Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0219U102112

Державний реєстраційний номер: 0119U101820

Відкрита

Дата реєстрації: 19-12-2019

1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Вивчення гладких перовскітових поверхонь (001) STO з метою отримання детальної інформації стосовно приповерхневої атомної структури

Початок етапу: 05-2019

Закінчення етапу: 12-2019

Вид звітного документа: Остаточний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Фізико-технічний інститут низьких температур імені Б. І. Вєркіна Національної академії наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 03534601

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: проспект Науки, 47, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61103, Україна

Телефон: 380573402223

E-mail: ilt@ilt.kharkov.ua

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Міністерство освіти і науки України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 38621185

Адреса: просп. Перемоги, 10, м. Київ, Київська обл., 01135, Україна

Підпорядкованість: Кабінет Міністрів України

Телефон: 380444813221

E-mail: mon@mon.gov.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: 2201380

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 100 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Низькотемпературні характеристики та ab-initio розрахунки аномальної поведінки структурних, люмінесцентних та провідних властивостей поверхонь перовскітів ABO3

Назва роботи (англ)

Low temperature characterization and ab-initio calculations of anomalous behavior of structural, luminescent and conductivity properties of ABO3 perovskite surfaces

Реферат (укр)

Проведені дослідження гладких перовскітових поверхонь (001) SrTiO3 (STO) з метою отримання детальної інформації стосовно поверхневої атомної структури методом RHEED від 5,5 до 300 K. Раманівське розсіювання було застосоване для встановлення якості зразків STO. У роботі виявлено п'ять структурних аномалій в залежності від температури, що свідчать про структурні перетворення на поверхні при різних температурах. Деякі з цих аномалій корелюють з відомими даними для об'єму. Якщо у об'ємі STO близько 105 K реалізується антисегнетодісторсійний фазовий перехід від кубічної до тетрагональної структури, то схоже перетворення на поверхні поширюється на діапазон від 70 до 120 K. Нижче 7 K, а також близько 35 K спостерігаються аномалії, що розглядаються у об'ємі як можливий кросовер між ростом сегнетоелектричного зміщення при зниженні температури і квантово–механічною стабілізацією росту за рахунок нульового руху атомів у кристалі. Інші аномалії раніше не спостерігались, вони пов'язані виключно з поверхневими шарами. Диференціація значень параметрів решітки в залежності від глибини проникнення електронів у кристал виявило немонотонний характер зміни таких параметрів, що пояснюється конкуренцією вкладів шарів TiO2 і SrO. На самій поверхні реалізуються дві можливості, тобто досягається максимальне або мінімальне значення параметрів. Мінімальні значення реалізуються при температурах, де структурні перетворення не спостерігаються. В зонах же активної структурної трансформації параметри решітки у 1–му поверхневому шарі приймають максимальні значення, що може розглядатися як індикатор структурного перетворення взагалі і застосовуватися як метод виявлення перетворення. Отримана інформація є необхідною для досягнення комплексного спільного експериментального та теоретичного детального розуміння структурних та люмінесцентних властивостей поверхонь перовскітів ABO3 з метою підвищення ефективності їх використання в мікроелектроніці та каталізі.

Реферат (англ)

The study of smooth perovskite (001) SrTiO3 (STO) surfaces was performed to obtain detailed information on the surface atomic structure by the RHEED method from 5.5 to 300 K. Raman scattering was applied to determine the quality of STO samples. Five structural anomalies are found, depending on the temperature, indicating structural changes on the surface at different temperatures. Some of these anomalies correlate with known bulk data. If in the bulk of STO antiferrodistortive phase transition from the cubic to tetragonal phases occurs at 105 K, then similar transformation on the surface extends from 70 to 120 K. The anomalies below 7 K and about 35 K are considered in the bulk as a possible crossover between the growth of ferroelectric displacement with decreasing temperature and quantum-mechanical stabilization of growth due to the zero motion of atoms in the crystal. Other anomalies were not previously observed, they are solely related to surface layers. The differentiation of the lattice parameter values depending on the depth of electron penetration into the crystal revealed the non-monotonic nature of the change of such parameters, which is explained by the competition of the TiO2 and SrO layer contributions. On the surface two possibilities are realized, the maximum or minimum values of the parameters are reached. Minimum values are realized at temperatures where structural transformations are not observed. In zones of active structural transformation, the lattice parameters in the 1st surface layer take maximum values, which can be considered as an indicator of structural transformation in general and used as a method of detecting transformation. The information obtained is necessary to achieve a comprehensive joint experimental and theoretical detailed understanding of the structural and luminescent properties of ABO3 perovskite surfaces in order to increase their efficiency in microelectronics and catalysis.

Індекс УДК: 537.533.73, 53.072;53:004, 666.655; 621.315.612, 53.072; 53:004; 537.533.73; 666.655; 621.315.612

Коди тематичних рубрик НТІ: 29.35.41, 29.03.77, 47.09.33

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Дослідження гладких перовскітових поверхонь (001) SrTiO3 з метою отримання детальної інформації стосовно приповерхневої атомної структури

Назва продукції (англ): Study of smooth perovskite (001) SrTiO3 surfaces in order to obtain detailed information on the surface atomic structure

Очікувані результати: Матеріали

Галузь застосування: Нові матеріали

Опис продукції (укр): Властивості поверхонь перовскітів ABO3 сильно залежать не тільки від їхньої досконалості, але також від реконструкції, дефектів, а також від полярності, виходу поверхонь AO або BO2 та температури (завдяки фазовим переходам, що пов'язані з об'ємом та поверхнею). У цьому проекті поєднується систематичне вивчення низькотемпературних структурних характеристик та ab-initio розрахунки аномальної поведінки поверхневих структурних та люмінесцентних властивостей перовскітів. Особлива увага приділяється вивченню за допомогою низькотемпературної високоенергетичної електронної дифракції як ідеальних, так і дефектних поверхонь, що супроводжується сучасним багатобічним гібридним DFT моделюванням структури та різних точкових дефектів, та зіставленням отриманих результатів з даними раманівського розсіювання та катодолюмінесценції. Розуміння та контроль поверхневих властивостей найбільш поширених перовскітів ABO3 (насамперед, SrTiO3) є особливо важливим для застосування в мікроелектроніці та каталізі.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження: 05.201912.2019

Виробник продукції: ФТІНТ ім. Б. І. Вєркіна НАН України

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: визначає МОН

7. Бібліографічний опис

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 61

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Керівник організації:

Гнатченко Сергій Леонідович (д. ф.-м. н., професор, акад.)

Керівники роботи:

Крайнюкова Ніна Василівна (к. ф.-м. н.)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.