Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U105793

Державний реєстраційний номер: 0120U104113

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 30-08-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Дослідження полярних, електронних та спектральних властивостей НВ ДПМ. Дослідження полярних та електронних властивостей низьковимір-них Янус сполук із хімічною формулою MXY. Вплив локальних електричних полів на полярні та електроні властивості графеноподібних НВ-ДПМ.

Початок етапу: 05.2021

Закінчення етапу: 08.2021

Вид звітного документа: Проміжний 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): Національний фонд досліджень України

Код за ЄДРПОУ: 42734019

Місцезнаходження: вул. Бориса Грінченка, 1, м. Київ, 01001, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442981622, 380442981622

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)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201300

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 3314.100

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Низьковимірні графеноподібні дихалькогеніди перехідних металів з керованими полярними та електронними властивостями для новітніх застосувань у наноелектроніці та біомедицині.

Назва роботи англійською:

Low-dimensional graphene-like transition metal dichalcogenides with controllable polar and electronic properties for advanced nanoelectronics and biomedical applications.

Реферат українською:

Об'єкт дослідження: Низьковимірні графеноподібні дихалькогеніди перехідних металів (НВ-ДПМ) з керованими полярними та електронними властивостями. Мета проєкту - Створення аналітичної теорії полярних та електронних властивостей НВ-ДПМ та її застосування для прогнозування та оптимізації властивостей НВ-ДПМ. Методологія дослідження: Для опису полярних та електронних властивостей НВ-ДПМ буде використана теорія Ландау-Гінзбурга-Девоншира та молекулярна динаміка, сканувальна зондова мікроскопія (СЗМ), оптична, ІЧ та Раманівська спектроскопія. Новизна проєкту. Розробка самоузгодженої аналітичної теорії для опису фізичної природи полярних, електронних та структурних властивостей НВ-ДПМ. За перший етап виконання НДР: 1.1. Знайдені кореляції полярних та електрофізичних властивостей для різних M'yM1-yX2, ґрунтуючись на розрахунках, проведених в рамках ЛГД підходу. 1.2. Проведена МД та флуоресцентна спектроскопія взаємодії двовимірних поверхонь MX2 з біологічними молекулами у водному середовищі. 1.3. Підготовані зразки НВ MX2 та систем «НВ MX2 – біологічна молекула» та проведені їх дослідження за допомогою електрофізичних вимірювань, СЗМ та SES. 1.4. В рамках ЛГД підходу проведені аналітичні та чисельні розрахунки полярних та електрофізичних властивостей моношарів MXY. 1.5. Проведена МД та флуоресцентна спектроскопія взаємодії двовимірних поверхонь MXY з біологічними молекулами у вакуумі та водному середовищі. 1.6. Відпрацьована методика підготовки зразків MXY, та систем «MXY – біологічна молекула», для оптичних та електрофізичних вимірювань, СЗМ та коливальної спектроскопії. 1.7. За допомогою розвинутої теорії проаналізована експериментальна інформація та встановлений вплив локальних електричних полів та флексоелектричного зв'язку на полярні та електронні властивості НВ-ДПМ.

Реферат англійською:

Object: Graphene-like low-dimensional transition metals dichalcogenides (LD-TMDs) with controlled polar and electronic properties. Aim: To create an analytical theory of polar and electronic properties of LD-TMDs and its application for forecasting and optimizing the properties of LD-TMDs. Methodologies: Landau-Ginzburg-Devonshire theory and molecular dynamics will be used to describe the polar and electronic properties of LD-TMDs, scanning probe microscopy, optical, IR and Raman spectroscopy. Novelty: The successful implementation of the project will lead to a self-consistent analytical theory to describe the key mechanisms and physical nature of polar, electronic and structural properties of LD-TMD. During the first stage: 1.1. Correlations of polar and electrophysical properties for different M'yM1-yX2 were found, based on the calculations performed within the LGD approach. 1.2. MD and fluorescence spectroscopy of the interaction of two-dimensional MX2 surfaces with biological molecules in an aqueous medium were performed. 1.3. Samples of LD MX2 and systems "LD MX2 - biological molecule" were prepared were studied using electrophysical measurements, SPM and SES. 1.4. Analytical and numerical calculations of polar and electrophysical properties of MXY monolayers were performed within the LGD approach. 1.5. MD and fluorescence spectroscopy of the interaction of two-dimensional MXY surfaces with biological molecules in vacuum and aqueous medium were performed. 1.6. The method of preparation of samples of MXY and systems "MXY - biological molecule" for optical and electrophysical measurements, SPM and vibrational spectroscopy has been worked out. 1.7. With the help of the developed theory the experimental

information is analyzed and the influence of local electric fields and flexoelectric connection on the polar and electronic properties of LD-TMD is established.

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: с.н.с.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Теорія полярних та електронних властивостей низьковимірних графеноподібних дихалькогенідів перехідних металів (НВ-ДПМ).

Назва НТП англійською: Analytical theory of the polar and electronic of low-dimensional graphene-like transition metal dichalcogenides (LD-TMDs).

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 зв'язки між симетрійними, полярними структурними, та електрофізичними властивостями НВ ДПМ, та кореляція між модуляцією флексоелектричної поляризації та статичної електропровідності нанопластівців ДПМ. Встановлено характер та величину змін впорядкованості мембран та біологічних молекул під дією 2D поверхонь ДПМ. Тож, НВ-ДПМ є перспективними в ролі базових елементів у комірках енергонезалежної пам'яті з високою щільністю інформації, польових транзисторах, та біомедицині в якості маркерів, транспортерів ліків та низькотоксичних антиоксидантів.

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 обгрунтування:**
- **Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:**
- **Очікуваний термін окупності (років):**
- **Додаткова інформація:**

IX. Бібліографічний опис

Anna N. Morozovska, Eugene A. Eliseev, Hanna V. Shevliakova, Yaroslava Yu. Lopatina, Galina I. Dovbeshko, Maya D. Glinchuk, Yunseok Kim, and Sergei V. Kalinin. Correlation between corrugation-induced flexoelectric polarization

and conductivity of low-dimensional transition metal dichalcogenides. Phys. Rev. Applied 15, 044051 (2021) https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevApplied.15.044051

Rama K. Vasudevan, Maxim Ziatdinov, Lukas Vlcek, Anna N. Morozovska, Eugene A. Eliseev, Shi-Ze Yang, Yongji Gong, Pulickel Ajayan, Wu Zhou, Matthew F. Chisholm, Sergei V. Kalinin. Investigating phase transitions from local crystallographic analysis based on statistical learning of atomic environments in 2D MoS2-ReS2. Applied Physics Reviews, 8, 011409 (2021) https://doi.org/10.1063/5.0012761

DL Kolesnik, ON Pyaskovskaya, OP Gnatyuk, VV Cherepanov, SO Karakhim, IO Polovii, O Yu Posudievsky, NV Konoshchuk, VV Strelchuk, AS Nikolenko, GI Dovbeshko, GI Solyanik. The effect of 2D tungsten disulfide nanoparticles on Lewis lung carcinoma cells in vitro. RSC Advances 11, issue 27, 16142 (2021) https://doi.org/10.1039/d1ra01469b

Galyna Dovbeshko, Olena Gnatyuk, Andrej Dementjev, Danielis Rutkauskas, Evgeniya Kovalska, Anna Baldycheva, Oleksii Ilchenko, Dmytro Krasnenkov, Tommi Kaplas. Coherent anti-stokes Raman scattering spectroscopy (CARS) and imaging of DNA on graphene layers and glass covers. FlatChem. 27, 100243 (2021) https://doi.org/10.1016/j.flatc.2021.100243

Anna N. Morozovska, Eugene A. Eliseev, Sergei V. Kalinin, Yulian M. Vysochanskii, and Petro Maksymovych. Stress-Induced Phase Transitions in Nanoscale CuInP2S6. Phys. Rev. B 104, 054102 (2021) https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.104.054102

Maksym V. Strikha, Mykola Yelisieiev, and Anna N. Morozovska. Fundamental miniaturization limits for MOSFETs with a monolayer MoS2 channel Appl. Phys. Lett. 119, 042102 (2021); https://doi.org/10.1063/5.0056720

R.M. Rudenko, O.O. Voitsihovska, G.I. Dovbeshko, V.M. Poroshin / Electrical properties of molybdenum disulfide MoS2 nanopowder // II International Advanced Study Conference Condensed Matter and Low Temperature Physics 2021 (6-12 June 2021, Kharkiv): Conference Program and Book of Abstracts / Editor: Nataliia Mysko-Krutik. – Kharkiv: FOP Brovin O.V., 2021. – P66.

N.V. Morozovsky, Yu. M. Barabash, G.I. Dovbeshko, Yu. V. Grebelna, M. T. Kartel, Yu. I. Sementsov, J. Macutkevic, J. Banys. Termophysical and electrophysical characterization of exfoliated grafhite – carbon nanotube composites. International research workshop “Thermal Conductivity of solid states at low temperatures”. Kharkiv, Ukraine, 8 June 2021. p. 15 II International Advanced Study Conference Condensed Matter and Low Temperature Physics 2021 6-12 June 2021, Kharkiv

R.M. Rudenko, O.O. Voitsihovska, G.I. Dovbeshko, V.M. Poroshin. Thermally activated conductivity of molybdenum disulfide MoS2 nanopowder. International research workshop “Thermal Conductivity of solid states at low temperatures”. Kharkiv, Ukraine, 8 June 2021. p.20 II International Advanced Study Conference Condensed Matter and Low Temperature Physics 2021 6-12 June 2021, Kharkiv

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Бондар Михайло Віталійович
д. ф.-м. н., 01.04.07

Перелік осіб-виконавців

Єсилевський Семен Олександрович
(д.ф.-м.н., 03.00.02)

Афоніна Уляна Костянтинівна

Боднарук Андрій Васильович
(к. ф.-м. н.)

Довбешко Галина Іванівна
(д. ф.-м. н., 01.04.07)

Куришева Олександра Антонівна

Лопатіна Ярослава Юріївна
(к. ф.-м. н.)

Морозовська Ганна Миколаївна
(д.ф.-м.н., 01.04.07)

Пилипчук Олександр Сергійович
(к. ф.-м. н., 01.04.07)

Польовий Іван Олександрович

Шевлякова Ганна Вікторівна

Відповідальний за підготовку облікових документів Машкіна В.Л.

Телефон +38 (044) 525-55-79

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності