

Заключение диссертационного совета МГУ.014.3  
по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук

Решение диссертационного совета от «5» декабря 2025 г. № 191  
о присуждении Мартынову Артуру Ильичу, гражданину Российской Федерации, ученой  
степени кандидата физико-математических наук

Диссертация «Моделирование неадиабатического переноса экситона между ковалентно связанными молекулярными логическими вентилями» по специальности 1.4.4. Физическая химия (физико-математические науки) принята к защите диссертационным советом 24.10.2025, протокол № 188.

Соискатель Мартынов Артур Ильич 1994 года рождения, соискатель с 01.09.2018 по 31.05.2022 г. обучался в очной аспирантуре Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский университет «Московский институт электронной техники» и в 2022 году ее окончил. С 15.05.2025 г. по 31.12.2025 г. был прикреплен к кафедре физической химии лаборатории молекулярной спектроскопии химического факультета Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова для подготовки диссертации.

Соискатель работает инженером-технологом в отделе интеграции технологических процессов Акционерного общества «Научно-исследовательский институт молекулярной электроники».

Диссертация выполнена в лаборатории молекулярной спектроскопии кафедры физической химии химического факультета Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

Научный руководитель – кандидат физико-математических наук, Белов Александр Сергеевич, доцент кафедры физической химии химического факультета Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

Официальные оппоненты:

**Будыка Михаил Федорович** - доктор химических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, лаборатория органической и супрамолекулярной фотохимии, главный научный сотрудник;

**Столяров Андрей Владиславович** - доктор физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова», химический факультет, заведующий кафедрой лазерной химии;

**Черепанов Виктор Николаевич** - доктор физико-математических наук, доцент,

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», физический факультет, заведующий кафедрой оптики и спектроскопии дали положительные отзывы на диссертацию.

Выбор официальных оппонентов обосновывался их компетентностью в области физической химии и фотохимии, а также наличием большого числа публикаций в соответствующих сферах исследования.

Соискатель имеет 5 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 4 статьи, опубликованные в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности и отрасли наук.

1. Martynov, A. I. The non-adiabatic exciton transfer in tetrathiafulvalene chains: a theoretical study of signal transmission in a molecular logic system / A. I. Martynov, A. S. Belov, V. K. Nevolin // *Physical Chemistry Chemical Physics*. – 2020. – Vol. 22. – No. 43. – P. 25243-25254. 1.5 п. л. Вклад автора 80%. EDN: HBQSTK. Импакт-фактор 2,9 (JIF).
2. Martynov, A. I. A simplified Bixon–Jortner–Plotnikov method for fast calculation of radiationless transfer rates in symmetric molecules / A. I. Martynov, A. S. Belov, V. K. Nevolin // *Molecular Physics*. – 2023. – Vol. 121. – No. 5. – P. e2189981. 1.5 п.л. Вклад автора 70%. EDN: LYUFXE. Импакт-фактор 1,6 (JIF).
3. Martynov, A. I. Using non-adiabatic excitation transfer for signal transmission between molecular logic gates / A. I. Martynov, A. S. Belov, V. K. Nevolin // *Nanoscale*. – 2024. – Vol. 16. - No 31. – P. 14879-14898. 2.0 п.л. Вклад автора 80%. EDN: SOGYZI. Импакт-фактор 5,1 (JIF).
4. Martynov, A. I. Verification of the modified Bixon-Jortner-Plotnikov model by calculating rates of non-adiabatic transitions in aromatic compounds / A. I. Martynov, A. S. Belov, V. K. Nevolin // *Molecular Physics*. – 2025. – Vol. 123. – No. 23. – P. e2470837. 1.0 п.л. Вклад автора 70%. EDN: WYUWII. Импакт-фактор 1,6 (JIF)

На диссертацию и автореферат поступило 2 дополнительных отзыва, все положительные.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований разработана модифицированная модель Биксона-Джортнера-Плотникова, предложен способ коммуникации между молекулярными логическими вентилями с помощью передачи экситонов по неадиабатическому каналу.

Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат новые

научные результаты и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку:

1. Для безызлучательного перехода между электронными состояниями, отвечающими разным неприводимым представлениям группы симметрии молекулы, вклад неадиабатического взаимодействия 2-го порядка оказывается равен нулю, и константа скорости перехода определяется лишь неадиабатическим взаимодействием первого порядка.
2. Модификация метода Биксона-Джортнера-Плотникова, использующая аппроксимацию спектральной плотности колебательных состояний функцией Пекара обеспечивает точность расчета констант скорости неадиабатических переходов в диапазоне энергий перехода от 500 до 15000 см<sup>-1</sup> с точностью до 2 порядков величины по сравнению с исходным методом при значительном сокращении временных затрат.
3. Согласно модифицированному методу Биксона-Джортнера-Плотникова константы скорости как для перемещений экситона по внутренней подсистеме молекулярных логических систем (переходы  $\pi\sigma^* \rightarrow \pi\sigma^*$ ), так и для переходов между внутренней подсистемой и оптическим интерфейсом (переходы  $\pi l^* \rightarrow \pi\sigma^*$  и  $\pi\sigma^* \rightarrow \pi l^*$ ) принимают значения на 5-10 порядков величины большие, чем суммарная константа скорости излучательной и безызлучательной релаксации экситона, что делает пренебрежимо малой вероятность того, что экситон релаксирует раньше, чем дойдет до выходного интерфейса.
4. Использование экситонов в качестве носителей сигнала позволяет сделать потери сигнала при передаче через молекулярные логические системы пренебрежимо малыми, а также практически позволяет изолировать от внешнего сигнала (фотонов) часть системы, ответственную за обработку сигнала, что делает экситонные молекулярные логические системы более эффективными по сравнению с фотонными молекулярными логическими системами.

На заседании 5 декабря 2025 г. диссертационный совет принял решение присудить Мартынову Артуру Ильичу ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 19 человек, из них 8 докторов наук по специальности 1.4.4 Физическая химия (физико-математические науки), участвовавших в заседании, из 21 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за 19, против 0, недействительных бюллетеней 0.

Председатель

диссертационного совета

Горюнков А.А.

Ученый секретарь

диссертационного совета

Шилина М.И.

5.12.2025