

ЗАТВЕРДЖУЮ

Заступник директора

Інституту металофізики

ім. Г. В. Курдюмова НАН України,

д. ф. - м. н. В. В. Лізунов



АНОТОВАНИЙ ЗВІТ

**про виконану роботу в рамках реалізації проєкту
із виконання наукових досліджень і розробок**

**«Стрейнтроніка квазидвовимірних матеріалів з дефектами: компланарні гетероструктури
у порівнянні з ламелярними»**

Назва конкурсу: Спільний конкурс Ф81 науково-дослідних проєктів Державного фонду фундаментальних досліджень (ДФФД) і Німецького дослідницького співтовариства (DFG)
Реєстраційний номер Проєкту: Ф81/41600

Підстави для реалізації Проєкту з виконання наукових досліджень і розробок

«Стрейнтроніка квазидвовимірних матеріалів з дефектами: компланарні гетероструктури у порівнянні з ламелярними» (реєстраційний номер Ф81/41600)

Рішення наукової ради Національного фонду досліджень України щодо забезпечення укладання договорів про виконання наукових досліджень і розробок за рахунок грантової підтримки з переможцями спільного конкурсу наукових проєктів (Ф81) від «06» липня 2021 року № 26

1. ЗАГАЛЬНА ІНФОРМАЦІЯ ПРО ПРОЄКТ

Тривалість виконання Проєкту

Початок: 23.07.2021 року

Завершення: 15.12.2021 року

Загальна вартість Проєкту:

272800,00 грн. (двісті сімдесят дві тис. вісімсот грн.)

Вартість Проєкту по роках

1-й рік: 272800,00 грн. (двісті сімдесят дві тис. вісімсот грн.)

2-й рік: 0 (нуль) грн.

3-й рік: 0 (нуль) грн.

2. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ВИКОНАВЦІВ ПРОЄКТУ

До виконання Проєкту залучено 3 виконавці, з них:

доктори наук — 2; кандидати наук / доктори філософії (Ph.D.) — 1.

3. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ГРАНТООТРИМУВАЧА ТА ОРГАНІЗАЦІЮ СУБВИКОНАВЦЯ ПРОЄКТУ

Грантоотримувач: Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, бульвар Академіка Вернадського, 36, 03142 Київ, Україна.

Субвиконавця не залучено.

4. ОПИС ПРОЄКТУ

4.1. Мета Проєкту (до 200 знаків)

Проєкт спрямовано на застосування різномасштабного підходу для вивчення електронних і транспортних властивостей $2D$ -матеріалів. Мета полягає у дослідженні впливу дефектів і з'ясуванні способів застосування деформацій для регулювання електричних характеристик цих систем.

4.2. Основні завдання Проєкту (до 400 знаків)

Основні завдання проєкту стосуються деформаційного впливу на квазидвовірну структуру фосфореу задля регулювання та контролю забороненої зони в його електронно-енергетичному спектрі. Задля цього необхідно розрахувати густини електронних станів (DOS) фосфореу, розтягнутого/стиснутого (зсунутого) вздовж «крісельного» та «зигзагового» напрямків; побудувати відповідні графіки DOS, проаналізувавши та порівнявши результати щодо щільності з іншими наявними у літературі; на основі звіту підготувати матеріали для статті.

4.3. Детальний зміст Проєкту:

- Сучасний стан проблеми (до 400 знаків)

Наразі основні проблеми та виклики щодо практичного застосування сімейства $2D$ -матеріалів пов'язані з регулюванням їх електронних і транспортних властивостей: у графена відсутня заборонена зона, а у фосфореу вона наявна, втім її величина не завжди придатна для практичного використання.

- Новизна Проєкту (до 400 знаків)

Головна новизна проєкту полягає в тому, що розглядаються реалістичні випадки, пов'язані з наявністю різних типів дефектів у системі, які проявляють себе як розсіювачі носіїв заряду: атоми заміщення або адсорбовані, вакансії або їх комплекси з атомами домішки, межі зерен у полікристалічних зразках, атомні сходинки чи тераси в епітаксіальних, крайові дефекти, тощо.

- Методологія дослідження (до 400 знаків)

Комбінування аналітичних (статистично-термодинамічних і кінетичних) з чисельними (на основі методології Кубо–Грінвуда) підходів. Модель (Гамільтоніан) сильного зв'язку, тридіагоналізація Гамільтоніанової матриці, метод неперервних дробів, ефективний метод чисельного розв'язування кінетичного рівняння Шредингера за допомогою ортогональних Чебишових поліномів.

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)

Розвинуто сучасну концепцію «деформаційної інженерії» («стрейнтроніки») із застосуванням комплексу створених та імплементованих комп'ютерних програм для розрахунків електронної структури і транспортних характеристик, спотворених зовнішнім магнітним полем та/або механічними напруженнями, графено- та фосфореноподібних шарів і структур на їх основі з точковими та/або протяжними дефектами.

Виявлено, що ті чи інші просторові розподіли на/у графеноподібних шарах точкових дефектів (домішкових (ад)атомів, вакансій та їх комплексів) можуть спричиняти низку ефектів: змінювати тип основних носіїв струму, індукувати заборонену зону в енергетичному спектрі, істотно модифікувати вигляд електронно-концентраційної залежності електропровідності, поліпшувати функціональність графеноподібного шару, змінюючи електропровідність у десятки разів, посилювати чи послаблювати (й навіть повністю пригнічувати) асиметрію між електронною та дірковою провідностями. У найреалістичнішому випадку, за наявності на/у графеноподібних шарах, крім точкових

дефектів, ще й протяжних (нанобрижів, атомових сходинок і/або терас), можливі не лише зміни в електронно-концентраційній залежності електропровідності, а й поява низки нових фізичних ефектів: підвищення електропровідності у декілька разів за кореляції у взаємній орієнтації лінійних дефектів, чи то й у сотні разів за наявності ще й далекого порядку у розташуванні точкових дефектів, посилення анізотропії електропровідності та протидія, чи, навпаки, сприяння електронно-дірковій асиметрії, яку спричиняють точкові дефекти.

З'ясовано, що деформації зсувом, одновісним розтягненням і, особливо, їх комбінація, а також структурні недосконалості (точкові, чи то протяжні дефекти у різних конфігураціях) є потужним інструментом для досягнення нового рівня функціоналізації графенових, фосфоренових, а тому й інших квазидвовимірних матеріалів з точки зору їх практичного використання як елементів наноелектроніки. Насамперед, це стосується поліпшення їх електротранспортних властивостей шляхом регулювання ширини забороненої зони в енергетичному спектрі, достатньої для перетворення графенового (фосфоренового) матеріалу з напівметалічного (напівпровідникового) стану з відсутньою (наявною) щільною у спектрі у напівпровідниковий (напівметалічний) стан з регульованим значеннями ширини забороненої зони, що за певних комбінацій розподілу різного типу дефектів, деформаційного і зовнішнього магнітного полів можуть перевищувати її значення для тих матеріалів, які наразі є типовими для наноелектроніки.

Детально наукові результати виконання проєкту (у вигляді нових знань) висвітлено у науковому звіті та у наведеному нижче **переліку публікацій та апробацій** (що містять подяку Національному фонду досліджень України за підтримку).

Статті:

1. Sahalianov I.Yu., Radchenko T.M., Tatarenko V.A., Cuniberti G., Prylutskyu Yu.I. Straintronics in graphene: extra large electronic band gap induced by tensile and shear strains. *Journal of Applied Physics*. 2019. Vol. 126. No. 5. P. 054302-1–9. <https://doi.org/10.1063/1.5095600> (квартиль Q2).
2. Radchenko T.M., Tatarenko V.A., Lizunov V.V., Molodkin V.B., Golentus I.E., Sahalianov I.Yu., Prylutskyu Yu.I. Defect-pattern-induced fingerprints in the electron density of states of strained graphene layers: diffraction and simulation methods, *Physica Status Solidi B*. 2019. Vol. 256. No. 5. P. 1800406-1–8. <https://doi.org/10.1002/pssb.201800406> (квартиль Q2).
3. Szroeder P., Sahalianov I., Radchenko T., Tatarenko V., Prylutskyu Yu. The strain- and impurity-dependent electron states and catalytic activity of graphene in a static magnetic field. *Optical Materials*. 2019. Vol. 96. P. 109284-1–5. <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2019.109284> (квартиль Q1).
4. Sahalianov I.Yu., Radchenko T.M., Tatarenko V.A., Cuniberti G. Sensitivity to strains and defects for manipulating the conductivity of graphene. *EPL (Europhysics Letters)*. 2020. Vol. 132. No. 4. P. 48002-1–7. <https://doi.org/10.1209/0295-5075/132/48002> (квартиль Q2)
5. Radchenko T.M., Tatarenko V.A., Cuniberti G. Effects of external mechanical or magnetic fields and defects on electronic and transport properties of graphene. *Materials Today: Proceedings*. 2021. Vol. 35. P. 523–529. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2019.10.014>

Монографії (розділи у книгах):

6. Radchenko T.M., Sahalianov I.Yu., Tatarenko V.A., Prylutskyu Yu.I., Szroeder P., Kempinski M., Kempinski W. The impact of uniaxial strain and defect pattern on magnetoelectronic and transport properties of graphene. *Handbook of Graphene, Volume 1: Growth, Synthesis, and Functionalization*. 2019. Editors: Celasco E., Chaika A. Beverly, MA: John Wiley & Sons, Inc., Scrivener Publishing LLC. Ch. 14. P. 451–502. <https://doi.org/10.1002/9781119468455.ch14>

Тези конференцій:

7. Radchenko T.M., Tatarenko V.A. Electronic and transport properties of graphene: effects of both the point or line defects and the external mechanical or magnetic fields. *Збірка тез конференції «Функціональні матеріали для інноваційної енергетики»*. 13–15 травня 2019 р., Київ. С. 70.
8. Tatarenko V.A., Radchenko T.M. Effects of defect pattern and external magnetic or mechanical fields on electronic and transport properties of graphene layer. *Abstract Book of XVII International Freik Conference Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems*. May 20–25, 2019, Ivano-Frankivsk. P. 23.

9. Радченко Т.М., Татаренко В.А. Вплив деформаційного та зовнішнього магнітного полів на електронні й електрокаталітичні характеристики дефектного графенового шару. *Тези VI наукової конференції «Нанорозмірні системи: будова, властивості, технології»*. 4–6 грудня 2019 р., Київ. С. 169.
10. Radchenko T.M., Tatarenko V.A. Tailored band gap in electronic structure of graphene: uniaxial tensile vs. shear strains and their combinations. *Тези VI наукової конференції «Нанорозмірні системи: будова, властивості, технології»*. 4–6 грудня 2019 р., Київ. С. 222.
11. Радченко Т.М., Татаренко В.А. Чутливість до деформацій і дефектів та їх комбінований вплив на електропровідність графену. *Матеріали II Міжнародної конференції «Функціональні матеріали для інноваційної енергетики»*. 9–11 червня 2020 р., Київ. С. 64.
12. Соломенко А.Г., Сагалянов І.Ю., Радченко Т.М., Татаренко В.А. Стрейтроніка у фосфорені: вплив деформацій розтягу, зсуву та їх комбінацій на електронні властивості. *Матеріали Всеукраїнської конференції молодих вчених «Сучасне матеріалознавство. Матеріали та технології (СММТ-2021)»*. 19–20 жовтня 2021 р., Київ. С. 9.

Окрім того, як зазначено у п. 5.1 Технічного завдання до Проекту, висвітлені в останньому розділі заключного звіту результати буде використано в статті, яка наразі готується для високореєтингового (індексованого і Scopus і Web of Science) журналу, з відповідною подякою Національному фонду досліджень України за підтримку.

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

Очікувані наукові результати не матимуть аналогів в Україні та будуть відповідати світовому науковому рівню. Головними перевагами їх у порівнянні зі світовими будуть наступні: адекватність екстенсивної модельної параметризації; короткочасний (півроку) термін реалізації наукових задумів та ідей; набагато дешевші за світові витрати на фінансування Проекту.

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

Оскільки наукові дослідження в рамках проекту мають фундаментальний характер, то головним результатом слугуватиме одержання нових знань.

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

Одержані в процесі реалізації проекту нові результати просунуть вперед здобутки в галузі стейтроніки завдяки комбінуванню атомістичного моделювання та екстенсивної модельної параметризації з мультимасштабним моделюванням електронної структури у двовимірних структурах. Одержані нові результати також будуть корисними при їх імплементації у (нано)електроніці гнучких і розтяжних пристроїв на основі 2D-матеріалів.

Примітка: Анований звіт не повинен містити відомостей, заборонених до відкритого опублікування.

Науковий керівник Проекту

провідний науковий співробітник

відділу теорії металічного стану

Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України,

член-кор. НАН України, д.ф.-м.н., проф.

Татаренко Валентин Андрійович


(підпис)