

РЕФЕРАТ роботи

Низьковимірні напівпровідникові структури для газової сенсорики

поданої Інститутом прикладних проблем механіки і математики ім.

Я.С.Підстригача НАН України

на здобуття премії Президента України для молодих вчених 2022 року.

Автори:

Бовгира Ростислав Вікторович – кандидат наук фізико-математичних наук, науковий співробітник відділу фізико-математичного моделювання низьковимірних систем Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України.

Савка Степан Степанович – кандидат наук фізико-математичних наук, молодший науковий співробітник відділу фізико-математичного моделювання низьковимірних систем Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України.

Венгрин Юрій Іванович – кандидат наук фізико-математичних наук, молодший науковий співробітник відділу фізико-математичного моделювання низьковимірних систем Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України.

Актуальність теми. В умовах швидкого зростання забруднення навколишнього середовища промисловими викидами шкідливих газів, загрози терористичних небезпек зі застосуванням отруйних газів, контролю робочого середовища придатного для здорового функціонування людського організму виникає потреба у вдосконаленні засобів вимірювання хімічного складу газових середовищ і створення нових, вискоелективних та недорогих сенсорів. На даний час, існують сенсорні системи, що дають змогу зареєструвати тільки обмежені кількості газових компонент при відносно невисокій чутливості, селективності та швидкодії. Практично відсутні малогабаритні ефективні полісенсори, селективно чутливі до широкого спектру газів одночасно і їх сумішей зі схемою обробки сигналів та малим енергоживленням. Особливістю даної роботи є комплексний підхід до розв'язання проблематики газової сенсорики, що полягає в застосуванні люмінесцентного методу для здійснення детектування адсорбованих газових частинок на нанопорошкових металооксидах, з використанням багатоканальної матриці. Одночасне вимірювання сигналів всіх датчиків і цифрова обробка

інформації дають змогу визначати концентрації і рід одночасно багатьох газових частинок. Перспективними для цих цілей є металооксиди, зокрема, нанопорошкові матеріали на основі ZnO. Ці матеріали характеризуються досить високою адсорбційною здатністю до переважної більшості газів та є добрими люмінофорами. У свою чергу, розвиток мікро-, оптоелектроніки та сенсорної техніки вимагає постійного вдосконалення фізико-технологічних умов одержання матеріалів та пошуку оригінальних структур для побудови нових приладів на їх основі. Однак, з кожним роком все більше виникає необхідність мініатюризації електронних пристроїв, перехід від мікро- до нанотехніки. Тому, на даний час спостерігається інтенсивний розвиток нанотехнологій та дослідження наноматеріалів і структур на їх основі, як з фундаментальної точки зору, так і для подальшого використання даних матеріалів в сучасній техніці. Вивчення окремих наночастинок є областю інтенсивних досліджень у фізиці, хімії та техніці.

Як відомо, властивості наночастинок визначаються їхньою структурою, яка, в свою чергу, є результатом процесу росту наночастинок. В залежності від технологічних особливостей синтезу процеси утворення частинок можуть істотно відрізнятися. Експериментальне дослідження механізмів формування наночастинок є технічно складною і трудомісткою задачею через швидкоплинність процесів та малі розміри даних об'єктів. В умовах експериментального газозфазного синтезу є дещо складним детальне вивчення впливу основних параметрів синтезу на структурні, морфологічні та фізико-хімічні властивості, а також зовнішню форму одержуваних частинок. А тому, комп'ютерне моделювання є альтернативним і перспективним способом вивчення механізмів формування нанооб'єктів, встановлення залежності електронної структури від морфології і атомної структури досліджуваних об'єктів та її вплив на їхні оптико-спектральні властивості. Особливу роль відіграють методи теоретичного моделювання, які дозволяють доволі детально досліджувати процеси росту і синтезу наночастинок при конденсації з газової фази, вивчати поверхневі явища в кристалічних твердих тілах та процеси їх взаємодії з атомами і молекулами зовнішнього середовища, а також методи основані на першопринципних підходах обчислювальної квантової теорії, які успішно

застосовуються для вивчення і прогнозування властивостей нових матеріалів поряд із експериментальними дослідженнями.

З іншого боку, лише добре узгодження результатів математичного моделювання з одержаними експериментальними даними, дозволяє більш глибоко розуміти фізичні явища та процеси в досліджуваних матеріалах. А тому, головною метою виконання даної роботи стали фізико-математичне моделювання процесів формування структури, морфології росту і електронних властивостей нанопорошкових металооксидів та експериментальні методи дослідження оптико-спектральних та газосенсорних властивостей досліджуваних матеріалів, одержаних методом лазерної абляції. Такими матеріалами і системами у роботі вибрані нанопорошкові металооксиди на основі ZnO, TiO₂, SnO₂, ZnO/TiO₂, ZnO/SnO₂, Zn₂SiO₄:Mn, та Zn₂SiO₄:Ti з модифікованими структурами, в тому числі, наноструктури типу «ядро-оболонка», що проявляють оригінальні властивості та можуть бути ефективно використані для побудови газосенсорних систем нового покоління.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами і темами. Цикл робіт виконаний у відділі фізико-математичного моделювання низьковимірних систем Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України у рамках держбюджетних науково-дослідних тем: «Теоретико-експериментальні дослідження особливостей формування тонкоплівкових та нанопорошкових функціональних матеріалів під дією інтенсивних іонних та лазерних потоків» (2012-2014 рр., № держреєстрації 0111U008860), «Математичне моделювання та експериментальні дослідження процесів формування низькорозмірних твердотільних функціональних матеріалів з допомогою інтенсивних лазерних та іонних потоків» (2015-2017 рр., № держреєстрації 0115U003057), «Теоретико-експериментальні дослідження процесів формування структури і властивостей складних низьковимірних твердо тільних функціональних матеріалів з використанням методів лазерної та іонно-променевої обробок.» (2018-2020 рр., № держреєстрації 0117U007435), науково-технічних проєктів: «Розробка та створення газосенсорної системи на основі низьковимірних металооксидів» (2015, № держреєстрації 0115U002937), «Створення газового сенсора на основі матричних (4x4) нанопорошкових комірок з алгоритмом аналізу

їх свічення для реєстрації сумішей газів» (2018 р. № держреєстрації 0118U001932) та комплексної цільової програми НАН України «Грид-інфраструктура і грид-технології для наукових і науково-прикладних застосувань» (2017, 2018 рр.) та гранту НФДУ «Створення сенсорної системи на основі нанопорошкових матеріалів для реєстрації сумішей газів» (пр.. №2020.01/0331, 2020-21 рр.).

Об'єкт дослідження: структурні, електронні, люмінесцентні та газосенсорні характеристики наноструктур на основі низьковимірних напівпровідникових металооксидів.

Предмет дослідження: взаємозв'язок між процесами формування структури, морфологією росту, закономірностями зміни електронних, оптико-спектральних та газосенсорних властивостей наноструктур на основі нанопорошкових металооксидів при адсорбції газів, придатних для використання в газовій сенсоріці.

Мета і задачі дослідження: розробка нових підходів отримання низьковимірних напівпровідникових структур, фізико-математичне моделювання процесів формування структури і електронних властивостей нанопорошкових матеріалів і систем на їх основі, одержаних за допомогою лазерних методів синтезу, оптимізація люмінесцентного методу для детектування адсорбованих газових частинок та їх сумішей на нанопорошкових металооксидах з використанням багатоканальної матриці для застосування у сенсорах газів та їх сумішей.

Досягнення цієї мети передбачало:

- моделювання структури та електронних властивостей наноструктур на основі ZnO;
- вивчення впливу адсорбції молекул газів на електронну структуру та оптичні властивості наноструктур на основі оксиду цинку;
- встановлення особливостей впливу дефектів структури та домішок на електронні властивості наноструктур ZnO;
- вивчення процесів формування морфології росту і структури нанокластерів ZnO;
- моделювання процесів коалесценції і коагуляції нанокластерів з лазерної плазми в умовах хімічно-активного середовища;
- моделювання процесів окислення нанокластерів Zn в кисневому середовищі і формування наноструктур типу «ядро-оболонка»;

- встановлення закономірностей впливу власнодефектної структури на електронні властивості нанопорошкового ZnO при адсорбції газів;
- виявлення процесів формування електронної структури на оптичні властивості нанопорошкового ZnO, в т.ч. при адсорбції газів;
- встановлення закономірностей фотолюмінесцентних властивостей легованих наноструктур на основі ZnO в газових середовищах;
- визначення характеру газосенсорних властивостей нанопорошкових металооксидів (адсорбційна здатність, швидкодія, чутливість, селективність);
- визначення фізико-технологічних засад побудови багатоелементної матричної системи для створення газового сенсора нового покоління.
- виготовлення діючого лабораторного макету газосенсорної системи та проведення його апробації в реальних умовах.

Методи дослідження. Для розв'язання поставлених задач і досягнення кінцевої мети циклу наукових праць використовувався комплекс взаємодоповнюваних теоретико-експериментальних методів досліджень: метод псевдопотенціалу в наближенні теорії функціонала густини, градієнтні методи пошуку мінімумів на поверхні потенціальної енергії для оптимізації структурних моделей, математичне моделювання методом молекулярної динаміки процесів формування нанокластерів та структур на їх основі з лазерної плазми, X-променева малокутова дифрактометрія, растрова електронна мікроскопія, енерго-дисперсійний аналіз, комплекс оптичного та люмінесцентного спектральних аналізів, методи комбінаційного розсіювання світла, статистична обробка експериментальних даних.

Наукова новизна одержаних результатів. Робота носить оригінальний та цілісний характер, оскільки передбачає математичне моделювання процесів морфології росту, структури та електронних властивостей нанопорошкових металооксидів, лазерну реактивну технологію одержання низьковимірних систем, експериментальні методи вивчення структури і люмінесцентних властивостей та передбачає побудову газосенсорної системи нового покоління з високою чутливістю, селективністю та швидкістю. У циклі наукових робіт вперше отримано такі наукові результати:

- встановлені умови формування атомної структури та параметрів енергетичного спектра електронів у малих ($n=2-12$) та великих ($n=34, 60$) кластерах ZnO сформованих з лазерної плазми;
- виявлені стабільні структурні конфігурації та встановлені закономірності зміни електронної структури нанокластерів ZnO легованих атомами $3d$ перехідних хімічних елементів (Mn, Co, Cu) та визначений вплив даних атомів на магнітні властивості нанокластерів;
- встановлені структурні та електронні властивості модельних одностінкових нанотрубок ZnO хіральності (4,4) та (8,0) ідеальної структури та легованих атомами $3d$ перехідних металів і виявлені енергетичні параметри їхньої взаємодії з газами та проаналізовані їхні магнітні властивості;
- виявлені стабільні структурні конфігурації нанокластерів $(\text{ZnO})_n$ ($n=34, 60$), як власнодефектної структури, так і легованих атомами $3d$ перехідних хімічних елементів (Co, Cu, Al), та вивчено їхні електронні властивості при адсорбції газів;
- у межах методу молекулярної динаміки виявлені закономірності формування нанокластерів ZnO в хімічно-активному середовищі з лазерної плазми та встановлені залежності розмірів, форми та структури отриманих наночастинок від швидкості охолодження системи та концентрації атомів у ній, встановлені оптимальні умови формування для утворення стабільних структурованих нанокластерів ZnO;
- методом молекулярної динаміки встановлені фізико-технологічні закономірності процесів окислення нанокластерів Zn в кисневому середовищі і утворення наноструктур типу «ядро-оболонка». Виявлено, що при збільшенні початкової концентрації кисню в середовищі товщина оксидного шару росте до певної межі;
- виявлені закономірності зміни товщини та щільності оксидного шару структур типу «ядро-оболонка» Zn-ZnO від початкової температури системи, концентрації газу та розмірів нанокластерів Zn, де отримання структурованих наночастинок має місце за температури системи, наближеної до кімнатної. Встановлено, що для малих кластерів ($d < 4$ нм) розділення між ядром і оболонкою практично не спостерігається;

- вивчено процеси адсорбції кисню на поверхні наногранул ZnO методом молекулярної динаміки та встановлено характер впливу дефектів структури на адсорбційні властивості приповерхневих шарів нанокластерів ZnO.
- встановлені закономірності формування газосенсорних властивостей наночастинок ZnO, легованих домішками благородних металів (Au, Ag, Pt) та виявлено високу чутливість сформованого нанопорошку до газів. Встановлено та обґрунтовано тенденцію до зниження адсорбційної здатності нанопорошків ZnO зі зменшенням розмірів наногранул до 40-60 нм;
- виявлені особливості фотолюмінесцентних властивостей нанопорошкових металооксидів на основі ZnO, TiO₂, SnO₂, в т.ч. лазерно-модифікованих та поверхнево-легованих домішками Ni, Cu, Sn, Ca, Cr, Cd, Al, W, V в газах O₂, N₂, H₂, CO, CO₂. Встановлені закономірності газосенсорних властивостей нанопорошкових металооксидів (адсорбційна здатність, швидкодія, чутливість, селективність) від роду газів;
- встановлені закономірності люмінесцентних властивостей складних нанопорошків ZnO/TiO₂, ZnO/SnO₂, Zn₂SiO₄:Mn і Zn₂SiO₄:Ti в різних газових середовищах, де зміна газового середовища призводить до досить значних змін інтенсивностей спектрів фотолюмінесценції та їх деформацій;
- встановлені фізико-технологічні особливості і засади функціонування багатоелементної матричної системи для побудови газового сенсора нового покоління.

Практичне значення одержаних результатів.

Одержані результати можуть бути покладені в основу розробки нових прогресивних способів створення низьковимірних твердотільних структур з використанням лазерної реактивної технології для цілей оптоелектроніки та газової сенсорики. В циклі наукових праць:

- розвинуті мікроскопічні моделі електронної будови, хімічного зв'язку, енергетичних умов стабільності низьковимірних систем та отримані нові параметри енергетичного спектру наноструктур на основі напівпровідникових

металооксидів, сформованих з лазерної плазми, цінні для практичних цілей газової сенсорики.

- встановлено характер впливу газового середовища на фотолюмінісцентні властивості нанопорошкових матеріалів, що дозволило спрогнозувати створення функціонально важливих елементів для газосенсорної системи нового покоління та побудувати діючий лабораторний макет такої системи.

Новизна розробки захищена Патентом України на корисну модель.

Основні науково-технічні результати:

Встановлений характер взаємодії нанокластерів $(\text{ZnO})_{12}$ із молекулами O_2 , H_2O , CO , NO_2 , NH_3 , CH_3OH , $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$ і $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, та виявлено, що адсорбція молекул газу призводить до зміни геометрії нанокластерів і сприяє обміну електронами між адсорбованими молекулами і поверхнею кластерів.

1. Встановлені особливості формування структури нанокластерів $(\text{ZnO})_n$ $n = 12, 34, 60$. Проведено аналіз моделей, що пояснює особливу стабільність цих кластерів та виявлено найбільш енергетично вигідними для $(\text{ZnO})_{34}$ є фулереноподібні структури, а для $(\text{ZnO})_{60}$ – структура типу ґратки содаліту, складеної із семи кластерів $(\text{ZnO})_{12}$.
2. Методом теорії функціонала електронної густини встановлені закономірності процесів адсорбції молекул різних газів (NH_3 , CO , O_2 , NO_2) на поверхні нанокластерів $(\text{ZnO})_n$ ($n = 34, 60$) з різними точковими дефектами структури та легуваних атомами $3d$ металів (Co , Cu , Al). Встановлено вплив адсорбції на електронні властивості даних наносистем, а також підтверджено вплив легування на чутливість наносистем.
3. Методом молекулярної динаміки проведено математичне моделювання процесів конденсації і утворення нанокластерів ZnO в хімічно-активному середовищі з лазерної плазми та встановлені залежності розмірів, форми, структури і кількості отриманих наночастинок від швидкості охолодження системи та її початкової конфігурації.
4. Встановлені закономірності залежності товщини та щільності оксидного шару сформованих наноструктур типу «ядро-оболонка» Zn-ZnO від початкових температур системи, концентрації газу та розмірів нанокластерів Zn .

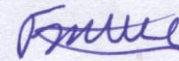
Проаналізовано та встановлено характер формування внутрішніх механічних напружень в системі «ядро-оболонка» Zn-ZnO.

5. Проведено моделювання методом молекулярної динаміки процесів адсорбції молекул O₂ на нанокластерах ZnO при різних технологічних умовах. Встановлено, що весь процес адсорбції характеризується швидким ростом кількості адсорбованих молекул та зростанням флуктуацій в зміні адсорбованих молекул на поверхні з часом.
6. Виявлені закономірності фотолюмінесцентних властивостей нанопорошкових металооксидів на основі ZnO, TiO₂, лазерно-модифікованих та поверхнево-легованих домішками Pt, Si, Ge, Ni, Ca, Sn та встановлено високу чутливість до різних газових середовищ.
7. Встановлено вплив різних газових середовищ на люмінесцентні властивості складних нанопорошків ZnO/TiO₂, ZnO/SnO₂, Zn₂SiO₄:Mn і Zn₂SiO₄:Ti, ZnGa₂O₄, ZnGdO₃:Eu, де при зміні газового середовища спостерігається деформація спектрів свічення та зміна їх інтенсивностей.
8. Встановлені закономірності особливостей формування кристалічної структури як вихідних, так і легованих нанопорошкових матеріалів. Відсутність додаткових дифракційних піків на одержаних дифрактограмах свідчить про досконалу структуру сформованих матеріалів та їх однофазність. Встановлені закономірності люмінесцентного свічення модифікованих нанопорошкових матеріалів та встановлено їх високу газочутливість. На основі проведеного комплексу фотолюмінесцентних досліджень та побудови колірних діаграм свічення було вибрано найбільш оптимальні нанопорошкові матеріали для побудови газосенсорної матриці.
9. Сконструйовано та побудовано газосенсорну систему, що містить багатокомпонентну матрицю з 25 адсорбентів нанопорошкових металооксидів різної модифікації. Сформована газосенсорна система містить набір вбудованих засобів для контролю тиску, температури, вологості. Цифрова обробка сигналів колірності матричних елементів в різних газових середовищах дали змогу виявляти різні газові частинки аж до їх сумішей. Створено алгоритм та програмне забезпечення для аналізу складу газового середовища. Створена газосенсорна система дозволяє проводити газоаналіз з високою чутливістю,

середовищах дали змогу виявляти різні газові частинки аж до їх сумішей. Створено алгоритм та програмне забезпечення для аналізу складу газового середовища. Створена газосенсорна система дозволяє проводити газоаналіз з високою чутливістю, селективністю та швидкістю.. Система немає ніяких аналогів як в Україні, так і за рубежом.

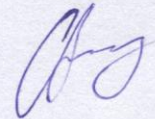
Публікації. Цикл наукових праць містить 55 наукових публікації, зокрема, 1 Патент України на корисну модель, 21 статтю у фахових виданнях, серед яких 20 у журналах, реферованих наукометричною базою Scopus та 33 публікації у матеріалах Міжнародних і Всеукраїнських наукових конференцій та симпозіумів. Загальний індекс цитування, згідно зі даними наукометричної бази даних Scopus складає 128, h-індекс = 7; бази даних Web of Science – 112, h-індекс = 6; бази даних Google Scholar –147, h-індекс = 7. За результатами циклу наукових праць учасниками колективу захищено 3 кандидатські дисертації.

Науковий співробітник
відділу фізико-математичного моделювання
низьковимірних систем
ІППММ ім. Я.С. Підстригача НАН України,
кандидат фіз.-мат. наук



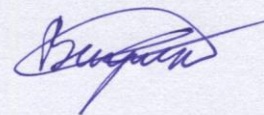
Р.В. Бовгира

Молодший науковий співробітник
відділу фізико-математичного моделювання
низьковимірних систем
ІППММ ім. Я.С. Підстригача НАН України,
кандидат фіз.-мат. наук



С.С. Савка

Молодший науковий співробітник
відділу фізико-математичного моделювання
низьковимірних систем
ІППММ ім. Я.С. Підстригача НАН України,
кандидат фіз.-мат. наук



Ю.І. Венгрин

**Перелік наукових публікацій претендентів
на здобуття Премії Президента України для молодих вчених**

- Бовгира О.В., Бовгира Р.В., Коваленко М.В., Попович Д.І., Середницький А.С.* Вивчення структурних та електронних властивостей кластерів ZnO методом теорії функціонала густини // **Журнал нано-та електронної фізики.** – 2013. – Т.5, №1. – С.01027 (6с).
(Translated as:
Bovgyra, O. V., Bovgyra, R. V., Kovalenko, M. V., Popovych, D. I., Srednytski, A. S. The Density Functional Theory Study of Structural and Electronical Properties of ZnO Clusters // **Journal of Nano- & Electronic Physics** . – 2013. – Vol. 5 Issue 1. – p01027-1-01027-6. бр.).
- Бовгира О., Коваленко М., Бовгира Р.* Електронна структура легованих нанотрубок ZnO // **Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика.** – 2014. – № 35. – С. 123–130.
- Bovgyra O.V., Bovhyra R.V., Popovych D.I., Srednytski A.S.* The Density Functional Theory Study of Electronical Properties of (ZnO)₁₂ Clusters During Gas Adsorption // **Journal of Nano- Electronic Physics.** – 2015. – V.7, №4. – P. 04090(6).
- Bovhyra R.V., Zhyrovetsky V.M., Popovych D.I., Savka S.S., Srednytsky A.S.* Development and Creating of Gas-Sensor System Based on Low Dimensional Metal Oxides // **Science and Innovation.** – 2016. – 12, №6. – P.59-65.
- S.S. Savka, D.I. Popovych, A.S. Srednytski* Molecular Dynamics Simulations of the Formation Processes of Zinc Oxide Nanoclusters in Oxygen Environment // **Nanophysics, Nanomaterials, Interface Studies, and Applications. NANO 2016. Springer Proceedings in Physics.** – 2016. – 195. – P. 145-156.
- Р.В.Бовгира, В.М.Жировецький, Д.І.Попович, Савка С.С., А.С.Середницький Пат.112955.* Україна, МПК (2016.01) G01N 30/36. Спосіб розпізнавання газів (Україна); заявник і власник патенту Інституту прикладних проблем механіки і математики ім.Я.С.Підстригача НАН України. - Nou201605475 заявл. 20.05.2016 р. опубл.10.01.2017, Бюл. No1.
- Bovhyra R.V., Popovych D.I, Bovgyra O.V., Srednytski A.S.* Ab Initio Study of Structural and Electronic Properties of (ZnO)_n “Magical” Nanoclusters n=(34, 60) // **Nanoscale Research Letters.** – 2017. – 12. – P.76(5).
- Zhyrovetsky V.M., Popovych D.I., Savka S.S., Srednytski A.S.* Nanopowder Metal Oxide for Photoluminescent Gas Sensing // **Nanoscale Research Letters.** – 2017. –12. – P. 132(5).
- Ya.V. Bobitski, R.V. Bovhyra, D.I. Popovych, S.S. Savka, A.S. Srednytski, V.N. Shevchuk, Yu.I. Venhryn* The Influence of Surface Doping on Adsorption Ability of Nanopowder Metal Oxides for Gas Sensors // **Journal of Nano- and Electronic Physics.** – 2017. – 9, №5. – P. 05008(4).
- S.S. Savka, Yu.I. Venhryn, A.S. Srednytski, D.I. Popovych* Molecular Dynamics Simulations of the Formation Processes and Luminescence Properties of Zn-ZnO Core-Shell Nanostructures // **Journal of Nano- and Electronic Physics.** – 2018. –10. №3. – P. 03008(5).
- R.Bovhyra, D.Popovych, O.Bovgyra, A.Srednytsky* First principle study of native point defects in (ZnO)_n nanoclusters (n = 34, 60) // **Applied Nanoscience.** – 2019. – 9(5). – P. 1067-1084.
- R.V.Bovhyra, S.I.Mudry, D.I.Popovych, S.S.Savka, A.S.Srednytski, Yu.I.Venhryn* Photoluminescent properties of complex metal oxide nanopowders for gas sensing // **Applied Nanoscience.** – 2019. – 9(5). – P. 775-780.
- R.V. Bovhyra, O.V. Bovgyra, D.I. Popovych, A.S. Srednytsky* DFT Study of native point defects in (ZnO)_n (n = 34, 60) nanoclusters // **Journal of Physical Studies.** – 2019. – 23(2). – P. 2702(6pp).
- Савка С.С., Венгрин Ю. І., Середницький А.С., Попович Д.І.* Модельовання методом молекулярної динаміки процесів формування наноструктур Zn-ZnO типу «ядро-оболонка» // **Журнал Фізичних Досліджень.** – 2019 – 23. № 2. – P. 2603(6).
(Translated as:
S.S. Savka, Yu.I. Venhryn, A.S. Srednytski, D.I. Popovych Molecular dynamics investigation of the formation processes of Zn–ZnO core-shell nanostructures // **Journal of Physical Studies.** – 2019. – 23(2).– P. 2602(6pp).)

- Bovgyra O., Kovalenko M., Bovhyra R., Dzikovsky V.* Effect of In, Ga and Al heavy doping on electronic structure of ZnO: First principle calculation // **Journal of Physical Studies**. – 2019. – 23(4). – P. 4301.
- Yu.I.Venhryn, S.S.Savka, R.V.Bovhyra, V.M.Zhyrovetsky, A.S.Serednytski, D.I.Popovych,* Obtaining structure and gas sensor properties of nanopowder metal oxides // **Materials Today: Proceedings**. 2019. – 35, №4. P. 588-594.
- Lazoryk, I.V., Popovych, I.D., Venhryn, Y.I., Savka S.S., Bovhyra R.V., Serednytski A.S., Mudry S.I.* Peculiarities of photoluminescence in gas ambient of doped ZnO nanopowders // **Applied Nanoscience**. – 2020. – 10, №12. – P. 5003-5008.
- Kovalenko, M., Bovgyra, O., Dzikovskyi, V., Bovhyra R.* A DFT study for adsorption of CO and H₂ on Pt-doped ZnO nanocluster // **SN Applied Sciences**. – 2020. – 2, №5. – P. 790.
- Kovalenko, M.V., Bovgyra, O.V., Dzikovskyi, V.Y., Bovhyra R.V.* Electronic structure of nanoporous zinc oxide // **Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii**. – 2020. – 18, №3. – P. 727-741.
- Bovhyra R., Venhryn Y., Serednytski A., Bovgyra O., Popovych D.* First principle study of electronic properties of ZnO nanoclusters with native point defects during gas adsorption // **Applied Nanoscience**. – 2021.
- Savka S., Venhryn Y., Serednytski A., Popovych D.* Molecular dynamics simulation of adsorption processes on the surface of ZnO nanoclusters // **Applied Nanoscience**. – 2021.
- Venhryn Y.I., Pawluk V.S., Serednytski A.S., Popovych D.I.* Photoluminescence in gas of (Ca) Mg-doped ZnO nanopowders // **Applied Nanoscience**. – 2021.
- Popovych D.I., Bovhyra R.V., Serednytski A.S.* Modeling of the structure and electronic properties of ZnO nanoclusters. // **6th CHAOS 2013 International Conference**, Yeditepe University, Istanbul, Turkey. Abstract book. (11-14 June 2013). – Istanbul, Turkey, 2013. – P. 98.
- Kovalenko M.V., Bovgyra O.V., Bovhyra R.V.* Electronic structure and magnetism of 3d transition metal-doped ZnO nanotubes: an ab initio study // **International research and practice conference “Nanotechnology and nanomaterials (NANO-2013)”**. Abstract book. (25 August-1 September 2013). – Bukovel, Ukraine, 2013. – P. 226.
- Kovalenko M.V., Bovgyra O.V., Bovhyra R.V.* Electronic structure and magnetism of 3d transition metal-doped ZnO nanostructures. // **Матеріали VI Міжнародної наукової конференції “Фізика неупорядкованих систем”**. (14-16 жовтня 2013р.). – Львів, Україна, 2013. – С. 58.
- Bovgyra R.V., Popovych D.I., Bovgyra O.V.* Ab initio study of structural and electronic properties of ZnO nanoclusters. // **International Conference on the Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems**. (11-16 May 2015). – Ivano-Frankivsk, Ukraine, 2015. – P. 160.
- Bovgyra R.V., Popovych D.I., Bovgyra O.V.* Ab initio study of structural and electronic properties of ZnO nanoclusters. // **International research and practice conference “Nanotechnology and nanomaterials (NANO-2016)”**. Abstract book. (24-27 August 2016). – Lviv, Ukraine, 2016. – P. 38.
- Zhyrovetsky V.M., Popovych D.I., Savka S.S., Serednytski A.S.* Nanopowder Metal Oxide for Luminescent Gas Sensing // **4th International research and practice conference «Nanotechnology and Nanomaterials» (NANO-2016)** (Lviv, Ukraine, 24 - 27 August, 2016). – Abstract Book. – Lviv: Eurosvit. –2016. – P.617.
- Savka S.S., Popovych D.I., Serednytski A.S.* Molecular dynamics study of the condensation of zinc oxide from the gas phase // **4th International research and practice conference «Nanotechnology and Nanomaterials» (NANO-2016)** (Lviv, Ukraine, 24-27 August, 2016). – Abstract Book. – Lviv: Eurosvit. -2016. – P.562.
- Попович Д.І., Савка С.С., Середницький А.С.* Моделивання процесів формування наночастинок оксиду цинку методом молекулярної динаміки // **V Наукова конференція «Нанорозмірні системи: будова, властивості, технології»** (Київ, Україна, 1-2 грудня, 2016). – Київ, Україна, 2016. – P.104.
- Гаврилів Д., Бовгира О., Бовгира Р.* Моделивання структури та електронного енергетичного спектру малих кластерів ZnO. // **Міжнародна конференція молодих науковців з теоретичної та**

експериментальної фізики **ЕВРИКА-2017**. Тези доповідей. (16-18 травня 2017 р.). – Львів, Україна, 2017. – с. Н8.

Бовгира Р. Вивчення структурних та електронних властивостей кластерів $(\text{ZnO})_n$ методом теорії функціонала густини. // Конференція молодих вчених “**Підстригачівські читання – 2017**”. Матеріали конференції. (23-25 травня 2017 р.). – Львів, Україна, 2017.

Венгрин Ю. Створення газосенсорної системи на основі нанопорошкових металооксидів. // Конференція молодих вчених “**Підстригачівські читання – 2017**”. Матеріали конференції. (23-25 травня 2017 р.). – Львів, Україна, 2017.

Савка С. Моделювання процесів формування наночастинок ZnO з газового середовища методом молекулярної динаміки. // Конференція молодих вчених “**Підстригачівські читання – 2017**”. Матеріали конференції. (23-25 травня 2017 р.). – Львів, Україна, 2017.

Попович Д.І., Середницький А.С., Бовгира Р.В., Савка С.С., Венгрин Ю.І. Газосенсорна система // Перспективи розвитку озброєння та військової техніки Сухопутних військ. – Національна академія сухопутних військ імені гетьмана Петра Сагайдачного. – 2017. – Р.283-284.

Popovych D.I., Savka S.S., Srednytski A.S., Venhryn Y.I. Photoluminescent Properties of the Complex Metal Oxide Nanopowders // E-MRS 2017 Spring Meeting. Symposium N: Semiconductor nanostructures towards electronic and opto-electronic device. – E-MRS. – 2017.

Ostafiychuk B.K., Bovgyra R.V., Popovych D.I., Savka S.S., Srednytski A.S., Venhryn Y.I. Obtaining, Structure and Physicochemical Properties of Nanopowder Metal Oxides for Gas Sensors // **XVI International Conference On Physics And Technology Of Thin Films And Nanosystems.** – Vasyl Stefanyk Precarpathian National University. – 2017. – P.240.

Bovgyra R.V., Popovych D.I., Bovgyra O.V. First principle study of native point defects in ZnO nanoclusters. // **International research and practice conference “Nanotechnology and nanomaterials (NANO-2017)”**. Abstract book. (23-26 August 2017). – Chernivtsi, Ukraine, 2017. – P. 148.

Savka S.S., Popovych D.I., Srednytski A.S. Molecular dynamics simulations of the oxidation of zinc nanoclusters // **5th International research and practice conference «Nanotechnology and Nanomaterials» (NANO-2017)** (Chernivtsi, Ukraine, 23-26 August, 2017). – Abstract Book. – Kiev: Burlaka. – 2017. – P.515.

Popovych D.I., Savka S.S., Srednytski A.S., Venhryn Y.I. Photoluminescent properties of complex metal oxide nanopowders for gas sensing // **5th International research and practice conference «Nanotechnology and Nanomaterials» (NANO-2017)** (Chernivtsi, Ukraine, 23-26 August, 2017). – Abstract Book. – Kiev: Burlaka. – 2017. – P.341.

Гаврилів Д., Бовгира О., Бовгира Р., Коваленко М. Моделювання структури та електронного енергетичного спектру кластерів ZnO за допомогою методу функціоналу густини (DFT) оптимізованого молекулярною динамікою // Міжнародна конференція молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики **ЕВРИКА-2018**. Тези доповідей. (15-17 травня 2018 р.). – Львів, Україна, 2018. – с. С2.

Venhryn Yu.I., Kolomys O.F., Luchechko A.P., Srednytski A.S., Popovych D.I., Strelchuk V.V. Optical Properties of ZnO and TiO_2 Nanopowders, Obtained by Pulsed Laser Reactive Ablation. // **E-MRS Spring Meeting, Symposium N: Nanostructures for phononic applications.** (18-22 June, 2018). – Strasbourg, France, 2018. – OWIJ7.

Venhryn Yu.I., Bovgyra R.V., Savka S.S., Srednytski A.S., Popovych D.I. Photoluminescent properties of doped ZnO nanopowders for gas sensors. // **International research and practice conference “Nanotechnology and nanomaterials (NANO-2018)”**. Abstract book. (27-30 August 2018). – Kyiv, Ukraine, 2018. – P. 522.

Бовгира Р., Бовгира О., Попович Д., Середницький А. Дослідження власнодефектної структури нанокластерів $(\text{ZnO})_n$ ($n=34, 60$) методом теорії функціонала густини. // **Наукова конференція “Фізика неупорядкованих систем” (ФНС’2018)**. Матеріали конференції. (16 жовтня 2018 р.). – Львів, Україна, 2018.

Venhryn Y.I., Savka S.S., Bovgyra R.V., Zhyrovetsky V.M., Srednytski A.S., Popovych D.I. Obtaining, Structure and Gas Sensors Properties of Nanopowder Metal Oxides // **XVII International**

Conference On Physics And Technology Of Thin Films And Nanosystems. – Vasyly Stefanyk Precarpathian National University. – 2019. – P.28.

Бовгира Р.В., Венгрин Ю.І., Жировецький В.М., Павлюк В.С., Попович Д.І., Савка С.С., Середницький А.С. Газосенсорна система на основі нанопорошкових матеріалів // **Міжнародна науково-технічна конференція "Перспективи розвитку озброєння та військової техніки сухопутних військ"** Збірник тез (16-17 травня, 2019). – Львів, Україна, 2019. – P.15.

Венгрин Ю. Фотолюмінесцентні властивості нанопорошкових ZnO:(Mg, In) у газах. // Конференція молодих вчених **"Підстригачівські читання – 2019"**. Матеріали конференції. (27-29 травня 2019 р.). – Львів, Україна, 2019.

Савка С. Моделювання методом молекулярної динаміки процесів адсорбції газів на нанокластерах ZnO. // Конференція молодих вчених **"Підстригачівські читання – 2019"**. Матеріали конференції. (27-29 травня 2019 р.). – Львів, Україна, 2019.

Venhryn Yu.I., Savka S.S., Bovhyra R.V., Zhyrovetsky V.M., Serednytski A.S., Popovych D.I. Obtaining, Structure and Gas Sensor Properties of Nanopowder Metal Oxides // **XVII International Freik Conference on Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems (ICPTTFN-XVII)** Abstract book (May 20-25, 2019). – Ivano-Frankivsk, Ukraine, 2019. – P.28.

Dzikovskyi V.Ye., Bovgyra O.V., Kovalenko M.V., Bovhyra R.V. A DFT study for adsorption of CO and H₂ on Pt-doped ZnO nanocluster // **7th International Conference "Nanotechnologies and Nanomaterials" NANO-2019.** Abstract book (27 - 30 August, 2019). – Lviv, Ukraine, 2019. – P.102.

Venhryn Yu.I., Savka S.S., Bovhyra R.V., Serednytski A.S., Popovych D.I. The peculiarities of doped ZnO nanopowders luminescence in gas // **7th International Conference "Nanotechnologies and Nanomaterials" NANO-2019** Abstract book (27 - 30 August, 2019). – Lviv, Ukraine, 2019. – P.416.

Lazoryk I.V., Venhryn Yu.I., Serednytski A.S., Popovych D.I. Effect of electron scattering by impurity on the electronic structure, type and spatial characteristics of nanoscale regions of magnetic ordering in alloys // **XII International Conference "Electronic Processes in Organic and Inorganic Materials" (ICEPOM-12)** Abstract book (01 – 05 June, 2020). – Kamianets-Podilskyi, Ukraine, 2020. – P. 127.

Venhryn Yu.I., Pawluk. V.S., Serednytski A.S., Popovych D.I. Photoluminescence in gas of (Ca) Mg-doped ZnO nanopowders. // **8th International Conference "Nanotechnologies and Nanomaterials" NANO-2020** (26 - 29 August, 2020). – Lviv, Ukraine, 2020. – P.365.

Bovgyra R.V., Popovych D.I., Bovgyra O.V. First principle study of electronic properties of ZnO nanoclusters with native point defects during gas adsorption // **8th International Conference "Nanotechnologies and Nanomaterials" NANO-2020** (26 - 29 August, 2020). – Lviv, Ukraine, 2020.

Savka S.S., Popovych D.I., Serednytski A.S. Molecular dynamics simulation of adsorption processes on the surface of ZnO nanoclusters // **8th International Conference "Nanotechnologies and Nanomaterials" NANO-2020** (26 - 29 August, 2020). – Lviv, Ukraine, 2020. – P. 512.