

АНОТОВАНИЙ ЗВІТ

за завершеним фундаментальним науковим дослідженням, виконання якого здійснювалось у 2014–2016 роках

Назва: Визначення просторової будови та електронних властивостей нанорозмірних твердотільних функціональних структур

Керівник роботи: Балабай Руслана Михайлівна, доктор фіз.-мат. наук, доцент, професор кафедри фізики та методики її навчання

Номер державної реєстрації: 0114U003454

Номер облікової картки заключного звіту: 0217U003120

Повна назва організації-виконавця: Державний вищий навчальний заклад «Криворізький національний університет»

Назва пріоритетного тематичного напрямку організації-виконавця: Фундаментальні наукові дослідження з найбільш важливих проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу для забезпечення конкурентоспроможності України у світі та сталого розвитку суспільства і держави

Строки виконання: початок - 01.02.2014 р., закінчення - 31.12.2016 р.

Обсяг коштів, виділених на виконання НДР, за весь період (згідно із запитом / фактичний) 691,2 / 230, 228 тис. гривень.

1. КОРОТКИЙ ЗМІСТ ЗАПИТУ (до 40 рядків тексту):

1.1. Проблема, на вирішення якої було спрямовано дослідження, обґрунтування щодо актуальності.

Запит стосувався дослідження шляхом комп'ютерного експерименту важливих для технологій наноелектроніки просторової будови та електронних властивостей нанорозмірних мета- та гібридних матеріалів (нуль-, одно-, двовимірних та комбінованих наногетеросистем, гібридних матеріалів тощо). У дослідженні були застосовані теоретичні методи із перших принципів – підходи, що потребують тільки інформації про хімічний склад об'єкта для описання властивостей, котрі спостерігаються в експерименті. Був використаний авторський комплекс комп'ютерних програм для отримання результатів та встановлення механізмів, що дозволив інтерпретувати відомі ключові експериментальні дані, передбачити нові типи наноструктур та їх властивості, виявити засоби керування цими властивостями.

1.2. Об'єкт і предмет дослідження.

Об'єкт дослідження – нанорозмірні атомні системи.

Предмет дослідження – атомна і електронна будова нанорозмірних систем: тонкоплівкових гетероструктур, поверхонь з адсорбованими шарами, нанокластерів в об'ємі і на поверхні напівпровідників та діелектриків, нанокompatитів, нанокаталізаторів, трибологічних контактів, каркасних вуглецевих структур.

1.3. Мета і основні завдання дослідження.

Основною метою дослідження є визначення особливостей електронної будови нанорозмірних об'єктів різних розмірностей та різного хімічного складу під впливом механічних напруг, хімічно осаджених молекул та інших впливів методами із перших принципів, використовуючи авторський комплекс програм для ЕОМ, що реалізує молекулярну динаміку за схемою Кар-Парріселло з квантово-механічним розрахунком сил з використанням методів функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу; систематизація отриманих результатів і встановлення механізмів, що дозволять керувати

цими особливостями; розвиток наукових знань та представлень у фізиці, технології та діагностиці наноструктур.

Основні завдання дослідження полягали:

- у вдосконаленні авторського програмного комплексу для проведення обчислювальних експериментів і розрахунків із застосуванням сучасних методів квантової фізики твердого тіла для нанооб'єктів;
- у створенні оригінальних адекватних моделей механічно напружених епітаксціальних напівпровідникових гетероструктур, квантових точок, нанокластерів, поверхонь з адсорбованими шарами, функціоналізованих каркасних вуглецевих структур, трибологічних контактів;
- у проведенні обчислювальних експериментів на основі розробленого програмного комплексу для вивчення впливів структурних трансформацій наноструктур на їх електронні властивості;
- в аналізі результатів обчислення, формулюванні висновків та рекомендацій, що розвинути фізику, технології виготовлення та діагностику наноструктур.

1.4. -

2. ОПИС ПРОЦЕСУ НАУКОВОГО ДОСЛІДЖЕННЯ (до 50 рядків тексту):

2.1. Описати підходи щодо проведення досліджень, визначити, у чому полягає їх новизна.

Були застосовані методи теорії функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу із перших принципів із використанням квантової молекулярної динаміки. Був розроблений алгоритм обчислення повної енергії твердотільних систем, що забезпечує її мінімізацію. Алгоритм був реалізованим у формі ефективних та зручних у використанні авторських комп'ютерних програм. Проблемно-орієнтований програмний пакет, що був отриманий для проведення комп'ютерних обчислювальних експериментів, має розвинені функціональні можливості відтворення й редагування нанооб'єктів, обчислення електронно-структурних характеристик, їх аналізу та візуалізації.

2.2. Розкрити основні ідеї дослідження, яким чином вони втілювались.

Основний стан електронної та атомної структур нанооб'єктів та їх енергії були встановлені шляхом самоузгодженого розв'язування рівнянь Кона-Шема. Одночастинкова хвильова функція розкладалася в ряд за плоскими хвилями, довжина ряду вибиралася такою, щоб на один атом базису приходилося не менше 20 плоских хвиль. Матриця Кона-Шема складалася із елементів на операторах кінетичної енергії та іонного псевдопотенціалу, що екранований діелектричною функцією в наближенні Томаса-Фермі, на нульовій ітерації. На наступних ітераціях іонний псевдопотенціал екранувався кулонівським та обмінно-кореляційним потенціалами. Діагоналізація матриці Кона-Шема після приведення її до дійсної тридіагональної форми далі відбувалася, використовуючи QL/QR алгоритм. Результат самоузгоджувався за певну кількість ітерацій.

У розрахунках використовувався прийом побудови штучної суперрешітки. Атомний базис одиничної комірки суперрешітки відбивав властивості систем, що досліджувалися. Розроблені атомні базиси для всіх об'єктів обчислення мали симетрію, що містила в своїй точковій групі операції тотожного та інверсного перетворення.

Результати розрахунків отримані у вигляді карт просторових розподілів густини валентних електронів та їх перетинів, одночастинкових електронних спектрів та повної енергії наносистем для Г-точки зони Бриллюена тривимірної суперрешітки. Г-точка для суперрешіткових розрахунків представляє всі вектори зони Бриллюена.

2.3. Навести основні гіпотези, які лягли в основу дослідження, як вони підтверджувались або спростовувались, перетворювались на теорію чи концепцію.

Числові масиви даних, отримані в результаті розрахунків, забезпечили проведення порівняльного аналізу поведінки електронно-структурних характеристик нанооб'єктів при переході від однієї їхньої ізомерної форми до іншої. Аналіз базувався на системі кореляцій. При цьому під час пошуку кореляцій використовувалася єдина теоретична

конструкція, що служила основою і забезпечувала напрямок такого пошуку та була реалізована у вигляді авторських комп'ютерних програм.

Прийом штучної суперрешітки, що використовувався, дозволив охопити морфологічне різноманіття наноструктур, включаючи наночастинки, нанотрубки, нанокластери, нанострічки, наноплівки.

2.4. Представити нові або оновлені методи та засоби, методику та методологію досліджень, що створені авторами у ході виконання роботи; обґрунтувати, чим вони відрізняються від наявних.

Оригінальність та достовірність наукових результатів дослідження були забезпечені коректністю постановки задач, використанням оригінальних адекватних моделей матеріалів, застосуванням новітніх, апробованих для розрахунку електронної структури об'ємних і низько-розмірних структур, підходів фізики твердого тіла та комп'ютерної підтримки, взаємною узгодженістю й несуперечністю отриманих результатів, якісною й кількісною згодою з результатами інших авторів та з експериментом.

Результати аналогічного змісту та рівня достовірності могли бути отримані, наприклад, такими комерційними продуктами як: комп'ютерна програма CPMD – власність International Business Machines Corporation U.S. and the Max-Planck-Institut für Festkörperforschung, Stuttgart, Germany (<http://www.cpmc.org/>); комп'ютерна програма ABINIT – власність міжнародної корпорації (<http://www.abinit.org/>); комп'ютерна програма SIESTA Version1.3, або інші.

2.5. Описати особливості структури та складових проведення дослідження.

Функціональність авторського пакету комп'ютерних програм дозволяє редагувати та візуалізувати нанооб'єкти, виконувати розрахунки їх електронно-структурних, енергетичних та механічних характеристик.

3. ОДЕРЖАНІ НАУКОВІ РЕЗУЛЬТАТИ (до 100 рядків тексту)

3.1. Результати етапів (відповідно до технічного завдання) відобразити у таблиці:

Таблиця 1

Номер етапу, строки	Назва етапу згідно з технічним завданням	Заплановані результати	Отримані результати
1. з 01.02.2014 по 31.12.2014	Дослідження трибологічних контактів алмазоподібних плівок з різною долею алмазних та графітоподібних зв'язків і різною обробкою поверхонь. Дослідження біметалічних нанокаталізаторів.	Атомні моделі трибологічних контактів алмазоподібних плівок для обчислень на проблемно-орієнтованому програмному пакеті. Потенціальні рельєфи зсуву поверхонь у трибологічному контакті, коефіцієнти тертя. Енергетичні спектри біметалічних нанокаталізаторів.	Розроблені атомні моделі трибологічних контактів алмазоподібних плівок, біметалічних наноплівкових каталізаторів для обчислень на авторському програмному пакеті. Отримані потенціальні рельєфи зсуву поверхонь алмазоподібних плівок з різною долею алмазних та графітоподібних зв'язків і різною обробкою поверхонь у

			трибологічному контакті, коефіцієнти тертя. Отримані енергетичні спектри біметалічних плівкових шаруватих каталізаторів $Pt_xNi_{(1-x)}$ нанокаталізаторів різної морфології.
2. з 01.01.2015 по 31.12.2015	Обчислення потенціальних рельєфів модифікації наноб'єктів під впливом процесів адсорбції, механічного тиску, внесення дефектів.	Атомні моделі міграції молекул води, метанолу уздовж поверхонь графену, всередині вуглецевих нанотрубок з чистими стінками та покритими зсередини атомами золота; нанокompозитів із алмазу та кубічного нітриду. Атомні моделі металічних, оксидних, силіцидних малих кластерів із атомів Cu, Ni, Co для обчислень на авторському програмному пакеті. Енергетичні рельєфи міграції молекул води або метанолу уздовж поверхонь графену, всередині вуглецевої нанотрубки. Енергетичні спектри модельних кластерів.	Розроблені атомні моделі міграції молекул води, метанолу уздовж поверхонь графену, всередині вуглецевих нанотрубок з чистими стінками та покритими зсередини атомами золота. Розроблені атомні моделі металічних, оксидних, силіцидних малих кластерів із атомів Cu, Ni, Co; нанокompозитів із алмазу та кубічного нітриду для обчислень на авторському програмному пакеті. Отримані енергетичні рельєфи міграції молекул води або метанолу уздовж поверхонь графену, всередині вуглецевої нанотрубки. Отримані повні та парціальні розподіли густини валентних електронів, енергетичні спектри металічних,

			оксидних, силіцидних малих кластерів. Оцінена механічна міцність нанокompозитів.
3. з 01.01.2016 по 31.12.2016	Дослідження фотонних кристалів у вигляді пористої тривимірної структури кристалічного напівпровідника та на основі графенів.	Атомні моделі фотонних кристалів для обчислень на проблемно-орієнтованому програмному пакеті. Карти розподілу електронної густини, електронний спектр, повна енергія для розроблених атомних моделей.	Розроблені атомні моделі фотонних кристалів, що являли собою масиви або пористих волокон GaAs, або графенових площин, перемежених шарами SiO ₂ ; Отримані розподіли густини валентних електронів, кулонівського потенціалу, електронні енергетичні спектри та діелектрична функція розроблених моделей фотонних кристалів.

3.2. Визначити, чи одержане нове знання та нове розуміння предмету дослідження, і сформулювати, у чому саме вони полягають. Розкрити зміст одержаного знання у вигляді детального представлення нових положень, суджень. Докладно розкрити форми одержаних результатів – навести описи теорій, концепцій, закономірностей, моделей, властивостей, механізмів які створено, змінено та/або доповнено у роботі.

Методами функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу визначені мікроскопічні механізми: тертя чистих та покритих алмазоподібних плівок; змочування графену, вуглецевих нанотрубок водою (метанолом); прискорення процесу оксидації метанолу в присутності плівкових каталізаторів Pt_xNi_(1-x); підвищеної каталітичної активності оксидних, силіцидних кластерів Cu, Ni, Co; керування електронними властивостями фотонних кристалів; сепарації суміші наночастинок гематиту і α-кварцу.

Визначено, що сили тертя тонких вуглецевих плівок з сумішшю алмазоподібних та графітоподібних зв'язків визначаються характером міжатомних взаємодій: близькодійючих – донорно-акцепторних та далекодійючих – кулонівських.

Встановлено, що міграція молекул води (метанолу) уздовж поверхонь графену, вуглецевих нанотрубок відбувається з енергетичним рельєфом, котрому притаманні бар'єри. Зависання молекул над графеновою площиною локально змінює її провідність. Встановлено, що масоперенос води через нанотрубки стимулюється додатковими рушійними силами, пов'язаними з кривиною її поверхні.

Виявлено, що у процесі окислення метанолу з використанням плівкових шаруватих механічно напружених каталізаторів змінного складу на основі Pt та Ni, найбільший вплив на їх активність мають механічні напруження в них та наявність дисоційованого кисню.

Визначена можливість керувати електронними станами кластерів перехідних металів шляхом зміни їх просторової організації та додавання електронегативних атомів, що є принциповим для їх каталітичної активності.

Продемонстровано, що контраст діелектричної проникності фотонного кристала можна міняти не тільки шляхом заповнення пустот у його каркасі, але й варіюванням діелектричної проникності самого каркаса.

Виявлено, що найкращі показники твердості виявляють алмазні наноккомпозити, вкриті нітрогеном. Найбільшу твердість проявляють матеріали, котрі у своїй формі мають вершинні кути. Вказані механізми, що визначають твердість матеріалів з тетраедричними хімічними зв'язками.

Визначена різниця енергій наночастинок гематиту і кварцу, що не змінюється у воді.

3.3. Визначити, які із результатів і як само були науково обґрунтовані та доведені, як вони пов'язані із закономірностями організації та розвитку природи, суспільства людини, їх взаємозв'язків. Чи є одержані результати достатньо надійними для різних контекстів застосування та використання.

Отримані результати забезпечують фундаментальне уявлення про механізми тертя, змочування, каталітичні реакції, механічну міцність, флотацію на атомарному рівні.

Одержаними результатами слід керуватися: при створенні багатокомпонентних каталітичних систем на основі платини із включенням інших металів; при виборі технологічних режимів виготовлення тонких гетероструктур $Pt_xNi_{(1-x)}$, з метою отримання потрібних каталітичних властивостей; для поліпшення трибологічних характеристик алмазоподібних покриттів; при створенні провідних гідро- та спиртофобних покриттів на основі графенів; створенні ефективних нанокаталізаторів на основі перехідних металів шляхом керування їх окремими електронними рівнями для встановлення кінцевої швидкості реакцій; створенні нанорозмірних трубчатих матеріалів на основі вуглецю з додатковим покриттям для контрольованого переносу маси; керованому конструюванні фотонних кристалів – штучних матеріалів, здатних керувати світлом, за рахунок контрасту діелектричної проникності фотонного кристала, котрий можна міняти як шляхом заповнення пустот у його каркасі якою-небудь речовиною чи вакуумом, так і варіюванням діелектричної проникності самого каркаса, варіюванням відстані між волокнами фотонного кристалу; створенні наноккомпозитів із алмазу та кубічного нітриду бору для отримання покриттів необхідної механічної міцності; розділені суміші мінералів гематиту і α -кварцу, яка сепарується у воді, що може бути досягнута шляхом подрібнення її до наночастинок.

3.4. Довести наукову новизну результатів на основі їх змістовного порівняння з існуючими аналогами у світовій науці, посиляючись на конкретні публікації. Список цих публікацій навести у Додатку 1. Довести переваги отриманих наукових результатів над аналогами, розмежуватись із суміжними науковими напрацюваннями світової спільноти вчених.

Процеси тертя, зношування та змащування композитних матеріалів, котрі нині замінюють захисні металеві покриття, значно відрізняються від процесів, притаманних металам [1,2]. Алмазоподібний вуглець привернув увагу як напівпровідниковий мастильний матеріал. Вміст у ньому атомів з алмазними та графітоподібними зв'язками, наявність поверхневих атомів – приводить до появи унікальних характеристик. Фрикційні властивості поверхні алмазу (111) були вивчені АСМ [2]. Присутність або відсутність водню на поверхні відстежувалася дифракцією повільних електронів. Видалення водню з поверхні призводило до збільшення коефіцієнта тертя на два порядки. В обчислювальних експериментах авторів НДР для пояснення експериментів [1,2] досліджувалися вплив шорсткості поверхонь алмазоподібного вуглецю, наявність обірваних зв'язків поверхневих атомів, тиску на поверхні, що ковзали, на величину адгезії між ними.

Незважаючи на інтенсивне дослідження графену, існує мало повідомлень про його взаємодію з водою (метанолом), котрі важливі для використання графену в захисних покриттях [3, 4]. Знання про змочування графену водою та метанолом, отримання яких були запровадженні авторами НДР, зумовить його різноманітні застосування. Зокрема, гідрофобні та супергідрофобні поверхні мають низьку поверхневу енергію і є, як правило, електроізоляційні [5].

В експериментах роботи [6] було продемонстровано ефект осушування тонкими плівками Au, осаджених на різні, як вважається, погано змочувані підкладки: графені, SiO₂. Особливості переміщення молекул води по скривленій поверхні графену вивчалися дослідниками [7,8] методами молекулярної динаміки. Вони виявили мікроскопічний механізм рушійної сили для динамічних явищ, що відбуваються на вигнутих поверхнях. Метою даної НДР є оцінка на атомарному рівні поведінки потоку рідин (води та метанолу) у нанорозмірних обмежених просторах з циліндричною геометрією, зокрема, всередині вуглецевої нанотрубки з чистими стінками і покритими атомами Au.

Перехідні елементи (ПЕ) незалежно від того, чи знаходяться вони у вигляді гомогенних комплексів, іонів у сполуках або у вигляді металів, своїми хемосорбційними та каталітичними властивостями перевищують неперехідні елементи [9], що обумовлюється характерною симетрією та енергетикою *d*-орбіталей. Енергетична організація *d*-орбіталей комплексів з ПЕ визначає шляхи перетворення адсорбованих на них молекул. Перехід від атомно-молекулярної до „рівневої” кінетики, тобто до вивчення ролі окремих електронних рівнів у кінцевій швидкості реакції – одна із задач сучасного гетерогенного каталізу. Починаючи з робіт Я. Ван Флека, для пояснення електронних властивостей сполук ПЕ використовується теорія поля лігандів, базуючись на методі молекулярних орбіталей [9]. У даній НДР організація рівнів енергії атомних комплексів різної симетрії з ПЕ, кисню та кремнію оцінювалося методами із перших принципів.

Флотаційні технології – це нанотехнології фізичних і хімічних процесів, що відбуваються на межі розділу рідких, твердих і газоподібних фаз на відстанях порядку десятків ангстрем [10]. Найбільш повне трактування цих процесів вимагає аналізу повної енергії цих систем і розподілу електронної густини на межі. Подивитися на межу розділу тверде тіло-рідина-газ в атомному масштабі можливо тільки за допомогою квантово-хімічних розрахунків із перших принципів. Ми аналізували процес флотації залізної руди басейну Кривий Ріг – суміш гематиту (α -Fe₂O₃) і α -кварцу (SiO₂), котру занурюють у воду з додатковими органічними реагентами, та інтерпретували експериментальні дані [10].

У виробництві ріжучих інструментів попитом користується алмаз як надтвердий матеріал, але він має недолік – окислення при нагріванні. У зв'язку із цим тривають пошуки [11] композиції алмазу із іншими структурами, що зменшать хімічну активність, але збережуть твердість кристалу. Робота [12] описує вирощування якісних чистих плівок cBN на алмазних підкладках, але потребує вивчення теоретичними підходами.

Традиційно, аналіз дисперсійних і відбивних властивостей фотонних кристалів робиться чисельними методами проходження електромагнітних хвиль у фотонних кристалах: методом Пендри [13, методом Блоха-Флоке [14]. Ми ж досліджували – методами із перших принципів вплив геометрії укладання формуючих елементів фотонного кристалу на його електронні властивості.

4. ПРАКТИЧНА ЦІННІСТЬ РЕЗУЛЬТАТІВ (до 50 рядків)

4.1. Обґрунтувати цінність результатів для світової та вітчизняної науки та для продовження фундаментальних та/або прикладних досліджень.

Результати, що були отримані за допомогою авторського комплексу комп'ютерних програм, презентація якого знаходиться за посиланням [<https://sites.google.com/a/kdpu.edu.ua/calculationphysics/>], пройшли апробацію на міжнародних та вітчизняних конференціях, опубліковані в міжнародних та вітчизняних виданнях, носять достовірний характер. Суть виконаного дослідження полягає у

теоретичному обчисленні просторових та енергетичних характеристик нанооб'єктів різних розмірностей та різного хімічного складу у напівпровідниках та інших матеріалів за допомогою комплексу комп'ютерних програм, що реалізують молекулярну динаміку за схемою Кар-Паррініелло з квантово-механічним розрахунком сил з використанням методів функціоналу електронної густини і псевдопотенціалу із перших принципів, котрі є власністю авторів проекту, відкриті для модернізації та не являються комерційними. Результати, що отримуються з використанням вище названих сучасних обчислювальних методик квантової фізики багаточастинкових систем, привірюються до результатів, що отримуються при застосуванні експериментальних методик.

Проблеми проведення експериментальних досліджень об'єктів наномасштабів очевидні, і вони приводять до ситуацій, коли дані, отримані з використанням різних методик, можуть різнитися між собою більше ніж на порядок. Успіхи в розумінні природи явищ, які відбуваються на нанорівнях, слід пов'язувати з комп'ютерними експериментами, оскільки саме вони дають змогу не тільки найбільш повно й точно відтворити фізичні процеси, що протікають на атомарному рівні в наноструктурах, але й на основі аналізу гіпотетичних моделей провести дослідження та оцінити ступінь впливу різних механізмів, що неможливо зробити жодними іншими засобами. Визначальною рисою сучасного матеріалознавства є можливість виконання теоретичних досліджень, не тільки спрямованих на інтерпретацію експериментальних результатів, але й прогнозувального характеру.

4.2. Довести цінність результатів для підготовки фахівців у системі освіти, зокрема вищої кваліфікації. Відокремити використання очікуваних результатів від науково-методичних завдань, що виконуються викладачами у межах їх основної педагогічної діяльності. Навести у Додатку 2 теми досліджень магістрантів (студентів), аспірантів і докторантів, кількість місяців їх роботи за темою з оплатою.

Результати виконаної роботи використовуються в лекційних курсах, методичних вказівках до практичних та лабораторних робіт для студентів напряму 6.040203 Фізика*, спеціальностей 7.04020301, 8.04020301 Фізика*.

Використання наукових розробок дозволило отримати ліцензію на освітню діяльність у сфері вищої освіти: підготовки фахівців третього (освітньо-наукового) рівня зі спеціальності 104 «Фізика та астрономія» галузі знань 10 «Природничі науки» денної та заочної форм навчання.

На основі результатів НДР: оновлені розділи лекцій, практичних та лабораторних робіт до дисциплін «Радіоелектроніка і основи автоматики», «Фізика конденсованих середовищ», «Сучасні методи фізичних досліджень», «Вступ до квантової електроніки», «Основи наноелектроніки»; сформульовані теми курсових, магістерських кваліфікаційних робіт та дипломного проектування спеціалістів; розроблено нові лекції для курсів підвищення кваліфікації вчителів фізики; підготовлено електронний варіант Навчального посібника „Практичний курс з фізики твердого тіла для фізичних спеціальностей педагогічних інститутів (задачі та лабораторні роботи)”; затверджені Науковою Радою фізико-математичного факультету Методичні вказівки до лабораторного практикуму з „Електротехніки” : **навчальний посібник** / Р.М. Балабай, Грицуля Д.Ю. – Кривий Ріг : Видавничий дім, 2016. – 130 с.; впроваджено у навчальний процес:

1. Конструктор багатоатомних структур на екрані комп'ютера.
2. Візуалізатор просторового розподілу густини валентних електронів в хімічних зв'язках багатоатомних структур на екрані комп'ютера.

5. ОСНОВНІ ПОКАЗНИКИ РЕЗУЛЬТАТІВ ДОСЛІДЖЕННЯ ЗА ТЕМОЮ

Зараховуються виключно роботи, серед авторів яких 50% і більше належать до колективу виконавців, визначеного у Таблиці 9. Оцінюючи наукові праці на відповідність темі, меті, предмету та завданням дослідження, експерт має право не зараховувати їх у разі повної невідповідності.

5.1. Перелік опублікованих за темою статей в журналах, що індексуються БД Scopus та/або Web of Science Core Collection (WoS) (або Index Copernicus для соціогуманітарних наук)

Таблиця 2

№	Повні дані про статті з веб-адресою електронної версії; <u>підкреслити прізвища авторів</u> , які належать до списку виконавців	Наукометр. база даних
1	<u>Balabai R.M., Chernikova H.N.</u> Platinum–nickel alloy catalysts for fuel elements // Applied Physics A. – 2014. – Vol. 116, №2. – P. 649-655. DOI 10.1007/s00339-014-8285-7. http://link.springer.com/article/10.1007/s00339-014-8285-7	Scopus
2	<u>Balabai R.M., Gorbanyuk T.I., Litovchenko V.G., Chernikova H.N.</u> Activation of Catalytic Properties of Metal Nanoclusters // Ukr. J. Phys. – 2014. – Vol. 59, № 7. – P. 726-731. http://www.ujp.bitp.kiev.ua/files/journals/59/7/590710p.pdf	Scopus
3	<u>Balabai R.M., Barilka A.G.</u> Graphene wetting by methanol or water // Ukr. J. Phys. – 2015. – Vol. 60, № 10. – P.1050-1055. http://ujphys.bitp.kiev.ua/files/journals/60/10/601008pu.pdf	Scopus
4	<u>Балабай Р.М., Грицуля Д.Ю., Здешиц А.В., Тарасова О.Ю.</u> Електронна структура та діелектрична матриця модельних фотонних кристалів, складених із волокон: розрахунки із перших принципів // Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології Nanosystems, Nanomaterials, Nanotechnologies. – 2015. – Т. 13, № 4. – С.707–720. http://www.imp.kiev.ua/nanosys/media/pdf/2015/4/nano_vol13_iss4_p0707p0720_2015.pdf	Scopus
5	<u>Balabai R.M., Gritsulia D.Yu., Litovchenko V.G.</u> Tuning of Electron States of Transition Metal's Catalysts Using Acceptor's Atoms: ab initio Calculation // Journal of Nano- and Electronic Physics. – 2016. – Vol. 8, № 2. – P. 2007 (5pp). DOI: 10.21272/jnep.8(2).02007 http://jnep.sumdu.edu.ua/download/numbers/2016/2/articles/en/jnep_2016_V8_02007.pdf	Scopus
6	<u>Balabai R.M., Barilka A.G.</u> The Flow Behavior of Organic Liquids Inside Carbon Nanotube // Фізика і хімія твердого тіла. – 2016. – Т.17. – №4. – С.329-335. http://www.pu.if.ua/inst/phys_che/start/pcss/vol17/1703-02.pdf	Scopus
7	<u>Барилка А.Г., Балабай Р.М.</u> Вплив кривини графенової площини на її змочуваність водою та метанолом // Наносистеми, Наноматеріали, Нанотехнології. – 2016. – №2, Т. 14. – С. 0235-0244. http://www.imp.kiev.ua/nanosys/media/pdf/2016/2/nano_vol14_iss2_p0235p0244_2016.pdf	Scopus
8	<u>Balabai R.M., Zdeschyts A.V., Lubenets A.G.</u> Spectral and barrier properties of heterocomposites based on poly (para-phenylene) disposed between the doped silicon films // Molecular Crystals and Liquid Crystals. – 2016. – Vol. 639. – P. 39-46. DOI:10.1080/15421406.2016.1254513. http://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/15421406.2016.1254513 http://www.tandfonline.com/eprint/Gxn2ztj5p2xcjuip9Kp2/full	Scopus

5.2. Перелік опублікованих за темою англomовних статей та тез доповідей у матеріалах міжнародних конференцій, що індексуються БД Scopus або WoS (або Index Copernicus для соціогуманітарних наук)

Таблиця 3

№	Повні дані про статті та тези доповідей з веб-адресою електронної	Наукометр.
---	---	------------

	версії; <u>підкреслити прізвища авторів</u> , які належать до списку виконавців	база даних
1	Balabai R.M., Gritsulia D.Yu., Pankratov P.I. Energy of interfacial reactions in the processes of mechanical separation of hematite and silica nanoparticles // The International Summer School “Nanotechnology: from fundamental research to innovations” and participants of International research and practice conference: NANOTECHNOLOGY AND NANOMATERIALS (NANO-2014). Book of abstracts, 23 – 30 August, Edited by Dr. Olena Fesenko. – Lviv: Eurosvit, 2014. – p.517.	Scopus
2	Balabai R.M., Barilka A.G. Wetting of graphene by methanol or water // The International Summer School “Nanotechnology: from fundamental research to innovations” and participants of International research and practice conference: NANOTECHNOLOGY AND NANOMATERIALS (NANO-2014). Book of abstracts, 23 – 30 August, Edited by Dr. Olena Fesenko. – Lviv: Eurosvit, 2014. – p.121.	Scopus
3	Balabai R.M., Barilka A.G. Wetting of graphene by methanol or water // 6 ^a Міжнародна науково-технічна конференція “Сенсорна електроніка та мікросистемні технології” (СЕМСТ-6), (з виставкою розробок та промислових зразків сенсорів), Україна, Одеса, 29 вересня – 03 жовтня 2014 р. Тези доповідей. – с.107.	scholar.google
4	Balabai R.M., Barilka A.G. The Flow Behavior of Organic Liquids Inside Carbon Nanotube // Фізика і технологія тонких плівок та наносистем. Матеріали XV міжнародної конференції, Івано-Франківськ, 11-16 травня, 2015 / За заг. ред. заслуженого діяча науки і техніки України, д.х.н., проф. Фреїка Д.М. – Івано-Франківськ: п-ць Голіней О.М., 2015. – С. 156.	scholar.google
5	Balabai R.M., Gritsulia D.Yu., Zdeschchys A.V. Graphene-Based Photonic Crystal: Ab-Initio Calculation // Фізика і технологія тонких плівок та наносистем. Матеріали XV міжнародної конференції, Івано-Франківськ, 11-16 травня, 2015/ За заг. ред. заслуженого діяча науки і техніки України, д.х.н., проф. Фреїка Д.М. – Івано-Франківськ: п-ць Голіней О.М., 2015. – С. 339.	Scopus
6	Balabai R.M., Gritsulia D.Yu., Zdeschchys A.V. Photonic Crystal with Electrical Properties: Ab-initio Calculation // Фізика і технологія тонких плівок та наносистем. Матеріали XV міжнародної конференції, Івано-Франківськ, 11-16 травня, 2015 / За заг. ред. заслуженого діяча науки і техніки України, д.х.н., проф. Фреїка Д.М. – Івано-Франківськ: п-ць Голіней О.М., 2015. – С.340.	Scopus
7	Barilka A.G., Balabai R.M. The transference of liquids inside carbon nanotubes covered with metals // The Jubilee 10-th International Conference «Electronic processes in organic and inorganic materials», 23–27 May, 2016, Ternopil, Ukraine, – P. 27.	Scopus
8	Balabai R.M., Zdeschchys A.V., Lubenets A.G. Spectral and barrier properties of heterocomposites based on poly (para-phenylene) disposed between the doped silicon films // The Jubilee 10-th International Conference «Electronic processes in organic and inorganic materials», 23–27 May, 2016, Ternopil, Ukraine, – P. 26.	Scopus

5.3. Перелік опублікованих за темою статей у журналах, що входять до переліку фахових видань України, а також статей у закордонних журналах, які не увійшли до п.5.1 і 5.2 та охоронних документів на об’єкти права інтелектуальної власності

Таблиця 4

№	Повні дані про статті з веб-адресою електронної версії, або вихідні дані про охоронні документи; <u>підкреслити прізвища авторів</u> , які належать до списку виконавців
1	<u>Balabai R.M., Barilka A.G.</u> Tribological characteristics of the diamond-like carbon films covered by hydrogen or fluorine: <i>ab initio</i> calculations // Photoelectronics – 2014. – V.23, P.6-16. http://phys.onu.edu.ua/journals/photoele/11/
2	<u>Balabai R.M., Merzlikin P.V.</u> The Choice of Silicon Nanostructures for CH ₄ Detection: Ab-initio Calculation // Наносистеми, Наноматеріали, Нанотехнології. – 2014. – №.4, т. 12. – С. 743-750. http://www.imp.kiev.ua/nanosys/media/pdf/2014/4/nano_vol12_iss4_p0743p0750_2014.pdf
3	<u>Балабай Р.М., Грицуля Д.Ю., Мерзликін П.В., Тарасова О.Ю.</u> Енергетичні характеристики плівки, що вирощена на основі III-нітридів // Сенсорна електроніка і мікросистемні технології. – 2015. – Т. 12. – №2. – С.13-16. http://nbuv.gov.ua/UJRN/seimt_2015_12_2_8
4	<u>Балабай Р.М., Грицуля Д.Ю., Панкратов П.І., Мерзликін П.В., Тарасова О.Ю., Чернікова О.М.</u> Енергія міжфазних реакцій в процесах механічної сепарації гематиту і наночастинок кварцу // Фізична інженерія поверхні. — 2015. — Т. 13 — №3. — С. 340-347. http://www.pse.scpt.org.ua/rus/jornal/3_15/9.pdf

5.4. Перелік опублікованих за темою монографій

Таблиця 5

№	Повні дані про монографії; <u>підкреслити прізвища авторів</u> , які належать до списку виконавців
1	

Анотації монографій українською мовою навести у Додатку 4

5.5. Перелік опублікованих за темою проекту підручників, навчальних посібників, словників, довідників

Таблиця 6

№	Повні дані про підручники, навчальні посібники, словники, довідники; <u>підкреслити прізвища авторів</u> , які належать до списку виконавців
1	<u>Балабай Р.М.</u> Методичні вказівки до лабораторного практикуму з „Електротехніки” : навчальний посібник / <u>Р.М. Балабай, Грицуля Д.Ю.</u> – Кривий Ріг : Видавничий дім, 2016. – 130 с. : іл.

5.6. Перелік захищених докторських і кандидатських (доктора філософії) дисертацій виконавцями проекту

Таблиця 7

№	Повні дані про дисертації
1	Балабай Р.М. Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук "Особливості розподілу електронної густини в нанорозмірних функціональних матеріалах" зі спеціальності 01.04.07 – Фізика твердого тіла. Дисертація захищена 31.03. 2014 в Спеціалізованій вченій раді Київського національного університету імені Тараса Шевченка.
2	Чернікова О.М. Дисертація „Моделі активації ковалентного зв’язування в реакціях окислення наноструктурними каталізаторами ” на здобуття ступеня кандидата фізико-математичних наук зі спеціальності 01.04.07 – Фізика твердого тіла, науковий керівник Балабай Р.М. Дисертація захищена 20.01.2016 в Спеціалізованій вченій раді Інституту фізики напівпровідників імені В.Є. Лашкарьова НАН

	України.
--	----------

Анотації дисертацій навести у Додатку 5

5.7. Кількість грантів, за якими працювали виконавці, що фінансувались закордонними організаціями (з відповідним підтвердженням від ВНЗ (НУ), посиланням на сайт грантового проекту або офіційним листом від грантодавця)

Таблиця 8

№	ПІБ виконавців	Назва гранту	Фінансування, тис. гривень
1			

Короткий зміст (анотації) досліджень за грантами навести у Додатку 6

6. ВИКОНАВЦІ ПРОЕКТУ (з оплатою в межах запиту)

- доктори наук: 1 кандидати наук: 2;
- молоді вчені до 35 років 3, з них кандидатів 2, докторів _____; докторантів: _____; аспірантів 3
- наукові працівники без ступеня _____;
- інженерно-технічні кадри: _____, допоміжний персонал _____;
- студенти _____.

Р а з о м : 6

Таблиця 9

Виконавці проекту* (з оплатою в межах запиту)

№	Прізвище, ім'я, по батькові	Науковий ступінь	Вчене звання	Посада і місце основної роботи	Вік
1	Балабай Руслана Михайлівна	док. фіз.-мат. наук	доцент	професор кафедри фізики та методики її навчання ДВНЗ „Криворізький державний педагогічний університет”	58 10.07.1958
2	Мерзликін Павло Володимирович	канд. фіз.-мат. наук		в.о. завідувача кафедри інформатики та прикладної математики ДВНЗ „Криворізький державний педагогічний університет”	31 12.01.1985
3	Чернікова Олена Миколаївна	канд. фіз.-мат. наук		асистент кафедри фізики та методики її навчання ДВНЗ „Криворізький державний педагогічний університет”	36 7.03.1978
4	Грицуля Дар'я Юріївна			аспірант кафедри фізики та методики її навчання ДВНЗ	24 23.04.1992

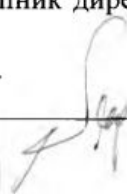
				„Криворізький державний педагогічний університет”	
5	Здешиц Анастасія Валеріївна			аспірант кафедри фізики та методики її навчання ДВНЗ „Криворізький державний педагогічний університет”	24 21.11.1992
6	Барилка Альона Григорівна			аспірант кафедри фізики та методики її навчання ДВНЗ „Криворізький державний педагогічний університет”	28 19.08.1988

Рішення вченої (наукової, науково-технічної) ради від 26.12.2016р. протокол № 3 щодо завершення роботи

Керівник роботи
ПІБ: Балабай Р.М.
Підпис, дата:



Проректор (заступник директора) з наукової роботи
ПІБ: Моркун В.С.
Підпис, дата:

Додаток 1. Список основних публікацій закордонних та вітчизняних вчених, на які посилаються автори роботи для доведення наукової новизни власних результатів

№	Повні дані про статті
1	Holmberg K. Tribology of thin coatings / K. Holmberg, H. Ronkainen, A. Matthews. // Ceram. Int. – 2000. – № 26. – P. 787–795.
2	Sealy C. Researchers unstick nanoparticle friction / Cordelia Sealy. // Nano Today. – 2011. – V. 7, № 1. – P. 2–3.
3	Wetting transparency of grapheme / [J. Rafiee, X. Mi, H. Gullapall та ін.]. // Nature Materials. – 2012. – № 11. – P. 217–222.
4	Breakdown in the Wetting Transparency of Graphene / [C. Shih, Q. H. Wang, S. Lin та ін.]. // Phys. Rev. Lett. – 2012. – № 109. – P. 176101–176106.
5	Yuan Q. Multiscale dynamic wetting of a droplet on a lyophilic pillar-arrayed surface / Q. Yuan, Y. Zhao. // J. Fluid Mech. – 2013. – № 716. – P. 171–188.
6	Lee S. Dewetting behavior of electron-beam-deposited Au thin films on various substrates: graphenes, quartz, and SiO ₂ wafers / S. Lee, E. Kwak, G. Jeong. // Appl. Phys. A. – 2015. – № 118. – P. 389–396.
7	C.Lv, C.Chen, Y.Yin and Q.Zheng, Surface Curvature-Induced Directional Movement of Water Droplets, Mechanics in Engineering (2010).
8	Falk K., Sedlmeier F., Joly L., Netz R.R., Bocquet L. Molecular Origin of Fast Water Transport in Carbon Nanotube Membranes: Superlubricity versus Curvature Dependent Friction // Nano Lett. – 2010. – Vol. 10, No 10. – P.4067-4073.
9	Крылов О.В. Гетерогенный катализ: Учебное пособие для вузов / О.В. Крылов – М.: ИКЦ «Академ книга», 2004. – 679с.
10	Панкратов П. И. Первичная переработка (обогащение) твердых полезных ископаемых флотацией / П. И. Панкратов. – Кривой Рог: Видавничий дім, 2011. – 600 с.
11	Kaner R. B., Gilman J. J., & Tolbert S. H. Designing superhard materials // Science. – 2005. – Vol. 308(5726) . – P. 1268-1269.
12	Zhang X. W., Boyen H. G., Deyneka N., Ziemann P., Banhart F., & Schreck M. Epitaxy of cubic boron nitride on (001)-oriented diamond // Nature materials. – 2003. – Vol. 2(5). – P.312-315.
13	Pendry J. Calculating photonic bandgap structure // J. Phys.: Condensed Matter. – 1996. – Vol. 8. – P. 1085-1108.
14	Glushko E.Ya. Analytical Solution for the Field in Photonic Structures Containing Cubic Nonlinearity // Optics Commun., 259. 2006. – P. 342-349.

Додаток 2. Дані про магістрантів (студентів), аспірантів і докторантів, які працювали за темою з оплатою праці

№ з/п	ПІБ	Статус	Назва теми досліджень	Кількість місяців їх роботи за темою з оплатою
1	Грицуля Дар'я Юріївна	аспірант кафедри фізики та методики її навчання ДВНЗ „Криворізький державний педагогічний університет”	Внутрішні електричні поля в наноматеріалах	36

2	Чернікова Олена Миколаївна	асистент кафедри фізики та методики її навчання ДВНЗ „Криворізький державний педагогічний університет”	Моделі активації ковалентного зв’язування в реакціях окислення наноструктурними каталізаторами	3
3	Барилка Альона Григорівна	аспірант кафедри фізики та методики її навчання ДВНЗ „Криворізький державний педагогічний університет”	Трибологічні характеристики наноструктур	1
4	Здешиц Анастасія Валеріївна	аспірант кафедри фізики та методики її навчання ДВНЗ „Криворізький державний педагогічний університет”	Електронні характеристики гібридних композитів	1
5	Вітюк Дмитро Олегович	магістрант кафедри фізики та методики її навчання ДВНЗ	Сенсорні твердотільні структури для контролю тиску, вологості, температури	1
6	Залевський Денис Віталійович	магістрант кафедри фізики та методики її навчання ДВНЗ	Гібридні матеріали у фотовольтаїці	1
7	Лубенець Анастасія Геннадіївна	магістрант кафедри фізики та методики її навчання ДВНЗ	Фізичні умови утворення р-п переходів у двомірних напівпровідниках	1

Додаток 3. Анотації українською мовою статей, що наведені у Таблиці 2

№ з/п	Назви статей та їх анотації
1	Balabai R.M., Chernikova H.N. Platinum–nickel alloy catalysts for fuel elements // <i>Applied Physics A.</i> – 2014. – Vol.116, №.2. – P. 649-655. Методами функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу із перших принципів отримані просторові розподіли густини валентних електронів і спектри енергії електронів для плівок на основі платини з добавками атомів другого металу під дією механічної напруги і в присутності атомів кисню. Найбільш важливими факторами для підвищення активності платинового каталізатора в процесі окислення метанолу є механічні напруги і дисоційований кисень.
2	<u>Balabai R.M., Gorbanyuk T.I., Litovchenko V.G., Chernikova H.N.</u> Activation of Catalytic Properties of Metal Nanoclusters // <i>Ukr. J. Phys.</i> – 2014. – Vol. 59, № 7. Методами функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу із перших принципів отримані розподіли густини валентних електронів та електронні енергетичні спектри металічних та окислених малих кластерів із атомів Cu, Ni, Co з метою визначення механізмів їх підвищеної каталітичної активності. Визначена організація електронної структури основних та збуджених станів для ізольованих атомів, що зберігається при об'єднанні атомів у 2-х атомні кластери. Зроблений висновок про легше збудження d-електронів міді у порівнянні з електронами нікелю та кобальту, що забезпечує можливе вивільнення d-орбіталей та є принциповим моментом для каталітичної активності мідних центрів.
3	<u>Balabai R.M., Barilka A.G.</u> Graphene wetting by methanol or water // <i>Ukr. J. Phys.</i> – 2015. – Vol. 60, № 10. – P.1050-1055. Методами функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу із перших принципів отримано розподіли густини валентних електронів та повні енергії для міграції води (або метанолу) на вільній поверхні графену. Було встановлено, що міграція молекул води та метанолу уздовж поверхні графену відбувається з енергетичним рельєфом, котрому притаманні бар'єри та ями. Зафіксована взаємодія молекул води, що знаходяться по різні боки від площини графену, через області малої ймовірності в розподілі електронної густини графенової площини. Спостерігалось, що зависання молекул над графеновою площиною локально змінювало її провідність. Оцінка енергетичних затрат під час поширення молекул адсорбентів по поверхні графену продемонструвала його гідрофобність.
4	<u>Балабай Р.М., Грицуля Д.Ю., Здешиц А.В., Тарасова О.Ю.</u> Електронна структура та діелектрична матриця модельних фотонних кристалів, складених із волокон: розрахунки із перших принципів // <i>Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології Nanosystems, Nanomaterials, Nanotechnologies.</i> – 2015. – Т. 13, № 4. – С.707–720. Статтю присвячено властивостям електронної підсистеми модельних фотонних кристалів з формувальними елементами у вигляді волокон пористого GaAs або SiO₂ з графеновими шарами. Теоретичний розрахунок на основі теорії функціоналу електронної густини та методу псевдопотенціалу із перших принципів є головною методою дослідження. З використанням авторського програмного комплексу було розраховано просторовий розподіл густини валентних електронів, розподіл густини електронних станів, Кулонів потенціал вздовж кристалу, діелектричну матрицю. Визначено вплив геометричних параметрів укладання формувальних елементів модельних фотонних кристалів на їхні електронні енергетичні зони, густину електронних станів у зонах, просторовий розподіл електронної густини, зонну структуру діелектричної матриці. Обчислено макроскопічну діелектричну проникність.
5	<u>Balabai R.M., Gritsulia D.Yu., Litovchenko V.G.</u> Tuning of Electron States of Transition

	Metal's Catalysts Using Acceptor's Atoms: ab initio Calculation // Journal of Nano- and Electronic Physics. – 2016. – Vol. 8, № 2. – P. 2007 (5pp). Методами теорії функціоналу електронної густини і псевдопотенціалу із перших принципів ми отримали просторовий розподіл густини валентних електронів і електронного енергетичного спектру для малих кластерів із атомів Cu, Ni, Co, O, Si, з метою визначити механізми їх високої каталітичної активності. Електронні рівні каталізатора визначають напрям хімічної реакції. Ми дослідили, що організацію електронних станів нанокаталізаторів на основі перехідних металів можливо контролювати шляхом зміни просторової організації кластерів і додавання електронегативних атомів.
6	<u>Balabai R.M., Barilka A.G.</u> The Flow Behavior of Organic Liquids Inside Carbon Nanotube // Фізика і хімія твердого тіла. – 2016. – Т.17. – №4. – С.329-335. Методами функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу із перших принципів отримано розподіли густини валентних електронів та повні енергії при міграції молекул води (або метанолу) всередині вуглецевої нанотрубки з чистими стінками та покритими зсередини атомами золота. Було встановлено, що масоперенос метанолу через вуглецеві нанотрубки типу «зигзаг» (15,0) відбувається на два порядки затратніше за енергією ніж води. Виявлено, що масоперенос води та метанолу через вуглецеві нанотрубки з покритими атомами золота внутрішніми стінками потребує на порядок більше енергії ніж через чисті нанотрубки.
7	<u>Барилка А.Г., Балабай Р.М.</u> Вплив кривини графенової площини на її змочуваність водою та метанолом // Наносистеми, Наноматеріали, Нанотехнології. – 2016. – №.2, Т. 14. – С. 0235-0244. Методами функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу із перших принципів одержано розподіли густини валентних електронів і потенціальні рельєфи міграції молекул води вздовж пласкої поверхні графену та всередині вуглецевої нанотрубки. Було встановлено, що масоперенесення води всередині нанотрубки стимулюється додатковими рушійними силами, пов'язаними з кривиною її поверхні, які проявляються у зменшенні на два порядки енергії дифузії при повздовжньому русі молекул у нанотрубці (на порядок — при поперечному русі) порівняно з рухом молекул вздовж пласкої поверхні графену.
8	<u>Balabai R.M., Zdeschyts A.V., Lubenets A.G.</u> Spectral and barrier properties of heterocomposites based on poly (para-phenylene) disposed between the doped silicon films // Molecular Crystals and Liquid Crystals. – 2016. – Vol. 639. – P. 39-46. Методами функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу із перших принципів отримані просторові розподіли густини валентних електронів, енергетичні спектри валентних електронів і кулонівські потенціали для гетерокомполімерів на основі поліпарафенілену і вуглецевих нанотрубок, що розташовані між плівками кремнію. Було встановлено, що потенціальний бар'єр максимального значення формується в композитному матеріалі з поліпарафеніленових волокон, поміщених між плівок кремнію і докомплектованими вуглецевими нанотрубками перпендикулярно поверхні плівок кремнію, у порівнянні із їх розташуванням уздовж плівок.

Додаток 4. Анотації українською мовою монографій, що наведені у Таблиці 5

№ з/п	Назви монографій та їх анотації
1	

Додаток 5. Анотації захищених кандидатських і докторських дисертацій виконавцями проекту, що наведені у Таблиці 7

№ з/п	Назви дисертацій та їх анотації
1	У дисертації Балабай Р.М. визначено особливості електронної структури механічно напружених епітаксialних напівпровідникових гетероструктур; ансамблів убудованих квантових точок; функціоналізованих вуглецевих нанотрубок, графенових нанострічок і плівок Si; каталітичних систем, що включають нанокластери металів, при переході від однієї їхньої ізомерної форми до іншої шляхом застосування до них методів із перших принципів. Створено програмний пакет на основі сучасних методів фізики твердого тіла, що має можливості редагування нанооб'єктів, обчислення електронно-структурних та енергетичних характеристик. Розвинуто уявлення про топологію просторового розподілу валентних електронів у шаруватих епітаксialних механічно напружених наногетероструктурах та обмежених у розмірі графенових площинах, що може набувати як двовимірних, так і тривимірних, як однорідних та неоднорідних, так і фрактальних форм. Кількісно доведено формування локальних пошкоджень груп sp^2 у сітці поверхонь нанотрубок і графенових нанострічок та появи одиночних sp^3 -зв'язків у результаті фторування чи гідрогенізації поверхні. Розвинуто прийоми впливів на провідність графенових нанострічок, нанорозмірних плівок Si шляхом вибору їхнього розміру та покриття. З'ясовано механізми підвищеної каталітичної активності кластерів перехідних металів, пов'язані з ймовірністю збудження d-орбіталей.
2	Дисертація Чернікової О. М. присвячена визначенню фізичних механізмів гетерогенних каталітичних реакцій окислення, а саме, синтезу гліоксалу окислюванням етиленгліколю на мідному нанокаталізаторі, окисації Si в присутності моношару Cr та окислення метанолу з використанням біметалічних плівкових шаруватих механічно напружених каталізаторів змінного складу на основі Pt, Ni. Основним методом дослідження обрано теоретичні розрахунки на основі формалізму функціоналу електронної густини, методу псевдопотенціалу, що відносяться до класу методів із перших принципів. Виявлено, що адсорбція атомів кисню в позиціях над атомами мідного каталізатора, над зв'язками між атомами міді, над міжатомною пустотою в поверхневому шарі мідного каталізатора є фізичними, а в позиції площини поверхневого шару – хімічною і такий атом кисню слід вважати втраченим для подальшої взаємодії з органічною молекулою. Визначено, що розташування молекули етиленгліколю своїм центром над міжатомною пустотою та біля ребра фрагментів каталізатору більш ефективно руйнує зв'язок між атомами C-C молекули на шляху її розкладу, чим при розташуванні молекули в позиції над атомами каталізатора. Продемонстровано, що прискорення процесу окисації Si в присутності моношару Cr здійснюється за рахунок послаблення зв'язків Si-Si у шарах плівки кремнію близьких до моношару Cr, а реактивність моношару Cr на плівці кремнію збільшується при неповній окисленості атомів Cr. Встановлено, що у плівках кремнію в присутності моноатомного шару Cr при малій концентрації кисню з'являються просторові області з локально підвищеним зарядом в околиці атомів кисню, а розподіл електронів по енергіям перегрупується на розподіл з домінуючим максимумом біля енергії Фермі. Виявлено, що у процесі окислення метанолу з використанням біметалічних плівкових шаруватих механічно напружених каталізаторів змінного складу на основі Pt, Ni найбільший вплив на підвищення електронної активності біметалічного каталізатора мають механічні напруги в ньому та наявність дисоційованого кисню. Встановлено, що стиснення плівки платини виштовхує електронну густину назовні плівки, надаючи густині витягнутих форм, що підвищує хімічну та адсорбційну активність плівки.

Додаток 6. Короткий зміст (анотації) досліджень за грантами, що наведені у Таблиці 8

№ з/п	Назви грантів та їх анотації
1	

Керівник роботи

ПІБ: Балабай Р.М.

Підпис

Дата:

