

Дүйсенова Айнұр Гайсиевнаның
8D05301- «Физика» білім беру бағдарламасы бойынша
философия докторы (PhD) дәрежесін алуға ұсынылған
**«Фуллерен тәрізді материалдар негізінде электрондық
нанокұрылғылардың тасымалдау қасиеттерінің ерекшеліктерін
модельдеу» тақырыбындағы диссертациялық жұмысына**

АҢДАТПАСЫ

Тақырыптың өзектілігі

Нанотехнология қарқынды дамып келеді, әртүрлі ғылыми салаларға, соның ішінде микроэлектроника мен оптоэлектроникаға революциялық түрде әсер етеді. Осы салаларда наноөлшемді материалдарды пайдалану әлеуеті белсенді түрде зерттелуде. Жартылай өткізгіш материалдардың икемділігі соңғы онжылдықтарда жартылай өткізгіш өнеркәсібінің қарқынды өсуінің катализаторына айналды. Мур заңы бойынша, жартылай өткізгіш кристалл ауданының бірлігінде транзисторлар санының әрбір бір жарым-екі жыл сайын екі еселенуі арқасында микропроцессордың есептеу қуаты немесе жылдамдығы ұдайы ұлғаяды. Бұл үрдіс жартылай өткізгіш технологиялар мен өндірісті дамытудың нормасы мен мақсатына айналды. Алайда есептеу қуаты әлі шегіне жеткен жоқ. Микросхемалардың озық технологиялары дәстүрлі транзисторлардың миниатюраландыру шектеулерін еңсеруге және балама принциптерге негізделген құрылғылардың жаңа буындарына жол ашуға мүмкіндік беретін наноэлектрондық құрылғыларды әзірлеуге бағытталған. Наноэлектроникадағы материалдар мен құрылғылар өлшемдері айтарлықтай аз, сондықтан бұл материалдардың атомаралық байланыстары мен кванттық механикалық қасиеттерін ескеру қажет. Микроэлектрондық өнеркәсіптегі миниатюраландырудың және ауқымды интеграцияның жылдам дамуымен талап етілетін механикалық, электр, жылу және оптикалық қасиеттері бар миниатюралық материалдарды әзірлеу және өндіру негізгі міндет болып қала береді.

Неғұрлым ықшам және өнімділігі жоғары электрондық құрылғыларды құруға ұмтылыста кванттық технологиялардың элементтік базасы ретінде фуллерендер, көміртекті нанотүтіктер, графендер және оларға ұқсас құрылымдар фуллерен тәрізді наноматериалдар қолданылады. 2004 жылы Новоселов көміртегі атомындай қалыңдығы бар графенді синтездегеннен кейінгі қарқынды зерттеу жұмыстары нәтижесінде басқа да көптеген қабатты материалдардың ашылуына әкелді. Бүгінде екі өлшемді материалдардың үлкен тобының физикалық қасиеттері сан алуан, соның ішінде оқшаулағыштар, жартылай өткізгіштер, металдар, жартылай металдар және асқынөткізгіштер, сондай-ақ жақында ашылған екі өлшемді ферромагниттік материалдар бар. Екі өлшемді материалдардың басты қасиеті электр және магнит өрісі сияқты сыртқы әсерге аса сезімталдығы болғандықтан, олар электроникада, оптоэлектроникада және спинтроникада қолдану үшін үздік таңдау болып табылады.

Соңғы бірнеше жылда фуллерен тәрізді материалдар конденсацияланған күй физикасында және одан тыс жерлерде қолданудың жаңа мүмкіндіктерін ашатын бірегей қасиеттеріне назар аударылып, олар заманауи ғылымда ерекше орын алды. Фуллерендердің бірегей құрылымы атомдық конфигурациясы өз қаңқасының ішінде атомдарды, молекулаларды және басқа заттарды қамту қасиетіне негізделген. Бұл жаңалық ғылымдағы нағыз серпіліс болды, себебі бұл көміртектің жаңа молекулалық түрі. Фуллерендердің ерекше қасиеттері зерттеушілер тарапынан іргелі ғылым тұрғысынан да, әлеуетті қолданбалы қолданбалар үшін де қызығушылық тудырады.

Көміртекті нанотүтікшелер (КНТ) – бірегей қасиеттері бар революциялық материал. Нанoeлектроникада аса шағын өлшемдерімен ерекшеленетін көміртекті нанотүтіктерді бұйымдарды миниатюраландыру үшін пайдаланылады, сонымен қатар олар жақсы ток өткізгіштер. КНТ эмиссиялық қасиеттері оларды жаңа жарық көздерін, дисплейлерді жасау үшін пайдалануға мүмкіндік береді. Жоғары химиялық төзімділік нанотүтіктерді қоршаған ортаға төзімді етеді, ал олардың химиялық радикалдарды қосу қабілеті жаңа материалдарды жасауда қасиеттерді жетілдіру мақсатында қолдануға мүмкіндік береді. Сондай-ақ төмен температурада электрондар шашыраусыз қозғалысын қамтамасыз ететін өткізгіштіктің кванттық баллистикалық тетігі нанотүтіктердің басты артықшылықтарының бірі болып табылатындығын ескеру қажет. Заряд тасымалдаушылардың жоғары қозғалыс жылдамдығы, дрейфтің қанығу жылдамдығы және бекітпенің өте аз ішкі сыйымдылығы сияқты қасиеттер көміртекті нанотүтіктерді радиожиілік құрылғылары үшін оңтайлы материал ретінде пайдалануға мүмкіндік береді. Жалпы, көміртекті нанотүтікшелер болашақ электрониканы дамыту үшін орасан зор әлеуетке ие.

Ғалымдар Д.В. Аверин және К.К.Лихарев болжаған корреляциялық туннельдің ашылуы электроника әлеміне зор үлес қосты және электронды компоненттерді одан әрі миниатюраландырудың кілті болды. Бұл құбылыс электр өрісінің әсерінен электрондардың қозғалысы реттелген кулондық блокадаға негізделген. Осы әсердің арқасында жалғыз молекулаларды «ядро» ретінде пайдаланатын бір электронды құрылғыларды құру мүмкіндігі туды. Бір электронды құрылғылардың бірегей қасиеттері бар: мысалы, төмен қуат тұтыну, жоғары жұмыс жылдамдығы және ультра жоғары қаптама тығыздығы. Болашақта бірэлектроника электроникада үлкен өзгерістерге әкеле алады, себебі қолданыстағы құрылғыларға қарағанда әлдеқайда кішірек, жылдамырақ және энергияны үнемдейтін түбегейлі жаңа құрылғыларды жасауға мүмкіндік береді. Дара электронды корреляцияланған туннельдеу – бұл әр түрлі материалдарда тіркелуі мүмкін әмбебап құбылыс. Мұндай материалдардың тізімі кең, оларға металдар, жартылай және асқын өткізгіштер, көміртекті және молекулалық құрылымдар жатады. Жеке атомдар мен молекулаларды сипаттау және манипуляциялау әдістерін әзірлеудегі жетістік және молекулалар арқылы электронды туннельдеу процесін бірінші принципті

модельдеудегі жетістіктер жаңа наноэлектрондық құрылғылардың архитектурасын дамытуға жол ашпақ.

Осындай шағын құрылғылардың физикасын түсіну үшін де, қолдану үшін де электронды күйлер мен тасымалдау қасиеттерін зерттеудің маңызы зор. Нанометрлік масштабта кванттық әсерлерді бірінші жоспарға шығару наноэлектроника мен спиндік электрониканы қоса алғанда, іргелі зерттеулердің көптеген бағыттарын ашты. Бұрын қол жеткізілген жетістіктер көп қабатты жұқа пленкалардағы үлкен магнит кедергі және туннельдік магнит кедергі сияқты маңызды жаңалықтарға әкелді, бұл магниттік зондтау мен деректерді сақтау саласындағы айтарлықтай ашулыларға ықпал етті. Ферромагниттік элементті бір электронды транзисторға (БЭТ) интеграциялау кезінде кулондық блокада мен электрондардың спиндік күйлері арасында өзара әрекеттесуге болатын жағдайлар туындайды. Мұндай өзара әрекеттесулер магниттасымалдаушылық қасиеттерін көрсететін магниткулондық әсерге әкелуі мүмкін.

БЭТ энергияны аз тұтынудың және сезімтал сенсорлардың, жадтың, мультилогиялық құрылғылардың, сондай-ақ нанометрология мен кванттық есептеулердің жоғары жылдамдығының арқасында қосымша металл оксидті жартылай өткізгіштер технологиясына болашағы зор балама ретінде қарастырылады. Соңғылары ақпаратты қалыптастыру және беру технологиясында түпкілікті өзгеріс жасауға мүмкіндік берді. Өкінішке орай, құрылғыны өндіруге сенімді және қайталанатын тәсіл наноэлектроника мен наноспинтрониканың негізгі «тар жолы» болып қала береді, ал БЭТ өзі зертханалық зерттеулер сатысында қалады. Шынында да, қажетті наноөлшемді дәлдікпен жеке нанобөлшектердің байланысы және үлгіленуі – өте күрделі технологиялық міндет. Сонымен қатар, мыңдаған түйіспелі нанобөлшектерден тұратын құрылғыларда өлшемдерінің шашылымы бар, демек әр түрлі электрондық қасиеттері бар үлкен масштабты құрылғылардың бір электронды сипаттамалары бұлыңғыр. Сондықтан бұл қиындықтарды жеңу үшін жаңа материалдар мен құрылғы тұжырымдамаларын әзірлеу қажет.

Диссертациялық жұмыстың мақсаты айнымалы Грин функциясымен бірге электронды тығыздықтың функционалдық теориясын қолдана отырып, эндофуллерен, полипризман және екіқабатты графендер мысалы негізінде 0D, 1D және 2D Ван-дер-Ваальстік фуллерен тәрізді наноқұрылғылар арқылы электр тогының ағынын зерттеу болып табылады.

Осы мақсатқа жету үшін алға қойылған **негізгі міндеттер**:

1. Электрондық наноқұрылғыларды құру үшін бірегей функционалдық қасиеттері бар наноқұрылымдарды іздеу және іріктеу, олардың геометриясын оңтайландыру, электр өрісінің әсерінен наноқұрылымдардың әрекетін есептеу үшін сәйкес математикалық және компьютерлік модель құру.

2. Әр түрлі диаметрлі фуллерендерден тұратын және бір-бірімен Ван-дер-Ваальс күштерімен байланысқан эндофуллерендерге негізделген бір электронды құрылғы моделін әзірлеу, ұқсас наноқұрылғылардағы электрондық тасымалдау механизмін зерттеу.

3. Өзара Ван-дер-Ваальс күшімен байланысқан әр түрлі диаметрлі полипризмандардың мысалымен бір өлшемді нанокұрылымдардағы электрондық тасымалдауды зерттеу, наноэлектрониканың келешекті электрондық құралдарын жасау үшін осы іспеттес материалдарды қолдану жөнінде ұсынымдар әзірлеу.

4. Фуллерен тәрізді материалдар негізінде нанокұрылымдарды модельдік зерттеу барысында алынған нәтижелерді талдау және физикалық түсінік беру, Ван-дер-Ваальстік фуллерен тәрізді материалдар негізінде нанокұрылымдарда электр тогының өтуі заңдылықтарын анықтау.

Зерттеу нысаны ретінде келесі фуллерен тәрізді нанобъектілер таңдалды: «ядро-қабық» типті нанотүтікшені құрайтын нөлдік фуллерен түзілістері, бір өлшемді коаксиалды біріктірілген призмалық нанотүтікшелер, сондай-ақ екі қабатты муарлы графен пленкалары.

Зерттеу пәні фуллерен тәрізді материалдар негізіндегі нанокұрылымдардың электрлік тасымалдау қасиеттері болып табылады.

Зерттеу әдістері: Бұл диссертацияда нанокұрылымдардың тасымалдау қасиеттерін және олардың электронды тығыздықтарын есептеуге мүмкіндік беретін айнималы Грин функциялары әдісімен бірге электронды тығыздық функционалының теориясына (ТФТ) негізделген біріктірілген әдіс қолданылды. Тығыздық функционалы теориясының әдісі көп бөлшекті жүйенің электронды құрылымын есептеудің негізгі әдісі есептелінеді, ол өзара әрекеттесетін бөлшектер жүйесінің кез-келген сипаты электронды тығыздық функционалы арқылы анықтауға болатындығына негізделген. Алға қойылған міндеттерге қол жеткізу үшін Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab, Gaussian сияқты нанокұрылымдарды модельдеу және зерттеу үшін кванттық-химиялық бағдарламалық кешендер қолданылды. Тығыздық функционалының теориясы шеңберінде зерттелетін нанокұрылымдардың геометриясын оңтайландыру кезінде жалпыланған градиенттік жуықтау (GGA), PBE алмасу-корреляциялық функционалдары және т.б. қолданылды. Нанокұрылымдарды визуалдау мен түзету VESTA, GaussVIEW бағдарламаларында орындалды және математикалық есептеу пакеттері де қолданылды. Толық энергияны, электронды тығыздықты, бір электронды құрылымдардың заряд тұрақтылығының диаграммасын есептеу кезінде Python тілінде жазылған бағдарламалық кодтар қолданылды.

Зерттеудің ғылыми жаңалығы:

1. Ван-дер-Ваальстік 0D нанокұрылымдарына негізделген бір электронды транзисторлардың жылдамдығын арттыруға мүмкіндік беретін бірегей электрлік қасиеттердің пайда болуына әкелетін әртүрлі диаметрлері бар фуллерендердің комбинациясы алғаш рет модельденді: өткізу спектрінің резонанстық шыңдарының саны артуы, жоғары орналасқан молекулалық орбиталь (ЖОМО) мен төменгі бос молекулалық орбиталь (ТБМО) арасындағы саңылаудың жоғалуы, Кулон энергиясының әлсіреуіне байланысты вольтамперлік сипаттамасында (ВАС) кулонтекес ерекше сатылы құрылымдардың пайда болуы, сондай-ақ тұрақтылық диаграммасында кулондық ромб ауданының кемуі байқалды.

2. Метал ($C_{[14,17]}$, $C_{[14,11]}$) және жартылай өткізгіш ($C_{[14,5]}$) призмандар арасында Шоттки тосқауылының пайда болуына байланысты бір-бірімен Ван-дер-Ваальс күшімен коаксиалды байланысқан полипризман нанотүтікшелерінде ($C_{[14,17]}$ - $C_{[14,11]}$ - $C_{[14,5]}$) тұңғыш рет диодтық эффект анықталды.

3. Пассивті графен кернеусіз (және кернеулі) күйде $\sim 4^\circ$ және $\sim 12^\circ$ муар бұрыштарына бұралған кезде $\sim 1,66$ эВ және $\sim 3,78$ эВ ($\sim 2,27$ эВ және $\sim 4,28$ эВ) модуляцияланған саңылау болатындығы анықталды, сәйкесінше, жаңа кванттық технологиялар үшін элементтік негіз ретінде пайдалану үшін бос моноқабатты графеннің кемшілігін жоюға мүмкіндік береді.

Практикалық маңыздылығы. Диссертациялық жұмыс фуллерен тәрізді құрылымдардың электрлік тасымалдау қасиеттерін зерттеуге байланысты мәселелерді шешуге бағытталған теориялық зерттеуді ұсынады. Практикалық бағыты бар бірқатар іргелі нәтижелер алынды. Әр түрлі диаметрлі фуллерендердің тіркесімінен тұратын және туннельдік өткелдермен бөлінген өткізгіш аралдардағы бір электронды тасымалдаудың ерекшеліктерін зерттеу нәтижесінде алынған ғылыми нәтижелер олардың негізінде бір электронды транзисторларды жасауда пайдалы болуы мүмкін. Ұсынылған фуллерен тәрізді нанокұрылымдардың негізінде бір электронды құрылғылардың өнімділігі жақсаруы мүмкін. Ван-дер-Ваальс күшімен коаксиалды түрде байланысқан полипризмалық нанотүтікшелердің ($C_{[14,17]}$ - $C_{[14,11]}$ - $C_{[14,5]}$) диод қасиетін Шоттки нанодиодтарын жасау үшін пайдалануға болады. Шоттки нанодиодының пайдалы моделіне патент алынды. Әсері пассивті графенді кернеусіз және кернеулі күйдегі муар бұрыштарына бұрау кезінде модуляцияланған саңылаудың ашылуы олардың негізінде микро және наноэлектрониканың компоненттік базасын дамытуға мүмкіндік береді.

Қорғауға шығарылатын негізгі қағидаттар:

1. Әр түрлі диаметрлі фуллерендердің тіркесімі «ядро-қабық» типті нанотүтікшені құрайтын өткізу спектрінің резонанстық шыңдарының көбеюіне, жоғары орналасқан молекулалық орбиталь мен төменгі бос молекулалық орбиталь арасындағы алшақтықтың жойылуына әкеледі, сонымен бірге тұрақтылық диаграммасында кулондық ромб ауданының кемуі байқалады.

2. Метал ($C_{[14,17]}$, $C_{[14,11]}$) және жартылай өткізгіш ($C_{[14,5]}$) призмандар арасында Шоттки тосқауылының пайда болуынан өзара Ван-дер-Ваальс күшімен коаксиалды байланысқан полипризман нанотүтікшелерінде ($C_{[14,17]}$ - $C_{[14,11]}$ - $C_{[14,5]}$) тұңғыш рет диодтық эффект байқалады .

3. Пассивті графенді кернеусіз (және кернеулі) күйде $\sim 4^\circ$ және $\sim 12^\circ$ муар бұрыштарына бұрау кезінде модуляцияланған саңылау ашылады, оның мәні, сәйкесінше, $1,66 - 1,82$ эВ және $3,78 - 4,69$ эВ ($2,27 - 2,67$ эВ және $4,28 - 4,93$ эВ) аралықтарында өзгереді. Кернеусіз және кернеулі графендердің вольтампер сипаттамасында теріс дифференциалды өткізгіштігі (ТДӨ) бар аймақтар кездеседі және муарлық құрылымының параметрлеріне байланысты әр түрлі кернеу мәндерінде көрінеді.

Алынған нәтижелердің **сенімділігі** нанокұрылғылардың құрастырылған компьютерлік модельдерінің мұқият негізділігімен, нанокұрылымдардың геометриясын оңтайландыру үшін қолданылатын модельдер мен жуықтаулардың қолданылу шегіне сәйкестігімен, көп атомды наножүйелердің атомдық және электронды құрылымы сипаттаманың есептеу әдістерінің дұрыстығын таңдаумен, қамтамасыз етіледі және халықаралық NanoLab, Gaussian және т.б. ғылыми қауымдастықпен мақұлданған Atomistix ToolKit with Virtual компьютерлік лицензиялық бағдарламаларын пайдалану, сондай-ақ жоғары қарқынмен халықаралық ғылыми журналдарда жарияланымдар түрінде тестілеу (Q1, Q2).

Автордың жеке үлесі. Диссертацияның барлық көлемін, зерттеу әдісін таңдауды, есептерді шешуді автор өз бетінше орындайды. Тапсырма қою нәтижелерді талқылау ғылыми жетекшілермен бірлесіп жүргізілді.

Тақырыптың ғылыми жұмыс жоспарларымен байланысы. Бұл диссертациялық жұмыс 2020-2022 жылдарына ЖТН АР08052562 «Бірегей электрлік және магниттік қасиеттері бар наножүйелердің кванттық-тасымалдаушылық сипаттамалары», сондай-ақ 2022-2024 жылдарына ЖТН АР14869773 «Жартылай өткізгіш құрылымдардың электромагниттік импульстармен бұзылуын атомистік модельдеу» атты Қазақстан Республикасы Білім және ғылым министрлігі қаржыландыратын екі ғылыми-зерттеу жобасы аясында орындалды.

Жұмысты апробациялау. Зерттеу нәтижелері халықаралық конференцияларда ұсынылды және талқыланды:

1. «Актуальные проблемы радиофизики» 9-шы Халықаралық ғылыми-практикалық конференциясы (Томск, Ресей, 20-22 қыркүйек, 2021);

2. 10th International conference on Nanomaterials and Advanced Energy Storage Systems (Nur-Sultan, Kazakhstan, August 4-6, 2022);

Әзірбайжан Ғылым және білім министрлігінің Физика институтында шетелдік тағылымдама (04.01.2023-05.02.2023 Баку, Әзірбайжан).

Жарияланымдар. Диссертациялық жұмыста баяндалған зерттеулердің нәтижелері бойынша 6 ғылыми жұмыс жарияланды, оның ішінде: Web of Science дерекқорындағы Science Citation Index Expanded индекстелген және Scopus базасында CiteScore бойынша процентілі бар рецензияланатын ғылыми басылымдарда 3 мақала; халықаралық ғылыми-практикалық конференция нәтижелері бойынша Scopus базасында CiteScore бойынша процентілі бар рецензияланатын ғылыми басылымдарда 2 мақала және 1 пайдалы модельге патент.

1) Sergeyev D., Duisenova A., Solovjov A., Ismayilova N. Electron transport in a stressed moiré 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%).

Диссертацияның құрылымы мен көлемі. Бұл диссертация кіріспеден, бес бөлімнен, қорытындыдан және зерттеудің белгіленген мақсатына, орындалған жұмыстың міндеттеріне және көлеміне сәйкес келетін пайдаланылған дереккөздер тізімінен тұрады. Диссертациялық жұмыс 51 суреттен, 4 кестеден және 159 атаудан тұратын библиографиядан тұрады.

Диссертацияның негізгі мазмұны.

Кіріспеде диссертациялық жұмыстың өзектілігі және оның негізгі ережелері берілген.

Бірінші бөлім бойынша қорытындылар: Жүргізілген әдеби шолу фуллерен тәрізді материалдардың бірегей электрофизикалық қасиеттері бар екенін көрсетті, бұл олардың негізінде жаңа перспективалы наноэлектрондық құрылғыларды жасауға мүмкіндік береді.

1. Фуллерендердің көміртегі қаңқасының ішінде атомдар мен заттарды ұстай алатын тірек құрылымы бар, бұл инкапсуляцияланған атомдардың қасиеттеріне байланысты олардың электрлік тасымалдау қасиеттерін өзгерте алады. Фуллерендердің тағы бір ерекшелігі-олар шағын диаметрлі фуллерендерді ұстай алады. Көптеген фуллерендердің металл өткізгіштігі бар екенін ескере отырып, қажетті диаметрлі инкапсуляцияланған фуллеренді таңдау арқылы фуллерен құрылымының электр сыйымдылығын басқаруға болады. Фуллереннің ерекше қасиеттеріне тұрақтылық, көміртек атомдарының сублимация температурасы 850 °C жетеді, олар тозуға төзімді, үйкеліс коэффициенті графитке қарағанда әлдеқайда төмен, сонымен қатар 1000 °C жоғары температураға дейін қыздыруға төтеп бере отырып, термиялық тұрақтылыққа ие, ал көлемдік серпімділік модулі 668 ГПа жетеді.

2. Полипризмалар тұрақты көпбұрыш түрінде шағын көлденең қимаға ие, бұл күшті коваленттік байланыстың пайда болуына ықпал етеді. Полипризман нанотүтікшелерінің тиімді диаметрінің өсуі олардың қасиеттерінің металдан жартылай өткізгішке дейін өзгеруіне әкеледі. Олар қатты және берік құрылымына байланысты тозуға төзімді, жоғары термиялық тұрақтылыққа ие, температура мәндері $700\text{ }^{\circ}\text{C}$, серпімділік, полипризман Юнг Модүлінің мәні 100-200 ГПа, қаттылығы 10-15 гПа-ға жетеді, бұл алмаздың қаттылығымен салыстырылады.

3. Ван-дер-Ваальс күшімен бір-бірімен байланысқан белгілі бір кіші бұрышпен қабаттасқан графен пленкалары болып табылатын муар графендері. Муар графеніндегі графеннің бұралу бұрышы оның электронды құрылымына әсер етуі мүмкін, нәтижесінде олар металл және жартылай өткізгіш қасиеттерге ие болуы мүмкін. Төмен температурада муар графендері асқын өткізгіштің қасиеттерін көрсете алады. Бұл материалдар бір электронды Транзисторлар мен наноэлектроника құрылғыларын жасауда өзекті және қызықты.

Екінші бөлім бойынша қорытындылар:

Бұл бөлімде Ван-дер-Ваальс фуллерен тәрізді материалдардың атомдық құрылымын компьютерлік модельдеудің және олардың электрлік тасымалдау қасиеттерін электронды тығыздық функционалдық теориясы арқылы тепе-теңдік емес әдіспен бірге болжаудың теориялық негіздері мен әдіснамалық тәсілдері берілген. айырбастау-корреляциялық функционалдылықты және жалпыланған градиенттік жуықтауын, сондай-ақ GGA-PBE әдістерін ескере отырып, Грин функциялары өріс, энергия балансы және молекулалық динамика.

ТФТ әдісін таңдау көп электронды жүйенің энергиясын бірінші принциптерден жоғары дәлдікпен есептеуді қамтамасыз етеді, сонымен бірге салыстырмалы түрде аз есептеу ресурстарын қажет етеді, ал тепе-теңдіксіз Грин функциясы әдісін қолдану сонымен қатар негізгі зерттеу әдістеріне негізделген, бірақ эмпирикалық тұрақтылармен модельдеу нәтижелерін "реттеу" мүмкіндігін жоққа шығаратын еркін параметрлері жоқ және электронды заряд тығыздығының ауытқуларының әсерін ескеруге мүмкіндік береді. атомдар арасындағы өзара әрекеттесу процесі.

Фуллерен наноқұрылғыларының электрлік тасымалдау қасиеттерін модельдеу бір электронды туннельдеу теориясын ескере отырып жүзеге асырылады, өйткені наноқұрылғы электродтары мен олардың арасында орналасқан фуллерен молекуласы арасында туннельдік өтулер пайда болады. Электродтар мен Арал арасындағы күшті және әлсіз байланыс режимдерін ескере отырып, бір электронды транзисторлардың электрлік сипаттамаларын есептеуге мүмкіндік беретін Kaasbjerg-Stokbro жартылай эмпирикалық моделі де қолданылды.

ТФТ сипаттамаларымен қатар, электронды тығыздықты, толық энергияны, наноқұрылымның тұрақтылық диаграммаларын анықтаудың есептеу әдістері келтірілген.

Үшінші бөлім бойынша қорытындылар: Бұл бөлімде тығыздық функционалының теориясы және айнымалы Грин функциялары әдісін қолдану шеңберінде «Au–C₁₈₀–Au», «Au–C₈₀@C₁₈₀–Au» және «Au–(C₂₀@C₈₀)@C₁₈₀–Au» модельдік наноөткізгіштерінің электр тасымалдау қасиеттерін зерттедік және келесі нәтижелер алынды:

1. Фуллерен қуысына C₁₈₀ шағын радиусты фуллерен C₂₀, C₈₀ енгізген кезде өткізу спектрінің резонанстық шыңдары санының артуы анықталды, бұл ұқсас нанобъектілердің электр өткізгіштігінің жақсарғанын көрсетеді. -0,45 эВ-тан 0,45 эВ-қа дейінгі аралықта «Au–C₁₈₀–Au» наноөткізгіштің өткізу спектрінде ЖОМО - ТБМО саңылауы пайда болады, оның ені 0,9 эВ-ге тең. Алайда C₁₈₀ шағын өлшемді фуллерендерге енгізілгенде, бұл алшақтық жоғалады және C₈₀@C₁₈₀-, (C₂₀@C₈₀)@C₁₈₀- наноөткізгіштердің өткізу спектрінде ең жоғары резонанстық құрылымдар сериясы пайда болады.

2. C₁₈₀-наноөткізгіште кулонтекес ерекше сатылы құрылымдар пайда болатыны көрсетілген. Вольтампер сипаттамасында C₈₀@C₁₈₀-, (C₂₀@C₈₀)@C₁₈₀- наноөткізгіштерде бұл сатылы құрылымдар молекулалардың меншікті электр сыйымдылығының жоғарылауымен байланысты кулондық энергияның әлсіреуіне байланысты «бұлыңғырланады».

3. dI/dV C₁₈₀-наноөткізгіштік дифференциалды өткізгіштік спектрінде 0,73 В периоды бар кулон тек 8 шыңдық құрылым, ал C₈₀@C₁₈₀-, (C₂₀@C₈₀)@C₁₈₀- спектрінде сәйкесінше 0,74 В және 0,61 В периодты 7 шыңдық құрылым пайда анықталды.

4. C₁₈₀-БЭТ кулондық блокада режимінен шығару үшін C₈₀@C₁₈₀-, (C₂₀@C₈₀)@C₁₈₀- наноөткізгіштерге негізделген транзисторлармен салыстырғанда бастапқы электродтарда үлкен кернеу қажет екендігі көрсетілген. Заряд тұрақтылығы диаграммасындағы кулондық алмаз ауданын C₈₀@C₁₈₀-, (C₂₀@C₈₀)@C₁₈₀-БЭТ көмегімен азайту олардың негізінде интегралды микросхемалардың жылдамдығын арттыруға мүмкіндік береді.

Модельдеу нәтижелері мен алынған мәліметтер жылдам әрекет ететін бір электронды наноқұрылыстарды құруда пайдалы болуы мүмкін. Қол жеткізілген нәтижелер жоғары технологиялық наноэлектроника құрылыстарын әзірлеу кезінде практика жүзінде маңызды боп табылатын, тағайындалған электр тасымалдау сипаттамалары бар «ядро-қабық» типті фуллеренді наноөткізгіштерді мақсатты түрде жобалау үшін жаңа мүмкіндіктер ашады.

Төртінші бөлім бойынша қорытындылар: Бұл бөлімде біз тығыздық функционалы теориясын пайдалана отырып, C_[14,17] – C_[14,11] – C_[14,5] бар телескопиялық призмалық нанотүтікшелердің электрлік тасымалдау өнімділігін зерделеу үшін зерттеу жүргіздік. Талдау электронды тығыздықты, өткізу спектрлерін, вольтампер сипаттамаларын және дифференциалды өткізгіштікті бағалауды қамтыды және келесі нәтижелер алынды:

1. Әр түрлі қималы нанотүтіктер түріндегі телескопты полипризмандардың қосылуы олардың электрлік қасиеттерінің елеулі өзгеруіне әкелетіндігі көрсетілді. Телескопты полипризмандарды өткізу

спектрінде $C_{[14,17]} - C_{[14,11]} - C_{[14,5]} - 0,5$ эВ-тан 2,2 эВ-қа дейінгі диапазонда ені 2,7 эВ құрайтын ЖОМО - ТБМО арасында энергетикалық саңылау пайда болады.

2. $C_{[14,17]} - C_{[14,11]}$ полипризмандарының ВАС-да «кулонды баспалдақ» түріндегі сатылы аймақтар түзілуі көрсетілді, олар кулонды қоршау әсерінің салдарынан бір электрондық құрылғыларда байқалады.

3. $C_{[14,11]} - C_{[14,5]}$ сияқты электр өткізгіштігінің әр түрлі түрлерімен полипризмандардың коаксиалды қосылуы Шоттки кедергісінің және диодтық эффект әкелетіні анықталды. $C_{[14,17]}$ және $C_{[14,11]}$ полипризмандары метал қасиеттеріне бар екендігі белгілі болды, ал $C_{[14,5]}$ полипризманы 0,4 эВ тыйым салынған аймағы бар жартылай өткізгіштің сипаттамаларын танытады.

Берілген бөлімде берілген телескоптық призмалық нанотүтікшелердің электрлік қасиеттерінің ерекшеліктерін білу жоғары өнімді наноэлектроника құрылғыларын жасау үшін маңызды және Шоттки нанодиодтарын есептеуде пайдалы болуы мүмкін

Бесінші бөлім бойынша қорытындылар: Бұл бөлімде графеннің екі қабатынан тұратын кернеусіз, кернеулі және жоғары кернеулі муар биграфенді наноқұрылғылардың электрлік тасымалдау қасиеттерін модельдеу нәтижелері Берілген, мұнда графеннің бір қабатымен электродтармен Электрлік байланыс орнатылады, ал екіншісі электрлік бейтарап болып қалады және келесі ғылыми нәтижелер алынады:

1. Кернеулі екі қабатты графен жүйесінде Ферми деңгейіндегі К-нүктесінің аймақтық құрылымының ерекшеліктері сақталатындығы және жоғары кернеулі күйде түбегейлі өзгеретіндігі анықталды, бұл көміртек атомдары байланысының ВДВ-дан коваленттікке өзгеруінен болуы ықтимал. сонымен қатар пассивті графенді кернеусіз (және кернеулі) күйде белгілі бір бұрыштарға ($\sim 4^\circ$ және $\sim 12^\circ$) бұрау кезінде энергия саңылауы ашылатындығы анықталды, оның мәні, сәйкесінше, 1,66 - 1,82 эВ және 3,78 - 4,69 эВ (2,27 - 2,67 эВ және 4,28 - 4,93 эВ) өзгереді.

2. Екі қабатты графеннің өткізгіштік спектрі ең жоғары құрылымға ие және бір қабатты графен спектріне қарағанда реті төмен екендігі көрсетілген, сонымен қатар графендердің арақашықтығы 2,85 Å-ге азайған кезде шындық құрылымдар бұлыңғырлана бастайды және олардың квази-периодты сипаты ішінара бұзылады, сонымен қатар кернеусіз күйде пассивті графенді $\theta = 4^\circ$ -қа бұрау кезінде 0 В-тан 1,1 В-қа дейінгі ығысу кернеуінде ток шамасының ~ 10 мкА-ге дейін біртіндеп жоғарылауы, содан кейін ТДӨ-нің әлсіз көрсетілген аймағы пайда болуымен ~ 185 мкА-ге дейін токтың күрт жоғарылауы, а $\theta = 12^\circ$ кезінде 1,35 В-тан 3 В-қа дейінгі ығысу кернеуінде 220 мкА-ге дейінгі токтың желілік өсуі байқалады. $0,4 \div 1,3$ В ВАС интервалында айқын ТДӨ аймағын (-1,8 мкСм кезінде -0,71 В және 0,8 В) қалыптастыра отырып, N-тәрізді көрініс алады. Осы өзгерістер наноқұрылымның dI/dV спектрінде де көрінеді.

3. Ван-дер-Ваальс байланысы арқылы байланысқан графен, силицен және молибден дисульфидінің қосындысынан тұратын наноқұрылғыларда силицен мен молибден дисульфидінің өзара әрекеттесуі кезінде оның өткізу

спектрінде және ВАС-да анықталған негізінен металл қасиеттері бар жаңа наножүйе түзілетіндігі көрсетілген. «G – MoS₂ – Sil» гибридті наноқұрылымында Шоттки тосқауылы түзілетіндігі және диодтың түзеткіш қасиеттеріне ие екендігі, сондай-ақ оның ВАС оң кернеуде кулондық баспалдақтар пайда болатыны анықталды.

Нәтижелер жоғары өнімді транзисторларды әзірлеу және миниатюризациялау, жоғары сезімтал магнит өрісі, қысым және басқа заттар датчиктерін жасау үшін қолданылуы мүмкін.

Қорытындыда негізгі нәтижелер келтірілді: Диссертацияда фуллерен тәрізді құрылымдардың электрлік тасымалдау қасиеттерін модельдік зерттеу нәтижелері келтірілген («ядро – қабық» типті нанотүтікті құрайтын фуллерен конструкциялары, бір өлшемді коаксиалды біріктірілген призмалық нанотүтікшелер, муар екі қабатты графен пленкалары). Біз атқарылған жұмыстың маңызды нәтижелерін тізімдейміз:

1. Әртүрлі диаметрлері бар «Au–C₁₈₀–Au», «Au–C₈₀@C₁₈₀–Au» және «Au–(C₂₀@C₈₀)@C₁₈₀–Au» фуллерендерінің комбинациялары модельденген, нәтижесінде бірегей электрлік қасиеттер пайда болады, бұл Ван-дер-Ваальс 0D наноқұрылымдарына негізделген бір электронды транзисторлардың жылдамдығын арттыруға мүмкіндік береді. Ұқсас нанобъектілерде келесі құбылыстар байқалады: эндофуллерендердің өткізу спектрінің резонанстық шыңдарының көбеюі, жоғары орналасқан молекулалық орбиталь мен төменгі бос молекулалық орбиталь арасындағы алшақтықтың жоғалуы; сондай-ақ кулондық энергияның әлсіреуіне байланысты вольтамперлік сипаттамада кулондық шығу тегі айқын емес сатылы құрылымдардың пайда болуы, заряд тұрақтылығы диаграммасында кулондық алмаздың ауданының азаюы.

2. Телескоптық полипризмалардың әртүрлі қималары бар нанотүтікшелер түрінде қосылуы олардың электрлік қасиеттерінің айтарлықтай өзгеруіне әкелетіні көрсетілген, атап айтқанда: телескоптық полипризмалардың C_[14,17]-C_[14,11]-C_[14,5] диапазонында -0,5 эВ-ден 2,2 эВ-ге дейін жоғары орналасқан молекулалық орбиталь мен төменгі молекулалық орбиталь арасында энергетикалық алшақтық пайда болады ені 2,7 эВ болатын бос молекулалық орбиталь; полипризмандардың вольтамперлік сипаттамасында C_[14,17] – C_[14,11] кулондық блокаданың әсерінен "кулондық баспалдақтар" түрінде сатылы учаскелер пайда болады; күй тығыздығын талдаудан C_[14,17] және C_[14,11] бар полипризмандардың металл қасиеттері бар екендігі анықталды, ал C_[14,5] бар полипризманның жартылай өткізгіштік қасиеттері 0,4 эВ айқын жолақ диапазонына ие. Металл (C_[14,17], C_[14,11]) және жартылай өткізгіш (C_[14,5]) арасында Шоттки тосқауылының пайда болуына байланысты Ван-дер-Ваальс күшімен коаксиалды байланысқан полипризмандық нанотүтікшелерде диодтық әсер анықталды) призмалар.

3. Пассивті графенді кернеусіз (және кернеулі) күйде ~4° және ~12° муар бұрыштарына бұрау кезінде ~1,66 эВ және ~3,78 эВ (~2,27 эВ және ~4,28 эВ) модуляцияланған саңылау ашылатыны анықталды, бұл элементтік негіз ретінде перспективалық қолдану үшін саңылаусыз моноқабатты графеннің жетіспеушілігін жоюға мүмкіндік береді жаңа кванттық технологиялар.

Кернеусіз және кернеулі графендердің вольтампер сипаттамасы теріс дифференциалды өткізгіштігі бар учаскелер бар, олар муар құрылымының параметрлеріне байланысты әр түрлі кернеу мәндерінде көрінеді. $\theta = 4^\circ$ кернеу жағдайында кернеусіз күйден шамалы ауытқу пайда болатыны анықталды, ал $\theta = 12^\circ$ dI/dV-спектр асимметриялы болады, -15 мкСм теріс дифференциалды өткізгіштік тек 0,8 В оң кернеуде пайда болады, ал теріс кернеуде теріс дифференциалды өткізгіштік тежеледі.

Қойылған міндеттердің шешімдерінің толықтығын бағалау. Диссертациялық жұмыста қойылған міндеттер толық көлемде орындалды, барлық модельдік зерттеулер жүргізілді және алынған нәтижелердің сәйкестігі дәлелденді. Алынған нәтижелер Қ.Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университетінің жанындағы "Материалдардың радиациялық физикасы" ғылыми орталығындағы семинарларда, сондай-ақ халықаралық конференцияларда талқыланды.

Зерттеу нәтижелерін нақты пайдалану бойынша ұсыныстар. Алынған іргелі нәтижелердің практикалық маңызы бар. Ғылыми нәтижелер бір электронды тасымалдаудың ерекшеліктерін зерттеу арқылы алынады және фуллерен тәрізді материалдар негізінде бір электронды транзисторларды жасауда пайдалы болуы мүмкін.

Осы саладағы үздік жетістіктермен салыстырғанда орындалған жұмыстың ғылыми деңгейін бағалау. Диссертациялық жұмыстың жоғары ғылыми деңгейі WOS және Scopus халықаралық ғылыми журналдарында жоғары көрсеткіштермен (Q1, Q2), пайдалы модельге патентпен және халықаралық ғылыми-практикалық конференцияларға қатысумен 5 жарияланым түрінде сынақтан өткізумен қамтамасыз етілген. Диссертациялық зерттеудің нәтижелері екі халықаралық ғылыми-практикалық конференцияда сыналды.

Қорытындылай келе, Мен өзімнің ғылыми кеңесшілеріме физика-математика ғылымдарының кандидаты, профессор Сергеев Дәулет Мақсатұлына, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор Соловьев Андрей Львовичке, PhD докторы Исмаилова Нармин Ариф қызға баға жетпес қолдауы үшін және диссертациялық жұмысты сәтті аяқтаудың кілті болған зерттеу барысында туындаған мәселелерді шешуге көмектескені үшін терең ризашылығымды білдіремін.