

<b>Наименование проекта, ИРН</b>	<b>AP23488734</b> - Первопринципное исследование электронных и квантово-транспортных свойств одномерных и двумерных Ван-дер-Ваальсовых наногетероустройств на основе дихалькогенидов переходных металлов
<b>Сроки реализации</b>	01.01.2024-31.12.2026
<b>Руководитель проекта</b>	Сергеев Дәулет Мақсатұлы, кандидат физико-математических наук, профессор
<b>Реферат</b>	<p>С развитием научно-технологической базы электроники наблюдается постепенная миниатюризация ее электронных компонентов, в свою очередь приводящего к функциональному и структурному усложнению электронных систем, повышению их надежности и быстродействия, уменьшению потребляемой энергии и т.п. Существенное увеличение плотности размещения и уменьшения размеров электронных компонентов скорее будет возможна на базе принципиально новых идей. В настоящее время уже созданы прототипы нанoeлектронных устройств, обладающие уникальными электрофизическими характеристиками. Активно ведутся работы по развитию новых направлений нанoeлектроники. Как один из перспективных материалов электронной техники предложены Ван-дер-Ваальсовые гетероструктуры, представляющие собой набор изолированных атомных плоскостей, связанные между собой Ван-дер-Ваальсовой силой и собранные по заранее выбранной последовательности. Последние годы интенсивно исследуются электронные и оптические свойства Ван-дер-Ваальсовых наногетероструктур на основе дихалькогенидов переходных металлов из-за их привлекательности для разработки новых квантовых технологий, а также обнаружению новых фундаментальных квантовых явлений. Целью данного проекта является разработка атомистических моделей одномерных и двумерных Ван-дер-Ваальсовых наногетероустройств на основе дихалькогенидов переходных металлов (ДПМ) в сочетании с другими графеноподобными материалами с различными типами проводимости и исследование их электронных и квантово-транспортных свойств из первых принципов, в том числе и при воздействии различных факторов (деформация, внешнее электрическое поле, муаровый потенциал, нульмерные дефекты и т.п.). Проект направлен на модельное исследование квантово-транспортных свойств новых одномерных и двумерных Ван-дер-Ваальсовых ДПМ-наногетероустройств, в том числе при воздействии на них различных факторов. Для оптимизации геометрии ДПМ-наногетероустройств, а также определения их квантово-транспортных характеристик будет применена теория функционала плотности в комбинации с методом неравновесных функций Грина. В рамках проекта будут разработаны атомистические модели одномерных и двумерных Ван-дер-Ваальсовых наногетероустройств на основе дихалькогенидов переходных металлов в сочетании с другими наноматериалами с различными типами проводимости, будут изучены фундаментальные явления,</p>

	<p>определяющие их квантово-транспортные характеристики, исследованы особенности их электронных свойств под воздействием различных факторов (деформация, электрическое поле, муаровый потенциал, нульмерные дефекты и т.п.), а также будут проведены работы по разработке моделей чувствительных наноэлементов сенсорных устройств и солнечных элементов.</p>
<b>Цели</b>	<p><i>Целью проекта</i> является разработка атомистических моделей одномерных и двумерных Ван-дер-Ваальсовых наногетероустройств на основе дихалькогенидов переходных металлов в сочетании с другими графеноподобными материалами и исследование их электронных и квантово-транспортных свойств из первых принципов при воздействии различных факторов.</p>
<b>Ожидаемые результаты</b>	<p>1) по результатам исследований, проведенных в рамках данного проекта, планируются публикации не менее 3 (трех) статей и (или) обзоров в рецензируемых научных изданиях по научному направлению проекта, индексируемых в Science Citation Index Expanded и входящих в 1 (первый), 2 (второй) и (или) 3 (третий) квартиль по импакт-фактору в базе Web of Science и (или) имеющих процентиль по CiteScore в базе Scopus не менее 60 (шестидесяти) (предполагаемые издания: 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%) и другие); не менее 1 (одной) статьи или обзора в рецензируемом зарубежном или отечественном издании, рекомендованном КОКШВО (предположительные издания: Eurasian Journal of Physics and Functional Materials, Bulletin of the Karaganda University – Physics, или зарубежные научные издания, индексируемые в Russian Science Citation Index и Emerging Sources Citation Index компании Clarivate Analytics или в базе данных Scopus).</p> <p>2) не планируется опубликование монографий, книг и (или) глав в книгах зарубежных и (или) казахстанских издательств;</p> <p>3) планируется подача заявки на патент на полезную модель в казахстанском патентном бюро;</p> <p>4) не планируется разработка научно-технической, конструкторской документации;</p> <p>5) распространение результатов работ среди потенциальных пользователей, сообщества ученых и широкой общественности будет осуществляться в виде научных публикации в рецензируемых зарубежных и отечественных журналах, а также в виде участия в работе международных научных конференций;</p> <p>6) другие измеримые результаты в соответствии с требованиями конкурсной документации и особенностями проекта:</p> <p>1) область применения ожидаемых результатов:</p>

	<p>нанoeлектроника, микроэлектроника, возобновляемая энергетика; целевые потребители: научно-исследовательские лаборатории, высшие учебные заведения.</p> <p>2) полученные в ходе исследования фундаментальные закономерности могут быть полезными для дальнейшего развития активных электронных компонентов нано- и микроэлектроники;</p> <p>3) применимость и (или) возможность коммерциализации полученных научных результатов; полученные атомистические модели наногетероструктур могут быть применены для улучшения КПД солнечных элементов и чувствительных элементов наносенсоров;</p> <p>4) выявление новых квантово-транспортных свойств наногетероструктур на основе дихалькогенидов переходных металлов можно применить для улучшения выходных характеристик существующих электроприборов, а также учесть при разработке новых типов электронных компонентов;</p> <p>5) полученные результаты могут быть применены для разработки новых видов электронных компонентов электроники, сенсоров, солнечных элементов.</p>
<p><b>Исследовательская группа</b></p>	<p><i>Руководитель:</i> Сергеев Даулет Максатұлы, кандидат физико-математических наук, профессор, Индекс Хирша h = 10; ResearcherID: O-3783-2017, ORCID ID: 0000-0001-7426-3039, Scopus Author ID: 55237792800  <a href="https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=55237792800">https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=55237792800</a></p> <p>Шункеев Куанышбек Шункеевич, доктор физико-математических наук, профессор, Индекс Хирша h=12; Researcher ID: O-8849-2017; ORCID ID: 0000-0002-3860-397X; Scopus Author ID: 57211063006  <a href="https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57211063006">https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57211063006</a></p> <p>Жантурина Нургул Нигметовна, PhD, ассоциированный профессор, индекс Хирша h=7; Researcher ID: GLL-4537-2022;  ORCID ID: 0000-0001-9540-6334; Scopus Author ID: 55588115900. <a href="https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=55588115900">https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=55588115900</a></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  <a href="https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57221375049">https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57221375049</a></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  <a href="https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57211115630">https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57211115630</a></p> <p>Кенжебаева Аделя Акмараловна - докторант, АРУ имени К.Жубанова, Индекс Хирша h=1; Researcher ID: DAI-0449-</p>

	2022; ORCID ID: 0000-0002-0214-9517; Scopus Author ID: 59249718200 <a href="https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=59249718200">https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=59249718200</a>
<b>Список опубликованных работ</b>	