



ЗАТВЕРДЖУЮ

Директор Інституту фізики НАН України

(посада)

член-кореспондент НАН України

Михайло БОНДАР  
(Власне ім'я та ПРІЗВИЩЕ)

(підпис)

М.П.

## АНОТОВАНИЙ ЗВІТ

про виконану роботу у 2021 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.

Рішення наукової ради Національного фонду досліджень України про схвалення звіту та продовження надання грантової підтримки проєкту від «22» грудня 2020 року № 40.

### 1. ЗАГАЛЬНА ІНФОРМАЦІЯ ПРО ПРОЄКТ

Загальна тривалість виконання проєкту 2020 рік – 2022 рік

Тривалість виконання Проєкту у 2021 році

Початок –23 квітня 2021, номер договору 11/02/0027

(дата укладання Договору про виконання наукового дослідження і розробки)

Закінчення – 15 грудня 2021 року.

Загальна вартість Проєкту: 10 662 577 грн. (десять мільйонів шістсот шістдесят дві тисячі п'ятсот сімдесят сім 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 733100 грн. (чотири мільйони сімсот тридцять три тисячі сто гривень, 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 залучено 10 виконавців, з них:

доктори наук            3 ;  
кандидати наук        3 ;  
інші працівники       4 .

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

Проєктом 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  $MX_2$  (M – метал, X - халькоген), твердих розчинів  $M'_yM_{1-y}X_2$  (y – хімічний склад металу M') та Янус-сполук  $MXY$  (X, 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, ГЧ, Раманівська спектроскопія і коливальна спектроскопія підсилена поверхнею використовуються для експериментальних 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. Дослідження полярних, електронних та спектральних властивостей НВ-ДПМ. Дослідження полярних та електронних властивостей низьковимірних Янус сполук із хімічною формулою  $MXY$ . Вплив локальних електричних полів на полярні та електронні властивості графеноподібних НВ-ДПМ» повною мірою виконано 7 поставлених завдань:

1. Знайдені кореляції полярних та електрофізичних властивостей для різних  $M'_yM_{1-y}X_2$ , ґрунтуючись на розрахунках, проведених в рамках ЛГД підходу.

2. Проведена МД та флуоресцентна спектроскопія взаємодії двовимірних поверхонь  $\text{MX}_2$  з біологічними молекулами у водному середовищі. Визначений вплив рН оточуючого середовища на властивості системи «2Д структура - біологічна молекула».
3. Підготовані зразки НВ  $\text{MX}_2$  та систем «НВ  $\text{MX}_2$  – біологічна молекула» та проведені дослідження їх фізичних властивостей за допомогою електрофізичних вимірювань, СЗМ, SES та коливальної спектроскопії.
4. В рамках ЛГД підходу проведені аналітичні та чисельні розрахунки полярних та електрофізичних властивостей моношарів  $\text{MX}_2$ .
5. Проведена МД та флуоресцентна спектроскопія взаємодії двовимірних поверхонь  $\text{MX}_2$  з біологічними молекулами у вакуумі та водному середовищі.
6. Відпрацьована методика підготовки вихідних зразків  $\text{MX}_2$ , та систем « $\text{MX}_2$  – біологічна молекула», для оптичних та електрофізичних вимірювань, СЗМ та коливальної спектроскопії.
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.

За **другий етап** виконання роботи «Етап 2. Вплив локальних електричних полів на полярні та електронні властивості графеноподібних НВ-ДПМ Полярні, структурні, електронні та спектральні властивості графеноподібних НВ-ДПМ: теорія та експеримент». Повною мірою виконано 4 поставлених завдання, які в сукупності істотно вдосконалюють стан розробки проблеми та мають світову новизну, зокрема:

1. Проведено аналітичний огляд літератури за тематикою «Застосування НВ-ДПМ у наноелектроніці та біомедицині» та визначено властивості досліджуваних матеріалів, які можна оптимізувати для їх новітніх застосувань.

2. Проаналізовано та узагальнено результати теоретичних розрахунків електрофізичних та структурних властивостей НВ ДПМ типу  $\text{M}_y\text{M}'_{1-y}\text{X}_2$  та  $\text{MX}_2$ , та їх взаємодії з біологічними молекулами. Проведено порівняння з експериментом, встановлено кореляцію та закономірність.

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.

4. Використовуючи розвинену аналітичну теорію та результати чисельного моделювання, ми навчилися прогнозувати вплив деформацій різного типу на полярні та електронні властивості НВ- $\text{MX}_2$ .

Результатом (індикатором) виконання завдань є:

1. Встановлені кореляції полярних, електронних та спектральних властивостей НВ ДПМ.
2. Встановлені взаємозв'язки полярних та електронних властивостей  $\text{MX}_2$ .
3. Встановлений вплив локальних електричних полів на полярні, електронні та структурні властивості НВ-ДПМ.

У сукупності проведений аналіз розвиває перспективи застосування НВ-ДПМ як базових елементів у комірках енергонезалежної пам'яті з високою щільністю інформації, польових транзисторах та біомедицині в якості маркерів.

Результати Проекту за 2021 рік опубліковані у 6-х статтях в журналах Q1 (Phys. Rev. Applied, Applied Physics Reviews, RSC Advances, FlatChem, Phys. Rev. B та Appl. Phys. Lett.), 1-ї статті Q2 (Symmetry), 2-х препринтах (ArXiv-cond.matt.), та 4-х тезах міжнародних конференцій:

1. 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) (*Scopus and Web of Science, Q1*) <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevApplied.15.044051>.

2. 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 MoS<sub>2</sub>-ReS<sub>2</sub>. *Applied Physics Reviews*, 8, 011409 (2021) <https://doi.org/10.1063/5.0012761> (*Scopus and Web of Science, Q1*).

3. 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> (*Scopus and Web of Science, Q1*).

4. 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> (*Scopus and Web of Science, Q1*).

5. Anna N. Morozovska, Eugene A. Eliseev, Sergei V. Kalinin, Yulian M. Vysochanskii, and Petro Maksymovych. Stress-Induced Phase Transitions in Nanoscale CuInP<sub>2</sub>S<sub>6</sub>. *Phys. Rev. B* 104, 054102 (2021) <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.104.054102> (*Scopus and Web of Science, Q1*).

6. Maksym V. Strikha, Mykola Yeliseiev, and Anna N. Morozovska. Fundamental miniaturization limits for MOSFETs with a monolayer MoS<sub>2</sub> channel *Appl. Phys. Lett.* 119, 042102 (2021); <https://doi.org/10.1063/5.0056720> (*Scopus and Web of Science, Q1*).

7. Shevliakova H. V., Yesylevskyy S. O., Kupchak I., Dovbeshko G. I., Kim Yu., Morozovska, A. N. Flexoelectric and piezoelectric coupling in a bended MoS<sub>2</sub> monolayer. *Symmetry*. 2021; 13(11):2086 <https://doi.org/10.3390/sym13112086> (*Scopus and Web of Science, Q2*).

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

9. 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>).

10. M.V. Olenchuk, U.K. Afonina, O.P. Gnatyuk, V.V. Strelchuk, A.S. Nikolenko and G.I. Dovbeshko. Heat Annealing Influences the Optical Property of 2D MoS<sub>2</sub> Nanoparticles. Відправлено до *Molecular Crystals & Liquid Crystals* (*Scopus and Web of Science, Q3*).

11. R.M. Rudenko, O.O. Voitsihovska, G.I. Dovbeshko, V.M. Poroshin / Electrical properties of molybdenum disulfide MoS<sub>2</sub> 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.

12. N.V. Morozovsky, Yu. M. Barabash, G.I. Dovbeshko, Yu. V. Grebelna, M. T. Kartel, Yu. I. Sementsov, J. Macutkevic, J. Banys. Thermophysical and electrophysical characterization of exfoliated graphite – 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.

13. R.M. Rudenko, O.O. Voitsihovska, G.I. Dovbeshko, V.M. Poroshin. Thermally activated conductivity of molybdenum disulfide MoS<sub>2</sub> 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.

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

Публікація результатів проекту у журналах Q1-2 підтверджує світову новизну результатів та сприятиме їх обговоренню у світовій науковій спільноті.

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

Аналітична теорія полярних, електронних та структурних властивостей графеноподібних НВ-ДПМ, що розробляється в рамках проекту, не має аналогів у світовій літературі, яка насичена здебільшого емпіричними результатами. Підготовлено зразки найбільш перспективних НВ-ДПМ та систем «НВ-ДПМ – біологічна молекула». Розроблений підхід для теоретичного

прогнозування впливу деформації поверхні на електронні та полярні властивості НВ-ДПМ, придатний для широкого класу НВ-МХ<sub>2</sub>.

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

Дослідження в рамках проєкту носить суто фундаментальний характер.

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

Аналітична теорія полярних, електронних та структурних властивостей графеноподібних НВ-ДПМ, перевірена експериментально, дозволяє прогнозувати властивості нових сполук та надати рекомендації для створення приладів на основі НВ-ДПМ з найкращими характеристиками та параметрами. Очікувані результати будуть використані в загальних та спеціальних курсах фізики твердого тіла, фізиці напівпровідників, нанофізиці, біофізиці в закладах вищої освіти України з найвищим рівнем акредитації, країн ЄС та США. Ідеї та конкретні рекомендації щодо контролю та покращення полярних, електронних та структурних властивостей різних НВ-ДПМ за рахунок їх спонтанної деформації відкриють шлях до новітніх застосувань моношарів ДПМ з хімічною формулою  $M_yM_{1-y}X_2$  та Янус сполук МХУ в якості нанорозмірних каналів польових транзисторів за рахунок переходу сегнетоелектричного каналу від напівпровідникового до металевого стану, керованого напруженою затвору та/або механічною деформацією за рахунок п'єзо- та флексо ефектів.

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., Ганна МОРОЗОВСЬКА  
(Власне ім'я та ПРІЗВИЩЕ)

  
\_\_\_\_\_  
(підпис)