

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
КРИВОРІЗЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ ПЕДАГОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
Фізико-математичний факультет  
Кафедра фізики та методики її навчання

Допущено до захисту  
Завідувач кафедри

\_\_\_\_\_ Слюсаренко М.А.

(підпис) (прізвище, ініціали)

«\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2023 р.

Реєстраційний номер № \_\_\_\_\_  
«\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2023 р.

МЕТОДИЧНА РОЗРОБКА ТЕМИ «НАНОСТРУКТУРИ, ЩО  
КОНТРОЛЮЮТЬ ГІДРОФОБНІСТЬ ПОВЕРХОНЬ» ДЛЯ  
ЗАСТОСУВАННЯ В НАУКОВО-ДОСЛІДНИЦЬКІЙ РОБОТІ УЧНІВ  
ЛЦЕІВ

Кваліфікаційна робота студента групи  
*ФМм-22*

ступінь вищої освіти *магістр*  
спеціальності *014 Середня освіта*  
(*Фізика*)

Новікова Володимира Миколайовича

Керівник:

доктор фізико-математичних наук,  
професор,  
професор кафедри фізики та  
методики її навчання  
Балабай Руслана Михайлівна

Оцінка:

Національна шкала \_\_\_\_\_

Шкала ECTS \_\_\_\_\_ Кількість балів \_\_\_\_\_

Голова ЕК \_\_\_\_\_

(підпис) (прізвище, ініціали)

Члени ЕК комісії:

\_\_\_\_\_

(підпис) (прізвище, ініціали)

\_\_\_\_\_

(підпис) (прізвище, ініціали)

\_\_\_\_\_

(підпис) (прізвище, ініціали)

\_\_\_\_\_

(підпис) (прізвище, ініціали)

Кривий Ріг – 2023 р.

## ЗАПЕВНЕННЯ

Я, Новіков Володимир Миколайович, розумію і підтримую політику Криворізького державного педагогічного університету з академічної доброчесності. Запевняю, що ця кваліфікаційна робота виконана самостійно, не містить академічного плагіату, фабрикації, фальсифікації. Я не надавав і не одержував недозволену допомогу під час підготовки цієї роботи. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають покликання на відповідне джерело.

Із чинним Положенням про запобігання та виявлення академічного плагіату в роботах здобувачів вищої освіти Криворізького державного педагогічного університету ознайомлений. Чітко усвідомлюю, що в разі виявлення у кваліфікаційній роботі порушення академічної доброчесності робота не допускається до захисту або оцінюється незадовільно.

## ЗМІСТ

ВСТУП .....	3
РОЗДІЛ 1. НАУКОВО-ДОСЛІДНИЦЬКА РОБОТА УЧНІВ ШКОЛИ ЯК ФАКТОР МОТИВАЦІЇ ДО НАВЧАННЯ ФІЗИКИ .....	5
1.1. Методи та технології навчально-виховного процесу, що ґрунтуються на дослідницькій діяльності учнів.....	5
1.2. Засоби розвитку дослідницьких здібностей учнів .....	8
ВИСНОВКИ ДО РОЗДІЛУ 1 .....	20
РОЗДІЛ 2. МЕТОДИЧНА РОЗРОБКА НА ТЕМУ «НАНОСТРУКТУРИ, ЩО КОНТРОЛЮЮТЬ ГІДРОФОБНІСТЬ ПОВЕРХОНЬ» .....	21
2.1. Супергідрофобні нанодропи ZnO: механізми змочуваності та функціональні застосування – огляд літератури .....	21
2.2. Керування за допомогою дефектів перемикання поверхні масиву нанодротів ZnO з гідрофобної на гідрофільну – розрахунки із перших принципів .....	50
ВИСНОВКИ ДО РОЗДІЛУ 2 .....	60
ВИСНОВКИ.....	62
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	64

## ВСТУП

Одним із найважливіших завдань гуманістично орієнтованої держави є сприяння розвитку молодого покоління, задоволення його освітніх і культурних потреб, відповідно до Конвенції ООН про права дитини, Всесвітньої декларації про забезпечення виживання, захисту і розвитку дітей. Втілення в життя вимог цих документів потребує від держави системних дій, спрямованих на пріоритетне ефективне вирішення проблем розвитку та самореалізації кожної особистості. Значну роль у вирішенні цих завдань відіграє своєчасне виявлення та підтримка обдарованих дітей, максимальна реалізація їхніх задатків і здібностей.

Задля ефективного виявлення та підтримки обдарованих дітей вчитель сам повинен удосконалити свої загальні компетентності: знання та розуміння сучасних тенденцій в науці і технологіях; планування та здійснення освітнього процесу через упровадження сучасних світових наукових методів; уміння раціонально використовувати наявні засоби, впроваджувати інновації та ресурсощадні освітні технології в освітній процес; уміння застосовувати отримані знання та навички у професійній діяльності.

Тому **метою даного дослідження** є покращення своєї (автора роботи) фахової компетентності: оволодіння методикою впровадження дослідницької діяльності учнів у процес викладання природничих дисциплін; власне виконання науково-дослідної роботи, зміст якої буде використаний учнями як приклад або як методична розробка актуальної теми «Наноструктури, що контролюють гідрофобність поверхонь» для застосування у своїй науково-дослідній роботі.

Для досягнення цієї мети поставлені наступні **завдання**:

1. Визначити методологічні принципи формування творчої особистості в контексті розвитку сучасного суспільства. Оглянути рекомендації щодо методів формування та розвитку обдарованої особистості.

2. Визначити методологію та інструментарій виявлення інтелектуально обдарованих старшокласників, схильних до дослідницької діяльності.
3. Обрати наукову тему із питань матеріалознавства для створення методичної розробки щодо проведення закінченого наукового дослідження.
4. Здійснити науково-дослідну роботу на тему «Наноструктури, що контролюють гідрофобність поверхонь», технологічний ланцюжок виконання якої включав би традиційні етапи: діагностичний етап, теоретичний, етапи виконання та оцінки результатів.

**Об'єктом дослідження** є організація науково-дослідної діяльності учнів через власні наукові розвідки вчителя.

**Предметом дослідження** є здійснення наукового дослідження на тему «Наноструктури, що контролюють гідрофобність поверхонь», зміст якого буде використаний учнями як приклад або як методична розробка актуальної проблеми для застосування у своїй науково-дослідній роботі.

**Структура роботи:** вступ, два розділи, висновки до розділів, загальні висновки, список використаних джерел. Загальний обсяг роботи 73 сторінки.

Вважаю за потрібне висловити подяку аспіранту кафедри фізики та методики її навчання, асистенту кафедри інформатики та прикладної математики Степанюку Олександрю Миколайовичу за допомогу під час виконання дослідження змочуваності нанодротів ZnO, результати якого увійшли в магістерську роботу.

## **РОЗДІЛ 1. НАУКОВО-ДОСЛІДНИЦЬКА РОБОТА УЧНІВ ШКОЛИ ЯК ФАКТОР МОТИВАЦІЇ ДО НАВЧАННЯ ФІЗИКИ**

### **1.1. Методи та технології навчально-виховного процесу, що ґрунтуються на дослідницькій діяльності учнів**

Сучасний розвиток освіти диктує нові підходи в організації діяльності учнів на уроках та в позаурочний час. Технологія класно-урочної системи протягом століть виявлялася найбільш ефективною для масової передачі знань, умінь та навичок молодому поколінню. Сьогодні акцент переноситься на виховання справді вільної особистості, на формування в учнів здатності самостійно мислити, здобувати і застосовувати знання, ретельно обмірковувати прийняті рішення і чітко планувати дії, ефективно співпрацювати в різноманітних за складом і профілем групах, бути відкритими для нових контактів і культурних зв'язків. Це вимагає широкого впровадження в освітній процес альтернативних форм і способів освітньої діяльності. Цим і обумовлено введення в навчально-виховний процес методів та технологій, що ґрунтуються на дослідницькій діяльності учнів [1-50]. Зупинимося докладніше на різних видах дослідницької діяльності школярів.

Науково-дослідницька діяльність учнів – це така форма організації роботи, яка пов'язана із розв'язанням творчого дослідницького завдання із заздалегідь невідомим результатом, і передбачає наявність основних етапів, характерних для дослідження в науковій сфері, тобто постановку проблеми, вивчення теорії, присвяченої даній проблематиці, підбір методик дослідження і практичне оволодіння ними, збір власного матеріалу, його аналіз та узагальнення, науковий коментар, власні висновки. Будь-яке дослідження, неважливо, в якій області природничих або гуманітарних наук воно виконується, має подібну структуру. Такий ланцюжок є невід'ємним елементом дослідницької діяльності, нормою її проведення.

Проектна діяльність учнів – це спільна навчально-пізнавальна, творча або ігрова форма організації роботи школярів, що має спільну мету, узгоджені методи та способи діяльності і спрямована на досягнення загального результату. Неодмінною умовою проектної діяльності є наявність заздалегідь вироблених уявлень про кінцевий результат, етапи здійснення (вироблення концепції, визначення цілей та завдань проекту, доступних і оптимальних ресурсів) та реалізації проекту, включаючи його осмислення і рефлексію результатів діяльності.

Проектно-дослідницька діяльність – діяльність з проектування власного дослідження, що припускає виділення цілей і завдань, принципів відбору методик, планування ходу дослідження, визначення очікуваних результатів та необхідних ресурсів. Є організаційною рамкою дослідження.

Далі піде мова про організацію науково-дослідницької роботи школярів. Така діяльність має ряд своїх особливостей і займає значне місце в системі позаурочної роботи. Але для того, щоб досягти в цьому напрямку позитивних результатів, необхідним є виконання цілого ряду умов.

Головне – високий рівень викладання в школі і наявність педагогів, готових здійснювати цю роботу. Значну роль відіграє і сприятливий мікроклімат в колективі учнів, однак вирішальним є наявність школярів, здатних до даного виду діяльності.

У школі все частіше говорять про ведення дослідницької роботи учнями середнього і старшого шкільного віку, але досвід керування написанням наукових робіт та врахування психологічних вікових особливостей школярів свідчить про те, що дослідження є особливо вдалим і мають позитивні результати, коли вчитель починає працювати з учнем вже з 5-го класу. Така діяльність формує у школярів навички пошукової роботи, уміння обробляти отримані дані, узагальнювати і систематизувати, виховує самостійність, впевненість у собі, розкутість, уміння відстоювати власну точку зору. У подальшому робота вчителя зводиться до складання сумісно з учнями розширеного плану наукової роботи, який у процесі написання може

уточнюватися та змінюватися, і контролю результату. Також корисно давати школярам додаткову літературу та настанови щодо пошуку інформації в інших джерелах (бібліотеці, Інтернеті тощо).

У першу чергу, вчителю необхідно чітко уявляти мету та завдання науково-дослідницької роботи учнів. Тільки тоді він зможе правильно організувати свою педагогічну діяльність і досягти бажаних результатів.

Головна мета науково-дослідницької роботи школярів – це поетапне здійснення пізнавального процесу шляхом безпосередньої участі в ньому учня. Усі етапи цієї роботи повинні здійснюватися школярем самостійно. Учитель в даному випадку виступає в ролі консультанта.

Особливим є те, що шкільне дослідження не ставить перед собою за мету встановити будь-які нові наукові істини і факти, хоча досвід показує, що учнівські відкриття бувають дуже цікавими і з точки зору професійних вчених. Звідси випливають завдання науково-дослідницької діяльності школярів:

1. Розвиток самостійності. В основі лежить пошук нових знань, здійснюваний безпосередньо учнем. У цьому випадку відбувається розвиток самостійності, необхідної для правильної соціальної адаптації.
2. Самореалізація особистості учня. Науково-дослідницька робота допомагає знайти себе, об'єктивно оцінити свої здібності. Тут важливим стає правильне визначення можливостей кожної дитини, спрямування процесу в потрібне русло.
3. Розвиток комунікативних здібностей. Науково-дослідницька робота сприяє розвитку образного мислення, пам'яті, логіки, змушує вчитися чітко формулювати свою точку зору та наводити аргументи.
4. Розвиток комунікабельних здібностей. У процесі здійснення науково-дослідницької діяльності дитина стає відкритою, соціально активною, вчиться спілкуванню.



Педагогу, який вирішив зайнятися організацією дослідницької діяльності учнів, необхідно пам'ятати, що науковою діяльністю можуть займатися не всі. За даними досліджень тільки 16 % населення здатні посправжньому здійснювати такого роду роботу. Тому вчителю важливо вміти визначати тих учнів, які мають схильність до наукової роботи. Варто враховувати, що загальний рівень успішності школяра не є показником його реальних здібностей до проведення повноцінного дослідження. І на допомогу вчителю може прийти цілий ряд методик, спрямованих на визначення нахилів до творчої або пошукової діяльності.

## **1.2. Засоби розвитку дослідницьких здібностей учнів**

Вчителі використовують різні форми роботи з обдарованими дітьми, але переконані, що домінувати мають самостійна робота, пошуковий та дослідницький підходи до засвоєння знань, умінь і навичок. Саме тому педагогічні колективи велику увагу приділяють участі учнів в науково-дослідницькій роботі Малої академії наук України, яка посідає чільне місце серед ефективних форм науково-дослідної діяльності, що сприяють розвитку творчого потенціалу учнів, спрямовує зусилля на розвиток дослідницьких здібностей школярів, залучає їх до активної дослідницької роботи [51]. Саме тут старшокласники проходять першу школу становлення як майбутніх науковців, дослідників. У МАН учні ознайомлюються з досягненнями науки і техніки, розвивають творчу думку, реалізують прагнення до наукового пошуку, набувають дослідницьких умінь.

МАН України є творчим об'єднанням учнівської молоді, яка забезпечує її інтелектуальний і духовний розвиток, підготовку до активної діяльності в галузі науки та сприяє самовизначенню в майбутній професії. Мала академія залучає учнівську молодь до систематичної науково-дослідницької, експериментальної, конструкторської і винахідницької діяльності в галузі історії та літературознавства, математики й екології, фізики та біології, хімії

та економіки, технічної творчості та геології, педагогіки та географії, сільського господарства й археології тощо. На сьогоднішній день Мала академія наук України об'єднує 27 територіальних відділень обласного рівня, які керують роботою близько 1000 районних територіальних відділень та наукових товариств учнів. Основною базою відбору талановитих дітей є система закладів позашкільної освіти (близько 1400 закладів різних напрямків) в яких в позаурочний час навчається понад 1 500 000 учнів (20% школярів). Малі академії та наукові товариства учнів створюються на базі обласних, районних, позашкільних навчально-виховних та інших закладів освіти, як їх структурні підрозділи або як секції, гуртки, клуби науково-дослідницького напрямку діяльності. Метою роботи кожного регіонального відділення є пошук, відбір і навчання здібної учнівської молоді. Кращі вчителі працюють над тим, щоб залучити учнівську молодь до систематичної науково-дослідницької, експериментальної, винахідницької діяльності у різних галузях знань.

Для виявлення дітей, схильних до наукової роботи, вчителі використовують різноманітні тести, конкурси наукових робіт, семінари, де діти і виявляють свою зацікавленість будь-якою науковою проблемою. З урахуванням світового досвіду стосовно виявлення обдарованих дітей, шкільними практичними психологами розробляються дієві системи тестування учнів. Виявлення дітей з відповідними здібностями є складною й багатоаспектною проблемою, для вирішення якої комплексно використовуються методики дослідження творчих здібностей. За їх допомогою оцінюється критичність, гнучкість, конструктивність мислення, образна оригінальність як компонент творчої особистості, визначається рівень уяви, її гнучкість, рівень сформованості загальних творчих здібностей, вплив установки на оригінальність розумової діяльності. Результати виконання завдань обробляються за кожною методикою окремо та заносяться до зведеної таблиці, яка дає об'єктивну картину щодо процесів мислення кожної дитини, її схильностей та здібностей.

Один із варіантів діагностики здібностей – застосування теорії домінуючих здібностей або теорії множинного інтелекту американського психолога, професора Гарвардського університету Говарда Гарднера. Ця теорія присвячена дослідженню множинних здібностей людини, їх ідентифікації та урахуванню у навчальному процесі. Основні положення: людина має не єдиний, так званий "загальний інтелект", а низку інтелектуальних здібностей:

- вербально-лінгвістичні (добре розвинуті вербальні вміння і чуттєвість до звуків, значень і ритміки слів);
- математично-логічні (здатність мислити концептуально і абстрактно, розрізняти логічні або числові зразки);
- музичні (здатність розрізняти, продукувати і цінувати ритм, тембр і висоту звуків);
- візуальні (здатність мислити образно, візуалізувати точно і абстрактно);
- кінестетичні (здатність контролювати рухи свого тіла і майстерно вправлятися з предметами);
- міжособистісні (здатність розпізнавати і реагувати відповідним чином на настрій, мотивацію і бажання інших);
- внутрішньо-особистісні (здатність усвідомлювати свою особистість, бути у гармонії з внутрішніми відчуттями, цінностями, поглядами і процесами мислення);
- натуралістичні (здатність розпізнавати і класифікувати рослини, тварини та інші об'єкти природи);
- екзистенціальні (чуттєвість, здатність розглядати глибоко питання про існування людини, такі, як сенс життя, чому ми приходимо у цей світ, чому помираємо тощо).

Кожний із цих типів інтелекту має свою структуру, функції, мову і тому є особливим потенціалом для розвитку. Множинні здібності взаємодіють між собою з утворенням різних когнітивних (пізнавальних) стилів, а саме: аналітичного, інтерактивного, інтроспективного.

Аналітичний когнітивний стиль ґрунтується на логічних, музичних, натуралістичних здібностях, які за своєю природою є евристичними процесами і найбільш фундаментально забезпечують процес аналізу та інтеграції даних в існуючі схеми.

Інтерактивний когнітивний стиль складається з вербальних, міжособистісних та кінестетичних здібностей, оскільки саме вони стимулюють до певної діяльності; за своєю природою є соціальним процесом.

Інтроективний когнітивний стиль охоплює екзистенційні, інтраособистісні та візуальні здібності, які мають чітко виражений афективний компонент і передбачають самоаналіз, емотивний зв'язок з власним досвідом і уявленнями з метою усвідомлення нових знань. За своєю природою він є афективним процесом.

Ідентифікація виду здібностей учня, визначення рівня розвитку їх складових, дозволяє залучити старшокласників до наукової діяльності, передбачивши напрямок, в якому б вони найповніше реалізували свій потенціал. Зважаючи на те, що діяльність Малої академії наук України відбувається за предметними секціями, саме тип здібностей вказує на напрямок дослідницької діяльності. Враховуючи отримані результати тестування, вчителі-предметники залучають учнів до науково-дослідницької роботи у різних секціях МАН.

У свій час філософ-просвітитель Софокл говорив: “Великі справи не робляться зненацька”. Щоб досягти високих результатів, навчити дитину основам пізнання світу потрібна довга копітка спільна робота вчителя, учня і батьків. Головне завдання вчителя – не просто передати знання учневі, а навчити його вчитися. І цьому багато в чому учить організація науково-дослідної діяльності школярів.

В умовах сучасного ринку праці зростає значущість знання і тому в школі виникає необхідність пошуку нових методів навчання і виховання, спрямованих на пропаганду інтелектуальних цінностей і авторитет знань,

навичок наукової роботи і передпрофесійної наукової діяльності. Найбільш придатною для вирішення питань мотивації школярів до навчання на уроках і в позаурочний час виступає науково-дослідна діяльність школярів, основною функцією якої є стимулювання учнів до пізнання світу, себе та себе в цьому світі.

Під дослідницькою діяльністю розуміється творчий процес спільної діяльності двох суб'єктів (вчителя і учня), пов'язана з вирішенням творчих дослідницьких завдань із заздалегідь невідомим рішенням, результатом якої є формування дослідницького стилю мислення і світогляду в цілому, і яка передбачає наявність основних етапів, характерних для дослідження у науковій сфері. Важливо розуміти, що науково-дослідна діяльність учнів це процес спільної роботи учня і педагога. Тому при написанні робіт учитель повинен розуміти головну мету і основні завдання роботи.

Організація науково-дослідної діяльності школярів дозволяє розвивати в учнів пізнавальні інтереси, самостійність, культуру навчальної праці, дозволяє систематизувати, узагальнювати, поглиблювати знання з певної галузі навчального предмету і вчить їх застосовувати на практиці.

Самим сензитивним періодом для формування основ дослідницької діяльності є підлітковий період. В цей час, за словами Л.С. Виготського, “відбувається підйом уяви і глибоке її перетворення”. Основними завданнями науково-дослідної роботи є:

- формування у школяра інтересу до наукової творчості, навчання методиці і способам самостійного вирішення науково-дослідних завдань;
- розвиток творчого мислення і самостійності, поглиблення і закріплення отриманих при навчанні теоретичних і практичних знань;
- виявлення найбільш обдарованих і талановитих школярів, використання їх творчого і інтелектуального потенціалу для вирішення актуальних завдань.

Головне завдання – забезпечення учня необхідними знаннями і вміннями, на основі яких формуються наукове мислення і дослідницька культура. Знання учнів знаходяться в прямій залежності від обсягу і систематичності їх самостійної пізнавальної діяльності. Для того, щоб знання були результатом їх власних пошуків, вчителю необхідно організувати і пошуки, управляти ними. Все це можна здійснити через організацію науково-дослідної діяльності учнів.

Існує кілька рівнів проходження учнів через дослідницьку діяльність:

1 рівень – репродуктивний, включає елемент входження в пошукову, науково-дослідну діяльність через систему олімпіад, конкурсів, оглядів.

2 рівень – емпірико-практичний, що передбачає ускладнений елемент проходження учнів через систему екскурсій, колекціонування тощо.

3 рівень – дослідницький, експериментальний, що включає ускладнений елемент проходження учня через систему спецкурсів.

4 рівень – творчий, продуктивно - діяльнісний, що включає власне дослідницьку і експериментальну роботу, пов'язану з конструюванням, моделюванням і захистом своїх проектів.

Продуктом науково-дослідної діяльності школярів є творча науково-дослідна робота. Виділяють п'ять видів творчих дослідницьких робіт:

Реферативні – роботи, в основу яких входять збір і представлення інформації з обраної теми. Суть реферативної роботи – вибір матеріалу з першоджерел, що якнайповніше висвітлюють проблему. Специфіка реферату полягає в тому, що в ньому немає розгорнутих доказів, порівнянь, міркувань. Реферат відповідає на питання про те, що нового міститься в тексті. Наприклад: “Роль лісу в житті людини”.

Описові - творчі роботи, спрямовані на спостереження і якісний опис явища. Ці роботи можуть мати елемент наукової новизни. Особливістю є відсутність кількісної методики дослідження. Наприклад: “Спостереження за міграцією популяції білок в районі дослідження”. Проектні – творчі роботи, в основу яких покладено опис заздалегідь спланованого результату з

вирішення якої-небудь проблеми, значимої для учасників проекту. Наприклад: “Народні традиції у вирішенні екологічних проблем регіону”.

Експериментальні – творчі роботи, написані на основі виконання експерименту, який описаний в науці і має відомий результат. Дані роботи носять швидше ілюстративний характер, передбачають самостійне трактування особливостей результату залежно від зміни вихідних умов.

Наприклад: “Екологічний моніторинг по вивченню стадій переродження лісу”.

Дослідницькі – творчі роботи, виконані за допомогою коректної з наукової точки зору методики, мають отриманий за допомогою цієї методики власний експериментальний матеріал, на підставі якого зроблено аналіз і висновки про характер досліджуваного явища. Особливістю таких робіт є непередбачуваність результату, який можуть дати дослідження. Наприклад: “Антропогенний вплив місцевого населення на екологічний стан лісового біогеоценозу”.

Всі творчі роботи мають загальні елементи:

1. Всі роботи розпочинаються з опрацювання літературних джерел, але при виконанні реферативних робіт аналіз літератури є основним вмістом роботи, а при виконанні проектних, експериментальних, описових, дослідницьких робіт аналіз літературних джерел виступає як літературний огляд даних про досліджуване явище.

2. У методичному плані всі види робіт структуровані на постановку проблеми, власне матеріал і висновки.

Відмінністю дослідницьких робіт від інших видів творчих робіт є:

1. Практична методика дослідження обраного явища.
2. Власний експериментальний матеріал.
3. Аналіз отриманих даних і зроблені на його основі висновки.

Труднощі, з якими стикаються учні при організації науково-дослідної діяльності:

- слабе володіння методологією наукового дослідження, дефіцит методичної, наукової, психолого-педагогічної, спеціальної літератури;
- велика завантаженість учнів, відсутність часу;
- побоювання вчителів залучати дітей до «невластивої для них наукової діяльності»;
- наукообразність в освітньому процесі, тобто відірване від життя знання.

Існує певний алгоритм виконання науково-дослідної роботи – технологічний ланцюжок, який включає чотири етапи.

### 1. Діагностичний етап.

Метою діагностичного етапу технологічного ланцюжка з виконання науково-дослідної роботи є “знайти” учня, в якого було б бажання, інтерес, здібності до виконання дослідницької роботи. Методи пошуку – спостереження, діагностика на уроках, позакласних заходах, співбесіди, психолого-педагогічна діагностика (методика Г. Гарднера). На діагностичному етапі доцільно провести дослідження релевантних умов освітнього середовища дитини (“релевантность” - доцільність). Релевантні умови – це умови, які створюються в тому освітньому середовищі, де ви працюєте і інтенсивно використовуються вчителем для організації дослідницької діяльності учня. Перш ніж приступити до виконання творчої роботи потрібно вивчити рівень соматичного, психологічного і соціального здоров'я школяра, аби дослідницька діяльність не нашкодила здоров'ю учня. Вивчення релевантних умов можна провести через медичну діагностику (виявити рівень фізичного здоров'я, наявність хронічних захворювань тощо), психологічну діагностику (тип темпераменту, вивчення рівня тривожності, вивчення особливостей адаптації до нових умов тощо), педагогічну діагностику (рівень інтелектуального розвитку, розвиток знань, умінь, навичок). Запис в наукове товариство здійснюється на підставі бажання учнів брати участь у науково-дослідній роботі та результатів діагностичних досліджень. Провідна роль тут належить вчителю-предметнику. У процесі



індивідуальної роботи з учнями вони мають розгледіти “іскру” дослідницького таланту, допомогти у виборі теми дослідження, визначити коло проблем, що потребують рішення, підібрати необхідну літературу. В зв'язку з цим важливо, щоб учень вже з перших кроків розумів конкретну значущість свого дослідження, можливість його використання в практичному плані (виступи на уроках і в позаурочних заходах, участь в наукових конференціях різного рівня).

## 2. Теоретичний етап (етап планування).

Відбувається затвердження тематики досліджень. Ця процедура здійснюється у межах роботи кафедри і на настановній конференції наукового учнівського товариства. Ця процедура вважається значимою, оскільки дозволяє:

- усвідомити учнями значущість своєї роботи,
- створити атмосферу співпраці між учнями і вчителем,
- стимулює розвиток їх науково-дослідної діяльності.

Часто виникає ситуація, коли тема проекту знаходиться на стику декількох дисциплін, вимагає консультаційної допомоги фахівців. У цьому випадку до співпраці притягуються інші вчителі-предметники. Найважливішими завданнями даного етапу є аналіз проблеми, визначення джерел інформації, постановка завдань, складання плану роботи з теми дослідження. Теоретичний етап включає такі напрями діяльності:

Визначення галузі дослідження – потрібно чітко визначити межі предметної сфери, в рамках якої виконується науково-дослідна робота. Галузь дослідження – це сфера науки і практики, в якій знаходиться об'єкт дослідження. Наприклад: екологія людини; екологія техносфери; екологія флори і фауни. Визначення проблеми і теми дослідження. Проблема – завдання, перешкода, трудність. Проблема дослідження – це суперечлива ситуація, що вимагає свого вирішення. Вирішення цього протиріччя безпосередньо пов'язане з практичною необхідністю. Правильна постановка і ясне формулювання проблеми дослідження дуже важливе. Вона визначає

стратегію дослідження, напрям наукового пошуку. Наприклад: проблема питної води в районі дослідження; проблема переродження лісового біогеоценозу унаслідок негативного антропогенного навантаження на лісовий масив.

Тема дослідження – вужча сфера дослідження в межах предмету. Тема – це ракурс, в якому розглядається проблема дослідження. Тема має бути емкою, короткою і конкретною.

Вибір об'єкту і предмету дослідження. Об'єкт дослідження – це процес або явище, що породжує проблемну ситуацію. Предмет дослідження – це частина об'єкту, яку можна перетворити, аби об'єкт змінився.

Гіпотеза дослідження. Гіпотеза (підстава, припущення) – науково обґрунтоване припущення про безпосередньо спостережуване явище. Гіпотеза має бути сформульована таким чином, щоб її можна було перевірити, тобто, вона має містити припущення.

Формулювання мети і завдань дослідження. Мета дослідження – це кінцевий результат, якого б хотів досягти дослідник по завершенні своєї роботи. Зазвичай мету формулюють із слів: довести, обґрунтувати, розробити, пояснити, визначити, встановити. З поставленої мети витікають завдання дослідження.

Завдання дослідження – вибір шляхів і засобів досягнення мети. Завдання формулюють за допомогою слів: проаналізувати, виявити, визначити, встановити, вивчити.

Відбір методів дослідження. Метод дослідження – це спосіб досягнення мети дослідження. Методи дослідження поділяються на теоретичні (вивчення і аналіз літератури, порівняння, моделювання, класифікація, систематизація) і емпіричні (спостереження, соціологічне опитування, тестування, моніторинг, анкетування, інтерв'ю).

### 3. Практичний етап (етап виконання).

На даному етапі учні виконують згідно плану дослідження (обробляють інформацію, виконують експеримент) і оформляють науково-

дослідну роботу. Вчитель на даному етапі виступає в ролі консультанта і помічника.

Безпосередня робота над проектом. Під керівництвом учителів учні обирають тему майбутнього дослідження, складають план роботи, який включає роботу в наукових бібліотеках, архівах, зустрічі з науковим керівником, написання роботи та як кінцевий результат – участь у конкурсній захисті учнівських науково-дослідницьких робіт. Учителі разом з учнями працюють в архівах, проводять дослідження. Праця вчителя з учнями над науковими роботами сприяє формуванню в учнів навичок дослідницької роботи, справжніх творчих особистостей з власною думкою та позицією, яку вони можуть відстоювати і аргументувати. Робота щодо участі учнів у МАН постійно вдосконалюється. Учні залучаються до роботи наукових конференцій, семінарів, де вони виступають з результатами власних досліджень, захищають самостійно підготовлені реферати тощо. 1 раз на тиждень проходять засідання кафедри, де учні представляють виконану роботу. Це дозволяє здійснювати контроль над процесом роботи, оперативно вирішувати виникаючі проблеми, підтримувати інтерес і рівень інформованості про дослідження, що проводяться, серед учнів і вчителів.

4. Етап рефлексії (етап оцінки результатів і захисту дослідницьких робіт)

На даному етапі відбувається експертиза творчих проектів, що проводиться експертними групами, створеними на основі методичних об'єднань вчителів школи. Рецензенти і опоненти з числа вчителів дають попередню оцінку виконаній роботі, виявляють слабкі сторони дослідження, надають допомогу в вирішенні виниклих питань. Учні під керівництвом педагогів готують доповіді з теми дослідження, презентації для захисту науково-дослідної роботи. Презентації можна зробити на паперових носіях у вигляді діаграми, схеми, таблиці, фотографії і на електронних носіях у формі комп'ютерної презентації. При захисті робіт на науково-дослідних

конференціях, як правило, використовуються можливості процесора презентацій Power Point.

На думку вчителів, які постійно працюють із старшокласниками, талановиті, здібні діти повинні весь час перебувати в особливому творчому середовищі наукового пошуку, розвивати уміння полемізувати, відстоюючи власну думку і формуючи власні наукові погляди на світ. Одним із головних завдань школи керівники науково-дослідної роботи учнів вбачають розвиток інтелектуального потенціалу підростаючого покоління, творчо обдарованої молоді, її залучення до наукової діяльності, орієнтованої на вирішення нагальних проблем суспільства, реалізацію національних інтересів країни, формування нових громадян України, основними рисами яких є компетентність, діловитість, прагнення до безперервної самоосвіти та самовдосконалення, різнобічність інтересів і захоплень.

У наступному Розділі 2 буде представлений зміст науково-дослідної роботи, що виконана автором на кафедрі фізики та методики її навчання КДПУ за допомогою наукового керівника та аспіранта кафедри Степанюка Олександра Миколайовича. Технологічний ланцюжок виконання роботи включав чотири традиційні етапи, які згадувалися вище: діагностичний етап, теретичний, етапи виконання та оцінки результатів. Зміст даної науково-дослідної роботи може бути використаний учнями як приклад також як методична розробка теми «Наноструктури, що контролюють гідрофобність поверхонь» для застосування у своїй науково-дослідній роботі.

Пропозиція даної наукової теми для методичної розробки не випадкова – перед освітою і наукою стоять завдання: розкрити суть процесів, які відбуваються в природі, створити матеріали, які стануть заміниками природних матеріалів, оскільки відбувається їх виснаження, проблема створення екологічно чистої води та ін. Досягти цього можна лише за умови детального вивчення структури речовини, її складових, властивостей. Тому вивченню питань матеріалознавства приділяється велика увага.

## ВИСНОВКИ ДО РОЗДІЛУ 1

У процесі реалізації літературного огляду було отримано низку важливих теоретичних і практичних висновків.

Визначено методологічні принципи формування творчої особистості в контексті розвитку сучасного суспільства. Оглянуто рекомендації щодо методів формування та розвитку обдарованої особистості.

Обговорено методологію та інструментарій виявлення інтелектуально обдарованих старшокласників, схильних до дослідницької діяльності.

Вказано на методи інтелектуального розвитку учнів в освітньому процесі закладів середньої освіти.

Визначено, що значну роль у вирішенні завдань розвитку молодого покоління відіграє своєчасне виявлення та підтримка обдарованих дітей, максимальна реалізація їхніх задатків і здібностей.

Підкреслено, що Мала академія наук України – загальнодержавний науково-громадський проект, спрямований на пошук, підтримку, сприяння творчому розвитку обдарованих, здібних до наукової діяльності учнів, школярів, студентів.

Запропонована наукова тема із питань матеріалознавства для даної методичної розробки, мета якої показати суть процесів, які відбуваються в природі, запропонувати матеріали, які стануть заміниками природних матеріалів, оскільки відбувається їх виснаження, проблема створення екологічно чистої води та ін. Досягти цього можна лише за умови детального вивчення структури речовини, її складових, властивостей.

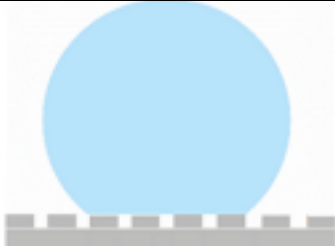
## **РОЗДІЛ 2. МЕТОДИЧНА РОЗРОБКА НА ТЕМУ «НАНОСТРУКТУРИ, ЩО КОНТРОЛЮЮТЬ ГІДРОФОБНІСТЬ ПОВЕРХОНЬ»**

### **2.1. Супергідрофобні нанодроги ZnO: механізми змочуваності та функціональні застосування – огляд літератури**

Нанотехнології обіцяють створити нові матеріали з бажаними та регульованими властивостями. Проте все ще існує проблема ефективного контролю структури наноматеріалів, щоб викликати цікаві властивості [52]. Одним із цікавих застосувань наноструктур є контроль гідрофобності поверхні, чого можна досягти, граючи зі структурою та хімічним складом поверхні. Одновимірні кристали - нанодроги - особливо цікаві для контролю змочуваності з тієї причини, що за допомогою ідеального маніпулювання висотою та кроком між нанодрогами можна досягти ідеальної супергідрофобної структури. Нанодроги ZnO, також відомі як нанострижні, наноголки, нанопояси, або нановискери, мають унікальні структурні та функціональні властивості, що робить їх вигідними для багатофункціональних супергідрофобних застосувань. По-перше, ZnO має три різні кристалографічні напрямки швидкого росту, що дає можливість синтезувати різні наноструктури з контролем росту. По-друге, нанодроги ZnO є фотокаталітичними, антибактеріальними, поглинають УФ, біосумісними, прозорими та стабільними при високих температурах, отже, можна отримати багатофункціональні супергідрофобні поверхні. Нанодроги ZnO також є екологічно чистими, оскільки їх можна виготовляти з поширених матеріалів земної кори з низьким екологічним впливом. ZnO не представляє істотної загрози для організму і використовується як харчовий елемент і для шкірних мазей. Нарешті, функціональна перевага нанодротів ZnO полягає в унікальному оборотному перемиканні змочуваності, що дозволяє змінити поверхню нанодроту ZnO з гідрофобної на гідрофільну шляхом маніпулювання атмосферою, нагріванням або освітленням.

Якщо ближче поглянути на біологічно водовідштовхувальні листя рослин, можна виявити принаймні два типи поверхонь, які дозволяють вільно стікати ранковій росі або краплям дощу. По-перше, листя типу лотоса містять дрібні структури (мікрокристали воску), які відповідають за водовідштовхування, тоді як листя другого типу (наприклад, листя жіночої мантиї) мають помітну вкриту волоссям поверхню, отже, виявлено дві моделі змочуваності поверхні (Венцеля та Кессі – Бакстера). Обидві моделі описують збільшення кута контакту з водою (CA) зі збільшенням шорсткості поверхні. Проте теорія Кессі-Бакстера характеризує ефект захоплених повітряних кишень на текстурованій поверхні, що викликає помітне збільшення CA. Іншими словами, ця модель передбачає, що поверхня стає більш гідрофобною, оскільки тверда частка контакту стає меншою. Коротке порівняння моделей Венцеля та Кессі-Бакстера представлено в таблиці 1.

Таблиця 1. Порівняння моделей Венцеля та Кессі – Бакстера

Модель Венцеля	Модель Кессі – Бакстера
	
Крапля рідини повністю змочує тверду нерівну поверхню	Крапля рідини стикається лише з верхньою частиною нерівностей твердої поверхні
Стан зволоженої поверхні	Незмочений стан поверхні
Повне проникнення рідини без границі розділу тверде тіло-повітря	Рідина не проникає в нерівності, існують межі розділу рідина-повітря, рідина-тверде тіло
Шорсткість (нерівність) поверхні підкреслює природні характеристики	Поверхня стає більш гідрофобною, оскільки тверда фракція

змочуваності поверхні: шорсткість робить гідрофобну поверхню більш гідрофобною, а гідрофільну поверхню більш гідрофільною	зменшується
На шорсткій гідрофобній поверхні гістерезис СА значно збільшується через збільшення площі контакту між рідиною та твердим тілом.	На шорсткій гідрофобній поверхні гістерезис СА зменшується через зменшення площі контакту між рідиною та твердою речовиною
Листя лотоса Макроскопічно гладкі листки містять ієрархічно шорсткі поверхні: мікромасштабні горбки, вкриті кристалоїдами воску	Листя жіночої мантії Краплі води піднімаються з менш гідрофільної кутикули в щітку більш гідрофільних еластичних волосків

Крапля води має дуже низьку адгезію до поверхні в режимі Кессі-Бакстера, оскільки вона знаходиться на вершині неправильної структури з повітряними кишнями (наприклад, листя Lady's Mantle має еластичний волосяний покрив). Режим Венцеля передбачає сильніше зчеплення краплі води з поверхнею, оскільки повітряні кишні заповнюються водою, а краплі притискаються до твердої поверхні (гладке листя лотоса містить ієрархічно шорстку поверхню). Ці два біоінспіровані режими забезпечують фундаментальні принципи для наукового світу та інженерів для розробки синтетичних супергідрофобних поверхонь із водним СА більше ніж  $150^\circ$ .

Це значення СА твердих поверхонь є орієнтиром для вчених, які впроваджують різні стратегії синтезу, щоб отримати поверхневі наноструктури з бажаною морфологією та ієрархією. Серед іншого, нанодроти ZnO мають одну з найбільш виражених морфологій, придатних для супергідрофобних застосувань, завдяки своїй кристалічній структурі, контрольованій висоті та щільності, сумісності та можливості змінювати характеристики поверхні текстилю та полімері. Два режими змочуваності





Таблиця 2. Значення СА води для різних полярних і неполярних поверхонь ZnO

<i>ZnO структура</i>	<i>поверхня</i>	<i>орієнтація</i>	<i>СА води</i>	<i>ref</i>
ZnO подовжені, нанозерна	неполярна	співіснують m-, a- площини	110.1	6
ZnO подовжені, нанозерна	неполярна, полярна	співіснують c-, m- площини ZnO	105.49	6
ZnO подовжені нанозерна	полярна	c-вісь ZnO	13.66	6
ZnO нанострижні	неполярна	не визначена	від 112 до 139.7	7
ZnO нанострижні	полярна	не визначена	~ 0 (щоденні вимірювання ~ 90)	7
ZnO наночастинки	полярна	Zn-обмежена [0001]	29 ± 2	8
ZnO наночастинки	полярна	Zn-обмежена [0001]	33 ± 2	8
ZnO нанострижні	полярна	c-вісь	74	10
ZnO нанострижні	полярна	c-вісь	9.6 ± 0.8	9

Причини таких змін обговорюються в наступних параграфах для полярних і неполярних поверхонь ZnO окремо.

На рис. 2 показано, як можна досягти різної змочуваності на неполярних a- та m- площинах ZnO. Для того, щоб поверхня була дуже супергідрофобною, краплі води повинні знаходитися на однорідному шарі захопленого повітря між водою та поверхнею (тобто режим Кессі-Бакстера). Затримане повітря діє як фізичний бар'єр, який також можна спостерігати, коли поверхня занурена у воду завдяки ефекту оптичного дзеркала. Цей ефект спровокований повним внутрішнім відбиттям світла, що відбивається від захопленого шару повітря. Для нанодротів з орієнтацією в a- та m-

площинах поверхня повітряних кишень, що існують у проміжках між а-орієнтованими структурами (рис. 2а) вище, ніж у m-орієнтованих структур (рис. 2б).  $S$  і  $D$  – довжина сторони шестикутника та відстань між сторонами шестикутника на с-площині нанодроту ZnO відповідно. Цей ефект можна пояснити геометрією. Відстань  $D$  а-площини нанодроту трохи менша, ніж  $D$  m-площина (рис. 2с – d). Це призводить до збільшення поверхні контакту вода-повітря та меншої поверхні тверда речовина-рідина (рис. 2е) і, як наслідок, підвищує  $CA$  води на орієнтованих поверхнях ZnO в площині порівняно з орієнтаціями в m-площині ( $CA_a > CA_m$ ).

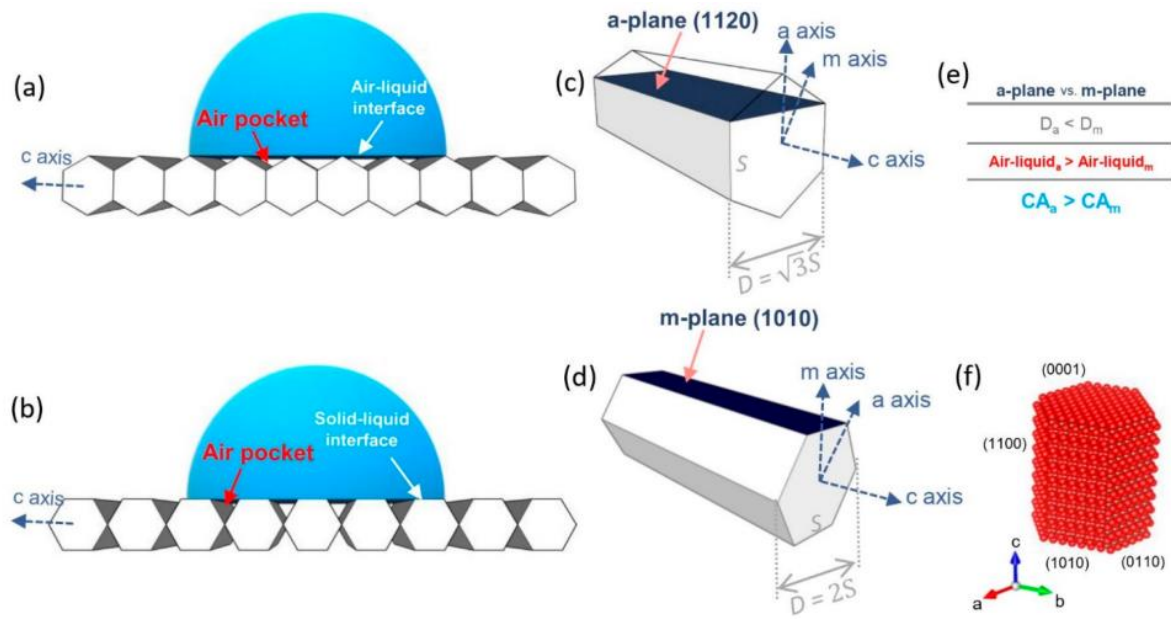


Рис. 2. Схематичний вигляд поверхневого змочування на нанодроті ZnO з неполярною орієнтацією (а) в площині  $a$  та (б) в площині  $m$ , (с – е) їх вюрцитні структури із заданими характеристиками та (ф) кристалічна структура ZnO типу вюрцит

Характер взаємодії між поверхнею і краплею води залежить від орієнтації кристала ZnO. Оскільки вплив  $a$ - і  $m$ -неполярних орієнтацій вже було оцінено в попередньому абзаці, монокристалічні нанодроти ZnO з віссю  $c$ , перпендикулярною до поверхні, можна використовувати як еталон для дослідження процесу змочування вздовж вісі  $c$  орієнтовані тонкі плівки та покриття ZnO. Рис. 3 ілюструє змочуваність полярного монокристалічного

масиву нанодротів ZnO, орієнтованого в *c*-площині, який відрізняється від розглянутих неполярних поверхонь ZnO. За своєю суттю монокристалічна поверхня ZnO, орієнтована в *c*-площині, є гідрофільною: СА вода на поверхні монокристала ZnO становить 31°. СА відрізняється для поверхонь кристалічної структури вюрциту, що завершується цинком [0001]-Zn і киснем [0001]-O: 29° ( $\pm 2^\circ$ ) і 33° ( $\pm 2^\circ$ ) відповідно. Однак у багатьох дослідженнях повідомлялося про різні значення СА для нанодротів ZnO.

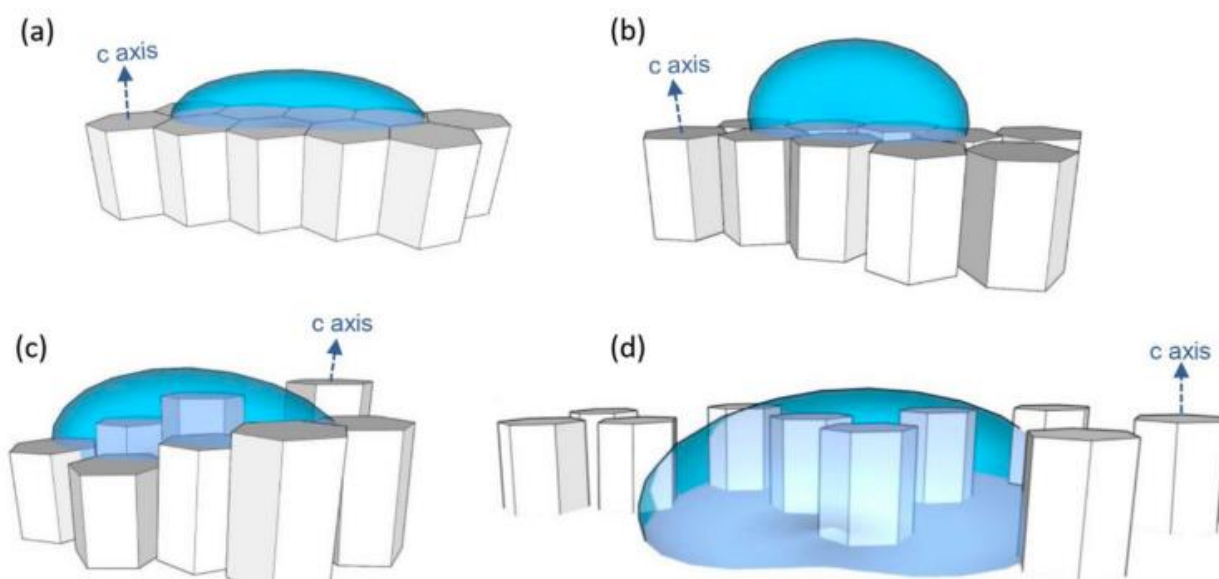


Рис. 3. Ефекти змочування поверхні на (a) гладкій та (b–d) шорсткій поверхнях полярних нанодротів ZnO, орієнтованих у *c*-площині; гідрофобність можна збільшити за допомогою отворів (b) для повітряних кишень, тоді як гідрофільні властивості можна отримати шляхом зміни висоти нанодротів (c) і їх щільності (d)

Гідрофобність полярної поверхні нанодроту ZnO можна збільшити шляхом створення повітряних кишень між нанодротоми. Багато авторів заявляють про гідрофобну поведінку нанодротів ZnO з відносно високою СА води до 157°. Значення СА близько 90° і вище можуть бути пов'язані з утворенням отворів між нанодротоми без помітного збільшення шорсткості плоскої плівкової поверхні. Більше отворів забезпечує більше захопленого повітря, що зменшує площу контакту води з поверхнею, як показано на малюнку 3b. Незначна відстань між неполярними бічними гранями нанодротів ZnO створює сильний заряд відштовхування для цих граней. У

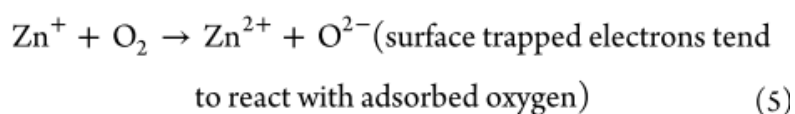
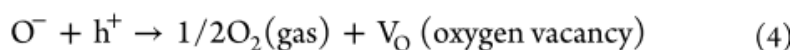
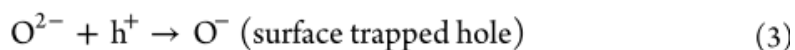
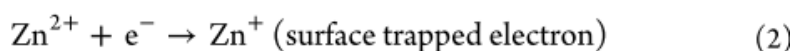
цьому випадку значення СА вище через заміну плоскої гідрофільної поверхні повітряними кишнями з СА  $180^\circ$ . Однак цей ефект можна призначити лише для плоских і гладких поверхонь з нанорозмірною шорсткістю.

Гідрофільну полярну поверхню ZnO з СА набагато нижчим за власний  $31^\circ$  також можна отримати шляхом зміни висоти та розподілу щільності нанодротів ZnO, як показано на рис. 3, с–d. Відповідно до моделі Венцеля, шорсткість поверхні може впливати як на гідрофобні, так і на гідрофільні властивості, підвищуючи їхні гідрофобні та гідрофільні властивості відповідно. СА води  $9,6 \pm 0,8^\circ$  на високоорієнтованих плівках нанодротів ZnO було виміряно Саі та ін. Співробітники Малліканда нещодавно повідомили про СА води  $20,2^\circ$  для плівок на основі нанодротів ZnO, виготовлених гідротермальним методом. Turmine та його співробітники повідомили про СА приблизно  $0^\circ$  гладкого шару ZnO з полярними гранями відразу після гідротермального синтезу.

Дефекти поверхні, пов'язані з киснем, зазвичай відповідають за взаємообмін між супергідрофільними та супергідрофобними станами ZnO. Впливи освітлення, термічної та хімічної обробки перетворюють змочуваність наноповерхонь ZnO, таким чином, розуміння оборотної змочуваності, викликані зовнішніми подразниками, має вирішальне значення для реального застосування багатофункціональних властивостей ZnO.

Одним із найпоширеніших методів маніпулювання є фотоіндукована оборотна змочуваність, коли поверхня ZnO обробляється світлом з енергією, що перевищує ширину забороненої зони. В останньому дослідженні синтезовані супергідрофільні нанодроти ZnO були перетворені на супергідрофобні поверхні після зберігання в темряві протягом кількох місяців і повернуті до супергідрофільного стану за допомогою ультрафіолетового освітлення лише протягом кількох хвилин. Гідроксильні радикали слідували фазі приєднання-видалення-відновлення на поверхні ZnO. Електронно-діркова пара створюється шляхом освітлення УФ з

більшою енергією, ніж ширина забороненої зони ZnO. Носії переміщуються с поверхні, викликаючи наступні реакції: (i) електрони реагували з іонами металу решітки  $Zn^{2+}$ , утворюючи дефектні центри  $Zn^+$ , і (ii) дірка реагувала з киснем решітки, утворюючи поверхневі кисневі вакансії. На місцях вакансій кисню здійснюється кінетично сприятлива адсорбція гідроксилу ( $-OH$ ) із вологи повітря. Незважаючи на те, що реакція адсорбції гідроксилу є швидшою, термодинамічно адсорбція кисню є більш сприятливою на цих кисневих вакансіях: кисень більш міцно зв'язаний на дефектних ділянках, ніж групи  $OH$ . Оборотна змочуваність може бути виправдана тут як початкова супергідрофобна природа ZnO поступово замінюється супергідрофобними поверхнями шляхом видалення  $-OH$  / адсорбції кисню в умовах тривалого зберігання в темряві, тоді як ці поверхні можна швидко повернути до супергідрофільних станів із вивільненням  $-OH$  після УФ-освітлення. Загалом, фотоіндукований процес можна виразити шляхом наступних реакцій (1 – 5):



Змочуваність нанодротів ZnO можна змінити шляхом відпалу у відновній або окислювальній атмосфері. Нагрівання в  $[Ar: H; 96:4]$  при  $400^\circ C$  призводить до утворення кисневих вакансій у порошках ZnO. Нещодавно супергідрофобність наночастинок ZnO була переведена в супергідрофільний стан разом із утворенням кисневих вакансій після відпалу при  $400^\circ C$  в атмосфері навколишнього середовища. Цікаво, що супергідрофобність була відновлена шляхом зниження температури відпалу до  $150^\circ C$ , що свідчить про те, що нижчої температури достатньо лише для прискорення швидкості

усунення груп -ОН, таким чином перетворюючи наноструктури в супергідрофобний стан без утворення вакансій. Подібний ефект спостерігали Singh et al., де початкові супергідрофільні нанодропи ZnO перейшли на супергідрофобні після відпалу в H<sub>2</sub> при 300 °С протягом 90 хвилин. Подібно до відпалу на повітрі, відпал в O<sub>2</sub> (300 °С протягом 60 хв) перетворив супергідрофобні нанодропи ZnO в супергідрофільні. Нюї та ін. продемонстрували, що обробка ZnO у H<sub>2</sub> або у вакуумі суттєво не змінює кількість кисневих вакансій порівняно з початковим вмістом, припускаючи, що H<sub>2</sub> усуває частину кисню з поверхневого шару. Однак відпал в O<sub>2</sub> зменшує концентрацію кисневих вакансій більш ніж удвічі: ефект пояснюється включенням кисню.

Зовнішні подразники ультрафіолетового світла або температури можуть розірвати зв'язки Zn-O на поверхні ZnO, що призведе до утворення кисневих вакансій і утворення висячих зв'язків - типових пасток для води. Маніпуляції з кисневими вакансіями на поверхні ZnO за допомогою світлового опромінення та теплових ефектів схематично показано на рис. 4. Після збагачення поверхні ZnO групами -ОН цей супергідрофільний стан можна перетворити на супергідрофобний шляхом старіння в темряві.

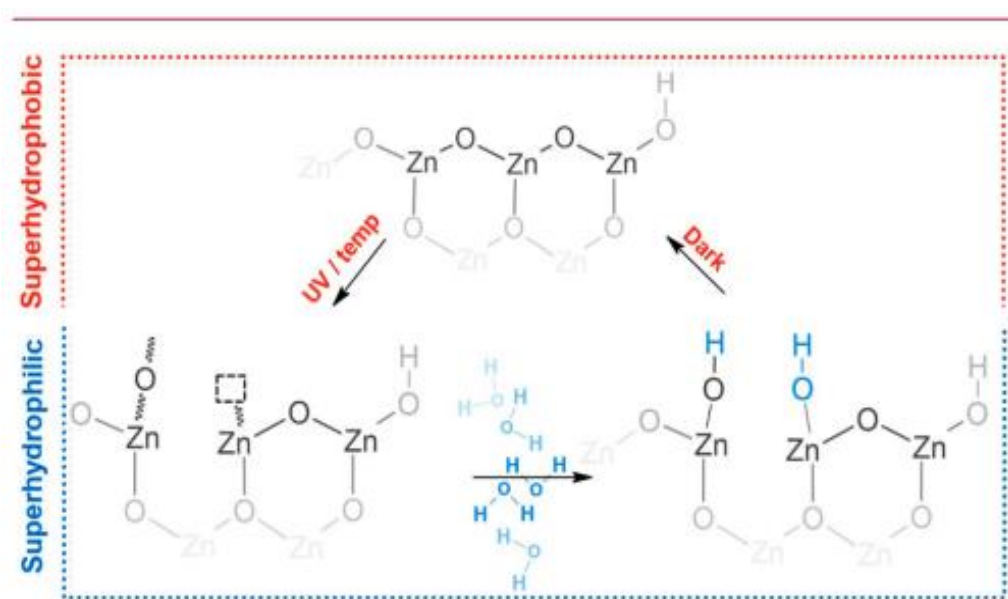


Рис. 4. Маніпуляції з кисневими вакансіями за допомогою світлового опромінення та теплових ефектів

Окрім освітлення та теплових ефектів, змочуваність поверхні ZnO також може бути змінена від гідрофільної до супергідрофобної обробкою поверхні ZnO плазмою, щоб вплинути на її стани. Наприклад, після обробки ZnO плазмою фтору атоми фтору заміщують кисень або займають вакансії кисню завдяки близьким розмірам іонів фтору та кисню. Оскільки іони фтору мають найсильнішу електронегативність, у пасивованому фтором оксиді атоми F може притягувати атоми водню (з навколишнього повітря) до зв'язування з найближчим кисневим обірваним зв'язком, утворюючи міжмолекулярні водневі зв'язки  $F \cdots H-O$  і, таким чином, збільшується кількість гідроксильних груп на поверхні ZnO (рис. 5a). У результаті поверхня ZnO стає більш гідрофільною за рахунок пасивації поверхневих вакансій фтором. Крім того, Yahaуа та його співробітники також вводили F гідротермально як аніонну добавку. Подібним чином оброблена  $H_2$  плазмою поверхня ZnO збільшила щільність  $-OH$  груп і кисневих вакансій (рис. 5b).



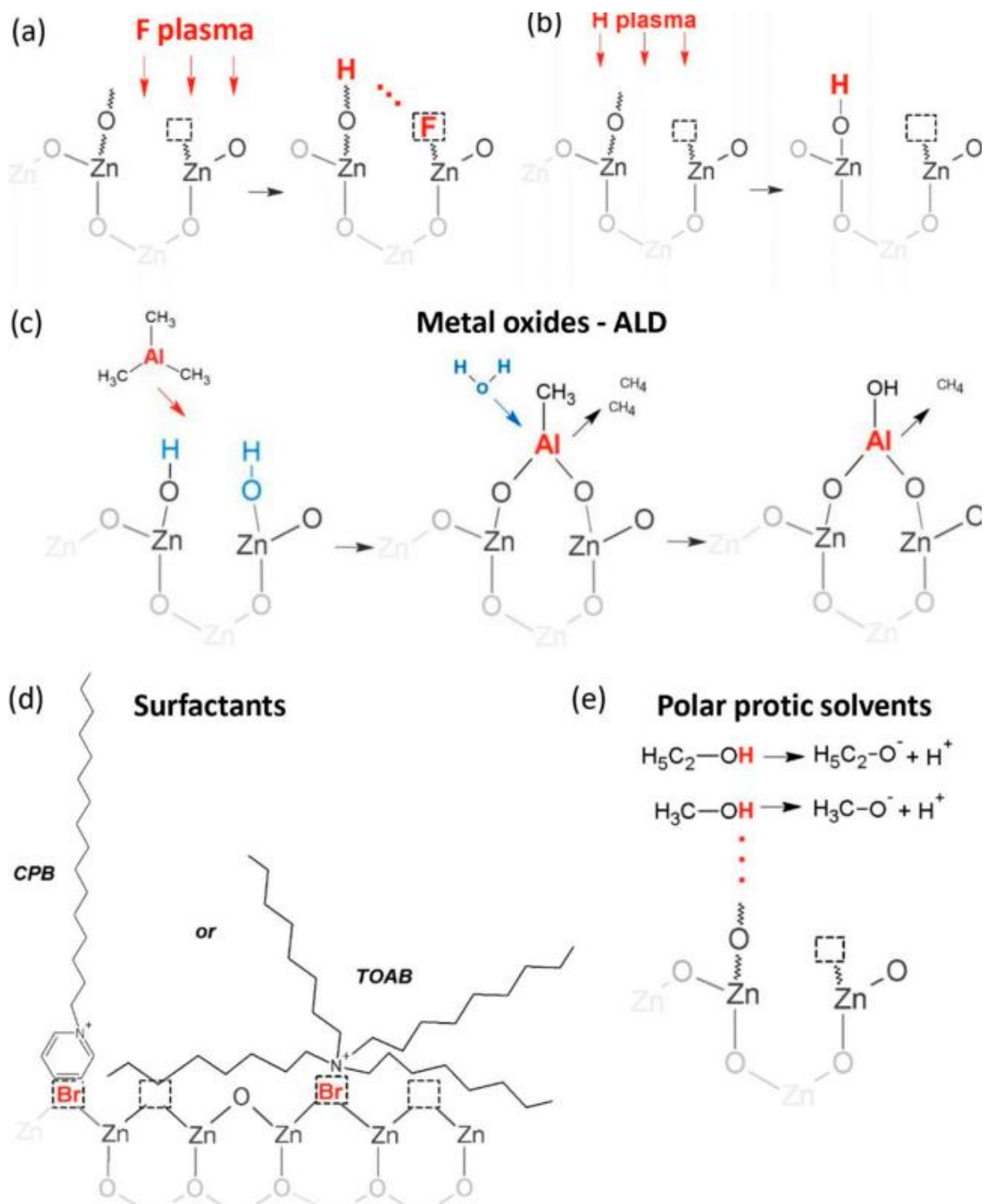


Рис. 5. Маніпуляція поверхневими дефектами ZnO: (а, б) пасивація плазмовою обробкою, (с) покриття Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, (д) приєднання поверхнево-активної речовини та (е) ефект сольватації

Альтернативно, хлор, як інший елемент групи галогенів, був включений в поверхню ZnO з простого прекурсора NaCl, що призвело до підвищення гідрофільності.

Змочуваність ZnO можна змінити шляхом нанесення тонкого шару оксиду іншого металу. На відміну від пасивації F і H, де посилюються гідрофільні властивості, пасивація оксидом металу може призвести до супергідрофобної поведінки. Зменшити кількість вакансій на поверхні ZnO можна за рахунок пасивації обірваних зв'язків Zn киснем з  $Al_2O_3$ . Ефект пасивації поверхневих дефектів тонким шаром  $Al_2O_3$  можна зрозуміти з досліджень осадження атомного шару на поверхні шерсті (рис. 5c), що можна пов'язати з поверхнею ZnO, покритою – OH. Повідомлялося, що підвищена шорсткість поверхні є вирішальним параметром для посилення супергідрофобності тканини.

Супергідрофобна поверхня ZnO може бути досягнута шляхом пасивації поверхневих дефектів ZnO поверхнево-активними речовинами або самоорганізованими органічними молекулами. Як правило, ці молекули складаються з довгого гідрофобного ланцюга алкільних груп і полярних головних груп. Головки відповідають за з'єднання з дефектами поверхні ZnO, тоді як довгі алкільні ланцюги створюють шорстку поверхню. Реакція зшивання між з'єднаними молекулами індукує полімеризацію або створює мережу навколо поверхні зі зниженою вільною енергією, що підвищує гідрофобність. Щоб отримати добре організовану, максимально шорстку поверхню, збагачену поверхнево-активною речовиною, вибір прекурсора є критичним. Наприклад: після зайнятих бромом кисневих вакансій поверхнево-активні речовини з одним довгим алкільним ланцюгом створюють більш щільний шар, ніж чотири ланцюги поверхнево-активних речовин (рис. 5d), що призводить до більш гідрофобної поверхні.

Дефекти ZnO можуть бути більш чутливими до полярних протонних розчинників (рис. 5e). Молекули таких розчинників легко віддають протони реагентам і таким чином можуть провокувати гідрофільні поверхні ZnO. Повідомлялося, що ультразвукова обробка ZnO в етанолі або метанолі може призвести до пасивації електронами водню рекомбінаційних станів. Крім того, низка протонних розчинників має низьку ефективність розділення для

тетрапод ZnO через низькі дипольні моменти розчинників. Це може бути пов'язано з утворенням водневих зв'язків між Н етанолу та кисню на поверхні ZnO, які можна спостерігати для нанодротів ZnO, які використовуються як датчики газу етанолу.

Супергідрофобні нанодроти, голки або стрижні ZnO мають численні потенційні застосування. Серед найпоширеніших – самоочищувальні нанесення на супергідрофобну поверхню, завдяки чому вода легко скочується. Крім того, супергідрофобність корисна для розділення олії та води. Інша група застосувань базується на властивості ZnO поглинати ультрафіолетове світло для захисту, очищення, зондування тощо. ZnO також є біологічно сумісним і тому підходить для біомедичних застосувань. Крім того, для більшості застосувань важливо використовувати багаті на Землі, дешевші, більш стійкі та екологічно чисті матеріали, і пристрої на основі ZnO можуть відповідати всім цим вимогам. У цьому розділі надається огляд найновіших застосувань супергідрофобних нанодротів ZnO.

Нанодроти ZnO можна синтезувати різними методами, просто контролюючи напрямок росту кристалів. Серед них можна виділити парофазний і розчиннофазний синтез. Парофазний синтез включає вирощування нанодротів ZnO шляхом прямої реакції окислення Zn, тоді як солі Zn у водних розчинах або органічних розчинниках використовуються для типового фазового синтезу нанодротів ZnO. Температурний режим для методу газофазного синтезу становить від 400 до 1100 °C, тоді як температури для синтезу в розчинній фазі зазвичай нижче 200 °C.

Змочуваність готових нанодротів ZnO не є стабільною. Гідрофобні або гідрофільні властивості можуть бути змінені через зміну температури, УФ-випромінювання або хімічного середовища, як це обговорювалося в розділі 4. Для більшості застосувань спочатку синтезовані наноструктури ZnO додатково модифікуються для підвищення їх гідрофобності. Більшість описаних методів включають модифікацію хімічного складу поверхні з покриттям матеріалами із надзвичайно низькою поверхневою енергією, таких

як силани, жирні кислоти та фторполімери, що призводить до значного зниження поверхневої енергії (рис. 6). Ці нанодропи ZnO зазвичай використовуються для зміни поверхневих характеристик текстилю, полімерів та інших матеріалів, оскільки поверхні з низькою щільністю відображатимуть поверхню з відносно високим вмістом води.

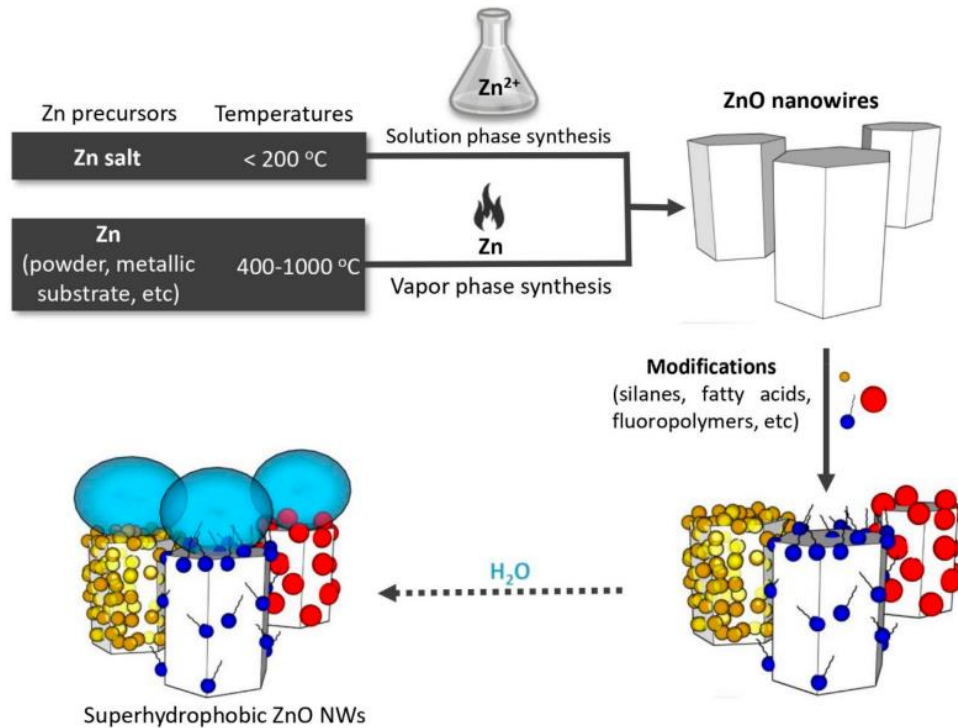


Рис. 6. Синтез та модифікація нанодропів ZnO для супергідрофобного застосування

Самоочищувальні поверхні значно зменшують витрати на обслуговування сонячних панелей, вікон будівель, літаків тощо. Щоб отримати ефект самоочищення, поверхня має бути супергідрофобною (бажано СА більше 150 °), а також крапля води повинна зісковзувати з поверхні під невеликим (<10°) кутом нахилу. Коли крапля води скочується з поверхні, вона збирає пил або інші частинки й таким чином очищає поверхню (рис. 7).

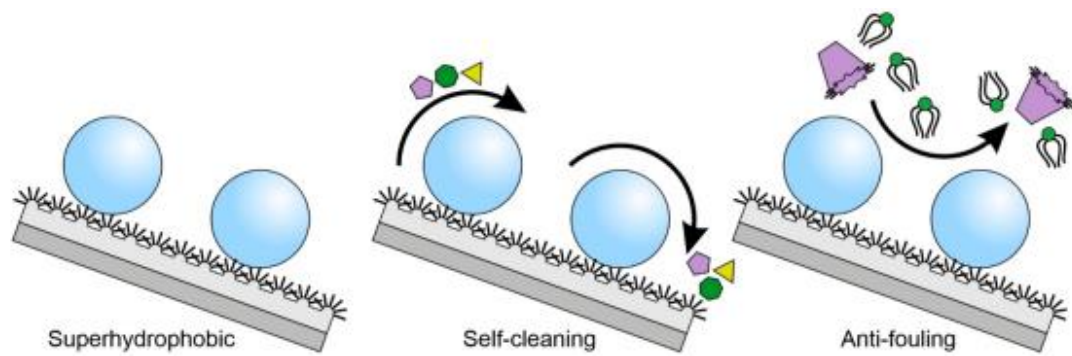


Рис. 7. Супергідрофобні нанодоти ZnO на полідиметилсилоксані (PDMS) для самоочищення та застосування проти обростання. Вода утворює краплі на супергідрофобній поверхні, які скочуються під малими кутами нахилу разом із забруднювачами. Це також запобігає прилипанню шкідливих організмів до поверхні

Ефект самоочищення з СА води  $162^\circ$  і кутом ковзання  $4^\circ$  досягається на склі, грубому кремнії та вигнутих підкладках, покритих нанодотами ZnO, вирощеними з шару затравки ZnO, що містить частинки полістиролу. СА  $154,26^\circ$  і кут ковзання  $5^\circ$ , а також відскакування крапель води на поверхні досягається за допомогою ZnO тетраподів для видалення пилу з силіконової гуми. Можна досягти таких низьких кутів ковзання, як  $1^\circ$ , якщо предметне скло покрито нанодотами  $Al_2O_3/ZnO$ .

Повністю функціоналізація супергідрофобних нанодотів ZnO на водній основі можлива шляхом розпилення фторалкілсилану, який біологічно розкладається (у результаті СА води становить  $158^\circ$ ). Ці структури виявляють здатність до самоочищення, оскільки порошок з поверхні скочується разом із краплями води. Гідрофобна поверхня ZnO також є антибактеріальною завдяки ефекту амортизації - бактерії не можуть прилипати до поверхні. Поверхня, розпилена сумішшю CuO та ZnO, стає не тільки самоочисною (СА =  $162,6^\circ$ , ефективно очищає вугільний порошок), але й стійкою до корозії.

Нанодоти ZnO на PDMS можна використовувати як поверхню проти обростання (рис. 7). Через супергідрофобність забруднюючі речовини не

можуть прилипати до поверхні. Властивості зберігаються протягом тривалого часу: після 6 місяців занурення в морську воду поверхня залишається чистою. Крім того, нанодропи ZnO можна використовувати як наповнювачі в матриці PDMS, де наповнювачі із тетраподів ZnO демонструють не тільки збільшення СА води, але й модуль пружності композиту.

Прісна вода необхідна для добробуту людей, але її ресурси обмежені. Таким чином, методи відділення питної води від забрудненої є дуже бажаними. Наприклад, є багато солоної води, і здатність розділяти сіль і воду буде корисною. Більш ефективне очищення стічних вод, включаючи відділення масла, також є необхідне.

Завдяки фотокаталітичній активності ZnO підходить для очищення стічних вод: забруднюючі речовини можна розкласти на менш шкідливі види. Повідомлялося, що за 4 години ультрафіолетового випромінювання понад 70% метиленового синього та 32% фенолу можна розкласти за допомогою нанодротів ZnO, вирощених із затравкового шару товщиною 3 нм. Пропонуються деякі складні структури для адсорбції нафти зі стічних вод; наприклад, тетраподи ZnO, покриті нанодротоми Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, є магнітним сорбентом, здатним адсорбувати 96% дизельного палива у воді з адсорбційною здатністю 1135 мг/г.

Людське волосся також може працювати як засіб для знезараження води, якщо його функціоналізують нанопроводами ZnO довжиною 400–600 нм. Вже гідрофобне (СА води 104°) волосся після функціоналізації стає супергідрофобним (СА води 149°). Такий композит може багаторазово фоторозкладати токсичні барвники майже з однаковою ефективністю. Нанодропи ZnO, прикріплені до людського волосся, мають меншу ймовірність викиду в навколишнє середовище, щоб уникнути можливої токсичності наночастинок. Щоб розщепити барвники (метиленовий синій, прямий червоний 23, алізариновий червоний S) або органіку (толуол), людське волосся з нанодротоми ZnO необхідно розмішати в розчині та

опромінити ультрафіолетовим світлом. Крім того, метиленовий синій можна розщепити за допомогою ZnO, покритого каркасом з цеоліту-імідазолату-8. Барвники (80% Reactive Yellow 145, 86% Basic Violet 3) також можна розщепити, а іони важких металів (99% хрому (VI), 97% свинцю (II)) можна видалити з води за допомогою нанокompозиту з тетраподів ZnO та CuO. Іншим варіантом деградації барвника є нанодроги ZnO, модифіковані вугільним пилом, які здатні розщепити 98% Reactive Orange 4, 99% Rhodamine B і 96% Трюпан Blue за 90 хвилин під природним УФ-опроміненням.

Опріснення води можливе за допомогою вакуумно-мембранного дистиляційного методу, де мембрана з полі(вініліденфториду) покрита нанодрогами ZnO, модифікованими 1H,1H,2H,2H-перфтордецилтриетоксисиланом (PFDS), що забезпечує кращу ефективність розділення порівняно з простою мембраною. Коли мембрана такого ж типу покрита фторованими нанодрогами ZnO, ефективність відділення солі становить 99,9% із потоком 15,7 л/год<sup>2</sup>.

Нанодроги ZnO можна вирощувати на бавовняній тканині, перетворюючи її на гідрофобну та олеофобну після обробки силановими сполучними агентами ТТОР-12 або КН550, де СА води становить 156 ° після додавання 1,5 мас.% ТТОР-12 до прекурсора ZnO. Коли тканину обробляють 2 мас.% КН550 у попереднику ZnO, вона стає гідрофільною на повітрі, але гідрофобною в маслі та олеофобною у воді з СА 156 ° та 157 ° відповідно. Якщо тканина супергідрофобна і олеофільна одночасно, її можна застосовувати для розділення водно-масляної суміші з ефективністю не менше 95%: масло пропускається завдяки дії сили тяжіння, а вода не пропускається завдяки гідрофобності.

Мідні сітки з наноструктурами ZnO (нанодроги, нанострижні, нанолисти) можна зробити гідрофобними на повітрі, але суперолеофобними у воді (СА 155 °, 153 °, 151 ° відповідно). Це утворює мембрану, здатну відокремлювати масло від води з ефективністю 99%. Ефективність

зберігається навіть після 15 циклів фільтрації і дуже незначно змінюється при зануренні в лужні, кислотні або сольові розчини. Схема механізму розділення проілюстрована на рис. 8. Сітку з нержавіючої сталі також можна використовувати замість міді як основу для нанодротів ZnO для відділення води та масла. Після нанесення сітка є супергідрофільною на повітрі та суперолеофобною у воді та пропускає воду. Двоступеневе осадження мікро-/наноієрархічних структур ZnO у хімічній ванні можна використовувати як інший варіант для того, щоб сітка з нержавіючої сталі стала супергідрофобною/суперолеофільною для відділення масла/води (ефективність 99,9%), уникаючи матеріалів з низькою поверхневою енергією

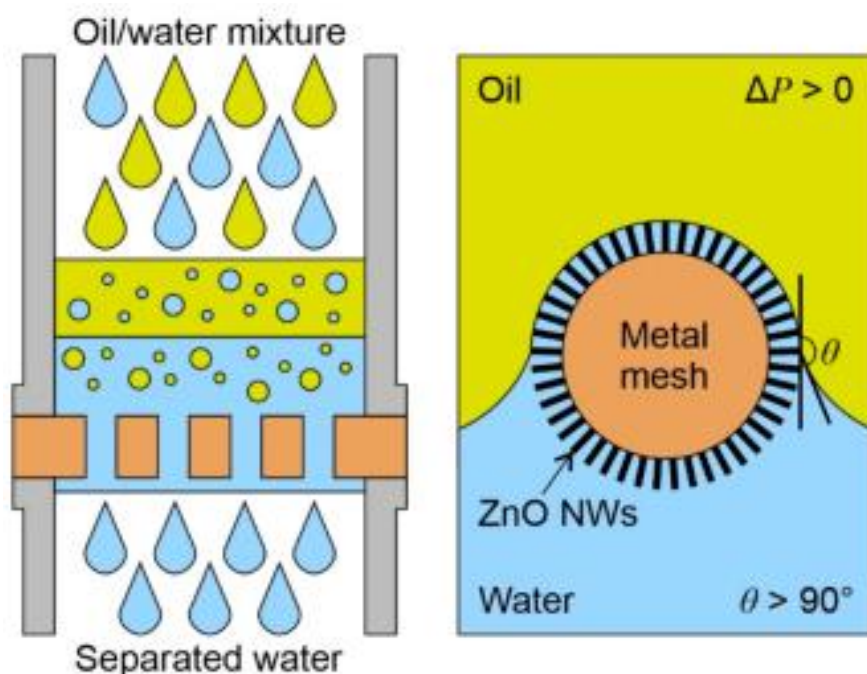


Рис. 8. Металева сітка, покрита нанодротами ZnO для розділення нафти та води на основі теорії Кессі. Вода затримується між нанодротами ZnO, що дозволяє воді проникати через мембрану та затримувати нафту поверх нього

Нанодроти ZnO на сітці з нержавіючої сталі можна вибірково перемикає між двома режимами – видалення масла та видалення води (рис. 9) – шляхом хімічної обробки або відпалу. Перемикання змочуваності може бути реалізовано шляхом обробки сітки з нанодротом ZnO стеариновою кислотою або NaOH. Стеаринова кислота робить сітку супергідрофобною



( $CA > 150^\circ$ ) і суперолеофобною ( $CA \approx 0^\circ$ ), а NaOH робить її супергідрофільною ( $CA \sim 0^\circ$ ) і підводною суперолеофобною ( $CA > 150^\circ$ ); кожен процес перемикання займає 15 хв. Ефективність розділення водно-масляної емульсії досягається з ефективністю 99%, яка ледь зменшується після восьми циклів розділення.

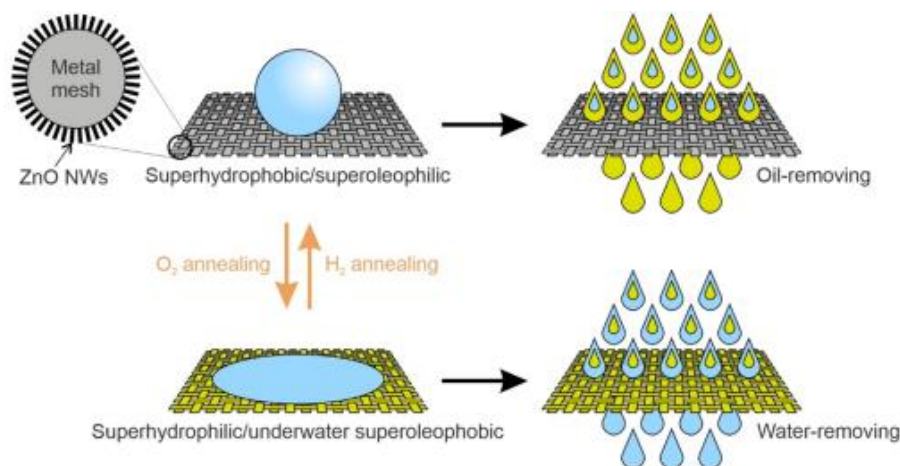


Рис. 9. Схема перемикання змочуваності металевої сітки з нанодротоми ZnO для видалення масла або води. Відпал у O<sub>2</sub> робить поверхню супергідрофільною/суперолеофобною під водою, тоді як відпал у H<sub>2</sub> повертає поверхню назад до супергідрофобного/суперолеофільного стану

Змочуваність нанодротів ZnO на сітці з нержавіючої сталі також можна змінити шляхом відпалу в парах полі(диметилсилоксану) при 210 °C протягом 20 хвилин (стан блокування масла) і на повітрі при 300 °C протягом 25 хвилин (стан блокування води). Крім того, подібна структура стає супергідрофобною шляхом відпалу в атмосфері водню при 300 °C, яку можна змінити на гідрофільну в атмосфері кисню, що призводить до ефективності розділення 99,9% навіть після 10 циклів використання.

Мембрана з вуглецевого волокна також може бути покрита нанодротоми ZnO для відділення масла від води. Перемикання змочуваності досягається шляхом відпалу або у вакуумі, або в атмосфері повітряного газу. Навіть після п'яти циклів перемикання зберігається з тією самою ефективністю. З води видаляли гептан, дизель, хлорбензол, толуол тощо з

ефективністю 98 – 99,5 %, яка зберігається протягом 15 циклів. Іншою багатообіцяючою структурою для розділення масла/води є полієфірсульфонова мембрана зі стрижнями ZnO, виготовлена без використання шкідливих модифікуючих агентів.

Наноголки ZnO, розташовані у вигляді квіткоподібних структур, спочатку є супергідрофобними ( $CA = 163,8^\circ$ ), але їх можна перетворити на супергідрофільні ( $CA \approx 0^\circ$ ) шляхом відпалу в атмосфері навколишнього середовища при  $400^\circ\text{C}$  протягом 30 хвилин. Супергідрофобний ефект скасовується після повторного відпалу в навколишній атмосфері при  $150^\circ\text{C}$  протягом 2 годин. Ці конструкції демонструють чудову стійкість у воді: супергідрофобність зберігається навіть після 12 годин занурення. Коли наноголки ZnO формуються на бавовняних або металевих сітках, їх можна використовувати для розділення хлороформу/води з ефективністю 97%, що знижує ефективність до 91% після 10 циклів (рис. 10).

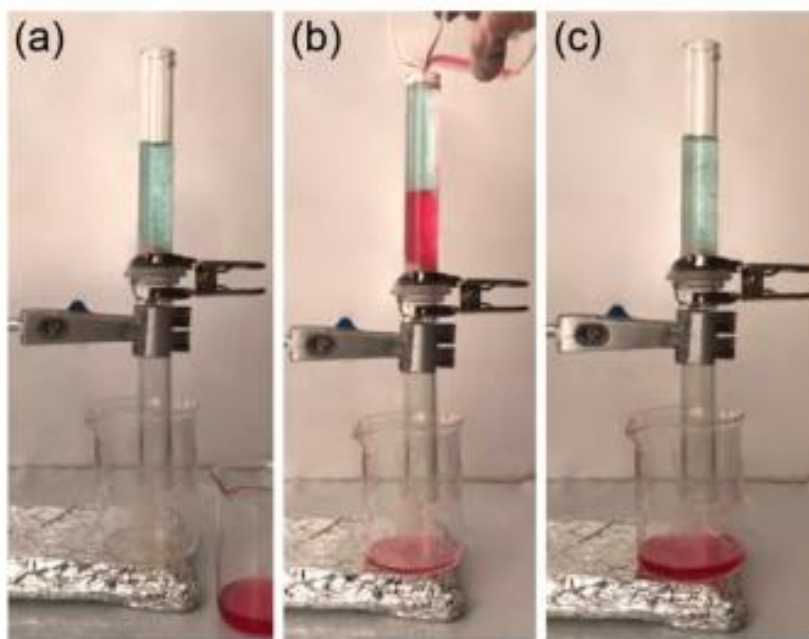


Рис. 10. Процес розділення хлороформу (рожевий) і води (блакитна) за допомогою ZnO: (а) скляна трубка, наповнена водою перед процесом розділення, (б) заливка хлороформу в трубку з водою, (в) хлороформ проникає в мембрани і збирається в мензурку, а вода очищається і залишається в трубці

Супергідрофобність нанодротів ZnO може зберігатися навіть при температурах нижче  $0^{\circ}\text{C}$ . Крапля води не може прикріпитися до поверхні при температурах нижче нуля градусів; отже, лід або паморозь також не може утворитися - цей процес називається льодофобією. При температурах від  $-10^{\circ}\text{C}$  до  $-20^{\circ}\text{C}$  конденсовані краплі можуть скочуватися з поверхні. Повідомляється, що нанодроти ZnO можуть підтримувати певний рівень льодофобності при температурах до  $-150^{\circ}\text{C}$ .

Супергідрофобні нанодроти ZnO, розпилені за допомогою радіочастотного магнетронного методу, можуть затримати обмерзання всієї поверхні на 140 хвилин при  $-10^{\circ}\text{C}$  або на 153 хвилини при  $-5^{\circ}\text{C}$ . Навіть після 30 циклів заморожування та розморожування нанодроти ZnO не виявляють видимих ознак пошкодження, що свідчить про відмінну довговічність. Під час процесу розморожування зразок був нахилений на  $15^{\circ}$ , що дозволяє талій воді скочуватися з поверхні таким чином, залишаючи його сухим для наступних циклів замерзання. При  $0^{\circ}$  зразок уникає повного запотівання поверхні, оскільки вода утворює краплі, які можна легко здути. Після 15 хвилин радіочастотного магнетронного розпилення ZnO на Al поверхня не замерзає протягом 2 годин і не покривається інеєм протягом 5 годин при  $-10^{\circ}\text{C}$ .

Здатність поверхні уникати інею залежить від кількості повітря в морфології поверхні. Повідомлялося, що для поверхні з нержавіючої сталі з фторованими круглими отворами та нанодротоми ZnO навколо них замерзання підкладки затримується на 63 години при  $-21^{\circ}\text{C}$  і вологості 75%, у порівнянні лише з 3 годинами для підкладки з нержавіючої сталі. Поверхня з властивостями проти зледеніння також може бути отримана шляхом покриття її багатошаровою голчастою структурою, яка включає ZnO, SiO<sub>2</sub> і політетрафторетилен. У цьому випадку після 2 годин розпилення льоду на підкладку лише 17,9% поверхні покривається льодом.

Змочуваність є дуже важливою при розгляді матеріалів для імплантатів. Гідрофобні поверхні можуть запобігти захворюванням,

спричиненим бактеріями, що знаходяться у воді. Нанодропи ZnO на поверхні кремнію можуть бути супергідрофобними, що також може сприяти підвищенню СА крові на різних поверхнях: від 54,6 ° до 96,4 ° на кварці, від 28,5 ° до 145,7 ° на склі, від 62,0 ° до 138,8 ° на кремнії, і від 81,4 ° до 131,6 ° на PDMS. Крім того, ZnO також має антибактеріальні властивості (вбиває бактерії під УФ-опроміненням), що робить його гарним вибором для біомедичних застосувань.

Було доведено, що наноголки ZnO мають антибактеріальні властивості проти *Staphylococcus aureus*, *Staphylococcus epidermidis*, *Streptococcus pyogenes*, *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Serratia marcescens*, *Klebsiella pneumonia* (зона інгібування становить 12-18 мм залежно від бактерій, коли ZnO розчинено в диметилсульфоксиді. Тим не менш, антибактеріальний ефект трохи кращий у випадку нанолістів і нанобарабанів ZnO; зона інгібування в середньому на 15% більша, ніж у випадку з наноголками ZnO (однак про відмінності у гідрофобності не повідомляється). Повідомляється, що нанодропи ZnO, покриті наночастинками Ag, також мають антибактеріальний ефект для бавовняної тканини проти *Staphylococcus aureus* та *Escherichia coli* кишкова паличка. ZnO, легований Ce, має антибактеріальні властивості проти *Staphylococcus aureus* із показником 83%. Проти *Escherichia coli* бавовняна тканина має кращу антибактеріальну активність при покритті ZnO без доповнення Ce (83%). Було запропоновано кілька антибактеріальних механізмів ZnO (рис. 11а): (1) індукція окисного стресу через активні форми кисню, що призводить до пошкодження або смерті клітин; (2) вивільнення  $Zn^{2+}$  пригнічує діяльність клітин, наприклад, активний транспорт, метаболізм бактерій, активність ферментів; (3) приєднання ZnO до клітинної мембрани через електростатичні сили, що спотворює структуру мембранної плазми та пошкоджує цілісність клітини.



Рис. 11. (а) Схема антимікробного механізму дії ZnO проти бактеріальної клітини: (1) утворення активних форм кисню, (2) розчинення ZnO на Zn<sup>2+</sup>, (3) пряма взаємодія між ZnO і клітинною мембраною. Адаптовано з посилання 76 (Creative Commons CC BY). (b) Зображення цифровою камерою різних рідин на тканині з нанокompозитним покриттям на основі нанодроти ZnO. Передруковано з дозволу з посилання 47. Copyright 2020 American Chemical Society. Зростання грибка на тісті через 5 днів: (c) чисте тісто, (d) тісто, покрите 20% C-легованим ZnO

ZnO є біосумісним і тому є перспективним матеріалом для біосенсорів. Крім того, нанодроти ZnO у формі тетрапод є більш біосумісними порівняно зі своїми сферичними аналогам. Нанодроти ZnO діаметром 200 нм і

довжиною кілька мікрометрів на кремнієвій підкладці були протестовані як оптичний сенсор для вірусу виноградної лози типу А: спектр фотолюмінесценції, пов'язаний з дефектами, зазнає зміщення до 5 нм. Однак супергідрофобність нанодротів ZnO може знизити чутливість сенсора, і, таким чином, гідрофобність навмисно знижується за допомогою УФ-опромінення. Оскільки наноструктури ZnO можна легко наносити на гнучкі підкладки, такі як тканина, вони цікаві для застосування в неінвазивних датчиках, які можна носити, для моніторингу в реальному часі. Наприклад, кортизол у людському поті виявляють нанопроводами ZnO, синтезованими на гнучких вуглецевих нитках.

Lab-on-a-chip (Лабораторія на мікросхемі) - ще одна цікава сфера можливого застосування нанодротів ZnO. Зі зменшенням розміру каналів у лабораторії на мікросхемі збільшується опір потоку рідини, особливо для гладких гідрофільних поверхонь. Нанодроти ZnO допомагають підтримувати постійний потік рідини в пристрої незалежно від властивостей змочування поверхні.

Наноструктури ZnO мають здатність блокувати ультрафіолетове випромінювання з регульованим положенням піку залежно від товщини та температури відпалу, тому вони часто використовуються в УФ-фільтрах або сонцезахисних кремах. Плівки частинок ZnO можна переформувати в нанострижні шляхом відпалу при 180° C, що збільшує їхню здатність поглинати до 50% ультрафіолетового світла, зберігаючи понад 80% пропускання у видимому спектрі. Завдяки введенню MXenes і Ni-ланцюга в покриття з нанодротів ZnO на бавовняній тканині можна досягти покращеного мікрохвильового поглинання (порівняно з немодифікованим ZnO). Така модифікація також дозволяє зробити тканину супергідрофобною для різних рідин (Рис. 11b).

Нанодроти ZnO також можуть створювати багатофункціональні лакофарбові покриття, такі як рідка органічна основа шкаралупи горіха кешью (CNSL). Додавання 10% об'ємної частки нанодротів ZnO демонструє

численні переваги: чисті покриття CNSL схильні до розтріскування, однак нанодропи ZnO вирішують цю проблему завдяки ефектам зв'язування, пов'язаним із внутрішньою морфологією ZnO. Коли таке композитне покриття (CNSL + ZnO) наноситься на скло, СА води збільшується, і в той же час коефіцієнт відбиття в ближньому інфрачервоному діапазоні також збільшується до понад 30% (порівняно з 3% для чистого скла). Коли CNSL + ZnO наноситься на поверхню магнієвого сплаву AZ31, вона ефективно захищається від корозії: стійкість до корозії підвищується на 156%. Стрибки крапель, викликані коалесценцією, можуть пояснити антикорозійні властивості супергідрофобних плівок: шар рідини на поверхні, що призводить до швидшої корозії, може бути викинутий таким покриттям, що складається з наноголок ZnO. Краща корозійна стійкість досягається за допомогою супергідрофобних нанодропів ZnO (діаметр 100 нм, довжина 5 мкм, СА = 161,7°) порівняно з мікрострижнями (діаметр 800 нм, довжина 10 мкм, СА = 155,6°). Крім того, сталеву підкладку можна захистити від корозії нанокompозитною плівкою PDMS/оксид графену/нанодропи ZnO.

ZnO також може ефективно зменшити ріст грибка завдяки зниженій вологості на гідрофобних поверхнях. Нанодропи ZnO, змішані з шелаком, зберігають деревину від значної зміни кольору через блокування ультрафіолету та є більш стійкими до формування завдяки гідрофобним властивостям суміші. Шелак зазвичай використовується для обробки деревини, а ZnO додатково покращує властивості. Необроблена деревина має СА 56°, який збільшується до 95° після обробки сумішшю шелак-ZnO. Необроблена деревина та деревина з шелаком демонструють розвиток грибків після 2 днів у середовищі з високою вологістю. Однак деревина з ZnO не утворює грибків навіть після 40 днів перебування у вологому середовищі. Необроблена деревина та деревина з шелакним покриттям виглядає темнішою та більш жовтою після УФ-опромінення. Завдяки додаванню до суміші ZnO деревина все ще піддається впливу УФ, але зміна кольору менш різка.

ZnO, легований вуглецем, є ще одним композитом на основі ZnO для протигрибкових покриттів. Коли C-легування виконується термічним осадженням, структури ZnO набувають форму нанодротів (20% C призводить до стрижнів розміром 37 нм), що збільшує СА до 98,4 °. Повідомлялося, що таке покриття ZnO:C значно зменшувало ріст грибка (*Rhizopus Stolonifer*) на тісті з білого борошна (Рис. 11с) порівняно як з тістом, покритим чистим тістом, так і тістом, покритим нелегованим ZnO. Нанодроти ZnO на бавовняній тканині, доповненій 2,5% церію, також мають протигрибкові властивості проти *Candida albicans* із показником 85%. Більшість структур з антибактеріальними властивостями водночас мають протигрибкові властивості. Наприклад, нанодроти ZnO і нанокompозити з наночастинок Ag на бавовняній тканині знижують швидкість росту грибків *Candida albicans* і *Aspergillus flavus*.

Нанодроти ZnO мають низьке оптичне пропускання, високе поглинання та відбиття, тому їх можна застосовувати в оптоелектроніці та фотоелектричній техніці шляхом налаштування значення енергії забороненої зони, яке пов'язане з морфологією плівки. Наприклад, коли нанодроти ZnO використовуються як шар для транспортування електронів, WO<sub>3</sub> як шар для транспортування дірок і GaIn як електрод, фотоелектричний пристрій може досягти ефективності перетворення потужності 4,5%.

Наноструктури ZnO знаходять свою нішу застосування в переносних термоелектричних генераторах енергії, які виробляють електроенергію з енергії навколишнього середовища. Навіть невелику кількість енергії, що випромінюється, наприклад, людським тілом, можна зібрати, створивши портативні пристрої; однак переносні генератори мають бути супергідрофобними, захищеними від ультрафіолетового випромінювання, ефективними та нетоксичними для шкіри. Таким чином, ZnO є перспективним матеріалом. Покриваючи тканину нанодротоми ZnO, СА води підвищується до 132,5°, а фактор захисту від УФ-променів (UPF) збільшується до 116,35. Ще кращий UPF (183,84) досягається сумішшю



нанодротів ZnO (діаметр 200–400 нм) і нанолістів (товщина 4 нм); однак він має трохи менший СА (122,4°). Нанодрооти ZnO на текстилі мають коефіцієнт потужності 13 мкВт/мК<sup>2</sup>, тоді як нанодрооти з нанолістами мають значення 22 мкВт/мК<sup>2</sup>.

Нанодрооти або наноголки ZnO без будь-яких добавок можна використовувати в газових датчиках для кращої роботи у вологому середовищі. Реакція датчика (співвідношення опору в повітрі та опору після 600 с в аналізаторі, тобто H<sub>2</sub> або CO; рис. 12) є кращою у випадку наноголок ZnO завдяки більш високому співвідношенню поверхні до об'єму. У вологому середовищі відгук знижується на 22%. Іншим варіантом визначення газу CO є вирощування нанодротів ZnO на графені на бавовняній тканині. Інші гази, такі як ацетальдегід, аміак і етанол, також можуть бути виявлені датчиком на основі бавовняної тканини, функціоналізованою ZnO.

Нанонитки ZnO можна використовувати в УФ-фотодетекторах. Нанопроводи ZnO діаметром 420 нм і 6,17 мкм на підкладці з оксиду індію демонструють чутливість до УФ 2348, тоді як відношення сигнал/шум становить 67 дБ. Чутливість від 3172,8 до 380 нм довжини хвилі може бути досягнута в нанодротах ZnO за допомогою модифікованої техніки хімічного осадження шляхом введення бульбашок повітря. Щоб створити гнучкі та ефективні УФ-фотодетектори, нанодрооти ZnO можна легувати Cu, Ni/Cu, Co або Co/Ni, що підвищує чутливість. Фотолюмінесценцію УФ-фотодетектора на основі нанодротів ZnO можна збільшити в 6 разів шляхом застосування наночастинок Ag з оболонкою SnO<sub>2</sub>. Проте леговані металом фотодетектори на основі ZnO можуть мати проблеми з сумісністю у зв'язку з високим легуванням і мобільністю. Цю проблему можна подолати за допомогою введення графену як активного шару в нанонитки ZnO і гетеропереходи GaN. Крім того, наноструктури CuO можна використовувати між нанодротами ZnO та шаром GaN для УФ-фотодетектування на довжині хвилі 365 нм. Нанодрооти ZnO є потенційними матеріалами для перемиканих УФ-фотодетекторів з подвійною реакцією: у постійному струмі нанодрооти ZnO

мають позитивну фотопровідність, тоді як у змінному струмі фотопровідність може бути як позитивною, так і негативною, залежно від частоти, що дозволяє точно налаштувати полярності змін світлового та темнового опорів.

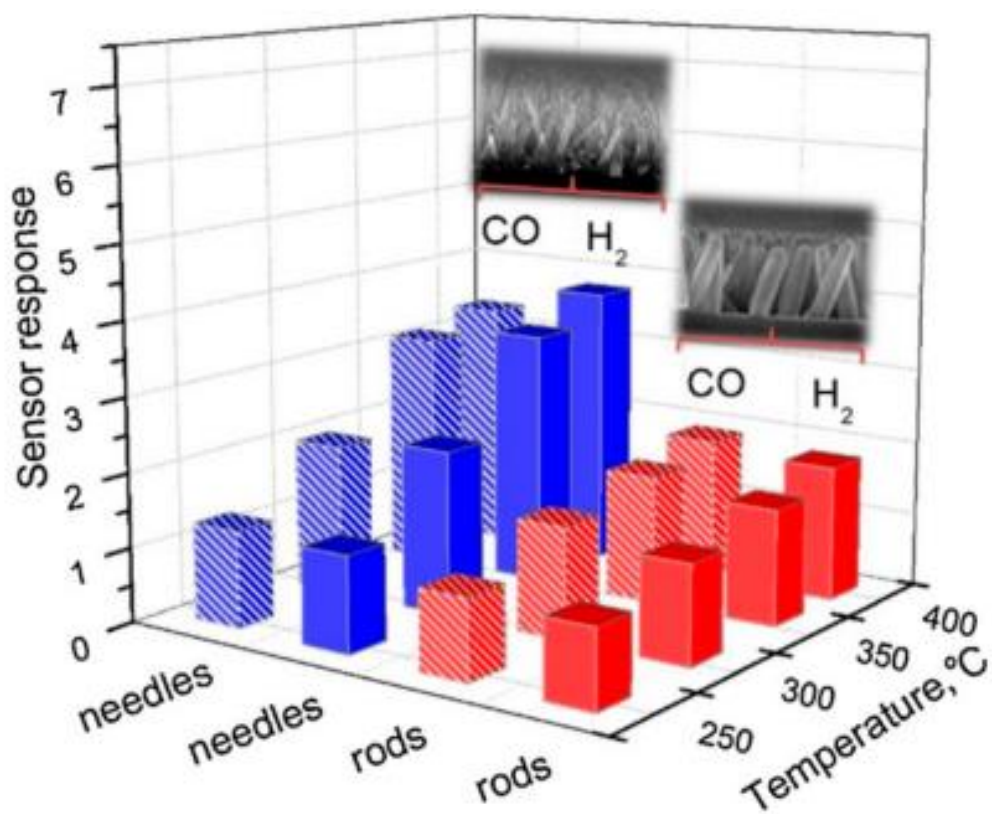


Рис. 12. Реакція голчастого датчика ZnO (ліворуч, синій) і стрижневого датчика (праворуч, червоний) для газів CO і H<sub>2</sub> залежно від робочої температури

## 2.2. Керування за допомогою дефектів перемикання поверхні масиву нанодротів ZnO з гідрофобної на гідрофільну – розрахунки із перших принципів

Як було зазначено у пункті 2.1 нанодроти ZnO мають структурні властивості, які роблять їх корисними для гідрофобних застосувань [52]. Полярні та неполярні поверхні ZnO мають різну змочуваність. Дефекти поверхонь, що містять кисень, як правило, відповідають за взаємоперехід між гідрофільними та гідрофобними станами ZnO. Розуміння механізмів реверсивної змочувальності на атомному рівні є важливим для розробки практичних застосувань нанодротів ZnO.

Дослідниками кафедри фізики та методики її навчання КДПУ були отримані енергетичні рельєфи міграції молекул води вздовж різних бічних поверхонь нанодротів ZnO без дефектів (рис. 13) та з вакансіями кисню або цинку на поверхнях нанодроту для того, щоб зробити висновки про особливості фізико-хімічних процесів, що відбуваються в нанодротах без молекул води та в присутності води, та якою є поверхня нанодроту – гідрофільною або гідрофобною [53].

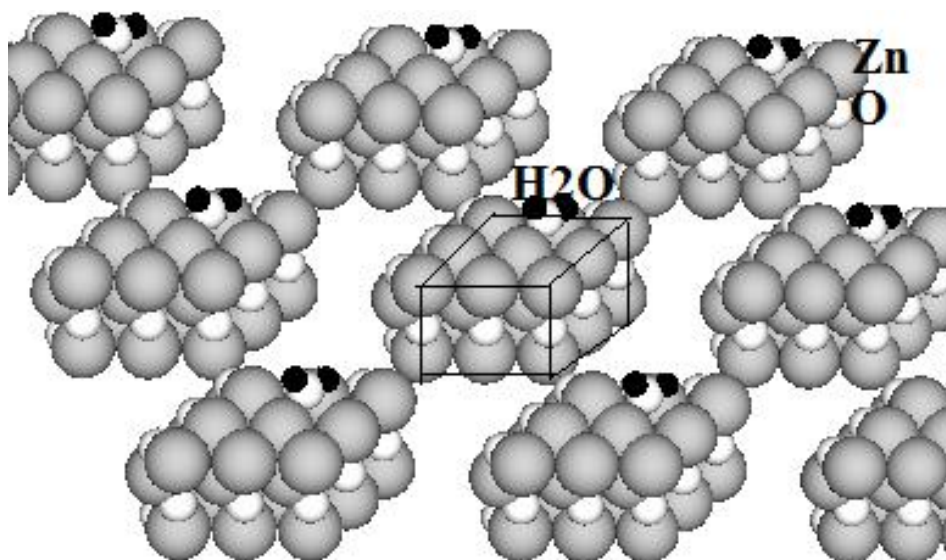


Рис. 13. Фрагмент масиву нанодротів ZnO з вюрцитовою кристалічною структурою, які вирощені вздовж осі Z: шари іонів Zn/O/Zn/O створюють послідовність у напрямку [0001]

Цинкіт (ZnO) в структурному типі вюрцита має такі параметри елементарної комірки:  $a=b=3,249 \text{ \AA}$ ,  $c=5,205 \text{ \AA}$ . Атоми кисню O утворюють двошарове щільне впакування, у якому цинк Zn заповнює половину тетрадричних порожнин однієї орієнтації. В об'ємі ZnO шари тих й інших атомів чергуються уздовж осі  $c$  і спричиняють полярність кристалів:  $\text{Zn}^{2+}$  утворює шари (0001), а  $\text{O}^{2-}$  – (000 $\bar{1}$ ). Відстані Zn – O уздовж осі  $c$  становлять  $1,992 \text{ \AA}$ , а в трьох інших напрямках –  $1,973 \text{ \AA}$ . У гексагональній структурі вюрцита кожен аніон оточений 4 катіонами, що розташовані у вершинах тетраедра (те ж саме для катіонів). Це типова координація  $sp^3$  ковалентного зв'язку, але ZnO має також суттєвий іонний характер (ступінь іонності 0.675). Електронні конфігурації O та Zn, відповідно:  $1s^2 2s^2 2p^4$  та  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2$ . Кристал вюрцита обмежується поверхнями: неполярними (1010) та (1120), полярними (0001), що завершуються іонами Zn, та (000 $\bar{1}$ ), що завершуються іонами O (рис.14). Шляхом іонного осадження з наступним відпалом при не дуже високих температурах можуть бути отримані всі чотири типи поверхонь з розташуванням атомів як в об'ємі.

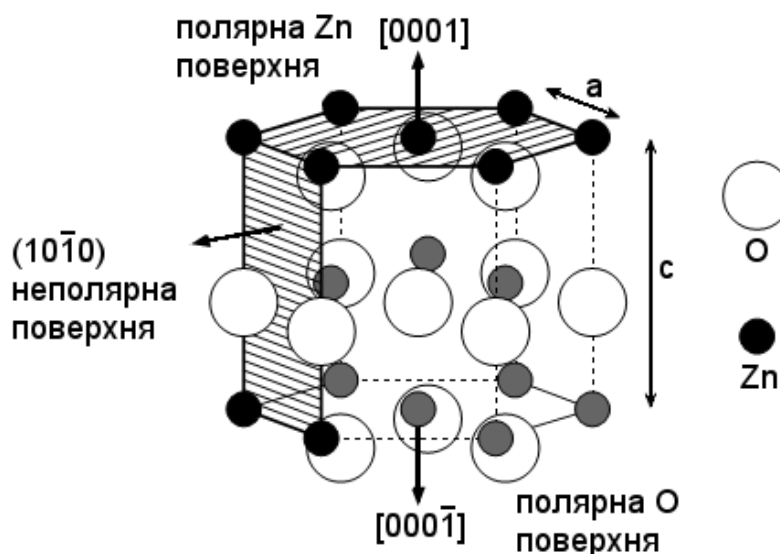


Рис. 14. Атомна структура кристалу ZnO

Алгоритм коду, за допомогою якого отримані всі результати даного чисельного дослідження базується на положеннях теорії функціонала електронної густини у локальному наближенні, псевдопотенціалу із перших принципів Бечелета-Хемена-Шльотера та методу суперрешіток. Розрахунки проводились за наступних умов: підсумовування по зоні Бриллюена штучної суперрешітки було замінено розрахунком в одній  $\Gamma$ -точці. Ітерації самоузгодження рішень рівнянь Кона-Шема припинялися, якщо результати розрахунку поточної ітерації збігалися з попередньою із наперед заданою похибкою [54-65]. Атомний базис не оптимізувався.

Лабораторна координатна система, що діє в межах авторського програмного комплексу, є прямокутною, а алгоритм розрахунку передбачає трансляційну симетрію у досліджуваній атомній системі, тому спочатку розроблялася штучна суперрешітка орторомбічного типу, одинична комірка якої представляє собою прямокутний паралелепіпед. Об'єктами дослідження визначалися параметри одиничної комірки цієї суперрешітки та атомного базису.

Було створено чотири групи атомних об'єктів: I – два нанодроти на примітивну комірку штучної суперрешітки, II – два нанодроти та дві молекули води, III – два нанодроти з однією вакансією ( $V_O$  або  $V_{Zn}$ ) на поверхні кожного, IV - два нанодроти з однією вакансією ( $V_O$  або  $V_{Zn}$ ) на поверхні кожного та дві молекули води. Молекули води встановлювались на різних позиціях по відношенню до нанодротів. При цьому відстань між молекулами води та поверхнями нанодротів була не меншою ніж сума радіусів поверхневих атомів дротів та найближчих до них атомів, з яких складаються молекули води. Трансляція примітивної комірки з описаним вище атомним базисом вздовж напрямків кристалографічних осей  $a$ ,  $b$ ,  $c$  що спряжені для даних об'єктів з осями  $x$ ,  $y$ ,  $z$  Декартової системи координат, приводить до створення нескінченного масиву дротів. При цьому параметри

трансляцій підбиралися таким чином, щоб уникнути взаємодії між дротами у напрямку  $c$  і цей параметр не змінювався під час чисельного експерименту, тоді як параметри трансляції у напрямках  $a$ ,  $b$ , навпаки, змінювалися, щоб виявити вплив розміру простору між боковими поверхнями дротів у масиві на їх гідрофобність.

Для кожної атомної конфігурації, що відповідала різним фіксованим позиціям молекул води, обчислювалася повна енергія (формула 1) та електричний заряд (формула 2) в околиці атома  $\alpha$  дроту, що був найближчим до молекули води, в об'ємі  $V$ :

$$\begin{aligned} \frac{E_{total}}{\Omega} = & \sum_{k,G,i} |b_i(\vec{k} + \vec{G})|^2 \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{G})^2 + \frac{1}{2} 4\pi e^2 \sum_{\vec{G}} \frac{|\rho(\vec{G})|^2}{\vec{G}^2} + \sum_{\vec{G}} \varepsilon_{xc}(\vec{G}) \rho^*(\vec{G}) + \\ & + \sum_{\vec{k}, \vec{G}, \vec{G}', i, l, s} S_s(\vec{G} - \vec{G}') \Delta V_{l,s}^{NL}(\vec{k} + \vec{G}, \vec{k} + \vec{G}') b_i(\vec{k} + \vec{G}) b_i^*(\vec{k} + \vec{G}') + \sum_{\vec{G}, s} S_s(\vec{G}) V_s^L(\vec{G}) \rho^*(\vec{G}) + \\ & + \left\{ \sum_s a_s \right\} \left[ \Omega^{-1} \gamma_{Ewald} \right] \end{aligned} \quad (1)$$

де  $\vec{k}$  має значення із першої зони Бриллюена суперрешітки,  $\vec{G}$  – вектор оберненої решітки,  $\Psi_i(\vec{k} + \vec{G})$  – коефіцієнт з розкладу хвильової функції,  $i$  – позначає зайняті стани для певного  $\vec{k}$ ,  $\rho(\vec{G})$  є коефіцієнт з розкладу густини валентних електронів,  $s$  нумерує атоми в одиничній комірці,  $S_s(\vec{G})$  є структурним фактором,  $V_s^L$  є локальний ( $l$  – незалежний) сферично симетричний псевдопотенціал,  $l$  – позначає квантове орбітальне число,  $\Delta V_{l,i}^{NL}$  є нелокальна ( $l$ -залежна) добавка до  $V_s^L$ ,  $Z_s$  – заряд іонного остову,  $\gamma_{Ewald}$  – це енергія Маделунга точкових іонних остовів;

$$q_\alpha = Z_\alpha - \int_{V_\alpha} \rho(\vec{r}) d\vec{r}. \quad (2)$$

Атомний базис одиничної комірки штучної решітки для відтворення об'єкта I складався з 108 атомів, об'єкта II - з 114 атомів, об'єкта III - з 106 атомів, об'єкта IV - з 112 атомів. Для всіх об'єктів крім зміни положень молекул

води та вакансій (6 варіантів розташування, рис. 15) на поверхні нанодроту змінювалися відстані між нанодротами: 3.3 Å, 2.9 Å та 2.5 Å.

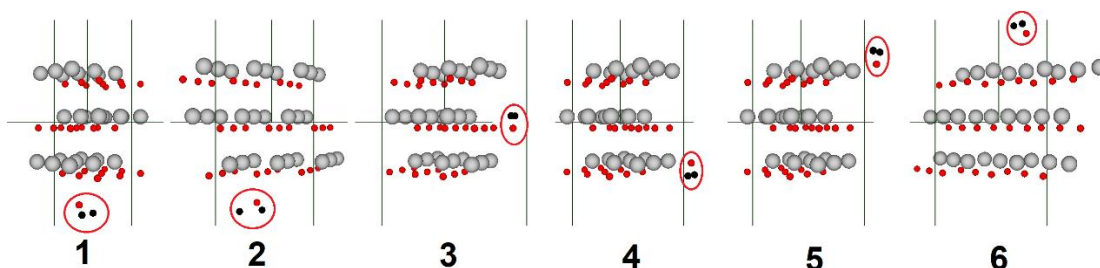


Рис. 15. Положення молекули води (обведена червоним еліпсом) біля поверхні нанодроту ZnO (об'єкт II), для яких проводилися обчислення. Великі сірі сфери позначають атоми цинку; маленькі червоні - кисню

Положення (локації) молекули води біля поверхні нанодроту ZnO, що позначені «1», «2», «3» є найближчими до поверхневих атомів кисню (O) нанодроту; при цьому локації «1», «2» знаходяться на полярній поверхні  $[000\bar{1}]$  O, а локація «3» знаходиться на неполярній поверхні  $[0100]$ . Положення «3», «4», «5» є найближчими до поверхневих атомів цинку (Zn) нанодроту, при цьому локації «5» та «6» знаходяться на полярній поверхні  $[0001]$  Zn, а локація «4» знаходиться на неполярній поверхні  $[0100]$ . Якщо на рис. 15 прибрати молекулу води, то отримаємо зображення об'єкта I. Якщо на рис. 15 прибрати молекулу води та певний поверхневий атом нанодроту, то отримаємо зображення об'єкта III. Якщо на рис. 15 відсутній атом, який є найближчим до молекули води, тобто утворена поверхнева вакансія, то отримаємо зображення об'єкта IV.

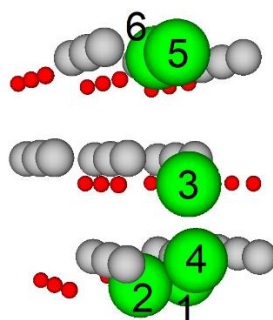


Рис. 16. Позиції атомів (позначені великими зеленими сферами) на поверхні дроту, до яких підводилися молекули води

На рис. 16 показані зразу всі позиції атомів на поверхні дроту, до яких підводилися молекули води, тобто позначена траєкторія руху молекули води.

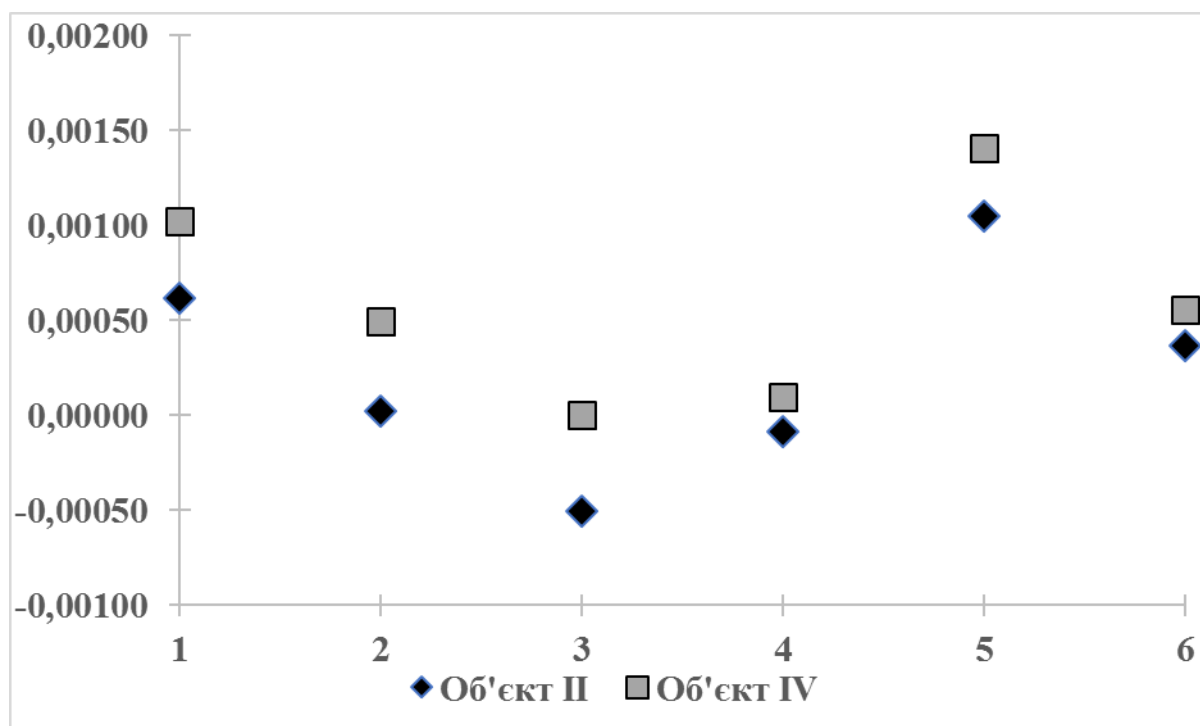


Рис. 17. Енергетичні рельєфи руху молекули води по траєкторії, що складалася із локацій «1» - «6», на поверхні нанодротів ZnO при відстанні між дротами 3.3 Å для об'єктів II та IV. Енергія наводиться в атомних одиницях

На рис. 17 - рис. 19 приводяться енергетичні рельєфи руху молекули води по траєкторії, що складалася із локацій «1» - «6» на поверхні нанодротів ZnO при відстані між дротами 3.3 Å, 2.9 Å або 2.5 Å, для об'єктів II та IV, що містили молекули води. Значення обчисленої за формулою (1) повної енергії нормувалися на об'єм одиничної комірки і кількість атомів в атомному базисі та відраховувалися від енергій атомних об'єктів I та III, що не містили води.



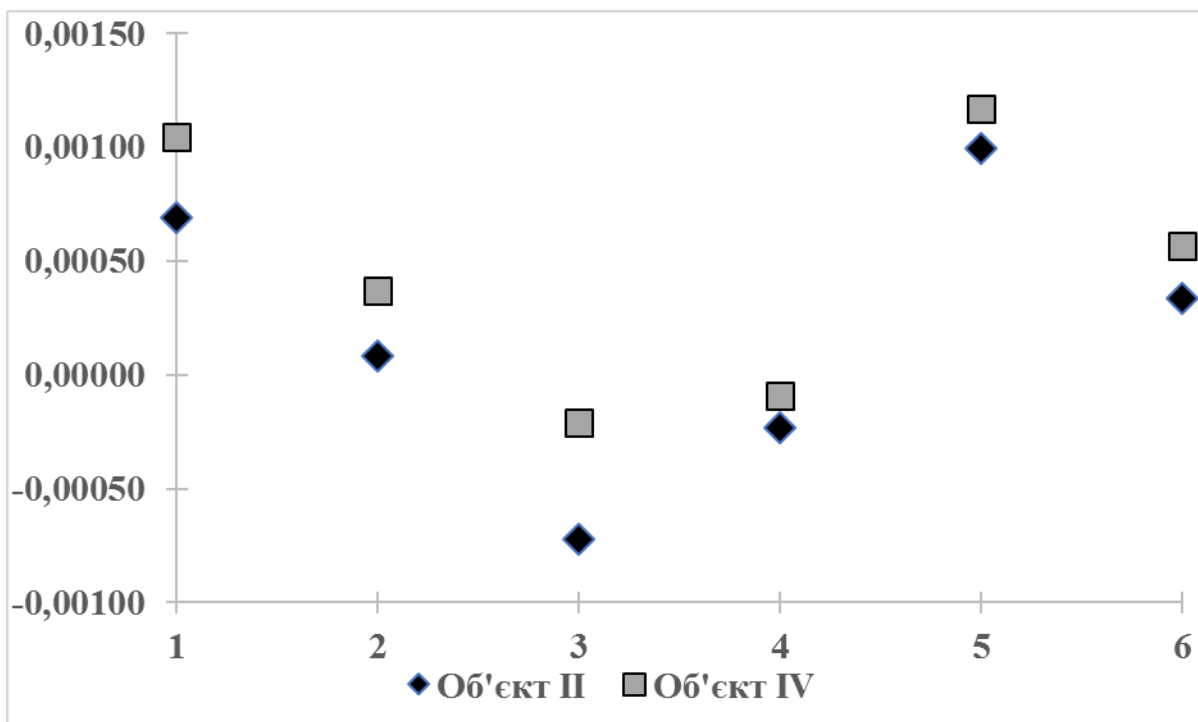


Рис. 18. Енергетичні рельєфи руху молекули води по траєкторії, що складалася із локацій «1» - «6», на поверхні нанодрогів ZnO при відстані між ними 2.9 Å для об'єктів II та IV. Енергія наводиться в атомних одиницях

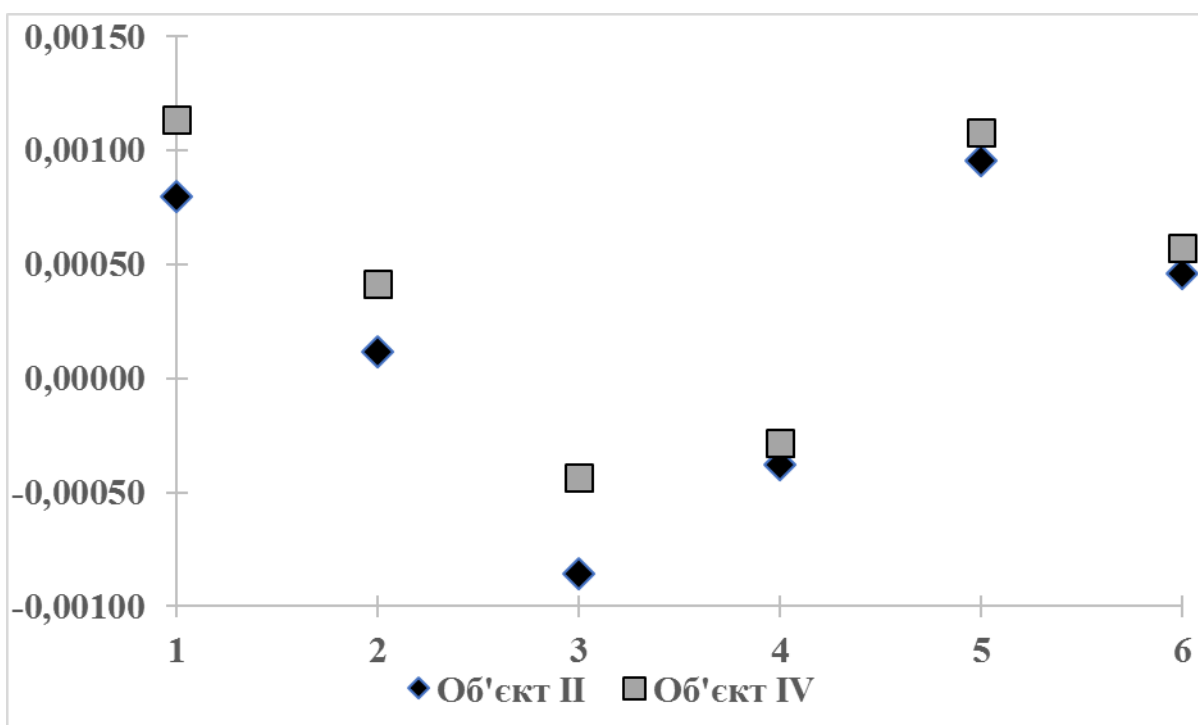


Рис. 19. Енергетичні рельєфи руху молекули води по траєкторії, що складалася із локацій «1» - «6», на поверхні нанодрогів ZnO при відстані між ними 2.5 Å для об'єктів II та IV. Енергія наводиться в атомних одиницях

Керуючись під час аналізу енергетичних рельєфів руху молекули води по визначеній вище траєкторії критерієм, який полягав у ствердженні, що гідрофобна реакція (відштовхування молекул води) поверхні нанодротів характеризується збільшенням повної енергії атомної системи (нанодроти+молекули води), тоді як гідрофільна реакція (притягування молекул води) – зменшенням, було визначено, що різні кристалографічні орієнтації поверхні нанодротів ZnO мають різну змочуваність. А саме, полярні поверхні нанодротів (локації «1», «2», «5» та «6») відштовхували молекули води, тоді як бокові поверхні (локації «3» та «4») проявляли властивість гідрофільності. Поверхневі дефекти, що пов'язані як з киснем так і цинком, не змінили якісний характер змочуваності поверхонь нанодротів ZnO, але збільшили енергетику цих процесів.

Кількість простору між нанодротами, тобто щільність нанодротів у масиві, котра змінювалася у даному чисельному експерименті шляхом зміни відстані між дротами, не виявилася критично важливим параметром, навіть якщо поверхні нанодротів ZnO були додатково модифіковані дефектами - не змінився якісний характер змочуваності поверхонь нанодротів ZnO при зменшені відстані між дротами, а тільки незначно збільшилися активаційні енергії цих процесів.

На рис. 20 - рис. 22 приводяться електричні заряди в околиці однакового сферичного об'єму з радіусом 1 Å поверхневих атомів нанодроту ZnO або їх вакансій, що розташовані вздовж траєкторії руху молекули води в локаціях «1» - «6», при відстані між дротами 3.3 Å, 2.9 Å або 2.5 Å для об'єктів I (без води), II (з водою), III (без води), IV (з водою)

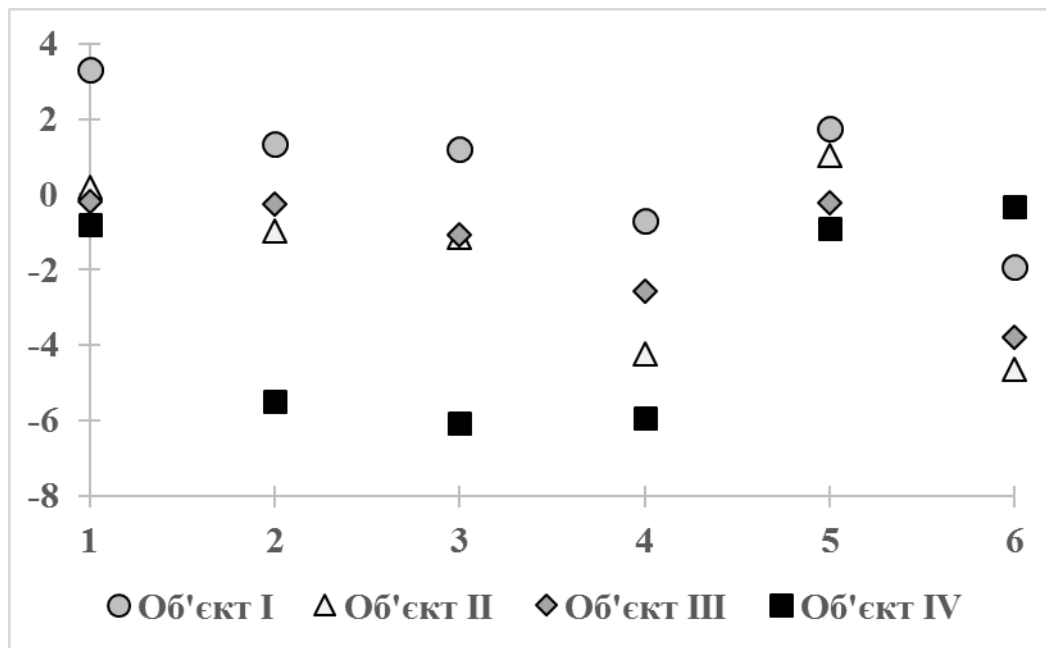


Рис. 20. Електричні заряди в околиці однакового об'єму поверхневих атомів нанодроту ZnO або їх вакансій, що розташовані вздовж траєкторії руху молекули води в локаціях «1» - «6», при відстані між дротами 3.3 Å, для об'єктів I (без води), II (з водою), III (без води), IV (з водою). Заряди наводяться в одиницях заряду електрону

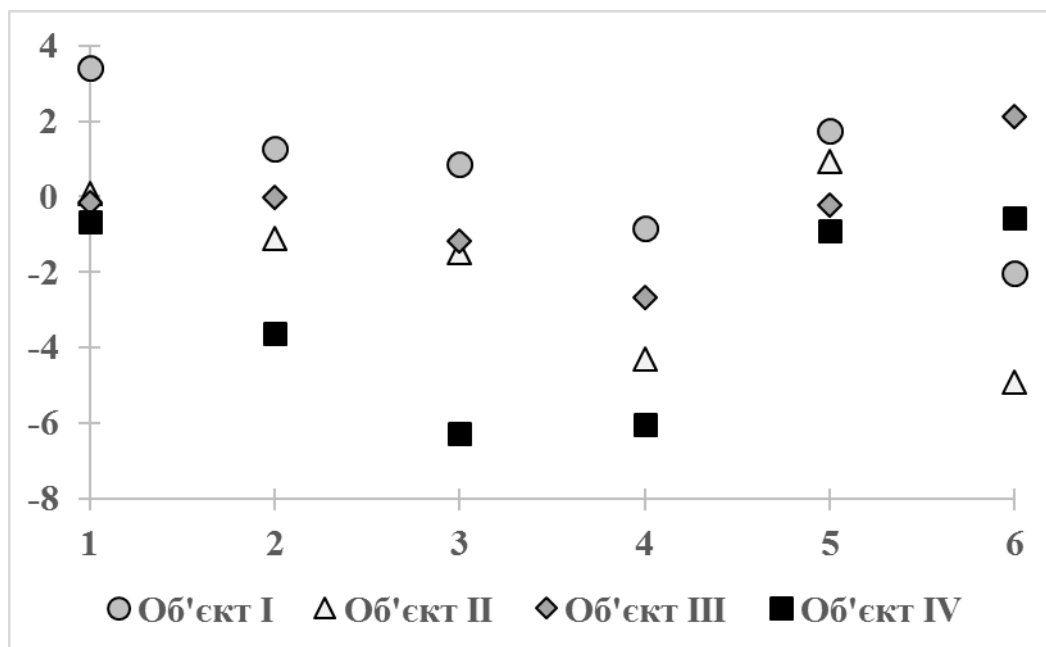


Рис. 21. Електричні заряди в околиці однакового об'єму поверхневих атомів нанодроту ZnO або їх вакансій, що розташовані вздовж траєкторії руху молекули води в локаціях «1» - «6», при відстані між дротами 2.9 Å, для

об'єктів I (без води), II (з водою), III (без води), IV (з водою). Заряди наводяться в одиницях заряду електрону

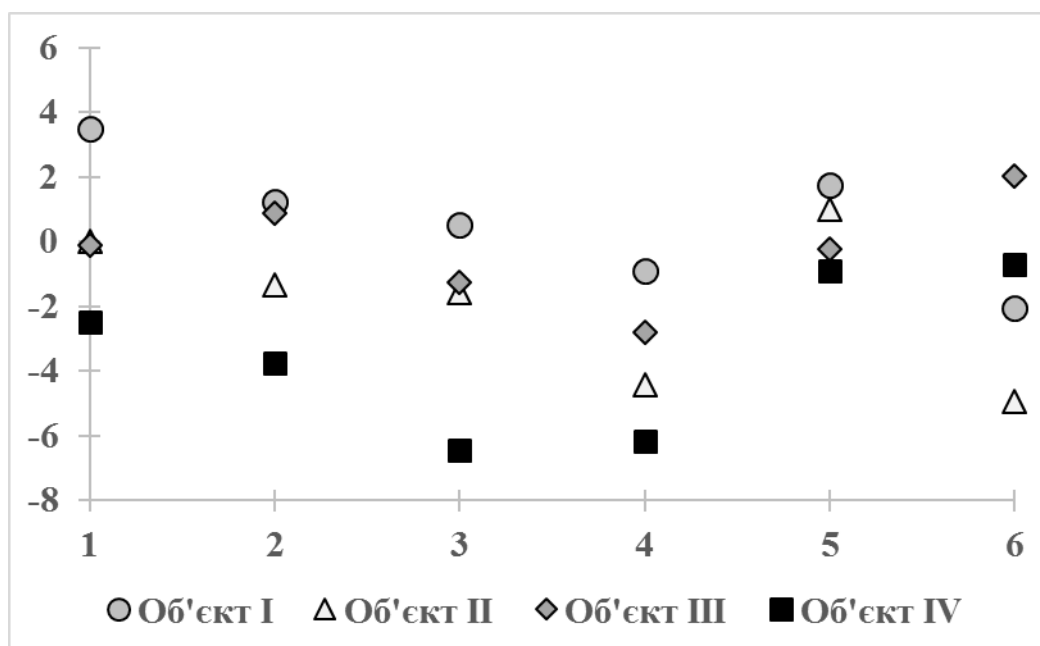


Рис. 22. Електричні заряди в околиці однакового об'єму поверхневих атомів нанодроту ZnO або їх вакансій, що розташовані вздовж траєкторії руху молекули води в локаціях «1» - «6», при відстані між дротами 2.5 Å, для об'єктів I (без води), II (з водою), III (без води), IV (з водою). Заряди наводяться в одиницях заряду електрону

Аналіз знаку та абсолютної величини електричного заряду, що попадав у обраний об'єм околиць досліджуваних локацій «1» - «6», дозволяє зробити висновки, що наявність молекул води біля локацій приводить до накопичення електронного заряду, про що свідчить знак «-» сумарного заряду, тоді як при відсутності молекул води ці області характеризуються відходом з них валентних електронів, про що свідчить знак «+» сумарного заряду.

## ВИСНОВКИ ДО РОЗДІЛУ 2

Представлено огляд останніх заходів, спрямованих на дослідження та застосування супергідрофобної поверхні нанодроту ZnO. Обговорені механізми супергідрофобності, починаючи з основ змочуваності та біоінспірованих моделей. Механізм супергідрофобності обговорюється для різних площин нанодротів ZnO.

Представлено гідрофільний-гідрофобний оборотний механізм перемикання, заснований на поверхневих дефектах, пов'язаних з киснем, описано можливості індукувати та контролювати зміну змочуваності нанодроту ZnO.

Оглянуто прогрес останніх досліджень із застосування супергідрофобних матеріалів на основі нанодротів ZnO для самоочищення, відділення, протизапотівання та інші. Вказано, що нанодроту ZnO мають подібність до інших наноструктур, які використовуються для супергідрофобних застосувань; однак деякі спеціальні властивості ZnO, такі як індукція поверхневих дефектів під УФ-променями, призводять до унікальних можливостей оборотного перемикання змочуваності. Внутрішні характерні переваги нанодротів ZnO, такі як фотокаталітичні, антибактеріальні або протигрибкові властивості, можуть призвести до багатофункціональних супергідрофобних поверхонь.

Методами функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу із перших принципів отримані енергетичні рельєфи міграції молекул води вздовж різних бічних поверхонь нанодротів ZnO без дефектів та з вакансіями кисню або цинку на поверхнях нанодроту.

Визначено, що полярні поверхні нанодротів відштовхують молекули води, тоді як бокові неполярні поверхні проявляють властивість гідрофільності. Поверхневі дефекти, що пов'язані як з киснем так і цинком, не змінюють якісний характер змочуваності поверхонь нанодротів ZnO, але збільшують енергетику цих процесів.

Встановлено, що щільність нанодротів у масиві, котра контролювалася у даному чисельному експерименті шляхом зміни відстані між дротами, не виявилася критично важливим параметром, навіть якщо поверхні нанодротів ZnO були додатково модифіковані дефектами. Визначено, що не змінюється якісний характер змочуваності поверхонь нанодротів ZnO при зменшенні відстані між дротами, а тільки незначно збільшуються активаційні енергії цих процесів.

## ВИСНОВКИ

Здійснено огляд теоретично-методичної літератури та реалізовані такі завдання:

- оглянуто рекомендації щодо методів формування та розвитку обдарованої особистості;
- обговорено методологію та інструментарій виявлення інтелектуально обдарованих старшокласників, схильних до дослідницької діяльності;
- вказано на методи інтелектуального розвитку учнів в освітньому процесі закладів середньої освіти;
- визначено, що значну роль у вирішенні завдань розвитку молодого покоління відіграє своєчасне виявлення та підтримка обдарованих дітей, максимальна реалізація їхніх задатків і здібностей;
- підкреслено, що Мала академія наук України – загальнодержавний науково-громадський проект, спрямований на пошук, підтримку, сприяння творчому розвитку обдарованих, здібних до наукової діяльності учнів, школярів, студентів;
- запропонована наукова тема із питань матеріалознавства для методичної розробки, мета якої показати суть процесів, які відбуваються в природі, запропонувати матеріали, які стануть заміниками природних матеріалів, оскільки відбувається їх виснаження, проблема створення екологічно чистої води та ін.

Представлено огляд останніх заходів, спрямованих на дослідження та застосування супергідрофобної поверхні нанодроту ZnO.

Обговорені механізми супергідрофобності, починаючи з основ змочуваності та біоінспірованих моделей.

Оглянуто прогрес останніх досліджень із застосування супергідрофобних матеріалів на основі нанодротів ZnO для самоочищення, відділення, протизапотівання та інші.

Методами функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу із перших принципів отримані енергетичні рельєфи міграції молекул води вздовж різних бічних поверхонь нанодротів ZnO без дефектів та з вакансіями кисню або цинку на поверхнях нанодроту.

Визначено, що полярні поверхні нанодротів відштовхують молекули води, тоді як бокові неполярні поверхні проявляють властивість гідрофільності. Поверхневі дефекти, що пов'язані як з киснем так і цинком, не змінюють якісний характер змочуваності поверхонь нанодротів ZnO, але збільшують енергетику цих процесів.

Встановлено, що щільність нанодротів у масиві, котра контролювалася у даному чисельному експерименті шляхом зміни відстані між дротами, не виявилася критично важливим параметром, навіть якщо поверхні нанодротів ZnO були додатково модифіковані дефектами. Визначено, що не змінюється якісний характер змочуваності поверхонь нанодротів ZnO при зменшенні відстані між дротами, а тільки незначно збільшуються активаційні енергії цих процесів.



## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Бедніна, В. Педагогічні особливості підготовки дослідницьких робіт старшокласників для захисту на всеукраїнських та міжнародних конкурсах / В. Бедніна // Рідна школа. – 2011. – № 12. – С. 24—27.
2. Білодід, Л. М. Організація науково-дослідницької діяльності учнів на уроках літератури й позакласній роботі: з професійного досвіду / Л. М. Білодід // Вивчаємо українську мову та літературу. – 2018. – № 15. – С. 2—8.
3. Бондар, Л. О. Підготовка школярів до хімічних олімпіад / Л. О. Бондар, Л. Є. Северін // Хімія. – 2011. – № 4. – С. 2—5.
4. Бондаренко, А. Розвиток творчого потенціалу школярів через науково-дослідну роботу / А. Бондаренко // Біологія. – 2015. – № 13—14. – С. 2—19; Географія. — 2015. — № 11—12. — С. 8—28.
5. Бондаренко, С. Ю. Формування в учнів ключових компетенцій у процесі науково-дослідної та проектної діяльності / С. Ю. Бондаренко // Біологія. – 2012. – № 29. – С. 2—6.
6. Борисенко, Н. О. Розробка змісту виховання в учнів свідомого ставлення до природи у спадщині вчених-природознавців, педагогів-методистів і вчителів-практиків/ Н. О. Борисенко // Теорія та методика навчання та виховання : зб. наук. праць / М-во освіти і науки України, Харків. нац. пед. ун-т імені Г. С. Сковороди; [редкол.: Троцько Г.В. та ін.]. – Харків : ХНПУ, 2007. – Вип. 19. – С.12—21.
7. Бугай, О. В. Практичні поради малим академікам / О. В. Бугай, Н. С. Огурцова// Біологія. – 2010. – № 19—21. – С. 15—25.
8. Буланов, Ю. І. Проект "Центр інтелектуального дозвілля "Інтек" / Ю. І. Буланов// Позакласний час. – 2010. – № 12. – С. 82—96.
9. Васильєва, С. О. Етапи та способи організації науково-дослідницької діяльності учнів у загальноосвітніх навчальних закладах : теорія і практика навчання та виховання / С. О. Васильєва // Збірник наукових

- праць Полтавського державного педагогічного університету ім. В. Г. Короленка / [голов. ред. кол. : Пащенко В. О. (голов. ред.) та ін.]. – Полтава : [б. в.], 2008. – Вип. 3 (61). – С. 150—156.
10. Васильєва, С. О. Методика організації науково-дослідницької діяльності учнів / С. О. Васильєва // Педагогіка та психологія : зб. наук. пр. / Харків. нац. пед. ун-т імені Г. С. Сковороди ; за заг. ред. І. Ф. Прокопенка, В. І. Лозової. – Харків : Курсор, 2007. – Вип. 32. – С. 48—54.
  11. Васильєва, С. О. Організація науково-дослідної діяльності старшокласників у загальноосвітніх навчальних закладах : автореф. дис. на здоб. наук. ступеня канд. пед. наук : спец. 13.00.01 — заг. пед. та іст. пед. / С. О. Васильєва ; Харк. нац. пед. ун-т імені Г. С. Сковороди. – Харків : [б. в.], 2007. – 20 с.
  12. Васильєва, С. О. Організація науково-дослідної діяльності старшокласників у загальноосвітніх навчальних закладах : дис. на здоб. наук. ступеня канд. пед. наук : спец. 13.00.01 — заг. пед. та іст. пед. / С. О. Васильєва ; Харків. нац. пед. ун-т імені Г. С. Сковороди. – Харків : [б. в.], 2007. – 226 с. + дод., CD.
  13. Васильєва, С. О. Проблема організації науково-дослідницької діяльності у загальноосвітніх навчальних закладах / С. О. Васильєва // Культура та інформаційне суспільство ХХІ століття : матеріали наук. конф. молодих учених 16 — 18 квіт. 2003 р. / Харків. держ. акад. культури ; [відп. ред. І. В. Щербіна]. – Харків : ХДАК, 2003. – С. 60.
  14. Васильєва, С. О. Факультативний курс як один із способів організації науково-дослідної діяльності учнів у загальноосвітньому навчальному закладі / С. О. Васильєва // Педагогіка та психологія / Харків. держ. пед. ун-т імені Г. С. Сковороди ; [за заг. ред. І. Ф. Прокопенка, В. І. Лозової]. – 2003. – Вип. 24. – С. 87—94.
  15. вищої освіти в частині провадження ними наукової (науково-технічної) діяльності : постанова Кабінету Міністрів України від 22

- серп. 2018 р. № 652 // Урядовий кур'єр. – 2018. – 7 верес. (№ 167). – С. 5—6.
16. Галалюк, Н. Методика написання шкільних рефератів / Н. Галалюк // Географія та основи економіки в школі. – 2011. – № 3. – С. 16–19.
  17. Галата, С. Манлаб: спочатку в Києві, потім - у Лондоні: наука і технолог/ С. Галата // Освіта України. – 2014. – 3 лют. (№ 5). – С. 11.
  18. Галата, С. Самореалізуватися в науці / С. Галата // Освіта України. – 2017. – 11 груд. (№ 48). – С. 12—13.
  19. Гриценко, Н. Розвиваємо творчий потенціал учнів: виступ на семінарі / Н. Гриценко // Завуч. Шкільний світ. – 2013. – № 19. – С. 5-7.
  20. Грудинін, Б. Особливості проведення всеукраїнського конкурсу-захисту науково- дослідницьких робіт в системі МАН України / Б. Грудинін // Вища школа. – 2017. – №11. – С. 67—81.
  21. Гуржій, А. М. Рекомендації до розв'язування задач міжнародних і всеукраїнських олімпіад серед учнів: навч.-метод. посіб. / А. М. Гуржій, В. В. Бондаренко ; АПН України; Ін-т інформаційних технологій і засобів навчання. – Київ : ТОВ Редакція "Комп'ютер", 2008. – 128 с.
  22. Давыдова, Е. Р. Исследовательская деятельность учащихся / Е. Р. Давыдова// Начальная школа. – 2010. – № 12. – С. 61—62.
  23. Данчук, А. Методичні рекомендації щодо написання науково-дослідних учнівських робіт / А. Данчук // Біологія. Шкільний світ. – 2014. – № 3. – С. 22—32.
  24. Дзигіна, Л. Б. Програма підготовки учнів до участі в математичних олімпіадах/ Л. Б. Дзигіна // Математика в школах України. – 2009. – № 16-18. – С. 76—89.
  25. Дічек, Н. Всеукраїнські конференції як чинник розвитку історико-педагогічних досліджень в Україні / Н. Дічек // Шлях освіти. – 2010. – № 4. – С. 28—31.
  26. Євдокимова, Т. Організація науково-дослідницької роботи учнів / Т.

- Євдокимова // Завуч. Шкільний світ. – 2014. – № 19. – С. 17—21.
27. Єпіфанова, Ю. Підходи до правового регулювання наукової творчої діяльності/ Ю. Єпіфанова // Теорія і практика інтелектуальної власності. – 2010. – № 2. С.75 — 79.
28. Здор, С. В. НТУ як ефективна форма роботи з обдарованими дітьми / С. В. Здор // Біологія. – 2009. – № 2. – С. 2—9.
29. Іващенко, О. В. Про підготовку підручників та навчальних посібників курсу "Основи науково-дослідної діяльності" / О. В. Іващенко // Теорія та методика фізичного виховання. – 2005. – № 1. – С. 14—17.
30. Інструкції для експертів з науково-дослідної, експериментальні роботи // Підручник для директора. – 2008. – №12. – С. 41—53.
31. Кандаскалов, Д.Олімпіада з хімії імені С. Реформаторського, 2007/08 н. р. / Д. Кандаскалов // Хімія. Шкільний світ. – 2008. – № 36. – С. 3 —16.
32. Кириленко, І. Національна академія наук України : основні засади розвитку та державної підтримки / І. Кириленко // Голос України. – 2018. – 22 груд. (№ 247). – С. 4.
33. Клепиков, В. Н. Научное общество учащихся как форма работы по этическому воспитанию / В. Н. Клепиков // Педагогика. – 2009. – №1. – С. 37— 43.
34. Коваленко,В. Організаціянауково-дослідної роботи учнів / В. Коваленко // Директор школи. Шкільний світ. – 2011. – №46. – С. 24—25.
35. Ковалів, І. Навіщо розумникам битви інтелектів? / І. Ковалів // Урядовий кур'єр. – 2016. – 30 берез. (№ 60). – С. 4.
36. Кодинець, А. Договірні інформаційні відносини у сфері наукової діяльності: проблеми теорії та практики / А. Кодинець // Підприємництво, господарство і право. – 2015. – № 2. – С. 15—18.
37. Кожем'яка, О. Формування і розвиток науково-дослідницьких умінь і

- здібностей у старшокласників / О. Кожем'яка // Історія в сучасній школі. – 2013. – № 12. – С. 25—27.
38. Копняк, В. Є. Формування навичок роботи з інформаційними технологіями у гуртковій роботі / В. Є. Копняк // Комп'ютер у школі та сім'ї. – 2012. – № 1. – С. 27—28.
39. Кортяк, Н. Шкільне наукове товариство - товариство великих можливостей / Н. Кортяк, А. Кортяк // Завуч. Шкільний світ. – 2014. – № 15. – С. 18—23.
40. Костоглодова, О. Учнівське наукове товариство / О. Костоглодова // Директор школи. Шкільний світ. – 2009. – № 9-10. – С. 10—11.
41. Крамарчук, О. Активна молодь і науковці потрібні рідній державі / О. Крамарчук // Урядовий кур'єр. – 2018. – 7 листоп. (№ 209). – С. 2.
42. Кривонос, О. Б. Методологія науково-дослідної роботи : навч. посіб. для студ. вищ. мед. навч. закл. I—III рівнів акредитації / О. Б. Кривонос, О. М. Демченко ; за ред. О. В. Кононова. – Київ : Медицина, 2011. – 159 с.
43. Кузнецова, І. Діяльність Малої Академії наук: шкільний етап / І. Кузнецова // Завуч. Шкільний світ. – 2014. – № 15. – С. 14—17.
44. Кулик, Н. GLOВальна справа: екологічна освіта / Н. Кулик // Освіта України. – 2016. – 8 серп. (№ 31). – С. 8.
45. Мальська, М. П. Організація наукових досліджень : навч. посіб. / М. П. Мальська, І. Г. Пандяк ; Львів. нац. ун-т ім. І. Франка. – Київ : Центр учб. л-ри, 2017. – 135 с.
46. Наукові дослідження в інтер'єрі сучасної цивілізації / О. М. Рубанець // Практична філософія. – 2005. – № 1. – С. 26 - 32.
47. Положення про порядок здійснення інноваційної освітньої діяльності : нормативне забезпечення науково-дослідної роботи освітньої установи // Підручник для директора. – 2008. – №3. – С. 38—50.
48. Пріоритетні напрями наукових досліджень до 2022 року. Стратегії і тактики освіти. Прикладний менеджмент // Управління освітою. – 2019.

– № 4. – С. 54—65.

49. Стріха, М. Яке фінансування потрібне науці. / М. Стріха // Урядовий кур'єр. – 2016. – 5 лют. (№ 23). – С. 6.
50. Технологія наукових досліджень : (схеми та приклади) : навч. посіб. / М-во освіти і науки України [та ін.] ; уклад. М. С. Дороніна. – Харків : ІНЖЕК, 2005. – 58 с.
51. Антонова О.Є. Залучення старшокласників до науково-дослідної діяльності МАН як засіб розвитку їх дослідницьких здібностей // Інновації в освіті: інтеграція науки і практики : зб. наук-метод. праць / за заг. ред. О.А. Дубасенюк – Житомир: ФОП Левковець, 2014. – С. 56-75
52. Mardosaitė R., Jurkevičiūtė A., Račkauskas S. Superhydrophobic ZnO Nanowires: Wettability Mechanisms and Functional Applications. *Crystal Growth & Design*. 2021. Vol. 21, No. 8. P. 4765–4779.
53. Stepanyuk A.N., Balabai R.V. Controlling by Defects of Switching of ZnO Nanowire Array Surfaces from Hydrophobic to Hydrophilic. XIX Міжнародна Фреїківська конференція з фізики і технологій тогких плівок та наносистем. Матеріали. Івано-Франківськ : Вид-во Прикарпатського нац. Ун-т ім. Василя Стефаника, 2023. С.44
54. Bachelet G. B., Hamann D. R., Schlüter M. Pseudopotentials that work: From H to Pu. *Physical Review B*. 1982. Vol. 26, no. 8. P. 4199–4228. URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.26.4199> (date of access: 22.05.2023)
55. Denteneer P. J. H., Haeringen W. v. The pseudopotential-density-functional method in momentum space: details and test cases. *Journal of Physics C: Solid State Physics*. 1985. Vol. 18, no. 21. P. 4127–4142. URL: <https://doi.org/10.1088/0022-3719/18/21/>
56. Dreizler R. M., Gross E. K. U. *Density Functional Theory*. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 1990. URL: <https://doi.org/10.1007/978-3-642-86105-5>

57. Excellent corrosion protection performance of epoxy composite coatings filled with silane functionalized silicon nitride / Y. Zhang et al. *Journal of Polymer Research*. 2018. Vol. 25, no. 5. URL: <https://doi.org/10.1007/s10965-018-1518-2>
58. Functionalization of Quasi-Two-Dimensional Materials: Chemical and Strain-Induced Modifications / A. G. Solomenko et al. *Progress in Physics of Metals*. 2022. Vol. 23, no. 2. P. 147–238. URL: <https://doi.org/10.15407/ufm.23.02.147>
59. Hamann D. R., Schlüter M., Chiang C. Norm-Conserving Pseudopotentials. *Physical Review Letters*. 1979. Vol. 43, no. 20. P. 1494–1497. URL: <https://doi.org/10.1103/physrevlett.43.1494>
60. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous Electron Gas. *Physical Review*. 1964. Vol. 136, no. 3B. P. B864–B871. URL: <https://doi.org/10.1103/physrev.136.b864> (date of access: 22.05.2023)
61. Improvement of Corrosion Resistances of Organosilane-Epoxy Coating on Al Alloy 6101 with Addition of Zinc Phosphate Pigment / Ahsan Riaz Khan et al. *Surface Engineering and Applied Electrochemistry*. 2022. Vol. 58, no. 6. P. 720–730. URL: <https://doi.org/10.3103/S1068375522060096>
62. Keast V. J. Corrosion processes of silver nanoparticles. *Applied Nanoscience*. 2022. URL: <https://doi.org/10.1007/s13204-022-02462-1>
63. Kohn W., Sham L. J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Physical Review*. 1965. Vol. 140, no. 4A. P. A1133–A1138. URL: <https://doi.org/10.1103/physrev.140.a1133>
64. Makov G., Shah R., Payne M. C. Periodic boundary conditions in ab initio calculations. II. Brillouin-zone sampling for aperiodic systems. *Physical Review B*. 1996. Vol. 53, no. 23. P. 15513–15517. URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.53.15513>

65. Naumenko M. V., Balabai R. M. Synergistic properties of  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanowire arrays. *Physics and Chemistry of Solid State*. 2023. Vol. 24, No. 1. P. 56–63.



## АНОТАЦІЯ

Новіков В.М. Методична розробка теми «Наноструктури, що контролюють гідрофобність поверхонь» для застосування в науково-дослідницькій роботі учнів ліцеїв : магістерська робота студента групи ФМм-22 / науковий керівник – доктор фізико-математичних наук, професор Р. М. Балабай. Кривий Ріг, 2023, 73 с.

Визначено методологію та інструментарій формування та розвитку обдарованої особистості. Запропонована та розроблена наукова тема із питань матеріалознавства, спрямованої на дослідження супергідрофобності поверхні нанодротів на основі ZnO.

*Ключові слова:* обдарована особистість, науково-дослідницька робота учнів, методична розробка, гідрофільність, гідрофобність, нанодроти на основі ZnO.