

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
КАФЕДРА КОМП'ЮТЕРИЗОВАНИХ СИСТЕМ УПРАВЛІННЯ

«До захисту допущено»

Завідувач кафедри КСУ

\_\_\_\_\_ Петро ЛЕОНТЬЄВ

(підпис) (Ім'я та ПРІЗВИЩЕ)

\_\_\_\_\_ 2024 р.

**КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА**

**на здобуття освітнього ступеня магістр**

зі спеціальності 176 «мікро- та наносистемна техніка»

освітньо-професійної програми Нанотехнології та біомедичні системи

на тему: Атомістичне моделювання декорування двовимірного карбїду

титану срібними наночастинками

Здобувача освіти групи ФЕ.м-31 Мойсеєнка Антона Ігоровича

Кваліфікаційна робота містить результати власних досліджень.

Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на

відповідне джерело

\_\_\_\_\_

(підпис)

Антон МОЙСЕЄНКО

(Ім'я та ПРІЗВИЩЕ здобувача)

Керівник, д.ф.-м.н., доц. Вадим БОРИСЮК

\_\_\_\_\_

(посада, науковий ступінь, вчене звання)

(підпис)

Ім'я та ПРІЗВИЩЕ)

Суми 2024

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
Кафедра комп'ютеризованих систем управління

ЗАТВЕРДЖУЮ:

Зав. кафедри КСУ

\_\_\_\_\_ Петро ЛЕОНТЬЄВ

\_\_\_\_\_ 2024 р.

**ЗАВДАННЯ**

на кваліфікаційну роботу магістра здобувачу вищої освіти

Мойсеєнку Антону Ігоровичу

(Прізвище, ім'я, по-батькові повністю)

1. Тема кваліфікаційної роботи: Атомістичне моделювання декорування двовимірного карбїду титану срібними наночастинками.

затверджена наказом ректора СумДУ № 1156- VI від " 08 " листопада 2024 р.

2. Термін здачі студентом закінченої роботи: 4 грудня 2024 р.

3. Вхідні дані до кваліфікаційної роботи:

Атомістичне моделювання конфігурацій на гідрофільній поверхні в ПЗ Ovito-  
Scientific data visualization and analysis software

4. Зміст кваліфікаційної роботи (питання, що підлягають розробленню):

Літературний огляд наноструктурних матеріалів: основні концепції та  
підходи; Методологія атомістичного моделювання процесу декорування;  
результати числового атомістичного моделювання конфігурацій з  
використанням програмного забезпечення.

## 5. Перелік графічних матеріалів:

Результати моделювання конфігурацій на різних поверхнях;

Презентація із наведеними результатами виконаного індивідуального завдання

## 6. Календарний план виконання роботи

Номер етапу	Зміст етапу виконання роботи	Термін виконання
1	Огляд наноструктурних матеріалів: основні концепції та підходи	до 23.09.2024р.
2	Опрацювання літератури	до 01.10.2024р.
3	Вивчення методології атомістичного моделювання процесу декорування	до 18.10.2024р.
4	Числове атомістичне моделювання конфігурацій на гідрофобній поверхні	до 31.10.2024р.
5	Числове атомістичне моделювання конфігурацій на гідрофільній поверхні	до 15.11.2024р.
6	Аналіз результатів дослідження та формування висновків	до 28.11.2024р.
7	Оформлення кваліфікаційної роботи магістра	до 04.12.2024р.

## 7. Дата видачі завдання " 09 " вересня 2024 р.

Керівник проекту:

доц., к.ф.-м.н  
(науковий ступінь, вчене звання, посада)

(підпис)

Вадим БОРИСЮК  
(Ім'я ПРІЗВИЩЕ)

Здобувач:

студент гр. ФЕ.м-31  
(шифр групи)

(підпис)

Антон МОЙСЕЄНКО  
(Ім'я ПРІЗВИЩЕ)

## АНОТАЦІЯ ЗВІТУ

**Об'єктом дослідження** є фізичні процеси, які відбуваються під час росту відповідних наночастинок на поверхні двовимірного карбїду титану.

**Метою** цього дослідження є моделювання процесу росту наночастинок на поверхні двовимірного карбїду титану  $Ti_2C$  за допомогою теоретичних і чисельних алгоритмів.

**Методи дослідження** - методи класичної молекулярної динаміки, методи статистичної фізики та обчислювальної математики тощо з виділенням моделей замкнених атомів, порожнистих і трикомпонентних потенціалів. Розроблено комп'ютерну модель для чисельного моделювання процесу росту срібних наночастинок. Двовимірна поверхня карбїду титану, створена в рамках класичних методів молекулярної динаміки. Розглянутий підхід дозволяє моделювати осадження атомів інших металів на поверхню двовимірних карбїдів з повільно зростаючою площею поверхні.

Враховуючи теоретичне розуміння процесу осадження атомів срібла на поверхні двовимірного карбїду титану з використанням цих пізніх значень поверхні росту, було проведено серію моделювань, а також проаналізовано гідрофобні та гідрофільні випадки. Найбільш поширений - гідрофільний тип.

Робота викладена на 37 сторінках, у тому числі містить 13 рисунків, 2 таблиці, список цитованої літератури 46 джерел.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** ПОКРИТТЯ, НІТРИД ТИТАНУ, ДЕКОРУВАННЯ, МОДЕЛЮВАННЯ, АНАЛІЗ.

## ЗМІСТ

ВСТУП	6
РОЗДІЛ 1 НАНОСТРУКТУРНІ МАТЕРІАЛИ: ОСНОВНІ КОНЦЕПЦІЇ ТА ПІДХОДИ	8
1.1 Категорії наноструктурних матеріалів	8
1.2 Мікроструктури та їх вплив на фізичні властивості	13
РОЗДІЛ 2 МЕТОДОЛОГІЯ АТОМІСТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ДЕКОРУВАННЯ	21
2.1 Опис міжатомної взаємодії у карбіді титану	21
2.2 Взаємодія між наночастинками срібла та поверхнею двомірної наноструктури	23
РОЗДІЛ 3 РЕЗУЛЬТАТИ ЧИСЛОВОГО АТОМІСТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ	25
3.1 Базові параметри числового моделювання	25
3.2 Моделювання декорування гідрофобної поверхні	27
ВИСНОВКИ	32
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	33

## ВСТУП

Декорування (англ. decorating) поверхонь матеріалів за допомогою металевих наночастинок привертає все більшу увагу дослідників у галузі нанотехнологій. Особливо актуальним є напрямок покращення властивостей двовимірних плівкових матеріалів шляхом декорування їх поверхні широким спектром матеріалів, таких як полімери, оксиди металів, наночастинки металів [1]. Наприклад, існує багато досліджень, спрямованих на хімічну модифікацію графену за допомогою електрохімічних застосувань, утворення серпоподібних клітин та інших методів. [2]. Ці методи дають змогу покращити властивості даного матеріалу при використанні для конкретних вимог. Окрім графену, МХени (MXenes) також модифікували поверхню металевими наночастинами. Ці матеріали належать до великої групи двовимірних карбідів і нітридів перехідних металів товщиною від 3 до 7 атомних шарів [3]. Загальна хімічна формула максена  $M_{n+1}X_n$ , де М - перехідний метал, а Х - вуглець або азот. Максен представляє особливий інтерес завдяки своїм унікальним електрохімічним властивостям і має багато потенційних застосувань як матеріал для суперконденсаторів і батарей [4].

Окрім покращених електрохімічних властивостей, максени також характеризуються чудовими механічними параметрами, а саме високим модулем пружності (теоретичне значення  $>500$  ГПа) та жорсткістю на вигин [5]. Ці властивості відкривають можливість використання максенів як мембранного і резонаторного матеріалу в різних нанотехнологічних пристроях, а також як армування для полімерних компаундів, захисних покриттів тощо. [6].

Як повідомляють останні дослідження [7] використання металевих наночастинок для збільшення поверхні розділу між електродом та електролітом продемонстрували перспективу застосування нанокompозитів графен-метал в якості матеріалу для електродів в електрохімічних конденсаторах. Так, зокрема срібні (Ag) наночастинки мають найвищу провідність серед

благородних металів та характеризуються найбільшим відношенням площини поверхні до об'єму на наномасштабах, а отже є перспективними матеріалами для побудови пристроїв для зберігання енергії, де потрібна значна площа поверхні [8].

Одним зі способів виготовлення композитів графену та срібних наночастинок є мікрохвильова обробка (ангд. microwave assisted) [9]. Така технологія також може бути застосована і для виготовлення композитів з максенами. Так в роботі [9] повідомляється про виготовлення максен/Ag композитів для літій-іонних акумуляторів, які демонструють підвищену швидкість заряду та кількість циклів зарядка/розрядка.

Таким чином комп'ютерне моделювання зростання срібних наночастинок на поверхні двовимірних карбідів титану є актуальним завданням сучасного матеріалознавства, яке може дозволити розширити уявлення про зазначені процеси на нанорівні. Окрім цього комп'ютерне моделювання є набагато менш витратним способом досліджень ніж експерименти, які потребують високовартісного обладнання та спеціальних умов і матеріалів. При цьому варто зазначити що теоретичні розрахунки та комп'ютерне моделювання, як правило, дають наближені результати, які якісно збігаються з експериментальними даними, і потребують подальшої верифікації. Тим не менш, моделювання є потужним інструментом дослідження.

# РОЗДІЛ 1 НАНОСТРУКТУРНІ МАТЕРІАЛИ: ОСНОВНІ КОНЦЕПЦІЇ ТА ПІДХОДИ

## 1.1 Категорії наноструктурних матеріалів

Одним із найважливіших досягнень у фізиці та хімії твердого тіла є знання про те, що більшість властивостей твердих тіл залежить від їх мікроструктури: їхнього хімічного складу, розташування атомів (атомної структури) та розміру в твердому тілі, двовимірні або тривимірні. Тобто зміна одного або кількох із цих параметрів змінює властивості твердого тіла. Можливо, найвідомішим прикладом зв'язку між атомною структурою та властивостями матриці є різниця в твердості вуглецю при переході від алмазу до графіту. Відносні флуктуації виявляються, коли атомна структура твердого тіла значно відхиляється від рівноваги або коли розмір твердого тіла зменшується до відстані кількох осей в одному, двох або трьох вимірах. Прикладом останнього є зміна кольору, коли розмір кристалів CdS зменшується до кількох нанометрів. [10-11].

Завдяки синтезу матеріалів і пристроїв з новими властивостями через контрольоване маніпулювання їхньою мікроструктурою на атомному рівні розвивається міждисциплінарна сфера, заснована на фізиці твердого тіла, хімії, біології та матеріалознавстві. Супутні матеріали та обладнання можна розділити на наступні три категорії [12].

До першої категорії належать матеріали та пристрої з невеликими розмірами та розмірами у вигляді наночастинок (окремих, покритих або комбінованих), тонких дротів або тонких плівок. Хімічне осадження з парової фази (VDC), вакуумне напилення (VS), конденсація інертного газу, різні методи аерозольного розпилення, осадження з парової фази, рідкі або перенасичені тверді речовини (кристалічні та аморфні) - це технології, які найчастіше використовуються для створення цього типу мікроструктури.



Поширеними прикладами технологічного застосування матеріалів, властивості яких залежать від такого типу мікроструктури, є каталізатори та напівпровідникові прилади з одно- та багатошаровими структурами квантових ям [13].

Друга категорія включає матеріали та пристрої, в яких нанорозмірна мікроструктура обмежена тонкою (нанометровою) областю поверхні об'ємного матеріалу. ВН (вакуумне напилення), ХОГЗ (хімічне осадження з газової фази), іонна імплантація та обробка лазерним променем є найбільш широковикористовуваними процесами для зміни хімічного складу та атомної структури твердих поверхонь на нанорозмірі. Поверхні з підвищеною корозійною стійкістю, твердістю, зносостійкістю або захисними покриттями (наприклад, алмаз) є прикладами сучасних технологій, де властивості поверхневого шару тонких поверхонь покращуються шляхом створення мікроструктур нанометрового розміру на тонких поверхнях [14-17].

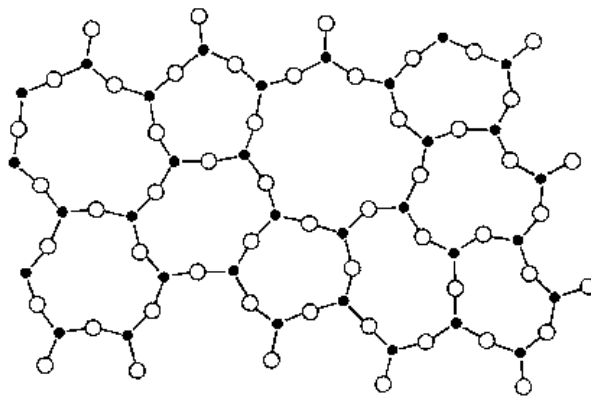


Рисунок 1.1 - Двовимірна модель аморфної речовини  $Al_2O_3$  [18].

Важливою підгрупою цього класу матеріалів є матеріали, поверхні яких латерально структуровані на нанорозмірі шляхом «запису» наноструктури на вільну поверхню. Наприклад, візерунки мають форму мережі нанорозмірних

острівців (наприклад, квантових точок), з'єднаних тонким (нанорозмірним) дротом [19]. Такі зразки можна синтезувати за допомогою фотолітографії з використанням локалізованих зондів (наприклад, скануючої тунельної мікроскопії, методів ближнього поля, фокусування електронного або іонного променя) і процесів осадження на поверхні. Очікується, що процеси та пристрої цього типу відіграватимуть важливу роль у виробництві електронних пристроїв наступного покоління, таких як високоінтегральні схеми, одноелектронні транзистори, квантові комп'ютери тощо. [20].

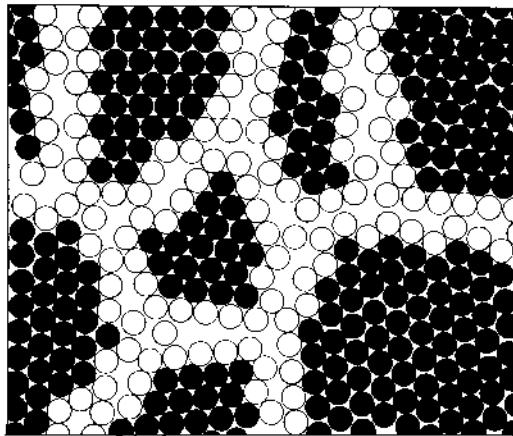


Рисунок 1.2 - Двовірна модель наноструктурованого матеріалу [21]

На рисунку 1.2 атоми в центрі кристала показані чорним кольором, а атоми на поверхні — білими колами. Зміни в атомній структурі призводять до появи високої щільності некогерентних поверхонь розподілу (рис. 1.2) та інших дефектів решітки, таких як дислокації та вакансії. Дефекти решітки — являють собою обмежений стан твердої речовини, що структурно відрізняється від необмежених кристалів і окулярів [21]. У результаті тверда речовина з високою щільністю ядер дефектів структурно відрізняється від бездефектної твердої речовини з таким же середнім хімічним складом. Межа на малюнку 1.2 є прикладом цього ефекту. Тобто невідповідність між сусідніми кристалітами змінює атомну структуру (середню атомну густину,

координацію найближчих сусідів тощо) у граничній області порівняно з ідеальним кристалом. Коли щільність дефектів висока, об'ємна частка дефектних ядер збільшується разом із об'ємною часткою кристалічних областей. Насправді це має місце, коли діаметр кристала порівняний з товщиною межі розділу, як у випадку НСМ (наноструктуровані матеріали), тобто коли розмір кристала становить один або кілька нанометрів [22].

Можна виділити наступні випадки незмішуваних компонентів цього типу в НСМ: розчинні атоми з низькою розчинністю в кристалічній решітці (рис. 1.3) часто відносять до граничних смуг таких як деяка вільна енергія системи, так як легування зменшується, коли великі розчинні атоми розділяються до граничного ядра. Другий випадок наноструктурованих сплавів виникає, коли кристаліти НСМ мають різний хімічний склад. Навіть коли компоненти сполуки в кристалічному та розплавленому станах не змішуються (наприклад, Fe та Ag), у крайовій області НСМ спостерігалось утворення твердого розчину (рис. 1.3) [23].

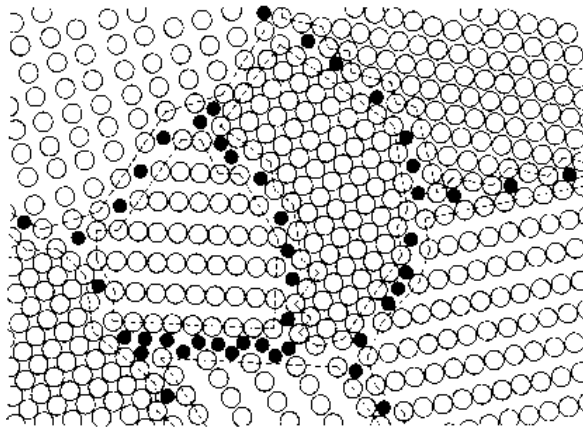


Рисунок 1.3 - Схематична модель структури наноструктурованих сплавів Cu-Bi та W-Ga [23]

Порожні кола представляють атоми Cu або W, відповідно, що утворюють кристали нанометрового розміру. Чорні кола - це атоми Bi або Ga з дотриманням меж в областях великого локального вільного об'єму. Атомні

структури, показані тут, були отримані на основі синхротронного випромінювання та рентгенівської дифракції. [24].

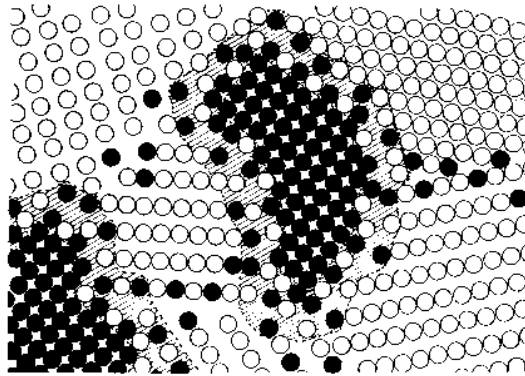


Рисунок 1.4 - Схематична модель нанокристалічних сплавів Ag-Fe за даними Мессбауерської спектроскопії [25].

Сплав складається із суміші нанокристалів Ag і Fe (позначених відкритими і зафарбованими колами відповідно). У напруженій області розділу між кристалами Ag і Fe утворюється твердий розчин атомів Fe в кристалах Ag і атомів Ag в кристалах Fe, хоча ці два компоненти несумісні в рідкому і твердому станах. Подібні ефекти також можуть відбуватися в межах зерен між сусідніми кристалами Fe та Ag [25].

В решті решт, варто зазначити, що НСМ аж ніяк не обмежуються полікристалічними матеріалами, що складаються з типу, показаного на рисунку 1.2. У напівкристалічних полімерах утворюються мікроструктури нанометрового розміру, які складаються з кристалічних і аморфних областей з різною молекулярною структурою або хімічним складом. НСМ є результатом супрамолекулярного хімічного синтезу, коли різні типи молекулярних будівельних блоків незалежно збираються в різні одно-, дво- та тривимірні масиви [26].

## 1.2 Мікроструктури та їх вплив на фізичні властивості

Матеріали з нанорозмірними мікроструктурами можна розділити на рівноважні НСМ і НСМ, далекі від термодинамічної рівноваги відповідно до їх вільної енергії, які називаються «нерівноважними НСМ».

Нерівноважні НСМ - це матеріали, що складаються зі структурних елементів (в основному кристалітів) з характерними розмірами в кілька нанометрів принаймні в одному напрямку (рис. 1.2). Іншими словами, нерівноважні НСМ за своєю суттю неоднорідні в нанорозмірі, складаються з нанорозмірних плям, розділених граничними областями. Різні типи нерівноважних НСМ мають різні об'ємні характеристики, такі як різні або ідентичні хімічні склади, різні або ідентичні атомні структури, різні або ідентичні кристаліти з різними формами та розмірами тощо [27]. Однак розмір і структура об'єму не є єдиними мікроструктурними особливостями, які відрізняють різні НСМ. Власне, гранична зона між ними відіграє схожу роль. Хімічний склад, атомна структура, товщина граничної області однаково важливі для продуктивності НСМ (наприклад, рис. 1.2 і 1.4) [28]. Іншими словами, навіть якщо будівельні блоки кристалітів двох НСМ мають порівняльний розмір, хімічний склад тощо, якщо структури інтерфейсу двох НСМ відрізняються, їх продуктивність може істотно різнитися. Якщо два НСМ синтезуються різними методами, можуть виникнути різні структури інтерфейсу. Наприклад, нанокристалічний нікель (розмір кристалів  $\sim 10$  нм, щільність  $\sim 94\%$ ), отриманий шляхом консолідації порошку нікелю, має нижчу пластичність ( $< 3\%$ ), тоді як нанокристалічний нікель, розмір зерна якого та хімічний склад подібний, може бути широко деформований ( $> 100\%$ ). Основна відмінність, яка спостерігається між двома матеріалами, полягає в енергії, що зберігається в міжфазній області, що вказує на різну структуру розділу. Однією з технологічно привабливих особливостей нерівноважних НСМ є те, що їх структури і властивості можна використовувати за допомогою

препаративних методів, як і всіх нерівноважних систем. Це дозволяє створювати різноманітні мікроструктури, а отже, і властивості.

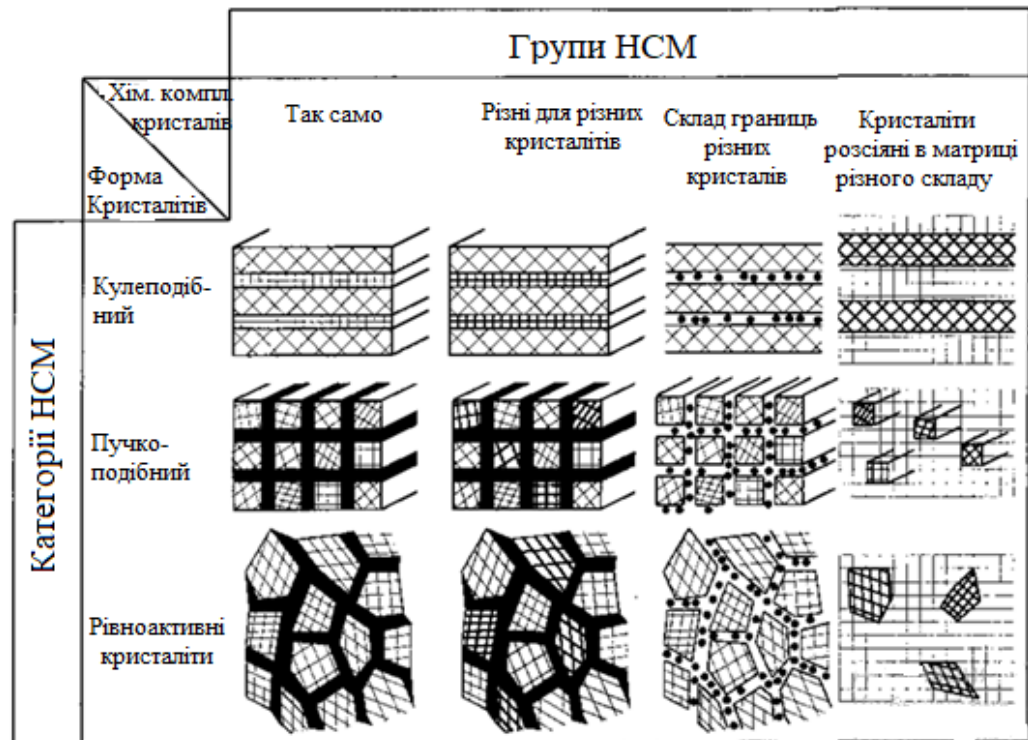


Рисунок 1.5 - Класифікація схеми для НСМ відповідно до їх хімічного складу та розмірності (форми) кристалітів (структурних елементів), що утворюють НСМ [29].

На рисунку 1.5 межі першого та другого типів НСМ позначені чорним, щоб підкреслити різні атомні структури всередині кристала та в межах. У першій категорії хімічний склад (чорної) крайової області та кристала ідентичний. У другій категорії (чорні) межі - це області, де два кристали з різними хімічними складами поєднуються, викликаючи крутий градієнт концентрації [30].

Якщо НСМ складається з тонких голчастих кристалів або плоских двовимірних кристалів (рис. 1.5), складність збільшується в розмірі лише двох або одного з компонентів, залежно від масштабу довжини фізичного явища.

Іншими словами, у цих випадках НСМ стає двовимірною або одновимірною системою щодо цього явища.

Спочатку розглянемо неpolімерні НСМ. Неполімерні НСМ, що складаються з нанорозмірних кристалів, можна класифікувати відповідно до їх хімічного складу та форми або розмірності їх мікроструктурних компонентів, таких як границь і кристалітів (рис. 1.5) [11]. Залежно від кристалічної форми НСМ поділяються на три категорії:

- сарові кристали;
- стрижнеподібні кристали (де товщина шару або діаметр стрижня становить кілька нанометрів);
- НСМ, що складаються з кристалів з одним нанометровим шаром.

Залежно від хімічного складу кристалітів три категорії НСМ поділяються на чотири групи. У найпростішому випадку у першій групі (рис. 1.5) усі кристаліти та крайові області мають однаковий хімічний склад. Приклади НСМ у цій групі включають напівкристалічні полімери, що складаються з кристалічних пластинок, розділених аморфними областями, перша категорія (рис. 1.5) та кристали нанометрового розміру, розташовані рівномірно, наприклад С<sub>60</sub> (третя категорія). НСМ, які належать до групи секторів і складаються з кристалітів з різним хімічним складом на рисунку 1.5 розпізнаються за різною товщиною ліній, використаних при їх виведенні. Структури з квантовими ямами, такі як багатошарові структури, мабуть, є найвідомішими прикладами типу першої категорії. Третя група НСМ створюється, коли відбувається примусова зміна складу між кристалітами та міжфазною областю. У цьому випадку один тип атома, а саме молекули, переважно відокремлюється в міжфазну область, так що структурна модуляція (кристалічна або міжфазна) пов'язана з локальною хімічною модуляцією. НСМ складається з нанометрових кристалів W, що містять атоми Ga.

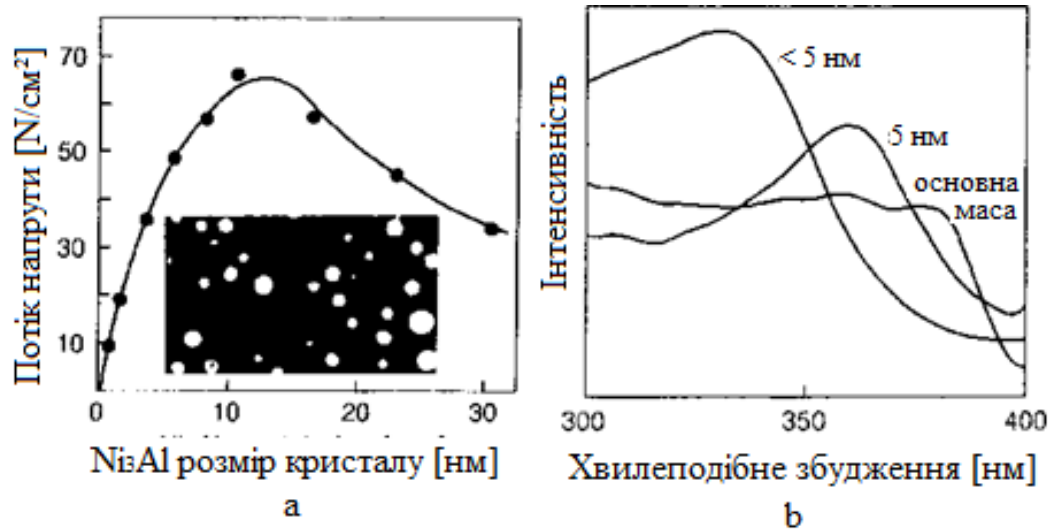


Рисунок 1.6. (а) - Струм навантаження Ni-13 на сплави. Ni, як функція розміру осаду Ni<sub>3</sub>Al, (б) Спектри фотолумінесценції нанокристалічного ZnO з різними розмірами кристалів у порівнянні з об'ємним матеріалом. Довжина хвилі виявлення становила 550 нм [30].

Приклади третьої категорії класифікуються за межами зерен (рис. 1.3). Нещодавно був отриманий несподіваний новий тип такого матеріалу шляхом сплаву Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> і Ga [31]. Було виявлено, що в процесі утворюються нанорозмірні кристали Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, розділені мережею аморфних шарів Ga. Залежно від вмісту Ga, щільність кордонів Ga між кристалами Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> змінюється від менше одного шару до приблизно семи шарів Ga. Четверта група НСМ складається з кристалітів нанометрового розміру - шарів, стрижнів або кристалітів з однаковим акцентом, диспергованих у матриці різного хімічного складу. До цієї групи НСМ відносяться сплави, опромінені опадами. Прикладом такого сплаву є застосування Ni<sub>3</sub>Al, представленого матрицею Ni, отриманою шляхом відпалу перенасиченого твердого розчину Ni-Al. Більшість високотемпературних матеріалів у сучасних авіаційних реактивних двигунах базуються на твердих сплавах Ni<sub>3</sub>Al або Ni (рис. 1.6 (а)).

Нітриди металів, вбудовані в аморфний Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, були отримані за допомогою радіочастотного розряду, постійного струму або плазмового хімічного осадження з парової фази. Важливою характеристикою цих



матеріалів є їх твердість, яка, ймовірно, порівнянна з алмазом або навіть краща за нього. Відомо, що сили пружного зображення вимагають дуже високих напружень, щоб спричинити зусилля зсуву, які розривають нанорозмірні нітридні кристаліти. Однак утворенню тріщини в одному з кристалітів може запобігти пластична аморфна матриця  $\text{Si}_3\text{N}_4$ , що оточує тріснутий кристаліт, тому це високе напруження не призводить до руйнування. Інша група технічно цікавих НСМ - це нанокристалічні магнітні матеріали, які складаються з нанорозмірних кристалітів, вбудованих в аморфну матрицю. Вони виникають в результаті кристалізації аморфних смуг «склоподібних» аморфних металевих структур (Fe, B). Їх мікроструктура характеризується зернами розміром 10-25 нм з фазою b.c.c.-a-FeX, що займає близько 70-80% загального обсягу. Ця фаза однорідно розсіяна в аморфній матриці. Дві групи сплавів, що демонструють найкращі характеристики, є Fe-Cu-Nb-B-Si (FINEMET) і Fe-Zr-Cu-B-Si (NANOPERM). Сплав «Finemet» має індукцію насичення приблизно 1,2 Тл, а його високочастотні властивості можна порівняти з найкращими аморфними металами на основі Co. Видатною властивістю сплаву «Nanoperm» є те, що втрати, зареєстровані на низьких частотах, дуже низькі (<100 Гц), що дають потенціал для застосування в розподілі електроенергії трансформатором.

Однією з помітних властивостей напівкристалічних полімерів є те, що коли ці полімери кристалізуються з розплаву або розчину, коли кристалізація не відбувається під високим тиском або коли для кристалізації використовується відпал під високим тиском, завжди виникає наноструктурна морфологія. Однак, коли полімер кристалізується з розчину або розплаву під тиском навколишнього середовища, створюється багат шарова структура, що складається з ступенів монокристалів полімеру. У середині кристала атоми, які утворюють полімерні ланцюги, розташовані в тривимірному (кристалічному) порядку. Неконгруентна міжфазна область між сусідніми кристалами складається з макромолекул, які згорнуті назад усередині того самого кристала та з'єднують сусідні молекули між сусідніми кристалами. Типова товщина

кристалічних пластин становить близько 10-20 нм. Ці відносно невеликі товщини кристалів були інтерпретовані з точки зору більшого зародження в ланцюжкових кристалах порівняно з розтягнутими кристалами, або з точки зору заморожених рівноважних структур. При температурі кристалізації надлишкова ентропія, пов'язана з компонентами ланцюга, знижує вільну енергію Гіббса ковзаючого згорнутого ланцюга нижче рівня кристалізації подовженого ланцюга. Тому при температурі кристалізації кристалічні ланцюги додаються, а кристали з розширеними ланцюгами не додаються. Оцінюючи надлишкову ентропію, пов'язану зі складеними ланцюгами, товщина зародкового кристала становить приблизно 10–20 нм. Варто звернути увагу, що неповне зародження кристалів під час кристалізації не обмежується полімерними матеріалами. Наприклад, надлишок ентропії, пов'язаний з вакансіями в елементарних кристалах, знижує рівноважну концентрацію вакансій при температурі плавлення, тобто утворення неповного кристала. Для металів ця рівноважна концентрація вакансій при точці плавлення зазвичай становить близько  $10^4$ .

Залежно від умов кристалізації ланцюгова структура може призвести до дуже складних нанорозмірних мікроструктур. Сфероліти, що складаються з радіально розташованих скручених пластинок, віддають перевагу неподіленим розплавам. Однак, коли розплав піддається напрузі під час затвердіння, залежно від швидкості деформації та температури кристалізації можуть виникнути різні морфології, такі як переохолодження. Висока температура кристалізації та низька деформація сприяють утворенню шаруватой морфології, а поєднання високої температури та високої швидкості деформації призводить до голчастих пристроїв. Низька температура і висока швидкість деформації призводять до утворення орієнтованих міцелярних структур. Перехід між цими формами безперервний, і їх суміші також можуть бути отримані за відповідних умов. Шлях до подальшого збільшення різноманітності морфології наноструктур знайдено у виробництві багатокомпонентних полімерних систем, так званих полімерних сумішей. У

сумішах, що складаються з кристалізованих і аморфних (некристалічних) компонентів, утворюються наступні типи морфології наноструктурованих полімерних сумішей.

1) Кристалізований компонент, сфероліт, росте в матриці, що складається переважно з аморфних полімерів.

2) Аморфні компоненти можуть міститися в міжміцелярних областях сферолітів кристалізованих полімерів. Сфероліти – заповнення простору.

3) Аморфні компоненти містяться в сферолітах кристалізованих полімерів і можуть утворювати домени з більшими розмірами, ніж домени між фрагментами.

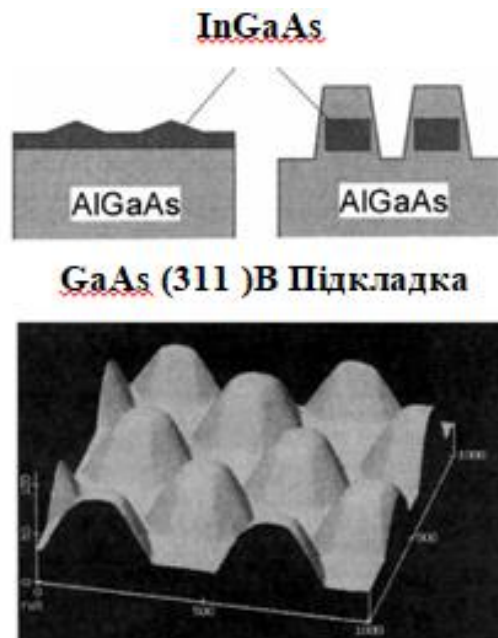


Рисунок 1.7 (а) Модель зростання похованих квантових точок InGaAs в AlGaAs. (б) СТМ поверхні кристала AlGaAs [31]. Під поверхнею поховані маленькі квантові точка-кристали  $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.4}\text{As}$  (а). Кристаліти періодично влаштовані [31].

Для сумішей двох кристалізованих компонентів чотири найпоширеніші форми:

- 1) Кристали обох компонентів дисперговані в аморфній матриці.
- 2) Один компонент кристалізується у формі кулі, тоді як інший компонент кристалізується більш простим способом, наприклад, складеними кристалами.
- 3) Обидва компоненти мають чіткі сферолітні структури.
- 4) Обидва компоненти кристалізуються одночасно, утворюючи так звані змішані сфероліти, що містять пластинки обох полімерів.

## РОЗДІЛ 2 МЕТОДОЛОГІЯ АТОМІСТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ДЕКОРУВАННЯ

### 2.1 Опис міжатомної взаємодії у карбіді титану

Взаємодії атомів у двовимірному карбіді титану  $Ti_2C$  були розраховані в рамках розробленої раніше моделі, що поєднує метод вбудованих атомів [32, 33] з попарними та тричастинковими міжатомними потенціалами [34-37]. Таким чином, для моделювання металевих зв'язків між атомами титану використовується підхід ЕАМ (англ. Embedded atom method - метод зануреного атому), а енергію взаємодії між атомами кристала можна виразити як:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i,j,i \neq j} \varphi(r_{ij}) + \sum_i F(\rho_i) \quad (2.1)$$

де перший доданок  $\varphi(r_{ij})$  відповідає парній енергії між атомами  $i$  та  $j$  що знаходяться на відстані  $r_{ij}$ , та має аналітичну форму:

$$\varphi(r) = \frac{A \cdot \exp[-a(\frac{r}{r_e} - 1)]}{1 + (\frac{r}{r_e} - \kappa)^{20}} - \frac{B \cdot \exp[-\beta(\frac{r}{r_e} - 1)]}{1 + (\frac{r}{r_e} - \lambda)^{20}} \quad (2.2)$$

Другий доданок  $F(\rho_i)$  представляє енергію занурення, визначену густиною електронів  $\rho_i$ , і обчислюється в два етапи. Спочатку нам потрібно обчислити електронну густину  $\rho_i$  за такою формулою::

$$\rho_i = \sum_{i,j,i \neq j} f(r_{ij}) \quad (2.3)$$

та

$$f(r) = \frac{f_e \cdot \exp[-\beta(\frac{r}{r_e} - 1)]}{1 + (\frac{r}{r_e} - \lambda)^{20}} \quad (2.4)$$

Наступним кроком розраховується енергія занурення, для чого необхідно скористатись одним з трьох наступних виразів:

$$F(\rho) = \sum_{i=0}^3 F_{ni} \left( \frac{\rho}{\rho_n} - 1 \right)^i, \quad \rho < \rho_n, \quad \rho_n = 0,85\rho_e \quad (2.5)$$

$$F(\rho) = \sum_{i=0}^3 F_i \left( \frac{\rho}{\rho_e} - 1 \right)^i, \quad \rho_n \leq \rho < \rho_0, \quad \rho_0 = 1,15\rho_e \quad (2.6)$$

$$F(\rho) = F_e \left[ 1 - \ln \left( \frac{\rho}{\rho_e} \right)^n \right] * \left( \frac{\rho}{\rho_e} \right)^n, \quad \rho_0 \leq \rho \quad (2.7)$$

Значення усіх параметрів, що входять у формули (2.2)-(2.7) наведені в таблиці 2.1.

Таблиця 2.1 – Параметри для розрахунку міжатомної взаємодії для атомів титану [30].

Ti			
$r_e$	2,934	$F_{n0}$	-3,204
$f_e$	1,863	$F_{n1}$	-0,198
$\rho_e$	25,565	$F_{n2}$	0,684
$\alpha$	8,775	$F_{n3}$	-2,322
$\beta$	4,680	$F_0$	-3,22
A	0,374	$F_1$	0
B	0,571	$F_2$	0,608
k	0,5	$F_3$	-0,751
$\lambda$	1,0	$\eta$	0,559
$F_e$		-3,219	

Значення параметрів потенціалів для моделювання міжатомної взаємодії в двовимірному карбіді титану  $Ti_2C$  можна знайти в роботі [40].

## 2.2 Взаємодія між наночастинками срібла та поверхнею двомірної структури

Взаємодія атомів срібла між собою в наночастинці, адсорбованій на поверхні  $Ti_2C$  а також в процесі зростання, була описана в рамках методу зануреного атому, аналогічно до взаємодії між атомами титану та відповідно до формул (2.1)-(2.7). Варто зазначити, що такий підхід успішно використовується для моделювання нанесення металевих атомів та зростання багат шарових металевих наноструктур [41]. Параметри моделі для срібла наведені у таблиці 2.2.

Таблиця 2.2 – Параметри для розрахунків міжатомної взаємодії для атомів срібла [42].

Ag			
$r_e$	2,892	$F_{n0}$	-1,729
$f_e$	1,106	$F_{n1}$	-0,221
$\rho_e$	15,539	$F_{n2}$	0,542
$\alpha$	7,945	$F_{n3}$	-0,967
$\beta$	4,237	$F_0$	-1,75
A	0,266	$F_1$	0
B	0,386	$F_2$	0,984
k	0,425	$F_3$	0,521
$\lambda$	0,851	$\eta$	1,149
$F_e$		-1,751	

Ми розглянули два випадки, коли взаємодії між атомами срібла, адсорбованими на поверхні  $Ti_2C$  і атомами титану та вуглецю, що моделювалися різними способами.

Основні взаємодії між атомами, нанесеними на  $Ti_2C$ , відбуваються з атомами титану, розташованими на поверхні зразка. Взаємодію Ag-Ti можна пояснити в рамках моделі ЕАМ сплаву. [43].

В такому випадку, енергія взаємодія розраховується по формулам (2.1) - (2.7), але при цьому для різних атомів а і b парна енергія розраховується як:

$$\varphi^{ab}(r) = \frac{1}{2} * \left( \frac{f^b(r)}{f^a(r)} * \varphi^{aa}(r) + \frac{f^a(r)}{f^b(r)} * \varphi^{bb}(r) \right) \quad (2.8)$$

В іншому розглянутому випадку, для моделювання гідрофобної поверхні, взаємодія атомів срібла та титану була описана парним потенціалом Леннард-Джонса. Взаємодія Ag-C описувалась парним потенціалом Леннард-Джонса в обох випадках.



## РОЗДІЛ 3. РЕЗУЛЬТАТИ ЧИСЛОВОГО АТОМІСТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ

### 3.1 Базові параметри числового моделювання

Нами розглядається система, що складається зі зразка двовимірного карбіду титану  $Ti_2C$  з лінійними розмірами  $20 \times 17$  нм, на поверхню якого осаджувались атоми срібла, як показано на рисунку 3.1 (всі зображення атомістичних конфігурацій виготовлені з використанням програмного забезпечення Ovito- Scientific data visualization and analysis software [44]). Температура зразка  $Ti_2C$  моделювалася на постійному значенні в 30 К з використанням термостату Берендсена [45].

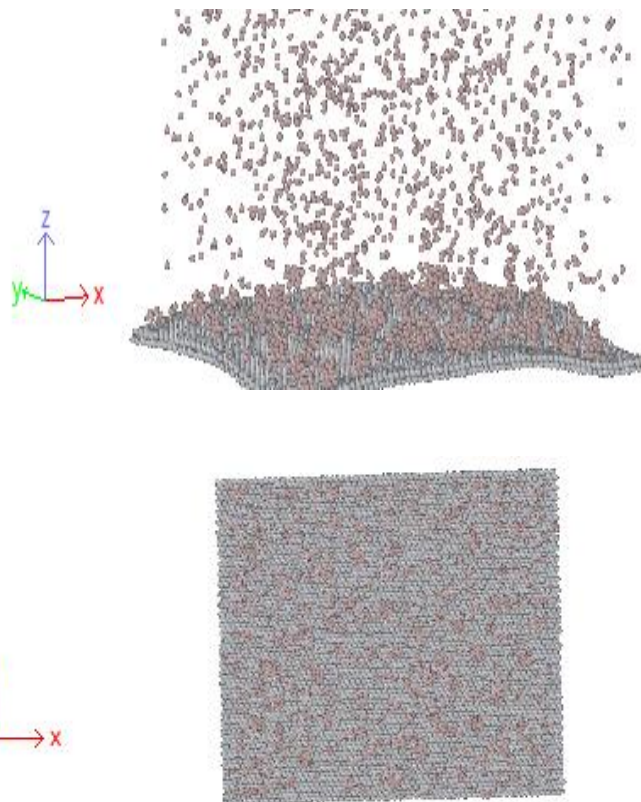


Рисунок 3.1 – Приклад початкової конфігурації досліджуваної системи зі зразком  $Ti_2C$  з лінійними розмірами  $20 \cdot 17$  нм та атомами срібла (атоми на рисунку показані червоним кольором), в процесі їх нанесення на поверхні двовимірної структури .

Процес термічного нанесення був змодельований таким чином. Перед початком нанесення атоми срібла розташовувались на висоті 1,0 нм над поверхнею  $Ti_2C$ , при цьому лінійні координати  $x$  та  $y$  кожного атома срібла обирались за випадковою процедурою. Осаджені атоми мали винятково компоненту швидкості за нормаллю, направлену в сторону орієнтації зростання, а густина потоку була підібрана таким способом, щоб атоми срібла не знаходилися у взаємодії один з одним, до моменту наближення до поверхні структури  $Ti_2C$  на відстань, меншу за 1,0 нм [46]. Після наближення атомів до поверхні вони підвергалися зовнішній дії термостату, і в результаті атоми починали взаємодіяти один з одним, а також з атомами поверхні  $Ti_2C$ , в результаті чого їх швидкість змінювалась у відповідності до розрахованих сил міжатомної взаємодії.

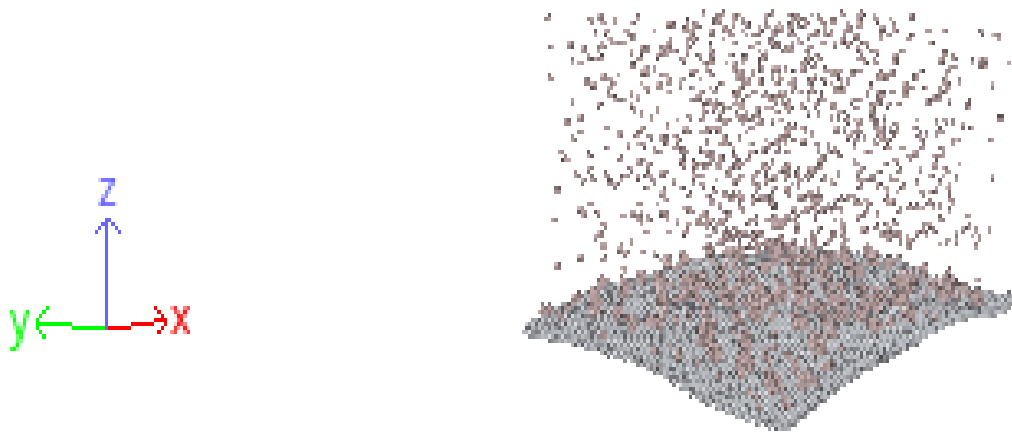


Рисунок 3.2 – Початкова конфігурація плівки  $Ti_2C$  та атомів срібла

Нами було розглянуто три випадки з різними площами поверхнонь, на яку осаджувалися атоми аргентуму. Як було з'ясовано в ході проведення процедури числового моделювання, більш швидкий ріст однієї наночастинки з близькою до кулеподібної формою, відбувався на меншій площі поверхні нанесення. Отже, з метою отримання інформації щодо формування окремої наночастинки срібла на поверхні двовимірного  $Ti_2C$  були також реалізовані додаткові числові моделювання з площами поверхні зростання в 6.0 x 6.0 та

3.0 x 3.0 nm<sup>2</sup>. Конфігурація атомів в даних випадках обиралась аналогічно до загального випадку, показаному на рисунку 3.1. Порівняння усіх початкових конфігурацій експерименту показано на рисунку 3.2 [46].

Також з метою дослідження різних типів взаємодії між плівками Ti<sub>2</sub>C та поглинутими на його поверхні атомами срібла, були розглянуті два випадки, в яких сили між атомами срібла та двовимірним карбідом розраховувались в рамках моделі зануреного атома, а також за допомогою потенціалу Леннарда-Джонса [45].

Перший випадок моделює хімічний зв'язок металевого типу між атомами титану в Ti<sub>2</sub>C та адсорбованими атомами срібла, в той час як другий, моделює Ван дер Ваальсові сили між атомами наночастинки та двовимірного карбиду. В реальних умовах металевий зв'язок відповідає чистій поверхні Ti<sub>2</sub>C без функціональних груп. Взаємодія з ЛД потенціалом моделює загальний випадок адсорбції без утворення хімічного зв'язку [46].

### 3.2 Моделювання декорування гідрофобної поверхні

Як зазначалось вище, в роботі також було розглянуто випадок, коли взаємодія між атомами срібла та атомами зразка Ti<sub>2</sub>C була описана парним потенціалом Леннарда-Джонса. Розгляд зазначеного випадку обумовлений припущенням, що для формування окремих нано-частинок срібла на поверхні двовимірного матеріалу потрібно змоделювати умови при яких кут змочування, атомами срібла поверхні був би близький до 180° (ситуація що відповідає гідрофобній поверхні). Оскільки експерименти з металевим зв'язком в системі призводили до кута змочування близького до 0° (срібло повністю «розтікалось» по поверхні Ti<sub>2</sub>C), то можна очікувати що потрібні умови гідрофобності будуть спостерігатись коли сили взаємодії атомів срібла між собою будуть значно перевищувати взаємодію Ag-Ti.

У випадку так званої «гідрофобної» взаємодії Ag-Ti (див. рисунок 3.3 для порівняння з аналогічною конфігурацією у «гідрофільному» випадку). Як

видно з рисунку, на відміну від металевої взаємодії Ag-Ti у гідروفобному кейсі спостерігається явище острівцевого механізму зростання nano-частинок срібла на поверхні  $Ti_2C$ , тобто замість окремих атомів Ag, на поверхні присутні здебільшого атомарні кластери та наночастинки надзвичайно маленьких розмірів. При збільшенні кількості осаджених атомів розміри таких nano-частинок суттєво збільшуються, паралельно з цим на поверхні утворюються нові центри заростання nano-частинок .

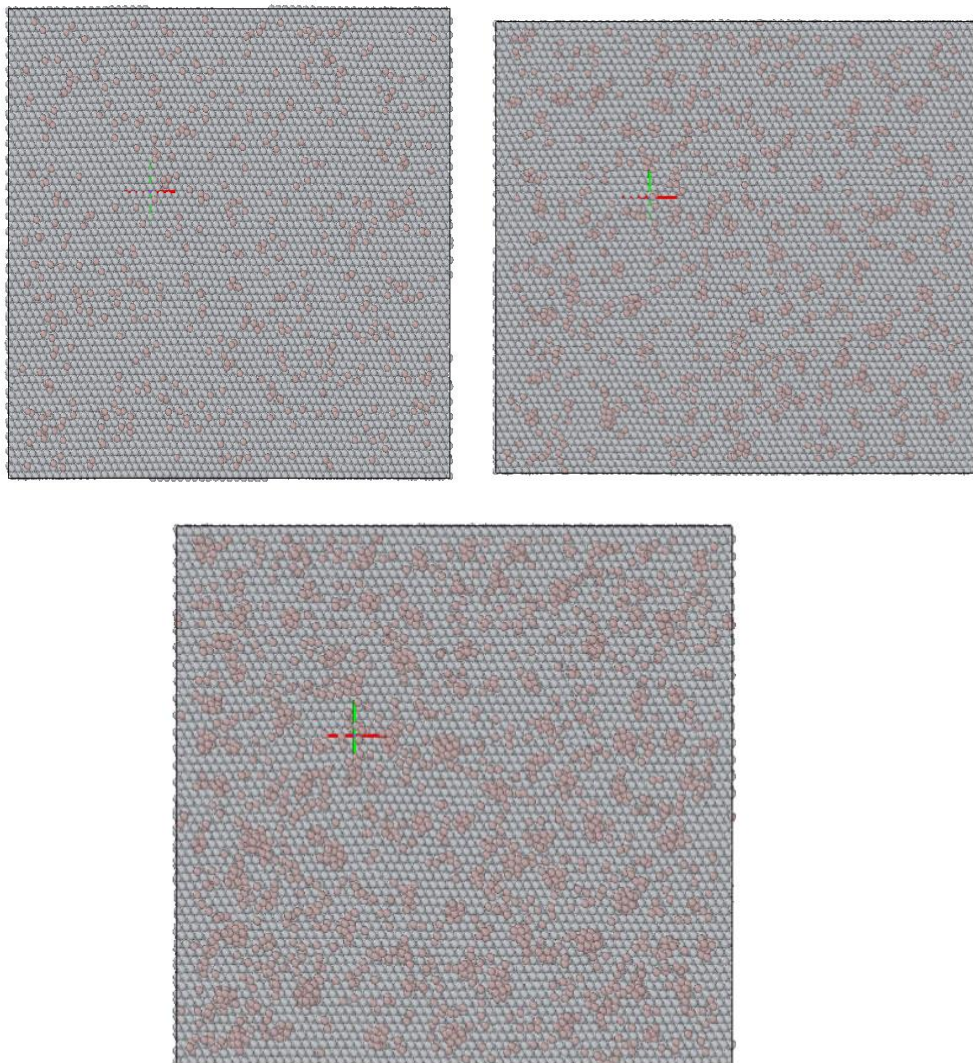


Рисунок 3.3 – Атомістична конфігурація системи з 512, 1024 та 2048 атомами срібла на поверхні  $Ti_2C$  з площею нанесення  $20 \cdot 17 \text{ nm}^2$

Можна очікувати, що при подальшому збільшенні кількості осаджених атомів, окремі наночастинки малих розмірів на поверхні  $Ti_2C$  почнуть перекриватись, що призведе до утворення єдиної наночастинки з розмірами, пропорційними до кількості осаджених атомів. Оскільки проведення такого експерименту потребує значних обчислювальних витрат, то для оптимізації часу експерименту по отриманню наночастинки срібла на поверхні  $Ti_2C$  площа поверхні зростання була зменшена до  $6,0 \cdot 6,0 \text{ nm}^2$ .

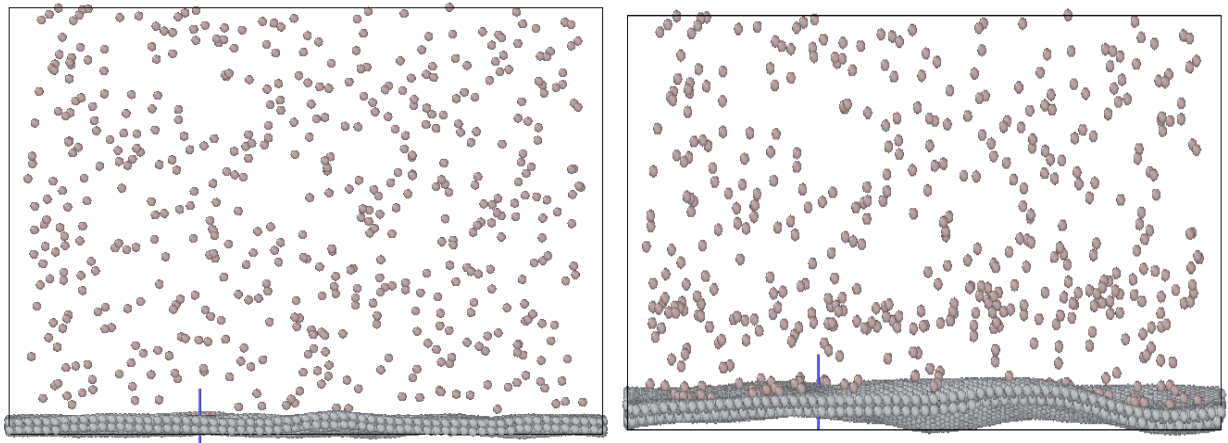


Рисунок 3.4 – Атомістична конфігурація системи після нанесення 512 та 1024 атомів срібла на поверхню  $Ti_2C$  з площею нанесення  $20 \cdot 17 \text{ nm}^2$ , вид збоку .

Як видно з рисунку, зменшення площі поверхні зростання дозволяє отримати декілька нано-частинок срібла на поверхні  $Ti_2C$  за відносно малий час розрахунків, проте для отримання окремої наночастинки срібла на поверхні, також потрібно значне збільшення кількості осаджених атомів, а отже і часу проведення експерименту .

Таким чином, беручи до уваги проведені експерименти можна зробити висновок, що у випадках з гідрофобною та гідрофільною поверхнями  $Ti_2C$ , на які осаджуються атоми срібла, спостерігається якісно різний механізм зростання ансамблю нано-частинок та тонкої плівки срібла в першому та

другому випадках відповідно. На рисунку 3.5 для порівняння наведено атомістичні конфігурації системи з 2048 атомами срібла на поверхні  $Ti_2C$  за гідрофобної та гідрофільної взаємодії .

Така ж сама картина спостерігається і при осадженні атомів срібла на поверхню меншої площі. Так у гідрофобному випадку можна спостерігати формування окремої наночастинки з близькою до сферичної форми, що відповідає куту змочування близькому до  $180^\circ$  , і відповідно у випадку з металевим зв'язком та кутом змочування близьким до  $0^\circ$  можна спостерігати покриття центральної частини поверхні  $Ti_2C$  рівномірним шаром срібла, товщиною у декілька атомів (див. рисунок 3.6).

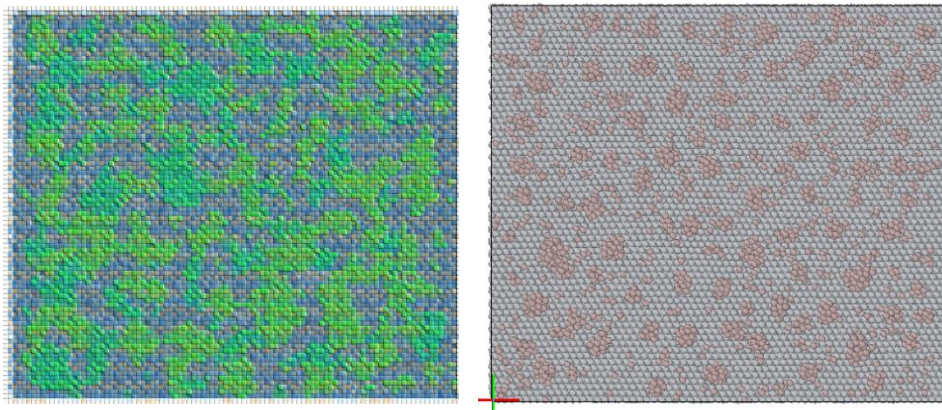


Рисунок 3.5 – Порівняння конфігурації досліджуваної системи з 2048 атомами срібла на поверхні  $Ti_2C$  з площею нанесення  $20 \cdot 17 \text{ nm}^2$  у випадку гідрофобної (ліва панель)[46] та гідрофільної (права панель) взаємодії

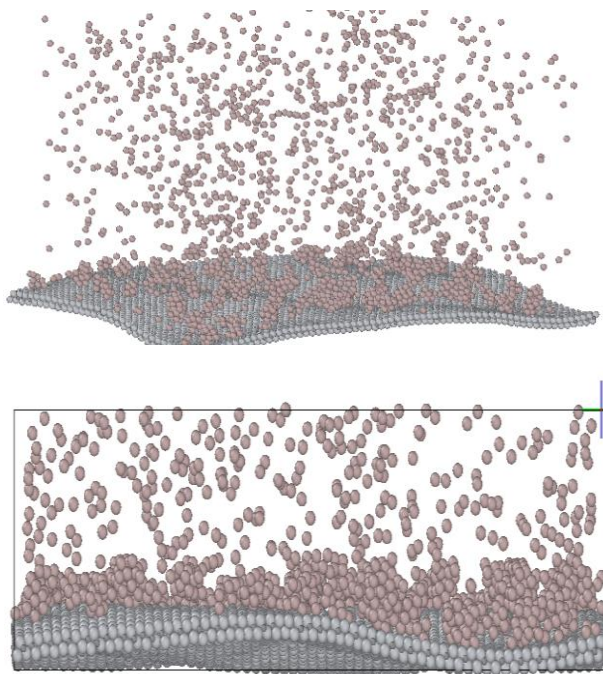


Рисунок 3.6 – Порівняння конфігурації досліджуваної системи з 512 атомами срібла на поверхні  $Ti_2C$  з площею нанесення  $3,0 \cdot 3,0 \text{ nm}^2$  у випадку гідрофобної (ліва панель) та гідрофільної (права панель) взаємодії

## ВИСНОВКИ

В рамках методів класичної молекулярної динаміки розроблено алгоритми, для комп'ютерного моделювання нанесення атомів срібла на поверхню двовимірного карбїду титану зростання срібних нано-частинок. Розроблена модель може бути використана для дослідження аналогічних систем, що складаються з атомів інших металів, а також двовимірних карбїдів.

В рамках виконання кваліфікаційної роботи проведені експерименти, що моделюють нанесення атомів срібла на поверхню двовимірного карбїду титану  $Ti_2C$  з трьома різними значеннями площі поверхні зростання. Для дослідження особливостей формування нано-частинок та процесів зростання також розглянуто два випадки з взаємодією між плівкою та сріблом з утворенням металевого зв'язку та Ван дер Ваальсовими силами, що моделюють нанесення на гідрофільну та гідрофобну поверхню відповідно.

В рамках розробленого підходу отримано модельний зразок системи зі сформованою наночастинкою срібла на поверхні двовимірного карбїду титану для якого були досліджені сили взаємодії між поверхнею плівки та наночастинками. Окрім стаціонарного випадку взаємодія поверхня - наночастинка була розглянута також при зовнішньому навантаженні.

Отримані під час виконання роботи результати можуть бути використанні при створенні гібридних наноматеріалів з покращеними властивостями.



## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. One-step Solution Processing of Ag, Au and Pd@MXene Hybrids for SERS / Elumalai Satheeskumar, Taron Makaryan, Armen Melikyan [et al.] // Scientific Reports. – 2016. – 6. –Article number: 32049.
2. Graphene Oxide: Preparation, Functionalization, and Electrochemical Applications. / Chen, D., Feng, H. & Li, J. // Chem. Rev. – 2012. – 112. – P.6027–6053.
3. Continuous production of nitrogen-functionalized graphene nanosheets for catalysis applications. / Rao, K. S., Senthilnathan, J., Ting, J.-M. & Yoshimura M. // Nanoscale – 2014. –6. – P.12758–12768.
4. Low energy synthesis of nitrogen functionalized graphene/nanoclay hybrid via submerged liquid plasma approach. / Senthilnathan, J. [et al.] // Carbon. –2014. –78. – P.446–454.
5. In situ green synthesis of silver–graphene oxide nanocomposites by using tryptophan as a reducing and stabilizing agent and their application in SERS. / Yang, B. [et al.] // Appl. Surf. Sci. – 2014. –316. – P.22–27.
6. Tuning plasmonic and chemical enhancement for SERS detection on graphene-based Au hybrids. / Liang, X [et al.] // Nanoscale. – 2015. –7. – P.20188–20196.
7. Two-Dimensional Nanocrystals Produced by Exfoliation of  $Ti_3AlC_2$  / M. Naguib, M. Kurtoglu, V. Presser [et al.] // Advanced Materials. – 2011. – 23. – P. 4248.
8. Maleski K. Dispersions of Two-Dimensional Titanium Carbide MXene in Organic Solvents / K. Maleski, V.N. Mochalin, Y. Gogotsi // Chemistry of Materials. – 2017. – 29. – P. 1632.
9. First principles study of two-dimensional early transition metal carbides / M. Kurtoglu, M. Naguib, Y. Gogotsi, M.W. Barsoum // MRS Communications. – 2012. – 2. – P. 133.
10. Borysiuk V. Bending rigidity of two-dimensional titanium carbide

(MXene) nanoribbons: A molecular dynamics study / Vadym N. Borysiuk, Vadym N. Mochalin, Yury Gogotsi // *Computational Materials Science*. – 2018. –V. 143.– P. 418–424.

11. Ag Nanoparticles Decorated 2D Titanium Carbide (MXene) with Superior Electrochemical Performance for Supercapacitors / Lu Li, Na Zhang, Mingyi Zhang[et al.] // *ACS Sustainable Chem. Eng.* – 2018. –6. – P. 7442–7450.

12. Хенгейн А. *Хімічні огляди / Хейнгейн А. – Шампейн: Університет штату Іллінойс, 1998. – 89 с.*

13. Глейтер Х. *Наноструктурні матеріали / Глейтер Х. – Карлсруе: Центр ядерних досліджень Карлсруе, 2001. – 14 с.*

14. Глейтер Х. *Наноструктурні матеріали / Глейтер Х. – Карлсруе: Центр ядерних досліджень Карлсруе, 1998. – 36 с.*

15. Гроссард А. С. *Тонкі плівки / Гроссард А. С. – Ренна: Університет Ренна, 1979. – 56 с.*

16. Глейтер Х. *Механічні властивості та деформаційна поведінка мікроструктурних матеріалів / Глейтер Х., Настасі М., Паркін Д. М. – Дордрехт: Центр досліджень НАТО, 1993. – 233 с.*

17. Гер У. *Твердотільні зв'язки / Гер У., Гонсер У., Глейтер Х. – Дубровнік: Матеріали сьогодні, 2018. – 198 с.*

18. Сур'янараяна С. *Міжнародні огляди матеріалів / Сур'янараяна С., Чаула К. К. – Бірмінгем: Університет Алабами, 1995. – 41 с.*

19. Яго А. *Тонкоплівкові сонячні елементи / Яго А., Сагава С., Акакі І. – Галле: ИКТМК Німеччина, 2017. – 14 с.*

20. Нінан Г. Г. *Матеріали сонячної енергетики / Нінан Г. Г., Карта К. П., Віджаякумар К. П. – Керала: Університет Курали, 2016. – 233 с.*

21. Танг Р. *Колоїдні поверхні поділу / Танг Р., Чжан К., Ценг С. – Сан-Антоніо: Університет Ауер Леді оф Лейк, 2016. – 466 с.*

22. Сурьяванші С. Р. *Матеріали поверхневого поділу / Сурьяванші С. Р., Воруле С. С., Патіль С. С. – Пуна: Пуненський університет, 2015. – 130 с.*

23. Вон Д. Д. Хімічні з'єднання / Вон Д. Д., Хенц О. Д. – Кембрідж: Массаччусетський технологічний інститут, 2012. – 132 с.
24. One-step Solution Processing of Ag, Au and Pd@MXene Hybrids for SERS / Elumalai Satheeshkumar, Taron Makaryan, Armen Melikyan [et al.] // Scientific Reports. – 2016. – 6. –Article number: 32049.
25. Graphene Oxide: Preparation, Functionalization, and Electrochemical Applications. / Chen, D., Feng, H. & Li, J. // Chem. Rev. – 2012. – 112. – P.6027–6053.
26. Continuous production of nitrogen-functionalized graphene nanosheets for catalysis applications. / Rao, K. S., Senthilnathan, J., Ting, J.-M. & Yoshimura M. // Nanoscale – 2014. –6. – P.12758–12768.
27. Low energy synthesis of nitrogen functionalized graphene/nanoclay hybrid via submerged liquid plasma approach. / Senthilnathan, J. [et al.] // Carbon. –2014. –78. – P.446–454.
28. In situ green synthesis of silver–graphene oxide nanocomposites by using tryptophan as a reducing and stabilizing agent and their application in SERS. / Yang, B. [et al.] // Appl. Surf. Sci. – 2014. –316. – P.22–27.
29. Tuning plasmonic and chemical enhancement for SERS detection on graphene-based Au hybrids. / Liang, X [et al.] // Nanoscale. – 2015. –7. – P.20188–20196.
30. Two-Dimensional Nanocrystals Produced by Exfoliation of  $Ti_3AlC_2$  / M. Naguib, M. Kurtoglu, V. Presser [et al.] // Advanced Materials. – 2011. – 23. – P. 4248.
31.  $Ti_3C_2$  MXene as a High Capacity Electrode Material for Metal (Li, Na, K, Ca) Ion Batteries / D. Er, J. Li, M. Naguib, [et al.] // ACS Applied Materials & Interfaces. – 2014. – 6. – P. 11173.
32. Alkylammonium Cation Intercalation into  $Ti_3C_2$  (MXene): Effects on Properties and Ion-Exchange Capacity Estimation / M. Ghidui, S. Kota, J. Halim, [et al.] // Chemistry of Materials. – 2017. – 29. – P. 1099.
33. MXene: a new family of promising hydrogen storage medium / Q. Hu, D.

Sun, Q. Wu, [et al.] // J Phys Chem A.– 2013. – 117. – P. 14253.

34. Novel Electronic and Magnetic Properties of Two-Dimensional Transition Metal Carbides and Nitrides / M. Khazaei, M. Arai, T. Sasaki, [et al.] // Advanced Functional Materials.– 2013. – 23. – P. 2185.

35. Cation Intercalation and High Volumetric Capacitance of Two-Dimensional Titanium Carbide / M.R. Lukatskaya, O. Mashtalir, C.E. Ren, [et al.] // Science.– 2013. – 341. – P. 1502.

36. MXene: a promising transition metal carbide anode for lithium-ion batteries /

M. Naguib, J. Come, B. Dyatkin [et al.] // Electrochemistry Communications.– 2012. – 16. – P. 61.

37. Tang Q. Are MXenes Promising Anode Materials for Li Ion Batteries? Computational Studies on Electronic Properties and Li Storage Capability of  $Ti_3C_2$  and  $Ti_3C_2X_2$  ( $X = F, OH$ ) Monolayer / Q. Tang, Z. Zhou, P.W. Shen // Journal of the American Chemical Society.– 2012. – 134. – P. 16909.

38. Flexible and conductive MXene films and nanocomposites with high capacitance / Z. Ling, C.E. Ren, M.-Q. Zhao [et al.] // Proceedings of the National Academy of Sciences.– 2014. – 111. – P. 16676.

39. Maleski K. Dispersions of Two-Dimensional Titanium Carbide MXene in Organic Solvents / K. Maleski, V.N. Mochalin, Y. Gogotsi // Chemistry of Materials. – 2017. – 29. – P. 1632.

40. First principles study of two-dimensional early transition metal carbides / M. Kurtoglu, M. Naguib, Y. Gogotsi, M.W. Barsoum // MRS Communications. – 2012. – 2. – P. 133.

41. Borysiuk V. Bending rigidity of two-dimensional titanium carbide (MXene) nanoribbons: A molecular dynamics study / Vadym N. Borysiuk, Vadym N. Mochalin, Yury Gogotsi // Computational Materials Science. – 2018. – V. 143. – P. 418–424.

42. Ag Nanoparticles Decorated 2D Titanium Carbide (MXene) with

Superior Electrochemical Performance for Supercapacitors / Lu Li, Na Zhang, Mingyi Zhang [et al.] // ACS Sustainable Chem. Eng. – 2018. – 6. – P. 7442–7450.

43. Atomic scale structure of sputtered metal multilayers / X. W. Zhou, H. N. G. Wadley, R. A. Johnson [et al.] // Acta Materialia. – 2001. – 49. – P. 4005.

44. Humphrey W. VMD: Visual molecular dynamics / W. Humphrey, A. Dalke,

K. Schulten // Journal of Molecular Graphics & Modelling. – 1996. – 14. – P. 33.

45. Molecular-Dynamics with Coupling to an External Bath / H. J. C. Berendsen,

J. P. M. Postma, W. F. Vangunsteren // Journal of Chemical Physics. – 1984. – 81. – P. 3684.

46. Моделювання адсорбції металевих частинок на поверхні двовимірних наноматеріалів / В.М. Борисюк // Звіт про науково-дослідну роботу «Фізичні властивості двовимірних наноматеріалів та металевих нано-частинок» (остаточний). – Суми, СумДУ, 2020. – 37 с.