Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0219U100435

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 12-02-2019

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Моделювання особливостей фазових діаграм та фізичних властивостей оксидних мультифероїків з ротосиметрією, електронної структури реальних поверхонь в кристалах типу сфалериту і вюрциту та оксидних усоблених нанокластерів, імплантованих магнітними домішками

Початок етапу: 01.2016

Закінчення етапу: 12.2018

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи: Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05416930

Місцезнаходження: вул. Кржижановського, 3, м. Київ, Київська обл., 03142, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 0444240102

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи: Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська,54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442346674, 380442262347, 380442396594, 380442343243

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір з МОН, іншими центральними органами виконавчої влади

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 2079.46

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Моделювання особливостей фазових діаграм та фізичних властивостей оксидних мультифероїків з ротосиметрією, електронної структури реальних поверхонь в кристалах типу сфалериту і вюрциту та оксидних усоблених нанокластерів, імплантованих магнітними домішками

Назва роботи англійською:

Modeling of peculiarities of phase diagrams and physical properties of oxide multiferroics with rothosymmetry, electronic structure of real surfaces in sphalerite-type and wurtzite-type crystals, as well as of oxide isolated nanoclusters implanted by magnetic impurities

Реферат українською:

Вперше отримано суттєвий зв'язок між структурними деформаціями, поляризацією та намагніченістю для наносистеми мультифероїка EuxSr1-xTiO3 та розраховано неочікувано значне зростання температури антиферомагнітного фазового переходу у кераміці мультифероїка BiFeO3, наведене розмірами зерен та внеском ротомагнітного та магнітострикційного зв'язків. Для розбавлених магнітних напівпровідників показана можливість феримагнітного упорядкування за малої концентрації магнітних домішок. Проведено ab initio розрахунки електронної структури 4-х варіантів полярної поверхні CdTe (111) A (2x2). Визначені оптимальні міжатомні сили і рівноважні координати атомів Cd і Te верхніх чотирьох шарів. Проведено теоретичне дослідження структурних, електронних і когезійних властивостей ізольованих фулереноподібних кластерів на основі прямозонних напівпровідників. Вперше побудована модель двошарових фулереноподібних кластерів (ZnSe)60 і (CdSe)60 зі змішаним sp2/sp3 типом зв'язків

Реферат англійською:

For the first time we ontained essential coupling between structural deformation, polarization and magnetization for multiferroic nanosystems EuxSr1-xTiO3, as well as calculated unexpected substantial increasing of temperature of antiferromagnetic phase transition in multiferroic ceramics BiFeO3, induced by grain sizes and contribution of rotomagnetic and magnetostriction couplings. The possibility of ferrimagnetic ordering for diluted magnetic semiconductors at small concentration of magnetic impurities is shown. Ab imitio calculations of electronic structure of four variants of CdTe (111) A (2x2) polar surface are carried out. Optimal interatomic forces and equilibrium coordinates for Cd and Te atoms of four upper layers are determined. The theoretical investigation of structural, electronic and cohesive properties of isolated fullerene-like clusters on the base of direct-gap semiconductors was carried out. For the first time the model of two-layer fullerene-like clusters (ZnSe)60 and (CdSe)60 with mixed sp2/sp3 type of couplings is constructed.

Індекс УДК: 539.216;539.22;538.91-405;548;620.18, 539.216; 621.762; 669.01

Коди тематичних рубрик: 29.19.04

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Глинчук Майя Давидівна

Науковий ступінь: д. ф.-м. н.

Наукове звання: член-кор.

Ідентифікатор ORCHID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

Назва НТП українською: Модель поведінки температури антиферомагнітного фазового переходу у мультифероїках, обумовленої розмірними ефектами, ротомагнітним та магнітострикційним зв'язками. Модель надструктур Ліба-Маттіса в магнітних напівпровідниках. Теорія фотоелектронної спектроскопії з кутовим розділенням для матеріалів з сильною кореляцією. Модель двошарових фулереноподібних кластерів (ZnSe)60 і (CdSe)60 зі змішаним sp2/sp3 типом зв'язків.

Назва НТП англійською: The model of behaviour of antiferromagnetic phase transition temperature in multiferroics, caused by size effects, rotomagnetic and magnitostriction couplings. The model of Lieb-Mattis superstructures in magnetic semiconductors. The theory of photoelectronic spectroscopy with angular separation for materials with strong correlation. The model of two-layer fullerene-like clusters (ZnSe)60 and (CdSe)60 with mixed sp2/sp3 type of couplings

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: М 72.19 Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Вперше теоретично прогнозовано та експериментально доведено зростання температури антиферомагнітного фазового переходу до 690 К у кераміці BiFeO3 порівняно з 645 К у монокристалі. Для розбавлених магнітних напівпровідників показана можливість феримагнітного упорядкування за будь-якої малої концентрації магнітних домішок. Розвинуто одноетапну теорію фотоелектронної спектроскопії з кутовим розділенням, що формулюється у базисі локалізованих орбіталей. Проведена оцінка стабільності і ширини енергетичної щілини фулереноподібних кластерів в залежності від кількости атомів в кластері і його геометрії. Результати роботи можуть бути використані для цілеспрямованого синтезу нових перспективних матеріалів. Більшість теоретичних досліджень виконана вперше і знайшла визнання світової наукової спільноти. Всі теоретичні дослідження виконані на високому науковому рівні. Робота носить теоретичний характер. Економічні переваги не розраховувалися Робота стосується фундаментальних досліджень і її результати впливу на зовнішнє середовище не мають.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Робота носить теоретичний характер

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

- **Початок етапу:** 01.2016
- **Закінчення етапу:** 12.2018

Споживачі продукції: Науково-дослідні інститути

Перспективні ринки: Україна, СНД

Характер співробітництва з інвестором

- **Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:**
- **Права, що надаються інвестору після завершення роботи:** Права не надаються

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обгрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

A. N. Morozovska, E. A. Eliseev, M. D. Glinchuk et al., Flexocouling impact on size effects of piezoresponse and conductance in mixed-type ferroelectric semiconductors under applied pressure, Phys. Rev. B 94, 174101(9) (2016)

R. O. Kuzian, J. Richter, M. D. Kuz'min, R. Hayn, Lieb-Mattis ferrimagnetism in magnetic semiconductors, Phys. Rev. B, 93, 214433 (2016)

A. N. Morozovska, V. V. Khist, M. D. Glinchuk, E. A. Eliseev et al. Flexoelectricity induced spatially modulated phases in ferroics and liquid crystals. (Author review) Journal of Molecular Liquids 267, 550-559 (2018)

A. N. Morozovska, E. A. Eliseev, M. D. Glinchuk, et al., Rotomagnetic coupling in fine-grained multiferroic BiFeO3: Theory and experiment, Phys. Rev. B 97, 134115(9) (2018)

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Солонін Юрій Михайлович
д. ф.-м. н.

Перелік осіб-виконавців

Відповідальний за підготовку облікових документів Юрченко Леся Петрівна

Телефон +38 (044) 205-79-40

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності