

Мономолекулярні нанопровідники і нанопаівпровідники на основі внутрішньо- допованих діамондоїдів.

- 1. Номер державної реєстрації 0109U001783**
- 2. Науковий керівник д.х.н., проф. Фокін Андрій Артурович,**
- 3. Суть розробки, основні результати**

За допомогою комп'ютерного моделювання було оптимізовано геометрію, розраховано залежність електронних властивостей діамондоїдів від їх розміру; наявності як одного, так і двох різних замісників в молекулі (зовнішнє допування); від заміни атомів вуглецю в певних положеннях діамондоїду (внутрішнє допування) одним та двома гетероатомами. Розроблено методи селективного введення різноманітних функціональних груп в наперед задані положення молекули діамондоїду, а також синтез діамондоїдів із заміною атомів вуглецю в певних положеннях діамондоїду на гетероатоми (O, N), синтезовано функціональні похідні гетеродіамондоїдів. У співдружності з фізиками Стенфорда і Берклі досліджено електрофізичні властивості одержаних таким чином зразків, а саме зроблені рентгенівські та УФ фотоелектронні, раманівські та фотолюмінесцентні спектри. Експериментально виміряно ширину забороненої зони допованих діамондоїдів та інші характеристики отриманих сполук. Вивчено властивості самоорганізуючихся моношарів деяких допованих діамондоїдів на поверхнях золоту та срібра. Це дозволило виявити галузі застосування допованих діамондоїдів в наноелектроніці та знайти залежності їх електрофізичних властивостей від методу допування та характеру допанта. Розроблено концепцію впливу природи і кількості допуючих атомів на електрофізичні властивості нанодіамантів, ефективні методи синтезу допованих діамондоїдів та селективного введення різноманітних функціональних груп в наперед задані положення молекули діамондоїду. Одержані результати дозволили вперше одержати мономолекулярні провідники і напівпровідники з контрольованим розміром забороненої зони.