

Утверждаю

Директор Федерального
государственного бюджетного
учреждения науки
Новосибирского института
органической химии
им. Н.Н. Ворожцова
Сибирского отделения
Российской академии наук
д.ф.-м.н., профессор
Е.Г. Багрянская
«21» марта 2023 г.



ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного учреждения науки Новосибирского института органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук (НИОХ СО РАН).

Диссертация **Куимова Анатолия Дмитриевича** «Молекулярное легирование как эффективный метод контроля оптоэлектронных свойств органических светоизлучающих полупроводников» выполнена в Лаборатории органической электроники (ЛОЭ) НИОХ СО РАН.

В период подготовки диссертации соискатель Куимов А.Д. работал в должности младшего научного сотрудника.

В 2017 г. соискатель окончил бакалавриат факультета естественных наук Новосибирского государственного университета по специальности «химия» и получил квалификацию «бакалавр». В 2019 г. соискатель окончил магистратуру факультета естественных наук Новосибирского государственного университета по специальности «химия» и получил квалификацию «магистр». С 2019 г. по настоящее время обучается в очной аспирантуре НИОХ СО РАН (приказ о зачислении №76 от 9.08.2019 г.). Справка о сдаче кандидатских экзаменов выдана в 2023 г. ФГБУН НИОХ СО РАН.

Тема диссертации утверждена на заседании Ученого совета НИОХ СО РАН (протокол № 7 от 17 сентября 2019).

Научный руководитель – к.х.н. Казанцев Максим Сергеевич, занимает должность зав. лаб., с.н.с. ЛОЭ НИОХ СО РАН.

Диссертационная работа рассмотрена на заседании объединенного научного семинара НИОХ СО РАН 27 февраля 2023 года, протокол № 4.

Отзыв рецензента к.х.н. зав. лаборатории фоторезистивных материалов Васильева Евгения Владимировича на диссертационную работу – положительный.

По итогам обсуждения принято следующее заключение:

Диссертация Куимова Анатолия Дмитриевича «Молекулярное легирование как эффективный метод контроля оптоэлектронных свойств органических светоизлучающих

полупроводников» является самостоятельно выполненной законченной научно-квалификационной работой.

Актуальность темы исследования связана с разработкой новых материалов, а также быстрым развитием и внедрением новейших оптоэлектронных устройств, в основе которых лежат органические π -сопряженные молекулы. Например, в настоящее время, органические светоизлучающие диоды постепенно занимают все большую долю рынка технологий и находят применения в передовых образцах потребительской техники и носимой электроники, таких как: смартфоны, широкоформатные экраны, умные часы и т. д. С другой стороны, помимо светодиодов органические материалы могут применяться в полевых и светоизлучающих транзисторах, лазерах с оптической или электрической накачкой, фотовольтаических ячейках. Органические материалы могут быть дешевыми в производстве, легкими, гибкими, ударопрочными, полупрозрачными и биосовместимыми.

Несмотря на непрекращающиеся исследования, в основе дизайна полупроводниковых материалов все еще лежит эмпирический подход. Это связано со сложной настройкой свойств органических сопряженных материалов, которые определяются не только химической структурой, но и межмолекулярными факторами, такими, как кристаллическая упаковка, тип агрегации, наличие дефектов, допирование. Более того, вариативность и разнообразие методик органического синтеза также накладывает свой отпечаток, поскольку каждый новый синтетический подход требует большого количества исследований взаимосвязи структуры со свойствами. Зачастую, введение различных заместителей или другие незначительные (с химической точки зрения) модификации могут практически полностью менять физические свойства материала.

Таким образом, контроль оптических и полупроводниковых свойств органических сопряженных материалов, а также поиск наиболее интересных представителей для дальнейшей модификации, является актуальной задачей для химии материалов и органической оптоэлектроники в частности

Цель диссертационной работы: исследование оптических свойств π -сопряженных органических полупроводниковых материалов и развитие подходов для их допирования.

Научная новизна и теоретическая значимость.

В результате изучения оптических свойств органических сопряженных светоизлучающих материалов был впервые показан и изучен эффект молекулярного самодопирования в концентрации до 0.2% в кристаллах фуран-фениленового соолигомера. Был разработан синтетический подход контролирования самодопирования и оптоэлектронных свойств арилен-виниленовых соолигомеров. Впервые были установлены параметры структурной совместимости соединений для реализации внешнего допирования органических светоизлучающих кристаллов.

Практическая значимость работы

Проведенные практические исследования сопряженных полупроводников имеют высокую значимость, как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения. Установленные зависимости между структурой и свойствами исследованных сопряженных материалов могут быть использованы в дальнейшем для целенаправленного дизайна

светоизлучающих и/или полупроводниковых материалов для органической оптоэлектроники.

Методология и методы исследования.

В представленной диссертационной работе в качестве основного метода исследования использовались методы кристаллизации из раствора и паровой фазы, методы оптической спектроскопии, в том числе в растворе и твердом теле, а также физико-химические методы характеристики соединений, такие, как рентгеноструктурный, рентгенофазовый и термический анализ.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Наличие эффекта молекулярного самодопирования в кристаллах 1,4-бис(5-фенилфуран-2-ил)бензола.
2. Синтетический подход для самодопирования и контроля оптических свойств на примере 1,2-бис(5-(4-октилфенил)тиофен-2-ил)этена.
3. Влияние конформации, гетероатома, длины цепи сопряжения, длинной и короткой осей молекулы, заместителей на возможность внешнего допирования органических сопряженных малых молекул.

Степень достоверности и апробация работы

Достоверность результатов исследований, представленных в научно-квалификационной работе Куимова А.Д. обусловлена тщательным подходом к исследованиям с использованием современного оборудования и согласованностью с литературными данными; новизна, значимость и признание научным сообществом результатов подтверждается наличием стендовых и устных докладов на международных и всероссийских конференциях и наличием публикаций в высокорейтинговых рецензируемых журналах первого квартиля, индексируемых в Scopus.

Полученные в работе результаты могут быть использованы в научно-исследовательской практике НИОХ СО РАН, а также в лабораториях следующих научных организаций: Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН (ИСПМ РАН), Институт химической кинетики и горения СО РАН им. В.В. Воеводского (ИХКГ СО РАН), Институт неорганической химии им. А. В. Николаева (ИНХ СО РАН), Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова (МГУ), Санкт-Петербургский государственный университет (СПбГУ).

Полнота опубликования результатов

По теме диссертации опубликованы 3 статьи в зарубежных рецензируемых журналах, входящих в базы научного цитирования Web of Science и Scopus, результаты работ широко представлены на международных и отечественных профильных конференциях.

Список публикаций автора по теме диссертации

1. **Kuimov A. D.**, Becker C. S., Sonina A. A., Kazantsev M. S. Host–guest molecular doping guide for emissive organic semiconductor crystals // *New. J. Chem.* – 2022. – Т. 46, №44. – С. 21257-21267.
2. **Kuimov A. D.**, Becker C. S., Shumilov N. A., Koskin I. P., Sonina A. A., Komarov V. Y., Shundrina I. K., Kazantsev M. S. Synthetic approach for the control of self-doping in luminescent organic semiconductors // *Mater. Chem. Front.* – 2022. – Т. 6, No 16. – С. 2244-2255.
3. Mannanov A. A., Kazantsev M. S., **Kuimov A. D.**, Konstantinov V. G., Dominskiy D. I., Trukhanov V. A., Anisimov D. S., Gultikov N. V., Bruevich V. V., Koskin I. P., Sonina A. A., Rybalova T. V., Shundrina I. K., Mostovich E. A., Paraschuk D. Y., Pshenichnikov M. S. Long-range exciton transport in brightly fluorescent furan/phenylene co-oligomer crystals // *J. Mater. Chem. C.* – 2019. – Т. 7, No 1. – С. 60-68.

Список тезисов докладов автора по теме диссертации

1. **A.D. Kuimov**, A.A. Sonina, T.V. Rybalova, I.K. Shundrina, E.A. Mostovich, M.S. Kazantsev., Doping of furan/phenylene co-oligomer single crystals as an efficient way to control their optoelectronic performance. International conference ORGEL-2019, Novosibirsk, September 23-29, 2019, P. 70 – стендовый доклад
2. **A. D. Kuimov**, I. P. Koskin, C. S. Becker, A. A. Sonina, M.S. Kazantsev. Optical Properties of Selectively Fluorinated Furan-Phenylene Co-Oligomers. «Современные проблемы органической химии» СПОХ-2021, Новосибирск, 9-11 июня, 2021, с. 84. – стендовый доклад
3. **A. D. Kuimov**, I. P. Koskin, C. S. Becker, A. A. Sonina, M.S. Kazantsev. Optical Properties of Selectively Fluorinated Furan-Phenylene Co-Oligomers, «7th International Fall School on Organic Electronics» IFSOE-2021, Moscow, September 13 – 16, 2021, P. 67 – стендовый доклад
4. **А. Д. Куимов**, К. С. Беккер, Н. А. Шумилов, И. П. Коскин, А. А. Сони́на, И. К. Шундрина, М. С. Казанцев. Оптические свойства С8-ВРТЕ: эффект молекулярного самолегирования, «Современные проблемы органической химии» СПОХ-2022, Новосибирск, 12-14 сентября, с. 84 – стендовый доклад

Личный вклад автора

Автор диссертации принимал активное участие в постановке целей и задач научной работы, в подборе экспериментальных методов исследования и их разработки, в обсуждении результатов и в подготовке научных публикаций по теме работы. Исследуемые соединения были синтезированы сотрудниками лаборатории органической электроники НИОХ СО РАН – Мельниковой-Беккер К.С., Киселевой Ю.О., Францевой Е.С., Мостовичем Е.А. Полупроводниковые свойства были изучены Казанцевым М.С., Шумиловым Н.А. Данные рентгеноструктурного и рентгенофазового анализа были

получены Сониной А.А., данные термического анализа были получены Шундриной И.К. Все представленные данные оптической спектроскопии были получены и проанализированы лично автором диссертационной работы. Диссертация выполнена как часть плановых научно-исследовательских работ, проводимых в НИОХ СО РАН в рамках государственного задания «Фундаментальные основы создания органических материалов для оптоэлектроники» (2019-2021, 2022-2024 гг.) и при финансовой поддержке гранта РФ «Со-кристаллизация как эффективный инструмент контроля оптоэлектронных свойств органических светоизлучающих полупроводников» 20-73-10090 (руководитель к.х.н. М.С. Казанцев).

Соответствие формуле специальности

Диссертация соответствует пункту 12 «Физико-химические основы процессов химической технологии и синтеза новых материалов» паспорта специальности 1.4.4. Физическая химия.

Диссертация «Молекулярное легирование как эффективный метод контроля оптоэлектронных свойств органических светоизлучающих полупроводников» Куимова Анатолия Дмитриевича рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия.

Заключение принято на заседании объединенного научного семинара Федерального государственного бюджетного учреждения науки Новосибирского института органической химии им. Н. Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук 27 февраля 2023 года. Присутствовало на заседании **28** чел.

Результаты голосования:

«за» – **28** чел., «против» – **0** чел., «воздержалось» – **0** чел.,
протокол № 4 от 27 февраля 2023 г.

Председатель объединенного научного семинара, к.х.н. _____ Е.В. Суслов

Ученый секретарь НИОХ СО РАН к.х.н. _____ Р.А. Бредихин