

ӘӨЖ 620.22-022.532

ГРАФЕН ПЛЕНКА - ОКСИДТІ ӨТПЕЛІ ГИБРИДТІК МАТЕРИАЛДАР ЖҮЙЕСІ

Жарқымбекова Аида Полатқызы

aidazhar66@mail.ru

Л.Н. Гумилёв атындағы ЕҰУ, Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар кафедрасының 1 курс магистранты, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
Ғылыми жетекшісі - Абуова Ф.Ұ.

Графен - шын мәніндегі оқшауланған бірінші екі өлшемді кристал. Бақыланатын түрде «екі өлшемді материалдар» деп аталатын зерттеу саласын бастады [1]. Екі өлшемді кристалдар атомдық қалыңдықтағы материалдар, олардың кішірейтілген өлшемділігі нәтижесіндегі бірегей физикалық және химиялық қасиеттері олардың 3D аналогтарынан өте ерекшеленеді. Егер үш өлшемді кристалдың кристалдық құрылымы оның сақталсақалыңдығы ретінде атомдық масштабқа дейін азаяды, қабатталған материалдар сияқты, әдетте оның физикалық қасиеттерінде күрт өзгерістер болады. Мысалы, графен оқшауланған кезде ғана 3D графитін бір атомдық қалың пішінге келтіреді, оның тіректері массасы жоқ релятивистік электрондар сияқты әрекет етеді. Тағы бір мысал MoS_2 , оның моноқабатты формасы тікелей жолақ және спин-поляризацияланған ағарлар, бұл 2D жартылай өткізгішті өте жақсы өтетін екі негізгі мүмкіндік, 3D нұсқасына қарағанда фотоника мен оптоэлектроника үшін жақсырақ. Сондай-ақ, іргелі тұрғыдан алғанда, 2D өте маңызды көптеген физикалық әсерлер үшін өлшем және шекті белгілейді, бұл жағдайда термиялық және кванттық ауытқулар әлдеқайда үлкен болады, 3D-ге қарағанда басым рөл атқарады. Осының өзі физиканы жиі жасайды. Екі өлшемді кристалдар өте маңызды емес. Практикалық тұрғыдан алғанда, 2D кристалдарының барлық беткі табиғаты оларды қоршаған ортағы барлық түрдегі әлдеқайда тікелей әсерге ұшыратады. Нәтижесінде олардың электрондық және оптикалық қасиеттері икемділіктің ерекше жоғары дәрежесімен конфигурациялауға болады. Кристалдардың электрондық құрылымына қатысты параметрлер, тиімді массалар, ферми энергиясы, ферми жылдамдығы немесе жолақ аралығы, қабаттар санын басқару арқылы тиімді теңшеуге болады, кернеуді қосу арқылы химиялық функционализациялау 2D материалдары қолданылатын үлгілер немесе субстрат. Өйткені кәдімгі жұқа пленкалар сияқты басқа 2D жүйелерімен салыстырғанда, 2D кристалдары да әлдеқайда жоғары сапа мен жалпы когеренттілік көрсетеді, өйткені олардың күшті жазық ішіндегі коваленттік байланыстары оларды сақтауға мүмкіндік береді. Олардың қалыңдығы азайған сайын бақылаудағы тәртіпсіздік көбейеді. Графен 2D материалдарының ең көп зерттелгені болып табылады, оны ерекше тартымды өтетін ерекше қасиеттері бар. Іргелі тұрғыдан да, оның әлеуеті жағынан да [2]. Дегенмен, оған қажетті жолақ аралығы жоқ оқшаулау және металл күйлері арасында ауысу, графен жасау кейбір электрондық құрылғылар үшін жарамсыз. Сонымен қатар, өткізу қабілеттілігі көрінетін немесе инфрақызыл спектрде де қажет күн панельдері және телекоммуникациялық қосымшалар. Демек, ықтимал екі өлшемді жартылай өткізгіш кристалдарды анықтауға айтарлықтай күш жұмсалды [3]. Қабатты қосылыстардың бірнеше кластары бар жақын назар аударды, оның ішінде алтыбұрышты бор нитридін (hBN), силицин, MoS_2 , қара фосфор (BP) және т.б. Бөлек қабаттар h-BN үлкен саңылауы бар тұрақты оқшаулағыштар болып табылады. Силикон, керісінше, өте тұрақсыз, өйткені жеке қабаттар ауамен әрекеттесе алады [4]. BP - жақын синтезделген тағы бір қабатты кристалдың бір қабатты формасы, фосфорен деп те аталады. Ақ тұрақты фосфор аллотропы және элементтік жартылай өткізгіш, бароның электрондық және оптикалық қасиеттерінің анизотропиясының жоғары дәрежесі [5]. Басқа өтпелі отбасылар әлдеқайда аз

түсініледі. металл трихалкогенидтері, мысалы, TiS_3 , бір қабатты Sb (антимонен) немесе Жақында бір қабатты түрінде синтезделген, өсіп келе жатқан каталогқа қосылатын $GeSe$ сияқты монокристаллы материалдар. Мұнда біз графеннің және оған қатысты 2D кристалдарының физикалық қасиеттері туралы ағымдағы білімді қарастырамыз.

Ерекше электрофизикалық, механикалық, жылулық және оптикалық қасиеттері бар графит кристалынан моноатомды 2D графен қабатын бөлу әдістерінің ашылуы әртүрлі 2D материалдарды зерттеуге және олардың негізінде принципті жаңа электрондық құрылғыларды жасауға қызығушылық тудырды [6]. Өтпелі металдардың карбидтері, оксидтері, хлоридтері, нитридтері, моно- және дихалкогенидтері негізінде эксперименталды түрде алынған 2D кристалдары [7,8].

Ультра жұқа 2D материалдардың әртүрлі керемет физикалық және химиялық қасиеттері бар. Олардың электрондық қасиеттері металдан жартылай металдық және жартылай өткізгіштікке дейін өзгереді. Шағын атомдық қалыңдығы максималды механикалық икемділік пен оптикалық мөлдірлікті қамтамасыз етеді. Үлкен көлденең өлшем және атомдық қалыңдығы химиялық реакциялар үшін қол жетімді үлкен бет ауданын қамтамасыз етеді. Бірнеше 2D материалдарының қолжетімділігі жалғыз «ғажайып материалдарды» зерттеуден технологияны ілгерілету үшін қажетті қасиеттері бар жүздеген немесе мыңдаған 2D құрылыс блоктарынан материалдар мен құрылғыларды жинауға парадигманың ауысуына әкелді.

Гибридті материалдарды құрастыру кез келген кәдімгі (бір) материалмен қамтамасыз ете алмайтын қасиеттерді біріктіруге мүмкіндік береді. 2D материалдарының теңшелетін қасиеттері кең жиілік диапазонындағы электромагниттік өрістермен әрекеттесу арқылы олардың электрондық күйлерін өзгертуге мүмкіндік береді. 2D үлпектерді орналастыру арқылы өте анизотропты материалдарды жасауға болады. Гибридті және композициялық материалдарды өздігінен құрастыру немесе қоспаларды өндіру әдістерімен жасауға болады. Құрылғыны өндірістік қалдықсыз жинауға болады. Осылайша, шағын өлшемді материалдарға негізделген жаңа технологияларды жасау технологияның дамуындағы жаңа серпіліске және адамдардың өмір сүру сапасын өзгертуге әкелуі керек.

Теориялық тұрғыдан зерттелетін объектілердегі электрондық қасиеттерді сипаттау симуляцияның кванттық механикалық деңгейінде болуы керек. Атомдық масштабта тығыздық функционалдық теориясы (ТҚТ) [9] жалпы энергия, магниттік және оптикалық қасиеттер, зарядтардың таралуы, электрондық құрылым және т.б. сияқты электрондық қасиеттерді есептеудің сенімді құралы болып табылады. Дегенмен, DFT дәлдігі алмасу-корреляция функционалдығын дұрыс таңдауға байланысты [10-14]. DFT - негізгі күй теориясы және қозған күйлер туралы ақпарат көбінесе сенімсіз. Бір бөлшектердің күйлері шынайы электрондық күйлер емес (тіпті олар жиі осылай түсіндіріледі). Сонымен қатар, DFT (LDA немесе GGA шегінде) болжаған жолақ саңылауы әдетте эксперименталды анықталған мәnniң жартысы болып табылады. Бұл ақаулармен байланысты электрондық күйлердің деңгейлерінің орнын болжауда қиындықтар туғызады. Бұл мәселенің одан әрі күрделенуі нөлдік емес зарядпен ақаулардың күйлерін есептеу кезінде мерзімді шекаралық шарттарды қолдану есебінен туындайды. Шынында да, өтемдік фондық заряд ұяшықтың таза зарядының нөлге тең болуын қамтамасыз етсе де, мезгіл-мезгіл қайталанатын кескін зарядтары жойылуы керек. Маделунг энергиясына жалған үлес тудырады (бұл бейтарап, бірақ полярлық ақаулар үшін де проблема болуы мүмкін). Дегенмен, сәйкес түзетулерді есепке алу әдістері бар [15,16].

Жолақ саңылауының проблемасы алмасу энергиясының жергілікті сипатына байланысты (LDA немесе GGA шегінде). Хартри-Фок жуықтауы корреляцияны елемейді, бірақ нақты алмасуды қамтиды, ал DFT электронды алмасу мен корреляцияны жуықтады, нәтижесінде алмасу-корреляция функционалдығы деп аталады. GGA алмасу корреляциясын дәл HF алмасуымен біріктіретін Purdue және басқалары [17] құрастырған гибридті алмасу-корреляция функционалдықтары жартылай өткізгіштер үшін қолайлы болып көрінеді.

Стандартты DFT көптеген жүйелердің электрондық құрылымын есептеу үшін құнды тәсіл болғанымен, жартылай өткізгіш материалдардың қасиеттерін дәл жаңғырту жүйенің өзіндік энергиясының жеткіліксіз көрсетілуіне байланысты әлі де қиындық тудырады.

Гибридті функционалдық [18] немесе нақты алмасу арқылы алмасу әрекеттестігінің бөліктерін дәл өңдейтін, көбінесе DFT+U, [19] деп аталатын Хаббард типті түзетуді енгізу арқылы оларды түзету үшін әртүрлі әдістер әзірленді және қолданылды. EXX) әдістері, немесе GW жуықтау шеңберінде көп денелі бұзылулар теориясы бойынша өзіндік энергияны есептеу [20]. Бұл тәсілдердің көпшілігі уақытты қажет ететін болса да, олар әдетте жүйенің электрондық құрылымының жақсартылған көрінісін қамтамасыз етеді (мысалы, жолақ құрылымы және жолақ аралығы).

Қолданылған әдебиеттер тізімі

1. K. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. Booth, V. Khotkevich, S. Morozov and A. Geim, PNAS, - 2005, -Vol.10451–10453, -P.102.
2. A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov and A. K. Geim, Rev. Mod. Phys., -2009, -Vol.81, -P.109–162.
3. A. Castellanos-Gomez, Nat. Photon., -2016, -Vol.10, - P.202–204.
4. G.-B. Liu, D. Xiao, Y. Yao, X. Xude and W. Yao, Chem. Soc. Rev, 2015, Vol.2643–2663, P.44.
5. A. Castellanos-Gomez, J. Phys. Chem. Lett, -2015, -no.6, -P.4280–4291.
6. K. S., Geim A. K., Morozov S. V., Jiang D., Zhang Y., Dubonos S. V., Grigorienko I. V., Firsov A. A. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films Novoselov // Science.- 2004.-Vol. 306.-P. 666.
7. Koski K. J., Cui Y. The New Skinny in Two-Dimensional Nanomaterials // ACS Nano. - 2013.-Vol.7. no.5. –P.3739
8. Yury Gogotsi, Qing Huang. MXenes: Two-Dimensional Building Blocks for Future Materials and Devices // ACS Nano.- 2021.Vol.15. no.4. –P.5775-5780.
9. W. Kohn, L. J. Sham. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects // Phys. Rev.-1965.-Vol.1133.-P.140.
10. A.D. Becke. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange // J.Chem. Phys.-1993.-Vol.98.no.7. –P.5648.
11. C. Lee, W. Yang, R. G. Parr. Development of the Colle-Salvetti correlation-

ӘӨЖ 538.93

ӨТПЕЛІ МЕТАЛЛ АТОМДАРЫМЕН ДОПИРЛЕНГЕН Fe-Ga МАГНИТТІК АНИЗОТРОПИЯ ЭНЕРГИЯСЫ МЕН СЕРПІМДІЛІК ҚАСИЕТТЕРІН ЕСЕПТЕУ

Жуман Бауыржан

zhuman9843@gmail.com

Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар кафедрасының 1 курс магистранты, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
Ғылыми жетекшісі – Абуова Ф.У.

Егер магнитострикция құбылысына келетін болсақ, 1842 жылы Джеймс Джоуль магниттелу және магнитсіздену кезінде кристалдық дененің өлшемдерінің өзгеруін ашқан болатын. Магнитострикция магнит өрісіндегі материалдың энергетикалық күйінің және соның салдарынан атомдар арасындағы қашықтықтардың өзгеруінен туындайды. Магнитостриктивтік материалдардың магниттелу кезінде сызықтық өлшемдері мен пішіндерін айтарлықтай түрде өзгерту қабілеттері бар. Бұл әсер электромагниттік энергияны механикалық энергияға және керісінше түрлендіруге мүмкіндік береді. Магнитострикцияға қарама-қарсы құбылыс Виллари эффектісі [1] деп аталады, ол дененің жүктеменің серпімді аймағында оның деформациясы кезінде магниттелуінің өзгеруінен тұрады.