

АННОТАЦИЯ

диссертации на соискание степени доктора философии (PhD)
по специальности 8D05301- «Физика»

Дуйсеновой Айнур Гайсиевны

Моделирование особенностей транспортных свойств электронных наноустройств на основе фуллереноподобных материалов

Актуальность темы

Нанотехнологии стремительно развиваются, оказывая революционное влияние на различные научные области, включая микроэлектронику и оптоэлектронику. В этих областях активно изучается потенциал применения наноразмерных материалов. Гибкость полупроводниковых материалов стала катализатором бурного роста полупроводниковой промышленности за последние десятилетия. Закон Мура гласит, что вычислительная мощность или скорость микропроцессора удваивается каждые полтора-два года, благодаря постоянному увеличению количества транзисторов на единице площади полупроводникового кристалла [1]. Эта тенденция стала нормой и целью развития полупроводниковых технологий и производства. Однако предел вычислительной мощности еще не достигнут. Передовые технологии микросхем направлены на разработку наноэлектронных устройств, которые позволят преодолеть ограничения миниатюризации традиционных транзисторов и открыть путь к новым поколениям устройств, основанных на альтернативных принципах. Материалы и устройства в наноэлектронике настолько малы, что необходимо учитывать межатомные контакты и квантово-механические свойства этих материалов. С быстрым развитием миниатюризации и масштабируемой интеграции в микроэлектронной промышленности, разработка и производство миниатюрных материалов с требуемыми механическими, электрическими, тепловыми и оптическими свойствами остается ключевой задачей.

В стремлении к созданию все более компактных и высокопроизводительных электронных устройств, в качестве элементной базы квантовых технологий применяются фуллереноподобные наноматериалы, такие как фуллерены, углеродные нанотрубки, графены и схожие с ними структуры [2-6]. После того как в 2004 г. Геймом и Новоселовым был получен графен методом микромеханического отшелушивания, бурная исследовательская деятельность привела к развитию многих других слоистых материалов. Сегодня большое семейство двумерных материалов обладает широким спектром физических свойств, включая изоляторы, полупроводники, металлы, полуметаллы и сверхпроводники, а также недавно открытые двумерные ферромагнитные материалы. Что еще более важно, двумерные материалы чрезвычайно чувствительны к внешнему воздействию, таким как электрическое и магнитное поле, что делает их идеальными кандидатами для применения в электронике, оптоэлектронике и спинтронике.

За последние несколько лет фуллереноподобные материалы занимают особую нишу в современной науке, акцентируя внимание на их уникальных свойствах, за которыми открываются новые возможности применения в физике конденсированного состояния и не только. Уникальная структура фуллеренов обоснована тем, что ее атомная конфигурация может заключать внутри своего каркаса атомы, молекулы, и другие вещества. Это открытие стало настоящим прорывом в науке, так как представляет собой новую молекулярную форму существования углерода. Необычные свойства фуллеренов обуславливают интерес к ним со стороны исследователей, как с точки зрения фундаментальной науки, так и для потенциальных прикладных применений.

В этом контексте углеродные нанотрубки (УНТ), обладающие уникальными свойствами, также рассматриваются как перспективный материал с широким спектром потенциальных применений. Применение углеродных нанотрубок в нанoeлектронике связано с сверхмалыми размерами, что позволяет использовать их для миниатюризации изделий, также они являются хорошими проводниками тока. Эмиссионные свойства УНТ позволяют использовать их для создания новых источников света, дисплеев. Высокая химическая стойкость делают нанотрубки более устойчивыми к воздействию окружающей среды, а их способность присоединять химические радикалы, позволяют модифицировать свойства для создания новых материалов [7]. Также необходимо учитывать, что одним из главных преимуществ нанотрубок является квантовый баллистический механизм проводимости, который обеспечивает движение электронов при низких температурах без рассеяния. Такие свойства, как высокая скорость подвижности носителей заряда, скорость насыщения дрейфа и сверхмалая внутренняя емкость затвора, позволяют использовать углеродные нанотрубки в качестве идеального материала для радиочастотных устройств. В целом, углеродные наноматериалы, такие как коаксиально соединяемые полипризмановые нанотрубки и закрученный графен, могут стать ключом к разработке новых, более миниатюрных, энергоэффективных и функциональных электронных устройств.

Перспективным направлением для дальнейшей миниатюризации электронных элементов является использование эффекта коррелированного туннелирования. Этот эффект был предсказан учеными Д. В. Аверин и К. К. Лихарев еще в начале 1980-х годов [8,9]. Открытие этого явления внесло значимый вклад в мир электроники и стало ключом к дальнейшей миниатюризации электронных компонентов. Это явление было основано на кулоновской блокаде, при котором движение электронов упорядоченно под воздействием электрического поля. Благодаря этому эффекту стало возможно создание одноэлектронных приборов, которые используют одиночные молекулы в качестве «ядра». Одноэлектронные приборы имеют ряд уникальных свойств, таких как низкое энергопотребление, высокая скорость работы и сверхвысокая плотность упаковки. Коррелированное туннелирование одиночных электронов является универсальным явлением, которое может быть зарегистрировано в самых разных материалах. Список

таких материалов обширен, к ним можно отнести металлы, полупроводники и сверхпроводники, также углеродные и молекулярные структуры. Успех в области разработки методов характеристики и манипулирования отдельными атомами и молекулами, а также прогресс в достижениях первопринципного моделирования процесса туннелирования электронов через молекулы, позволили открыть новый путь к разработке архитектуры новых нанoeлектронных устройств.

Большое значение имеют исследования электронных состояний и транспортных свойств, как для понимания физики таких небольших устройств, так и для применения. Выдвижение на первый план квантовых эффектов в нанометровом масштабе открыло множество направлений фундаментальных исследований, включая нанoeлектронику и спиновую электронику. Уже ранее достигнутые успехи привели к таким важным открытиям, как гигантское магнитосопротивление и туннельное магнитосопротивление в многослойных тонких пленках, что способствовало значительным достижениям в области магнитного зондирования и в области хранения данных. При интеграции ферромагнитного элемента в одноэлектронный транзистор (ОЭТ) возникают условия, при которых возможно взаимодействовать между кулоновской блокадой и спиновыми состояниями электронов. Такие взаимодействия могут привести к магнитокулоновскому эффекту, который проявляет свойства магнитотранспорта [10].

ОЭТ рассматриваются как перспективная альтернатива технологии комплементарных металлооксидных полупроводников благодаря низкому энергопотреблению и высокому быстродействию чувствительных датчиков, памяти, мультилогических устройств, а также в нанометрологии и в квантовых вычислениях. Последние обещают произвести прорыв в технологиях формирования и передачи информации. К сожалению, надежный и воспроизводимый подход к изготовлению устройств остается основным «узким местом» нанoeлектроники и наноспинтроники, а сами ОЭТ остаются на стадии лабораторных исследований. Действительно, контакт и нанесение рисунка на отдельные наночастицы с требуемой точностью наноразмерного масштаба - очень сложная технологическая задача. В то же время в крупномасштабных устройствах с потенциально тысячами контактирующих наночастицами, имеющих разброс размеров и, следовательно, различные электронные свойства, размываются одноэлектронные характеристики. Поэтому необходимо разрабатывать новые материалы и концепции устройств, позволяющие обойти эти трудности.

Целью диссертации является исследование закономерности протекания электрического тока через 0D, 1D и 2D Ван-дер-Ваальсовы фуллереноподобные наноустройства на примере эндофуллерена, полипризмана и двуслойных графенов с применением теории функционала электронной плотности в сочетании с методом неравновесных функций Грина.

Основные задачи, поставленные для достижения данной цели выражены в следующем:

1. Поиск и подбор наноструктур с уникальными функциональными свойствами для создания электронных наноустройств, оптимизация их геометрии, построение адекватной математической и компьютерной модели для расчета поведения наноструктур под влиянием электрического поля.

2. Разработка модели одноэлектронного устройства на основе эндофуллеренов, состоящие из фуллеренов с различными диаметрами и связанные между собой силами Ван-дер-Ваальса, исследование механизма электронного транспорта в подобных наноустройствах.

3. Исследование электронного транспорта в одномерных наноструктурах на примере полипризматов с различными диаметрами, связанные между собой силами Ван-дер-Ваальса, выработка рекомендации по применению подобных материалов для создания перспективных электронных приборов нанoeлектроники.

4. Анализ и физическая интерпретация полученных результатов в ходе модельного исследования наноустройств на основе фуллереноподобных материалов, выявление закономерностей протекания электрического тока в наноустройствах на основе Ван-дер-Ваальсовых фуллереноподобных материалов.

Объектом исследования выбраны следующие фуллереноподобные нанобъекты: нульмерные фуллереновые конструкции образующие нанопереход типа «ядро - оболочка», одномерные коаксиально соединенные призматические нанотрубки, а также муаровые двуслойные графеновые пленки.

Предметом исследования является электротранспортные свойства наноустройств на основе фуллереноподобных материалов.

Методы исследования: В диссертационной работе применялся комбинированный подход на основе теории функционала электронной плотности совместно с методом неравновесных функций Грина, которая позволяет рассчитать транспортные свойства наноструктур и их электронные плотности. Метод теории функционала плотности является основным методом для расчета электронной структуры многочастичной системы, который основывается на том, что любое свойство системы взаимодействующих частиц может быть определено через функционал электронной плотности. Для достижения поставленных задач применялись квантово-химические программные комплексы для моделирования и исследования наноструктур, такие как Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab, Gaussian. При оптимизации геометрии исследуемых наноструктур в рамках теории функционала плотности применились обобщенно-градиентное приближение (GGA), обменно-корреляционные функционалы PBE и другие. Визуализация и коррекция наноструктур была выполнена в программах VESTA, GaussVIEW, а также применялись математические пакеты вычислений. При расчете полной энергии, электронной плотности, диаграммы стабильности зарядов одноэлектронных устройств использовались программные коды, написанные на языке Python.

Научная новизна:

1. Впервые смоделирована комбинация фуллеренов с разными диаметрами, приводящие к проявлению уникальных электрических свойств, позволяющие увеличить быстродействие одноэлектронных транзисторов на основе Ван-дер-Ваальсовых 0D наноструктур: увеличение количества резонансных пиков спектра пропускания, исчезновение щели между высшей занятой молекулярной орбиталью и низшей свободной молекулярной орбиталью, возникновение нечетливых ступенчатых структур кулоновского происхождения на вольт-амперной характеристике из-за ослабления кулоновской энергии, а также уменьшению площади кулоновского ромба на диаграмме стабильности.

2. Впервые обнаружен диодный эффект в полипризматических нанотрубках ($C_{[14,17]}-C_{[14,11]}-C_{[14,5]}$), коаксиально соединенные между собой силой Ван-дер-Ваальса, из-за образования барьера Шоттки между металлическим ($C_{[14,17]}$, $C_{[14,11]}$) и полупроводниковым ($C_{[14,5]}$) призмами.

3. Установлено, что при закрутке пассивного графена на муаровые углы $\sim 4^\circ$ и $\sim 12^\circ$ в ненапряженном (и напряженном) состоянии открывается модулированная щель величиной $\sim 1,66$ эВ и $\sim 3,78$ эВ ($\sim 2,27$ эВ и $\sim 4,28$ эВ), соответственно, позволяющая устранить недостаток бесщелевого монослойного графена для перспективного применения в качестве элементной базы новых квантовых технологий.

Практическая значимость. Диссертационная работа представляет теоретическое исследование, направленное на решение проблем, связанных с изучением электротранспортных свойств фуллереноподобных структур. Получен ряд фундаментальных результатов, имеющих практическую направленность. Научные результаты, полученные при исследовании особенностей одноэлектронного транспорта в проводящих островах, состоящие из комбинации фуллеренов с разными диаметрами и разделенные туннельными переходами, могут быть полезны при разработке одноэлектронных транзисторов на их основе. На основе предложенных фуллереноподобных наноструктур могут быть улучшено быстродействие одноэлектронных устройств. Вентильное свойство полипризматических нанотрубок ($C_{[14,17]}-C_{[14,11]}-C_{[14,5]}$), коаксиально соединенные между собой силой Ван-дер-Ваальса, могут быть использовано для создания нанодиодов Шоттки. Получен патент на полезную модель нанодиода Шоттки. Эффект открытия модулированной щели при закрутке пассивного графена на муаровые углы в ненапряженном и напряженном состоянии дает возможность на их основе развития компонентной базы микро- и нанoeлектроники с пониженным энергопотреблением.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Комбинация фуллеренов с разными диаметрами, образующие нанопереход типа «ядро-оболочка», приводит к увеличению количества резонансных пиков спектра пропускания, исчезновению щели между высшей занятой молекулярной орбиталью и низшей свободной молекулярной орбиталью, а также уменьшению площади кулоновского ромба на диаграмме стабильности.

2. В коаксиально соединенных между собой силой Ван-дер-Ваальса полипризматических нанотрубках ($C_{[14,17]}$ - $C_{[14,11]}$ - $C_{[14,5]}$) проявляется диодный эффект из-за образования барьера Шоттки между металлическим ($C_{[14,17]}$, $C_{[14,11]}$) и полупроводниковым ($C_{[14,5]}$) призмами.

3. При закрутке пассивного графена на муаровые углы $\sim 4^\circ$ и $\sim 12^\circ$ в ненапряженном (и напряженном) состоянии открывается модулированная щель, величина которой варьируется 1,66 - 1,82 эВ и 3,78 - 4,69 эВ (2,27 - 2,67 эВ и 4,28 - 4,93 эВ), соответственно. Вольтамперная характеристика ненапряженного и напряженного графенов имеют участки с отрицательной дифференциальной проводимостью, проявляющаяся в различных значениях напряжения в зависимости от параметров муаровой структуры.

Достоверность полученных результатов обеспечивается тщательной обоснованностью построенных компьютерных моделей наноустройств, соблюдением пределов применимости используемых моделей и приближений для оптимизации геометрии наноструктур, выбором корректности вычислительных методов для описания атомной и электронной структуры многоатомных нано- систем, применением апробированных международным научным сообществом лицензионных компьютерных программ Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab, Gaussian и т.п., а также апробацией в виде публикаций в международных научных журналах с высокими показателями (Q1, Q2).

Личный вклад автора заключается в том, что весь объем диссертационной работы, выбор метода исследования, решения задач выполнены автором самостоятельно. Постановка задач и обсуждение результатов проводились совместно с научными руководителями.

Связь темы с планами научных работ. Диссертационная работа была выполнена в рамках двух научно-исследовательских проектов, финансируемых Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан «Исследование квантово-транспортных характеристик наносистем с уникальными эксплуатационными электрическими и магнитными свойствами» ИРН AP08052562 на 2020-2022 годы, а также «Атомистическое моделирование разрушения полупроводниковых структур электромагнитными импульсами» ИРН AP14869773 на 2022-2024 годы.

Апробация работы. Результаты исследования были представлены и обсуждены на международных конференциях:

1. 9-ая Международная научно-практическая конференция «Актуальные проблемы радиофизики» (Томск, Россия, 20-22 сентября 2021);
2. 10th International conference on Nanomaterials and Advanced Energy Storage Systems (Nur-Sultan, Kazakhstan, 4-6 August 2022).

Зарубежная стажировка проходила в Институте физики Министерства науки и образования Азербайджана в период с 04.01.2023 по 05.02.2023, Баку, Азербайджан.

Публикации. По результатам исследований, изложенных в диссертационной работе, опубликовано 6 научных работ, из них: 3 статьи

в индексируемых в Science Citation Index Expanded базы данных Web of Science, и в рецензируемых научных изданиях, имеющих проценты по CiteScore в базе Scopus; 2 статьи опубликованы по результатам международных научно-практических конференций в рецензируемых научных изданиях, имеющих проценты по CiteScore в базе Scopus, и 1 патент на полезную модель.

1) Sergeyev D., Duisenova A., Solovjov A., Ismayilova N. Electron transport in a stressed moir'e bigraphene structure // Results in Physics. – 2023. – Vol. 54. – P. 107140. <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2023.107140> (Web of Science – Q1, Scopus – 89%).

2) Sergeyev D., Duisenova A. Electron transport in core-shell type fullerene nanojunction // Advances in Nano Research. – 2022. – Vol.12, № 1. – P. 25-35. <https://doi.org/10.12989/anr.2022.12.1.025> (Web of Science – Q2, Scopus – 86%).

3) Sergeyev D.M. and Duisenova A.G. Electron Transport in Model Quasi-Two-Dimensional van der Waals Nanodevices // Technical Physics Letters. – 2021. – Vol. 47, № 4. – P. 417-420. [Сергеев Д. М., Дуйсенова А. Г. Электронный транспорт в модельных квази-двумерных ван-дер-ваальсовых наноустройствах // Письма в Журнал технической физики. – 2021. – Т. 47, № 8. – С. 7-10. <https://doi.org/10.21883/PJTF.2021.08.50844.18583>]<https://doi.org/10.1134/S1063785021040295> (Web of Science – Q4, Scopus – 36%)

4) Патент на полезную модель № 7120 РК. Нанодиод / Сергеев Д.М., Дуйсенова А.Г.; заявитель и патентообладатель НАО Актюбинский Региональный университет имени К. Жубанова. – № заявки 2022/0298.2; Дата заявки 07.04.2022; Опубликовано 20.05.2022, Бюл. № 20. – 7 с. URL: <https://gazpatent.kz/en/content/poleznaya-model-20052022> . Дата обращения: 01.01.2024

5) Duisenova A., Sergeyev D. Model of single-electron transistor based on prismanes // Materials Today: Proceedings. – 2023. – Vol.81. – P.1192-1197. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2022.11.175> (Scopus – 42%).

6) Duisenova A. G., Sergeyev D. M. Model of a single-electron transistor based on endohedral fullerene (Sc₃N)@C₈₀ // Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2021. – Vol. 2140, № 1. – P. 012006. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/2140/1/012006> (Scopus – 22%).

Структура и объем диссертации. Данная диссертационная работа состоит из введения, пяти разделов, заключения и списка используемых источников, соответствующие поставленной цели исследования, задачам и объемам проведенной работы. Работа состоит из 51 рисунков, 4 таблиц и библиографии из 159 наименований.

Основное содержание диссертации.

Во введении представлена актуальность диссертационной работы и ее основные положения.

Выводы по первому разделу:

Проведенный литературный обзор показал, что фуллереноподобные материалы обладают уникальными электрофизическими свойствами,

которые открывают возможность на их основе создать новые перспективные наноэлектронные устройства.

1. Фуллерены обладают каркасной структурой, которая может вместить внутри углеродного каркаса атомы и вещества, в зависимости от свойств этих инкапсулируемых атомов, они могут изменять их электротранспортные свойства. Еще одной особенностью фуллеренов является то, что они могут вмещать в себя фуллерены малого диаметра. Учитывая, что многие фуллерены обладают металлической проводимостью, можно управлять электроёмкостью фуллереновой конструкции подбирая инкапсулируемый фуллерен нужного диаметра. К особым свойствам фуллерена можно отнести стабильность, температура сублимации атомов углерода достигает 850 C° , они являются износостойкими, коэффициент трения намного ниже, чем у графита, а также обладают термической стабильностью, выдерживая нагревание до температур выше 1000 C° , а модуль объемной упругости достигает 668 ГПа .

2. Полипризмы обладают малым поперечным сечением, в форме правильного многоугольника, что способствует образованию крепкой ковалентной связи. Рост эффективного диаметра полипризматических нанотрубок приводит к изменению их свойств от металлических до полупроводниковых. Они являются износостойкими, из-за своей жесткой и прочной структуры, обладают высокой термической стабильностью, выдерживающие значения температур от 700 C° , упругостью, значение модуля Юнга полипризматических составляет $100\text{-}200\text{ ГПа}$, твердостью, достигающая значений $10\text{-}15\text{ ГПа}$, что сравнима с твердостью алмаза.

3. Муаровые графены, представляющие собой наложенные друг на друга под определенным малым углом графеновые пленки, связанные между собой силой Ван-дер-Ваальса. Угол закручивания графена в муаровом графене, может влиять на его электронную структуру, в следствии чего они могут обладать как металлическими, так и полупроводниковыми свойствами. При низких температурах муаровые графены могут проявлять свойства сверхпроводника. Эти материалы являются актуальными и интересными при разработке одноэлектронных транзисторов и устройств наноэлектроники.

Выводы по второму разделу:

В данном разделе представлены теоретические основы и методологические подходы, лежащие в основе компьютерного моделирования атомной структуры Ван-дер-Ваальсовых фуллереноподобных материалов и прогнозирования их электротранспортных свойств с помощью теории функционала электронной плотности в сочетании с методом неравновесных функции Грина, учитывая обменно-корреляционный функционал и обобщенно-градиентное приближение GGA-PBE, а также методов самосогласованного поля, энергетического баланса, и молекулярной динамики.

Выбор метода ТФП обеспечивает высокоточный расчет энергии многоэлектронной системы из первых принципов, требуя при этом относительно небольших вычислительных ресурсов, а использование метода НРФГ основан также на первопринципных методах исследованиях, но не имеет свободных параметров, что исключает возможность «настройки»

результатов моделирования с помощью эмпирических констант, и позволяет учитывать влияние флуктуаций электронной плотности заряда в процессе взаимодействий между атомами.

Моделирование электротранспортных свойств фуллереновых наноструктур произведено с учетом теории одноэлектронного туннелирования, так как между электродами наноструктуры и молекулой фуллерена, размещенной между ними, образуются туннельные переходы. Также была применена полуэмпирическая модель Kaasbjerg-Stokbro, позволяющая произвести вычисление электрических характеристик одноэлектронных транзисторов, учитывая режимы сильной и слабой связи между электродами и островом.

Наряду с изложенными особенностями ТФП, также приведены вычислительные методы по определению электронной плотности, полной энергии, диаграмм стабильности наноструктур.

Выводы по третьему разделу:

В данном разделе представлены результаты электротранспортных свойств модельных нанопереходов «Au-C₁₈₀-Au», «Au-C₈₀@C₁₈₀-Au» и «Au-(C₂₀@C₈₀)@C₁₈₀-Au» в рамках ТФП в сочетании метода НРФГ и получены следующие результаты:

1. Выявлено увеличение количества резонансных пиков спектра пропускания при внедрении в полость фуллерена C₁₈₀ фуллеренов малого радиуса C₂₀, C₈₀, что показывает улучшение электропроводности подобных нанобъектов. В интервале от -0,45 эВ до 0,45 эВ на спектре пропускания наноперехода «Au-C₁₈₀-Au» образуется щель ВЗМО - НСМО, ее ширина составляет 0,9 эВ. Однако при внедрении в C₁₈₀ фуллеренов малых размеров эта щель исчезает и на спектре пропускания C₈₀@C₁₈₀-, (C₂₀@C₈₀)@C₁₈₀- нанопереходов появляется серия пиковых резонансных структур.

2. Показано, что на вольтамперной характеристике C₁₈₀-наноперехода возникают отчетливые ступенчатые структуры кулоновского происхождения. На ВАХ C₈₀@C₁₈₀-, (C₂₀@C₈₀)@C₁₈₀-нанопереходов эти ступенчатые структуры «размазываются» из-за ослабления кулоновской энергии, связанные с увеличением собственных электроемкостей молекул.

3. Установлено, что на спектре дифференциальной проводимости dI/dV C₁₈₀-наноперехода возникают 8 пиковых структур кулоновского происхождения с периодом 0,73 В, а на спектре C₈₀@C₁₈₀-, (C₂₀@C₈₀)@C₁₈₀- нанопереходов 7 пиковых структур с периодами 0,74 В и 0,61 В, соответственно.

4. Показано, что для вывода C₁₈₀-ОЭТ из режима кулоновской блокады требуется большое напряжение на электродах исток-сток по сравнению с транзисторами на основе C₈₀@C₁₈₀-, (C₂₀@C₈₀)@C₁₈₀-нанопереходов. Уменьшение площади кулоновского алмаза на диаграмме стабильности заряда C₈₀@C₁₈₀-, (C₂₀@C₈₀)@C₁₈₀-ОЭТ позволяет увеличить быстродействие интегральных схем на их основе.

Результаты моделирования и полученные данные могут быть полезны при создании быстродействующих одноэлектронных наноструктур. Полученные результаты открывают новые возможности для

целенаправленного проектирования фуллереновых нанопереходов типа «ядро-оболочка» с заданными электротранспортными характеристиками, которые имеют практическое применение при разработке высокотехнологичных устройств наноэлектроники.

Выводы по четвертому разделу:

В этом разделе было проведено исследование по изучению электротранспортных характеристик телескопических призматических нанотрубок $C_{[14,17]} - C_{[14,11]} - C_{[14,5]}$ в рамках ТФП+НРФГ и получены следующие результаты:

1. Показано, что соединение телескопирующих полипризматов в виде нанотрубок с разными сечениями приводит к существенному изменению их электрических свойств. В спектре пропускания телескопирующих полипризматов $C_{[14,17]} - C_{[14,11]} - C_{[14,5]}$ в диапазоне от $-0,5$ эВ до $2,2$ эВ образовывается энергетическая щель между ВЗМО-НСМО, ширина которой составляет $2,7$ эВ.

2. Выявлено образование ступенчатых участков в виде «кулоновских лестниц» на ВАХ полипризматов $C_{[14,17]} - C_{[14,11]}$, которые наблюдаются в одноэлектронных устройствах вследствие эффекта кулоновской блокады.

3. Обнаружено, что коаксиальное соединение полипризматов с разными типами электропроводности, таких как $C_{[14,11]} - C_{[14,5]}$ приводит к образованию барьера Шоттки и проявлению диодного эффекта. Из плотности состояния полипризматов, стало ясно, что полипризматы $C_{[14,17]}$ и $C_{[14,11]}$ обладают металлическими свойствами, тогда как полипризма $C_{[14,5]}$ проявляет характеристики полупроводника с запрещенной зоной в $0,4$ эВ.

Знание особенностей электрических свойств телескопирующих призматических нанотрубок, приведенные в данном разделе, важны для разработки высокопроизводительных устройств наноэлектроники, и могут быть полезны при расчетах нанодиодов Шоттки.

Выводы по пятому разделу:

В данном разделе представлены результаты моделирования электротранспортных свойств ненапряженного, напряженного и сильнонапряженного муаровых биграфеновых наноустройств, состоящие из двух слоев графена, где с одним слоем графена установлен электрический контакт с электродами, а другой остается электрически нейтральным, и получены следующие научные результаты:

1. Выявлено, что особенности зонной структуры точки K на уровне Ферми в напряженной двуслойной графеновой системе сохраняются, а в сильнонапряженном состоянии радикально изменяется, по-видимому, это связано с изменением связи между атомами углерода от ВдВ на ковалентную, также установлено, что при закрутке пассивного графена на определенные углы ($\sim 4^\circ$ и $\sim 12^\circ$) в ненапряженном (и напряженном) состоянии открывается энергетическая щель, величина которой варьируется $1,66 - 1,82$ эВ и $3,78 - 4,69$ эВ ($2,27 - 2,67$ эВ и $4,28 - 4,93$ эВ), соответственно.

2. Показано, что спектр пропускания двуслойного графена имеет пиковую структуру и на порядок ниже, чем спектр однослойного графена, а также при уменьшении расстояния графенов на $2,85 \text{ \AA}$ пиковые структуры

начинают размываться и частично нарушается их квазипериодическое поведение, также обнаружено, что в ненапряженном состоянии при закрутке пассивного графена на $\theta = 4^\circ$ в интервале напряжения смещения от 0 В до 1,1 В наблюдается постепенное повышение величины тока до ~ 10 мкА, далее резкое повышение тока до ~ 185 мкА с появлением слабовыраженного участка ОДП, а при $\theta = 12^\circ$ в интервале напряжения смещения от 1,35 В до 3 В наблюдается линейный рост тока до ~ 220 мкА. В интервале 0,4÷1,3 В ВАХ принимает *N*-образный вид, формируя выраженный участок ОДП (-1,8 мкСм при -0,71 В и 0,8 В). Эти же изменения проявляются и на dI/dV -спектре наноструктуры и было выявлено, что в напряженном состоянии при $\theta = 4^\circ$ происходит небольшое отклонение от ненапряженного состояния, а при $\theta = 12^\circ$ dI/dV -спектр становится асимметричным, ОДП -15 мкСм возникает только при положительном напряжении 0,8 В, а при отрицательном напряжении ОДП подавляется.

3. Показано, что в наноустройствах, состоящих из комбинации графена, силицена и дисульфида молибдена, связанные между собой Ван-дер-Ваальсовой связью, при взаимодействии силицена и дисульфида молибдена образуется новая наносистема преимущественно с металлическими свойствами, выявляющиеся на ее спектре пропускания и ВАХ, также установлено, что в гибридной наноструктуре «G – MoS₂ – Sil» образуется барьер Шоттки и она обладает выпрямляющими свойствами диода.

Полученные данные могут быть применены для разработки и миниатюризации высокопроизводительных транзисторов, для создания высокочувствительных датчиков магнитного поля, давления и других веществ.

В заключении приведены основные результаты:

В диссертации представлены результаты модельного исследования электротранспортных свойств фуллереноподобных структур (фуллереновые конструкции образующие нанопереход типа «ядро - оболочка», одномерные коаксиально соединенные призматические нанотрубки, муаровые двуслойные графеновые пленки). Перечислим наиболее важные результаты проделанной работы:

1. Смоделированы комбинации фуллеренов «Au–C₁₈₀–Au», «Au–C₈₀@C₁₈₀–Au» и «Au–(C₂₀@C₈₀)@C₁₈₀–Au» с разными диаметрами, приводящие к проявлению уникальных электрических свойств, позволяющие увеличить быстродействие одноэлектронных транзисторов на основе Ван-дер-Ваальсовых 0D наноструктур. В подобных нанобъектах наблюдаются следующие феномены: увеличение количества резонансных пиков спектра пропускания эндофуллеренов, исчезновение щели между высшей занятой молекулярной орбитали и низшей свободной молекулярной орбитали; а также возникновение неотчетливых ступенчатых структур кулоновского происхождения на вольтамперной характеристике из-за ослабления кулоновской энергии, уменьшение площади кулоновского алмаза на диаграмме стабильности заряда.

2. Показано, что соединение телескопирующих полипризматов в виде нанотрубок с разными сечениями приводит к существенному изменению их

электрических свойства, а именно: в спектре пропускания телескопирующих полипризманов $C_{[14,17]}-C_{[14,11]}-C_{[14,5]}$ в диапазоне от $-0,5$ эВ до $2,2$ эВ образовывается энергетическая щель между высшей занятой молекулярной орбитали и низшей свободной молекулярной орбитали, ширина которой составляет $2,7$ эВ; на вольтамперной характеристике полипризманов $C_{[14,17]} - C_{[14,11]}$ возникают ступенчатые участки в виде «кулоновских лестниц» из-за эффекта кулоновской блокады; из анализа плотности состояния выявлено, что полипризмы $C_{[14,17]}$ и $C_{[14,11]}$ обладают металлическими свойствами, а полипризма $C_{[14,5]}$ обладает полупроводниковыми свойствами с заметной запрещенной зоной в $0,4$ эВ. Обнаружен диодный эффект в полипризмановых нанотрубках ($C_{[14,17]}-C_{[14,11]}-C_{[14,5]}$), коаксиально соединенные между собой силой Ван-дер-Ваальса, из-за образования барьера Шоттки между металлическим ($C_{[14,17]}$, $C_{[14,11]}$) и полупроводниковым ($C_{[14,5]}$) призмами.

3. Установлено, что при закрутке пассивного графена на муаровые углы $\sim 4^\circ$ и $\sim 12^\circ$ в ненапряженном (и напряженном) состоянии открывается модулированная щель величиной $\sim 1,66$ эВ и $\sim 3,78$ эВ ($\sim 2,27$ эВ и $\sim 4,28$ эВ), соответственно, позволяющая устранить недостаток бесщелевого монослойного графена для перспективного применения в качестве элементной базы новых квантовых технологий. Вольтамперная характеристика ненапряженного и напряженного графенов имеют участки с отрицательной дифференциальной проводимостью, проявляющиеся в различных значениях напряжения в зависимости от параметров муаровой структуры. Выявлено, что в напряженном состоянии при $\theta = 4^\circ$ происходит небольшое отклонение от ненапряженного состояния, а при $\theta = 12^\circ$ dI/dV -спектр становится асимметричным, отрицательная дифференциальная проводимость -15 мкСм возникает только при положительном напряжении $0,8$ В, а при отрицательном напряжении отрицательная дифференциальная проводимость подавляется.

Оценка полноты решений поставленных задач. Поставленные задачи в диссертационной работе были выполнены в полном объеме, проведены все модельные исследования и доказано соответствие полученных результатов. Полученные результаты обсуждались на семинарах в научном центре «Радиационная физика материалов» при Актюбинском региональном университете имени К. Жубанова, а также в международных конференциях.

Рекомендации по конкретному использованию результатов исследований. Полученные фундаментальные результаты имеют практическую значимость. Научные результаты получены при исследовании особенностей одноэлектронного транспорта, и могут быть полезны при разработке одноэлектронных транзисторов на основе фуллереноподобных материалов.

Оценка научного уровня выполненной работы в сравнении с лучшими достижениями в данной области. Высокий научный уровень диссертационной работы обеспечен апробацией в виде 5 публикаций в международных научных журналах базы данных WoS и Scopus с высокими показателями (Q1, Q2), патентом на полезную модель, и участием на

международных научно-практических конференциях. Результаты диссертационного исследования апробированы на двух международных научно-практических конференциях.

В заключение выражаю глубокую признательность своим научным консультантам кандидату физико-математических наук, профессору Сергееву Даулет Максатовичу, доктору физико-математических наук, профессору Соловьёву Андрей Львовичу, доктору PhD Исмаиловой Нармин Ариф кызы за их бесценную поддержку, и помощь в решении возникающих проблем на протяжении всего исследования, что стало ключом к успешному завершению диссертационной работы.