

# Облікова картка ДіР



## I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U033044

Державний реєстраційний номер: 0123U102727

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 16-12-2024

## II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 4

Назва етапу: Дослідження кореляції електрофізичного стану графенів з динамічними змінами доменної структури сегнетоелектрика-мультифероїка у комплексах графен-сегнетоелектрик.

Початок етапу: 07.2024

Закінчення етапу: 12.2024

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

## III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут фізики  
Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417302

Місцезнаходження: проспект Науки, буд. 46, м. Київ, 03680, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380445251220, 380445251589

## IV. Відомості про співвиконавців ДіР

## V. Відомості про замовника ДіР

**Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи):** Міністерство освіти і науки України

**Код за ЄДРПОУ:** 38621185

**Місцезнаходження:** проспект Перемоги, буд. 10, м. Київ, 01135, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Кабінет Міністрів України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Розмір організації:**

**Телефон:** 380444813221

## VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

**Підстава для проведення ДіР:** 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

**Напрямок фінансування:** 2.1 - фундаментальні дослідження

### Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

**Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК):** 2201300

|                                                          |
|----------------------------------------------------------|
| <b>Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.):</b> 527.130 |
|----------------------------------------------------------|

## VII. Відомості про ДіР

### Назва роботи українською:

Вплив розмірних ефектів на електрофізичні властивості графен-сегнетоелектричних наноструктур

### Назва роботи англійською:

The influence of size effects on the electrophysical properties of graphene-ferroelectric nanostructures

### Реферат українською:

В результаті виконання 4-го етапу НТР проаналізовано кореляції електрофізичного стану графенів та/або графено-подібних низьковимірних (2Д) напівпровідників з динамічними змінами доменної структури сегнетоелектрика-мультифероїка у комплексах графен-сегнетоелектрик. Основні нові результати: 1) Виявлено та проаналізовано кореляції електропровідності графену та графено-подібного 2Д-напівпровідника MoS<sub>2</sub> з динамічними змінами доменної структури нанорозмірних сегнетоелектриків-мультифероїків, таких як наночастинки феритів Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>, ортоферитів LuFeO<sub>3</sub> та Bi<sub>1-x</sub>Sm<sub>x</sub>FeO<sub>3</sub>, ван-дер-Ваальсівських феріелектриків CuInP<sub>2</sub>S<sub>6</sub> та кремній-сумісних гафнатів HfO<sub>2</sub>-у з вакансіями кисню та домішкою Y. 2) Встановлено, що стрічкам шаруватого ван-дер-Ваальсівського сегнетоелектрика CuInP<sub>2</sub>S<sub>6</sub> притаманні індуковані прогином ізоструктурні переходи доменної структури, наслідком яких є перерозподіл електричного поля та поляризації, механічних напружень та деформацій. Електропровідність графену та/або графено-подібного 2Д-напівпровідника MoS<sub>2</sub> корелює з динамічними змінами доменної структури стрічок ван-дер-Ваальсівських феріелектриків. 3) Встановлено, що збільшення вмісту вакансій кисню (які в основному розташовані на поверхні та поблизу поверхні наночастинок) приводить до появи орторомбічних фаз (серед яких є полярна фаза Pca21) у наночастинках HfO<sub>2</sub>-у, причому вміст орторомбічних фаз зростає вище 80 % у присутності високої концентрації вакансій кисню («у» більше 3 – 5 %). Електропровідність графену у комплексі з наночастинками HfO<sub>2</sub>-у корелює з динамічними змінами доменної структури наночастинок. 4) Запропоновано найбільш перспективні з досліджених графен-сегнетоелектричних наноструктур та їх комплексів, зокрема нанокомпозити, що містять наночастинки Bi<sub>1-x</sub>Sm<sub>x</sub>FeO<sub>3</sub> (хімічний склад  $5\% \leq x < 15\%$ ) у полімерних матрицях.

### Реферат англійською:

As a result of the 4-th stage of the project, correlations of the electrophysical state of graphene and/or graphene-like low-dimensional (2D) semiconductors with dynamic changes in the ferroelectric-multiferroic domain structure in graphene-ferroelectric complexes were analyzed. Main new results: 1) Correlations of the electrical conductivity of graphene and the graphene-like 2D semiconductor MoS<sub>2</sub> with dynamic changes in the domain structure of nanoscale ferroelectrics-multiferroics, such as nanoparticles of ferrites Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>, orthoferrites LuFeO<sub>3</sub> and Bi<sub>1-x</sub>Sm<sub>x</sub>FeO<sub>3</sub>, van der Waals ferrielectrics CuInP<sub>2</sub>S<sub>6</sub> and silicon-compatible hafnia oxides HfO<sub>2</sub>-y with oxygen vacancies and Y impurity, were identified and analyzed. 2) It was established that the ribbons of the layered van der Waals ferroelectric CuInP<sub>2</sub>S<sub>6</sub> exhibit deflection-induced isostructural transitions of the domain structure, which result in the redistribution of the electric field and polarization, mechanical stresses and deformations. The electrical conductivity of graphene and/or graphene-like 2D semiconductor MoS<sub>2</sub> correlates with dynamic changes in the domain structure of van der Waals ferrielectric ribbons. 3) It has been established that an increase in the content of oxygen vacancies (which are mainly located on the surface and near the surface of nanoparticles) leads to the appearance of orthorhombic phases (among which is the polar phase Pca21) in HfO<sub>2</sub>-y nanoparticles, and the content of orthorhombic phases increases above 80% in the presence of a high concentration of oxygen vacancies ("y" more than 3 – 5%). The electrical conductivity of graphene in a complex with HfO<sub>2</sub>-y nanoparticles correlates with dynamic changes in the domain structure of nanoparticles. 4) The most promising of the investigated graphene-ferroelectric nanostructures and their complexes are proposed, in particular nanocomposites containing Bi<sub>1-x</sub>Sm<sub>x</sub>FeO<sub>3</sub> nanoparticles (chemical composition  $5\% \leq x < 15\%$ ) in polymer matrices.

**Індекс УДК:** 538.91Ф405; 548.5.01

**Коди тематичних рубрик:** 29.19.15

**Керівники роботи**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:** Морозовська Ганна Миколаївна

**Науковий ступінь:** д. ф.-м. н.

**Вчене звання:** професор

**Ідентифікатор ORCID ID:**

**Додаткова інформація:**

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

**Назва НТП українською:** Теорія впливу розмірних ефектів на електрофізичні, полярні, магнітні та магнітоелектричні властивості графен-сегнетоелектричних наноструктур (ГСЕНС).

**Назва НТП англійською:** Theory of influence of size effects on electrophysical, polar, magnetic and magnetoelectric properties of graphene-ferroelectric nanostructures (GFENS).

**НТП, яку передбачалося створити:**

**Причини, через які НТП не було створено:**

**Отримані результати:** Методи, теорії

**Галузь застосування:** 72.19

**Реєстраційний номер картки технології:**

**Опис НТП:** Встановлено, що стрічкам шаруватого ван-дер-Ваальсівського сегнетоелектрика  $\text{CuInP}_2\text{S}_6$  притаманні індуковані прогином ізоструктурні переходи доменної структури, наслідком яких є перерозподіл електричного поля та поляризації, механічних напружень та деформацій. Електропровідність графену та/або графено-подібного 2Д-напівпровідника  $\text{MoS}_2$  корелює з динамічними змінами доменної структури стрічок ван-дер-Ваальсівських феріелектриків. Встановлено, що збільшення вмісту вакансій кисню (які в основному розташовані на поверхні та поблизу поверхні наночастинок) приводить до появи орторомбічних фаз (серед яких є полярна фаза  $\text{Pca}2_1$ ) у наночастинках  $\text{HfO}_2$ -у, причому вміст орторомбічних фаз зростає вище 80 % у присутності високої концентрації вакансій кисню («у» більше 3 – 5 %). Електропровідність графену у комплексі з наночастинками  $\text{HfO}_2$ -у корелює з динамічними змінами доменної структури наночастинок. Запропоновано найбільш перспективні з досліджених графен-сегнетоелектричних наноструктур та їх комплексів, зокрема нанокомпозити, що містять наночастинки  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$  (хімічний склад  $5\% \leq x < 15\%$ ) у полімерних матрицях, в якості базових елементів надчутливих сенсорів та підзатворних діелектриків для польових транзисторів, що містять графен або 2Д-напівпровідник  $\text{MoS}_2$  в якості каналу. У підсумку запропоновані нові можливості створення багатофункціональних пристроїв на базі шаруватих та композитних ГСЕНС. Наукова продукція. За 4-й етап НТР опубліковано 3 статті у журналах AIP Advances (Q3), Molecular Crystals Liquid Crystals (Q4), та IEE proceedings (Scopus), 1 статтю прийнято до друку у журнал Semiconductor Physics, Optoelectronics and Quantum Electronics (Q3) та подано препрінт до ArXiv: Condensed Matter – Material Science, опубліковано тези міжнародної конференції «НАНО-2024» та зроблена однойменна усна доповідь на цій міжнародній конференції. Подана заявка на корисну модель «нанокомпозитний мультифероїк для сенсорів» (деклараційний патент).

**Соціально-економічна спрямованість НТП:** Розробка теорії

**Вплив НТП на довкілля:**

**Впровадження НТП:** Не впроваджено

**Практична реалізація НТП**

**Початок етапу:**

**Закінчення етапу:**

**Споживачі продукції:**

**Перспективні ринки:**

**Характер співробітництва з інвестором**

**Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:**

**Права, що надаються інвестору після завершення роботи:**

**Наявність бізнес-плану:**

**Техніко-економічне обґрунтування:**

**Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:**

**Очікуваний термін окупності (років):**

**Додаткова інформація:**

## **IX. Бібліографічний опис**

O. M. Fesenko, I. V. Fesych, A. V. Bodnaruk, A. D. Yaremkevych, M. Rallev, I. V. Zatovsky, E. A. Eliseev and A. N. Morozovska. Temperature-Induced Hexagonal-Orthorhombic Phase Transition in Lutetium Ferrite Nanoparticles. AIP Advances 14, 095124 (2024), <https://doi.org/10.1063/5.0225063>

M. Rallev, O. Fesenko, Ye. Leonenko, A. Yaremkevych, O. Lavrynenko. Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>-Ag nanohybrids as novel SEIRA and SERS substrate for Thymine detection. Molecular Crystals and Liquid Crystals (2024), <https://doi.org/10.1080/15421406.2024.2434336>

E. A. Eliseev, I. V. Kondakova, Y. O. Zagorodniy, H. V. Shevilakova, O. V. Leshchenko, V. N. Pavlikov, M. V. Karpets, L. P. Yurchenko, and A. N. Morozovska, The origin of the ferroelectric-like orthorhombic phase in oxygen-deficient HfO<sub>2</sub>-y nanoparticles. Accepted to the Semiconductor Physics, Optoelectronics and Quantum Electronics (2025), <https://doi.org/10.48550/arXiv.2412.01632>

A. N. Morozovska, H. V. Shevliakova, L. M. Korolevych, V. Khist, Y. M. Vysochanskii, E. A. Eliseev. Strain-polarization coupling in the low-dimensional Van der Waals Ferrielectrics (2024), IEEE proceedings of 42-nd International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO), Kyiv, Ukraine, 2024, pp. 83-87 (2024), <https://doi.org/10.1109/ELNANO63394.2024.10756948>

O. S. Pylypchuk, V. V. Vainberg, V. N. Poroshin, A. V. Terebilenko, A. S. Nikolenko, V. I. Popenko, M. V. Olenchuk, A. S. Tolochko, O. Bezкровnyi, G. I. Dovbeshko, T. Sabov, B. M. Romanyuk, A. N. Morozovska, and S. V. Kolotilov. The effect of formation temperature and flexo-chemical strains on the electrophysical properties of the molybdenum-disulfide-oxide nanoflakes (2024), <https://doi.org/10.48550/arXiv.2411.00603>

Morozovska A.N., Eliseev E.A., Zagorodniy Y.O., Fesych I.V., Yaremkevych A.D., Rallev M.1, and Fesenko O.M. Phase diagrams and polar properties of Bi<sub>1-x</sub>Sm<sub>x</sub>FeO<sub>3</sub> nanoparticles. 12th International Conference "Nanotechnologies and Nanomaterials" (NANO-2024), Uzhhorod, Ukraine, 21 - 24 August 2024. p. 174. <https://nano-conference.iop.kiev.ua/en/>

Г.М. Морозовська, С.О. Пилипчук, Д.О. Стеценко, О.В. Березніков, М.В. Раллєв, О.М. Фесенко. Нанокompозитний мультифероїк для сенсорів (2024). Заявка на корисну модель u202405926 зареєстровано Державною організацією «Український національний офіс інтелектуальної власності та інновацій (УКРНОІВІ)» (Деклараційний патент)

## **Х. Заключні відомості**

### **Керівник юридичної особи**

Бондар Михайло Віталійович

д. ф.-м. н.

### **Перелік осіб-виконавців**

Боднарук Андрій Васильович

(к. ф.-м. н., 01.04.07)

Леоненко Євген Володимирович

(к. х. н.)

Морозовська Ганна Миколаївна

Пилипчук Олександр Сергійович

(к. ф.-м. н.)

Раллев Максим Віталійович

Старинець Сергій Михайлович

Ткаченко Віталій Сергійович

Фесенко Олена Мар'янівна

(к. ф.-м. н.)

Яремкевич Андрій Дмитрович

(д. філософ)

### **Відповідальний за підготовку**

Машкіна В.Л.

### **облікових документів**

### **Телефон**

+38 (044) 525-55-79

### **Реєстратор**

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є  
відповідальним за реєстрацію наукової  
діяльності**

