

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0220U104185

Державний реєстраційний номер: 0120U104113

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 14-12-2020

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Аналіз електрофізичних, структурних та спектральних властивостей графеноподібних низьковимірних (НВ) дихалькогенідів перехідних металів (ДПМ). Дослідження структурних та спектральних властивостей НВ-ДПМ.

Початок етапу: 10.2020

Закінчення етапу: 12.2020

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, Київська обл., 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, Київська обл., 01001, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 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.): 945.415
--

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, теорія пружності, електродинаміка, теорія напівпровідників, теорія симетрії та молекулярна динаміка, сканувальна зондова мікроскопія (СЗМ), оптична, ІЧ та Раманівська спектроскопія, зокрема коливальна спектроскопія підсилена поверхнею (SEIRA). Новизна проекту. Розробка самоузгодженої аналітичної теорії для опису фізичної природи полярних, електронних та структурних властивостей НВ-ДПМ, прогнозування, оптимізації та контролю полярних, електронних та структурних властивостей НВ-ДПМ для численних застосувань у опто- та нанoeлектроніці та біомедицині. За перший етап виконання НДР: 1.1. Зроблено аналітичний огляд літератури за тематикою «Електрофізичні, структурні та спектральні властивості НВ-ДПМ». 1.2. Розраховано симетрію одношарових MX_2 та визначено зв'язки між симетрійними, структурними, спектральними та електрофізичними властивостями MoS_2 , WS_2 , WSe_2 та $MoTe_2$. 1.3. В рамках модифікованого підходу Ландау-Гінзбурга-Девоншира розраховані аналітично структурні фазові діаграми НВ-ДПМ $MyM^{1-y}X_2$ для змінної долі «у» компоненти М від 0 до 1. 1.4. Проведена молекулярна динаміка (МД) взаємодії двовимірних поверхонь MX_2 з біологічними молекулами у вакуумі. Проаналізовано механізми взаємодії двовимірних поверхонь MX_2 з біологічними молекулами у вакуумі. 1.5. Проведені експериментальні дослідження структурних властивостей НВ MX_2 за СЗМ та спектральних властивостей MX_2 за допомогою SEIRA. Проведений аналіз відкриває перспективи НВ-ДПМ як базових елементів транзисторної логіки та біомедицині.

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 first stage: 1.1. An analytical review of the literature on "Electrophysical, structural and spectral properties of LD-TMD" is prepared. 1.2. The symmetry of single-layer MX_2 is calculated and the connections between symmetrical, structural, spectral and electrophysical properties of MoS_2 , WS_2 , WSe_2 and $MoTe_2$ are determined. 1.3. Within the modified Landau-Ginzburg-Devonshire approach, structural phase diagrams of LD-TMD $MyM^{1-y}X_2$ calculated analytically for the variable fraction "y" of the component M from 0 to 1. 1.4. The molecular dynamics (MD) of the interaction of two-dimensional MX_2 surfaces with biological molecules in vacuum is performed. The mechanisms of interaction of two - dimensional MX_2 surfaces with biological molecules in vacuum are analyzed. 1.5.

Experimental studies of the structural properties of LD MX2 using scanning probe microscopy (SPM) and the spectral properties of MX2 using surface-enhanced IR absorption (SEIRA) were performed. The analysis opens up prospects for LD-TMD as a basic element in high-density non-volatile memory cells, field-effect transistors, and biomedicine.

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: 01.2021

Закінчення етапу: 12.2024

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

Anna N. Morozovska, Eugene A. Eliseev, Kyle Kelley, Yulian M. Vysochanskii, Sergei V. Kalinin, and Petro Maksymovych. Phenomenological description of bright domain walls in ferroelectric-antiferroelectric layered

chalcogenides. Phys. Rev. B, 102, 174108 (2020) <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.102.174108>

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 (<http://arxiv.org/abs/2011.09326>)
(відправлено до Phys. Rev. Applied)

Morozovska A.N., Shevliakova H.V., Kelley K., Vysochanskii Yu.M., Kalinin S.V., Maksymovych P. "Possible origin of bright and dark domain walls in ferroelectric-antiferroelectric layered chalcogenides" IX International seminar «Properties of ferroelectric and superionic systems», Uzhhorod, 27 October 2020, pp. 7-8

Hanna V. Shevliakova, Uliana K. Afonina, Oleksandra A. Kurysheva and Anna N. Morozovska. Bending-induced flexoelectric polarization and conductivity of low-dimensional transition metal dichalcogenides. XI Conference of Young Scientists «PROBLEMS OF THEORETICAL PHYSICS». Kyiv, Ukraine, December 21-23, 2020

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

Довбешко Галина Іванівна
(д.ф.-м.н., 03.00.02)

Куришева Олександра Антонівна

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

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

Пиршев Кирило Олександрович
(к. б. н.)

Польовий Іван Олександрович

Шевлякова Ганна Вікторівна

Відповідальний за підготовку облікових документів

Машкін В.Л.

Телефон

+38 (044) 525-55-79

Реєстратор

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

