

ЗАТВЕРДЖУЮ  
Директор Інституту фізики НАН України  
(посада)  
член-кореспондент НАН України

Михайло БОНДАР  
(Власне ім'я та ПРІЗВИЩЕ)



*(Handwritten signature)*  
(підпис)  
М.П.

**АНОТОВАНИЙ ЗВІТ**  
**про виконану роботу у 2021 році в рамках реалізації проєкту**  
**із виконання наукових досліджень і розробок**

Кооперативна кінетика дефектів та доменних структур у сегнетоелектриках (назва Проєкту)

**Назва конкурсу:** Спільний конкурс Ф81 науково-дослідних проєктів Державного фонду фундаментальних досліджень (ДФФД) і Німецького дослідницького співтовариства (DFG)

**Реєстраційний номер Проєкту:** Ф 81/41481

**Підстава для реалізації Проєкту з виконання наукових досліджень і розробок (реєстраційний номер та назва Проєкту)** Ф 81/41481 Кооперативна кінетика дефектів та доменних структур у сегнетоелектриках

рішення Тимчасової комісії (створена рішенням наукової ради Грантоотримувача (протокол №36 від 02.12.2020 року) щодо підтвердження актуальності та можливості виконання наукових проєктів-переможців Спільного конкурсу Ф81 науково-дослідних проєктів Державного фонду фундаментальних досліджень (ДФФД) і Німецького дослідницького співтовариства (DFG) (протокол №11 від «29» червня 2021 року), рішення наукової ради Грантонадавача щодо забезпечення укладання договорів про виконання наукових досліджень і розробок за рахунок грантової підтримки з переможцями «Спільний конкурс Ф81 науково-дослідних проєктів Державного фонду фундаментальних досліджень (ДФФД) і Німецького дослідницького співтовариства (DFG), (протокол № 26 від «06» липня 2021 року), а також рішення наукової ради Грантонадавача про надання гранту (протокол № 28 від «20» липня 2021 року)

## **1. ЗАГАЛЬНА ІНФОРМАЦІЯ ПРО ПРОЄКТ**

Загальна тривалість виконання проєкту 2021 рік

Тривалість виконання Проєкту у 2021 році

Початок – 1 серпня 2021 року, за договором №211/Ф81/41481

(дата укладання Договору про виконання наукового дослідження і розробки)

Закінчення – 15 грудня 2021 року.

Загальна вартість Проєкту: 884 000,00 грн. (вісімсот вісімдесят чотири тисячі гривень, 00 копійок)

Вартість Проєкту по роках, грн.:

1-й рік 884 000,00 грн. (вісімсот вісімдесят чотири тисячі гривень, 00 копійок)

## **2. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ВИКОНАВЦІВ ПРОЄКТУ**

до виконання Проєкту залучено 6 виконавців, з них:

доктори наук 2;

кандидати наук 2;

інші працівники 2.

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

Проєктом не передбачено залучення субвиконавця

### **4. ОПИС ПРОЄКТУ**

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

Встановлення основних особливостей формування та кооперативної еволюції доменних структур і дефектів у сегнетоелектриках з рухливими іонними та електронними носіями заряду.

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

(а) розробити самоузгоджений опис еволюції доменної структури, спричиненою кінетикою заряджених дефектів;

(б) розвинути теорію кооперативних явищ, керованих дефектами в сегнетоелектриках;

(в) визначити роль впливу нелінійного поверхневого екранування на спонтанну поляризацію;

(г) розробити самоузгоджений опис кінетики доменної структури в сегнетоелектричних наноструктурах.

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

- Сучасний стан проблеми (до 400 знаків)

Стабілізація сегнетоелектричного стану в тонких сегнетоелектричних плівках може відбуватися завдяки нелінійному екрануванню адсорбованими зарядами. Нелінійне екранування має сильний вплив на стабільність сегнетоелектричної фази та вигляд фазових діаграм у сегнето-іонних системах. Проте не було розроблено комплексних підходів для розуміння природи кооперативної кінетики поверхневих іонів та доменних структур.

- Новизна Проєкту (до 400 знаків)

Вперше проведені аналітичні та чисельні розрахунки для загальних моделей заряджених та електронейтральних пружних дефектів, екранування поляризації об'ємними вільними носіями (електронами та дірками, а також іонним транспортом) та нелінійного екранування електричної поляризації поверхневими зарядами у сегнетоелектриках та антисегнетоелектриках. Розрахунки верифіковані за допомогою Раман-спектроскопії, ІЧ-поглинання та вимірювань процесів переносу електричного заряду.

- Методологія дослідження (до 400 знаків)

Використовуючи комбінований ЛГД-підхід, досліджена стійкість сегнето-іонних станів щодо формування доменної структури та сценаріїв реверсування поляризації в тонких плівках сегнетоелектриків та антисегнетоелектриків, покритих зарядженими дефектами. Тонкі плівки охарактеризовані за допомогою Раман-спектроскопії, ІЧ-поглинання та досліджень особливостей переносу електричного заряду.

### **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 час виконання роботи «Етап 1. Дослідження впливу поверхневого екранування спонтанної поляризації на еволюцію доменної структури та кооперативну динаміку заряджених дефектів та доменної структури у тонких плівках сегнето- та анти-сегнетоелектриків» повною мірою виконано 7 поставлених завдань:

1. Встановлений вплив флексоелектричного і електрострікційного зв'язків, температури і розмірних ефектів на динаміку доменної структури в тонких сегнетоелектричних плівках з зарядженими дефектами.

2. Встановлений вплив екранування спонтанної поляризації на кооперативну динаміку

- заряджених дефектів та доменної структури у тонких плівках сегнето- та анти-сегнетоелектриків.
3. Відпрацьована методика підготовки різних типів сегнетоелектриків для вимірювання їх спектрів Раманівського розсіювання та ІЧ поглинання.
  4. Проведений аналіз спектрів Раманівського розсіювання зразків сегнетоелектриків з домішками та дефектами для характеристикації зразків.
  5. Відпрацьована методика вимірювань характеристик явищ переносу у сегнетоелектриках з фотоактивними домішками та зарядженими дефектами.
  6. Визначена роль кооперативних явищ у характеристиках досліджуваних матеріалів на основі визначених експериментально особливостей явищ переносу та електро-хімічного реверсування поляризації сегнетоелектриків та антисегнетоелектриків.
  7. Порівняні теоретичні результати з експериментальними вимірюваннями характеристик явищ переносу в гетероструктурах, які містять нанорозмірні сегнетоелектрики.

Результатом (індикатором) виконання завдань є:

1. Проведений аналіз еволюції просторових розподілів поляризації, електричного поля і пружних деформацій, пов'язаних з кінетикою носіїв заряду в сегнето- та антисегнето-електричних тонких плівках.
2. Проведений аналіз екранування спонтанної поляризації на кооперативну динаміку заряджених дефектів та доменної структури у тонких плівках сегнето- та анти-сегнетоелектриків
3. Відпрацьована методика вимірювань характеристик явищ переносу у сегнетоелектриках з фотоактивними домішками та зарядженими дефектами.
4. Відпрацьована методика підготовки різних типів сегнетоелектриків для вимірювання Раманівського розсіювання та ІЧ поглинання. Вимірювання зразків.
5. Проведена спектральна характеристика зразків за допомогою спектрів Раманівського розсіювання
6. Проведений аналіз характеристик явищ переносу у досліджуваних сегнетоелектриках в рамках існуючих та розроблених теоретичних моделей

У сукупності проведений аналіз розвиває перспективи застосування тонких плівок сегнетоелектриків та антисегнетоелектриків з зарядженими поверхневими дефектами в якості базових елементів у нанорозмірних комірках енергонезалежної пам'яті з високою щільністю інформації, в якості елементів мультибітової пам'яті та нанорозмірних енергозберігаючих елементів.

Результати 1-го етапу Проекту опубліковані у 2-х статтях в журналах Q1 - Advanced Electronic Materials та Physical Review Applied, 1-ї статті в журналі Q2 – Journal of Applied Physics, 1-ї статті в журналі Q3, 2-х е-препрінтах і 3-х тезах:

1. I.S. Vorotiahin, A.N. Morozovska, E.A. Eliseev, Y.A. Genenko. Control of domain states in rhombohedral PZT films via misfit strains and surface charges. Advanced Electronic Materials, Article 100386 (2021) <https://doi.org/10.1002/aelm.202100386> (*Scopus and Web of Science, Q1*)
2. Anna N. Morozovska, Eugene A. Eliseev, Arpan Biswas, Nicholas V. Morozovsky, and Sergei V. Kalinin. Effect of surface ionic screening on polarization reversal and phase diagrams in thin antiferroelectric films for information and energy storage. Phys. Rev. Applied **16**, 044053 (2021) <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevApplied.16.044053> (*Scopus and Web of Science, Q1*)
3. Arpan Biswas, Anna N. Morozovska, Maxim Ziatdinov, Eugene A. Eliseev and Sergei V. Kalinin. Multi-objective Bayesian optimization of ferroelectric materials with interfacial control for memory and energy storage applications. J. Appl. Phys. **130**, 204102 (2021) (<https://doi.org/10.1063/5.0068903>) (*Scopus and Web of Science, Q2*)
4. Anna N. Morozovska, Eugene A. Eliseev, Arpan Biswas, Hanna V. Shevliakova, Nicholas V. Morozovsky, and Sergei V. Kalinin. Chemical control of polarization in thin strained films of a multiaxial ferroelectric: phase diagrams and polarization rotation (<http://arxiv.org/abs/2109.06787>). Відправлено до Phys. Rev.B. (*Scopus and Web of Science, Q1*)

5. O. M. Fesenko, A. D. Yaremkevich, T.V. Tsebrienko, O.P. Bydnyk, A. V. Semchenko, V. V. Sidski, and A. N. Morozovska. Effect of Nb cationic substitution on Raman spectra of SrBi<sub>2</sub>Ta<sub>2</sub>O<sub>9</sub> thin films (<http://arxiv.org/abs/2112.04331>)
6. Influence of the Annealing Temperature on the Structure and Properties of Bismuth Ferrites/V. Korskanov, O. Fesenko, T. Tsebrienko, A. Yaremkevych, N. Davydenko, V. Dolgoshey, A. Semchenko, V. Sidski, // J. Nano- Electron. Phys., Vol. 13 No 5, 05004, - 2021. DOI: [https://doi.org/10.21272/jnep.13\(5\).05004](https://doi.org/10.21272/jnep.13(5).05004) (*Scopus and Web of Science, Q3*)
7. N. V. Morozovsky, E. A. Eliseev, A. Biswas, H. V. Shevliakova, S. V. Kalinin and A. N. Morozovska. Control of Polar State of Thin Films of Multiaxial Ferroelectrics by Charge Density of Surface Ions: Peculiarities of Polarization Reorientation Characteristics and Phase Diagrams. X International seminar "Properties of ferroelectric and superionic systems", Uzhhorod, 26-27 October 2021, pp. 36-37
8. N. V. Morozovsky, E. A. Eliseev, A. Biswas, S. V. Kalinin and A. N. Morozovska. Control of Polarization Reversal and Phase Diagrams of Thin Antiferroelectric Films by Surface Ionic Screening: Possibility of Energy and Information Storage. X International seminar "Properties of ferroelectric and superionic systems", Uzhhorod, 26-27 October 2021, pp. 38-41
9. Effect of annealing and doping on nanostructure and Raman characteristics SrBi<sub>2</sub>(Ta<sub>x</sub>Nb<sub>1-x</sub>)<sub>2</sub>O<sub>9</sub> films // O. M. Fesenko, A. N. Morozovska, Yaremkevich A. D., Tsebrienko T.V.1, Budnyk O.P., Sidski V. V., Semchenko A. V. // Abstract book of the International research and practice conference: Nanotechnology and Nanomaterials (NANO-2021), с. 544, 2021

Публікація результатів проєкту у журналах Q1-Q2 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**

Проведені аналітичні та чисельні розрахунки для загальних моделей заряджених та електронейтральних пружних дефектів, екранування поляризації об'ємними вільними носіями (електронами та дірками, а також іонним транспортом) та нелінійного екранування електричної поляризації поверхневими зарядами у сегнетоелектриках та антисегнетоелектриках, не мають аналогів у світовій літературі. Результати проєкту опубліковані у вигляді 3-х оригінальних статей у фізичних журналах Q1-Q2.

## **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.**

Результати можуть бути використані для викладання загальних та спеціальних курсів фізики твердого тіла, фізики напівпровідників, нанофізики у вищих навчальних закладах Німеччини і України найвищого рівня акредитації.

Ідеї та рекомендації для керування полярними властивостями сегнето- та антисегнетоелектричних плівок з дефектами та продовження терміну їх придатності і покращення їх робочих характеристик сприятимуть їх використанню як базових елементів новітніх приладів наноелектроніки, комірок енергонезалежної пам'яті і елементів логіки, що може бути використані для зниження собівартості та подальшої комерціалізації.

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)

