

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**

**5 (315)**

**ҚЫРКУЙЕК – ҚАЗАН 2017 Ж.  
СЕНТЯБРЬ – ОКТЯБРЬ 2017 Г.  
SEPTEMBER – OCTOBER 2017**

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.** корр.-мүшесі (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](http://www.nauka-nanrk.kz) / [physics-mathematics.kz](http://physics-mathematics.kz)

---

© Қазақстан Республикасының Ұлттық ғылым академиясы, 2017

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

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

Редакционная коллегия:

**Джумадильдаев 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.** чл.-корр. (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](http://www.nauka-nanrk.kz) / [physics-mathematics.kz](http://physics-mathematics.kz)

---

© Национальная академия наук Республики Казахстан, 2017

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.** corr. member. (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](http://www.nauka-nanrk.kz/physics-mathematics.kz)

---

© National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan, 2017

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 5, Number 315 (2017), 75 – 83

UDC 539.23; 539.216.1

**D.G. Batryshev<sup>1,3</sup>, Ye. Yerlanuly<sup>1,3</sup>, T.S. Ramazanov<sup>2</sup>, M.T. Gabdullin<sup>3</sup>**

<sup>1</sup> Laboratory of Engineering Profile, Al-Farabi Kazakh National University;

<sup>2</sup> Scientific and Research Institute of Experimental and Theoretical Physics,  
Al-Farabi Kazakh National University;

<sup>3</sup> National Nanotechnological Laboratory of Opened Type, Al-Farabi Kazakh National University  
Kazakhstan, 050040, Almaty, Al-Farabi avenue, 71  
[yerlanuly@physics.kz](mailto:yerlanuly@physics.kz)

**INVESTIGATION OF STRUCTURAL AND ELECTRONIC  
PROPERTIES OF SINGLE-WALLED CARBON NANOTUBES  
ON THE BASIS OF A HYBRID FUNCTIONAL  
BECKE 3-PARAMETER LEE-YANG-PARR (B3LYP)**

**Abstract:** This work is devoted to the study of the structural and electronic properties of single-walled carbon nanotubes from "the first principles" by the electron density functional method and the Hartree-Fock approximation. On the basis of this method, quantum-chemical calculations of the energy minimum and the band gap of single-walled carbon nanotubes were performed as a function of the chirality angle. It was shown that single-walled nanotubes have both metallic and semiconducting conductivity. From calculations of the energy minimum, it has been established that chiral single-walled carbon nanotubes have the most stable structure, rather than the "zigzag" and "armchair" type. Although the nanotubes of the chair type (11.11) and the zigzag type (11.0), which are identical in the chirality index, have the closest values of the energy minimum and the same number of atoms in the unit cell, they differ in diameter, volume of the unit cell, and the chirality angle and, consequently, the types of conductivity.

**Key words:** carbon nanotubes, structural properties, electronic properties, electron density functional

УДК 539.23; 539.216.1

**Д.Г. Батрышев<sup>1,3</sup>, Е. Ерланулы<sup>1,3</sup>, Т.С. Рамазанов<sup>2</sup>, М.Т. Габдуллин<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>Лаборатория инженерного профиля, КазНУ им. аль-Фараби;

<sup>2</sup>Научно-исследовательский институт экспериментальной и теоретической физики, КазНУ им. аль-Фараби;

<sup>3</sup>Национальная нанотехнологическая лаборатория открытого типа, КазНУ им. аль-Фараби,  
Казахстан, 050040 Алматы, пр. аль-Фараби, 71

**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ И ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ  
ОДНОСТЕННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК  
НА ОСНОВЕ ГИБРИДНОГО ФУНКЦИОНАЛА  
BECKE 3-PARAMETER LEE-YANG-PARR (B3LYP)**

**Аннотация:** Данная работа посвящена изучению структурных и электронных свойств одностенных углеродных нанотрубок «из первых принципов» методом функционала электронной плотности и приближения Хартри-Фока. На основе данного метода были проведены квантово-химические расчеты минимума энергии и ширины запрещенной зоны одностенных углеродных нанотрубок в зависимости от угла хиральности. Показано, что одностенные нанотрубки имеют как металлическую, так и полупроводниковую

проводимость. Из расчетов минимума энергии установлено, что наиболее стабильной структурой обладают хиральные одностенные углеродные нанотрубки, нежели типа «зигзаг» и «кресло». Показано, что хотя идентичные по индексу хиральности нанотрубки типа «кресло» (11,11) и типа «зигзаг» (11,0) имеют наиболее близкие значения минимума энергии и одинаковое количество атомов в элементарной ячейке, они различаются по диаметру, объему элементарной ячейки и углу хиральности и, следовательно, типами проводимости.

**Ключевые слова:** углеродные нанотрубки, структурные свойства, электронные свойства, функционал электронной плотности.

### Введение

На сегодняшний день большой интерес исследования одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ) связано с их уникальными механическими, электрическими, магнитными, оптическими свойствами, благодаря которым они могут применяться в электронике (гибкие дисплеи, датчики, быстродействующие и экономичные диоды и транзисторы) [1,2], в медицине (лечение онкологических заболеваний, биосовместимые функциональные препараты и маркеры) [3-5], в энергетике (создание солнечных панелей, топливные элементы, эффективный катодный электрокатализатор)[6-8] и т.д. Для использования углеродных нанотрубок в перечисленных отраслях, требуется обширное понимание их электронных и структурных свойств. Именно для этих целей компьютерное моделирование и теоретические расчеты являются подходящими методами изучения характеристик наноматериалов и имеют немаловажную роль в процессе изучения свойств наноструктур, в частности и УНТ [9-16]. Расчеты структурных и электронных свойств проводят «из первых принципов» как в рамках приближения Хартри–Фока (HF), так и на теории функционала электронной плотности (DFT), или гибридных методов (DFT/HF). В основе используемых методов лежит представление одноэлектронных волновых функций, которые в свою очередь выражаются через локальные базисные функции на основе функций гауссова типа.

### Расчеты и обсуждение результатов

В данной работе для изучения структурных и электронных свойств одностенных углеродных нанотрубок был использован гибридный метод. Из литературных данных [17–21] известно, что использование гибридного функционала дает качественное описание электронных и структурных свойств периодической системы (энергия оптимизации, длина химической связи, ширина запрещенной зоны и т.д.) соответствующие результатам экспериментальных измерений. В DFT/HF-вычислениях использовался гибридный функционал Becke 3-parameter Lee-Yang-Parr (B3LYP), где обменная энергия рассчитывается на основе точных вычислений, полученных в приближении методом Хартри–Фока. В расчетах для описания базисного набора атомов углерода был использован псевдопотенциал Reintiger-Oliveiro-Bredowtriple-zetavalence + polarization. Оптимизация геометрии структуры одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ) проводилась с помощью минимизации полной энергии (точность  $10^{-7}$  a.u.).

В процессе проведения исследования были рассмотрены структуры ОУНТ различной хиральности, параметры которых приведены в таблице 1. Как известно, ОУНТ классифицируются на 3 типа: «кресло» (armchair), «зигзаг» (Zigzag) и хиральные (chiral), которые различаются по типу проводимости в зависимости от степени хиральности ( $n_1, n_2$ ).

На рисунке 1 представлена структура ОУНТ с коэффициентами хиральности  $n_1=11, n_2=11$ . Как видно из рисунка, структура нанотрубки (11,11) имеет характерную форму ОУНТ типа «кресло», в которых две из шести С-С связи в гексагоне перпендикулярны относительно оси ОУНТ. Из литературных источников известно, что все ОУНТ типа «кресло» имеют металлическую проводимость. Произведенные расчеты электронных свойств ОУНТ (11,11) типа «кресло» действительно показывают отсутствие запрещенной зоны (рисунок 2). Значению  $E=0$  соответствует уровень Ферми.

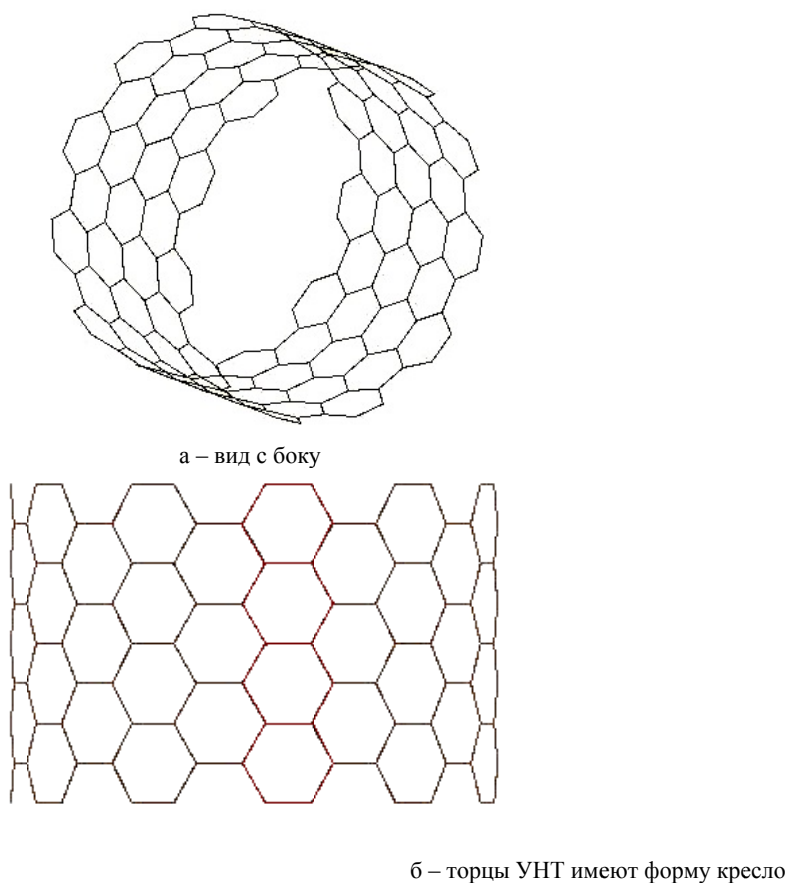
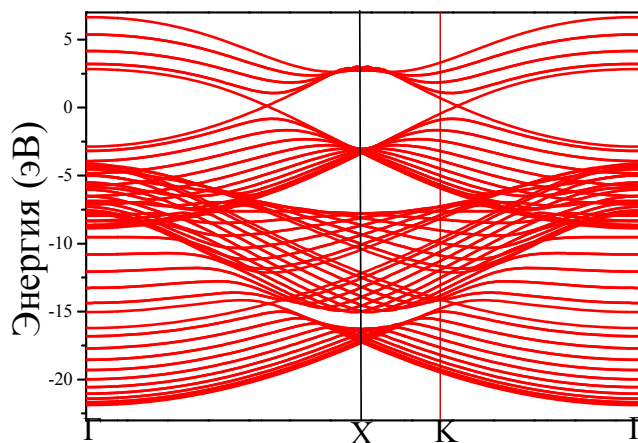


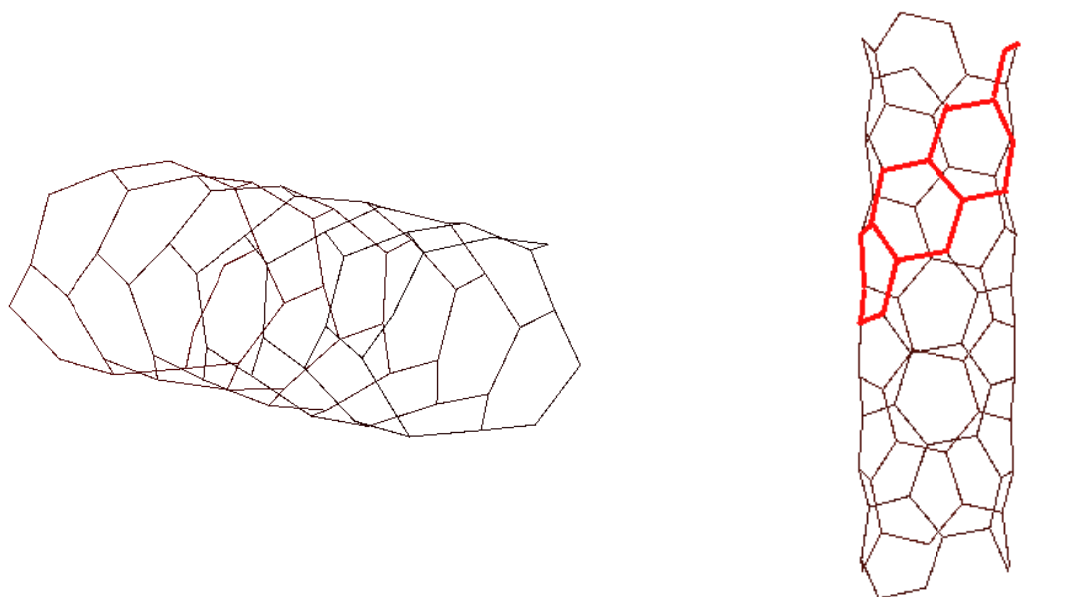
Рисунок 1 – Структура ОУНТ (11,11) типа «кресло»

Рисунок 2 – Электронная структура ОУНТ (11,11) типа «кресло»,  $E=0$  соответствует уровень Ферми

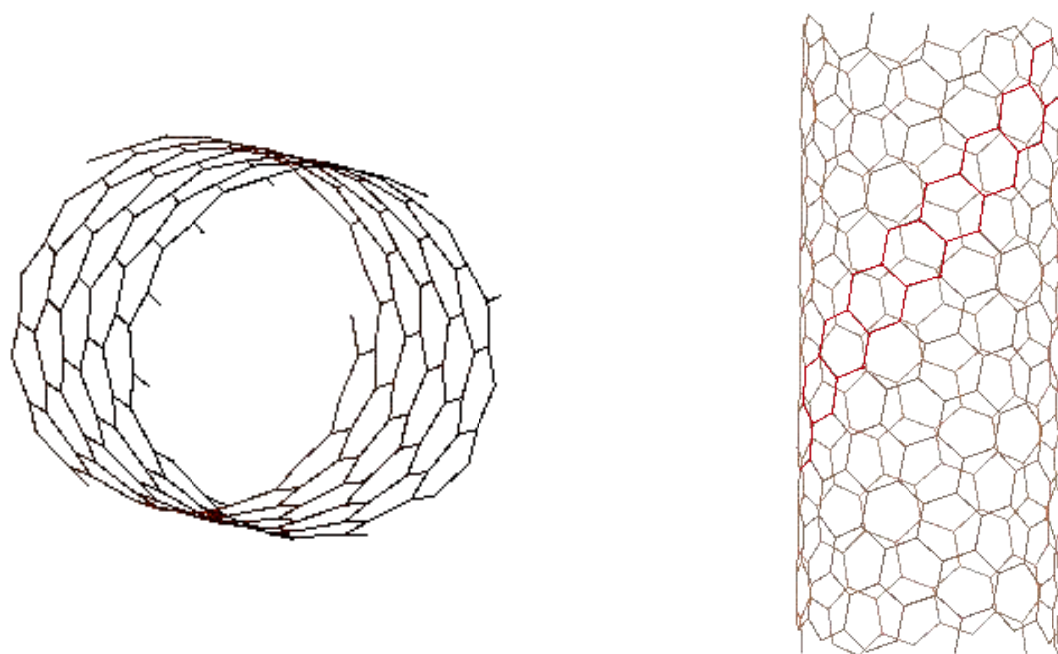
На рисунке 3 представлены структуры хиральных ОУНТ с коэффициентами хиральности (4,2) и (12,3). Известно, что если у ОУНТ разность коэффициентов хиральности  $n_1$  и  $n_2$  кратно трем:

$$n_1 - n_2 = 3q \quad (6),$$

где  $q = 1, 2, 3 \dots$ , то ОУНТ имеют металлическую проводимость, если нет - то полупроводниковую.



а – ОУНТ с хиральностью (4,2)



б – ОУНТ с хиральностью (12,3)

Рисунок 3 – Структура хиральных ОУНТ

Полученные электронные структуры хиральных ОУНТ показывают, что ОУНТ (4,2) имеет полупроводниковый тип проводимости с шириной запрещенной зоны порядка 1 эВ (рисунок 4). Тогда как, ОУНТ (12,3) имеет металлическую проводимость, в структуре которой отсутствует запрещенная зона (рисунок 5).



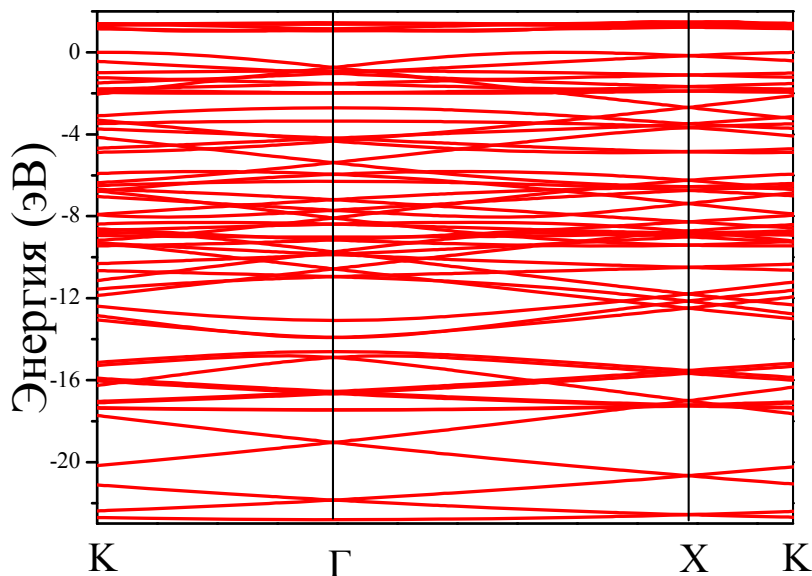


Рисунок 4 – Электронная структура хиральной ОУНТ (4,2),  $E=0$  соответствует уровень Ферми

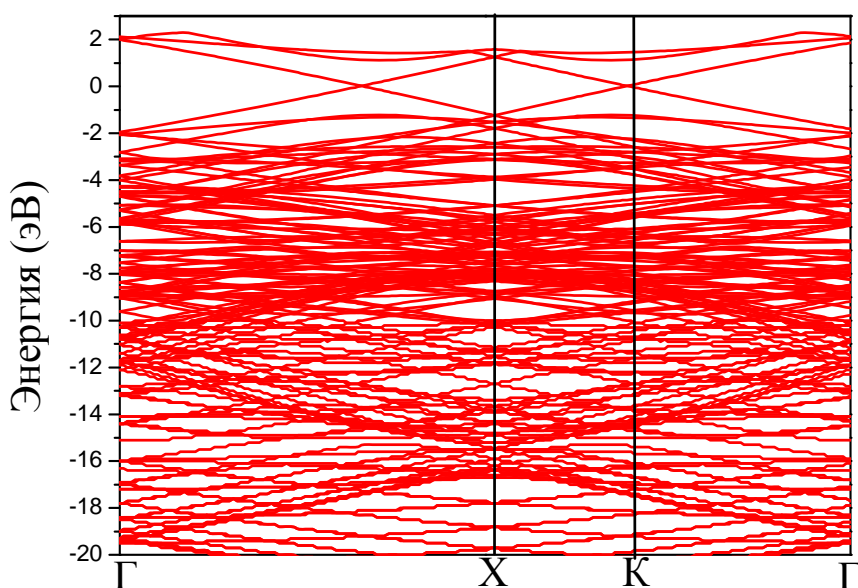
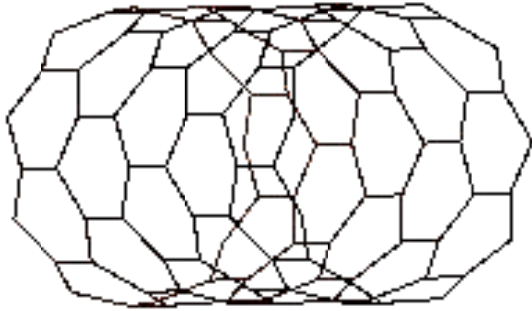
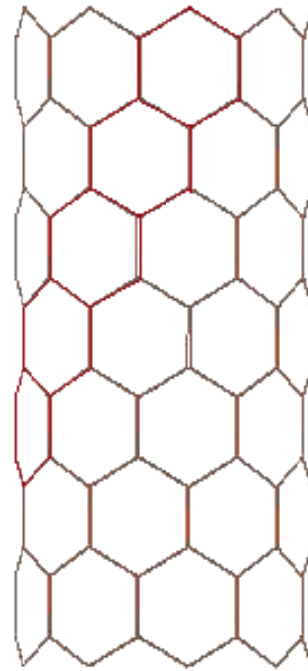


Рисунок 5 – Электронная структура хиральной ОУНТ (12,3),  $E=0$  соответствует уровень Ферми

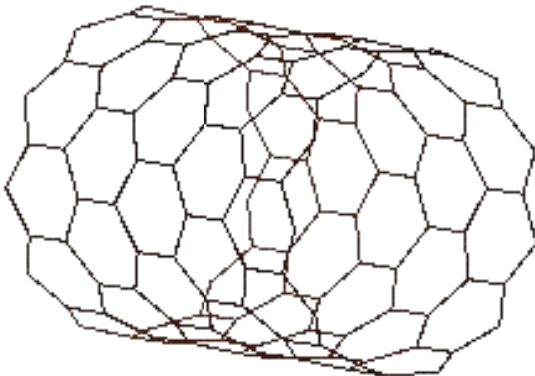
На рисунке 6 представлены структуры ОУНТ типа «зигзаг». Данные ОУНТ отличаются от других типов ОУНТ характерными зигзагообразными миторцами. Большая часть ОУНТ типа зигзагов имеют полупроводниковую проводимость, а остальная часть - металлическую. Электронные структуры ОУНТ типа «зигзаг» (9,0) и (11,0) представлены на рисунках 7 и 8, соответственно. Как видно из зонных структур, ОУНТ (9,0) имеет металлическую проводимость, а (11,0) полупроводниковую с шириной запрещенной зоны порядка 1,25 эВ.



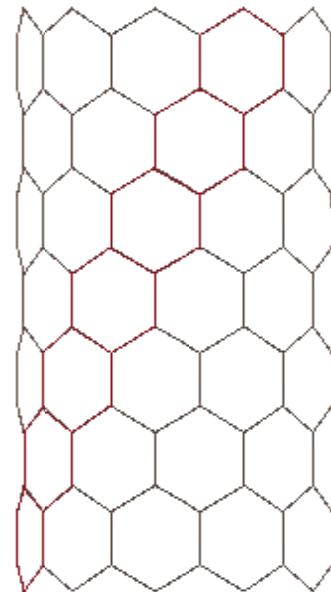
а – ОУНТ с хиральностью (9,0), вид с боку



б – ОУНТ с хиральностью (9,0) имеют форму зигзагов



в – ОУНТ с хиральностью (11,0), вид с боку



г – ОУНТ с хиральностью (11,0) имеют форму зигзагов

Рисунок 6 – Структуры ОУНТ типа «зигзаг»

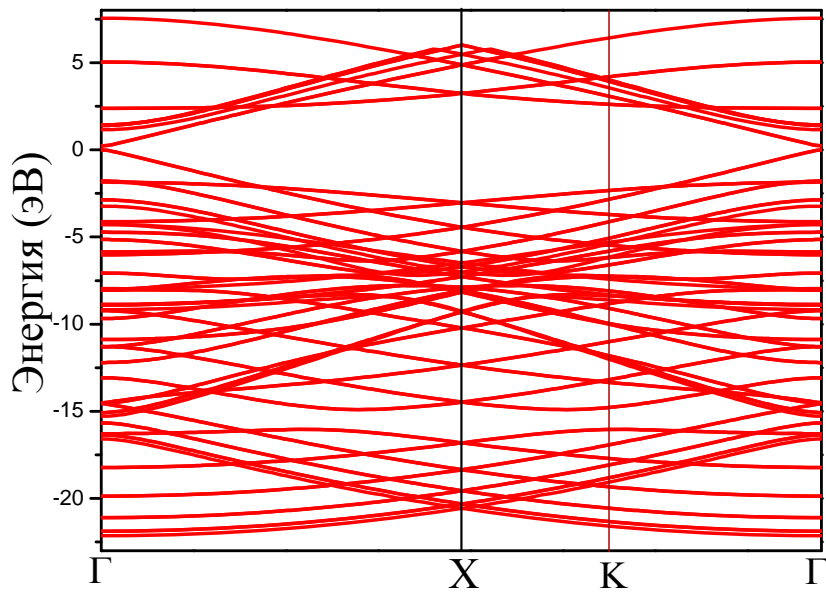


Рисунок 7 – Электронная структура ОУНТ типа «зигзаг» (9,0),  $E=0$  соответствует уровень Ферми

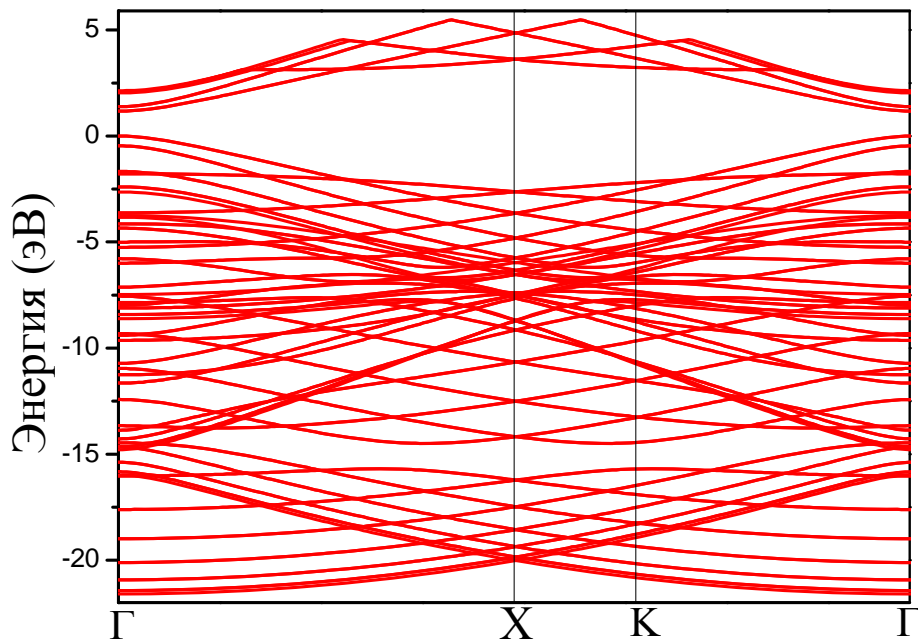


Рисунок 8 – Электронная структура ОУНТ типа «зигзаг» (11,0),  $E=0$  соответствует уровень Ферми

Таблица 1 – Структурные параметры ОУНТ

Нано- трубка	Диаметр, нм	Кол-во атомов в элемент. ячейке	Угол хиральности, градус	Объем элемент.ячейки, куб. ангстрем	Минимум полной энергии, Хартри	Ширина запрещенной зоны, эВ
Тип «кресло»						
(11,11)	1,4980	44	30	2,45310	-1676,29	0
Тип «хиральный»						
(4,2)	0,416	56	19,107	11,20799	-2132,54	1
(12,3)	1,0808	84	10,893	6,4864	-3200,09	0
Тип «зигзаг»						
(9,0)	0,7076	36	0	4,25258	-1371,33	0
(11,0)	0,8648	44	0	4,24337	-1676,17	1,25

Из расчетов минимума энергии, показанной в таблице 1, установлено, что наиболее стабильной структурой обладают хиральные одностенные углеродные нанотрубки, нежели типа «зигзаг» и «кресло». Также показано, что хотя идентичные по индексу хиральности нанотрубки типа «кресло» (11,11) и типа «зигзаг» (11,0) имеют наиболее близкие значения минимума энергии и одинаковое количество атомов в элементарной ячейке, они различаются по диаметру, объему элементарной ячейки и углу хиральности и, следовательно, типами проводимости.

Таким образом, на основе гибридного функционала *becke 3-parameter lee-yang-parr (B3LYP)* была изучена кристаллическая и электронная структура одностенных углеродных нанотрубок из первых принципов. Результаты расчетов хорошо согласуются с известными литературными данными и показывают, что проводимость ОУНТ зависит от хиральности. Структурные параметры ОУНТ и значения запрещенной зоны представлены в таблице 1.

### Заключение

В данной работе были изучены структурные и электронные свойства одностенных углеродных нанотрубок «из первых принципов» методом функционала электронной плотности и приближения Хартри-Фока. На основе данного метода были проведены квантово-химические расчеты минимума энергии и ширины запрещенной зоны одностенных углеродных нанотрубок в зависимости от угла хиральности. Показано, что одностенные нанотрубки имеют как металлическую, так и полупроводниковую проводимость. Из расчетов минимума энергии установлено, что наиболее стабильной структурой обладают хиральные одностенные углеродные нанотрубки, нежели типа «зигзаг» и «кресло». Показано, что хотя идентичные по индексу хиральности нанотрубки типа «кресло» (11,11) и типа «зигзаг» (11,0) имеют наиболее близкие значения минимума энергии и одинаковое количество атомов в элементарной ячейке, они различаются по диаметру, объему элементарной ячейки и углу хиральности и, следовательно, типами проводимости.

Данная работа выполнена в рамках проекта 0263/ПЦФ.

### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Xiao L., Chen Zh, Feng Ch., Liu L., Bai Z.-Q, Wang Y., Qian L., Zhang Y., Li Q., Jiang K., FanSh., Stretchable, Transparent Carbon Nanotube Thin Film Loudspeakers // Nano Lett. – 2008 – Vol. 8, №12 – P. 4539–4545.
- [2] Zheng Q., Jiang Q., Multiwalled Carbon Nanotubes as Gigahertz Oscillators // Phys. Rev. Lett. – 2002 – Vol.88 – 045503.
- [3] Chen J., Chen S., Zhao X., Kuznetsova L.V., Wong S.S., Ojima I. Functionalized single-walled carbon nanotubes as rationally designed vehicles for tumor-targeted drug delivery // J. Am. Chem. Soc. 2008. V. 49, no. 130. P. 16778–16785.
- [4] Devitt M.R. Tumor targeting with antibody-functionalized, radiolabeled carbon nanotubes // The J. of nuclear medicine. 2007. V. 48, no. 7. P. 1180–1189.
- [5] Kateb B., Yamamoto V., Alizadeh D., Zhang L., Manohara H.M., Bronikowski M.J., Badie B. Multi-walled carbon nanotube (MWCNT) synthesis, preparation, labeling, and functionalization // Immunotherapy of Cancer, Methods in Molecular Biology. 2010. No. 651. P. 307–317.
- [6] Ye Y., Ahn C.C., Witham C., Fultz B., Liu J., Rinzler A.G., Colbert D., Smith K.A., Smalley R.E., Hydrogen adsorption and cohesive energy of single-walled carbon nanotubes. // Applied Physics Letters 1999, 74, (16), 2307-2309.
- [7] Xu W.C., Takahashi K., Matsuo Y., Hattori Y., Kumagai M., Ishiyama S., Kaneko K., Iijima S., Investigation of hydrogen storage capacity of various carbon materials. // International Journal of Hydrogen Energy 2007, 32, (13), 2504-2512.

- [8] Panella B., Hirscher M., Roth S., Hydrogen adsorption in different carbon nanostructures. //Carbon –2005 – Vol.43, №10, –P. 2209-2214.
- [9] G. Bertoni, L. Calmels, Micron 37 (2006) 486–491.
- [10] R. Nizam, S. Mahdi, A. Rizvi, A. Azam, International Journal of Science and Technology 1 (2011) 153–162.
- [11] R.S. Ruoff, D. Qian, W.K. Liu, Comptes Rendus Physique 4 (2003) 993–1008.
- [12] B.I. Yakobson, P. Avouris, Topics in Applied Physics 80 (2001) 287–327.
- [13] J. Zhao, H. Park, J. Han, J.P. Lu, Physical Chemistry B 108 (2004) 4227–4230.
- [14] K. Gharbavi, H. Badehian, Structural and electronic properties of armchair (7, 7) carbon nanotubes using DFT, COMPUTATIONAL MATERIALS SCIENCE, – 2014 –Том: 82 Стр.: 159-164.
- [15] Duan, YN; Zhang, JM; Wei, XM; Fan, XX ; Xu, KW; Ji, V , Structural and electronic properties of copper nanowires inside zigzag carbon nanotubes, PHYSICA B-CONDENSED MATTER – 2015– Том: 447 Стр.: 77-82.
- [16] Ya-Nan, L; Jun-Zhe, L; Heng-Jiang, Z; Yu-Chao, T; Xiang, L; Jing, L; Ting, W , Structural derivative and electronic properties of zigzag carbon nanotubes, ACTA PHYSICA SINICA – 2017– Том: 66 Выпуск: 9.
- [17] Lee H., Cheong S.W., Kim B.G. Hybrid functional band gap calculation of SnO 6 containing perovskites and their derived structures // Journal of Solid State Chemistry. – 2015. – Vol. 228. – P. 214-220.
- [18] Kim B.G., Jo J.Y., Cheong S.W. Hybrid functional calculation of electronic and phonon structure of BaSnO<sub>3</sub> // Journal of Solid State Chemistry. – 2013. – Vol. 197. – P. 134-138.
- [19] Chang Y.H., Park C.H., Matsuishi K. First-principles study of the structural and the electronic properties of the lead-halide-based inorganic-organic perovskites (CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>)PbX<sub>3</sub> and CsPbX<sub>3</sub> (X=Cl, Br, I) // Journal of Korean Physical Society. – Vol. 44, №. 4. – P. 889-893.
- [20] Borriello I., Cantele G., Ninno D. Ab initio investigation of hybrid organic-inorganic perovskites based on tin halides // Physical Revie. B: Condensed Matter Materials Physics. – 2008. – Vol. 77. – P. 1-9.
- [21] Ahmed R., Aleem F., Hashemifar S.J., Akbarzadeh H. First principles study of structural and electronic properties of different phases of boron nitride // Physica B: Condensed Matter. – 2007. – Vol. 400, №. 1-2. – P. 297-306.

Д.Ғ. Батрышев<sup>1,3</sup>, Е. Ерланұлы<sup>1,3</sup>, Т.С. Рамазанов<sup>2</sup>, М.Т. Габдуллин<sup>3</sup>,

<sup>1</sup>Инженерлі бейіндегізертхана, әл-Фарабиатындағы ҚазҰУ;

<sup>2</sup>Эксперименттік және теориялық физика ғылыми-зерттеу институты, әл-Фараби атындағы ҚазҰУ;

<sup>3</sup>Ашық түрдегі ұлттық нанотехнологиялық зертхана, әл-Фарабиатындағы ҚазҰУ,  
Қазақстан, 050040 Алматы, әл-Фараби, 71

### БІР ҚАБЫРҒАЛЫ КӨМІРТЕКТІ НАНОТҮТІКШЕЛЕРДІҢ ҚҰРЫЛЫМДЫҚ ЖӘНЕ ЭЛЕКТРОНДЫҚ ҚАСИЕТТЕРІН БЕСКЕ 3-PARAMETER LEE-YANG-PARR (ВЗЛҮР) ГИБРИД ФУНКЦИОНАЛЫ НЕГІЗІНДЕ ЗЕРТТЕУ

**Аннотация:** Аталған жұмыс электрондық тығыздықтың функционалы және Хартри-Фок жуықталуы әдісімен бір қабырғалы көміртекті нанотүтікшелердің құрылымдық және электрондық қасиеттерін зерттеуге арналған. Аталған әдіс негізінде хираль бұрышына байланысты бір қабырғалы көміртекті нанотүтікшелердің минимум энергиясы және тыйым салынған аймақ ені квантты-химиялық есептеулері жүргізілді. Бір қабырғалы нанотүтікшелер металдық және жартылай өткізгіштік қасиетке ие екендігі көрсетілді. Минимум энергияны есептеу барысында «зигзаг» және «кресло» типіне қарағанда хиральды бір қабырғалы көміртекті нанотүтікшелер тұрақты құрылымға ие екендігі анықталды. «Кресло» (11,11) және «зигзаг» (11,0) типті нанотүтікшелердің хиральдық индексі, минимум энергиясының шамасы және элементар ұяшықтағы атомдар саны бірдей болғаны көрсетілсе де, олар диаметр, элементар ұяшықтың көлемі және хиральдылық бұрышымен өзгешеленеді, сәйкесінше өткізгіштік типі де өзгеше.

**Тірек сөздер:** көміртекті нанотүтікшелер, плазмохимиялық қондыру, плазма углеродные нанотрубки, құрылымдық қасиеттер, электрондық қасиеттер, электрондық тығыздықтың функционалы.

#### Сведения об авторах:

Батрышев Д.Г. - Ст. преподаватель, КазНУ им. аль-Фараби, Аль-Фараби 71а, физ-тех, 123 каб., [batryshev@physics.kz](mailto:batryshev@physics.kz);

Рамазанов Т.С. – Профессор, КазНУ им. аль-Фараби, Аль-Фараби 71а, физ-тех, 332 каб., [ramazan@physics.kz](mailto:ramazan@physics.kz);

Габдуллин М.Т. - Ст. Преподаватель, КазНУ им. аль-Фараби, Аль-Фараби 71а, физ-тех, 427 каб., [gabdullin@physics.kz](mailto:gabdullin@physics.kz);

Ерланұлы Е. – Инженер, КазНУ им. аль-Фараби, Аль-Фараби 71а, физ-тех, 120 каб., +77073234341 [verlanuly@physics.kz](mailto:verlanuly@physics.kz)

МАЗМУНЫ

<i>Кульжумиева А.А., Сартабанов Ж.А.</i> Сызықты біртекті $D_e$ -жүйелерді жордандық канондық түрге келтіру.....	5
<i>Сайдуллаева Н.С., Кабылбеков К.А., Аширбаев Х.А., Каликулова А.О., Пазылова Д.Т.</i> Matlab бағдарламалар пакетін қолданып «Сыртқы күш әсер еткенде мәжбүрлі тербелістерді есептеу және визуализациялау» компьютерлік зертханалық жұмысты орындауды ұйымдастыру.....	13
<i>Сайдуллаева Н.С., Тагаев Н.С., Пазылова Д.Т., Каликулова А.О.</i> Влияние однократной перегрузки на развитие усталостной трещины.....	22
<i>Жантаев Ж.Ш., Виляев А.В., Серикбаева Э.Б.</i> Солтүстік Тянь-Шаньнің сейсмикалық тәртіп ерекшелігін бағалауда геотермиялық үлгілеуді қолдану.....	26
<i>Гордиенко Г.И., Яковец А.Ф., Литвинов Ю.Г.</i> Ионосфералақы F-аймақтың биіктігін бағалау әдістерін салыстыру.....	35
<i>Яковец А.Ф., Гордиенко Г.И., Крюков С.В., Жумабаев Б.Т., Литвинов Ю.Г.</i> Электрондық концентрацияның ионосфераның F2-қабатының максималындағы күнделікті өзгеруі.....	44
<i>Яковец А.Ф., Гордиенко Г.И., Жумабаев Б.Т., Литвинов Ю.Г., Абдрахманов Н.</i> Максимум F2-қабатының түнгі көбеюлерінің жұқа құрылымы.....	50
<i>Васильев И.В., Жұмбаев Б.Т.</i> Жердің электрлік өрісінің қалыптасуына гравитациялық күшінің әсері.....	55
<i>Козин И.Д., Федулina И.Н.</i> Радиофизика есептерін шешудегі вакуум – орта.....	60
<i>Козин И.Д., Федулina И.Н.</i> Радиотолқынның қабылдағыш антеннаға әсері.....	66
<i>Жантаев Ж.Ш., Стихарный А.П., Виляев А.В.</i> Жердің қазіргі заманғы қозғалысының GPS бақылауындағы уақыттық қатарларының кедергісін сүзу алгоритмі.....	71
<i>Батрышев Д.Ф., Ерланұлы Е., Рамазанов Т.С., Габдуллин М.Т.</i> Бір қабырғалы көміртекті нанотүтікшелердің құрылымдық және электрондық қасиеттерін BECKE 3-PARAMETER LEE-YANG-PARR (B3LYP) гибрид функционалы негізінде зерттеу.....	75
<i>Серебрянский А. В., Усольцева Л. А., Комаров А. А., Рева И.В.</i> Атмосфералық экстинкцияның лездік мәндері және ауысуы коэффициенттері.....	84
<i>Бақтыбаев Қ., Бақтыбаев М.К., Наукенов Д.Д., Далелханкызы А.</i> Өзара әрекеттесуші бозондар моделінің микроскоптық негіздемесі және ядролық теориядағы жалпыланған квазиспиндік формализм.....	91
<i>Бапаев К.Б., Слэмжанова С.С.</i> Айырымдық-динамикалық жүйелердің орнықтылығы.....	101
<i>Иманбаева А.Б., Шалданбаев А.Ш., Копжасарова А.А.</i> Коэффициенттері тұрақты кәдімгі дифференциалдық теңдеулер системасының сингуляр әсерленген Коши есебін спектралдік әдіспен шешу.....	112
<i>Копжасарова А.А., Шалданбаев А.Ш., Иманбаева А.Б.</i> Ұқсастық әдісі бойынша, сингуляр әсерленген Кошидің есебін шешу.....	127
<i>Косов В.Н., Жакебаев Д.Б., Федоренко О.В.</i> Изотермиялық диффузия кезіндегі тік каналдардағы үшкомпонентті газдар қоспаларында пайда болатын конвективтік қозғалыстардың сандық талдауы.....	134
<i>Мырзақұл Ш.Р., Белисарова Ф.Б., Мырзақұл Т.Р., Мырзакулов К.Р.</i> Старобинский моделінің негізіндегі F-эссенция динамикасы .....	143
<i>Мамырбаев О.Ж., Мухсина Қ.Ж.</i> Мәтін үндесітілігін анықтауға арналған қолданыстағы жүйелерді талдау.....	149
<i>Омашова Г.Ш., Спабекова Р., Қабылбеков К.А., Саидахметов П.А., Абдрахманова Х.К., Аширбаев Х.А.</i> Физикалық құбылыстарды компьютерлік моделдеуде MATLAB жүйесін қолдану.....	156

## СОДЕРЖАНИЕ

Кульжумиева А.А., Сартабанов Ж.А. Приведение линейных однородных $D_e$ -систем к жордановому каноническому виду.....	5
Сайдуллаева Н.С., Кабылбеков К.А., Аширбаев Х.А., Каликулова А.О., Пазылова Д.Т. Организация выполнения компьютерной лабораторной работы «Расчет и визуализация вынужденных колебаний при наличии внешней силы» с применением пакета программ Matlab.....	13
Сайдуллаева Н.С., Тагаев Н.С., Пазылова Д.Т., Каликулова А.О. Влияние однократной перегрузки на развитие усталостной трещины.....	22
Жантаев Ж.Ш., Виляев А.В., Серикбаева Э.Б. Применение геотермического моделирования в оценке особенностей сейсмического режима Северного Тянь-Шаня.....	26
Гордиенко Г.И., Яковец А.Ф., Литвинов Ю.Г. Сравнение методов оценки высоты максимума F-области ионосферы.....	35
Яковец А.Ф., Гордиенко Г.И., Крюков С.В., Жумабаев Б.Т., Литвинов Ю.Г. День ото дня вариации электронной концентрации в максимуме F2-слоя ионосферы.....	44
Яковец А.Ф., Гордиенко Г.И., Жумабаев Б.Т., Литвинов Ю.Г., Абдрахманов Н. Тонкая структура ночных увеличений в максимуме F2-слоя.....	50
Васильев И.В., Жумабаев Б.Т. Влияние гравитации на формирование электрического поля земли.....	55
Козин И.Д., Федулина И.Н. Вакуум – среда в решении задач радиофизики.....	60
Козин И.Д., Федулина И.Н. Воздействие радиоволны на приёмную антенну.....	66
Жантаев Ж.Ш., Стихарный А.П., Виляев А.В. Алгоритм фильтрации помех временных рядов GPS мониторинга современных движений земной поверхности .....	71
Батрышев Д.Г., Ерланулы Е., Рамазанов Т.С., Габдуллин М.Т. Исследование структурных и электронных свойств одностенных углеродных нанотрубок на основе гибридного функционала bescke 3-PARAMETER LEE-YANG-PARR (B3LYP).....	75
Серебрянский А. В., Усольцева Л. А., Комаров А. А., Рева И. В. Коэффициенты перехода и мгновенные значения атмосферной экстинкции.....	84
Бактыбаев К., Бактыбаев М.К., Наукенов Д.Д., Далелханкызы А. Микроскопическое обоснование модели взаимодействующих бозонов и обобщенный квазиспиновый формализм в теории ядра .....	91
Бапаев К.Б., Сламжанова С.С. Об устойчивости разностно – динамических систем.....	101
Иманбаева А.Б., Копжасарова А.А., Шалданбаев А.Ш. Асимптотическое разложение решения сингулярно возмущенной задачи Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами.....	112
Копжасарова А.А., Шалданбаев А.Ш., Иманбаева А.Б. Решение сингулярно возмущенной задачи Коши методом подобия.....	127
Косов В.Н., Жакебаев Д.Б., Федоренко О.В. Численный анализ конвективных движений, возникающих при изотермической диффузии в вертикальных каналах в трехкомпонентных газовых смесях.....	134
Мырзакул Ш.Р., Белисарова Ф.Б., Мырзакул Т.Р., Мырзакулов К.Р. Динамика F-эссенции в рамках модели старобинского .....	143
Мамырбаев О.Ж., Мухсина Қ.Ж. Анализ существующих систем для определения тональности текста.....	149
Омашова Г.Ш., Спабекова Р., Кабылбеков К.А., Саидахметов П.А., Абдрахманова Х.К., Аширбаев Х.А. Использование системы MATLAB при компьютерном моделировании физических процессов.....	156

CONTENTS

<i>Kulzhumiyeva A.A., Sartabanov Zh.A.</i> Reduction of linear homogeneous $D_e$ -systems to the jordan canonical form.....	5
<i>Saidullayeva N.S., Kabyzbekov K.A., Ashirbaev Kh.A., Kalikulova A.O., Pazylova D.T.</i> Organization of computer lab work "Calculation and visualization of forced oscillations in the presence of an external force" with the use of the software package Matlab.....	13
<i>Saidullayeva N.S., Tagaev N.S., Pazylova D.T., Kalikulova A.O.</i> Effect of single overload on the development of a fatigue crack.....	22
<i>Zhantaev Zh.Sh., Vilyayev A.V., Serikbaeva E.B.</i> The application of geothermal modeling in the assessment of the features of the seismic regime of the Northern Tien Shan.....	26
<i>Gordienko G.I., Yakovets A.F., Litvinov Yu.G.</i> Comparison of the methods for estimating the hight of the maximum of th $F$ region of the ionosphere.....	35
<i>Yakovets A.F., Gordienko G.I., Kryukov S.V., Zhumabayev B.T., Litvinov Yu.G.</i> Day-to-day variability of electron concentration n the ionospheric $F2$ layer maximum.....	44
<i>Yakovets A.F., Gordienko G.I., Zhumabayev B.T., Litvinov Yu.G., Abdrakhmanov N.</i> Fine structure of nighttime enhancements of the electron concentration in the $F2$ layer maximum .....	50
<i>Vassilyev I.V., Zhumabayev B.T.</i> Influence of gravitation on formation of the electric field of the earth.....	55
<i>Kozin I.D., Fedulina I.N.</i> Vacuum - environment in the decision of radio physics problems.....	60
<i>Kozin I.D., Fedulina I.N.</i> Radio-wave action on the receiving antenna.....	66
<i>Zhantaev Zh.Sh., Stikharny A.P., Vilyayev A.V.</i> The algorithm for filtering the errors of time series GPS monitoring ofafactual movements of the earth's surface.....	71
<i>Batryshev D.G., Yerlanuly Ye., Ramazanov T.S., Gabdullin M.T.</i> Investigation of structural and electronic properties of single-walled carbon nanotubes on the basis of a hybrid functional becke 3-parameter LEE-YANG-PARR (B3LYP).....	75
<i>Serebryanskiy A., Usoltseva L., Komarov A., Reva I.</i> The trasformation coefficients and instantaneous values of atmospheric extinction.....	84
<i>Baktybaev K., Baktybaev M.K., Naukenov D.D., Dalelkhankyzy A.</i> Microscopic justification of the model of interacting bosons and a generalizedquasispin formalism in the theory of the nuclei.....	91
<i>Bapayev K.B., Slamzhanova S.S.</i> On stability of difference-dynamical systems .....	101
<i>Imanbayeva A.B., Shaldanbayev A.Sh., Kopzhasarova A.A.</i> Asymptotic decomposition the decision is singular the indignant task of Cauchy for the system of the ordinary differential equations with constant coefficients.....	112
<i>Kopzhasarova A.A., Shaldanbayev A.Sh., Imanbayeva A.B.</i> The decision is singular the indignant task of Cauchy by a similarity method.....	127
<i>Kossov V.N., Zhakebaev D.B., Fedorenko O.V.</i> Numerical analysis of convective motions occurring under isothermal Diffusion in the vertical channels in ternary gaseous mixtures.....	134
<i>Myrzakul S.R., Belisarova F.B., Myrzakul T.R., Myrzakulov K.R.</i> Dynamics of F-essence in frame of the starobinsky model.....	143
<i>Mamyrbayev O.Zh., Muhsina K.Zh.</i> Analysis of existing systems for determination of tonnity of text.....	149
<i>Omashova G. Sh., Spabekova R., Kabyzbekov K. A., Saidahmetov P. A., Abdrakhmanova H. K., Ashirbaev H. A.</i> The use of the system MATLAB in the compyter simulation of physical processes.....	156



---

**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](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.nauka-nanrk.kz)

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

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

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

Подписано в печать 25.09.2017.  
Формат 60x88<sup>1</sup>/<sub>8</sub>. Бумага офсетная. Печать – ризограф.  
11 п.л. Тираж 300. Заказ 5.

---

*Национальная академия наук РК*  
*050010, Алматы, ул. Шевченко, 28, т. 272-13-18, 272-13-19*