

Жобаның атауы, ЖТН	AP08052562 – Бірегей электрлік және магниттік қасиеттері бар наножүйелердің кванттық-тасымалдаушылық сипаттамаларын зерттеу
Іске асыру мерзімі	01.05.2020-31.12.2022
Жобаның жетекшісі	Сергеев Дәулет Мақсатұлы ф.-м.ғ.к., профессор
Реферат	<p>Аталмыш жоба ерекше электрлік және магниттік қасиеттері бар металл (не болмаса жартылайөткізгіш) электродтар арасына (наносаңылауға) орналастырылған молекулалар түріндегі наноысандардан тұратын наножүйелердің кванттық-тасымалдаушылық сипаттамаларын зерттеуге арналған. Мұндай нысандар наноэлектрониканың негізгі белсенді элементтері ретінде жұмыс жасайды: нанодиодтар, нанотранзисторлар және басқалар. Дегенмен, наноқұрылымының энергетикалық сипаттамалары геометриялық өлшемдер мен молекулалардың электронды құрылымдарының кішігірім өзгерісіне де тәуелді. Сондықтан осы жобада (бірінші қағидаттардан) наноқұрылымдар бірегей электрлік және магниттік қасиеттері бар наноқұрылымдарды құру үшін таңдалады, сондай-ақ олардың кванттық-тасымалдаушы сипаттамалары зерттеледі. Нәтижесінде наножүйелердің кванттық тасымалдауы туралы жаңа деректер алынатын болады. Наноқұрылымдарды құру үшін ерекше электрлік және магниттік қасиеттері бар наноқұрылымдарды іздеу және таңдау жүргізіледі және олардың геометриясын оңтайландыру, электр өрісінің әсерінен наноқұрылымдардың іс-әрекетін есептеуге арналған жеткілікті математикалық және компьютерлік модель құрылады. Электрондық наноқұралдардың (нанодиодтар, наноайырып-қосқыштар, наносенсорлар) модельдері жасалады және олардың оңтайлы параметрлері таңдалады, негізгі электртасымалдаушылық сипаттамаларын анықталады. Компьютерлік модельдеудің әртүрлі әдістерін қолдана отырып, бірэлектронды транзисторлардағы электронды тасымалдау механизмдерін, олардың негізгі электрофизикалық сипаттамаларын анықтау мақсатында кешенді зерттеу жүргізіледі. Көміртекті наноқұрылымдарда спин-тәуелді тасымалдау құбылыстары зерттеледі, олардың негізінде спиндік сүзгі модельдері жасалады. Асқынөткізгіштік наноқұрылымдарда бірнеше реттік Андреев шағылуы эффектісінің ерекшеліктері зерттеледі. Алынған іргелі заңдылықтар наноэлектрониканың жаңа перспективті электрондық құрылымын құруға пайдаланылуы мүмкін. Төменөлшемді жүйелердің кванттық-тасымалдаушылық қасиеттерін зерттеу барысында алынған нәтижелер электрониканың электрондық компоненттерін кішірейту мақсатында пайдаланылуы мүмкін.</p>
Өзектілігі	<p>Соңғы жылдары электроникада қарқынды алға жылжу байқалуда, оның негізгі бағыты болып электронды бөліктердің миниатюризациясы табылады. Кремний мен галий арсениді негізіндегі заманауи жартылайөткізгіш электроника осы материалдардың іргелі сипаттамаларына байланысты өзінің физикалық шегіне жетті. Сондықтан қазіргі уақытта микро- және наноэлектрониканың жаңа типті электронды</p>

	<p>құрылғыларын жасау үшін, бақылауға келетін электрофизикалық қасиеттері бар жаңа материалдарды игеру өзекті. Осыған байланысты дәстүрлі жартылай өткізгіштерден түбегейлі жаңа электрофизикалық қасиеттерімен ерекшеленетін экзотикалық материалдар негізінде наноэлектрониканың жаңа бағыттары дамуда. Наноэлектрониканың мұндай бағыттарына асқынөткізгіштік, органикалық, молекулалық және бір электрониканы жатқызуға болады, мұнда жұмыс объектілері наноөлшемді құрылымдар болып табылады. Қазіргі уақытта наноэлектроника элементтерінің дамуы кейбір проблемалардың пайда болуымен баяулады, мысалы, атом өлшеміндегі элементтердің шамадан тыс орналасуы кезінде "бейорганикалық" құрылымдардан жылуды кетіру, энергияны тұтынуды азайту және өнімділікті арттыру, нейрондық желілер мен наноэлектроника элементтерінің үйлесімділігі, жаңа тізбек элементтерінің кремний платформасына қосылуы, сондай-ақ макро контактілердің қысқа тұйықталуы мен бұзылу ықтималдығы. Аталған проблемаларды шешу үшін наноқұрылымдардағы электрондық көлік механизмдерінің ерекшеліктерін жан-жақты кешенді іргелі және қолданбалы зерттеу қажет. Сондықтан бірегей функционалды қасиеттері бар наноқұрылымдарды іздеу және олардың негізінде жоғары тиімді наноқұрылымдарды дамыту конденсацияланған күй физикасы мен физикалық электрониканың өзекті міндеті болып табылады. Бұл жоба наноэлектрониканың перспективалық элементтерін құру кезінде туындайтын мәселелерді зерттеуге және шешуге, сондай-ақ осындай наноқұрылыстардың кванттық-көліктік сипаттамаларын теориялық талдауға арналған.</p>
Мақсаты	<p>Бұл жобаның мақсаты электрондық тығыздық функционалы теориясының (бірінші қағидаттардан), айналымы Грин функциясының әдісінің (DFT + NEGF) және басқа сандық модельдеу әдістерінің шеңберінде жүзеге асырылады: тиімді наноэлемент жасау үшін бірегей функционалды қасиеттері бар наноқұрылымдарды таңдау; олардың негізінде наноқұрылғылардың әр түрлі үлгілерін жасау - нанодиодтар, нанотранзисторлар, нано ажыратып-қосқыштар және басқалар; наноқұрылғылардың кванттық-тасымалдаушы сипаттамаларын зерттеу, олардың электр және магниттік қасиеттерін зерттеу.</p>
Күтілетін нәтижелер	<p>– Наноқұрылымдарды құру үшін бірегей электрлік және магниттік қасиеттері бар жаңа наноқұрылымдарды іздестіру жүргізіледі, олардың геометриялары PBE, B3LYP және т.б. алмасу-корреляциялық функционалдарымен жалпыланған градиенттік жуықтауды (GGA) қолдана отырып оңтайландырылады, электр өрісі әсерінен наноқұрылымдардың іс-әрекетін есептеу үшін жеткілікті математикалық және компьютерлік модельдер жасалады.</p> <p>– Электронды наноқұрылғылардың - нанодиодтардың, наноайырып-қосқыштардың, наносенсорлардың - жеке және күрделі молекулалардың негізінде жасалады, оңтайлы</p>

	<p>параметрлер таңдалады және олардың негізгі электрлік сипаттамалары есептеледі.</p> <p>– Әр түрлі компьютерлік модельдеу әдістерін қолданатын эндофуллерендерге, призмандарға және басқа да наноматериалдарға негізделген бір электронды транзисторларда электронды тасымалдау механизмдері жан-жақты зерттеліп, олардың негізгі электрофизикалық сипаттамалары анықталады.</p> <p>– Әртүрлі геометриялық фигуралары бар квазиметриялық көміртекті нанокұрылымдарда спинге тәуелді көліктің әсер ету ерекшеліктері зерттеліп, олардың негізінде спиндік сүзгінің модельдері жасалады.</p> <p>– Өткізгіштің әртүрлі типіндегі наноматериалдардан тұратын асқынөткізгіштің нанокұрылымдарындағы бірнеше реттік Андреев шағылу эффектісінің ерекшеліктері зерттелетін болады және перспективалы электрондық криоэлектрондық құрылғыларды құру үшін осындай нанокұрылымдарды пайдалану бойынша ұсыныстар жасалады.</p>
<p>Зерттеу тобы</p>	<p><i>Жетекші:</i> <i>Сергеев Даулет Максатович</i> – к.ф.-м.н., профессор, индекс Хирша h=8 (Author ID в Scopus – 55237792800; Researcher ID - O-3783-2017; ORCID - 0000-0001-7426-3039). https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=55237792800</p> <p><i>Мясникова Людмила Николаевна</i> – к.ф.-м.н., ассоц. профессор, индекс Хирша h=5 (Author ID в Scopus – 16481268100; Researcher ID - O-9697-2017; ORCID - 0000-0003-3326-7206). https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=16481268100</p> <p>Жантурина Нургул Нигметовна, PhD, ассоц. профессор, индекс Хирша h=6 (Author ID в Scopus – 55588115900; ORCID - 0000-0001-9540-6334). https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=55588115900</p> <p>Петренко Евгений Васильевич – к.ф.-м.н., индекс Хирша h=3 (Author ID в Scopus – 57209539205) https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57209539205</p> <p>Истляуп Асель Сарбековна – докторант, h=1 (Author ID в Scopus – 57211115630; ORCID - 0000-0003-3423-5126). https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57211115630</p> <p>Дуйсенова Айнур Гайсиевна – докторант, магистр (ORCID 0000-0003-4868-1944)</p>
<p>Ғылыми басылымдардағы жарияланымдары</p>	<p>1. Sergeev D. Single Electron Transistor Based on Endohedral Metallofullerenes Me@C60 (Me = Li, Na, K) // Journal of Nano- and Electronic Physics. – 2020. – Vol. 12, No 3. – 03017. https://doi.org/10.21272/jnep.12(3).03017</p> <p>2. Sergeev D., Ashikov N., Zhanturina N. Electric transport</p>

	<p>properties of a model nanojunction “Graphene – Fullerene C60 – Graphene” // International Journal of Nanoscience. – 2021. – Vol. 20, No 1. – 21500071. https://doi.org/10.1142/S0219581X21500071</p> <p>3. D. Sergeyev, N. Zhanturina, L. Myasnikova, A.I. Popov, A. Duisenova, A. Istlyaup. Computer simulation of the electric transport properties of the FeSe monolayer // Latvian journal of physics and technical sciences. – 2020. – Vol. 57, No 6. – P. 3-11. https://doi.org/10.2478/lpts-2020-0029</p> <p>4. D. Sergeyev. Nanoswitch based on ring-opening of 1,3-cyclohexadiene molecule // International Journal of Nanoelectronics and Materials. – 2021. – Vol. 14, No 1. – P.49-60.</p> <p>5. Sergeyev D. One-dimensional Schottky nanodiode based on telescoping polyprismanes // Advances in Nano Research. – 2021. – Vol. 10, No 4. – P. 339-347. https://doi.org/10.12989/anr.2021.10.4.339</p> <p>6. Sergeyev D., Duisenova A. Electron Transport in Model Quasi-Two-Dimensional van der Waals Nanodevices // Technical Physics Letters. – 2021. – Vol. 47, No 4. – P. 375–378. https://doi.org/10.1134/S1063785021040295</p> <p>7. Petrenko E.V., Omelchenko L.V., Kolesnichenko Yu.A., Shytov N.V., Rogacki K., Sergeyev D.M., Solovjov A.L. Study of fluctuation conductivity in YBa2Cu3O7–δ films in strong magnetic fields // Low Temperature Physics/Fizika Nizkikh Temperatur. – 2021. – Vol. 47, No 12. – P. 1148–1156.</p>
<p>Зерттеу тақырыбы бойынша конференцияға қатысу</p>	<p>«Радиофизиканың өзекті мәселелері» 9-шы Халықаралық ғылыми-практикалық конференция, 20 - 22 қазан, 2021, Томск, Ресей.</p>