Реєстраційна картка НДДКР

Державний реєстраційний номер: 0121U112812

Відкрита

Дата реєстрації: 06-09-2021

Статус виконавця: 17 - головний виконавець

1. Загальні відомості

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

КПКВК: 2201300

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Загальний обсяг фінансування (тис. грн.): 272.800

У тому числі по роках (тис. грн.):

Рік	Фінансування
2021	272.800

2. Замовник

Назва організації: Національний фонд досліджень України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 42734019

Адреса: вул. Бориса Грінченка, 1, м. Київ, 01001, Україна

Підпорядкованість: Кабінет Міністрів України

Телефон: 380442981622

Телефон: 380442981622

3. Виконавець

Назва організації: Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова Національної академії наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05417331

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: бульвар Академіка Вернадського, буд. 36, м. Київ, 03142, Україна

Телефон: 380444243110

Телефон: 380444241005

E-mail: metall@imp.kiev.ua

WWW: https://www.imp.kiev.ua/

4. Співвиконавець

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Стрейнтроніка квазидвовимірних матеріалів з дефектами: компланарні гетероструктури у порівнянні з ламелярними

Назва роботи (англ)

Straintronics of imperfect quasi-two-dimensional materials: coplanar vs lamellar heterostructures

Мета роботи (укр)

Проект спрямовано на застосування різномасштабного підходу для систематичного вивчення, насамперед, електронних транспортних властивостей гетероструктур з різних 2D-матеріалів. Мета проекту полягає у: (1) дослідженні впливу різного типу дефектів, від точкових, таких як вакансії чи домішкові атоми, до протяжних (меж зерен, атомних сходинок та терас, зморшок тощо); (2) з'ясуванні способів застосування далекосяжних (однорідних) або локальних (неоднорідних) деформацій задля реґулювання електричних характеристик цих систем. В якості базисної системи спочатку ми розглянемо гетероструктури графен/фосфорен, а на основі одержаних результатів на пізнішому етапі проекту можна розглянути й інші комбінації 2D-матеріалів. З обчислювальної точки зору поставлена задача складається з двох взаємодоповнювальних аспектів: дослідження когерентного транспорту з використанням атомістичних підходів із застосуванням функцій Ґріна у масштабі декількох нанометрів та динаміки хвильового пакета у прямому просторі у масштабі кількох сотень нанометрів. Поєднання цих двох підходів здійснюватиметься шляхом забезпечення (а) структурною інформацією для дефектних структур та (б) ефективною параметризацією моделей для різних сценаріїв (розподілу різного типу дефектів та деформаційних полів) у відповідності до проекту. Результати проекту можуть забезпечити нові шляхи інженерії (дизайну) гетероструктур на основі 2D-матеріалів дефектоутворенням та деформуванням, а тому пролити світло на подальші потенціальні використання таких систем у наноелектроніці.

Мета роботи (англ)

The project aims at exploiting a scale-bridging approach to systematically study the electronic transport properties of heterostructures made of different 2D materials. Our focus will lie on: (1) the influence of various types of defects, ranging from local perturbations such as vacancies or impurity atoms up to extended defects (grain boundaries, atomic steps and terraces, wrinkles, etc.); (2) how globally (homogeneous) or locally (heterogeneous) applied strains may be used to control the electrical response of these systems. As a reference point, we will first address graphene/phosphorene heterostructures; based on the obtained results other combinations of 2D materials may be dealt within a later stage of the project. From the computational point of view, we will approach the problem from two complementary sides: coherent transport using atomistic Green's function approaches at the level of few nanometers, and real-space wave packet dynamics to treat few hundred of nanometers. Bridging between the two approaches will be carried out by providing (a) structural information for defective structures, and (b) efficient parametrizations for the various scenarios relevant to the proposal (different types of defects and strains). The outcomes of the project may provide new routes for defect and strain engineering (design) of the 2D-materials-based heterostructures, and thus shed further light on the potential of such systems in nanoelectronic applications.

Пріоритетний напрям науково-технічної діяльності: Фундаментальні наукові дослідження з найважливіших проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Вид роботи: 39 - фундаментальна

Очікувані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Наукові дослідження в галузі новітніх квазидвовимірних матеріалів та природничих наук в цілому

6. Етапи виконання

Номер	Початок	Закінчення	Звітний документ	Назва етапу
1	08.2021	12.2021	Остаточний звіт	Оптимізація комп'ютерної програми для розрахунку електронного спектру ідеального фосфорену та деформованого одновісним розтяганням. Розрахунок густини електронних станів фосфорену, розтягнутого/стиснутого (зсунутого) вздовж одного або іншого напрямку межі зразка

7. Індекс УДК тематичних рубрик НТІ

Коди тематичних рубрик НТІ: 53.41.43, 55.19.03.15, 29.19.11, 29.19.23, 47.09.48

Індекс УДК: 669:66-963, 621.9.013:621.7.014.2, 548.571; 548.4 , 539.21:537.1; 548:537.1; 538.95Ф405:537.1 , 621.373

8. Заключні відомості

Керівник організації:

Татаренко Валентин Андрійович (д.ф.-м.н., професор, член-кор.)

Керівники роботи:

Радченко Тарас Михайлович (д. ф.-м. н., с.н.с.)

Відповідальний за подання документів: Радченко Т.М. (Тел.: +38 (044) 424-90-42)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.