

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)

Исследование, проведенное Мартыновым А. И., посвящено решению одной из ключевых проблем, стоящих на пути развития вычислительной техники после исчерпания возможностей закона Мура, – поиску альтернативных принципов построения вычислительных устройств на молекулярном уровне. Автором предложен и теоретически обоснован механизм передачи сигнала между молекулярными логическими вентилями (МЛВ) посредством неадиабатического переноса локализованного экситона, а также разработан новый эффективный вычислительный метод на базе модели Биксона-Джортнера-Плотникова для расчета констант скорости таких переходов.

Актуальность работы, с точки зрения микроэлектроники, не вызывает сомнений. Современная кремниевая технология приближается к фундаментальным физическим пределам, и поиск посткремниевых решений ведется в самых разных направлениях, включая молекулярную электронику. Предложенный автором подход к созданию масштабируемых молекулярных логических систем (МЛС) с направленной передачей сигнала является одним из таких потенциальных прорывных направлений. *Достоверность* полученных результатов подтверждается использованием современных методов квантово-химического моделирования, строгой верификацией разработанной модели на экспериментальных данных и критическим анализом границ ее применимости.

Особого внимания заслуживает разработанный автором модифицированный метод БДП, который за счет аппроксимации спектральной плотности функцией Пекара позволяет перейти от экспоненциальной к полиномиальной сложности расчетов. Это открывает возможность моделировать системы, состоящие из десятков атомов, что является необходимым условием для проектирования реальных молекулярных устройств. Полученные автором выводы о влиянии симметрии молекулы на константы скорости переноса экситона важны для целенаправленного молекулярного дизайна. Практической ценностью обладает созданный автором программный комплекс NATRC, который может быть использован для скрининга перспективных молекулярных структур.

Продemonстрированная в работе на модельных системах (цепях TTF и молекуле S-Line) высокая эффективность и направленность экситонного переноса (превышение скорости миграции над скоростью релаксации на 5-13 порядков) свидетельствует о принципиальной возможности построения на его основе работоспособных логических схем.

К автореферату есть следующие вопросы и замечания, сформулированные с позиции технологий микроэлектроники:

1. В работе предложены молекулярные конструкции, такие как «S-Line». В наноэлектронике ключевым параметром любого нового материала или структуры является технологическая реализуемость. Были ли рассмотрены автором возможные пути синтеза подобных сложных молекул методами, совместимыми с существующими или перспективными нанотехнологическими процессами (например, молекулярной самосборки)? Без ответа на этот вопрос переход от теоретического моделирования к созданию прототипов устройств будет затруднен.

2. При моделировании влияния среды использовалась континуальная модель PCM/SMD. Однако в реальных условиях, особенно при интеграции молекул в твердотельные наноструктуры или на границах раздела, могут возникать специфические эффекты, связанные с локальной неоднородностью среды и поверхностными состояниями. Рассматривал ли автор возможность таких эффектов и их влияния на перенос экситона в предложенных молекулярных архитектурах?
3. В наноэлектронике стабильность и долговечность компонентов являются критическими параметрами. Оценивалась ли в работе термическая стабильность предложенных модельных молекул, а также стабильность их возбужденных состояний при возможном тепловом воздействии в условиях, приближенных к эксплуатационным?

Указанные замечания носят уточняющий характер и не снижают общей высокой оценки выполненного исследования. Диссертационная работа Мартынова А. И. представляет значительный интерес для междисциплинарной области на стыке физической химии, науки о материалах и микроэлектроники. В целом работа представляет собой завершённый научный труд, отличающийся научной новизной и актуальностью темы, отвечает всем требованиям ВАК предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор Мартынов Артур Ильич заслуживает присуждения искомой ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия (физико-математические науки).

Начальник отдела АО «НИИМЭ»,
доктор технических наук, профессор
кафедры микро- и наноэлектроники
МФТИ, доцент по специальности
«Физическая химия»

Дата 27.11.2025 г.
Бокарев Валерий Павлович
Москва, Зеленоград,
ул. Академика Валиева, 6/1.

Подпись В.П. Бокарева заверяю: