

ӘӨЖ 539.231

**ВАКУУМДАҒЫ, ҚУЫСТЫ МАТЕРИАЛДАРДАҒЫ ЖӘНЕ ТӨСЕМШЕЛЕР
БЕТТЕРІНДЕГІ БІРӨЛШЕМДІ ҚҰРЫЛЫМДАРДЫҢ АТОМДЫҚ ЖӘНЕ
КВАНТТЫҚ ҚАСИЕТТЕРІН КВАНТТЫҚ-ХИМИЯЛЫҚ МОДЕЛЬДЕУ**

Талғатов Әлібек Қуанышұлы

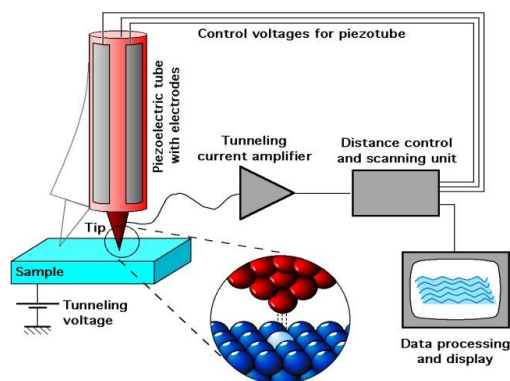
Alibek9898@gmail.com

Л.Н. Гумилёв атындағы ЕҰУ, Халықаралық ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар кафедрасының 2 курс магистранты, Нұр-Сұлтан. Қазақстан
Ғылыми жетекшісі - Абуова Ф.Ү.

21 ғасырдың перспективалы және инновациялық технологияларының ішінде наноэлектроника және оның спинтроника бөлімі жетекші орын алады, онда бөлшектердің зарядымен қатар мәліметтерді физикалық түрде ұсыну үшін бөлшектердің спині қолданылады, бұл ақпаратты жазу мен берудің тығыздығын бірнеше есе арттыруға мүмкіндік береді. Бір өлшемді құрылымдар – наноконтактілер (НК) және нанопроводтар (НП) ерекше қызығушылық тудырады, олардың негізінде шағын көлемді және электр энергиясын аз тұтынатын тиімділігі жоғары нано-схемаларды қалыптастыруға болады. Бөлме температурасында да тұрақты металл НК және НП [1,2,3] зерттеулеріне көп көңіл бөлінеді. Магниттік қасиеттері бар металл нановодтар мен наноконтактілерді негізінен бір спиндік поляризацияның электрондарын өткізетін спиндік сүзгілердің бір түрі ретінде қарастыруға болады, олардағы ток спинполяризациялануы мүмкін. Мұндай наноқұрылымдарға деген қызығушылық оларды спинтроника құрылғыларында қолдану мүмкіндігімен түсіндіріледі. Полярланған электронды көліктің спин-ін белсенді зерттеу 2002 жылы наноконтактілердегі баллистикалық магнитке төзімділіктің эксперименталды ашылуынан басталды [4], бұл наноқұрылымдардың магниттік және көліктік қасиеттері арасындағы байланыс. Баллистикалық магнитке қарсы тұрудың ашылуы наноконтактілер мен наноптардағы атомдардың спинін басқару мүмкіндіктерін, соның салдарынан олардың көліктік және магниттік қасиеттерін белсенді зерттеуге әкелді. Бөлме температурасындағы көптеген тұрақты өткізгіш наноконтактілер магнитті емес болғандықтан, спинтроника құрылғыларында қолдануға жарамсыз болғандықтан, жаңа зерттеу саласы пайда болады – аралас наноконтактілер мен наноөткізгіштердің магниттік және көліктік қасиеттерін зерттеу. Бүгінгі таңда мұндай құрылымдарды құруға болады. Бір өлшемді аралас наноконтактілерді қалыптастыру бойынша алғашқы тәжірибелік жұмыс Беттинидің жұмысы және т.б. болды [5], онда олар бөлме температурасында тұрақты Au-Ag наноконтактілерін алды. Спинтроника үшін реактивтілігі төмен өтпелі және асыл металдар атомдарынан (Au, Pt және т.б.) және магниттік элементтер атомдарынан (Co, Fe, Ni және т. б.) аралас НК және НП қасиеттерін зерттеу қызықты болып көрінеді. Нәтижесінде алынған құрылымдар әртүрлі сипаттағы сыртқы әсерлерге жоғары құрылымдық қарсылыққа ие бола отырып, алып магниттік анизотропия, баллистикалық магнит кедергісі сияқты ерекше физикалық қасиеттерге ие болуы мүмкін. Алайда, наноконтактілер мен наноөткізгіштерді қалыптастыру процесінде олардың

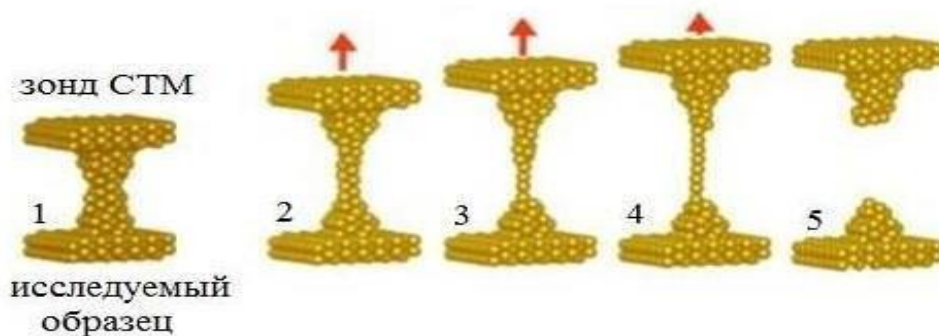
құрылымында серпімді кернеулер пайда болады, олар өткізгіштің немесе контактінің атомдық құрылымы мен геометриясын құрылымның үзілуіне дейін айтарлықтай өзгерте алады, бұл кейіннен олардың механикалық және кванттық қасиеттерінің айтарлықтай өзгеруіне әкеледі [3,5]. Сонымен қатар, бүгінде әртүрлі магниттік емес субстраттарда пайда болған наноөткізгіштер мен наноконтактілердің қасиеттері белсенді зерттелуде, олар бір өлшемді құрылымдарды олардың қасиеттерін едәуір өзгерте отырып тұрақтандырады. Оң жақта пайда болған өткізгіш наноөлшемді электронды схеманың алғашқы прототипі болып табылады, сондықтан "өткізгіш төсемі" жүйесіндегі өзара әрекеттесуді зерттеу наноэлектроника мен спинтрониканың басым бағыттарының бірі болып табылады. Субстраттардың серпімді сипаттамаларын және олардың механикалық қасиеттерін зерттеу өте маңызды. Субстраттың шамалы деформациясы да оның кванттық қасиеттерін өзгерте алады және нәтижесінде жасалған құрылғының немесе бүкіл тізбектің жұмысын бұзады. Өз кезегінде, субстраттың деформациясы тұндырылған өткізгіштің кванттық қасиеттерін өзгерте алады, сонымен қатар оның бұзылуына әкелуі мүмкін. Осыған байланысты бос наноконтактілердің, нано өткізгіштердің және беттік бір өлшемді жүйелердің атомдық қасиеттерін зерттеу тек іргелі физика үшін ғана емес, сонымен бірге практикалық қолдану үшін де қажет. Бүгінгі күні наноэлектроника мен спинтрониканың алғашқы төмен өлшемді құрылғыларының қасиеттерін бір өлшемді наноконтактілер мен наноөткізгіштер негізінде құру және зерттеу туралы бірнеше ғылыми жұмыстар жарияланды. Бүгінгі таңда бір өлшемді құрылымдарды эксперименттік алу және зерттеу үлкен шығындарға алып келеді және көп уақытты қажет ететін және ресурстарды қажет ететін процесс болғандықтан, бос наноконтактілер мен нанопардың, сондай-ақ субстрат беттеріндегі бір өлшемді құрылымдардың қалыптасу процестері мен ерекшеліктерін теориялық зерттеу маңызды болады. Бұл жұмыста бір өлшемді жүйелердің (наноконтактілер мен наноөткізгіштердің) деформациясының олардың кванттық қасиеттеріне әсерін, сондай-ақ субстрат деформацияларының беттік наноөткізгіштердің кванттық және механикалық қасиеттеріне әсерін теориялық зерттеу жүргізілді. Жұмыста субстрат ретінде жұқа магниттік емес металл пленкалар (Ag, Au, Cu) зерттелді. "Өткізгіш-субстрат" жүйесіндегі өзара әрекеттесуді зерттеу мыс пленкаларының бетінде пайда болған аралас наноөткізгіштердің Au-Mn мысалында жүргізілді. Жұмыста LAMMPS бағдарламалық пакетін және VASP бағдарламалық пакетін қолдана отырып, кванттық молекулалық динамиканы қолдана отырып, классикалық молекулалық динамика шеңберіндегі бір өлшемді құрылымдар мен магниттік емес металл субстраттардың кванттық және механикалық қасиеттерін жан-жақты зерттеу жүргізілді. Наноөлшемді жүйелердің қасиеттері туралы мәселені шешудің бұл тәсілі әмбебап болып табылады және алынған шамалардың дәлдігін жоғалтпай зерттеу уақытын едәуір жеделдетуге әкеледі.

Қазіргі уақытта наноконтактілер мен наноөткізгіштерді алудың көптеген тәжірибелік әдістері бар. Барлық осы әдістерді екі негізгі топқа бөлуге болады: бірінші топқа наноқұрылымдардың өзін-өзі ұйымдастыру әдістері кіреді [6]. Оларды пайдалану кезінде өткізгіштің немесе наноконтактінің соңғы конфигурациясы тек сыртқы жағдайларда жүйеде атомдар арасындағы өзара әрекеттесудің энергетикалық сипаттамасымен анықталады. Әдістердің екінші тобына наноқұрылымды қалыптастыру әдістері кіреді [7,8,9], онда наноқұрылымдардың қалыптасуы жеке атомдарды басқару құралы арқылы жүреді. Наноқұрылым әдістерін қолданған кезде алынған наноқұрылымдардың атомдық құрылымы мен геометриясын бақылауға болады. Алайда, оларды қолдану сыртқы жағдайлардың өзгеруімен алынған наноқұрылымдардың тұрақтылығына қосымша егжей-тегжейлі талдауды, серпімді деформацияларға төзімділігін зерттеуді және олардың кванттық қасиеттерін зерттеуді қажет етеді. Өзін-өзі ұйымдастыру әдістеріне сканерлейтін туннельдік микроскопия (СТМ) көмегімен наноконтактілер мен наноөткізгіштерді қалыптастыру әдісі жатады. СТМ зерттеулері кезінде электродтар жанасу нүктесінде СТМ зонды мен зерттелетін бет арасында наноконтактілер мен наноөткізгіштер өздігінен пайда болуы мүмкін (Сурет 1).



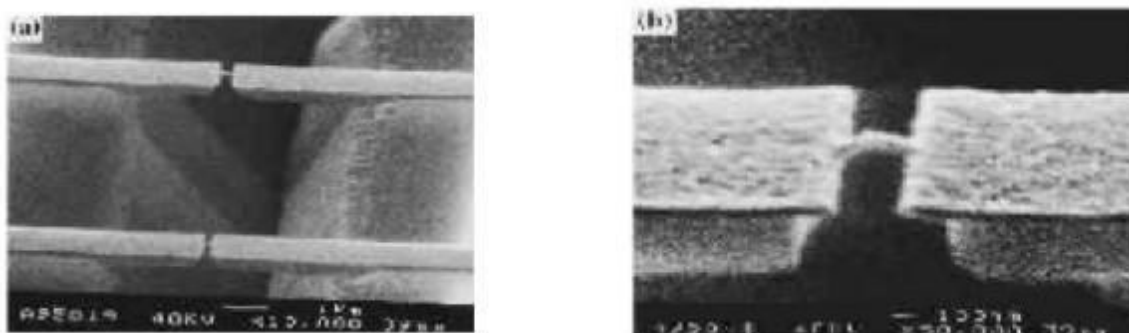
1-сурет - Сканерлейтін туннель микроскопының көмегімен наноконтактілерді қалыптастыру әдісі

2-суретте STM әдісімен контактілерді қалыптастыру процесі схемалық түрде көрсетілген. STM әдісімен алынған наноконтактивтердің мүмкін болатын физикалық қасиеттерін егжей-тегжейлі зерттеу және болжау теориялық және эксперименттік физика үшін маңызды міндет болып табылады, өйткені контактілердің пайда болуы өздігінен жүреді және байланыс арқылы туннельді электронды көліктің пайда болуына әкелуі мүмкін, бұл эксперименттің нәтижелерін бұрмалауға қабілетті.



2-сурет - STM-мен жұмыс істеу кезінде наноконтактілердің пайда болу схемасы

Өзін-өзі ұйымдастыру әдістеріне механикалық бақыланатын байланыс үзілісі әдісі де кіреді (МББҮ), онда байланыс қатты кристалды массивтердің жыртылған жерлерінде пайда болады [6,9,10,11] (сурет. 3). МББҮ әдісі наноконтактілер мен наноөткізгіштердің өзін-өзі ұйымдастыру әдістеріне жатады, өйткені байланыстың соңғы құрылымы, сондай-ақ оның қасиеттері атомаралық өзара әрекеттесудің энергетикалық сипаттамасымен анықталады және көбінесе эксперименттің сыртқы жағдайларына байланысты болады.



3-сурет - МББҮ әдісімен Au наноконтактілерін қалыптастыру

Қолданылған әдебиеттер тізімі

1. J. K. Gimzewski, R. Möller, Transition from the tunneling regime to point contact studied using scanning tunneling microscopy, *Phys. Rev. B*, 1987, 36, p.1284-1287
2. R. Wiesendanger, *Scanning probe microscopy and spectroscopy*, Cambridge University Press, Cambridge, 1994
3. T. Matsuda, T. Kizuka, Palladium wires of single atom width as mechanically controlled switching devices, *Jpn. J. Appl. Phys.*, 45, 2006, p.1337-1339
4. H. D. Chopra, S. Z. Hua, Ballistic magnetoresistance over 3000% in Ni nanocontacts at room temperature, *Phys. Rev. B*, 2002, 66, 020403(R), p.1-3 38
5. J. Bettini, F. Sato, P. Z. Coura, S. O. Danatas, D. S. Galvao, D. Ugarte, Experimental realization of suspended atomic chains composed of different atomic species, *Nature Nanotechnology*, 1, 2006, p. 182-185
6. C. Zhou, C. J. Muller, M. R. Deshpande, J. W. Sleight, M. A. Reed, Microfabrication of a mechanically controllable break junction in silicon, *Appl. Phys. Lett.*, 67 (8), 1995, p.1160- 1162 130
7. H. Hegger, B. Huckestein, K. Hecker, M. Janssen, A. Freimuth, G. Reckziegel, R. Tuzinski, Fractal conductance fluctuations in gold nanowires, *Phys. Rev. Lett.*, 77, 1996, p. 3885-3888; Y. Kondo, K. Takayanagi, Gold nanobridge stabilized by surface structure, *Phys. Rev. Lett.*, 79, (1997), p. 3445 3458; T. W. Fishlock, A. Oral, R. G. Egdell, J. B. Pethica, Manipulation of atoms across a surface at room temperature, *Nature*, 404, 2000, p. 743-745