

Наименование проекта, ИРН	AP08052562 – Исследование квантово-транспортных характеристик наносистем с уникальными эксплуатационными электрическими и магнитными свойствами
Сроки реализации	01.05.2020-31.12.2022
Руководитель проекта	Сергеев Даулет Максатулы к.ф.-м.н., профессор
Реферат	<p>Данный проект направлен на изучение квантово-транспортных характеристик наносистем с уникальными эксплуатационными электрическими и магнитными свойствами, представляющие собой нанообъекты в виде молекулы, помещенные между металлическими (либо полупроводниковыми) электродами (в нанозазор). Такие объекты выступают в роли базовых активных элементов нанoeлектроники: нанодиоды, нанотранзисторы и другие. Однако энергетические характеристики наноустройств сильно зависят от малейшего изменения геометрических размеров и электронных структур молекул. В проекте (из первых принципов) будут подобраны наноструктуры с уникальными эксплуатационными электрическими и магнитными свойствами для создания наноустройств, а также исследованы их квантово-транспортные характеристики. В результате будут получены новые данные о квантовом транспорте наносистем. Будет осуществлен поиск новых наноструктур с уникальными электрическими и магнитными свойствами для создания наноустройств, оптимизированы их геометрии с помощью обобщенного градиентного приближения с разными обменно-корреляционными функционалами, построены адекватные математические и компьютерные модели для расчета поведения наноструктур под влиянием электрического поля. Будут разработаны модели электронных наноустройств – нанодиоды, нанопереклюатели, наносенсоры – на основе как одиночных, так и комплексных молекул, будут выбраны оптимальные параметры и рассчитаны их основные электротранспортные характеристики. Будут комплексно исследованы механизмы электронного транспорта в одноэлектронных транзисторах и определены их основные электрофизические характеристики. Будут исследованы особенности эффекта спин-зависимого транспорта в квазидвумерных углеродных наноструктурах с различными геометрическими формами и разработаны на их основе модели спинового фильтра. Будут исследованы особенности эффекта многократного андреевского отражения в сверхпроводящих наноструктурах. Полученные фундаментальные закономерности могут быть полезными для создания новых перспективных электронных приборов нанoeлектроники. Научные результаты по изучению квантово-транспортных свойств низкоразмерных систем могут быть полезными для миниатюризации электронных компонентов электроники.</p>
Актуальность	В последние годы наблюдается интенсивный прогресс в электронике, центральным направлением которой является

	<p>миниатюризация электронных компонентов [1-3]. Современная полупроводниковая электроника на основе кремния и арсенида галлия уже подошла к своему физическому пределу, обусловленному фундаментальными характеристиками данных материалов. Поэтому в настоящее время для создания новых типов электронных приборов микро- и наноэлектроники все более актуальным становится освоение новых материалов с контролируемыми электрофизическими свойствами [4]. В этой связи, развиваются новые направления наноэлектроники на базе экзотических материалов, отличающихся принципиально новыми электрофизическими свойствами от традиционных полупроводниковых. К таким направлениям наноэлектроники можно отнести сверхпроводниковую, органическую, молекулярную и одноэлектронику, где рабочими объектами являются наноразмерные структуры. В настоящее время развитие элементов наноэлектроники замедлилось в связи с появлением некоторых проблем, таких как отвод тепла от «неорганических» конструкций при сверхплотном расположении элементов атомных размеров, уменьшение энергопотребления и увеличения быстродействия, совместимость элементов нейронных сетей и наноэлектроники, соединение новых элементов схемы с кремниевой платформой, а также высокая вероятность короткого замыкания макроконтрактов и пробоя. Для решения перечисленных проблем требуется всестороннее комплексные фундаментальные и прикладные исследования особенностей механизмов электронного транспорта в наноструктурах. Поэтому поиск наноструктур с уникальными функциональными свойствами и разработка на их основе высокоэффективных наноустройств является актуальной задачей физики конденсированного состояния и физической электроники. Данный проект посвящен исследованию и решению задач, возникающих при конструировании перспективных элементов наноэлектроники, а также теоретическому анализу квантово-транспортных характеристик подобных наноустройств.</p>
Цели	<p>Целью настоящего проекта является в рамках теории функционала электронной плотности (из первых принципов), метода неравновесных гриновских функций (DFT+NEGF) и других методов численного моделирования: подбор наноструктур с уникальными функциональными свойствами для создания эффективных наноустройств; на их основе создание различных моделей наноустройств – нанодиоды, нанотранзисторы, нанопереключател и другие; исследование квантово-транспортных характеристик наноустройств, изучение их электрических и магнитных свойств.</p>
Ожидаемые результаты	<p>– Будет осуществлен поиск новых наноструктур с уникальными электрическими и магнитными свойствами для создания наноустройств, оптимизированы их геометрии с помощью обобщенного градиентного приближения (GGA) с</p>

	<p>обменно-корреляционными функционалами PBE, B3LYP и другие, построены адекватные математические и компьютерные модели для расчета поведения наноструктур под влиянием электрического поля.</p> <ul style="list-style-type: none"> – Будут разработаны модели электронных наноустройств - нанодиоды, нанопереклюатели, наносенсоры – на основе как одиночных, так и комплексных молекул, будут выбраны оптимальные параметры и рассчитаны их основные электротранспортные характеристики. – Будут комплексно исследованы механизмы электронного транспорта в одноэлектронных транзисторах на основе эндофуллеренов, призматов и других наноматериалов с применением различных методов компьютерного моделирования и определены их основные электрофизические характеристики. – Будут исследованы особенности эффекта спин-зависимого транспорта в квазидвумерных углеродных наноструктурах с различными геометрическими формами и разработаны на их основе модели спинового фильтра. – Будут исследованы особенности эффекта многократного андреевского отражения в сверхпроводящих наноструктурах, состоящих из комбинации сверхпроводника с наноматериалами различных типов проводимостей, и выработаны рекомендации по применению подобных наноструктур для создания перспективных электронных приборов криоэлектроники.
<p>Исследовательская группа</p>	<p><i>Руководитель:</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>Мясникова Людмила Николаевна – 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 Айнура Гайсиевна – докторант, магистр (ORCID</p>

	0000-0003-4868-1944)
<p>Список опубликованных работ</p>	<p>1. Sergeyev 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. Sergeyev D., Ashikov N., Zhanturina N. Electric transport 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>Участие в конференции по теме исследования</p>	<p>9-ая Международная научно-практическая конференция «Актуальные проблемы радиофизики», 20 - 22 Октября 2021, Томск, Россия.</p>