

Жобаның атауы, ЖТН	AP23488734 – Өтпелі металдар дихалькогенидтері негізіндегі бірөлшемді және екіөлшемді Ван-дер-Ваальс наногетероқұрылғыларының электрондық және кванттық-тасымалдау қасиеттерін бірінші қағидаттан зерттеу
Іске асыру мерзімі	01.01.2024-31.12.2026
Жобаның жетекшісі	Сергеев Дәулет Мақсатұлы, ф.-м.ғ.к., профессор
Реферат	<p>Электрониканың ғылыми-технологиялық базасының дамуымен оның электронды компоненттерін біртіндеп миниатюризациялау үдерісі байқалады. Өз кезегінде ол – электронды жүйелердің функционалды және құрылымдық күрделенуге, олардың беріктілігі мен жылдам әрекет етуіне, энергияны тұтынуды азайтуға және т.б. әкеледі. Орналастыру тығыздығының едәуір өсуі және электронды компоненттер мөлшерінің төмендеуі түбегейлі жаңа идеялар негізінде мүмкін болады. Қазіргі уақытта ерекше электрофизикалық сипаттамалары бар наноэлектрондық құрылғылардың прототиптері жасалды. Наноэлектрониканың жаңа бағыттарын әзірлеу жұмыстары жүргізілуде. Электрондық техниканың перспективалық материалдарының бірі ретінде, Ван-дер-Ваальс күші арқылы бір-бірімен өзара байланысқан және алдын-ала таңдалған жүйемен құрастырылған, Ван-дер-Ваальстық гетероқұрылымдар ұсынылған. Соңғы жылдары өтпелі металдар дихалькогенидтері негізіндегі Ван-дер-Ваальстық гетероқұрылымдардың электрондық және оптикалық қасиеттері қарқынды зерттелуде, және де бұл олардың жаңа кванттық технологияларды жасақтау мен жаңа фундаменталды кванттық құбылыстарды анықтау үшін қызықтыратын объектілер болуымен байланысты. Аталмыш жобаның мақсаты болып өтпелі металдар дихалькогенидтері (ӨМД) негізіндегі, бірөлшемді және екіөлшемді Ван-дер-Ваальстық наногетероқұрылғылардың әртүрлі өткізгіштік типтері бар басқа графен тәріздес материалдармен бірге атомистикалық модельдерін жасақтау, алғашқы принциптардан, әртүрлі факторлар әсерімен қоса алғанда (деформация, сыртқы электр өрісі, муар потенциалы, нөлдік ақаулар және т.б.), олардың электрондық және кванттық-транспорттық қасиеттерін зерттеу табылады. Жоба, әртүрлі факторлар әсерімен қоса алғанда, жаңа бірөлшемді және екіөлшемді ӨМД Ван-дер-Ваальстық наногетероқұрылғылардың кванттық-транспорттық қасиеттерін модельдік зерттеуге бағытталған. ӨМД-наногетероқұрылғылар геометриясын оптимизациялау үшін, сондай-ақ олардың кванттық-транспорттық сипаттамаларын анықтау үшін тығыздық функционалының теориясы Гриннің тепе-теңдік емес функциялар әдісімен бірге қолданылады. Жоба аясында әртүрлі өткізгіштіктің типтері бар басқа наноматериалдармен ұштастыра отырып өтпелі металдар дихалькогенидтері негізінде бірөлшемді және екіөлшемді Ван-дер-Ваальстық наногетероқұрылғыларының атомдық модельдері әзірленетін, олардың кванттық-транспорттық</p>

	<p>сипаттамаларын айқындайтын фундаменталды құбылыстар мен әртүрлі факторлар (деформация, электр өрісі, муар потенциалы, нөлдік ақаулар және т.б.) әсері кезіндегі олардың электрондық қасиеттерінің ерекшеліктері зерттелетін болады, сондай-ақ сенсорлық құрылғылар мен күн батареяларының сезімтал наноэлементтерінің модельдерін әзірлеу бойынша жұмыстар жүргізілетін болады.</p>
<p>Мақсаты</p>	<p><i>Жобаның мақсаты</i> - Жобаның мақсаты - басқа графен тәріздес материалдармен бірге, өтпелі металдар дихалькогенидтері негізіндегі бірөлшемді және екіөлшемді Ван-дер-Ваальстық наногетероқұрылғылардың атомистикалық модельдерін жасақтау мен алғашқы қағидаттардан, әртүрлі факторлар әсері кезінде олардың электрондық және кванттық-транспорттық қасиеттерін зерттеу</p>
<p>Күтілетін нәтижелер</p>	<p>1) осы жоба аясында жүргізілген зерттеулердің нәтижелері бойынша Science Citation Index Expanded индекстелетін және импакт-фактор бойынша 1 (бірінші), 2 (екінші) және (немесе) 3 (үшінші) квартильге кіретін Web of Science базасына кіретін және (немесе) Scopus базасында CiteScore бойынша процентілі кемінде 60 (алпыс) болатын жобаның ғылыми бағыты бойынша рецензияланатын ғылыми басылымдарда кемінде 3 (үш) мақала және (немесе) шолулар (болжамды басылымдар: Results in Physics (Web of Science – Q1, Scopus – 89%), Advances in Nano Research (Web of Science – Q2, Scopus – 94%), Physica E: Low-dimensional systems and nanostructures (Web of Science – Q2, Scopus – 78%), IEEE Sensors Journal (Web of Science – Q1, Scopus – 90%), Crystals (Web of Science – Q2, Scopus – 54%), Electronic Materials Letters (Web of Science – Q3, Scopus – 70%) және т.б.); ҒЖБССҚК ұсынған рецензияланатын шетелдік немесе отандық басылымда кемінде 1 (бір) мақала немесе шолу (болжамды басылымдар: Eurasian Journal of Physics and Functional Materials, Bulletin of the Karaganda University – Physics, немесе Clarivate Analytics компаниясының Russian Science Citation Index және Emerging Sources Citation Index немесе Scopus дерекқорында индекстелген шетелдік ғылыми басылымдар) жариялау жоспарлануда;</p> <p>2) шетелдік және (немесе) қазақстандық баспалар кітаптарында монографияларды, кітаптарды және (немесе) кітаптардағы тарауларды жариялау жоспарланбайды;</p> <p>3) қазақстандық патенттік бюроға пайдалы модельге патентке өтінім беру жоспарланады;</p> <p>4) ғылыми-техникалық, конструкторлық құжаттаманы әзірлеу жоспарланбайды;</p> <p>5) жұмыстардың нәтижелерін әлеуетті пайдаланушылар, ғалымдар қауымдастығы және жалпы қоғам арасында тарату рецензияланатын шетелдік және отандық</p>

	<p>журналдарда ғылыми жарияланым түрінде, сондай-ақ халықаралық ғылыми конференциялар жұмысына қатысу түрінде жүзеге асырылатын болады;</p> <p>б) конкурстық құжаттаманың талаптарына және жобаның ерекшеліктеріне сәйкес басқа да өлшенетін нәтижелер:</p> <p>1) күтілетін нәтижелерді қолдану саласы: наноэлектроника, микроэлектроника, жаңартылатын энергетика; мақсатты тұтынушылар: ғылыми-зерттеу зертханалары, жоғары оқу орындары.</p> <p>2) зерттеу нәтижесінде алынған іргелі заңдылықтар нано-және микроэлектрониканың белсенді электронды компоненттерін одан әрі дамыту үшін пайдалы болуы мүмкін;</p> <p>3) алынған ғылыми нәтижелердің қолданыстылығы және (немесе) коммерцияландыру мүмкіндігі; наногетероқұрылымдардың алынған атомистикалық модельдері күн батареялары мен наносенсорлардың сезімтал элементтерінің ПӘК жақсарту үшін қолданылуы мүмкін;</p> <p>4) өтпелі металл дихалькогенидтері негізіндегі наногетероқұрылымдардың жаңа кванттық-транспорттық қасиеттерін анықтауды қолданыстағы электр құрылғыларының шығымы сипаттамаларын жақсарту үшін қолдануға болады, сонымен қатар электрондық компоненттердің жаңа түрлерін жасау кезінде ескеруге болады;</p> <p>5) алынған нәтижелерді электрониканың, сенсорлардың, күн батареяларының электрондық компоненттерінің жаңа түрлерін жасау үшін қолдануға болады.</p>
<p>Зерттеу тобы</p>	<p><i>Жетекші:</i> Сергеев Дәулет Мақсатұлы, ф.-м.ғ.к., профессор, Индекс Хирша h = 10; ResearcherID: O-3783-2017, ORCID ID: 0000-0001-7426-3039, Scopus Author ID: 55237792800 https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=55237792800</p> <p>Шункеев Куанышбек Шункеевич, ф.-м.ғ.д., профессор, Индекс Хирша h=12; Researcher ID: O-8849-2017; ORCID ID: 0000-0002-3860-397X; Scopus Author ID: 57211063006 https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57211063006</p> <p>Жантурина Нургул Нигметовна, PhD, қауымд. профессор,, индекс Хирша h=7; Researcher ID: GLL-4537-2022; ORCID ID: 0000-0001-9540-6334; Scopus Author ID: 55588115900. https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=55588115900</p>

	<p>Дуйсенова Айнур Гайсиевна, PhD, Индекс Хирша h=2; Researcher ID: AEL-8118-2022; ORCID ID: 0000-0003-4868-1944; Scopus Author ID: 57221375049 https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57221375049</p> <p>Истляуп Асель Сарбековна, магистр естественнонаучных дисциплин, Индекс Хирша h=2; Researcher ID: GZL-1346-2022; ORCID ID: 0000-0003-3423-5126; Scopus Author ID: 57211115630 https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57211115630</p> <p>Кенжебаева Аделя Акмараловна – докторант АРУ имени К.Жубанова, Индекс Хирша h=1; Researcher ID: DAI-0449-2022; ORCID ID: 0000-0002-0214-9517; Scopus Author ID: 59249718200 https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=59249718200</p>
<p>Ғылыми басылымдардағы жарияланымдары</p>	