



ЗАТВЕРДЖУЮ

Проректор з наукової роботи
Національного університету
«Львівська політехніка»

Іван ДЕМИДОВ

" 03 2025 р.

Висновок

про наукову новизну, теоретичне та практичне значення результатів дисертації «Нові підходи до застосування амбіполярних молекул у приладах органічної наноелектроніки»

здобувача наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 105 Прикладна фізика та наноматеріали (галузь знань 10 Природничі науки)

Лілії ДЕВИ

наукового семінару кафедри електронної інженерії Навчально-наукового інституту інформаційно-комунікаційних технологій та електронної інженерії

1. Актуальність теми дисертації. Розширення функціональних можливостей електронних пристроїв на органічній основі та підвищення їхньої конкурентоспроможності порівняно з традиційними електронними технологіями є одним із ключових викликів сучасної органічної електроніки. Стрімкий розвиток цієї галузі, зокрема в таких застосуваннях, як OLED-дисплеї (включно з гнучкими), органічні фотоперетворювачі, сенсорика та пристрої фотодинамічної терапії, значною мірою зумовлений використанням нанотехнологічних підходів. Вони дозволяють керувати архітектурою органічних гетероструктур на основі інноваційних функціональних матеріалів із заданими електронними та оптичними властивостями у наномасштабі (1–100 нм). Серед перспективних класів матеріалів особливу увагу привертають органічні сполуки з внутрішньомолекулярним перенесенням заряду, що містять донорні (D) та акцепторні (A) фрагменти. Такі сполуки активно застосовуються для генерації термічно активованої затриманої флуоресценції (TADF) у сучасних OLED. Завдяки відсутності металів у складі та ефективному зворотному міжсистемному переходу ці матеріали забезпечують високі показники ефективності OLED-структур.

Проте створення ефективних випромінювачів такої природи в червоній та ближній інфрачервоній (NIR) області спектра залишається складним завданням. Основною причиною є необхідність компромісу між оптимальною ортогональністю структури складних донорно - акцепторних (D-A) сполук та контрольованим збільшенням енергетичної щільності між

синглетним і триплетним збудженими станами.

Крім того, амбіполярні органічні напівпровідники з внутрішньомолекулярним перенесенням енергії відкривають нові можливості для розробки сенсорів, чутливих до червоного та NIR-випромінювання. Такий підхід може забезпечити високу чутливість та селективність за довжиною хвилі виявлення світла, що є важливим для застосувань у біомедичних та аналітичних системах. Однак, наявні органічні напівпровідники, які використовуються у сучасних інфрачервоних детекторах (наприклад, фулерени, фталоціаніди, полімери p-/n-типу), мають певні обмеження щодо оптимального діапазону спектрального поглинання, механізмів підсилення фотонів і властивостей перенесення заряду.

Таким чином, спрямування дисертаційної роботи на розроблення нових підходів до застосування молекулярних D-A напівпровідникових сполук у приладах органічної електроніки з урахуванням нанотехнологічного налаштування їхніх параметрів, є актуальним науковим завданням, що сприятиме подальшому розвитку цієї галузі.

2. Зв'язок теми дисертації з державними програмами, науковими напрямами університету та кафедри

Дисертація відповідає науковому напряму кафедри електронної інженерії Національного університету «Львівська політехніка», а саме: «Розроблення нових підходів до побудови засобів електронної техніки, методів моделювання та дослідження інноваційних технологій в електроніці, оптоелектроніці та сенсоріці». Дисертаційне дослідження виконано в межах наступних держбюджетних науково-дослідних робіт і міжнародних грантів:

- Проєкт міжнародного обміну Горизонт Європа HELIOS «Стратегія досліджень та інновацій Національного університету «Львівська політехніка» з біловипромінювальних органічних систем освітлення» (ЄС, грантова угода № 101155017 – HELIOS – HORIZON-WIDERA-2023-ACCESS-02-02, тривалість проєкту 2024 – 2027 рр.).

- «Низькорозмірні структури для підсилення квантового виходу люмінесценції у високоефективних фосфоресцентних світловипромінюючих пристроях» (НФДУ, номер державної реєстрації 0124U003833, термін виконання 2024 – 2026 рр.);

- «Теоретичні та експериментальні основи хімічного синтезу модифікованих плівкових напівпровідників типу A^2B^6 для альтернативної енергетики» (МОН України, номер державної реєстрації 0124U000522, термін виконання 2024-2026 рр.);

- «Ефективні нанокристалічні матеріали на основі халькогенідів металів для оптико-електронних систем» (МОН України, номер державної реєстрації 0124U000760, термін виконання 2024–2026 рр.);

- Українсько-литовський міжнародний науково-дослідний проєкт: «Розроблення високоефективних світловипромінювальних наноструктур на квантових ямах для органічних електролюмінесцентних пристроїв, що випромінюють в червоній та інфрачервоній областях спектру» (МОН України, номер державної реєстрації 0124U002941, термін виконання 2024-

2025 рр.);

- «Органічний пристрій з внутрішнім підсиленням фотоструму для реєстрації сигналів низької інтенсивності в ближній інфрачервоній області спектра» (МОН України, номер державної реєстрації 0123U101690, термін виконання 2023-2025 рр.);

- Проект міжнародного обміну Горизонт 2020 MEGA «Випромінювачі, які не містять важких металів для джерел освітлення нового покоління» (ЄС, грантова угода № 823720 – MEGA- H2020-MSCA-RISE-2018, тривалість проекту 2019 – 2023 рр.).

3. Особистий внесок здобувача в отриманні наукових результатів

Особистий внесок здобувача полягає в проведенні аналізу науково-технічної літератури за темою дисертаційного дослідження, активній участі у формулюванні наукових завдань, визначенні та обґрунтуванні мети дослідження, а також у виконанні експериментальної частини роботи. Автор особисто провела спектроскопічні дослідження, аналіз термічних, електрохімічних та фотофізичних властивостей новосинтезованих амбіполярних органічних матеріалів, а також брала участь у розробленні архітектури органічних світловипромінювальних пристроїв. Крім того, здобувач оптимізувала структуру органічного фотоприймача для реєстрації сигналів низької інтенсивності у ближній інфрачервоній області спектра, що стало підставою для отримання патенту на корисну модель. Автор активно співпрацювала з науковими колегами та з науковим керівником д.т.н., проф. Стахірою П.Й. на різних етапах дослідження, опрацьовувала отримані результати, формулювала теоретичні висновки, а також брала безпосередню участь у написанні наукових статей і підготовці доповідей для конференцій.

4. Достовірність та обґрунтованість отриманих результатів та запропонованих автором рішень, висновків, рекомендацій

Достовірність та обґрунтованість отриманих результатів підтверджується використанням сучасного спеціалізованого обладнання та програмного забезпечення, що забезпечує високу точність вимірювань. Чисельні розрахунки виконані на основі апробованих математичних методів, що базуються на фундаментальних законах фізики та математики. Отримані експериментальні результати узгоджуються з теоретичними розрахунками, а також з літературними даними та результатами інших авторів за цією тематикою.

5. Ступінь новизни основних результатів дисертації порівняно з відомими дослідженнями аналогічного характеру

Наукова новизна дисертаційної роботи полягає у вирішенні науково-практичного завдання з нанотехнологічного налаштування архітектури пристроїв органічної електроніки на основі амбіполярних напівпровідникових сполук. У межах цього дослідження вперше встановлено, що:

- молекулярна суміш AnCzPO:TCTA характеризується аномальною фотопровідністю в NIR-діапазоні, зумовленою активізацією пасток на

триплетних комплексах перенесення заряду при освітленні ІЧ-випромінюванням;

- емітер на основі новосинтезованої похідної QBr2 характеризується флуорисцентним механізмом випромінювання в наносекундному діапазоні (0,64 нс);

- в тонких плівках сполук на основі феноксазину і акридину (QPhox2 і QAc2) виявлено явище термічно активованої затриманої флуоресценції зеленого кольору свічення (SSE-TADF);

- характерною особливістю плівки сполуки QAc2 є поєднання двох механізмів, зокрема TADF-випромінювання з фосфоресценцією при кімнатній температурі (RTP) із часом згасання фотолюмінесценції (PL), що наближається до 7 мс;

- похідні, які містять фрагменти акридину та феноксазину, виявили біполярний транспорт заряду (рухливість дірок і електронів для сполук QAc2 та QPhox2 становлять $2,7 \times 10^{-5}$; $3,5 \times 10^{-6}$ см²V⁻¹c⁻¹, і $3,2 \times 10^{-4}$; $1,5 \times 10^{-4}$ см²V⁻¹c⁻¹ відповідно);

- новосинтезовані сполуки QBr2, QAc2, QPhox2 характеризуються високою термічною стабільністю і 5 %-ою втратою ваги при температурах 330 °C, 432°C і 460°C відповідно. Потенціали іонізації твердих плівок матеріалів QAc2 і QPhox2 рівні 5,66 еВ та 5,52 еВ, а значення електронної спорідненості - 2,9 еВ та 2,83 еВ відповідно.

6. Перелік наукових праць, які відображають основні результати дисертації

Основні результати дисертації опубліковано в 13 наукових працях, з них 5 статей у наукових періодичних виданнях інших держав та виданнях України, що включені до міжнародних наукометричних баз даних (Scopus та Web of Science), 7 тез доповідей та матеріалів міжнародних і всеукраїнських науково-практичних конференцій, 1 патент України на корисну модель.

Статті у наукових періодичних виданнях інших держав та виданнях України, що включені до міжнародних наукометричних баз даних (Scopus та Web of Science):

1. Deva, L., Stanitska, M., Skhirtladze, L., Ali, A., Baryshnikov, G., Volyniuk, D., Kutsiy, S., Obushak, M., Cekaviciute, M., Stakhira, P., & Grazulevicius, J. V. (2024). Efficient Microwave Irradiation-Assisted Synthesis of Benzodioxinoquinoxaline and Its Donor-Variiegated Derivatives Enabling Long-Lived Emission and Efficient Bipolar Charge Carrier Transport. *ACS Materials Au*, 4(6), 628-642. <https://doi.org/10.1021/acsmaterialsau.4c00050>. (Особистий внесок здобувача: комплексне дослідження властивостей новосинтезованих амбіполярних похідних бензодіоксінноксалину (QBr2, QAc2, QPhox2) та виготовлення світловипромінюючих структур на їх основі).

2. Deva, L. (2024). The Quantum Efficiency Roll-off-free Red Organic Light-emitting Diode via Quantum Well Structure. *Journal of Nano- and Electronic Physics*, 16(6), 06012. [https://doi.org/10.21272/jnep.16\(6\).06012](https://doi.org/10.21272/jnep.16(6).06012).

3. Deva, L., Stakhira, P., Fitio, V., Debata, S., Dev, P., Karaush-Karmazin, N., Kuzyk, N., Yaremchuk, I., & Volyniuk, D. (2025). Organic Light-Emitting Devices with Quantum Well Structures Using Carbazole Derivative 4CzTPN-Ph as an Emitting Material. *Ukrainian Journal of Physical Optics*, 26(1), 01009–01022. <https://doi.org/10.3116/16091833/Ukr.J.Phys.Opt.2025.01009>.

(Особистий внесок здобувача: формування та дослідження електролюмінесцентних властивостей органічних 2D-гетероструктур зі на основі емітера 4CzTPN-Ph).

4. Stanitska, M., Deva, L., Minaev, B., Minaeva, V., Panchenko, O., Ågren, H., Volyniuk, D., Keruckiene, R., Khomyak, S., Maksymych, V., Stakhira, P., & Grazulevicius, J. V. (2025). Hetero-Donors-Adorned Anthraquinones with Near Infra-Red Absorption for Solution-Processable Photodetectors. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 332, 125805. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2025.125805>.

(Особистий внесок здобувача: дослідження оптичних властивостей новосинтезованих похідних антрахінону (AnCzDCz, AnCzAc, AnCzPO), виготовлення та дослідження фотопровідності органічного фотоприймача для реєстрації сигналів низької інтенсивності у ближній інфрачервоній області спектра).

5. Deva, L., Stakhira, P., Fitio, V., Guminilovych, R., Stanitska, M., & Volyniuk, D. (2025). Exploring Quantum Wells in OLED Technologies: A Comprehensive Review of Applications and Advancements. *Ukrainian Journal of Physical Optics*, 26(2), 02001 - 02047. <https://doi.org/10.3116/16091833/Ukr.J.Phys.Opt.2025.02001>.

(Особистий внесок здобувача: літературний огляд сучасного стану, фізичних механізмів і відомих підходів до розробки органічних світлоемісійних (OLED) та фоточутливих структур на основі амбіполярних органічних напівпровідників).

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

1. Deva, L., Yaremchuk, I., Bulavinets, T., Barylo, H., Stakhira, P., Skhirtladze, L., Bezvikonnyi, O., Volyniuk, D., & Grazulevicius, J. V. (2023). Yellow-Green High-Efficiency TADF OLED with Phenoxazine and Quinoxaline as Emitter. *Eleventh International Conference on Radiation, Natural Sciences, Medicine, Engineering, Technology and Ecology (RAD 2023 Conference): Book of abstracts* (pp. 58). Herceg Novi, Montenegro, June 19-23, 2023. <https://doi.org/10.21175/rad.abstr.book.2023.14.3>.

2. Deva, L., Kutsiy, S., Yaremchuk, I., Bulavinets, T., Stakhira, P., Skhirtladze, L., Bezvikonnyi, O., Volyniuk, D., & Grazulevicius, J. V. (2023). Derivative of Phenoxazine and Quinoxaline as Green TADF Emitter for OLEDs. *Advanced Materials and Technologies: Book of Abstracts of 25th International Conference-School* (pp. 140). Palanga, Lithuania, August 21–25, 2023. <https://doi.org/10.5755/e01.2669-1930.2023>.

3. Deva, L. (2024). Near-Infrared Organic Photodetectors for Registration of Low-Intensity Signals. *Молода наука Волині: пріоритети та перспективи*

досліджень: *Матеріали XVIII Міжнародної науково-практичної конференції студентів, аспірантів та молодих учених* (С. 903-905). Луцьк, Україна, 14-15 травня 2024 р. <https://ra.vnu.edu.ua/naukove-tovarystvo/moloda-nauka-volyni/>.

4. Deva, L., Huminilovych, R., Sozanskyi, M., & Stadnik, V. (2024). Polymer Substrates for II Group Chalcogenide Quantum Wells: Perspectives for Wide Applications from Solar Cells, Optoelectronic Devices to Special-Purpose Clothing. *Поступ в нафтогазопереробній та нафтохімічній промисловості (APGIP-12): Матеріали XII Міжнародної науково-технічної конференції* (С. 210-213). Львів, Україна, 20-24 травня 2024 р. <https://apgip.lviv.ua/wp-content/uploads/2024/07/apgip-12-abstracts.pdf>.

5. Deva, L. & Huminilovych, R. (2024). A^{IV}B^{VI} Group Quantum Wells: Investigation of Dimensional Effects and Applications in High-Performance Semiconductor Devices and Optoelectronics. *Наукові горизонти XXI століття: мультидисциплінарні дослідження: Матеріали Міжнародної наукової конференції* (С. 1239-1243). Ужгород, Україна, 16-17 травня 2024 р.

6. Volyniuk, D., Stanitska, M., Deva, L., Ghasemi, M., Stakhira, P., & Grazulevicius, J. V. (2024). Enhancement of Efficiency of Red Organic Light-emitting Diodes Based on a New Derivative of Phenazine and Diphenylamine by a Quantum Well Approach. *Advanced Materials and Technologies: Book of Abstracts of 26th International Conference-School* (p. 61). Palanga, Lithuania, August 26-30, 2024. <https://doi.org/10.5755/e01.2669-1930.2024>.

7. Stanitska, M., Deva, L., Skhirtladze, L., Baryshnikov, G., Volyniuk, D., Stakhira, P., & Grazulevicius, J. V. (2024). Tuning the Origin of Delayed Emission in Donor-Ornamented Benzodioxinoquinoxalines: Theoretical and Experimental Study. *Baltic Polymer Symposium 2024 (BPS 2024): Book of Abstracts of 22nd International Scientific Conference* (p. 69). Birštonas, Lithuania, September 17-19, 2024. <https://doi.org/10.5755/e01.3030-1378.2024>.

Наукові праці, які додатково відображають наукові результати дисертації:

1. Стахіра, П. Й., Дева, Л. Р., Станіцька, М. О., Мінаєв, Б. П., & Мінаєва, В. О. (2025). Спосіб виготовлення органічного фотоприймача для реєстрації сигналів низької інтенсивності в ближній інфрачервоній області спектра. *Патент України на корисну модель UA № 158114*. Опубліковано 01.01.2025 р., Бюл. № 1. Заявка № u202402041 зареєстрована 18.04.2024 р. в СІС УКРНОІВІ. <https://sis.nipo.gov.ua/uk/search/detail/1835493/>.

7. Апробація основних результатів дослідження на конференціях, симпозиумах, семінарах тощо

Основні результати роботи доповідалися та обговорювалися на міжнародних і всеукраїнських науково-практичних конференціях, семінарах, наукових школах в Україні та за кордоном:

- 11th International Conference on Radiation, Natural Sciences, Medicine, Engineering, Technology and Ecology (RAD 2023 Conference), Herceg Novi, Montenegro, June 19-23, 2023.

- 25th International Conference-School «Advanced Materials and Technologies», Palanga, Lithuania, August 21–25, 2023.

- XVIII Міжнародна науково-практична конференція студентів, аспірантів та молодих учених «Молода наука Волині: пріоритети та перспективи досліджень», Луцьк, Україна, 14–15 травня 2024 р.

- Міжнародна наукова конференція «Наукові горизонти XXI століття: мультидисциплінарні дослідження», Ужгород, Україна, 16–17 травня 2024 р.

- XII Міжнародна науково-технічна конференція «Поступ в нафтогазопереробній та нафтохімічній промисловості (APGIP-12)», Львів, Україна, 20–24 травня 2024 р.

- 26th International Conference-School «Advanced Materials and Technologies», Palanga, Lithuania, August 26–30, 2024.

- 22nd International Scientific Conference «Baltic Polymer Symposium 2024 (BPS 2024)», Birštonas, Lithuania, September 17–19, 2024.

8. Наукове значення виконаного дослідження із зазначенням можливих наукових галузей та розділів програм навчальних курсів, де можуть бути застосовані отримані результати

Наукові та практичні результати роботи впроваджено у навчальний процес для підготовки студентів другого освітнього рівня «Магістр» спеціальності 105 *Прикладна фізика та наноматеріали*, а саме вдосконалено лекційні курси навчальних дисциплін 7.105.01.O.001 «Наноматеріалознавство» і 7.105.01.E.017 «Фізика і технологія наносистем».

9. Практична цінність результатів дослідження із зазначенням конкретного підприємства або галузі народного господарства, де вони можуть бути застосовані

Практичне значення отриманих результатів полягає у розробленні нових підходів та вдосконаленні технології виготовлення приладів органічної наноелектроніки, зокрема OLED-дисплеїв, світлових панелей, оптичних сенсорів та інфрачервоних детекторів. Зокрема:

- розроблено високоефективний органічний світлодіод зеленого кольору свічення на основі нового амбіполярного матеріалу із TADF-механізмом випромінювання. Електролюмінесцентний прилад зі світловипромінювальним шаром на основі похідної бензодіоксинохіноксаліну, що містить фрагменти феноксазину (QPhox2), продемонстрував максимальні значення яскравості понад 28000 кд/м² при 10 мА/см² і зовнішньої квантової ефективності 12,3 %. Колірні координати (x, y) цього пристрою становлять (0,37; 0,53), що відповідає стандарту Міжнародної комісії з освітлення CIE (Commission Internationale de l'Éclairage);

- в роботі вирішена проблема зсуву спектра червоного випромінювання в короткохвильову область, що притаманна OLED-структурам FR/NIR область випромінювання, шляхом впровадження нанотехнологічного підходу в архітектуру пристрою квантових ям. В результаті розроблені MQW-OLED-структури характеризувалися вузьким спектром електролюмінесценції з випромінюванням (FWHM = 70 нм) спектрально чистого червоного кольору

(0.54, 0.35) і (0.58, 0.33) і стабільністю роботи;

- емпіричним шляхом встановлено оптимальні технологічні товщини функціональних шарів для формування квантових ям (5 нм) з метою забезпечення ефективної локалізації екситонів в органічних емітерах;

- запропоновано новий концептуальний підхід детектування сигналів низької інтенсивності в ближній інфрачервоній області спектра (750–950 нм), зокрема розроблено і виготовлено органічний фотоприймач на основі молекулярної суміші похідної антрахінону з феноксазиновим замісником (AnCzPO) та ТСТА зі структурою ІТО/AnCzPO : ТСТА (55 nm)/Ca (50 nm)/Al (200 nm). Крім того, оптимізовано склад активного шару, зокрема емпірично визначено оптимальне масове співвідношення компонентів 20 % : 80 %. Характерною особливістю функціонування виготовленої структури є зменшення провідності на три порядки внаслідок дії слабого інфрачервоного випромінювання ($\lambda > 750$ нм).

10. Оцінка структури дисертації, її мови та стилю викладення

Дисертація складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел (265 найменувань) та двох додатків. Основна частина роботи викладена на 161 сторінці. Загальний обсяг дисертації становить 216 сторінок та містить 64 рисунки, 24 таблиці. Дисертація за структурою, мовою та стилем викладення відповідає вимогам МОН України.

У ході обговорення дисертації до неї не було висунуто жодних зауважень щодо самої суті роботи.

11. З урахуванням зазначеного, на науковому семінарі кафедри електронної інженерії ухвалили:

11.1. Дисертація Деви Лілії Ростиславівни «Нові підходи до застосування амбіполярних молекул у приладах органічної наноелектроніки» є завершеною науковою працею, у якій розв'язано конкретне наукове завдання із розроблення нових підходів до застосування молекулярних донорно-акцепторних напівпровідникових сполук у приладах органічної електроніки з нанотехнологічним налаштуванням, що має важливе значення для галузі знань 10 *Природничі науки*.

11.2. Основні наукові положення, методичні розробки, висновки та практичні рекомендації, викладені у дисертаційній роботі, логічні, послідовні, аргументовані, достовірні, достатньо обґрунтовані. Дисертація характеризується єдністю змісту.

11.3. У 13 наукових публікаціях повністю відображені основні результати дисертації, з них 2 статті у наукових періодичних виданнях інших держав, які включені до міжнародних наукометричних баз даних (Scopus та Web of Science), 3 статті у виданнях України, що включені до міжнародних наукометричних баз даних (Scopus та Web of Science), 7 тез доповідей та матеріалів міжнародних і всеукраїнських науково-практичних конференцій, 1 патент України на корисну модель.

11.4. Дисертація відповідає вимогам наказу МОН України № 40 від 12.01.2017р. «Про затвердження вимог до оформлення дисертації», Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії (Постанова Кабінету Міністрів України від 12 січня 2022 р. № 44, зі змінами).

11.5. Дисертація є результатом самостійних досліджень, не містить елементів фальсифікації, компіляції, плагіату та запозичень, що констатує відсутність порушення академічної доброчесності. Використання текстів інших авторів мають належні посилання на відповідні джерела.

11.6. З урахуванням наукової зрілості та професійних якостей Деви Л.Р. дисертація «Нові підходи до застосування амбіполярних молекул у приладах органічної наноелектроніки» рекомендується для подання до розгляду та захисту у спеціалізованій вченій раді.

За затвердження висновку проголосували:

за	-	23 (двадцять три)
проти	-	(немає)
утримались	-	(немає)

Головуючий на науковому
семінарі кафедри електронної
інженерії,
зав. кафедри ЕЛІ,
д.т.н., професор

Ірина ЯРЕМЧУК

Рецензенти:

д.ф.-м.н., професор, професор
кафедри НІПЕ

Орест МАЛИК

д.х.н., професор, професор
кафедри НІПЕ

Леонід ВАСИЛЕЧКО

Відповідальний за атестацію PhD
спеціальності 105 Прикладна
фізика та наноматеріали
к.т.н., доц.

Дарія МАТУЛКА

"06" березня 2025 р.