

# Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0224U032810

Державний реєстраційний номер: 0124U003757

Відкрита

Дата реєстрації: 05-12-2024



## 1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Метастабільні феро-йонні стани у нанорозмірних багатовісних фероелектриках та анти-фероелектриках.

Початок етапу: 08-2024

Закінчення етапу: 12-2024

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

## 2. Виконавець

Назва організації: Інститут фізики Національної академії наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05417302

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: проспект Науки, буд. 46, м. Київ, 03680, Україна

Телефон: 380445251220

Телефон: 380445251589

E-mail: fizyka@iop.kiev.ua

WWW: <http://www.iop.kiev.ua>

## 3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Інститут фізики Національної академії наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05417302

Адреса: проспект Науки, буд. 46, м. Київ, 03680, Україна

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Телефон: 380445251220

Телефон: 380445251589

E-mail: fizyka@iop.kiev.ua

WWW: <http://www.iop.kiev.ua>

## 4. Джерела та напрями фінансування

Підстава для проведення робіт: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

КПКВК: 2201300

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

## Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 1655.005 тис. грн.

## 5. Науково-технічна робота

### Назва роботи (укр)

Багатократно-вироджені метастабільні стани спонтанної поляризації нанофероїків: теорія, експеримент та перспективи для цифрової наноелектроніки.

### Назва роботи (англ)

Manyfold-degenerated metastable states of spontaneous polarization in nanoferroics: theory, experiment and perspectives for digital nanoelectronics.

### Реферат (укр)

Знайдені умови виникнення феро-йонного стану для випадку тонких плівок фероелектрика  $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ , наночастинок багатовісного фероелектрика  $\text{BaTiO}_3$  у середовищах з різною електрохімічною активністю, наночастинок багатовісного фероелектрика-антифероелектрика  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$ , одновісного фероелектрика-антифероелектрика  $\text{Hf}_x\text{Zr}_{1-x}\text{O}_2$  з адсорбованими іонами на поверхні, та наночастинок фероелектрика  $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$  в іонних водних розчинах. Вперше знайдена залежність умов виникнення феро-йонного стану феріелектричного типу та багатократно-вироджених метастабільних лабіринтних доменних структур від розміру наночастинок  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$  та  $\text{Hf}_x\text{Zr}_{1-x}\text{O}_2$ , їх хімічного складу «x», концентрації адсорбованих іонів на поверхні частинок, діелектричних властивостей оточуючого середовища та температури. Вперше виявлено, що шари заряджених дефектів іонної природи на інтерфейсах приводять до утворення багатократно-вироджених метастабільних станів доменної структури типу «зубів дракона» у тонких плівках  $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$  з бішаровою структурою. Проведений аналіз ІЧ-спектрів і Раман-спектрів композитів з наночастинками  $\text{BaTiO}_3$  та  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$  та встановлені їх кореляції з вольт-фарадними та вольт-амперними характеристиками нанокompозитів. Виявлено, що особливості ІЧ-спектрів та Раман-спектрів наночастинок  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$  при  $x=0,1$  та  $x\geq 0,15$  відповідають фазовим переходам від феріелектричного до антифероелектричного стану, та від антифероелектричного до неполярного стану, відповідно. Вперше виявлено експериментально релаксоро-подібну температурну поведінку діелектричної проникності композитів із вмістом наночастинок  $\text{BaTiO}_3$  більше 25% та гістерезисні вольт-амперні характеристики цих наноматеріалів за певних умов.

### Реферат (англ)

The conditions for the emergence of the ferro-ionic state have been found for the case of thin films of the ferroelectric  $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ , nanoparticles of the multiaxial ferroelectric  $\text{BaTiO}_3$  in media with different electrochemical activities, nanoparticles of the multiaxial ferroelectric-antiferroelectric  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$ , nanoparticles of the uniaxial ferroelectric-antiferroelectric  $\text{Hf}_x\text{Zr}_{1-x}\text{O}_2$  with adsorbed ions at the surface, and nanoparticles of the ferroelectric  $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$  in ionic aqueous solutions. For the first time, the dependence of the conditions for the emergence of a ferro-ionic state of the ferrielectric type and multiply-degenerated metastable labyrinth domain structures on the size of  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$  and  $\text{Hf}_x\text{Zr}_{1-x}\text{O}_2$  nanoparticles, their chemical composition "x", the concentration of adsorbed ions on the surface of the particles, the dielectric properties of the surrounding environment and temperature was found. For the first time, it was found that layers of charged defects of ionic nature at the interfaces lead to the formation of multiply-degenerated metastable states of the "dragon's teeth" type domain structure in thin films of  $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$  with a bilayer structure. The analysis of IR spectra and Raman spectra of composites with  $\text{BaTiO}_3$  and  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$  nanoparticles was carried out and their correlations with the current-voltage and current-voltage characteristics of nanocomposites were established. It was found that the features of the IR and Raman spectra of  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$  nanoparticles at  $x=0,1$  and  $x\geq 0,15$  correspond to phase transitions from the ferrielectric to the antiferroelectric state, and from the antiferroelectric to the nonpolar state, respectively. For the first time, the relaxor-like temperature behavior of the dielectric constant of composites with a  $\text{BaTiO}_3$  nanoparticle content of more than 25% and the hysteresis current-voltage characteristics of these nanomaterials under certain conditions were experimentally revealed.

Індекс УДК: 538.91Ф405; 548.5.01

Коди тематичних рубрик НТІ: 29.19.15

## 6. Науково-технічна продукція (НТП)

### НТП 1

**Назва продукції (укр):** Багатократно-вироджені метастабільні стани спонтанної електричної поляризації, індукованих розмірними ефектами у нанофероїках.

**Назва продукції (англ):** The multiply-degenerated metastable states of spontaneous electric polarization induced by size effects in nanoferroics.

**Очікувані результати:** Матеріали, Методи, теорії

**Галузь застосування:** 72.19

**Опис продукції (укр):** Знайдені та проаналізовані умови виникнення багатократно енергетично-вироджених метастабільних станів електричної поляризації, індукованих розмірними ефектами у нанофероїках. Зокрема, визначені умови виникнення феро-йонного стану у тонких бішарових плівках  $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$  та наночастинках багатовісних фероелектриків-антифероелектриків  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$ , якому притаманна значна кількість метастабільних станів доменної структури. Встановлені механізми впливу розмірного ефекту та нелінійного поверхневого екранування на феро-йонний стан у наночастинках  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$ ,  $\text{Hf}_x\text{Zr}_{1-x}\text{O}_2$  та  $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ . Результати отримані вперше, не мають аналогів та є важливими для розвитку передової світової фундаментальної науки та новітніх застосувань у нанoeлектроніці в країнах-лідерах, США та ЄС. Втім ці результати в першу чергу важливі для підтримки розвитку передової науки в Україні.

**Соціально-економічна спрямованість НТП:** Розробка теорії

**Стадія завершеності НТП:** Звіт по НДДКР

**Впровадження НТП:** Не впроваджено

**Строки впровадження:**

**Виробник продукції:** Інститут фізики НАН України

**Споживачі продукції:**

**Перспективні ринки:**

**Права інтелектуальної власності:** За договорами

**Форми та умови передачі продукції:** Спільні НДДКР

## 7. Бібліографічний опис

1. Jonghee Yang, Anton V. Ievlev, Anna N. Morozovska, Eugene Eliseev, Jonathan D Poplawsky, Devin Goodling, Robert Jackson Spurling, Jon-Paul Maria, Sergei V. Kalinin, Yongtao Liu. Coexistence and interplay of two ferroelectric mechanisms in  $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ . *Advanced Materials* 36(39), 2404925 (2024), <https://doi.org/10.1002/adma.202404925>

2. Oleksandr S. Pylypchuk, Serhii E. Ivanchenko, Yuriy O. Zagorodniy, Mykola E. Yeliseiev, Oleksandr V. Shyrovok, Oksana V. Leschenko, Oleksii Berezhnykov, Denis Stetsenko, Sreco Davor Skapin, Eugene A. Eliseev, Vladimir N. Poroshin, Victor V. Vainberg, and Anna N. Morozovska. Relaxor-like Behavior of the Dielectric Response of Dense Ferroelectric Composites. *Ceramics International*, 50, Issue 22, Part A, 45465-45478 (2024), <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2024.08.385>

3. Anna N. Morozovska, Eugene A. Eliseev, Igor V. Fesych, Yuriy O. Zagorodniy, Oleksandr S. Pylypchuk, Evgenii V. Leonenko, Maxim V. Rallev, Andrii D. Yaremkevych, Lesya Demchenko, Sergei V. Kalinin, and Olena M. Fesenko. Reentrant polar phase induced by the ferro-ionic coupling in  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$  nanoparticles. Submitted to *Physical Review B*, <https://doi.org/10.48550/arXiv.2408.12856>

4. Sergei V. Kalinin, Eugene A. Eliseev, and Anna N. Morozovska. Water Desalination by Ferroelectric Nanoparticles. Submitted to *Physical Review Applied*, <https://doi.org/10.48550/arXiv.2409.07318>

5. Eugene A. Eliseev, Sergei V. Kalinin, Anna N. Morozovska. Ferro-ionic States and Domains Morphology in  $\text{Hf}_x\text{Zr}_{1-x}\text{O}_2$

6. Juliya M. Gudenko, Oleksandr S. Pylypchuk, Victor V. Vainberg, Igor A. Gvozдовskyy, Serhii E. Ivanchenko, Denis O. Stetsenko, Nicholas V. Morozovsky, Volodymir N. Poroshin, Eugene A. Eliseev, and Anna N. Morozovska. Ferroelectric Nanoparticles in Liquid Crystals: The Role of Ionic Transport at Small Concentrations of the Nanoparticles. Accepted to the Semiconductor Physics, Optoelectronics and Quantum Electronics, 28, 1 (2025), <https://doi.org/10.48550/arXiv.2411.14118>.

7. Morozovska A.N., Pylypchuk O.S., Fesenko O.M., Yaremkevych A.D., Rallev M.V., Fesych I.V., Zagorodniy Y.O. and Eliseev E.A. The influence of the long-range crosstalk interactions between ferroelectric domains in Bi1-xSmxFeO3 nanoparticles on the physical properties of the Bi1-xSmxFeO3-based nanocomposites. 12th International Conference "Nanotechnologies and Nanomaterials" (NANO-2024) 21 - 24 August 2024. p. 285. <https://nano-conference.iop.kiev.ua/en/>

8. Bereznykov O.V., Pylypchuk O.S., Ivanchenko S.E., Stetsenko D.O., and Morozovska A.N. Model of effective permittivity for dense ferroelectric nanocomposites. Bogolyubov Kyiv Conference. Problems of Theoretical and Mathematical Physics. September 24-26, 2024, Kyiv, Ukraine, <https://indico.bitp.kiev.ua/event/13/contributions/353/>

9. Eugene A. Eliseev and Anna N. Morozovska.. Polaronic model of the Giant Dielectric and Pyroelectric Responses of Ferroelectric Fine-Grained Ceramics. Bogolyubov Kyiv Conference. Problems of Theoretical and Mathematical Physics. September 24-26, 2024, Kyiv, Ukraine, <https://indico.bitp.kiev.ua/event/13/contributions/368/>

10. Eugene A. Eliseev and Anna N. Morozovska..Analytical Description of Size Effects, Strains and Ferro-ionic Coupling in Si-Compatible Nanosized Ferroelectrics. Bogolyubov Kyiv Conference. Problems of Theoretical and Mathematical Physics. September 24-26, 2024, Kyiv, Ukraine, <https://indico.bitp.kiev.ua/event/13/contributions/331/>

11. Juliya M. Gudenko, Oleksandr S. Pylypchuk, Igor A. Gvozдовskyy, Serhii E. Ivanchenko, Volodymir N. Poroshin. The influence of the ultra-small concentrations of ferroelectric nanoparticles on the ionic transport in liquid crystals. International Scientific Conference Electronics and Applied Physics APHYS'2024, October, 22-25, 2024, Kyiv, Ukraine. [http://aphys.knu.ua/images/APHYS\\_Book\\_2024\\_content.pdf](http://aphys.knu.ua/images/APHYS_Book_2024_content.pdf)

## 8. Звітна документація

**Кількість сторінок в звіті:** 13

**Мова звіту:** Українська

**Кількість файлів у звіті:** 1

## 9. Заключні відомості

### Перелік осіб-виконавців

Гуденко Юлія Миколаївна (к. ф.-м. н.)

Дем'яник Олег Юрійович

Леоненко Євген Володимирович (к. х. н.)

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

Пилипчук Олександр Сергійович (к. ф.-м. н., с.д.)

Раллев Максим Віталійович

Фесенко Олена Мар'янівна (к. ф.-м. н., старший науковий співробітник)

Яремкевич Андрій Дмитрович (д.філософ)

**Керівник організації:**

Бондар Михайло Віталійович (д. ф.-м. н., член-кор.)

**Керівники роботи:**

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

**Керівник відділу реєстрації наукової діяльності  
УкрІНТЕІ**



Юрченко Т.А.