

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫНЫҢ БІЛІМ ЖӘНЕ ҒЫЛЫМ МИНИСТРЛІГІ

Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті

Металлургия және өнеркәсіптік инженерия институты

Инженерлік физика кафедрасы

Жақсыбек Санат

«Графеннің полиморфты түрлерінің құрылымы мен қасиеттері»

**ДИПЛОМДЫҚ ЖҰМЫС**

5B072300 – «Техникалық физика» мамандығы

Алматы 2020

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫНЫҢ БІЛІМ ЖӘНЕ ҒЫЛЫМ МИНИСТРЛІГІ

Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті

Металлургия және өнеркәсіптік инженерия институты

Инженерлік физика кафедрасы

**ҚОРҒАУҒА ЖІБЕРІЛДІ**

«Инженерлік физика»

кафедра меңгерушісі

PhD доктор

\_\_\_\_\_ Р.Е. Бейсенов

« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2020 ж.

## ДИПЛОМДЫҚ ЖҰМЫС

Тақырыбы: «Графеннің полиморфты түрлерінің құрылымы мен қасиеттері»

5B02300 – «Техникалық физика» мамандығы

Орындаған

Жақсыбек С. Қ.

Пікір беруші:

Кіші ғылыми

қызметкер \_\_\_\_\_ Умирзаков А.Г.

Ғылыми жетекшісі:

PhD доктор

\_\_\_\_\_ Манабаев.Н.К.

« \_\_\_\_ » мамыр 2020 ж.

« \_\_\_\_ » мамыр 2020 ж.

Алматы 2020

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫНЫҢ БІЛІМ ЖӘНЕ ҒЫЛЫМ МИНИСТРЛІГІ

Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті

Металлургия және өнеркәсіптік инженерия институты

Инженерлік физика кафедрасы

5B072300 – «Техникалық физика» мамандығы

**ҚОРҒАУҒА**

**ЖІБЕРІЛДІ**

«Инженерлік физика»

кафедра меңгерушісі

PhD доктор

\_\_\_\_\_ Р.Е. Бейсенов

« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2020 ж.

**Дипломдық жұмыс орындауға  
ТАПСЫРМА**

Білім алушы: Жақсыбек Санат

Тақырыбы: «Графеннің полиморфты түрлерінің құрылымы мен қасиеттері»

Университет ректорының «27» қаңтар 2020 ж. №762-б бұйырығымен бекітілген

Аяқталған жұмысты тапсыру мерзімі « 27 » мамыр 2020 ж.

Дипломдық жұмыстың бастапқы мәліметтері:

- 1) Көміртекті қосылыстардың құрылымдық түрлері; 2) Электрлік қасиеттері;
- 3) Графен өткізгіштігі;

Дипломдық жұмыста қарастырылған мәселелер:

- а) Графен құрылымы, Графеннің қасиеттері;
- б) Графен алу әдістері;

Ұсынылған негізгі әдебиет атаулары:

1) Golden B. L., Ramakrishnan V., White S. W. Ribosomal protein L6: structural evidence of gene duplication from a primitive RNA binding protein //The EMBO Journal. – 1993. – Т. 12. – №. 13. – С. 4901-4908.

2) Hyun K. et al. Crystal structure of Arabidopsis thaliana SNC1 TIR domain //Biochemical and biophysical research communications. – 2016. – Т. 481. – №. 1-2. – С. 146-152.

Дипломдық жұмысты дайындау  
**КЕСТЕСІ**

Бөлімдер атауы, қарастырылатын мәселер тізімі	Ғылыми жетекші мен кеңесшілерге көрсету мерзімдер	Ескертулер
Әдеби шолу	23.01.2020 - 28.01.2020	
Тәжірибелік бөлім	02.03.2020 – 07.03.2020	
Дипломдық жұмысты алдын – ала қорғау	27.04.2020	

Дипломдық жұмыс бөлімдерінің кеңесшілері мен норма бақылаушының аяқталған жұмысқа қойған **қолтаңбалары**  
(жұмысқа қарасты тараулардың нұсқаумен)

Бөлім атауы	Кеңесшілер, (ғылыми дәрежесі, атағы)	Қол қойылған күні	Қолы
Әдеби шолу	Р.Е. Бейсенов , PhD докторы		
Тәжірибелік жұмыстар	Ассистент – профессор Манабаев. Н. К.		
Нормоконтролер	Б.Д. Сарсембаева Ассистент		

Ғылыми жетекші \_\_\_\_\_ Манабаев Н. К.

Тапсырманы орындауға алған білім алушы \_\_\_\_\_ Жақсыбек С.Қ.

Күні « » \_\_\_\_\_ 2020 ж

## АҢДАТПА

Тақырыбы: «Графеннің полиморфты түрлерінің құрылымы мен қасиеттері».

Дипломдық жұмыстың көлемі 31 бет, онда 11 сурет орналастырылған. Диплом жазу кезінде 35 әдебиет көзі қолданылады.

Жұмыстың мақсаты: Графеннің құрылымы мен қасиеттің тиімді әдіспен дәлелдеу.

Құрылымның әсерін зерттеудің негізгі жүйесі ретінде осы жұмыста қасиеттері туралы полиморфтар, көміртек жүйесі таңдалған, өйткені көміртекті материалдар - әдеттегі өкіл коваленттік байланысы бар қосылыстар және алуан түрлі құрылымдық сорттар. Көміртекті материалдар ретінде қарастыруға болады әр түрлі модификациялар құрылымының әсерін зерттеуге арналған модельдік жүйе көміртегі материалдарының арасында материалдық қасиеттер де кездеседі аллотропты сорттар, сонымен қатар полиморфты және полипиптік құрылымдар.

## АННОТАЦИЯ

Тема: «Структура и свойства полиморфных разновидностей графена».

Объем дипломной работы 31 страницы, на которых размещены 11 рисунков. При написании диплома использовалось 35 источника.

Цель работы является доказать структуры и свойства графена эффективным методом.

В качестве основной системы для исследования влияния структуры полиморфов на их свойства в данной работе была выбрана углеродная система, потому что углеродные материалы являются типичным представителем соединений с ковалентным типом связей и имеют большое разнообразие структурных разновидностей. Углеродные материалы можно рассматривать как модельную систему для изучения влияния структуры различных модификаций на свойства материалов, так как среди углеродных материалов встречаются как аллотропные разновидности, так и полиморфные и политипные структуры.

## **ABSTRACT**

Topic: "Structure and properties of polymorphic varieties of graphene».

The volume of the thesis is 31 pages, which contain 11 drawings. When writing the diploma, 35 sources were used.

The purpose of this work is to prove the structure and properties of graphene by an effective method.

In this work, the carbon system was chosen as the main system for studying the effect of the structure of polymorphs on their properties, because carbon materials are a typical representative of compounds with a covalent type of bonds and have a wide variety of structural varieties. Carbon materials can be considered as a model system for studying the influence of the structure of various modifications on the properties of materials, since allotropic varieties as well as polymorphic and polytype structures are found among carbon materials.

## МАЗМҰНЫ

	КІРІСПЕ	9
1	Көміртекті қосылыстардың құрылымдық түрлері	10
	1.1 Көміртекті нанотүтікше	10
	1.2 Фуллерен	11
	1.3 Графен	12
2	Графен қасиеттері	12
	2.1 Электрлік қасиеттері	13
	2.2 Графен өткізгіштігі	14
	2.3 Графеннің механикалық қасиеттері	15
3	Графеннің құрылымы	17
	3.1 Графеннің кристалды құрылымы	17
	3.2 Аймақтық құрылымы	19
4	Графен алу әдістері	22
	4.1 Микромеханикалық ыдырату	22
	4.2 Химиялық графен	24
	4.3 Эпитаксиальды өсу	25
	4.4 Химиялық газофазды тұндыру	27
	ҚОРЫТЫНДЫ	29
	ПАЙДАЛАНЫЛҒАН ӘДЕБИЕТТЕР ТІЗІМІ	30



## КІРІСПЕ

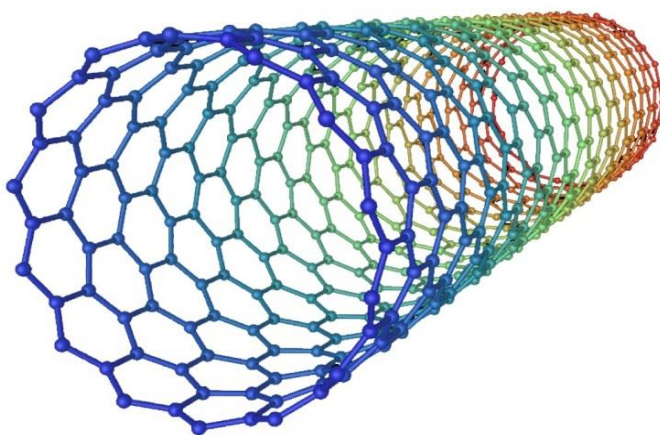
Наноқұрылымдарды тек жеке атомдардан немесе жеке молекулалардан ғана емес, молекулалық блоктардан жинауға болады. Наноқұрылымдарды жасау үшін мұндай блоктар немесе элементтер графен, көміртекті нанотүтікше және фуллерен болып табылады. Графен-бұл көміртегі атомдарынан тұратын, өзара байланысты және тор жасайтын, әрбір ұяшықтары ара ұясына ұқсайтынтегісет. Графендегі ең жақын көміртегі атомдарының арасындағы қашықтық 0,14 нм. Графеннің кристалды торы алты бұрышты ұяшықтардан тұратын жазықтықты білдіреді, яғни екі өлшемді гексагоналды кристалды тор. Мұндай тор үшін оның кері торы да гексагоналды болады. Кристалдың элементарлық ұяшығында екі атом бар. Осы атомдардың әрқайсысы аудару векторларымен жылжытылған кезде (форманың кез-келген векторы, мұндағы  $m$  және  $n$  - кез келген бүтін сандар), оған тең атомдардың субтекциясы жасалады, яғни кристалдың қасиеттері эквивалентті кристалл түйіндерінде орналасқан бақылау нүктелерінен тәуелсіз болады.

Графен өте берік және икемді. Бұл өткізгіштің де, жартылай өткізгіштің де қасиеттерін көрсете алатындығымен ерекшеленеді. Заряд тасығыштардың жоғары қозғалуы (барлық белгілі материалдар арасындағы электрондардың барынша қозғалуы) оны әртүрлі қосымшаларда, атап айтқанда, наноэлектрониканың болашақ негізі және интегралды микросхемалардағы кремнийді ауыстыру мүмкіндігі ретінде пайдалану үшін перспективалы материал ретінде жасайды. Сонымен қатар, бұл сипат күн батареяларының мөлдір электродтары немесе сенсорлық дисплейлер ретінде пайдалану үшін өте тартымды етеді. Сонымен қатар, графен жоғары беріктікке ие, ол өте аз қалыңдығына байланысты мөлдір.

## 1 Көміртекті қосылыстардың құрылымдық түрлері

### 1.1.1 Көміртекті нанотүтікше

Көміртекті нанотүтікше - бұл көміртектің аллотроптік модификациясы, диаметрі оннан бірнеше ондық нанометрге дейін және ұзындығы бір микрометрден бірнеше сантиметрге дейін болатын толық цилиндрлік құрылым болып табылады (бұл ретте оларды шексіз ұзындықтағы жіптерге өрмелеуге мүмкіндік беретін технологиялар бар), түтікке оралған бір немесе бірнеше графикалық жазықтықтардан тұрады[1].



1 Сурет - Көміртекті нанотүтікше

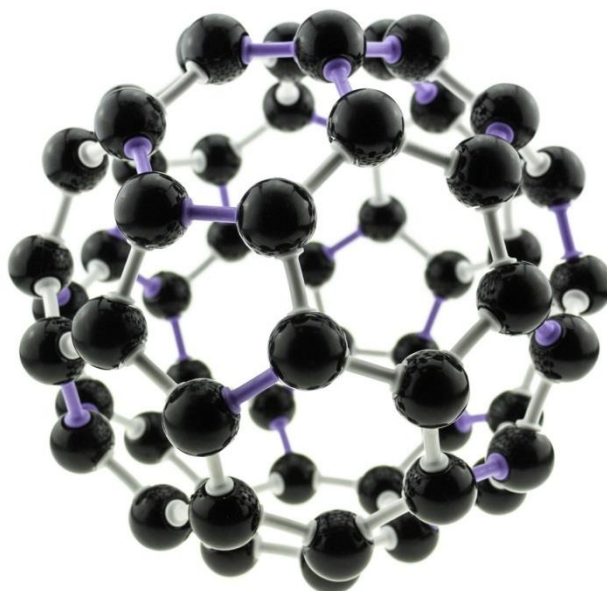
Серпімділік қасиеттері; сыни жүктемеден асқан кездегі ақаулар:

- көп жағдайда гексагон торының бұзылған ұяшығының орнына пентагон немесе септагон түзіледі. Графеннің спецификалық ерекшеліктерінен ақаулы нанотүтікштер ұқсас түрде, яғни дөңес (5-тік кезінде) және ойпат тәрізді беттердің (7-лік кезінде) пайда болуымен бұрмаланады. Бұл жағдайда, әсіресе, бір-біріне қарама-қарсы орналасқан осы бұрмаланулардың үйлесуі (Стоун-Уэльс ақауы) - бұл нанотүтікшенің беріктігін төмендетеді, бірақ оның құрылымында соңғылардың қасиеттерін өзгертетін тұрақты бұрмалауды тудырады: басқаша айтқанда нанотүтікшеде тұрақты иілу пайда болады.

- ашық және жабық нанотүтікшелер

### 1.1.2 Фуллерен

Фуллерендер – көміртегінің аллотроптық формалар классына кіретін молекулалық қосылыстар (алмаз, графит және карбин). Фуллерен молекуласы 20алты бұрышты және 12бес бұрышты атомдардан құралған футбол добына ұқсас болады (өлшемі метрден миллиард есе кіші). Бұл тұрақты форманы  $C_{60}$  фуллерені деп атайды. Доп сияқты формадағы фуллеренді тасымалдағыш Фуллерендер көміртек атомының саны  $n=30-120$  болатын қуыс сфералы кластерлер.  $C_{60}, C_{70}, C_{76}$  және тағы басқа фуллерендер жеткілікті мөлшерде алынатыны белгілі.  $C_{60}$  формасы ең тұрақтысы және тағы басқа фуллерендер жеткілікті мөлшерде алынатыны белгілі [2].

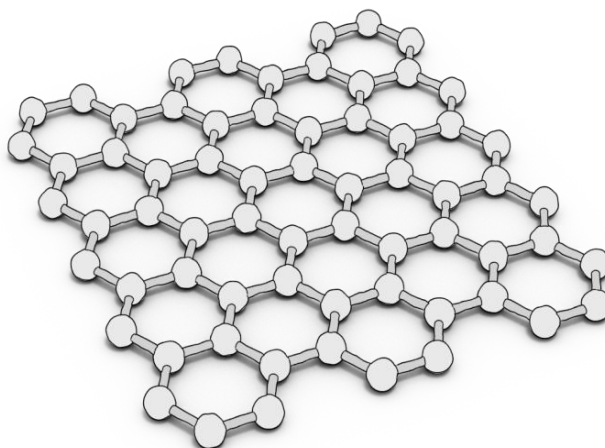


2 Сурет –Фуллереннің моделі

Оқшауландырылған бесбұрыштар ережесіне сәйкес, бір біріне байланыстырылмаған бесбұрыштыр бар фуллерендер ең тұрақты болады. Ең кіші фуллерен көміртектің 32 атомынан құрылған. Көміртек атомдыр саны 60-тан кем фуллерендер тұрақсыз болады, ал  $C_{60}$  фуллерені (бакминстерфуллерен, бакибол) ең орнықты болып табылады. Бұл молекулада әрбір атом екі алтыбұрышқа және бір бесбұрышқа тиеселі. Ол көміртегі 60 атомынан құрылған тұйық клетка формасының 1812 математикалы ықтимал изомерлерінің бірі болып табылады (3 сурет). Көміртектің қабықшалық формалары 60-тан кем және 70-тен көп құрауы мүмкін. көміртек атомдар саны  $n=28, 42, 52, 58, 70, 76, 82, 84, 90, 100, 180, 190, 240, 540, 960$  тең  $C_n$  фуллерендер ашылды. Макроскопиялық мөлшерлі  $C_{60}$ -тан басқа 70, 76, 78, 82, 84, 90, 94 және 96 атомы бар молекулалар анықталынды.

### 1.1.3 Графен

Графен - көміртегі атомдарының қабатымен түзілген көміртектің екі өлшемді аллотропты модификациясы. Графен қабаты - бұл көлемді графит кристалының жеке қондырғы жазықтығы. Графен қабаттарындағы көміртек атомдары үш координацияланған күйде, яғни әрқайсысы төменде келтірілген. Нәтижесінде, шыңдары көміртек атомдары болатын көміртек-көміртегі байланыстары тұрақты гексагондар желісін қалыптастырады[3].



3 Сурет – Графен моделі

## 2. Графен қасиеттері

Графен - Жердегі ең берік материал, болаттан 300 есе мықты. Көлемі бір шаршы метр және қалыңдығы бар графен парағы тек бір атомда ғана салмағы 4 килограмм затты ұстап тұруға қабілетті. Графенді майлық сияқты, бүгуге, бұрауға, созуға болады[4].

Зерттеу нәтижесінде графен қабаттары ерекше қасиеттерге ие екендігі анықталды, атап айтқанда, жылу өткізгіштіктің рекордты мәніне, барлық белгілі материалдар арасында заряд (электрондар) тасығыштардың ең үлкен қозғалыстарына, сондай-ақ үлкен механикалық беріктікке ие. Химиялық тұрақтылық, беріктілік және серпімділік, газ өткізбеушілік және толық дерлік оптикалық ашықтық сияқты графеннің қосымшалар үшін маңызды қасиеттерін атап өткен жөн. Графен бризерлерді зерттеуге арналған перспективалық материал болып табылады[4].

## 2.1 Электрлік қасиеттері

Графен өзінің қасиеттері бойынша өткізгіштік аймағы мен валентті аймағының аз жабындысы бар жартылай металл болып табылады. Заряд тасығыштар жоғары жылдамдыққа ие, бөлме температурасында ол  $10^4 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$  жетеді, бұл қазіргі заманғы электрониканың — кремнийдің негізгі материалының заряд тасығыштарының қозғалуынан едәуір асады. Бұл Ферми деңгейіне жақын арнайы электрондық энергетикалық құрылыммен түсіндіріледі. Электрондардың валентті күйлерінің дисперсиясы бұл жерде сызықтық сипатқа ие, соның салдарынан заряд тасығыштар нөлдік тиімді массаға ие және аномальды жоғары қозғалысқа ие. Сол себепті графен осындай қалыңдықтың кез келген басқа пленкасымен салыстырғанда электр тогының ең жақсы өткізгіші болып табылады [5].

Графен жартылай металл болып табылады, сондықтан бөлме температурасында ол дала транзисторларын жасау үшін жарамсыз, өйткені затвор кернеуінің түсуі кезінде үнемі ағу тогы болады. Бұл проблеманы шешу үшін кванттық-өлшемді әсерлер тыйым салынған аймақтың пайда болуына алып келуі үшін графен жолақтарын миниатюралау қажет.

Көптеген теориялық және эксперименттік зерттеулер көрсеткендей, ені 100 нм аспайтын «наноленгалар» графені заряд тасымалдаушыларының қозғалысын бір өлшемде тиімді шектейді (бұл көміртегі нанотабындағы процесті еске салады). Дұрыс ені мен кристалды құрылымының ленталары жартылай өткізгіштік қасиеттерге ие және салыстырмалы түрде айтарлықтай масштабта квантқа тән қасиетті көрсетеді [6].

Мұндай таспалардың Өткізгіштігін өлшеу әр түрлі температураларда бөлме температурасында электрөткізгіштігі кернеумен бірге бірте-бірте ұлғайып, лентаның енінің азаюымен едәуір азаяды, бұл тыйым салынған аймақтың энергетикалық ені лентаның еніне кері пропорционал және бағытты таңдауға байланысты емес.

Графеннің құндылығы заряд тасығыштардың қозғалмалылығының жоғары мәндерімен анықталады (бөлме температурасында ол осы көрсеткіш бойынша кремнийден жүз есе артық). Физиканың осындай сипаттамаларына түсініктеме графендегі электрондар мен тесіктер нөлдік тиімді массаға ие (басқаша айтқанда, олардың жылдамдығы энергиямен байланысты емес) және фотондарға ұқсас "өзін ұстайтынын" көреді.

Осы қасиетпен жаңа материалдың басқа "елдігін" байланыстыру қабылданған. Өткізгішті магнит өрісіне енгізген кезде оның электрондары айналмалы қозғалыстар жасай бастайды. Шеңбер бойынша қозғалыс-периодты процесс, оны кванттық осциллятор ретінде қарастыруға болады, ал кванттық осциллятор энергиясы тек мәндердің дискреттік қатарын қабылдай алады. Бұл мәндер — кәдімгі өткізгіш үшін — эквидистанттар, графенде энергетикалық деңгейлер арасындағы қашықтық әртүрлі болады [7].

Графен өз бетінде түрлі қоспаларды оңай адсорбциялайды және электрондық жүйенің өзара әрекеттесуін есепке алу күрделі есепті ұсынады.

Атап айтқанда, графен электрондары мен қоспалар электрондарының өзара әрекеттесуін есепке алу энергетикалық спектрдің сапалы өзгеруіне (мысалы, спектрде саңылаудың пайда болуына) демек, оптикалық импульстердің таралу мүмкіндігіне әкелуі мүмкін. Бұл ретте электрондардың энергетикалық спектрі ауырсынбайтын болады, көміртекті нанобөлшектің электрондық қасиеттерінің Елеулі сызықсыз болуына әкеледі. Көміртекті нанотүтікшелерде және қоспалы графенде электрондық кіші жүйені сипаттау үшін ұсынылатын Андерсонның периодтық моделі негізінде Грин функциялары әдісімен электрондарға арналған дисперсия заңын алды. Төмен температуралы шектерде электрондар мен электромагниттік өрістің бірлескен серпіні қарастырылды және тиімді теңдеу алынды, ол қысқа оптикалық импульстердің таралуын сипаттайды, сондай-ақ есеп параметрлеріне байланысты берілген теңдеудің шешімдері келтірілген[8].

Бірегей электр қасиеттері графенді наноэлектроника және спинтроника құралдары саласындағы ең перспективалы материалдардың бірі етеді. Атап айтқанда, графен негізінде тар арнасы бар жылдам әрекет ететін транзистор, сондай-ақ электрондардың арқасын басқаруға негізделген электрондық құрылғыларды құру мүмкіндігі қарастырылды.

## 2.2 Графен өткізгіштігі

Теориялық тұрғыдан, графендегі (Si субстратында) электрондар мен тесіктердің қозғалғыштығына негізгі шектеу диэлектриктегі (SiO<sub>2</sub>) зарядталған қоспалардың әсерінен пайда болатындығы, сондықтан мобильділікті  $2 \cdot 10^6 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$ -ге дейін көтеретін бос ілулі графен пленкаларын алу жұмыстары жүргізіліп жатыр. Қазіргі уақытта қол жеткізілген ең жоғары ұтқырлық -  $2 \cdot 10^5 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$ ; ол диэлектрик қабатының үстінде 150 нм биіктікте ілінген үлгіде алынды (диэлектриктің бір бөлігі сұйық етчектің көмегімен алынып тасталды). Бір атомның қалыңдығы бар үлгіні кең байланыстар қолдады. Тұтқырлықты жақсарту үшін үлгіні жоғары вакуумда 900 К дейін қыздыратын ток өткізіп, бетіндегі қоспалардан тазартылды[7].

Идеалды екі өлшемді пленканы еркін күйінде термодинамикалық тұрақсыздық салдарынан алуға болмайды. Бірақ егер пленкада ақаулар болса немесе ол кеңістікте деформацияланса (үшінші өлшемде), онда мұндай "идеалды емес" пленка төсекпен байланыссыз өмір сүре алады. Электрондық трансмиссиялық микроскопты қолданған экспериментте бос графен қабықшалары бар екендігі және кеңістіктік біртектіліктің бүйірлік өлшемдері 5-10 нм және биіктігі 1 нм болатын күрделі толқынды бетті құрайтындығы көрсетілді. Бұл жұмыста наноэлектромеханикалық жүйені құрайтын, екі жағынан бекітілген субстратпен байланыссыз пленка жасауға болатындығы көрсетілді. Бұл жағдайда аспалы графенді мембрана ретінде қарастыруға болады, оның механикалық тербелістерінің жиілігін өзгерту массаны, күш

пен зарядты анықтау үшін, яғни жоғары сезімтал сенсор ретінде пайдалану үшін ұсынылады[8].

Графен жабылатын диэлектрикпен кремнийдің төсемесі оны кері ысқыш ретінде пайдалануға болатындай, концентрацияны басқаруға және тіпті өткізгіштіктің түрін өзгертуге болатын қатты легіріленуі тиіс. Графен жартылай металл болып табылатындықтан, оң кернеудің қосымшасы графеннің электрондық өткізгіштігіне әкеледі, керісінше-егер теріс кернеуді қоса алғанда, негізгі тасығыштар тесіктер болады, сондықтан негізінде тасығыштардан толық графенді түюге болмайды.

Идеал жағдайда, легирлеу және бітеу кернеуі нөлге тең болған жағдайда, ток тасығыштары болмауы тиіс, бұл, егер ниивтік ұғымдарды ұстаса, өткізгіштіктің болмауына әкелуі тиіс. Бірақ, эксперименттер мен теориялық жұмыстар көрсеткендей, драк нүктесіне немесе электронейтралдылық нүктесіне жақын жерде драк фермиондары үшін өткізгіштіктің соңғы мәні бар, бірақ ең аз өткізгіштіктің шамасы есептеу әдісіне байланысты. Бұл тамаша аймақ жеткілікті таза үлгілер жоқ, өйткені зерттелген емес. Шын мәнінде, графеннің барлық пленкалары төсенішпен біріктірілген, және бұл әркелкі, потенциал флуктуациясына әкеледі, бұл үлгі бойынша өткізгіштіктің типінің кеңістіктік біркелкі еместігіне әкеледі, сондықтан да электронейтралдық нүктесінде де тасығыштардың концентрациясы теориялық тұрғыдан  $10^{12} \text{ см}^{-2}$  кем емес. Мұнда екі өлшемді электронды немесе тесікті газбен қарапайым жүйелерден айырмашылығы бар, атап айтқанда- оқшаулағыш ауысуы жоқ металл-диэлектрик[9].

### 2.3 Графеннің механикалық қасиеттері

Графеннің бірегей механикалық қасиеттері ғылым мен техниканың түрлі салаларында оны практикалық қолданудың үлкен перспективаларын ашады. Атап айтқанда, графен қазірдің өзінде нанорезонаторларды әзірлеу және құру үшін пайдаланылады. Мұндай жағдайда графеннің және басқа да көміртекті наноқұрылымдардың механикалық қасиеттерін жүктеудің әртүрлі түрлерінде сипаттауға мүмкіндік беретін модельдерді әзірлеу ерекше өзектілікке ие болады. Практикада көміртекті құрылымдардың механикалық қасиеттерін модельдеу үшін дискретті-континуалды модельдер жиі қолданылады. Жылу қозғалысын анық ескеру молекулалық динамика әдісі арқылы әсер ететін бөлшектер қозғалысының классикалық теңдеуін интеграциялауға негізделген. Молекулалық динамика әдісімен моделдеу кезінде бөлшектер арасындағы өзара әрекеттесу аймағы (өзара әрекеттесу потенциалдары) негізгі рөл атқарады. Графен жағдайында мұндай потенциалдарды құру міндеті атомдар арасындағы байланыс бағытталған болып табылатындығымен күрделене түседі. Бұл мәселені шешу үшін бөлшектердің көп санының жағдайына байланысты көп жиілікті потенциалдар жиі қолданылады. Көрсетілген потенциалдар графеннің

физика-химиялық қасиеттерін жоғары дәлдікпен сипаттайды. Алайда, механикалық қасиеттер, әдетте, үлкен қателікпен шығарылады. Белгілі көп бөлшекті потенциалдардың басым көпшілігі графеннің серпімді модулін қате сипаттайды (атап айтқанда, Пуассонның қатынасы). Көп бөлшектердің потенциалдарының ішінде графеннің механикалық қасиеттері AIREBO (бейімделетін молекулалық реактивті эмпирикалық байланыс тәрізді) - эмпирикалық реактивті тәртіптің бейімделетін молекулалық байланысы арқылы дәл сипатталған[10].

1 Кесте - Графеннің механикалық сипаттамалары эксперименталды деректер және молекулалық-динамикалық моделдеудің нәтижелері

Параметр	Потенциал	Потенциал AIREBO	Нәтижелер
E, Н/м	346.5	338	350
$\nu$	0.171	0.21	0.17
$\sigma_{cr}$ (зигзаг), Н/м	45.8	43	42
$\sigma_{cr}$ (кресло), Н/м	42.5	34	42
$\varepsilon_{cr}$ (зигзаг)	0.196	0.20	0.25
$\varepsilon_{cr}$ (кресло)	0.186	0.13	0.25
$K_B$ , нН•нм	0.225	0.225	-
Қателігі	$\leq 1\%$	$\leq 5\%$	$\leq 20\%$

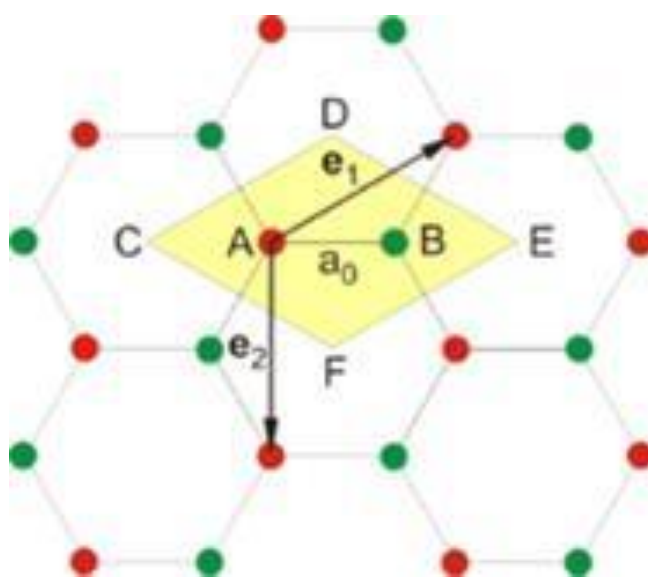
Бөлшектердің еркіндіктің айналмалы дәрежелерімен өзара әрекеттесуін сипаттайтын негізгі арақатынастар келтірілген. Осы арақатынас  $sp^2$ -Гибридизация жағдайында көміртегін құру үшін қолданылады[11].



### 3 Графеннің құрылымы

#### 3.1 Графеннің кристалдық құрылымы

Графеннің кристалды торы алты бұрышты ұяшықтардан тұратын жазықтықты білдіреді, яғни екі өлшемді гексагоналды кристалды тор болып табылады. Мұндай тор үшін оның кері торы да гексагоналды болады. Кристалдың бірлік ұяшығында А және В деп белгіленген екі атом бар. Осы атомдардың әрқайсысы трансляция векторына жылжу кезінде ( $r_a = m e_1 + n e_2$  түрінің кез келген векторы, мұнда  $m$  және  $n$  – кез келген бүтін сандар) оған эквивалентті атомдардан торшаны құрайды, яғни кристалдың қасиеттері кристалдың эквивалентті тораптарында орналасқан бақылау нүктелерінен тәуелсіз. 4-суретте атомдардың екі торкөзі көрсетілген [12].



4 Сурет - Графеннің жеңілдетілген моделі

$A_0$  белгіленген алтыбұрыштардағы ең жақын көміртегі атомдарының арасындағы қашықтық 0,142 нм құрайды. Тұрақты торлар (a) қарапайым геометриялық идеялардан алынуы мүмкін [13,21]. Бұл  $a = \sqrt{3} a_0$ , яғни 0,246 нм. Егер координаттар басында  $a$  векторларының ұзындығы  $e_1$  және  $e_2$

тасымалдау векторлары басталатын кристалдық тордың торабына сәйкес келсе және екі өлшемді Декартты оське бағытталған ординат осімен графен жазықтығында координаттар жүйесін енгізеді, ал абсцисс осі көршілес А және В тораптарын қосатын сегментке бағытталған. Векторлардың ұштарының координаттары көршілес А және В тораптарын қосатын сегментке сәйкес жазылады:

$$e_1=[\sqrt{3}a/2,-a/2],e_2=[0,a] \quad (1)$$

және оларға сәйкес кері тор векторы:

$$g_1=[2/(\sqrt{3}a)],g_2=[1/(\sqrt{3}a),1/a] \quad (2)$$

(2пкөбейткішсіз).Декарттық координаттарда координаттардың басында А торабының торабына жақын орналасуы торабынан атомдар түрінде беріледі:

$$[a/\sqrt{3},0],[-a/(2\sqrt{3}),a/2],[-a/(2\sqrt{3}),-a/2] \quad (3)$$

$L_6$ ,  $L_{4-8}$ ,  $L_{3-12}$  және  $L_{4-6-12}$  графен қабаттарынан тұратын кристалдардың құрылымы мен электрондық қасиеттері есептеулер градиенттік жуықтаулар мен тығыздықтың функционалды теориясы аясында жүргізілді. Графеннің негізгі төрт түрінің кристалдары металды қасиетке ие болатындығы анықталды. Бұл жұмыста графеннің негізгі төрт полиморфты типтері және олардың жолақ құрылымы мен электронды күйлердің тығыздығы есептелген. Графен кристалдарының полиморфты түрлерінің құрылымын есептеу екі кезеңде жүргізілді. Бірінші сатыда графен қабаттарының құрылымы есептелді. Графен қабаттарының фрагменттері үшін  $L_6$ ,  $L_{4-8}$ ,  $L_{3-12}$  және  $L_{4-6-12}$  құрылымдарының төрт негізгі типтері үшін жартылай эмпирикалық кванттық-механикалық әдіспен 3 параметрлік әдіспен алдын-ала есептеулер жүргізілді. кейінгі есептеулер жалпыланған градиенттік жуықтауда тығыздықтың функционалды теориясымен орындалған геометриялық оңтайландырылған қабаттар құрылымы мен үш өлшемді графен кристалдарының қасиеттері туралы. Есептеулерде Бриллоуин

зоналарында  $16 \times 16 \times 16$  нүктелерінің торы және жазықтық-толқын негізіне арналған энергияның бөлінуі арқылы пайдаланылды. Атомаралық байланыстардың ұзындығы ( $R_i$ ,  $i=1,2,3$ ) байланыс бұрыштарының ( $\beta_{12}$ ,  $\beta_{13}$ ,  $\beta_{23}$ ) жеңісі  $a$  және  $b$  қарапайым аудармаларының ұзындығы графен қабаттарының құрылымын сипаттайтын параметрлер ретінде есептелді. Алпыс деңгейлі графен қабаттарының құрылымымен салыстырғанда полиморфты түрлер құрылымының деформациялану дәрежесін сипаттайтын кернеу параметрлерін анықтау үшін олар арасындағы байланыс ұзындықтары мен бұрыштарының мәні алынды. Параметрі берілген қабаттағы  $120^\circ\text{C}$  пен бұрыштардың арасындағы абсолютті шамалардың қосындысын білдіреді. Кернеу параметрі  $L_6$ ,  $L_{4-8}$ ,  $L_{3-12}$  және  $L_{4-6-12}$  графен қабаттарындағы  $L_i$  интератомиялық байланыстарының абсолютті ұзындықтарының және  $L_6$  графен қабатындағы байланыстардың арасындағы айырмашылық ретінде есептелді. Келесі қадамда графеннің негізгі төрт түрінің үшөлшемді кристалды құрылымы есептелді. Есептеу кезінде кристалдар бөлек қабаттардың құрылымы өзгермейтіндей етіп қабыққа салынған графен қабаттарынан тұрады деп қабылданды. Плеердің өзара әрекеттесуіне байланысты және бірінші сатыны есептеу кезінде табылған құрылымға сәйкес келеді.

### 3.2 Аймақтық құрылым

Графеннің аймақтық құрылымы алғаш рет [19] мақалада қатты байланысқан электрондардың жақындауында есептелген. Көміртегі атомының сыртқы қабығында 4 электрон бар, олардың үшеуі  $sp^2$ -гибридизацияланған орбитальдарды жабу кезінде тордағы көрші атомдармен байланыс жасайды, ал қалған электрон  $|2pz\rangle$  күйде болады (дәл осы жағдай графитте тұқымаралық байланыстардың пайда болуына жауап береді). Қатты байланысқан электрондардың жақындауында кристалдардың барлық электрондарының толық толқындық функциясы тек жақын көршілерді есепке

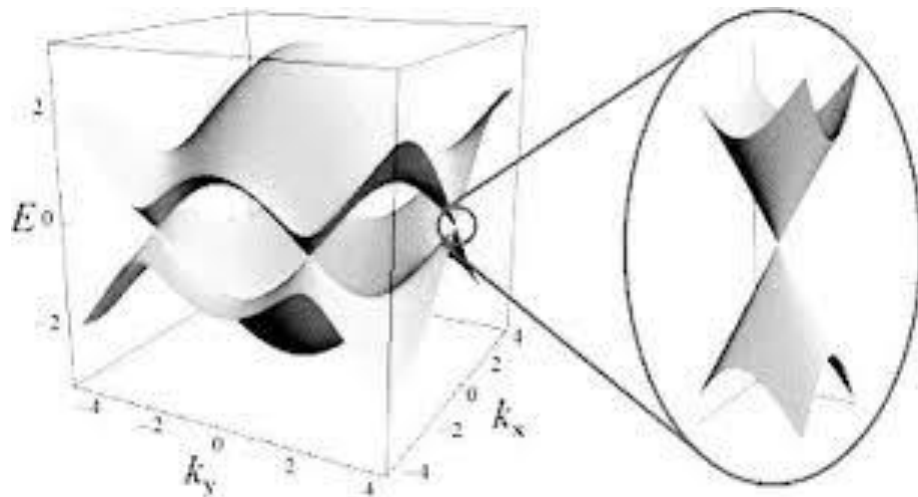
ала отырып, әртүрлі тордан электрондардың толқындық функцияларының жиынтығы түрінде жазылады.

$$\psi^{c,v}(\vec{k})=U_{1k}(\vec{r})+\lambda U_{2k}(\vec{r}) \quad (4)$$

мұндағы  $\lambda$  коэффициенті-энергияның минимумынан анықталатын белгісіз (Вариациялық) параметр. Толқындық функциялары электрондардың подрешеток түріне ие[20]:

$$U_{ik}(\vec{r})=C\sum_{\vec{r}_{n,m}} \exp[i\vec{k}\cdot(\vec{r}_{n,m}+\vec{\tau}_i)]\phi_z(\vec{r}-\vec{r}_{n,m}-\vec{\tau}_i), i=1,2, \quad (5)$$

мұнда  $C$  толық толқынды  $\vec{k}$  нормалауға жауап береді-екі өлшемді толқынды вектор, кристалдың барлық элементарлық ұяшықтары бойынша жүгіретін трансляция векторы, Элементарлық ұяшықта  $A$  және  $B$  торкөздерінен екі атомға бағытталған.



5 Сурет - Графеннің аймақтық құрылымы

Қатты байланысқан электрондардың жақындауында көршілес атомдар ( $y_0$ ) арасындағы жабынды интеграл, яғни өзара әрекеттесу күші, тез ұйаралық қашықтықтарға түседі және жақын атомдардан келе жатқан атомдарды ескермеуге болады. Басқаша айтқанда-қызыл шеңберде орналасқан атомдардың толқындық функцияларымен орталық атомның толқындық функциясының өзара әрекеттесуі 5-суретте көрсетілген графеннің аймақтық құрылымын қалыптастыруға негізгі үлес қосады.

$C$  және  $V$  индекстері  $\pi$ -аймаққа (өткізгіштік аймаққа) және  $\pi^*$  - аймаққа (валентті аймаққа) жатады. Нөл энергия жасырын графен үшін

аймақтың ортасында таңдалған. Ферми деңгейі электрондармен толық толтырылған валентті аймақты температураның нөлі кезінде оң энергия өткізгіштігінің толық еркін аймағынан теріс энергиялармен бөледі. Нөл энергиясы бар нүкте өзі Дирак нүктесі немесе электронейтраль нүктесі деп аталады. Ферми деңгейі валентті және аймақтың өткізгіштігі жанасатын  $K, K'$  аймақтық диаграммасының ерекше нүктелерін қиып өтеді. Бұл кристалдағы  $2p_z$  электрондардың саны қол жетімді күйлердің жартысына тең Арқаға қарай тууды ескере отырып,. Бұл нүктелердің жанында графеннің аймақтық диаграммасы конустардың түрін алады. Графендегі квазичастицаның дисперсиясы заңының осындай түрінің арқасында төмен энергия кезінде Шредингер теңдеуі емес, Дирак теңдеуіне бағынады.  $K, K'$  Бриллюэн аймағының шетінде орналасқан,  $k$  толқын векторы  $K$  амплитудасы кері тор векторымен салыстырылатын амплитудасы бар[21].

## 4 Графен алу әдістері

Графеннің дамуындағы жаңа кезең 2004 жылы бір қабатты және екі қабатты үлгілердің өндірісінен басталды, онда ғалымдар бір қабатты графенді көлемді графиттен лентаның желімімен бірнеше рет қолдану арқылы бөліп, оны 300 нм оксидінің қалыңдығы бар кремний төсенішіне ауыстырды. Графеннің бірегей электрондық қасиеттері көрсетілгеннен кейін бұл жұмыстарда графендік зерттеулердің қарқынды дамуы басталды. Сонымен қатар, графеннің бұрын теориялық тұрғыдан болжанған және эксперименталды үлгілерді алудың жаңа әдістері де зерттелді[22].

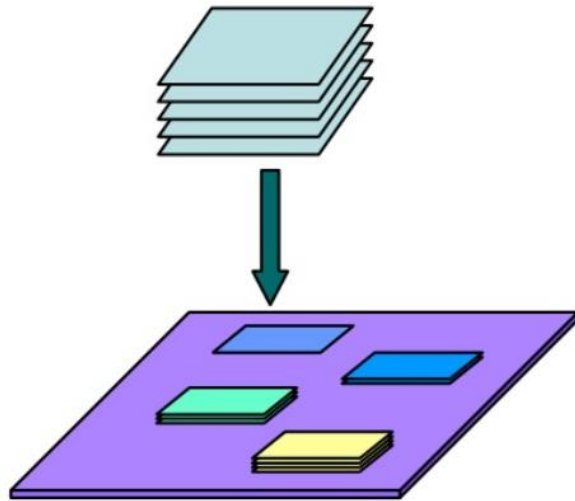
Графен - көміртегі атомдарының қабатымен түзілген көміртектің екі өлшемді аллотропты модификациясы. Графен қабаты - бұл көлемді графит кристалының жеке қондырғы жазықтығы. Графен қабаттарындағы көміртек атомдары үш координация жүйесінде, яғни әрқайсысы төменде келтірілген. Нәтижесінде, шындары көміртек атомдары болатын көміртек-көміртегі байланыстары тұрақты гексагондар желісін қалыптастырады.

Осылайша, графен оны алу тәсіліне байланысты бірнеше санатқа бөлінеді:

- Ыдыратылған графен
- Химиялық графен
- металдардағы эпитаксиалды графен немесе SiC эпитаксиалды графен
- CVD графен (никельде немесе мыста)

### 4.1 Микромеханикалық ыдырату

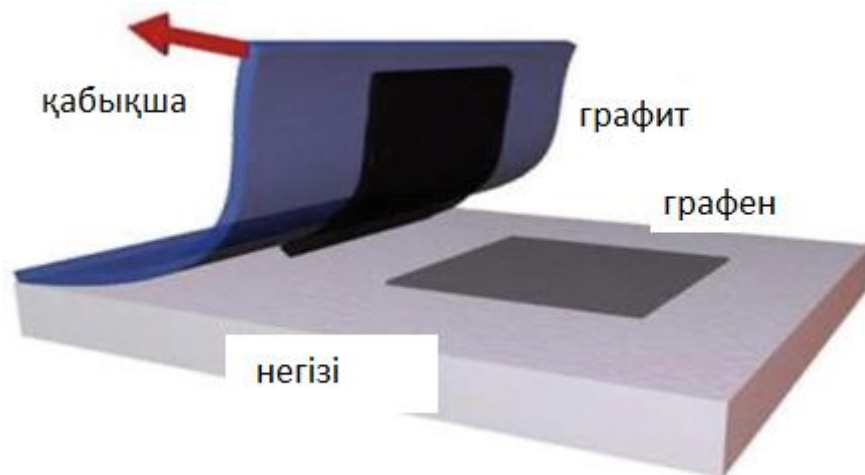
Микромеханикалық ыдырату кезінде қалыңдығы бірнеше жүз қабаттағы жұқа пленка жабысқақ таспаның көмегімен көлемді жақсы бағытталған пироликалық графит пластинасынан бөлінеді. Одан әрі, процедураны бірнеше рет қайталаған кезде лентада бір қабатты графикалық пленка пайда болуы мүмкін. Бұл көміртекті пленка бекітілген оксидтің қалыңдығымен (300 нм) тотыққан кремний негізіне өткізіледі. Ван-дер-Ваальстың өзара әрекеттесуіне байланысты графен кремнийдің негізінде орналасады. Төсеніштегі көпқабатты графенмен қатар, көлденең көлемі 100 мкм аспайтын, 100 графенге дейінгі қабаттары бар көп мөлшерде қабыршақтар қалады[23].



6 Сурет - Микромеханикалық ыдырату әдісімен графен үлгілерін алу схемасы

Осылайша, көлемі екі сантиметрден аспайтын төсеніште 100 мкм аспайтын жеке көпқабатты графенді анықтау өте қиын процесс болып табылады. Алайда, осы әдістеменің даусыз артықшылығы бүгінгі таңда ең жоғары сапалы көпқабатты графенді алу болып табылады[24].

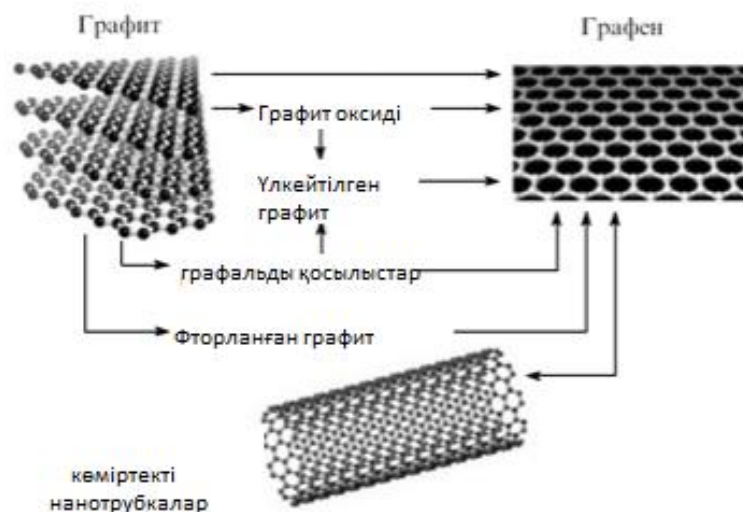
Мұндай үлгілер графеннің электрондық қасиеттерін зерттеу, оның өткізгіштігін өлшеу немесе графен негізіндегі құрылғылардың прототиптерін жасау бойынша эксперименттер жүргізу үшін өте қолайлы, мысалы, кванттық транзистор. Бұл әдістің жалғыз және өте маңызды кемшілігі-бұл әдістің ерекшелігіне байланысты графенді ауқымды өндіру үшін пайдалану мүмкіндігінің болмауы.



7 Сурет - микромеханикалық әдіспен графен алу тәсілі

## 4.2 Химиялық графен

Екінші әдіс - химиялық. Ол, өз кезегінде, құрамында суспензия бар графен дайындаудың бірнеше ықтимал нұсқаларын білдіреді (сурет. 8). Графен алудың ерте химиялық әдісі- графит оксидін қалпына келтіру деп саналады[25].

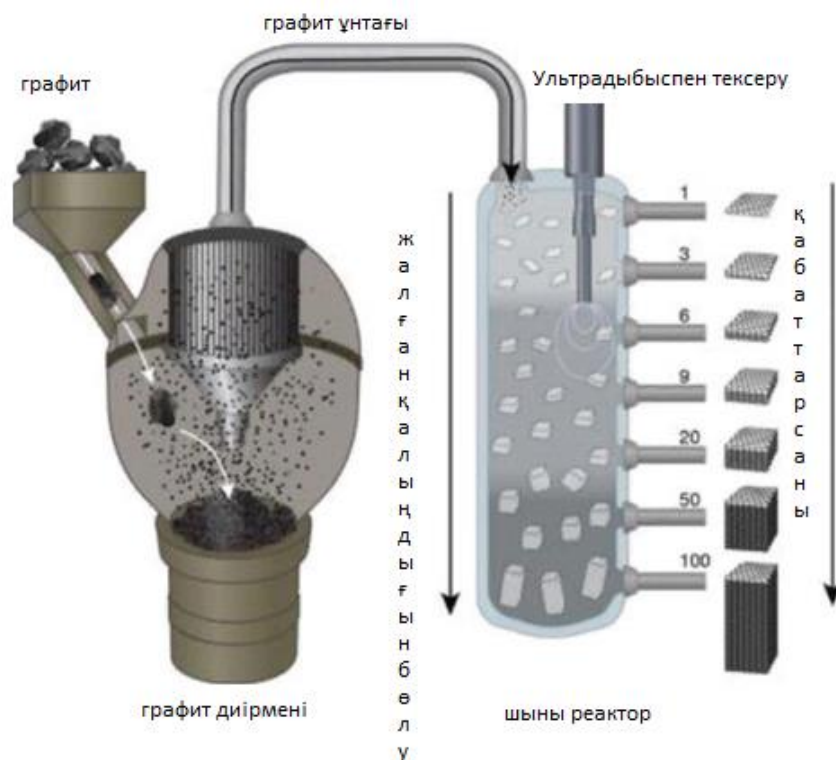


8 Сурет - Өртүрлі негіздердің ыдырауы арқылы графенді алу жолдары

Графитті қабаттарды бөлуге бұл тиімді тәсіл химиялық тотықтырғыштарды пайдалануға негізделген, бұл графиттің ішкі қабаттарының тотығуына және нәтижесінде кристалдағы қабатаралық қашықтықтың артуына және тиісінше қабаттар арасындағы өзара әрекеттесу энергиясының төмендеуіне әкеледі[26]. Нәтижесінде графитті қабаттарды сұйық фазада бөлу мүмкіндігі жеңілдетіледі, бұл бірнеше жүздеген микрометрдің көлденең өлшемдерімен графен оксидінің үлгілерін синтездеуге мүмкіндік береді. Оксидтен графенді кейіннен қалпына келтіру химиялық әсердің көмегімен жүзеге асырылады. Зерттеу көрсеткендей, әдетте тотыққан графенді қабаттардың беті гидроксильді және эпоксидті топтардан тұрады, ал жапырақтың шеттері карбоксильді және карбонильді топтармен аяқталуы мүмкін.

Графен алудың химиялық әдісінің басқа түрі-графиттің сұйық фазалық бөлінуі. Графитті жеке графенді парақтарға бөлудің ең оңай жолы беттік-белсенді органикалық сұйықтықтарды пайдалануға негізделген. Осыған ұқсас тәсіл кристалды графиттің қабатты құрылымын пайдаланады, оның арқасында түрлі табиғаттағы атомдар мен молекулалар қабаттар арасындағы кеңістікке еніп, қабаттар арасындағы қашықтықты арттыра алады. Нәтижесінде графитті қабаттарды механикалық әсермен бөлу мүмкіндігі пайда болады[27].



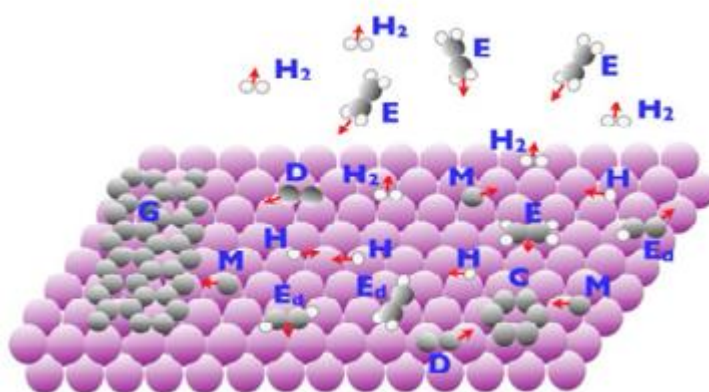


9 Сурет - Графиттің сұйық фазалық бөлінуі

Беттік-белсенді заттың қатысуымен ұсақ дисперсті графитті ұзақ ультрадыбыстық өндеу және Центрифугалау графеннің өлшенген бір қабатты табақтары бар суспензияның пайда болуына, сондай-ақ бірнеше қабаттан тұратын графен үлгілеріне әкеледі. Осылайша, дайындалған суспензияда, әдетте, тек бір қабатты графен үлпектері ғана емес, иілген табақтар, сондай-ақ екі қабатты немесе көп қабатты графендік үлгілер бар. Бұл объектілердің көлденең өлшемдері барлық жағдайларда бірнеше микрометрді құрады [28].

### 4.3 Эпитаксиальды өсу

Үшінші әдіс-эпитаксиальды. Бұл әдіс өтпелі металдардағы көміртектің ерігіштігінің жоғарылататын температуралық тәуелділігіне негізделген. 1000°C асатын температура кезінде көміртегі көзінің қатысуымен металл газ фазасынан көміртектің химиялық тұнбасы нәтижесінде қанықтырылады. Одан әрі, жоғары немесе аса жоғары вакуум жағдайында 10-10 м Па қысым кезінде және төсеніш температурасының төмендеуі кезінде металдағы көміртектің ерігіштігі айтарлықтай төмендейді және кристалды тордың термиялық қысылуы есебінен көміртегі жоғары ауданның графенді домендерін қалыптастыра отырып, жер бетіне шығады (сурет 10) [29].



10 Сурет - E. көмірсутегі молекулаларынан графеннің эпитаксиалды өсуі кезінде болатын негізгі процестердің схемалық бейнесі

Олар бетте шөгіледі,  $E_d$  және H-атомдар ретінде көрсетілген  $C_xH_y$  әр түрлі түрлеріне әкелетін дегидрлеу реакцияларының қатары арқылы ыдырайды. Жаңа түрлер беті арқылы диффундирленеді. Атомдар H бастапқы молекулалар беттен қоныс аударады және сутегі молекуласын қалыптастырады, ол беттен буланады. Ақырында, M және D сияқты пішіндердің кейбірі, немесе тіпті олардың үлкен кластерлері с, оның шетінде G аралына қосылуы мүмкін[30].

Аталған металдардың әрқайсысы үшін графенніңкөпқабаттылығын синтездеудің белгілі бір шарттары бар, бірақ синтез механизмі, сондай-ақ, барлық төсеніштер үшін осындай әдіспен үлгілерді жасаудың артықшылықтары мен кемшіліктері бірдей. Графен синтезіне осы тәсілдің оң жақтарына тек бір немесе екі қабатты құрайтын және 200 мкм дейінгі жоғары бағытталған кластерлердің өлшемдері бар жұқа және жеткілікті ауқымды үлгілердің қалыптасу ерекшелігі болып табылады.

Сондай-ақ, бұл тәсілдің плюстеріне сканерлейтін туннель микроскоптың көмегімен графеннің кристалды торын зерттеу мүмкіндігі жатады. Бірақ, екінші жағынан, металл төсенішінің бетінде пайда болған графен металдың зақымдануынсыз қандай да бір басқа төсенішке ауыстырылуы мүмкін емес, ол өз кезегінде өте қымбат шығыс материалы болып табылады[31].

Графенніңэпитаксиалды өсуінің басқа түрі-кремний карбидінің термиялық ыдырауы. Вакуум жағдайында немесе аргон қысымы 10-900 мПа кезінде 6H-SiC(0001) жасалған төсеніш секундына 2-3 градус жылдамдықпен

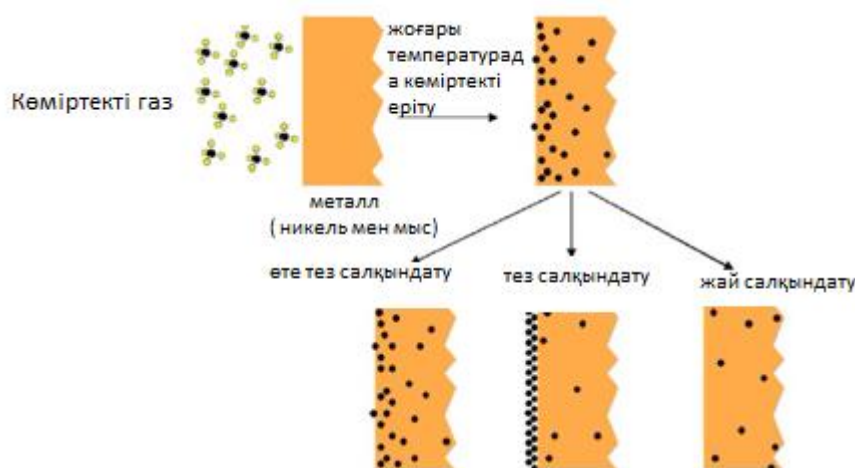
1500-2000°C температураға дейін қыздырылады және содан кейін осындай жылдамдықпен бірнеше минут өткеннен кейін салқындатылады.

Әдіс қарапайым және тиімді болып көрінеді, бірақ синтезделген үлгілердің сапасы бастапқы Кристалл құрылымының жетілу дәрежесіне байланысты. Мұндай тәсілдің артықшылықтары, ең алдымен, кристалдың жақсы сапасы кезінде синтезделген үлгілердің өлшемі кристалдың өлшемімен салыстыруға болады[32].

Сонымен қатар, графеннің электрлік сипаттамаларын зерттеу үшін оны диэлектрлік төсеніште орналастыру қажет, сондықтан SiC қасиеттерінің арқасында графенді басқа төсеніштерге көшіру қажет емес. Бірақ графен негізіндегі соңғы құрылғыларды дайындау графенді соңғы төсекке ауыстыру күрделілігіне байланысты осы әдіспен оны синтездеуде мүмкін емес.

#### 4.4 Химиялық газофазды тұндыру

Химиялық газофазды тұндыру (ағылш. chemical vapor deposition - CVD). 1976 жылы никельдегі графиттің синтезі туралы белгілі болды. 900°C температурада металл төсеніште қалыңдығы 400 мкм графит пленкасын қалыптастыру мүмкін екендігі көрсетілді. Графит тәрізді пленканың пайда болу механизмі өте қарапайым (сурет 11) [33].



11 Сурет - Химиялық газфазалы тұндыру әдісінің көмегімен никель немесе Мыстың бетінде графеналық пленканы қалыптастыру схемасы

Көміртекті газдың, сутектің және аргонның қоспасында әр түрлі қысымдарда (милиторрдың бірнеше үлесінен атмосфераға дейін) қыздыру

кезінде көміртекке және  $400^{\circ}\text{C}$  төмен температура кезінде құрамдастарға ыдырау болады.

Одан әрі, температураның жоғарылауы кезінде көміртегі атомдары никель төсенішіне  $650^{\circ}\text{C}$  бастап шөгіледі. Қыздыру  $950-1000^{\circ}\text{C}$  температураларда тоқтайды, содан кейін үлгіні бөлме температурасына дейін салқындатқанда металдың кристалды торы (термиялық қысу салдарынан) көміртегі атомдарын графит тәрізді құрылымды қалыптастыратын жер бетіне қысады, себебі никельдің тұрақты торы графиттің тұрақты торына өте жақын. Никель пленкасының қалыңдығы, синтездің ең жоғары температурасы, синтез уақыты және үлгіні салқындату жылдамдығы сияқты синтездің белгілі бір параметрлерін таңдау кезінде жұқа графеналық пленканың қалыптасуына – көпқабатты графенді алуға дейін қол жеткізуге болады.

Мыс жартылай кристалды төсеніштің бетінде графеналық үлдірдің қалыптасуы никель төсенішіндегі процестен біршама ерекшеленеді. Мыстағы көміртектің ерігіштігі никельге қарағанда шамамен 1000 есе аз болғандықтан, көміртекті газ ыдырағаннан және мыс бетінде көміртекті тұндырғаннан кейін диффузия көлемге болмайды.

Мыс төсенішінің температурасының ұлғаюымен графеналық пленканың пайда болу ықтималдығы және оның жабылатын ауданы артады. Бұл ретте мыста көп қабатты графен табақтарының пайда болуы мүмкін емес, себебі мыс көміртекті тұндыру кезінде катализатор болып табылады. Мыстың бетікөпқабаттыграфен жабылған кезде кейінгі қабаттардың түзілуі екіталай болады. Бұл әдіс графеннің ауқымды өндірісі үшін өте келешегі зор. Және бұл әдіс Русграфен компаниясы өз үлгілерін дайындау кезінде қолданады[34].

## ҚОРЫТЫНДЫ

Қазіргі кезде әлемнің жетекші елдерінде нанотехнология қарқындап даму үстінде. Әлем ғалымдары нанотехнологияның жан-жақты мүмкіндіктерін ашып, адамзатқа қажетті жаңа өнімдер ойлап табуда. Сондай-ақ елімізде де нанотехнологияны жүзеге асыру ісі алдағы негізгі мақсаттардың бірі болып отыр

Осы шолу жұмысында графеннің құрылымы мен қасиеттеріне зерттеулер жасадық. Көміртекті наноматериалдарға ерекше назар аударылады, атап айтқанда оның ішіндегі графен құрылымы мен физика-химиялық қасиеттеріне. Шолуда графен негізіндегі материалдардың қасиеттері мен құрылымы талданды. Графен әліде зерттеліп келе жатыр.

Графен – болашақтың материалы. Бұл материал қазірдің өзінде көптеген салада теңдесі жоқ өнім ретінде бағаланады. Әлемдегі ең жеңіл әрі берік материал энергия жинақтау қасиетіне де ие. Оның көмегімен сутектен қуат көзін алатын арнайы құрылғылар жасап, ғаламат қуат көзіне айналдыруға болады. Келешекте қыр-уар қаржы жұмсап жерасты пайдалы қаз-ба байлықтарын іздестіру, кен орындарын барлау, жер қойнауын қопарып кен өндірудің, оларды қуат шығыны үлкен, болашақта тапшылығын тартатын суды көп мөлшерде жұмсап өңдейтін металл комбинаттарының қажеті болмай қалуы әбден мүмкін. Себебі – олардан алынатын соңғы өнім графенмен бәсе-келес бола алмайды, қасиеттерінің айыр-машылығы тым үлкен. Қазіргі уақытта графенді зерттеу саласына үлкен көңіл аударуда.

## ПАЙДАЛАНЫЛГАН ӘДЕБИЕТТЕР ТІЗІМІ

- 1 Чернозатонский Л. А., Артюх А. А. Квазидвумерные дихалькогениды переходных металлов: структура, синтез, свойства и применение //Успехи физических наук. – 2018. – Т. 188. – №. 1. – С. 3-30.
- 2 Артюх А. А., Чернозатонский Л. А. Фуллерен-графеновые слоистые структуры с полимеризованными компонентами: моделирование их образования и механических свойств //Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2020. – Т. 111. – №. 2. – С. 93-100.
- 3 Зарубин В. С., Сергеева Е. С. Исследование связи упругих характеристик однослойной углеродной нанотрубки и графена //Вестник Московского государственного технического университета им. НЭ Баумана. Серия «Естественные науки». – 2016. – №. 1 (64).
- 4 Ванчугов А. А. Нанокластеры графена в модели Хаббарда //МОЛОДОЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬ: ОТ ИДЕИ К ПРОЕКТУ. – 2017. – С. 3-7.
- 5 Седельникова О. В., Булушева Л. Г., Окотруб А. В. Оптические свойства квантовых точек CdS на графене //Журнал структурной химии. – 2018. – Т. 59. – №. 4. – С. 907-913.
- 6 Li D., Kaner R. B. Graphene-based materials //Science. – 2008. – Т. 320. – №. 5880. – С. 1170-1171.
- 7 Ferrari A. C. et al. Raman spectrum of graphene and graphene layers //Physical review letters. – 2006. – Т. 97. – №. 18. – С. 187401.
- 8 Bai J. et al. Graphene nanomesh //Nature nanotechnology. – 2010. – Т. 5. – №. 3. – С. 190-194.
- 9 Завьялов, Е. Н. Кристаллология: основные представления о кристаллах, кристаллических веществах и методах их изучения / Е.Н. Завьялов // М.: Книжный дом "Университет". 2016. 314 с.
- 10 Тамаров, М.А. Неорганическая химия /М. А. Тамаров // М.: Медицина, 1974г. 480 с.
- 11 Степин, Б. Д. Неорганическая химия: Учеб.для хим. и химико-технол. спец. вузов / Б. Д. Степин, А. А. Цветков// М.: Высш. шк. 1994. 608 с.
- 12 Материаловедение / под ред. Б.Н. Арзамасова // М.: Изд-во. МГТУ им. Н.Э. Бауман. 2001. 648 с.
- 13 Убеллоде, А. Р. Графит и его кристаллические соединения / А.Р.Убеллоде, Ф.А.Льюис // М. : Мир. 1965. 257 с.
- 14 Елисеев, А. А. Углеродные материалы. Методическая разработка к курсу лекций / А. А. Елисеев, М.В. Чернышева // М. 2006. 79 с.
- 15 Kudryavtsev, Yu.P. The discovery of carbyne / Yu.P.Kudryavtsev. // Phys. Chem. Mater. Low-Dimens.Struct. 1998. V.21. pp. 1-6.
- 16 Kim, B.G. Graphyne: hexagonal network of carbon with versatile Dirac cone / B.G. Kim, H.J. Choi // Physical Review B. 2012. V. 86. p. 115435.
- 17 Беленков, Е. А. Структура кристаллов идеального карбина / Е. А. Беленков, В. В. Мавринский // Кристаллография. 2008. Т. 53. С. 83-87.

- 18 Bundy, F.P. Man-made diamonds / F.P. Bundy, H.T. Hall, H.M. Strong, R.H. Wentorf // *Nature*. 1955. V. 176. pp. 51-55.
- 19 Раков, Э. Г. Нанотрубки и фуллерены / Э. Г. Раков // *Успехи химии*. 2007. Т. 76. С. 3.
- 20 Dresselhaus, M. S. Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes / M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, P. C. Eklund // New York: Academic. 1996. p. 965.
- 21 Ивановская, В. В. Компьютерное моделирование новых нанотрубок и прогноз из функциональных свойств / В. В. Ивановская, А. Н. Еняшин, Ю. Н. Макурин, А. Л. Ивановский // *Нанотехника*. 2006. Т. 1(5). С. 126.
- 22 Stankovich S. et al. Graphene - based composite materials // *nature*. – 2006. – Т. 442. – №. 7100. – С. 282-286.
- 23 Мулюков, Р.Р. Углеродные наноматериалы. Уч. пособие. / Р.Р. Мулюков, Ю.А. Баймова // Уфа: РИЦ БашГУ. 2015. 160 с.
- 24 Pereira, V. M. Optical properties of strained graphene / V. M. Pereira, R. M. Ribeiro, N. M. R. Peres, A. H. Castro Neto // *Europhysics Lett*. 2011. V. 92. P. 67001.
- 25 Crespi, V.H. Prediction of a pure-carbon planar covalent metal / V. H. Crespi, L. X. Benedict, M. L. Cohen, S. G. Louie // *Phys. Rev. B*. 1996. V. 53. pp. 13303–13305.
- 26 Baimova, J.A. Discrete breathers in graphane: effect of temperature *JETP*. 2016. V. 122, № 5. pp. 869-873.
- 27 Skaldin, O.A. Anisotropy of the oscillation dynamics of a breather on a trap in the electroconvective twist structure of a nematic / O.A. Skaldin, V.A. Delev, E.S. Shikhovtseva, Y.A. Lebedev, E.S. Batyrshin // *JETP Letters*. 2014. V. 100, № 3. pp. 162-166. 134
- 28 Brodie, B. C. On the atomic weight of graphite / B. C. Brodie // *Phil. Trans. R. Soc. Lond*. 1859. V. 149. pp. 249–259.
- 29 Sheng, X.L. Octagraphene as a versatile carbon atomic sheet for novel nanotubes, unconventional fullerenes, and hydrogen storage / X.L. Sheng, H.J. Cui, F. Ye, Q.B. Yan, Q.R. Zheng, G. Su // *J Appl Phys*. 2012. V. 112(7). p. 074315.
- 30 Malescio, G. Intermolecular potentials - past, present, future / Malescio G. // *Nature Materials*. 2003. V. 2. p. 501.
- 31 Китайгородский, А.И. Молекулярные кристаллы / А.И. Китайгородский // М.: Наука. 1971. 424 с.
- 32 M.J.S. Dewar, W. Thiel // *J. Am. Chem. Soc*. 1977. V. 99, № 15. pp. 4899-4907.
- 33 Давыдов, А.С. Квантовая механика / А.С. Давыдов // М.: Гос. издат. физикоматематической литературы. 1963. 748 с.
- 34 Hohnberg, P. Inhomogeneous Electron Gas / P. Hohnberg, W. Kohn. // *Phys. Rev. A*. 1964. V. 136. p. 864.
- 35 Dmitriev, S.V. Stability range for a flat graphene sheet subjected to in - plane deformation / S.V. Dmitriev, Y.A. Baimova, A.V. Savin, Y.S. Kivshar // *JETP Letters*. 2011. V. 93, № 10. pp. 571-576.