

ЗАТВЕРДЖУЮ

Директор Інституту фізики НАН України  
(посада)

член-кореспондент НАН України  
Бондар Михайло Віталійович



## АНОТОВАНИЙ ЗВІТ

про виконану роботу у 2020 році в рамках реалізації проєкту  
із виконання наукових досліджень і розробок

Низьковимірні графеноподібні дихалькогеніди перехідних металів з керованими полярними та електронними властивостями для новітніх застосувань у наноелектроніці та біомедицині  
(назва Проєкту)

Назва конкурсу: «Підтримка досліджень провідних та молодих учених»

Реєстраційний номер Проєкту: 2020.02/0027

Підстава для реалізації Проєкту з виконання наукових досліджень і розробок (реєстраційний номер та назва Проєкту) 2020.02/0027 Низьковимірні графеноподібні дихалькогеніди перехідних металів з керованими полярними та електронними властивостями для новітніх застосувань у наноелектроніці та біомедицині

Рішення наукової ради Національного фонду досліджень України щодо визначення переможця конкурсу «Підтримка досліджень провідних та молодих учених» (назва конкурсу) протокол від 16-17 вересня 2020 року № 21

### 1. ЗАГАЛЬНА ІНФОРМАЦІЯ ПРО ПРОЄКТ

Тривалість виконання Проєкту

Початок – дата укладання Договору про виконання наукових досліджень і розробок;

Закінчення – 2022 рік.

Загальна вартість Проєкту: 10919 240 грн. (десять мільйонів дев'ятсот дев'ятнадцять тисяч двісті сорок гривень, 00 копійок)

Вартість Проєкту по роках, грн.:

1-й рік 945415 грн. (дев'ятсот сорок п'ять тисяч чотириста п'ятнадцять гривень, 00 копійок)

2-й рік 4 989762 грн. (чотири мільйони дев'ятсот вісімдесят дев'ять тисяч сімсот шістдесят дві гривні, 00 копійок)

3-й рік 4984062 грн. (чотири мільйони дев'ятсот вісімдесят чотири тисячі шістдесят дві гривні, 00 копійок)

### 2. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ВИКОНАВЦІВ ПРОЄКТУ

до виконання Проєкту буде залучено 10 виконавців, з них:  
доктори наук 3;

кандидати наук 2 ;  
інші працівники 5 .

### **3. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ГРАНТООТРИМУВАЧА ТА ОРГАНІЗАЦІЮ(Ї) СУБВИКОНАВЦЯ(ІВ) ПРОЄКТУ**

Проектом не передбачено залучення субвиконавця

### **4. ОПИС ПРОЄКТУ**

#### **4.1. Мета Проєкту (до 200 знаків)**

Створення аналітичної теорії полярних та електронних властивостей низьковимірних (НВ) графеноподібних дихалькогенідів перехідних металів (ДПМ) та її застосування для оптимізації властивостей НВ-ДПМ

#### **4.2. Основні завдання Проєкту (до 400 знаків)**

(а) Створити аналітичну теорію для опису полярних та електронних властивостей графеноподібних НВ-ДПМ та встановити ключові механізми впливу на ці властивості.

(б) За допомогою сканувальної зондової мікроскопії та підсиленої поверхнею коливальної спектроскопії отримати інформацію про вплив локальних електричних полів та деформацій на полярні, електронні та структурні властивості НВ-ДПМ.

#### **4.3. Детальний зміст Проєкту:**

##### Сучасний стан проблеми (до 400 знаків)

Можливість змінювати полярні властивості та електронні властивості НВ-ДПМ з хімічною формулою  $MX_2$  (М – метал, Х - халькоген), твердих розчинів  $M'_yM_{1-y}X_2$  (у – хімічний склад металу М') та Янус-сполук  $MXY$  (Х, Y – халькогени) зробили їх об'єктами інтенсивних фундаментальних та прикладних досліджень. Однак ці можливості маловивчені теоретично та майже несистематизовані.

##### Новизна Проєкту (до 400 знаків)

Вперше у світовій науковій практиці успішна реалізація проєкту приведе до появи самоузгодженої аналітичної теорії для опису ключових механізмів та фізичної природи полярних, електронних та структурних властивостей НВ-ДПМ, кореляції, прогнозування, оптимізації та контролю полярних, електронних та структурних властивостей НВ-ДПМ для новітніх застосувань у опто- та наноелектроніці та біомедицині.

##### Методологія дослідження (до 400 знаків)

Полярні і електронні властивості НВ-ДПМ описуються теорією Ландау-Гінзбурга-Девоншира, теорією пружності, електродинамікою, теорією напівпровідників, теорією симетрії і молекулярною динамікою. Сканувальна зондова мікроскопія, ІЧ, Раманівська спектроскопія і коливальна спектроскопія підсилена поверхнею використовуються для експер. досліджень полярних, електронних і структурних властивостей НВ-ДПМ.

### **5. ОТРИМАНІ НАУКОВІ АБО НАУКОВО-ТЕХНІЧНІ РЕЗУЛЬТАТИ (до 2 сторінок) в поточному році/ в рамках реалізації Проєкту, зокрема:**

#### **5.1. Опис наукових або науково-технічних результатів, отриманих в рамках виконання Проєкту (із зазначенням їх якісних та кількісних (технічних) характеристик)**

За перший етап виконання роботи «Етап 1. Аналіз електрофізичних, структурних та спектральних властивостей графеноподібних низьковимірних (НВ) дихалькогенідів перехідних металів (ДПМ). Дослідження структурних та спектральних властивостей НВ-ДПМ» повною мірою виконано 5 поставлених завдань:

1.1. Зроблено аналітичний огляд літератури за тематикою «Електрофізичні, структурні та спектральні властивості НВ-ДПМ», в якому проаналізовано сучасні теоретичні та експериментальні роботи за тематикою досліджень.

1.2. Розраховано симетрію одношарових  $\text{MX}_2$  та визначено (по літературі) зв'язки між симетрійними, структурними, спектральними та електрофізичними властивостями  $\text{MoS}_2$ ,  $\text{WS}_2$ ,  $\text{WSe}_2$  та  $\text{MoTe}_2$ .

1.3. В рамках модифікованої феноменологічної теорії Ландау-Гінзбурга-Девоншира (ЛГД) розраховані аналітично структурні фазові діаграми НВ-ДПМ  $\text{M}_y\text{M}'_{1-y}\text{X}_2$  для змінної долі «у» компоненти М від 0 до 1.

1.4. Проведена молекулярна динаміка (МД) взаємодії двовимірних поверхонь  $\text{MX}_2$  з біологічними молекулами у вакуумі. Проаналізовано механізми взаємодії двовимірних поверхонь  $\text{MX}_2$  з біологічними молекулами у вакуумі.

1.5. Проведені експериментальні дослідження структурних властивостей НВ  $\text{MX}_2$  за допомогою сканувальної зондової мікроскопії (СЗМ), та спектральних властивостей  $\text{MX}_2$  за допомогою підсиленого поверхнею ІЧ поглинання (SEIRA).

Результатом (індикатором) виконання завдань є:

1. Проаналізовані близько 100 теоретичних та експериментальних статей у високорейтингових журналах Q1-Q2 за останні 10 років за тематикою «Електрофізичні, структурні та спектральні властивості НВ-ДПМ». В результаті аналізу літератури була поставлена розрахункова задача, розв'язок якої дозволив передбачити кореляції між поляризацією та електропровідністю  $\text{MX}_2$  та  $\text{MX}_Y$ , та намітити шляхи покращення їх полярних та електронних властивостей. Ці теоретичні результати чекають на нашу експериментальну перевірку на наступних етапах виконання проекту.

2. Встановлено певні зв'язки між симетрійними, полярними, структурними, та електрофізичними властивостями НВ  $\text{MX}_2$ , та встановлена однозначна кореляція між модуляцією флексоелектричної поляризації та статичної електропровідності нанопластівців  $\text{MoS}_2$ ,  $\text{MoTe}_2$  та  $\text{MoSTe}$  на шорсткій підкладці. Встановлено, що хімічна неоднорідність, яка призводить до співіснування феро- та антифероелектричних фаз, є причиною виникнення «світлих» та «темних» доменних стінок у тонких шарах фероелектричних та антифероелектричних халькогенідів перехідних металів.

3. Розроблена методика аналітичних розрахунків структурних фазових діаграм графеноподібних НВ-ДПМ із хімічною формулою  $\text{M}_y\text{M}'_{1-y}\text{X}_2$ . Проведений аналіз функціоналу вільної енергії ЛГД для одношарових  $\text{M}_y\text{M}'_{1-y}\text{X}_2$  та проаналізовані їх структурні фазові діаграми залежно від складу «у» на прикладі твердого розчину  $\text{Mo}_y\text{Re}_{1-y}\text{S}_2$ . Встановлено, що ключовими механізмами впливу на полярні властивості та структурні фазові діаграми НВ-ДПМ із хімічною формулою  $\text{M}_y\text{M}'_{1-y}\text{X}_2$  є критична концентрація хімічного складу  $y_{cr}$  та супутні механічні деформації.

4. Проаналізовано механізми взаємодії двовимірних поверхонь  $\text{MX}_2$  з біологічними молекулами у вакуумі. Встановлено характер та величину змін впорядкованості мембран та біологічних молекул під дією двовимірних поверхонь ДПМ.

5. Визначено структурні властивості НВ  $\text{MX}_2$  за допомогою СЗМ, та охарактеризовані спектральні властивості системи « $\text{MX}_2$  – біологічна молекула» за допомогою SEIRA. Результати вказують на збільшення локального електричного поля поблизу поверхні НВ  $\text{MX}_2$ , що проявилось в зростанні інтенсивності коливань амідних смуг білку лізоциму.

У сукупності проведений аналіз відкриває перспективи використання НВ-ДПМ як базових елементів у комірках енергонезалежної пам'яті з високою щільністю інформації, польових транзисторах, та біомедицині в якості маркерів, транспортерів ліків та низькотоксичних антиоксидантів.

Результати 1-го етапу проекту опубліковані у статті у Physical Review B, електронному препринті (подано до Physical Review Applied) та 2-х тезах міжнародних конференцій:

– 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

Публікація результатів 1-го етапу проекту у журналах Q1 підтверджує їх світову новизну та сприятиме їх обговоренню у світовій науковій спільноті.

## **5.2. За наявності науково-технічної продукції обґрунтування її переваг у порівнянні з існуючими аналогами**

Проект є фундаментальним і наукова-технічна продукція за проектом не передбачена

## **5.3. Практична цінність отриманих результатів реалізації Проєкту для економіки та суспільства (стосується проєктів, що передбачають проведення прикладних наукових досліджень і науково-технічних розробок)**

Проект є фундаментальним і практична цінність отриманих результатів реалізації Проєкту для економіки та суспільства не передбачена

## **5.4. Опис шляхів та способів подальшого використання результатів виконання Проєкту в суспільній практиці.**

Ідеї щодо покращення полярних, електронних та структурних властивостей НВ-ДПМ з хімічною формулою  $M_yM'_{1-y}X_2$  за рахунок їх спонтанної деформації та легування домішками перехідних металів важливі для подальшого використання цих матеріалів в якості нанорозмірних каналів польових транзисторів за рахунок переходу від напівпровідникового до металевого стану, керованого напруженою затвору та/або механічною деформацією за рахунок п'єзоелектричних та флексоелектричних ефектів; та для середовищ запису інформації у комітках енергонезалежної мультибітової пам'яті високої щільності, завдяки можливості збереження-зчитування та запису-перезапису нанорозмірних структурних доменів, напрямок поляризації та провідність яких будуть нести мультибітову інформацію.

Примітка: Анотований звіт не містить відомостей, заборонених до відкритого опублікування

## **Науковий керівник Проєкту**

провідний науковий співробітник  
відділу фізики магнітних явищ ІФ НАНУ,

(посада)

д.ф.-м.н, с.н.с.. Морозовська Ганна Миколаївна

ПБ



(підпис)