

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U106580

Державний реєстраційний номер: 0120U104113

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 14-12-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Вплив локальних електричних полів на полярні та електроні властивості графеноподібних НВ-ДПМ. Полярні, структурні, електроні та спектральні властивості графеноподібних НВДПМ: теорія та експеримент. Прогнозування полярних та електронних властивостей НВ-MX2.

Початок етапу: 09.2021

Закінчення етапу: 12.2021

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): 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)

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201300

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1419.000

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Низьковимірні графеноподібні дихалькогеніди перехідних металів з керованими полярними та електронними властивостями для новітніх застосувань у нанoeлектроніці 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 проекту - 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 проекту. Розробка самоузгодженої аналітичної теорії для опису фізичної природи полярних, електронних та структурних властивостей НВ-ДПМ. За другий етап виконання НДР: 2.1. Проведено аналітичний огляд літератури за тематикою «Застосування НВ-ДПМ у нанoeлектроніці та біомедицині» та визначено властивості досліджуваних матеріалів, які можна оптимізувати для їх новітніх застосувань. 2.2. Проаналізовано та узагальнено результати теоретичних розрахунків електрофізичних та структурних властивостей НВ ДПМ типу $\text{MyM}'1\text{-yX}_2$ та MXy , та їх взаємодії з біологічними молекулами. Проведено порівняння з експериментом, встановлено кореляцію та закономірність. 2.3. Підготовано зразки найбільш перспективних НВ-ДПМ та систем «НВ-ДПМ – біологічна молекула» для яких досліджено вибрані полярні, структурні та спектральні властивості за допомогою електрофізичних вимірювань, СЗМ та коливальної спектроскопії. 2.4. Використовуючи розвинену аналітичну теорію та результати чисельного моделювання, ми навчилися прогнозувати вплив деформацій різного типу на полярні та електронні властивості НВ- MX_2 .

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, elasticity theory, electrodynamics, semiconductor theory, symmetry 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, in particular surface-enhanced vibrational 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 second stage: 2.1. An analytical review of the literature on "Application of HB-DPM in nanoelectronics and biomedicine" and identified the properties of the studied materials that can be optimized for their latest applications. 2.2. The results of theoretical calculations of electrophysical and structural properties of HB DPM type $\text{MyM}'1\text{-yX}_2$ and MXy , and their interaction with biological molecules are analyzed and generalized. The comparison with the experiment is made, the correlation and regularity are established. 2.3. Samples of the most promising HB-DPM and systems "HB-DPM - biological molecule" for which the selected polar, structural and spectral properties were studied by means of electrophysical measurements, SPM and vibrational spectroscopy were prepared. 2.4. Using the developed analytical theory and the results of numerical modeling, we learned to predict the effect of deformations of different types on the polar and electronic properties of HB- MX_2 .

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 обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Shevliakova H. V., Yesylevskyy S. O., Kupchak I., Dovbeshko G. I., Kim Yu., Morozovska, A. N. Flexoelectric and piezoelectric coupling in a bended MoS₂ monolayer. Symmetry. 2021; 13(11):2086

<https://doi.org/10.3390/sym13112086> (Scopus and Web of Science, Q2).

V.V. Vainberg, O.S. Pylypchuk, V.N. Poroshin, M.V. Olenchuk, G.I. Dovbeshko. Electric Transport Properties in the 2D-MoS₂ (<http://arxiv.org/abs/2110.15281>).

E. A. Eliseev, M. E. Yeliseiev, S. V. Kalinin and A. N. Morozovska. Whither steady-state negative capacitance of a ferroelectric film? (<http://arxiv.org/abs/2112.04712>).

V.V. Vainberg, O.S. Pylypchuk, V.N. Poroshin, M.V. Olenchuk, G.I. Dovbeshko. Electric Transport Properties in the 2D-MoS₂. Spectroscopy of Molecular Crystals, September 21-24, 2021, Kyiv, Ukraine, P-141.

Х. 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.)

Гнатюк Соломія Іванівна

Довбешко Галина Іванівна
(д. ф.-м. н., 01.04.05)

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

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

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**

