

ISSN 2518-1726 (Online),
ISSN 1991-346X (Print)

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ
ҰЛТТЫҚ ҒЫЛЫМ АКАДЕМИЯСЫНЫҢ

Х А Б А Р Л А Р Ы

ИЗВЕСТИЯ

НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК
РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН

NEWS

OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES
OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN

**ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА
СЕРИЯСЫ**



СЕРИЯ

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКАЯ



**PHYSICO-MATHEMATICAL
SERIES**

6 (310)

**ҚАРАША – ЖЕЛТОҚСАН 2016 Ж.
НОЯБРЬ – ДЕКАБРЬ 2016 г.
NOVEMBER – DECEMBER 2016**

1963 ЖЫЛДЫҢ ҚАҢТАР АЙЫНАН ШЫҒА БАСТАҒАН
ИЗДАЕТСЯ С ЯНВАРЯ 1963 ГОДА
PUBLISHED SINCE JANUARY 1963

ЖЫЛЫНА 6 РЕТ ШЫҒАДЫ
ВЫХОДИТ 6 РАЗ В ГОД
PUBLISHED 6 TIMES A YEAR

АЛМАТЫ, ҚР ҰҒА
АЛМАТЫ, НАН РК
ALMATY, NAS RK

Б а с р е д а к т о р ы
ф.-м.ғ.д., проф., ҚР ҰҒА академигі **Ғ.М. Мұтанов**

Р е д а к ц и я а л қ а с ы:

Жұмаділдаев А.С. проф., академик (Қазақстан)
Кальменов Т.Ш. проф., академик (Қазақстан)
Жантаев Ж.Ш. проф., корр.-мүшесі (Қазақстан)
Өмірбаев У.У. проф. корр.-мүшесі (Қазақстан)
Жүсіпов М.А. проф. (Қазақстан)
Жұмабаев Д.С. проф. (Қазақстан)
Асанова А.Т. проф. (Қазақстан)
Бошқаев К.А. PhD докторы (Қазақстан)
Сұраған Д. PhD докторы (Қазақстан)
Quevedo Hernando проф. (Мексика),
Джунушалиев В.Д. проф. (Қырғыстан)
Вишневский И.Н. проф., академик (Украина)
Ковалев А.М. проф., академик (Украина)
Михалевич А.А. проф., академик (Белорус)
Пашаев А. проф., академик (Әзірбайжан)
Такибаев Н.Ж. проф., академик (Қазақстан), бас ред. орынбасары
Тигиняну И. проф., академик (Молдова)

«ҚР ҰҒА Хабарлары. Физика-математикалық сериясы».

ISSN 2518-1726 (Online), ISSN 1991-346X (Print)

Меншіктенуші: «Қазақстан Республикасының Ұлттық ғылым академиясы» РҚБ (Алматы қ.)
Қазақстан республикасының Мәдениет пен ақпарат министрлігінің Ақпарат және мұрағат комитетінде
01.06.2006 ж. берілген №5543-Ж мерзімдік басылым тіркеуіне қойылу туралы куәлік

Мерзімділігі: жылына 6 рет.
Тиражы: 300 дана.

Редакцияның мекенжайы: 050010, Алматы қ., Шевченко көш., 28, 219 бөл., 220, тел.: 272-13-19, 272-13-18,
www.nauka-nanrk.kz / physics-mathematics.kz

© Қазақстан Республикасының Ұлттық ғылым академиясы, 2016

Типографияның мекенжайы: «Аруна» ЖК, Алматы қ., Муратбаева көш., 75.

Главный редактор
д.ф.-м.н., проф. академик НАН РК **Г.М. Мутанов**

Редакционная коллегия:

Джумадилаев А.С. проф., академик (Казахстан)
Кальменов Т.Ш. проф., академик (Казахстан)
Жантаев Ж.Ш. проф., чл.-корр. (Казахстан)
Умирбаев У.У. проф. чл.-корр. (Казахстан)
Жусупов М.А. проф. (Казахстан)
Джумабаев Д.С. проф. (Казахстан)
Асанова А.Т. проф. (Казахстан)
Бошкаев К.А. доктор PhD (Казахстан)
Сураган Д. доктор PhD (Казахстан)
Quevedo Hernando проф. (Мексика),
Джунушалиев В.Д. проф. (Кыргызстан)
Вишневский И.Н. проф., академик (Украина)
Ковалев А.М. проф., академик (Украина)
Михалевич А.А. проф., академик (Беларусь)
Пашаев А. проф., академик (Азербайджан)
Такибаев Н.Ж. проф., академик (Казахстан), зам. гл. ред.
Тигиняну И. проф., академик (Молдова)

«Известия НАН РК. Серия физико-математическая».

ISSN 2518-1726 (Online), ISSN 1991-346X (Print)

Собственник: РОО «Национальная академия наук Республики Казахстан» (г. Алматы)

Свидетельство о постановке на учет периодического печатного издания в Комитете информации и архивов
Министерства культуры и информации Республики Казахстан №5543-Ж, выданное 01.06.2006 г.

Периодичность: 6 раз в год.

Тираж: 300 экземпляров.

Адрес редакции: 050010, г. Алматы, ул. Шевченко, 28, ком. 219, 220, тел.: 272-13-19, 272-13-18,
www.nauka-nanrk.kz / physics-mathematics.kz

© Национальная академия наук Республики Казахстан, 2016

Адрес типографии: ИП «Аруна», г. Алматы, ул. Муратбаева, 75.

E d i t o r i n c h i e f
doctor of physics and mathematics, professor, academician of NAS RK **G.M. Mutanov**

E d i t o r i a l b o a r d:

Dzhumadildayev A.S. prof., academician (Kazakhstan)
Kalmenov T.Sh. prof., academician (Kazakhstan)
Zhantayev Zh.Sh. prof., corr. member. (Kazakhstan)
Umirbayev U.U. prof. corr. member. (Kazakhstan)
Zhusupov M.A. prof. (Kazakhstan)
Dzhumabayev D.S. prof. (Kazakhstan)
Asanova A.T. prof. (Kazakhstan)
Boshkayev K.A. PhD (Kazakhstan)
Suragan D. PhD (Kazakhstan)
Quevedo Hernando prof. (Mexico),
Dzhunushaliyev V.D. prof. (Kyrgyzstan)
Vishnevskiy I.N. prof., academician (Ukraine)
Kovalev A.M. prof., academician (Ukraine)
Mikhalevich A.A. prof., academician (Belarus)
Pashayev A. prof., academician (Azerbaijan)
Takibayev N.Zh. prof., academician (Kazakhstan), deputy editor in chief.
Tiginyanu I. prof., academician (Moldova)

News of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan. Physical-mathematical series.

ISSN 2518-1726 (Online), ISSN 1991-346X (Print)

Owner: RPA "National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan" (Almaty)

The certificate of registration of a periodic printed publication in the Committee of information and archives of the Ministry of culture and information of the Republic of Kazakhstan N 5543-Ж, issued 01.06.2006

Periodicity: 6 times a year

Circulation: 300 copies

Editorial address: 28, Shevchenko str., of. 219, 220, Almaty, 050010, tel. 272-13-19, 272-13-18,
www.nauka-nanrk.kz/physics-mathematics.kz

© National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan, 2016

Address of printing house: ST "Aruna", 75, Muratbayev str, Almaty

NEWS

OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN

PHYSICO-MATHEMATICAL SERIES

ISSN 1991-346X

Volume 6, Number 310 (2016), 49 – 58

UDC 539.23; 539.216.1

D.M. Sergeyev^{1,2}, K.Sh. Shunkeyev¹¹Zhubanov Aktobe Regional State University, Aktobe²Begeldinov Military Institute of Air Defence Forces, Aktobee-mail: serdau@rambler.ru, serdau@mail.ru, shunkeev@rambler.ru**COMPUTER SIMULATION OF TRANSPORT PROPERTIES OF NANOCONTACT "NIOBIUM – CARBON NANOTUBES (5,5) – NIOBIUM"**

Abstract. Within the framework of the density functional theory using Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab program by simulation, transport properties of nanocontact "niobium – carbon nanotube (5,5) – niobium" were studied. At computer simulation of nanocontact the method of non-equilibrium Green's function and the local density approximation was used. The current-voltage characteristics, the differential conductivity, the transmission spectra and spectral current of considered nanocontact at different values of the bias voltage and temperature were calculated. The nature of electron transport through the reporting nanocontact shows that despite the small correlation between the size of nanocontact and the coherence length, such systems at low temperatures behave like Josephson structures. This makes possible to conclude about decreasing the size of Cooper pairs in low-dimensional systems, where the correlation between the electrons due to the absence of a periodic structure on the surface of the system is due to phonon transmitted through its volume. In these contacts at low temperature there is the coincidence of the transmission spectra at different values of the bias voltage. The obtained results may be useful for calculating of the nanoelectronics elements.

Keywords: nanocontact, carbon nanotube, current-voltage characteristic, differential conductivity, transmission spectra, spectral current.

УДК 539.23; 539.216.1

Д.М. Сергеев^{1,2}, К.Ш. Шункеев¹¹Актюбинский региональный государственный университет им. К. Жубанова, Актобе;²Военный институт Сил воздушной обороны им. Т.Я. Бигельдинова, Актобе**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАНСПОРТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК НАНОКОНТАКТА «НИОБИЙ – УГЛЕРОДНАЯ НАНОТРУБКА (5,5) – НИОБИЙ»**

Аннотация. В рамках теории функционала плотности с применением программы Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab модельно исследованы транспортные характеристики наноконтакта «ниобий – углеродная нанотрубка (5,5) – ниобий». При компьютерном моделировании наноконтакта использовался метод неравновесных гриновских функций и аппроксимация локальной плотности. Рассчитаны вольтамперные характеристики, дифференциальная проводимость, спектры пропускания и спектральная плотность тока рассматриваемого наноконтакта при различных значениях напряжения смещения и температуры. Характер электронного транспорта через рассматриваемый нанокontakt показывает, что несмотря на малое соотношение между размером контакта и длиной когерентности, подобные системы при низкой температуре ведут себя как джозефсоновские структуры. Это позволяет сделать вывод об уменьшении размера куперовской пары в низкоразмерных системах, где корреляция между электронами из-за отсутствия периодической структуры на поверхности системы происходит за счет фонона, передаваемого через ее

объем. В подобных контактах при низкой температуре наблюдается совпадение спектров пропускания при различных значениях напряжения смещения. Полученные результаты могут быть полезными для расчетов элементов наноэлектроники.

Ключевые слова: нанокontakt, углеродная нанотрубка, вольтамперная характеристика, дифференциальная проводимость, спектр пропускания, спектральная плотность тока.

Введение

В настоящее время интенсивно исследуются электрофизические свойства различных наноразмерных контактов (см. например [1-3]). Это связано с разработками на их основе миниатюрных электронных компонентов микро- и наноэлектроники [4, 5]. В этом плане одним из широко используемых материалов для создания подобных наноконтактов является углеродные наноматериалы – углеродные нанотрубки (УНТ или CNT – carbon nanotube), фуллерены, графены и им родственные структуры [6-8].

Известно, что УНТ обладают такими уникальными свойствами, как сверхмалые размеры, хорошая электропроводность, высокие эмиссионные характеристики, высокая химическая стабильность и способность присоединять к себе разнообразные химические радикалы (см. например [9, 10] и цитируемые в них работы), которые позволяют на их основе создавать новые типы перспективных миниатюрных элементов электроники [11, 12]. Следует отметить, что одностенные УНТ (ОУНТ) обладают квантовым баллистическим механизмом проводимости, т.е. в них при низкой температуре электроны, являющиеся основными носителями заряда, движутся по нанотрубке, не испытывая рассеяния [9]. Поэтому особый интерес представляют структуры, состоящие из комбинаций УНТ с материалами с различными типами проводимости, например, УНТ – металл, УНТ – полупроводник, УНТ – сверхпроводник, контакты УНТ с разными значениями хиральности и т.п. В работе [13] показано, что за счет изменения хиральности ОУНТ путем внедрения в ее структуру дефекта (пары пятиугольник – семиугольник) можно изменить ее электронные свойства, например, ОУНТ с хиральностью (8,0) является полупроводником с шириной запрещенной зоны 1,2 эВ, тогда как ОУНТ с хиральностью (7,1) выступает как полуметалл (с шириной запрещенной зоны равной нулю). А в работе [14] путем внедрения дефекта в структуру ОУНТ получены гетеропереходы полупроводник – полупроводник с различными значениями ширины запрещенной зоны. Аналогичным образом можно получить сверхминиатюрные гетеропереходы полупроводник – металл. Следует отметить, что устройства, состоящие из двух соединенных ОУНТ с различными значениями хиральности, представляют собой электронно-дырочный переход размером несколько нанометров [15, 16]. Такие p-n переходы на основе УНТ применяются для разработки транзистора, а также солнечных элементов и сенсоров [17].

В работах [18-20] исследованы контакты сверхпроводник – УНТ, где основным механизмом транспорта сверхпроводящего тока (куперовских пар электронов) служит эффект многократного андреевского отражения (MAR – multiple Andreev reflections). Отметим, что в этих работах размер сверхпроводящей системы d много больше, чем длина когерентности (размер куперовской пары электронов) ξ , т.е. $d \gg \xi$, что не противоречит существованию куперовских пар в подобной системе. В нашем случае, размер рассматриваемого наноконтакта d много меньше, чем длина когерентности ($d \ll \xi$), поэтому возникает вопрос о возможности формирования куперовских пар в подобных системах, а также как ведут себя такие системы в низкой температуре. В данной работе предпринята попытка ответить на эти вопросы, основываясь на результатах компьютерного моделирования транспортных характеристик наноконтакта «ниобий – углеродная нанотрубка (5,5) – ниобий» с применением программы Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab.

Описание объекта и методов исследования

Геометрия исследуемого наноконтакта «ниобий – углеродная нанотрубка (5,5) – ниобий» приведена на рис. 1 а-г. Длина ниобиевых электродов по оси С составляет $\sim 4,67$ Е, а длина УНТ $\sim 4,922$ Е. Размер контактирующей (центральной) области составляет $\sim 21,6$ Е.

Компьютерное моделирование наноконтакта производилось в рамках теории функционала плотности (DFT – Density Functional Theory) с применением метода неравновесных гриновских

функций (NEGF – Non-Equilibrium Green's Functions) и аппроксимации локальной плотности (LDA – local-density approximation) [21].

Основные параметры вычислительного ресурса: 8 ядерный процессор Intel(R) Core(TM) i7-4790 CPU @ 3,6 GHz, ОЗУ 8 Гб, тип системы – 64-разрядная операционная система, операционная система – Windows 8.1. Основные временные затраты вычислительного ресурса для различных видов операции при расчете характеристик, показанные на рис.2, приведены в таблице 1.

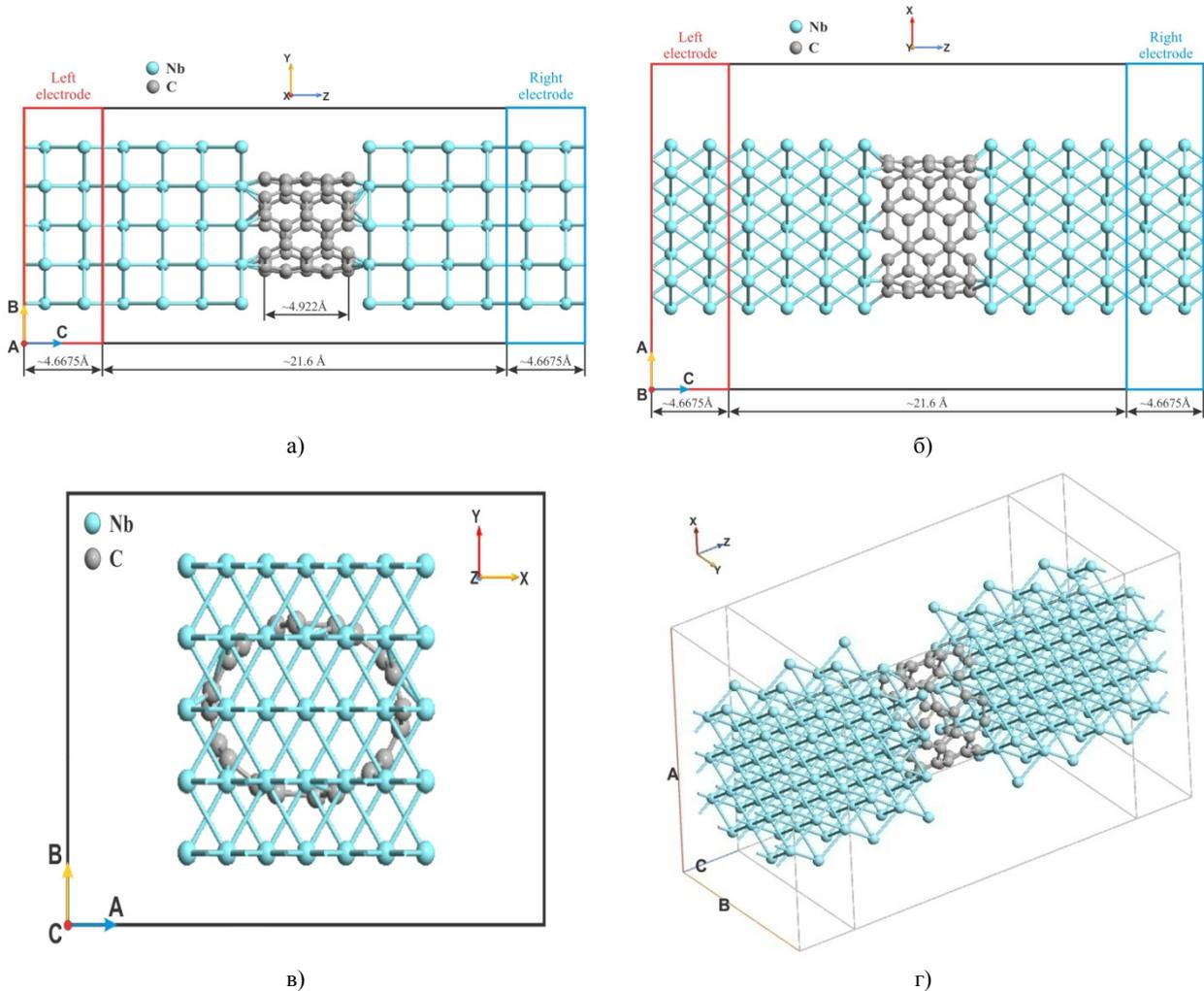


Рисунок 1 – Геометрия наноконтакта «ниобий – углеродная нанотрубка (5,5) – ниобий»: а) Z-Y plane; б) Z-X plane; в) X-Y plane; г) 3D.

Моделирование транспортных характеристик наноконтакта с помощью программы Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab осуществлялось на основе нижеприведенных уравнений (1-10).

Для расчета транспортных свойств рассматриваемого наноконтакта составляется матрица плотности состояний левого и правого электродов:

$$D = D^L + D^R, \tag{1}$$

где D^L , D^R – матрица плотности левого и правого электродов, соответственно.

$$D^L = \int \rho^L(\varepsilon) f\left(\frac{\varepsilon - \mu_L}{k_B T_L}\right) d\varepsilon, \tag{2}$$

где ε – энергия, $\rho^L(\varepsilon)$ – спектральная матрица, $f(\varepsilon)$ – фермиевская функция распределения квазичастиц по энергиям, k_B – постоянная Больцмана, μ_L – электрохимический потенциал, T_L – текущая температура левого электрода. Матрица плотности для правого электрода D^R находится аналогичным способом. Спектральная матрица определяется с применением гриновских функций:

$$\rho^L(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi} G(\varepsilon) \Gamma^L(\varepsilon) G^\dagger(\varepsilon), \quad (3)$$

где $\Gamma^L(\varepsilon)$ – матрица уширения (функция уширения), $G(\varepsilon)$, $G^\dagger(\varepsilon)$ – запаздывающая и опережающая функции Грина. Матрица уширения левого электрода описывается следующим уравнением:

$$\Gamma^L(\varepsilon) = \frac{1}{i} \left(\Sigma^L - (\Sigma^L)^\dagger \right), \quad (4)$$

где i – мнимая единица, Σ^L – собственная энергия левого электрода. Аналогичное уравнение существует для матрицы плотности правого электрода. Запаздывающая функция Грина представлена в виде

$$G(\varepsilon) = \frac{1}{(\varepsilon + i\delta_+)S - H}, \quad (5)$$

или

$$G(\varepsilon) = \left[(\varepsilon + i\delta_+)S - H - \Sigma^L(\varepsilon) - \Sigma^R(\varepsilon) \right]^{-1}, \quad (6)$$

где δ_+ – бесконечно малое положительное число, S – матрица интегралов перекрытия, H – гамильтонова матрица.

Таблица 1 – Временные затраты вычислительного ресурса для различных видов операции

№	Наименование операции	Итоговое время, сек	За один шаг, сек
1.	Матрица плотности (Density Matrix)	438968,09	495,45
2.	Спектр пропускания (Transmission Spectrum)	73585,89	728,57
3.	Интеграл вещественного пространства (Real Space Integral)	11567,71	10,69
4.	Плотность валентности (Valence Density)	3536,28	3,27
5.	Обменная корреляция (Exchange-Correlation)	1230,22	1,14
6.	Настройка матрицы плотности (Setting Density Matrix)	1028,79	257,20
7.	Постоянные термы (Constant Terms)	713,54	7,00
8.	Потенциал Хартри (Hartree Potential)	561,11	0,52
9.	Базис вещественного пространства (Real Space Basis)	533,14	5,13
10.	Диагонализация матрицы (Diagonalization)	498,64	5,42
11.	Смешивание (Mixing)	252,53	0,26
12.	Сохранение в файл	22,54	0,22
13.	Генерация базисного комплекта (Basis Set Generation)	7,51	0,07
14.	Разность плотности (Difference Density)	6,53	0,07
15.	Основная плотность (Core Density)	3,25	0,03
16.	Потенциал нейтрального атома (Neutral Atom Potential)	3,22	1,07
17.	Загрузка модулей (Loading Modules)	1,69	1,69
18.	Установка спиновой термы (Fixed Spins Term)	0,01	0,00
19.	Общее время расчета характеристик наноконтакта	539102,52	

Для расчета вольтамперной характеристики (ВАХ) и дифференциальной проводимости сначала в рамках DFT определяется функция пропускания барьера наноконтакта. Расчет зависимости функции пропускания барьера от энергии производится на основе уравнения:

$$T(\varepsilon) = \sum_k t_k^\dagger t_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k), \quad (7)$$

или

$$T(\varepsilon) = \text{tr}[\Gamma^L A^R] = \text{tr}[\Gamma^R A^L] = \text{tr}[\Gamma^L G \Gamma^R G^\dagger] = \text{tr}[\Gamma^R G \Gamma^L G^\dagger], \quad (8)$$

где t_k – амплитуда пропускания, $\delta(\varepsilon)$ – дельта функция, A – спектральная функция.

В этом случае данный наноконтакт можно рассматривать как полупроницаемую мембрану, разделяющую два электрода, тогда функция пропускания $T(\varepsilon)$ будет определять проницаемость этой мембраны для электронов с энергией ε [1]. При таком раскладе, ВАХ наноконтакта рассчитывается с учетом спектра пропускания на основе уравнения:

$$I(V_L, V_R, T_L, T_R) = \frac{2e^{+\infty}}{h} \int_{-\infty}^{\infty} T(\varepsilon) \left[f\left(\frac{\varepsilon - \mu_R}{k_B T_R}\right) - f\left(\frac{\varepsilon - \mu_L}{k_B T_L}\right) \right] d\varepsilon, \quad (9)$$

где T_R, T_L – текущие температуры правого и левого электрода, μ_R, μ_L – химические потенциалы правого и левого электрода.

Дифференциальная проводимость наноконтакта определяется с помощью уравнения:

$$\sigma(V_L, V_R, T_L, T_R, \alpha_L, \alpha_R) = \lim_{\delta V \rightarrow 0} \frac{I(V_L + \alpha_L \delta V, V_R - \alpha_L \delta V, T_L, T_R)}{\delta V}, \quad (10)$$

где α_L, α_R – константы связи, при этом выполняется условие $\alpha_L + \alpha_R = 1$.

Описание и анализ результатов

На рис. 2 представлены результаты моделирования основных характеристик наноконтакта «ниобий – углеродная нанотрубка (5,5) – ниобий» при напряжении смещения $V_{bias} = 0,01$ В и температуре 4,2 К. Отметим, что температура перехода ниобия в сверхпроводящее состояние (критическая температура) $T_c \approx 9,2$ К. Расчет транспортных характеристик наноконтакта для этого случая производился в течении 6 дней 5 часов 45 мин. 2,52 сек.

Как видно, ВАХ наноконтакта напоминает ВАХ джозефсоновского элемента (рис. 3) (см. например [22]). Нулевой ток наблюдается в интервале напряжений $\approx -6 \div 6$ мВ. При этих же значениях напряжения происходит переключение ВАХ с OFF режима в ON режим, как в наноструктурах для двухтерминального переключающего устройства (рис. 4) [23]. Это наводит на мысль о том, что, не представляет ли рассматриваемый наноконтакт джозефсоновского перехода SIS структуры (S – superconductor, I – insulator), хотя сверхпроводимость в низкоразмерной структуре может существовать при условии, если размер наноструктуры d больше или соизмерим с размером куперовской пары ξ , т.е.

$$d \geq \xi. \quad (11)$$

Все классические сверхпроводники, описываемые теорией Бардина-Купера-Шриффера (БКШ), имеют относительно большую длину когерентности (см., например, табл. 2, где представлены параметры ниобиевых сверхпроводников [24]). При этом с уменьшением размера куперовских пар увеличивается критическая температура материала.

В работах [25, 26] исследован электронный транспорт через сверхпроводящую наночастицу с учетом поверхностных состояний, при этом рассмотрены следующие возможные варианты формирования куперовских пар в зависимости от соотношения между длиной когерентности и размером наночастицы:

а) при $d \ll \xi$ сверхпроводящее состояние не возникает, поскольку образование куперовских пар невозможно;

б) при увеличении размера наночастицы до $d \approx \xi$ в процесс формирования сверхпроводящего состояния вступают электроны, локализованные в поверхностных состояниях (рис. 5 в);

в) при $d \gtrsim \xi$ в формировании сверхпроводимости начинают участвовать также и электроны в объемных состояниях, имеют место все возможные сценарии образования куперовских пар (рис. 5 а-в);

г) в макроскопическом пределе, когда $d \gg \xi$, вклады от второго (рис. 5 б) и третьего (рис. 5 в) сценариев образования куперовских пар становятся пренебрежимо малы ввиду малой доли поверхностных атомов по сравнению с объемными, и в формировании сверхпроводимости участвуют только электроны в объемных состояниях (рис. 5 а).

Также в этих работах с помощью возмущенной температурной функции Грина, рассчитанной в рамках приближенного метода кристаллических орбиталей, произведен расчет величины щели спектра сверхпроводящей наночастицы. В результате выявлено, что величина щели спектра сверхпроводящей наночастицы существенно превышает величину макроскопической сверхпроводящей щели, что свидетельствует об уменьшении ξ при уменьшении размера системы. Отметим, что взаимодействие между электронами происходит за счет фонона, передаваемого через объем наносистемы, так как на поверхности фактически не существует периодической структуры, поэтому происходит рассеяние электронов либо захват их в поверхностные состояния.

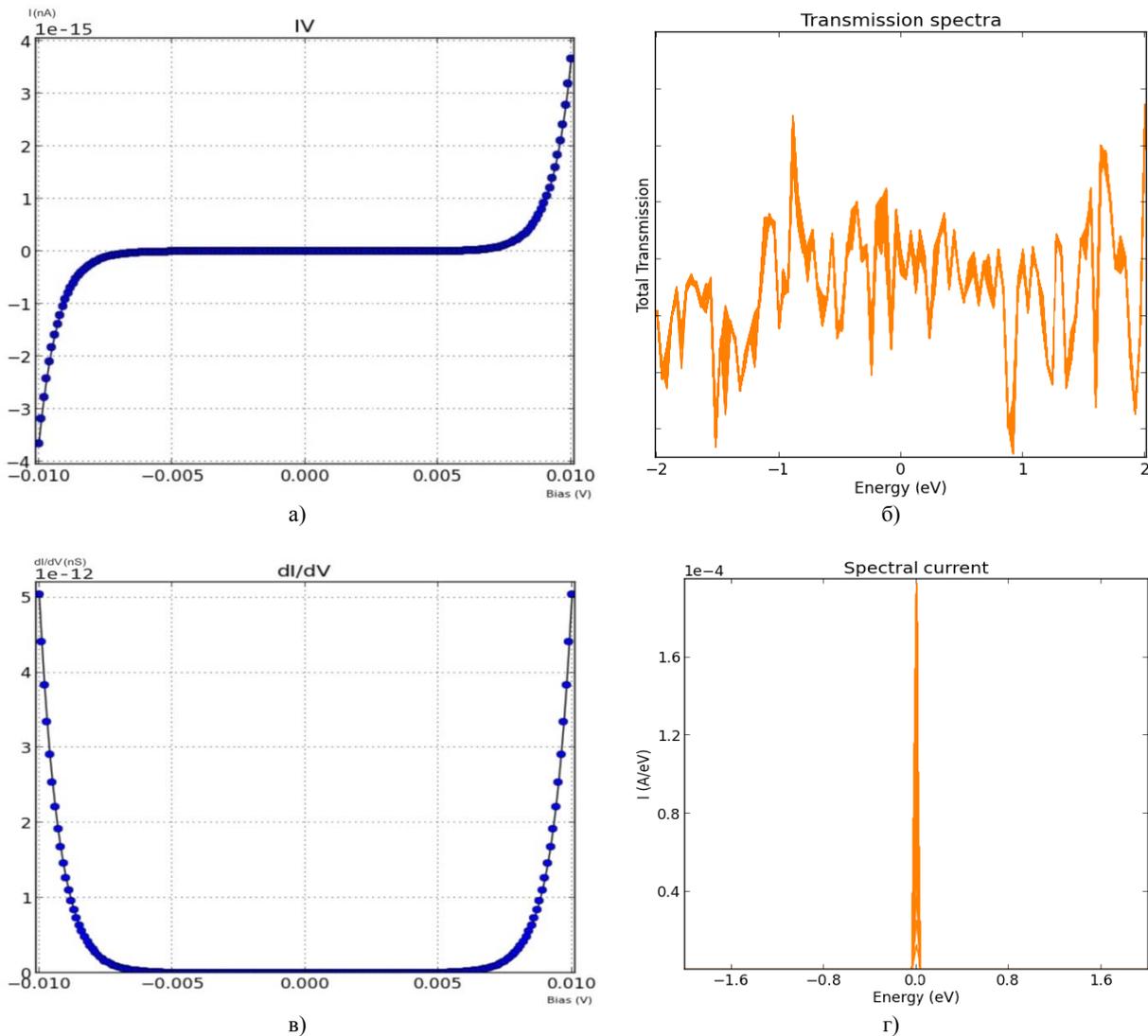


Рисунок 2 – Характеристики наноконтакта Nb – CNT (5,5) – Nb при напряжении смещения 0,01 В: а) ВАХ; б) спектр прозрачности; в) дифференциальная проводимость; г) спектральная плотность тока

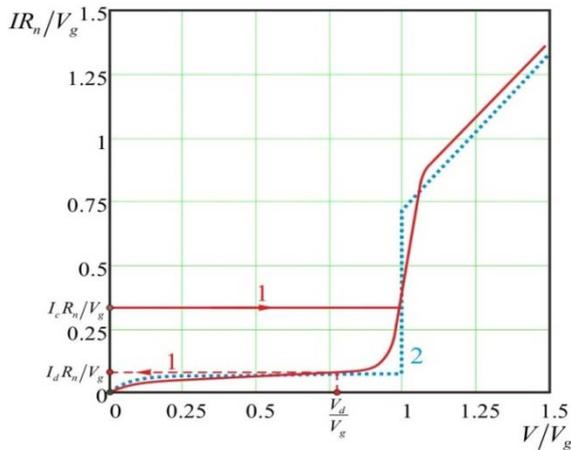


Рисунок 3 – ВАХ сверхпроводящего туннельного перехода: 1 – типичная ВАХ SIS-перехода; 2 – рассчитанная в рамках теории БКШ для идеального SIS-перехода

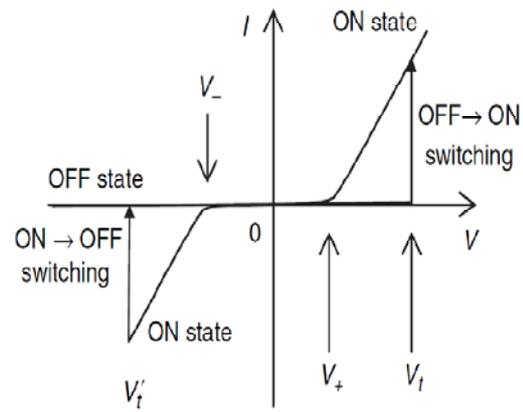


Рисунок 4 – ВАХ по постоянному току двух-терминального переключающего устройства [22].

При таком подходе, можно предположить, что в рассматриваемом наноконтакте ниобиевые берега находятся в сверхпроводящем состоянии, а сам нанокontakt ведет себя, как джозефсоновский элемент SIS типа. Тогда, в нашем случае, малое значение транспортного тока, протекающего через нанокontakt, не разрушает сверхпроводящее состояние ниобиевых сверхпроводящих берегов, за счет чего ВАХ имеет «джозефсоновский вид».

Таблица 1 – Основные параметры сверхпроводящих материалов из ниобия

Сверхпроводник	Критическая температура T_c , К	Глубина проникновения $\lambda(0)$, Э	Длина когерентности $\xi(0)$, Э
Nb	9,2	450	380
NbTi	9,5	1600	50
NbN	16	2000	50
Nb ₃ Sn	18,4	800	35
Nb ₃ Ge	23	–	35

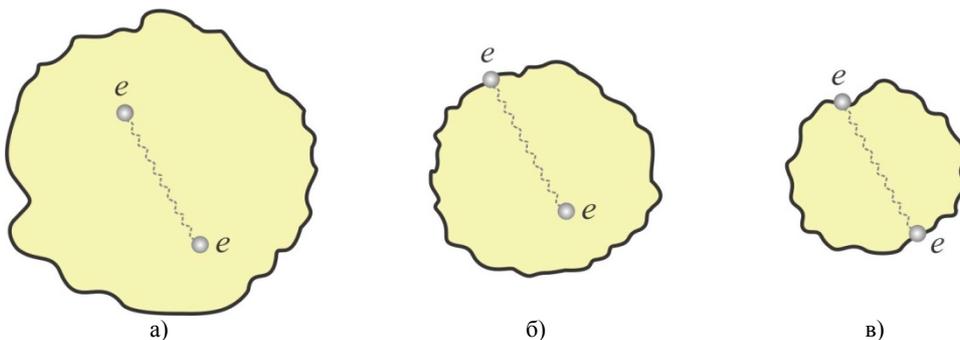


Рисунок 5 – Сценарии образования куперовских пар (согласно [25])

Спектры пропускания барьера совпадают при различных значениях напряжения от -0,01 до 0,01 В (рис. 2 б), что свидетельствует об упорядоченном взаимодействии квазичастиц. Максимумы спектра пропускания наблюдаются при отрицательной энергии $\approx -0,7$ эВ и при положительной энергии $\approx 1,8$ эВ, а минимумы – при $\approx -1,6$ эВ и $\approx 0,9$ эВ.

Дифференциальная проводимость наноконтакта имеет два максимума (присуще туннельным переходам) при напряжениях $\mp 0,01$ В. Максимальное значение дифференциальной проводимости составляет $5 \cdot 10^{-12}$ нСм (рис. 2 в).

Спектральная плотность тока наноконтакта увеличивается с увеличением приложенного напряжения и имеет максимальное значение $2 \cdot 10^{-4}$ А/эВ (рис. 2 г).

На рис. 6 а-г приведены результаты моделирования характеристик наноконтакта Nb – CNT (5,5) – Nb при напряжении смещения 0,5 В. ВАХ квазилинейная и похожа на омическую зависимость. Омическая зависимость ВАХ связана с тем, что величина транспортного тока, протекающего через нанокontakt, достаточна для разрушения сверхпроводящего состояния в левых и правых берегах.

Спектры пропускания барьера флуктуирует при различных значениях приложенного напряжения. На рис. 6 б показаны спектры пропускания для отмеченных точек ВАХ на рис 6 а.

Максимумы дифференциальной проводимости наблюдаются при напряжениях $\mp 0,42$ В и составляют $3 \cdot 10^{-4}$ См.

Спектральная плотность тока – неоднозначная и заметно меняется при различных значениях приложенного напряжения. Максимальное значение спектральной плотности тока $2,2 \cdot 10^{-4}$ А/эВ проявляется при энергии 0,3 эВ.

Подобные характеристики наблюдаются у наноконтакта Nb – CNT (5,5) – Nb и при увеличении температуры на 10 К и 20 К, что объясняется разрушением сверхпроводящего состояния берегов наноконтакта.

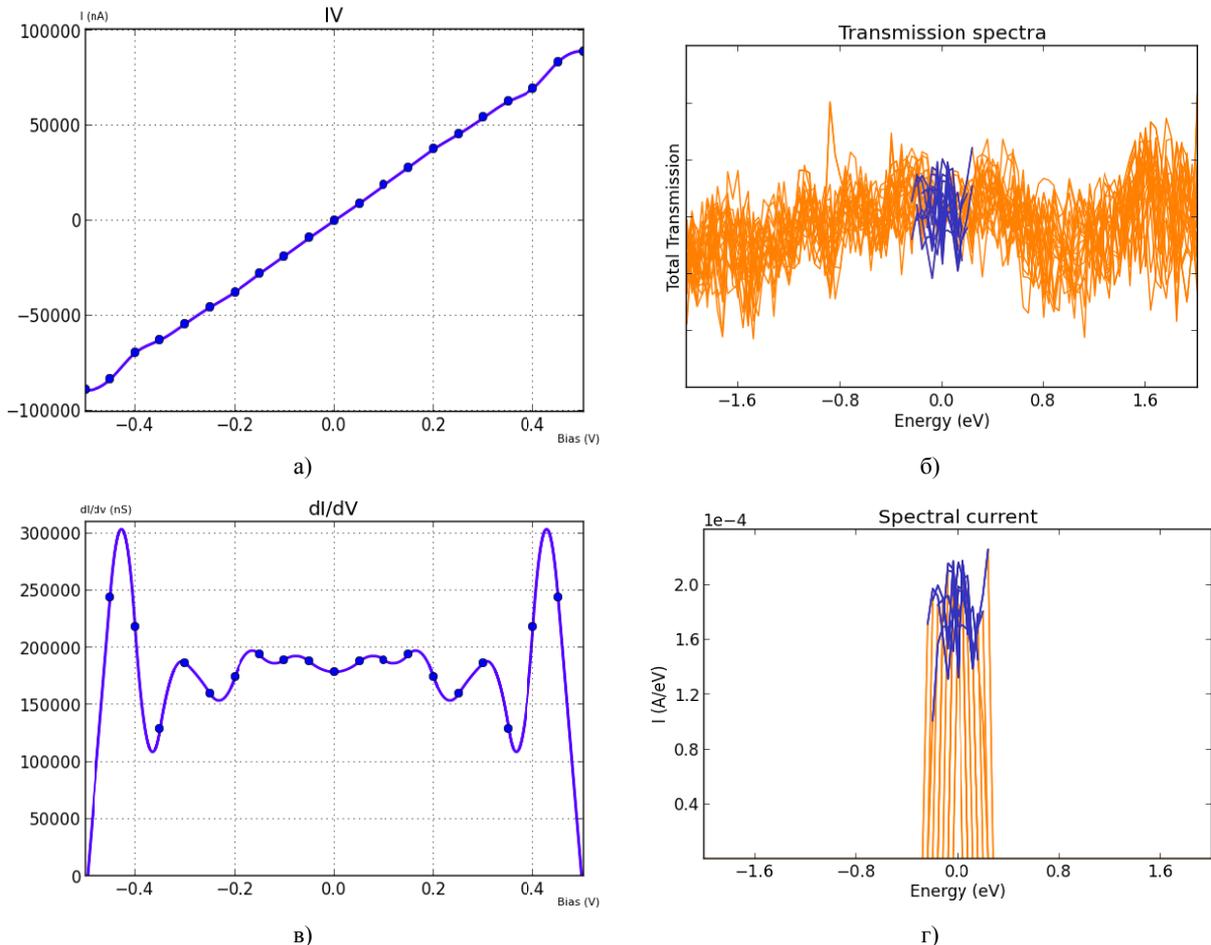


Рисунок 6 – Характеристики наноконтакта Nb – CNT (5,5) – Nb при напряжении смещения 0,5 В: а) ВАХ; б) спектр прозрачности; в) dI/dV -характеристика; г) спектральная плотность тока

Выводы

Сравнивая характеристики наноконтакта для различных значений напряжения смещения (рис. 2, 6), можно сделать заключение о возможности существования сверхпроводящего состояния в низкоразмерных системах при невыполнении условия (11), т.е. в низкоразмерных системах возможно существенное уменьшение длины когерентности. При таком подходе в рамках теории джозефсоновского перехода хорошо объясняются форма ВАХ и спектра дифференциальной

проводимости наноконтакта, совпадение спектров пропускания наноконтакта при различных значениях напряжения, монотонно повышающаяся спектральная плотность тока наноконтакта с увеличением приложенного напряжения.

Таким образом, в данной работе модельно исследованы транспортные характеристики наноконтакта «ниобий – углеродная нанотрубка (5,5) – ниобий» при напряжении смещения $V_{bias} = 0,01$ В; 0,5 В и при низких температурах и получены следующие результаты:

- Расчитаны вольтамперные и dI/dV -характеристики, спектры пропускания и спектральная плотность тока наноконтакта при различных значениях приложенного напряжения и температуре;
- Представлена возможность уменьшения длины когерентности ξ в низкоразмерных структурах по сравнению с макроскопической, вследствие чего при низких температурах структура ведет себя как джозефсоновская структура;
- Выявлено, что при температуре ниже критической, спектры пропускания наноконтакта совпадают при различных значениях напряжения.

Работа частично поддержана грантом МОН РК (проект №4903/ГФ4).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Клавсюк А.Л., Салецкий А.М. Формирование и свойства металлических атомных контактов // УФН. – 2015. – Т. 185. – С. 1009-1030 [Klavysyuk A.L., Saletsky A.M. Formation and properties of metallic atomic contacts // Phys. Usp. – 2015. – Vol. 58. – P. 933-951.]
- [2] Чаплыгин Ю.А. Нанотехнологии в электронике. М.: Техносфера, 2005. – 448 с.
- [3] Sergeyev D., Shunkeyev K., Zhanturina N., Shunkeyev S. The influence of external weak magnetic field on anharmonic nanocontacts of Josephson type // IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering. – 2013. – Vol. 49. – P. 012049.
- [4] Клавсюк А.Л., Колесников С.В., Смелова Е.М., Салецкий А.М. Моделирование процесса формирования металлических наноконтактов методом молекулярной динамики // Физика твердого тела. – 2011. – Т. 53, вып. 11. – С. 2237-2241 [Klavysyuk A.L., Kolesnikov S.V., Smelova E.M., Saletsky A.M. Molecular dynamics simulation of the formation of metal nanocontacts // Physics of the Solid State. – 2011. – Vol. 53, Issue 11. – P. 2356-2360.]
- [5] Paul W., Oliver D., Grutter P. Indentation-formed nanocontacts: an atomic-scale perspective // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2014. – Vol. 16. – P. 8201-8222.
- [6] Iijima S. Helical microtubules of graphitic carbon // Nature. – 1991. – Vol. 354. – P. 56-58.
- [7] Kroto H.W., Heath J.R., O'Brien S.C., Curl R.F., Smalley R.E. C₆₀: Buckminsterfullerene // Nature. – 1985. – Vol. 318. – P. 162-163.
- [8] Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V., Jiang D., Zhang Y., Dubonos S.V., Grigorieva I.V., Firsov A.A. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films // Science. – 2004. – Vol. 306. – P. 666-669.
- [9] Елецкий А.В. Углеродные нанотрубки // УФН. – 1997. – Vol. 167. – P. 945-972 [Eletskii A.V. Carbon nanotubes // Phys. Usp. – 1997. – Vol. 40. – P. 899-924].
- [10] Харламова М.В. Электронные свойства одностенных углеродных нанотрубок и их производных // УФН. – 2013. – Т. 183. – P. 1145-1174 [Kharlamova M.V. Electronic properties of pristine and modified single-walled carbon nanotubes // Phys. Usp. – 2013. – Vol. 56. – P. 1047-1073].
- [11] Cao Q., Han S.-J., Tulevski G.S., Zhu Y., Lu D.D., Haensch W. Arrays of single-walled carbon nanotubes with full surface coverage for high-performance electronics // Nat. Nanotechnol. – 2013. – Vol. 8. – P. 180-186.
- [12] Mishra A., Clayton K., Velasco V., Williams S.J., Wereley S.T. Dynamic optoelectric trapping and deposition of multiwalled carbon nanotubes // Microsystems & Nanoengineering. – 2016. – Vol. 2. – P. 16005.
- [13] Chico L., Crespi V.H., Benedict L.X., Louie S.G., Cohen M.L. Pure Carbon Nanoscale Devices: Nanotube Heterojunctions // Phys. Rev. Lett. – 1996. – Vol. 76. – P. 971.
- [14] Saito R., Dresselhaus G., Dresselhaus M.S. Tunneling conductance of connected carbon nanotubes // Phys. Rev. B. – 1996. – Vol. 53. – P. 2044.
- [15] Franklin A.D., Chen Z. Length scaling of carbon nanotube transistors // Nat. Nanotechnol. – 2010. – Vol. 5. P. 858-862.
- [16] Shin H.-J., Clair S., Kim Y., Kawai M. Substrate-induced array of quantum dots in a single-walled carbon nanotube // Nat. Nanotechnol. – 2009. – Vol. 4. – P. 567-570.
- [17] Barkelid M., Zwiller V. Photocurrent generation in semiconducting and metallic carbon nanotubes // Nat. Photonics. – 2014. – Vol. 8. – P. 47-51.
- [18] Morpurgo A.F., Kong J., Marcus C.M., Dai H. Gate-Controlled Superconducting Proximity Effect in Carbon Nanotubes // Science. – 1999. – Vol. 286. – P. 263-265.
- [19] Zhong Y.-L., Akazaki T., Kanzaki K., Kobayashi Y., Takayanagi H. Superconducting proximity effect in single-walled carbon nanotubes between NbN electrodes // Science and Technology of Advanced Materials. – 2006. – Vol. 7. – P. S78-S82.
- [20] Kasumov A.Yu., Deblock R., Kociak M., Reulet B., Bouchiat H., Khodos I.I., Gorbatov Yu.B., Volkov V.T., Journet C., Burghard M. Supercurrents Through Single-Walled Carbon Nanotubes // Science. – 1999. – Vol. 284. – P. 1508-1511.
- [21] Brandbyge M., Mozos J.-L., Ordejon P., Taylor J., Stokbro K. Density-functional method for nonequilibrium electron transport // Phys. Rev. B. – 2002. – Vol. 65. – P. 165401.
- [22] Karpov A., Blondel J., Dmitriev P., Koshelets V. A Broad Band Low Noise SIS Radiometer // IEEE Trans. on Appl. Supercond. – 1999. – Vol. 9, No 2. – P. 4225-4228.

- [23] Likharev K.K. Hybrid CMOS/Nanoelectronic Circuits: Opportunities and Challenges // *Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics*. – 2008. – Vol.3. – P. 203–230.
- [24] Mourachkine A. Room-Temperature Superconductivity. Cambridge Int. Science Publ., 2004. – 310 p.
- [25] Смолянкина О.Ю., Югай К.Н. Электронный транспорт через сверхпроводящую наночастицу с учетом поверхностных состояний // *Вестник НГУ. Серия Физика*. – 2009. – Т. 4, вып. 1. – С. 62-67.
- [26] Смолянкина О.Ю., Югай К.Н. Исследование поверхностных состояний наночастицы // *Вестник Омского университета*. – 2005. – № 3. – С. 9-11.

REFERENCES

- [1] Klavysyuk A.L., Saletsky A.M. *Phys. Usp.*, **2015**, 58, 933-951 (in Eng.).
- [2] Chaplygin Ju.A. *Nanotehnologii v elektronike*. M.: Tehnosfera, **2005**, 448 p. (in Russ.).
- [3] Sergeyev D., Shunkeyev K., Zhanturina N., Shunkeyev S. *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering*, **2013**, 49, 012049 (in Eng.).
- [4] Klavysyuk A.L., Kolesnikov S.V., Smelova E.M., Saletsky A.M. *Physics of the Solid State*, **2011**, 53, 11, 2356-2360 (in Eng.).
- [5] Paul W., Oliver D., Grutter P. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2014**, 16, 8201-8222 (in Eng.).
- [6] Iijima S. *Nature*, **1991**, 354, 56-58 (in Eng.).
- [7] Kroto H.W., Heath J.R., O'Brien S.C., Curl R.F., Smalley R.E. *Nature*, **1985**, 318, 162-163 (in Eng.).
- [8] Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V., Jiang D., Zhang Y., Dubonos S.V., Grigorieva I.V., Firsov A.A. *Science*, **2004**, 306, 666-669 (in Eng.).
- [9] Eletskiy A.V. *Phys. Usp.*, **1997**, 40, 899-924 (in Eng.).
- [10] Kharlamova M.V. *Phys. Usp.*, **2013**, 56, 1047-1073 (in Eng.).
- [11] Cao Q., Han S.-J., Tulevski G.S., Zhu Y., Lu D.D., Haensch W. *Nat. Nanotechnol.*, **2013**, 8, 180-186 (in Eng.).
- [12] Mishra A., Clayton K., Velasco V., Williams S.J., Wereley S.T. *Microsystems & Nanoengineering*, **2016**, 2, 16005 (in Eng.).
- [13] Chico L., Crespi V.H., Benedict L.X., Louie S.G., Cohen M.L. *Phys. Rev. Lett.*, **1996**, 76, 971 (in Eng.).
- [14] Saito R., Dresselhaus G., Dresselhaus M.S. *Phys. Rev. B*, **1996**, 53, 2044 (in Eng.).
- [15] Franklin A.D., Chen Z. *Nat. Nanotechnol.*, **2010**, 5, 858-862 (in Eng.).
- [16] Shin H.-J., Clair S., Kim Y., Kawai M. *Nat. Nanotechnol.*, **2009**, 4, 567-570 (in Eng.).
- [17] Barkelid M., Zwiller V. *Nat. Photonics*, **2014**, 8, 47-51 (in Eng.).
- [18] Morpurgo A.F., Kong J., Marcus C.M., Dai H. *Science*, **1999**, 286, 263-265 (in Eng.).
- [19] Zhong Y.-L., Akazaki T., Kanzaki K., Kobayashi Y., Takayanagi H. *Science and Technology of Advanced Materials*, **2006**, 7, S78–S82 (in Eng.).
- [20] Kasumov A.Yu., Deblock R., Kociak M., Reulet B., Bouchiat H., Khodos I.I., Gorbatov Yu.B., Volkov V.T., Journet C., Burghard M. *Science*, **1999**, 284, 1508-1511 (in Eng.).
- [21] Brandbyge M., Mozos J.-L., Ordejon P., Taylor J., Stokbro K. *Phys. Rev. B*, **2002**, 65, 165401 (in Eng.).
- [22] Karpov A., Blondel J., Dmitriev P., Koshelets V. *IEEE Trans. on Appl. Supercond.*, **1999**, 9, 2, 4225-4228 (in Eng.).
- [23] Likharev K.K. *Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics*, **2008**, 3, 203–230 (in Eng.).
- [24] Mourachkine A. *Room-Temperature Superconductivity*. Cambridge Int. Science Publ., **2004**, 310 p (in Eng.).
- [25] Smoljankina O.Ju., Jugaj K.N. *Vestnik NGU. Serija Fizika*, **2009**, 4, 62-67 (in Russ.).
- [26] Smoljankina O.Ju., Jugaj K.N. *Vestnik Omskogo universiteta*, **2005**, 3, 9-11 (in Russ.).

Д.М. Сергеев, Қ.Ш. Шүңкеев

- ¹ Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік мемлекеттік университеті, Ақтөбе қ.
- ² Т.Я. Бегельдинов атындағы Әуе қорғаныс күштерінің әскери институты, Ақтөбе қ.

«НИОБИЙ – КӨМІРТЕКТІ НАНОТҮТІКШЕ (5,5) – НИОБИЙ» НАНОТҮЙІСПЕСІНІҢ ТРАНСПОРТТЫҚ СИПАТТАМАЛАРЫНЫҢ КОМПЬЮТЕРЛІК МОДЕЛЬДЕУІ

Аннотация. Мақалада функционалды тығыздық теориясы аясында Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab бағдарламасын қолдану арқылы «ниобий – көміртекті нанотүтікше (5,5) – ниобий» нанотүйіспесінің транспорттық сипаттамалары модельді зерттелді. Нанотүйіспені компьютерлік модельдеу барысында тепе-теңсіздік Грин функциялары әдісі мен локальды тығыздық аппроксимациясы қолданылды. Ығысу кернеуі мен температураның әртүрлі мәндерінде қарастырылып отырған нанотүйіспенің вольтамперлік сипаттамасы, дифференциалдық өткізгіштігі, өткізу спектрлері және спектральді тоқ тығыздығы есептелінді. Нанотүйіспе арқылы өтетін электронды транспорт сипаттамасы түйіспе өлшемі мен когеренттілік ұзындығы қатынасының аз шамасына қарамай мұндай жүйелер төмен температурада джозефсондық құрылымы тәрізді қасиетін көрсететіндігі белгілі болды. Бұл төменгі өлшемді жүйелерде Купер жұбының өлшемі азаятындығы туралы түйін жасауға мүмкіндік береді. Мұндай жағдайда жүйенің бетінде периодты құрылымның жоқ болуына байланысты электрондар арасындағы корреляция оның көлемі арқылы фонндар есебінен жүзеге асады. Аталмыш нанотүйіспелерде төменгі температурада ығысу кернеуінің әртүрлі мәндерінде өткізу спектрлерінің ұқсастығы байқалады. Алынған нәтижелер наноэлектрониканың элементтерін есептеуге пайдалы болуы мүмкін.

Түйін сөздер: нанотүйіспе, көміртекті нанотүтікше, вольтамперлік сипаттама, дифференциалдық өткізгіштік, өткізу спектрі, спектральді ток.

МАЗМУНЫ

<i>Бакранова Д.И., Кукушкин С.А., Бейсембетов И.К., Осипов А.В., Нусупов К.Х., Бейсенханов Н.Б., Кенжалиев Б.К., Сейтов Б.Ж.</i> Ақауы аз кремний матрицаларындағы атомдардың орнын басу әдісімен алынған эпитаксиалды SiC кабыршақтарын рентгендік талдау.....	5
<i>Батрышев Д.Ф., Рамазанов Т.С., Досболаев М.К., Габдуллин М.Т., Ерланұлы Е.</i> Жоғары жиілікті сыйымдылық разрядында газдық фазадан плазмохимиялық әдісімен көміртек нанотүтікшелерін синтездеу.....	10
<i>Демьянова А.С., Данилов А.Н., Буртебаев Н., Джансейтов Д.М., Керимкулов Ж., Алимов Д.К., Мухамеджанов Е.С.</i> ¹³ C ядросының экзотикалық күйлерінің радиустары.....	17
<i>Сарсенгельдин М.М., Слямхан М.М., Бижигитова Н.Т.</i> Қозғалмалы шекарасы бар оське тимейтін жылуөткізгіштік тендеуінің жылу көпмүшелері арқылы аналитикалық шешімі.....	21
<i>Бакранова Д.И., Кукушкин С.А., Бейсембетов И.К., Осипов А.В., Нусупов К.Х., Бейсенханов Н.Б., Кенжалиев Б.К., Сейтов Б.Ж.</i> Ақауы аз кремний матрицаларындағы атомдардың орнын басу әдісімен алынған эпитаксиалды SiC кабыршақтарын рентгендік талдау.....	25
<i>Диханбаев К.К., Мусабек Г.К., Сиваков В.А., Ермухамед Д., Мейрам А.Т.</i> Кремний наноталшықтарының микрофотолюминесценциясы.....	32
<i>Батрышев Д.Ф., Рамазанов Т.С., Досболаев М.К., Габдуллин М.Т., Ерланұлы Е.</i> Жоғары жиілікті сыйымдылық разрядында газдық фазадан плазмохимиялық әдісімен көміртек нанотүтікшелерін синтездеу.....	38
<i>Демьянова А.С., Данилов А.Н., Буртебаев Н., Джансейтов Д.М., Керимкулов Ж., Алимов Д.К., Мухамеджанов Е.С.</i> ¹³ C ядросының экзотикалық күйлерінің радиустары.....	45
<i>Сергеев Д.М., Шұңқеев Қ.Ш.</i> «Ниобий – көміртекті нанотүтікше (5,5) – ниобий» нанотүйіспесінің транспорттық сипаттамаларының компьютерлік модельдеуі.....	49
<i>Досболаев М.К., Утегенов А.У., Тажен А.Б., Рамазанов Т.С., Габдуллин М.Т.</i> Импульстік плазмалық ағынның динамикалық қасиеттері мен импульсті плазмалық деткіштегі тозаңның пайда болуы.....	59
<i>Минглибаев М.Ж., Жұмабек Т.М.</i> Теңбүйірлі шектелген үш дене мәселесі	67
<i>Оразбаев С.А., Өмірбеков Д.Б., Досболаев М.Қ., Габдуллин М.Т., Рамазанов Т.С.</i> Сынақта тозаңды-плазмалы шамның жарық беру қасиетін зерттеу.....	74
<i>Жақып К.Б.</i> Сұйықтықтар мен газдардағы химиялық реакциялары бар термобародиффузияларды моделдеу.....	80
<i>Оразбаев С.А., Өмірбеков Д.Б., Габдуллин М.Т., Досболаев М.Қ., Рамазанов Т.С.</i> Газ температурасының тозаңды нанобөлшектердің өлшемі мен құрылымына әсері.....	89
<i>Жақып-тегі К. Б.</i> Гуктың заңымен серпілімдік теориясында моделдеу. Кернеулер тензорында симметрия жоқтығы.....	96
<i>Буртебаев Н., Алимов Д., Зазулин Д.М., Керимкулов Ж.К., Юшков А.В., Джансейтов Д.М., Мухамеджанов Е., Насрулла М.</i> Төменгі энергиялы протондардың ¹⁴ N ядросымен әсерлесу потенциал параметрлерін анықтау.....	104
<i>Буртебаев Н., Керимкулов Ж.К., Амангелді Н., Алимов Д.К., Мухамеджанов Е.С., Джансейтов Д.М., Мауей Б., Аймаганбетов А., Қурахмедов А.Е., Бекбаев С.М., Мадиярова А.Ж.</i> 17,5 және 41 МэВ энергияларда ¹¹ B ядроларынан ¹⁴ N иондарының серпімді шашырауын зерттеу.....	109
<i>Искакова У.А., Төрбек Б.Т.</i> Лаплас операторы үшін робен-коши қисынсыз есебін шешудің бір әдісі туралы.....	115
<i>Шинибаев М.Д., Беков А.А., Даирбеков С.С., Жолдасов С.А., Мырзақасова Г.Е., Алиаскаров Д.Р., Шекербекова С.А., Садыбек А.Ж.</i> Екі жылжымайтын нүкте проблемасының жаңа нұсқасы.....	121
<i>Сарсенбаев Х.А., Хамзина Б.С., Колдасова Г.А., Исаева Г.Б.</i> Модификацияланған алс лигносульфонатты реагентін (НПП «Азимут») зерттеу.....	126

СОДЕРЖАНИЕ

<i>Бакранова Д.И., Кукушкин С.А., Бейсембетов И.К., Осипов, А.В. Нусупов К.Х., Бейсенханов Н.Б., Кенжалиев Б.К., Сейтов Б.Ж.</i> Рентгеновский анализ эпитаксиальных пленок SiC, выращенных методом замещения атомов на подложках низкодефектного кремния.....	5
<i>Батрышев Д.Г., Рамазанов Т.С., Досболаев М.К., Габдуллин М.Т., Ерланулы Е.</i> Синтез углеродных нанотрубок плазмохимическим методом осаждения из газовой фазы в высокочастотном емкостном разряде.....	10
<i>Демьянова А.С., Данилов А.Н., Буртебаев Н., Джансейтов Д.М., Керимкулов Ж., Алимов Д.К., Мухамеджанов Е.С.</i> Экзотические состояния ядра ¹³ C с аномальными радиусами.....	17
<i>Сарсенгельдин М.М., Слямхан М.М., Бижигитова Н.Т.</i> Аналитическое решение уравнения теплопроводности с движущимися границами не касающимися оси тепловыми полиномами.....	21
<i>Бакранова Д.И., Кукушкин С.А., Бейсембетов И.К., Осипов А.В., Нусупов К.Х., Бейсенханов Н.Б., Кенжалиев Б.К., Сейтов Б.Ж.</i> Рентгеновский анализ эпитаксиальных пленок SiC, выращенных методом замещения атомов на подложках низкодефектного кремния.....	25
<i>Диханбаев К.К., Мусабек Г.К., Сиваков В.А., Ермухамед Д., Мейрам А.Т.</i> Фотолюминесценция кремниевых нанонитей.....	32
<i>Батрышев Д.Г., Рамазанов Т.С., Досболаев М.К., Габдуллин М.Т., Ерланулы Е.</i> Синтез углеродных нанотрубок плазмохимическим методом осаждения из газовой фазы в высокочастотном емкостном разряде.....	38
<i>Демьянова А.С., Данилов А.Н., Буртебаев Н., Джансейтов Д.М., Керимкулов Ж., Алимов Д.К., Мухамеджанов Е.С.</i> Экзотические состояния ядра ¹³ C с аномальными радиусами.....	45
<i>Сергеев Д.М., Шункеев К.Ш.</i> Компьютерное моделирование транспортных характеристик наноконтакта «Ниобий – углеродная нанотрубка (5,5) – ниобий».....	49
<i>Досболаев М.К., Утегенов А.У., Тажен А.Б., Рамазанов Т.С., Габдуллин М.Т.</i> Динамические свойства импульсного плазменного потока и пылеобразование в ИПУ.....	59
<i>Минглибаев М.Дж., Жумабек Т.М.</i> К равнобедренной ограниченной задаче трех тел.....	67
<i>Оразбаев С.А., Омирбеков Д.Б., Досболаев М.К., Габдуллин М.Т., Рамазанов Т.С.</i> Экспериментальное исследование свойства светоотдачи плазменно-пылевой лампы.....	74
<i>Джакупов К.Б.</i> Моделирование термобародиффузий с химическими реакциями в жидкостях и газах.....	80
<i>Оразбаев С.А., Омирбеков Д.Б., Габдуллин М.Т., Досболаев М.К., Рамазанов Т.С.</i> Влияние температуры газа на размеры и структуры пылевых наночастиц.....	89
<i>Джакупов К.Б.</i> Моделирование по закону Гука в теории упругости. Несимметричность тензора напряжений.....	96
<i>Буртебаев Н., Алимов Д., Зазулин Д.М., Керимкулов Ж.К., Юшков А.В., Джансейтов Д.М., Мухамеджанов Е., Насрулла М.</i> Определение параметров потенциала взаимодействия протона с ¹⁴ N при низких энергиях.....	104
<i>Буртебаев Н., Керимкулов Ж.К., Амангелді Н., Алимов Д.К., Мухамеджанов Е.С., Джансейтов Д.М., Мауей Б., Аймаганбетов А., Курахмедов А.Е., Бекбаев С.М., Мадиярова А.Ж.</i> Исследование упругого рассеяния ионов ¹⁴ N на ядрах ¹¹ B при энергиях 17,5 и 41 МэВ.....	109
<i>Искакова У.А., Торекбек Б.Т.</i> Об одном методе решения некорректной задачи робена-коши для оператора лапласа... ..	115
<i>Шинибаев М.Д., Беков А.А., Даирбеков С.С., Жолдасов С.А., Мырзакасова Г.Е., Алиаскаров Д.Р., Шекербекова С.А., Садыбек А.Ж.</i> О новой версии задачи двух неподвижных центров.....	121
<i>Сарсенбаев Х.А., Хамзина Б.С., Колдасова Г.А., Исаева Г.Б.</i> Исследование модифицированного реагента АЛС лигносульфонатная (НПП «Азимут»).....	126

CONTENTS

<i>Bakranova D.I., Kukushkin S.A., Beisembetov I.K., Osipov A.V., Nussupov K.Kh., Beisenkhanov N.B., Kenzhaliev B.K., Seitov B.Zh.</i> X-Ray analysis of SiC epitaxial films grown by method of atom replacement on low dislocation silicon substrate.....	5
<i>Batryshev D.G., Ramazanov T.S., Dosbolayev M.K., Gabdullin M.T., Yerlanuly Ye.</i> Synthesis of carbon nanotubes by plasma chemical deposition method from vapour-phase in radio-frequency capacitive discharge.....	10
<i>Demyanova A.S., Danilov A.N., Burtebayev N., Janseitov D.M., Kerimkulov Zh., Alimov D.K., Mukhamejanov Y.S.</i> Exotic states of ¹³ C nuclei with abnormal radii.....	17
<i>Sarsengeldin M.M., Slyamkhan M.M., Bizhigitova N.T.</i> Analytical solution of heat equation with moving boundary tangent to axis by heat polynomials.....	21
<i>Bakranova D.I., Kukushkin S.A., Beisembetov I.K., Osipov A.V., Nussupov K.Kh., Beisenkhanov N.B., Kenzhaliev B.K., Seitov B.Zh.</i> X-ray analysis of SiC epitaxial films grown by method of atom replacement on low dislocation silicon Substrate.....	25
<i>Dikhanbayev K.K., Mussabek G.K., Sivakov V.A., Yermukhamed D., Meiram A.T.</i> Micro-photoluminescence in silicon nano-wires.....	32
<i>Batryshev D.G., Ramazanov T.S., Dosbolayev M.K., Gabdullin M.T., Yerlanuly Ye.</i> Synthesis of carbon nanotubes by plasma chemical deposition method from vapour-phase in radio-frequency capacitive discharge.....	38
<i>Demyanova A.S., Danilov A.N., Burtebayev N., Janseitov D.M., Kerimkulov Zh., Alimov D.K., Mukhamejanov Y.S.</i> Exotic states of ¹³ C nuclei with abnormal radii.....	45
<i>Sergeyev D.M., Shunkeyev K.Sh.</i> Computer simulation of transport properties of nanocontact "Niobium – carbon nanotubes (5.5) – niobium".....	49
<i>Dosbolayev M.K., Utegenov A.U., Tazhen A.B., Ramazanov T.S., Gabdullin M.T.</i> Dynamic properties of pulse plasma flow and dust formation in the pulsed plasma accelerator.....	59
<i>Minglibayev M.Zh., Zhumabek T.M.</i> On the isosceles restricted three-body problem.....	67
<i>Orazbayev S.A., Omirbekov D.B., Dosbolayev M.K., Gabdullin M.T., Ramazanov T.S.</i> Experimental research of luminous efficiency of dusty plasma lamp.....	74
<i>Zhakupov K.B.</i> Modeling thermal barodiffusion with chemical reactions in liquids and gases.....	80
<i>Orazbayev S.A., Omirbekov D.B., Gabdullin M.T., Dosbolayev M.K., Ramazanov T.S.</i> The influence of gas temperature on size and structure of the dust nanoparticles.....	89
<i>Jakupov K.B.</i> Modeling Hooke's law in the theory of elasticity. Unsymmetrical stress tensor.....	96
<i>Burtebayev N., Alimov D.K., Zazulin D.M., Kerimkulov Zh.K., Yushkov A.V., Janseitov D.M., Mukhamejanov Y., Nassurulla M.</i> Determination of parameters of proton ¹⁴ N interaction potential at low energies.....	104
<i>Burtebayev N., Kerimkulov Zh.K., Amangeldi N., Alimov D.K., Mukhamejanov Y.S., Janseitov D.M., Mauey B., Aymaganbetov A., Kurakhmedov A., Bekbaev S.M., Madiyarova A.Zh.</i> Study of elastic scattering of ¹⁴ N ions from ¹⁶ O at energies 17,5 and 41 MeV.....	109
<i>Iskakova U.A., Torebek B.T.</i> Certain method of solving ill-posed cauchy-robin problem for the laplace operator.....	115
<i>Shinibaev M.D., Bekov A.A., Dairbekov S.S., Zholdasov S.A., Myrzakasova G.E., Aliaskarov D.R., Shekerbekova S.A., Sadybek A.G.</i> A new version of the problem of two fixed centers.....	121
<i>Sarsenbayev Kh.A., Khamzina B.S., Koldassova G.A., Issayeva G.B.</i> Research of modified reagent ALS lignosulfonate (NPP «Azimut»).....	126

Publication Ethics and Publication Malpractice in the journals of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan

For information on Ethics in publishing and Ethical guidelines for journal publication see <http://www.elsevier.com/publishingethics> and <http://www.elsevier.com/journal-authors/ethics>.

Submission of an article to the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan implies that the described work has not been published previously (except in the form of an abstract or as part of a published lecture or academic thesis or as an electronic preprint, see <http://www.elsevier.com/postingpolicy>), that it is not under consideration for publication elsewhere, that its publication is approved by all authors and tacitly or explicitly by the responsible authorities where the work was carried out, and that, if accepted, it will not be published elsewhere in the same form, in English or in any other language, including electronically without the written consent of the copyright-holder. In particular, translations into English of papers already published in another language are not accepted.

No other forms of scientific misconduct are allowed, such as plagiarism, falsification, fraudulent data, incorrect interpretation of other works, incorrect citations, etc. The National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan follows the Code of Conduct of the Committee on Publication Ethics (COPE), and follows the COPE Flowcharts for Resolving Cases of Suspected Misconduct (http://publicationethics.org/files/u2/New_Code.pdf). To verify originality, your article may be checked by the Cross Check originality detection service <http://www.elsevier.com/editors/plagdetect>.

The authors are obliged to participate in peer review process and be ready to provide corrections, clarifications, retractions and apologies when needed. All authors of a paper should have significantly contributed to the research.

The reviewers should provide objective judgments and should point out relevant published works which are not yet cited. Reviewed articles should be treated confidentially. The reviewers will be chosen in such a way that there is no conflict of interests with respect to the research, the authors and/or the research funders.

The editors have complete responsibility and authority to reject or accept a paper, and they will only accept a paper when reasonably certain. They will preserve anonymity of reviewers and promote publication of corrections, clarifications, retractions and apologies when needed. The acceptance of a paper automatically implies the copyright transfer to the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan.

The Editorial Board of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan will monitor and safeguard publishing ethics.

Правила оформления статьи для публикации в журнале смотреть на сайтах:

www.nauka-nanrk.kz

<http://www.physics-mathematics.kz>

ISSN 2518-1726 (Online), ISSN 1991-346X (Print)

Редактор *М. С. Ахметова, Д. С. Аленов, Т. А. Апендиев*
Верстка на компьютере *А. М. Кульгинбаевой*

Подписано в печать 2016.
Формат 60x881/8. Бумага офсетная. Печать – ризограф.
4 п.л. Тираж 300. Заказ 6.