула «S-Line» со сложной архитектурой. Оценивалась ли автором (хотя бы качественно) синтетическая доступность таких структур? Ведь практическая реализация молекулярной логики невозможна без синтеза предсказанных теоретиками объектов.
2. В автореферате утверждается, что модифицированный метод позволяет проводить расчеты за «полиномиальное время». Было бы полезно привести конкретные

данные о масштабируемости алгоритма: как именно зависит время расчета от числа атомов или базисных функций (N^2 ? N^3 ?) в сравнении с традиционным подходом.

3. При учете влияния растворителя используется модель PCM/SMD. Учитывая специфику переноса заряда и энергии в полярных средах, рассматривалась ли возможность специфических взаимодействий растворителя с МЛВ, которые не описываются в рамках континуальных моделей?

Указанные замечания не снижают общей высокой оценки диссертационного исследования. Диссертация отвечает требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М.В.Ломоносова к работам подобного рода. Содержание диссертации соответствует специальности 1.4.4 Физическая химия (по физико-математическим наукам), а также критериям, определенным пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова, а ее автор достоин присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 Физическая химия (физико-математические науки).

Профессор кафедры физической химии
химического факультета федерального
государственного бюджетного
образовательного учреждения высшего
образования «Московский государственный
университет имени М.В.Ломоносова»
(химический факультет МГУ)
Доктор физико-математических наук,
профессор

02.12.2025 Дата

Еремин Вадим Владимирович

Москва г, Ленинские Горы ул, 1, 3

+7 (495) 939-12-86

vadim@educ.chem.msu.ru