

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

МІЖАТОМНІ ПОТЕНЦІАЛИ МАШИННОГО НАВЧАННЯ В
ДОСЛІДЖЕННІ ГРАФЕНОВИХ КВАНТОВИХ ТОЧОК У
НАНОКОМПОЗИТАХ

Кваліфікаційна робота
студента групи ФМм-24
ступінь вищої освіти магістр
спеціальності 014.08 Середня освіта (Фізика
та астрономія)
Коротиша Віктора Олексійовича

Керівник:
доктор фізико-математичних наук,
професор
Соловйов Володимир Миколайович

Кривий Ріг - 2025

ЗАПЕВНЕННЯ

Я, Коротиш Віктор Олексійович, 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.

(підпис)

Зміст

Зміст.....	3
Перелік скорочень, умовних позначень і термінів.....	5
Вступ	7
РОЗДІЛ 1. ТЕОРЕТИЧНІ ЗАСАДИ УТВОРЕННЯ ДЕФЕКТІВ У ГРАФЕНОВИХ КВАНТОВИХ ТОЧКАХ	12
1.1. Сучасні тренди в теорії та практиці наноструктур	12
1.2. Дефекти в графенових квантових точках: історія та класифікація	14
1.3. Розвиток досліджень графену та графенових квантових точок	15
Висновки до розділу 1	16
РОЗДІЛ 2. СУЧАСНІ ПІДХОДИ ДО МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ДЕФЕКТОУТВОРЕННЯ В НАНОМАТЕРІАЛАХ	18
2.1. Моделювання дефектів з використанням квантово-механічних методів та підходів машинного навчання.....	18
2.2. Точкові дефекти в графені	23
2.3 Функціоналізація і легування як інструменти керування властивостями графенових квантових точок.....	28
Висновки до розділу 2	32
РОЗДІЛ 3. МОДЕЛЮВАННЯ ДЕФЕКТОУТВОРЕННЯ У НАНОМАТЕРІАЛАХ	34
3.1. Моделювання дефектів у графенових квантових точках	34
3.2. Функціоналізація графенових квантових точок	55
3.3. Вплив легування на дефектоутворення та властивості графенових квантових точок.....	59

3.4. Дидактичні основи вивчення квантових явищ на прикладі моделювання графенових квантових точок і дефектів у них під час занять шкільного фізичного гуртка.....	65
Висновки до розділу 3	69
Висновки	71
Список використаних джерел.....	73
Додаток А.....	79
Додаток Б	82

Перелік скорочень, умовних позначень і термінів.

ГКТ (GQD, Graphene Quantum Dots) - графенові квантові точки.

DFT (density functional theory) - теорія функціоналу густини.

МПМН (MLIPs, Machine-Learning Interatomic Potentials) - міжатомні потенціали машинного навчання.

MACE (Machine-Learned Atomic Cluster Expansion) - машинно-навчальний підхід до побудови міжатомних потенціалів на основі кластерного розкладу.

ab initio (лат. «з початку», «з перших засад») - квантово-механічні розрахунки з перших засад, без емпіричних параметрів.

ASE (Atomic Simulation Environment) - середовище для моделювання та автоматизації розрахунків атомних систем.

ML (Machine Learning) - машинне навчання.

Jmol (Java molecules) - програмне забезпечення для інтерактивної тривимірної візуалізації молекулярних і кристалічних структур.

LDA (Local Density Approximation) - локальна апроксимація густини.

GGA (Generalized Gradient Approximation) - узагальнена градієнтна апроксимація.

NNP (Neural Network Potentials) - міжатомні потенціали, побудовані на основі нейронних мереж.

GAP (Gaussian Approximation Potentials) - міжатомні потенціали з гаусівською апроксимацією.

SNAP (Spectral Neighbor Analysis Potential) - потенціали на основі спектрального аналізу локальних атомних оточень.

Дефект Стоуна-Вельса (Stone-Wales defect - SW) - топологічний дефект у графені.

HRTEM (High-Resolution Transmission Electron Microscopy) - високороздільна трансмісійна електронна мікроскопія.

Raman (Raman spectroscopy) - спектроскопія комбінаційного (раманівського) розсіювання.

STM (Scanning Tunneling Microscopy) - сканувальна тунельна мікроскопія.

E(3) (Euclidean Group in 3D) - евклідова група рухів у тривимірному просторі.

PES (Potential Energy Surface) - потенційна енергетична поверхня, залежність енергії системи від координат атомів.

BFGS (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno) - алгоритм оптимізації, який використовується для знаходження мінімуму потенційної енергії системи в атомістичних розрахунках.

FIRE (Fast Inertial Relaxation Engine) - швидкий метод релаксації атомних конфігурацій, що поєднує інерційні та оптимізаційні підходи для ефективного досягнення мінімуму енергії.

NMC2025 (Neuromorphic Materials Calculator 2025) - командна платформа, яка поєднує функції штучного інтелекту-т'ютора з автоматизованими робочими процесами моделювання: генерація вхідних даних для квантово-механічних розрахунків, оптимізація параметрів, аналіз і пошук матеріалів для нейроморфних застосувань.

Вступ

Актуальність теми дослідження. У сучасному матеріалознавстві особливу увагу приділяють наноструктурованим матеріалам, зокрема графеновим квантовим точкам (ГКТ), завдяки їхнім унікальним електронним, оптичним і механічним властивостям [1-2]. Висока питома поверхня, квантовий конфайнмент, регульована ширина забороненої зони, хімічна стабільність та біосумісність роблять ГКТ перспективними для застосування в оптоелектроніці, енергетиці, сенсорних технологіях, фотоніці та біомедицині[1-3]. Їхні властивості дозволяють створювати високочутливі датчики, ефективні сонячні елементи, нанофотонні пристрої та біосумісні матеріали для медичних застосувань, що підкреслює їхню важливість як у фундаментальних, так і прикладних дослідженнях[1-4].

Особливу значущість набуває дослідження дефектів у ГКТ [1-6]. Точкові (вакансії, дивакансії)[7-12], топологічні (наприклад Стоуна-Вельса - SW)[7-14] та леговані дефекти (азот N, бор B, фосфор P, сірка S, кремній Si, кисень O, водень H, фтор F, хлор Cl, метали - Fe, Co, Ni, Cu, Pt, Au)[15, 16] суттєво змінюють електронну структуру матеріалу, його провідність, магнітні властивості, стабільність та функціональність нанокompозитів. Вивчення енергії формування таких дефектів є критично важливим для керованої функціоналізації матеріалу, оптимізації його властивостей і проєктування наноструктур із заданими характеристиками. Це дозволяє не лише прогнозувати поведінку матеріалів під час експлуатації, але й створювати нові наноматеріали з покращеними функціональними характеристиками [7-16].

Традиційні квантово-механічні методи моделювання, зокрема DFT [17, 18, 19, 20], забезпечують високу точність, проте вони надзвичайно обчислювально затратні, що обмежує можливості масштабування досліджень. У цьому контексті значну роль відіграють МПМН[8,21], зокрема моделі типу MACE[8, 21, 22, 23], які поєднують точність *ab initio*[24] з високою ефективністю. Це дозволяє проводити

структурну оптимізацію, аналіз дефектів, розрахунки електронної густини та динаміку атомів у великих системах у прийнятні часові рамки.

Традиційні квантово-механічні методи моделювання, зокрема DFT[17, 18, 19, 20], забезпечують високоточний опис електронної структури матеріалів, дозволяючи передбачати їхні оптичні, електронні та магнітні властивості на фундаментальному рівні. Вони дають змогу розраховувати енергії формування дефектів, взаємодії між атомами, зарядові розподіли та спектри збуджених станів із точністю, яка практично відповідає експериментальним даним. Проте такі методи мають надзвичайну обчислювальну затратність: навіть для систем середнього розміру (кілька сотень атомів) розрахунки можуть займати тижні на сучасних суперкомп'ютерах. Це обмежує масштабування досліджень, ускладнює моделювання великих нанокомпозитів і не дозволяє ефективно вивчати динамічні процеси та багатовимірні дефектні конфігурації.

У цьому контексті особливу роль відіграють МПМН[8,21], зокрема моделі типу MACE[8, 21, 22, 23], які поєднують точність методів *ab initio*[24] із високою обчислювальною ефективністю. Використання МПМН дозволяє значно зменшити час розрахунків при збереженні точності прогнозу енергій і сил між атомами. Це відкриває можливості для структурної оптимізації великих наносистем, аналізу точкових дефектів, розрахунку електронної густини та проведення молекулярної динаміки у масштабах, недоступних традиційним DFT-методам. Крім того, такі підходи дозволяють моделювати реалістичні умови експерименту, включаючи температуру, тиск і взаємодію із середовищем, що робить їх надзвичайно цінними для передбачення поведінки матеріалів у прикладних задачах.

Сучасні наукові досягнення демонструють пріоритетне значення інтеграції штучного інтелекту та нанотехнологій. Наприклад, Нобелівські премії з хімії 2023 року (за відкриття та синтез квантових точок) та з фізики 2024 року (за прориви у галузі машинного навчання) засвідчили глобальний тренд на використання

інтелектуальних алгоритмів у моделюванні, передбаченні властивостей і синтезі нових матеріалів [25-28]. Це підтверджує, що симбіоз сучасних методів обчислювальної хімії, фізики твердого тіла та штучного інтелекту відкриває нові перспективи для проєктування функціональних нанокомпозитів із керованими електронними, оптичними та механічними властивостями.

Інтеграція МПМН у дослідження графенових квантових точок і подібних наноструктур дозволяє поєднати глибоке фундаментальне розуміння поведінки дефектів із практичними можливостями масштабного моделювання. Це створює новий рівень прогнозування властивостей матеріалів і дає змогу розробляти нанокомпозити для високотехнологічних застосувань, таких як сенсори нового покоління, фотонні пристрої та енергоефективні матеріали.

Попри зростаючу кількість наукових робіт, систематичні дослідження дефектів у ГКТ, механізмів їхнього впливу на електронні та механічні властивості, а також взаємодії наноструктур із різними середовищами залишаються недостатньо розвиненими, і загальна картина інженерії дефектів усе ще не є повністю сформованою. Розробка надійних методів моделювання та прогнозування властивостей таких матеріалів дозволяє не лише поглибити фундаментальні знання про енергетику і структуру дефектів, а й сприяє створенню нових наноматеріалів з керованими властивостями для інноваційних технологій нового покоління.

Мета дослідження полягає у теоретичному обґрунтуванні та застосуванні міжатомних потенціалів машинного навчання для моделювання точкових дефектів, функціоналізації та легуванні графенових квантових точок у нанокомпозитах з метою визначення їх структурної стабільності, енергетичних характеристик та потенційних функціональних властивостей. Додатковою метою є розробка методичної розробки на основі використання штучного інтелекту для ознайомлення учнів із квантовими явищами та наноструктурованими матеріалами.

Мета дослідження зумовила наступні **завдання**:

1. Провести аналіз наукової літератури з тематики графенових квантових точок, їхніх дефектів, методів функціоналізації та сучасних підходів моделювання за допомогою міжатомних потенціалів машинного навчання.
2. Систематизувати відомості про типові дефекти у ГКТ (вакансії, дивакансії, дефекти SW).
3. Адаптувати методику створення моделей функціоналізованих ГКТ у середовищі Jmol з подальшою оптимізацією їхньої структури за допомогою інструментів ASE та моделей MACE.
4. Здійснити розрахунок енергії формування дефектів залежно від їх розміщення в структурі ГКТ та типу функціональної групи, визначити стабільність та вплив дефектів на властивості матеріалів.
5. Підготувати методичну розробку з використанням штучного інтелекту, що сприятиме формуванню в учнів знань про квантові явища та наноструктуровані матеріали завдяки інтерактивним моделям і комп'ютерному моделюванню.
6. Сформулювати висновки щодо перспектив застосування міжатомних потенціалів машинного навчання для оптимізації нанокompозитних матеріалів із заданими функціональними властивостями та навчально-освітніх застосувань.

Об'єкт дослідження: графенові квантові точки.

Предмет дослідження: використання потенціалів машинного навчання для моделювання точкових дефектів в ГКТ та їх впливу на процеси функціоналізації та легування.

Практичне значення роботи: Практичне значення даної роботи полягає у вдосконаленні підходів до інженерії наноструктур, шляхом застосування міжатомних потенціалів машинного навчання, що відкриває нові можливості для

розробки високоефективних нанокompозитів на основі графенових квантових точок.

Розроблений методичний підхід до аналізу дефектів та функціональних груп у графенових структурах дозволяє швидко й точно прогнозувати їхні електронні, оптичні та механічні властивості. Це сприяє створенню нових матеріалів із заданими характеристиками для застосування в сенсорних технологіях, біомедицині, енергетиці та оптоелектроніці.

Використання навченої ML-моделі у поєднанні з програмними інструментами типу ASE та Jmol дає змогу студентам, аспірантам і молодим дослідникам оперувати сучасними цифровими інструментами аналізу, наближеними до індустріального рівня. На основі отриманих результатів може бути створена методична розробка для навчання школярів та студентів із використанням штучного інтелекту, що дозволяє ефективно знайомити їх із квантовими явищами та сучасними підходами в матеріалознавстві.

Подальше впровадження напрацьованих рішень у практику дозволить покращити підходи до раціонального проєктування нанокompозитів, підвищити якість освітнього процесу у сфері природничих наук та сприятиме формуванню високої компетентності майбутніх дослідників і інженерів у галузі фізики, хімії та нанотехнологій.

Структура роботи. Робота складається зі списку умовних скорочень, вступу, трьох розділів, висновків, списку використаної літератури, додатку А та Б і в цілому складає 85 сторінок.

Апробація результатів магістерського дослідження здійснювалася шляхом участі у наукових конференціях різного рівня, опублікуванням статті у міжнародному виданні, що індексується в Scopus, а також підготовкою й представленням тез доповідей. Детальніше дивитися ДОДАТОК А.

РОЗДІЛ 1. ТЕОРЕТИЧНІ ЗАСАДИ УТВОРЕННЯ ДЕФЕКТІВ У ГРАФЕНОВИХ КВАНТОВИХ ТОЧКАХ

Розвиток нанонауки та мікроелектроніки протягом останніх десятиліть визначив потребу у вивченні матеріалів, здатних демонструвати унікальні властивості на масштабах до кількох нанометрів. Зменшення розмірів активних елементів сучасних пристроїв до нанорівня зумовило інтенсивне дослідження нанооб'єктів - від перших кластерів до повноцінних наноматеріалів із керованою структурою та функціональністю. Особливе місце серед них посідають вуглецеві матеріали, зокрема графен, який завдяки своїм винятковим механічним, електронним та оптичним властивостям став основою для створення його нульвимірних похідних - графенових квантових точок.

У цьому розділі ми простежимо еволюцію формування дефектів у ГКТ, розглянемо ключові етапи становлення концепції квантових точок як нанооб'єктів, проаналізуємо класифікацію дефектів та їхній вплив на властивості матеріалу. Першим кроком стане огляд історичного розвитку уявлень про квантові точки як фундаментальний елемент нанотехнологій.

1.1. Сучасні тренди в теорії та практиці наноструктур

Стрімкий розвиток нанотехнологій зумовив появу нових класів матеріалів, здатних зберігати або навіть посилювати функціональні властивості за умови зменшення їх розмірів до нанометрового масштабу. Зі скороченням геометричних параметрів активних елементів електронних і оптоелектронних пристроїв виникла потреба у створенні структур, контроль над характеристиками яких здійснюється на рівні окремих атомів. Першими об'єктами такого типу стали нанокластери, що являли собою малі агрегати атомів із розміром у кілька нанометрів та проявляли квантові ефекти, недоступні для об'ємних матеріалів. Подальший прогрес привів до

формування повноцінних наноматеріалів - упорядкованих або частково упорядкованих нанооб'єктів із чітко визначеною структурою, електронними властивостями та можливостями цілеспрямованої інженерії [6, 29, 30].

Особливе місце серед таких матеріалів посідають вуглецеві наноструктури, зокрема графен - одна з найпоширеніших у природі форм вуглецю, яка вирізняється унікальною сукупністю механічних, електронних та теплових характеристик. Його одноатомна товщина, висока рухливість носіїв заряду, надзвичайна міцність і хімічна стабільність визначили графен як базову платформу для створення нових функціональних наноструктур, включно з нульвимірними системами - квантовими точками [6, 31, 32].

Після відкриття графену у 2004 році [1] інтерес наукової спільноти до цього матеріалу різко зріс. Відзначалося, що графен має унікальні електронні та механічні властивості, зокрема надзвичайно високу електропровідність та міцність, що стало підґрунтям для пошуку його нульвимірних аналогів. Одним із таких об'єктів стали ГКТ, які поєднують у собі властивості графену та ефекти квантового обмеження. Важливість цих відкриттів була підтверджена присудженням Нобелівської премії з фізики 2010 року Андре Гейму та Костянтину Новоселову «за революційні експерименти з двовимірним матеріалом - графеном» [24].

Дослідження останніх років показали, що ГКТ характеризуються регульованою шириною забороненої зони, яка залежить від розміру, форми та типу крайових атомів, а також наявності дефектів, таких як точкові дефекти: моновакансія, дивакансія та дефект SW. Після відкриття графену у 2004 році інтерес наукової спільноти до цього матеріалу різко зріс. Крім того, ГКТ демонструють цікаві оптичні властивості, такі як флуоресценція, що робить їх перспективними для застосування у сенсоріці та біомедицині[6, 32, 33,].

1.2. Дефекти в графенових квантових точках: історія та класифікація

Карбонова ера, яка впевнено приходить на зміну силіконовій, відкриває нові горизонти для розвитку матеріалів, таких як графен та його похідні. Вона демонструє перевагу в адаптивності та функціональності цих матеріалів, особливо завдяки моделюванню інженерії дефектів у графенових структурах.

Історичний розвиток досліджень дефектів у графені відображає поступове поєднання теоретичних передбачень і експериментальних підтверджень. Перші теоретичні моделі моновакансій (див. рис. 1.1c) та дивакансій (див. рис. 1.1d, рис. 1.1e, рис. 1.1f) були створені в середині 2000-х років.

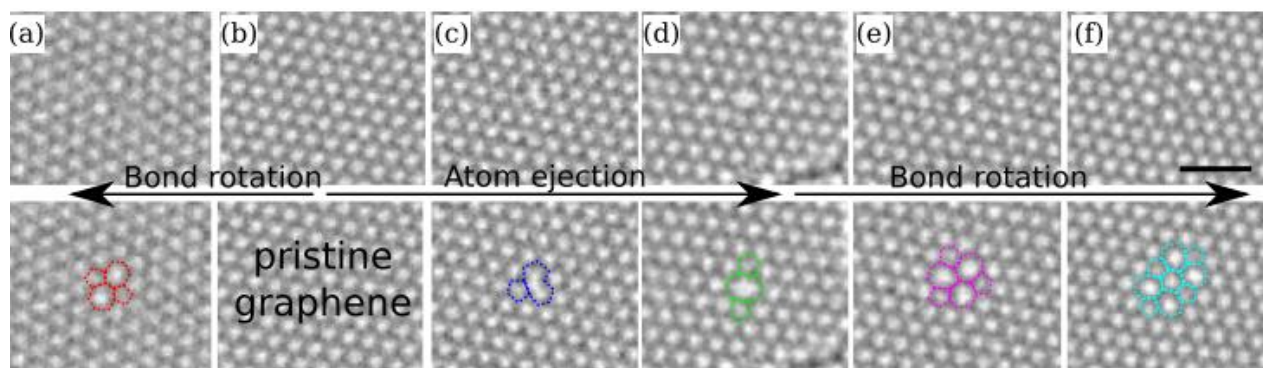


Рис. 1.1. (a) дефект SW, (b) графен без дефектів, (c) V₁(5-9) - моновакансія, (d) V₂(5-8-5) - дивакансія, (e) V₂(555-777) - дивакансія, (f) V₂(5555-6-7777) - дивакансія. Масштаб рисунка - 1 нм [9].

Відразу після експериментального виділення графену, із застосуванням DFT, що дозволило оцінити їх вплив на електронні та механічні властивості графену.

Ці теоретичні передбачення стали фундаментом для подальших експериментальних досліджень і допомогли визначити ключову роль дефектів у поведінці графенових матеріалів.

Дефект SW (рис. 1.1a), який виникає при обертанні одного з С-С зв'язків на 90° у графеновій решітці з утворенням пентагонів і гептагонів, був вперше теоретично описаний у 1986 році британськими хіміками Ентоні Стоуном та Девідом Вельсом у контексті органічних сполук, які мають дві або більше

потрійних зв'язків у ланцюзі. Це відкриття стало важливим кроком у розумінні топологічних дефектів у вуглецевих наноматеріалах[13, 14]. Проте перші експериментальні спостереження дефекту SW в графені відбулися лише в середині 2000-х років за допомогою скануючої тунельної мікроскопії, що підтвердило його реальне існування та відкрило нові перспективи для дослідження впливу дефектів на електронні та механічні властивості графену.

1.3. Розвиток досліджень графену та графенових квантових точок

У сучасних оглядових роботах відзначається, що напрями досліджень ГКТ охоплюють як синтез новими методами (гідротермальний, електрохімічний, хімічне окиснення), так і їх функціоналізацію[34, 35, 36] для цілеспрямованих застосувань [30]. Так, огляд показує, що ГКТ демонструють яскраві фотолюмінесцентні та електрохемолюмінесцентні властивості, а також використовуються для створення біо- та електрохімічних сенсорів - зокрема для детекції металів, білків, ферментів та інших біомолекул [2].

Важливим кроком стало розширення спектра досліджень ГКТ у напрямі створення композитних матеріалів. Нещодавні праці демонструють, що введення ГКТ у полімери дозволяє регулювати їх електропровідність, механічну міцність і стабільність [3, 4, 8].

Інженерія наноструктур відкриває нові перспективи у розробці передових матеріалів і технологій. ГКТ, як один із типових наноматеріалів, вирізняються унікальними фізичними та хімічними властивостями: регульованою шириною забороненої зони та високою біосумісністю. Завдяки цим властивостям ГКТ знаходять застосування у фотоніці, каталітичних системах, зберіганні енергії, екологічному моніторингу та в системах доставки лікарських препаратів, а також у створенні нових функціональних композитних матеріалів.

Сучасні наукові досягнення підтверджуються сферами, за які нещодавно були присуджені Нобелівські премії. Так, Нобелівську премію з хімії 2023 року було вручено за відкриття та синтез квантових точок (лауреати - Moungi G. Bawendi, Louis E. Brus, Aleksey I. Ekimov) [26]. У 2024 році Нобелівську премію з фізики отримали John J. Hopfield та Geoffrey E. Hinton «за фундаментальні відкриття та винаходи, які зробили можливим машинне навчання за допомогою штучних нейронних мереж» [27].

Одними з найпоширеніших для дослідження матеріалів на атомному рівні є DFT, завдяки своїй точності у передбаченні структурних та електронних властивостей. Водночас метод є ресурсозатратним і вимагає значних обчислювальних потужностей, що обмежує масштаб і швидкість досліджень. Подальший розвиток цього напрямку тісно пов'язаний із використанням методів штучного інтелекту, які дедалі активніше інтегруються в матеріалознавчі дослідження. Показовим прикладом є присудження Нобелівської премії з хімії 2024 року Демісу Хассабісу, Джону Джамперу та Девіду Бейкеру за створення моделей ШІ, що розв'язали багаторічну проблему прогнозування просторової структури білків [28]. Цей прорив демонструє стратегічну значущість і пріоритетність застосування машинного навчання у фундаментальних науках.

Подібні підходи відкривають нові перспективи й для дослідження графенових квантових точок. Синергія машинного навчання та матеріалознавства сприяє не лише оптимізації структури ГКТ, а й глибшому розумінню впливу дефектів на їхні електронні та механічні характеристики, роблячи дослідження більш доступними та ефективними[8].

Висновки до розділу 1

Аналіз літературних джерел та дав можливість зробити наступні висновки:

1. Розвиток нанотехнологій сприяв появі нових класів матеріалів, серед яких особливе місце займають вуглецеві наноструктури, зокрема ГКТ, що поєднують властивості графену та ефекти квантового обмеження, демонструючи регульовану ширину забороненої зони, високу фотолюмінесценцію та біосумісність.

2. Дослідження дефектів у графені та ГКТ, зокрема точкових дефектів (моновакансії, дивакансії, дефекту SW), показали їх ключову роль у визначенні електронних, механічних та оптичних властивостей матеріалів. Теоретичні методи, такі як DFT, дозволяють оцінювати ці ефекти, але є ресурсозатратними та обмежують масштаб досліджень.

3. Використання потенціалів машинного навчання у матеріалознавстві, зокрема дозволяє прискорити моделювання, зробити його доступнішим і ефективнішим, що відкриває нові перспективи для оптимізації структури ГКТ та глибшого розуміння впливу дефектів на їхні властивості.

РОЗДІЛ 2. СУЧАСНІ ПІДХОДИ ДО МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ДЕФЕКТОУТВОРЕННЯ В НАНОМАТЕРІАЛАХ

В дослідженнях наноматеріалів важливим завданням є точне моделювання процесів дефектоутворення на атомному рівні. Для цього використовують різні підходи - від класичних міжатомних потенціалів до квантово-механічних методів і алгоритмів машинного навчання. Ці методи дозволяють аналізувати електронну структуру, енергетичні характеристики і стабільність дефектів, прогнозувати їх вплив на фізико-хімічні властивості матеріалів та планувати інженерію наноструктур. У наступному підрозділі розглянуто підходи до моделювання наноматеріалів із використанням квантово-механічних і машинно-навчальних методів, що забезпечують високу точність і надійність результатів.

2.1. Моделювання дефектів з використанням квантово-механічних методів та підходів машинного навчання

У цьому підрозділі представлено сучасні підходи до моделювання наноструктур, орієнтовані на аналіз електронної структури, дефектів та реакційної здатності графенових квантових точок (ГКТ) і полімерних нанокомпозитів. Оскільки наноматеріали демонструють складні квантові та міжатомні взаємодії, для їхнього адекватного опису застосовують два ключові класи методів: *ab initio* та МПМН.

Фундаментальною основою *ab initio* моделювання є опис електронної системи через розв'язання рівняння, яке визначає хвильову функцію та енергетичний стан багаточастинкової системи - це рівняння Шредінгера (формула 2.1) [11, 12,17]:

$$\hat{H} \cdot \Psi(r_1, r_2, \dots, r_N) = E \cdot \Psi(r_1, r_2, \dots, r_N) \quad (2.1)$$

де

$\hat{H}$ - гамільтоніан системи, оператор повної енергії, що визначає динаміку квантової системи;

$\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N)$ - хвильова функція, яка містить усю інформацію про стан системи електронів (їх положення, спіни та ймовірності знаходження);

E - повна енергія системи, власне значення гамільтоніана, що відповідає даному квантовому стану.

Ключовим елементом цього рівняння є гамільтоніан системи, що задає повну енергію та структуру взаємодій у багаточастинковому середовищі. Узагальнений вигляд гамільтоніана наведено у (формулі 2.2)[17, 19, 24].

$$\hat{H} = -\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^N \sum_{A=1}^M \frac{Z_A e^2}{|r_i - R_A|} + \sum_{i < j}^N \frac{e^2}{|r_i - r_j|} + \sum_{A < B}^M \frac{Z_A Z_B e^2}{|R_A - R_B|} \quad (2.2)$$

де

$\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2$ - кінетична енергія електронів;

$\sum_{i=1}^N \sum_{A=1}^M \frac{Z_A e^2}{|r_i - R_A|}$ - притягання електронів до ядер (кулонівська взаємодія);

$\sum_{i < j}^N \frac{e^2}{|r_i - r_j|}$ - відштовхування електронів між собою;

$\sum_{A < B}^M \frac{Z_A Z_B e^2}{|R_A - R_B|}$ - відштовхування між ядрами.

Однак прямий розв'язок багаточастинкового рівняння є обчислювально надзвичайно складним, особливо для систем із десятків або сотень атомів. Тому виникла потреба у методах, що дозволяють спростити задачу, зберігаючи при цьому високу точність. Найбільш ефективним підходом став метод DFT[17, 18, 19, 24].

Сучасна DFT ґрунтується на двох фундаментальних теоремах, сформульованих П'єром Гоенбергом та Волтером Коном у 1964 році, які становлять її концептуальну основу. Перша теорема Гоенберга-Кона стверджує, що основний стан багаточастинкової електронної системи однозначно визначається електронною густиною, а не складною багатовимірною хвильовою функцією. Це означає, що вся інформація про систему, включно з її повною енергією та всіма

властивостями, може бути виражена виключно через функціонал електронної густини. Друга теорема доводить існування універсального функціонала енергії від густини, мінімізація якого дає точну густину основного стану системи. Разом ці теореми дозволили замінити складний опис багатеелектронної системи за допомогою хвильової функції на значно простіший опис через електронну густину, яка залежить лише від трьох просторових координат, що і стало вирішальним кроком для практичного застосування DFT у моделюванні складних матеріалів, включно з наноструктурами [17, 18, 19, 24, 37].

У 1965 році запропоновано практичну реалізацію цих принципів у вигляді рівнянь Кона-Шема (формула 2.3).

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V_{eff}(r) \right] \psi_i(r) = \varepsilon_i \psi_i(r) \quad (2.3)$$

де $\psi_i(r)$ - орбіталі Кона-Шема, ε_i - відповідні енергетичні рівні, а $V_{eff}(r)$ - ефективний потенціал, який включає всі основні взаємодії в системі [37].

Вони описують рух невзаємодіючих електронів в ефективному потенціалі, який включає всі основні взаємодії системи. Ефективний потенціал формується з трьох компонентів, що подаються у (формула 2.4):

$$V_{eff}(r) = V_{ext}(r) + V_H(r) + V_{xc}(r) \quad (2.4)$$

де: $V_{ext}(r)$ – потенціал взаємодії електронів із ядрами, тобто зовнішнє електростатичне поле, яке формує атомна структура системи; $V_H(r)$ – кулонівський (Гартрі) потенціал, що описує середнє електростатичне відштовхування між електронами; $V_{xc}(r)$ – обмінно-кореляційний функціонал, який враховує квантові ефекти, що не можуть бути описані у рамках середнього поля - обмін електронів та кореляції їх руху.

Невідома аналітична форма обмінно-кореляційного функціонала є однією з ключових причин складності практичного застосування підходів, що базуються на точному багаточастинковому описі. Оскільки цей функціонал неможливо подати в закритому вигляді, його доводиться апроксимувати різними моделями - LDA, GGA,

гібридними та іншими. Кожна з них по-своєму спрощує реальну фізику взаємодій, що неминуче призводить до компромісу між точністю опису та обчислювальною складністю. Саме ця проблема стала одним із головних стимулів для переходу до методу DFT, який дозволяє зберегти фізичну обґрунтованість моделі, але водночас значно знижує обчислювальні витрати [19, 24, 37].

Ключовим інструментом у дослідженні ГКТ та полімерних нанокompозитів є DFT, оскільки цей метод забезпечує фундаментальний рівень розуміння їх властивостей. Він дозволяє з високою точністю визначати та прогнозувати низку критично важливих характеристик. Зокрема, за допомогою DFT можна розраховувати енергії утворення точкових дефектів, таких як вакансії, дивакансії та дефекти SW, що є вирішальним для оцінки стабільності наноструктур[6, 17]. Метод також є незамінним для дослідження ефектів легування, дозволяючи моделювати атомне заміщення в ґратці ГКТ та кількісно оцінювати вплив допантів на електронну структуру та оптичні властивості матеріалу. Крім того, DFT дозволяє досліджувати електронну структуру та магнітні властивості, що виникають внаслідок функціоналізації ГКТ різними хімічними групами, а також є незамінним для моделювання процесів адсорбції молекул на поверхні, визначення реакційних бар'єрів хімічних перетворень, аналізу стабільності різних структурних конфігурацій та розрахунку ширини забороненої зони[20]. Ця здатність до точного теоретичного прогнозування атомної структури та фізико-хімічних властивостей матеріалів ще до їх експериментального синтезу робить DFT особливо цінним інструментом для прискореного дизайну та розробки нових поколінь нанотехнологічних матеріалів [31, 37, 38].

Хоча DFT залишається основним інструментом моделювання, його застосування для складних систем стикається з суттєвими обмеженнями. Ключовою проблемою є залежність результатів від вибору обмінно-кореляційного функціонала, що може суттєво впливати на точність розрахунків енергетичних

характеристик. Іншим критичним обмеженням є швидке зростання обчислювальної складності зі збільшенням розміру системи, що робить моделювання великих нанокompозитів чи полімерних матриць практично недоцільним. Ці фактори обумовлюють необхідність розвитку альтернативних методів, здатних забезпечити високу точність за значно менших обчислювальних витрат[19].

Для подолання обмежень DFT перспективним напрямом є використання МПМН. Це нове покоління інструментів моделювання, які навчаються на великих наборах даних квантово-механічних розрахунків і здатні відтворювати потенційну енергетичну поверхню з точністю, близькою до *ab initio*. Серед таких підходів метод MACE вирізняється поєднанням симетрійно-адаптованого опису атомних оточень з високою масштабованістю, що робить його особливо ефективним для моделювання складних наносистем. Він дозволяє проводити точні дослідження систем з тисячами атомів, аналізувати динамічні процеси в нанокompозитах та обчислювати енергетичні профілі складних структурних перетворень[6, 8, 21, 22, 23].

У власних дослідженнях, які були апробовані на чисельних наукових конференціях та в публікаціях (див. ДОДАТОК А), метод MACE було успішно застосовано для аналізу енергетики дефектів у полімерному середовищі AESO з використанням інструментів пакета ASE. Це підтвердило його ефективність для моделювання реальних нанокompозитних систем та прогнозування їх властивостей[8].

Методи *ab initio*, зокрема DFT, залишаються фундаментальною основою для точного моделювання електронної структури наноматеріалів. Однак, існуючі обчислювальні обмеження цих підходів роблять МПМН перспективним напрямком розвитку обчислювального матеріалознавства. Метод MACE демонструє ефективне поєднання високої точності з вражаючою масштабованістю, що робить його оптимальним інструментом для подальших досліджень властивостей ГКТ,

процесів дефектоутворення та полімерних нанокompозитів. Застосування цього підходу відкриває нові можливості для моделювання складних систем, які раніше були недоступні для традиційних методів квантової механіки.

2.2. Точкові дефекти в графені

Моновакансія - це один із найпростіших і найпоширеніших типів точкових дефектів у кристалічних матеріалах, який виникає внаслідок видалення одного атома з ґратки. У випадку графену або ГКТ утворення моновакансії призводить до локального порушення sp^2 -гібридизації, появи незаповнених зв'язків і зміни електронної структури матеріалу[39]. Уперше структурні особливості вакантних дефектів у графені були описані експериментально за допомогою просвічувальної електронної мікроскопії високої роздільності, де було продемонстровано можливість спостереження індивідуальних вакансій у графенових шарах. Ці спостереження підтвердили, що видалення одного атома призводить до локальної реконструкції ґратки [5, 8].

Поява моновакансії спричиняє значні локальні зміни у геометрії та електронній щільності графенового шару (див. рис 2.1.). Три атоми, що залишаються навколо вакансії, зазнають релаксації: два з них утворюють новий σ -зв'язок між собою, тоді як третій атом залишається з одним неспареним електроном.

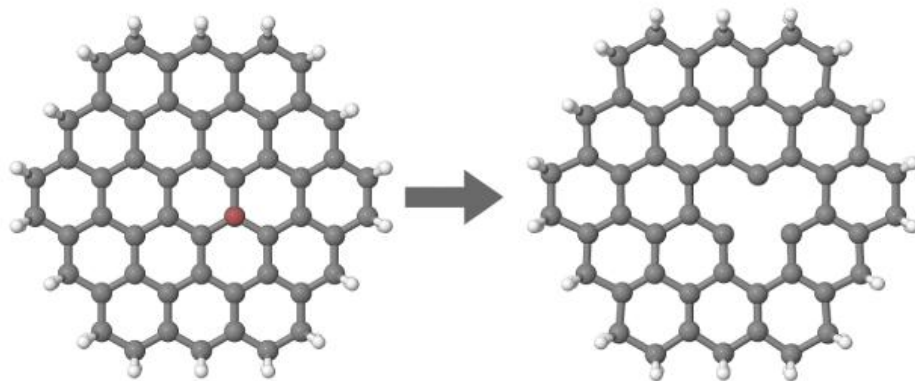


Рис. 2.1. Утворення моновакансії в ГКТ.

Це призводить до появи локалізованого магнітного моменту, який у графені становить приблизно $1 \mu\text{B}$ (магнетон Бора), що підтверджено як експериментально, так і за допомогою розрахунків методами DFT [17, 18, 19, 20].

Крім того, моновакансії часто виступають активними центрами адсорбції молекул або атомів металів, оскільки створюють області з підвищеною електронною густиною, що робить їх критично важливими у процесах каталізу, сенсорики та функціоналізації ГКТ.

Енергетично утворення моновакансії є доволі затратним процесом: розрахунки за допомогою методів *ab initio* показують, що енергія формування такого дефекту у графені становить близько 7-8 eV, залежно від використаного обмінно-кореляційного функціонала та умов моделювання [40]. Проте саме завдяки цим дефектам матеріал набуває унікальних електронних властивостей. Таким чином, моновакансія в ГКТ є не лише структурною аномалією, а й функціональним елементом, який визначає поведінку наноматеріалу у багатьох практичних застосуваннях.

Для теоретичного вивчення моновакансій традиційно застосовуються методи *ab initio*, зокрема DFT. Вона дозволяє розрахувати енергію утворення вакансії, електронну густину, магнітний момент і локальну релаксацію атомів поблизу дефекту. Наприклад, у дослідженнях які було розглянуто [5-10] показано, що енергія утворення моновакансії в графені становить близько 7.5 eV, а сама вакансія може спричиняти появу локалізованих магнітних моментів. Для експериментальної ідентифікації таких дефектів використовують методи HRTEM, Raman, а також STM, які дозволяють фіксувати структурні та електронні особливості області дефекту [39].

Як було зазначено вище, незважаючи на високу точність, методи DFT є ресурсно-затратними. Тому для обчислення енергій формування дефектів у

складних системах доцільно використовувати метод МАСЕ, який поєднує точність DFT з ефективністю класичних потенціалів.

Дивакансія - це точковий дефект у кристалічній структурі, який утворюється внаслідок видалення двох сусідніх атомів з ґратки. У графені та ГКТ цей тип дефекту призводить до більш суттєвої перебудови локальної структури, ніж моновакансія. Після релаксації система прагне мінімізувати енергію, утворюючи нові зв'язки між атомами, що залишилися, - у результаті формується стабільна структура, відома як (5-8-5)-дивакансія що проілюстровано на (рис 2.2), де навколо порушення виникає комбінація п'ятикутників і восьмикутників [5-10]. Такі дефекти можуть істотно змінювати електронні властивості графену, спричиняючи появу локальних станів у забороненій зоні, що впливає на провідність і реакційну здатність матеріалу.

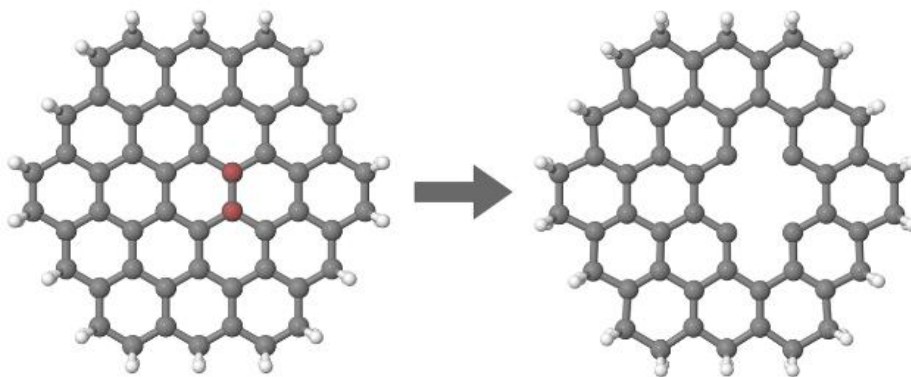


Рис. 2.2. Утворення дивакансії в ГКТ.

В контексті енергетичного розподілу, дивакансія є стабільнішою за моновакансію, оскільки її утворення дозволяє усунути деякі неспарені електрони та частково компенсувати енергію порушення зв'язків. Розрахунки за допомогою DFT показують, що енергія формування дивакансії в графені становить близько 7.5 eV - тобто трохи менша, ніж для двох окремих моновакансій, що свідчить про енергетичну вигідність їх коалесценції [9, 10]. Крім того, дивакансії здатні спричиняти локальні деформації площини графену, впливаючи на її гнучкість і

механічну стабільність, а також модифікувати магнітні властивості, які можуть проявлятися через локальні магнітні моменти на краях восьмикутників.

Вивчення дивакансій традиційно здійснюється методами HRTEM, EELS і STM [39]. З обчислювального боку - методи DFT дозволяють дослідити енергетичні бар'єри переходів між різними типами дивакансій (наприклад, (5-8-5) - (555-777)), однак на практиці для моделювання утворення й релаксації дивакансій у великих ГКТ-системах дедалі частіше використовуються міжатомні потенціали машинного навчання, зокрема модель MACE, яка дозволяє точно відтворювати енергетичні поверхні.

Наступним кроком логічно розглянути дефекти SW, які характеризуються ротацією σ -зв'язків і утворенням пари п'ятикутників і семикутників без втрати атомів, що є природним продовженням процесів структурної перебудови в графенових системах.

Дефект SW є топологічним типом дефекту в графеноподібних структурах, який виникає не внаслідок втрати атомів, а через ротацію одного σ -зв'язку між двома атомами в гексагональній сітці на 90° . У результаті цього процесу утворюється пара п'ятикутників і семикутників (5-7-7-5), які зберігають цілісність атомної ґратки, але змінюють її локальну симетрію. Вперше цей тип дефекту був описаний у 1986 році у контексті досліджень фулеренів Стоуном і Вельсом [10, 13, 14]. Для графену подібні перебудови спостерігалися згодом за допомогою високороздільної електронної мікроскопії, де було зафіксовано обертання зв'язків під впливом локальної енергії пучка електронів. Схематично геометрію дефекту SW та утворення пари п'ятикутників і семикутників проілюстровано на (рис. 2.3).

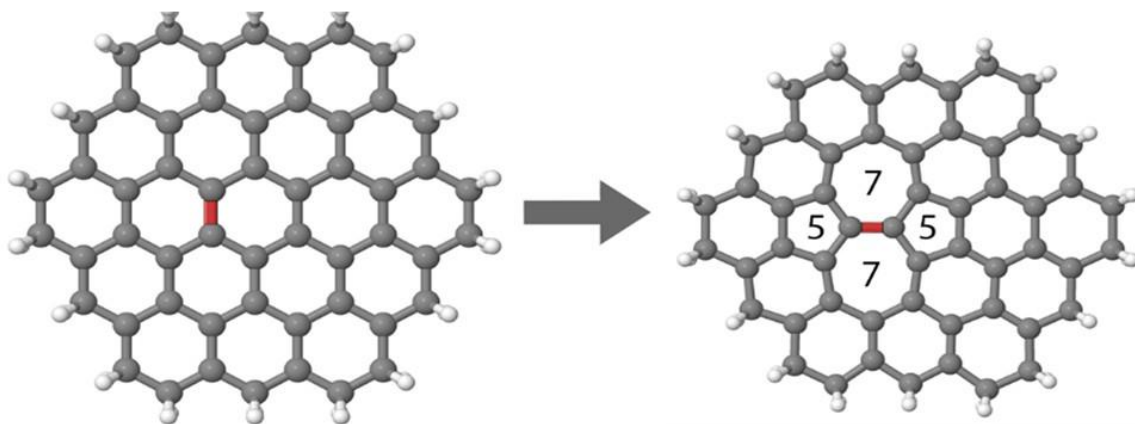


Рис. 2.3. Дефект SW в графеновій квантовій точці. Поворот зв'язку C-C (позначений червоним) на 90° спричиняє перебудову гексагональної решітки з утворенням двох п'ятикутників (5) та двох семикутників (7).

Такий дефект є оборотним: при подальшому опроміненні або нагріванні структура може повертатися до первісного шестикутного стану. З точки зору електронної структури, дефект SW не створює вільних радикалів або неспарених електронів, однак він суттєво впливає на локальну щільність станів і може зумовлювати появу локалізованих зонних рівнів. Енергетичний бар'єр для утворення дефекту SW становить приблизно 5 eV, тоді як енергія активації для його обернення - близько 5.5-6 eV, що свідчить про відносну стабільність утвореної конфігурації [9, 10, 13, 14]. DFT-розрахунки підтверджують, що виникнення таких дефектів змінює механічну жорсткість і електропровідність графену, а також може впливати на процеси адсорбції молекул, створюючи локальні реакційно-активні центри. У ГКТ подібні топологічні перебудови є особливо важливими, оскільки вони визначають стабільність країв, що безпосередньо впливає на оптичні й магнітні властивості нанокмполімерів.

Моделювання дефектів SW методами *ab initio* пов'язане з високими обчислювальними витратами, особливо при дослідженні динаміки обертання зв'язків. Це суттєво обмежує масштаби таких досліджень. Ефективною

альтернативою виступає метод MACE, який забезпечує високу точність апроксимації енергетичних поверхонь при значно менших ресурсних витратах.

Отже, розглянуті точкові дефекти - моновакансії, дивакансії та дефекти SW - визначають ключові фізико-хімічні властивості графенових квантових точок. Кожен тип дефекту вносить унікальний внесок: моновакансії формують локальні магнітні моменти та активні центри адсорбції, дивакансії забезпечують стабілізацію ґратки через енергетично вигідні реконструкції, а дефекти SW викликають топологічні перебудови, що впливають на механічні та електронні характеристики. Сукупність цих явищ створює основу для розробки нових функціональних матеріалів.

Однак повномасштабне моделювання таких складних систем методами *ab initio* залишається надто ресурсомістким. Перспективним рішенням є використання машинно-навчальних потенціалів, зокрема моделі MACE, яка поєднує квантово-механічну точність з ефективністю обчислень. Це відкриває можливості для дослідження динаміки дефектоутворення та еволюції наноструктур у масштабах, недосяжних для традиційних методів. Таким чином, поєднання фізико-хімічного аналізу з інтелектуальними методами моделювання становить новий етап у розвитку наноматеріалознавства.

2.3 Функціоналізація і легування як інструменти керування властивостями графенових квантових точок

Після аналізу точкових дефектів, таких як моновакансії, дивакансії та реконструкція SW, логічним наступним етапом є перехід до цілеспрямованої хімічної модифікації ГКТ. Якщо дефекти визначають внутрішні структурні, електронні та енергетичні характеристики матеріалу, то функціоналізація виступає зовнішнім інструментом керованого впливу на ці властивості, дозволяючи гнучко адаптувати квантові точки під конкретні наукові чи технологічні задачі. Саме тому

у сучасних дослідженнях ГКТ значна увага приділяється поєднанню аналізу дефектів та функціональних груп, оскільки обидва чинники формують спільний електронний ландшафт наноструктури [31, 32, 34, 35, 36.].

Функціоналізація ГКТ полягає у приєднанні хімічних груп або молекулярних фрагментів, які впливають на електронну структуру, полярність, оптичні переходи та хімічну активність матеріалу. Найбільш поширеними є оксигеновмісні групи (-ОН, -COOH, -C=O), аміногрупи, ароматичні фрагменти або гетероатомні допанти, що забезпечують зміну ширини забороненої зони, положення рівня Фермі, інтенсивності фотолюмінесценції та реакційної здатності поверхні ГКТ [41, 42]. Таким чином, функціоналізація дає змогу здійснювати тонке налаштування електронних та оптичних властивостей, що є ключовим для застосувань у сенсориці, каталізі, біомаркуванні та енергетичних системах.

З позицій реальної хімічної практики принципово важливо враховувати, що повністю нефункціоналізовані ГКТ фактично недосяжні. Переважна більшість експериментальних методів синтезу - хімічне окиснення, гідротермальні процеси, лазерна абляція, плазмова обробка - неминуче приводить до включення атомів кисню або утворення оксигеновмісних груп на поверхні та краях ГКТ. Навіть мінімальна взаємодія із залишковою вологою чи атмосферним киснем стабілізує -ОН, -C=O та інші функціональні групи, що можуть змінювати електронні властивості матеріалу не менш відчутно, ніж точкові дефекти кристалічної ґратки [41, 42]. Унаслідок цього дослідження функціоналізації є не додатковим, а обов'язковим елементом коректного опису реальних ГКТ, оскільки саме вона визначає їхню поведінку в експериментальних умовах і взаємодію з довкіллям.

Особливе значення має аналіз взаємодії функціональних груп із точковими дефектами, оскільки саме дефектні області виступають найбільш реакційно активними зонами поверхні ГКТ. Моновакансії формують відкриті незаповнені зв'язки, які легко вступають у реакції з оксигеновмісними групами; дивакансії

створюють реконструйовані фрагменти з підвищеною локальною хімічною активністю; дефект SW генерує локальні напруження у решітці - системі делокалізованих π -електронів, утвореній перекриванням р-орбіталей атомів карбону в площинній sp^2 -гібридизованій структурі графену, що визначає електронну провідність, оптичні переходи та хімічну реакційність матеріалу [31, 41, 42]. У результаті дефекти виступають природними «якорями» для іммобілізації функціональних груп, які, своєю чергою, додатково модифікують локальну електронну густину, змінюють потенціальні бар'єри та впливають на кінетику релаксацийних процесів у ГКТ. У нашому дослідженні ми зосереджуємося на функціоналізації, що базується на атомах оксигену та азоту, оскільки саме ці елементи є типовими для експериментально отриманих ГКТ і мають найбільший вплив на оптичні, електронні та реакційні властивості. Їх присутність визначає фотолюмінесцентні властивості матеріалу, змінює зарядові стани та впливає на енергетичні профілі взаємодії з зовнішніми агентами, що є критичним для застосувань у біомедичних системах, каталізі та сенсориці.

Дослідження функціоналізації важливе ще й тому, що саме вона визначає відповідність між теоретичними моделями та експериментальними спостереженнями. У багатьох роботах показано, що оптичні та електронні властивості ГКТ значною мірою формуються саме крайовими оксигеновмісними або азотовмісними групами, а не ідеальною графеновою решіткою [33]. Тому аналіз функціоналізованих структур є основою для передбачення реальної поведінки квантових точок, оцінки їх стабільності, реакційної здатності та енергетичних переходів.

Логічним продовженням вивчення функціоналізації є перехід до легування ГКТ- цілеспрямованого введення гетероатомів у карбонову решітку. Легування змінює розподіл електронної густини, модифікує локальні потенціали та впливає на

фотонні й зарядові процеси, забезпечуючи можливість глибшого та більш контрольованого налаштування електронних властивостей матеріалу [36].

Легування ГКТ є одним із найефективніших інструментів цілеспрямованого керування їх електронною структурою та оптичними властивостями. На відміну від функціоналізації, що здебільшого змінює поверхневі стани, легування передбачає заміщення атомів карбону в π -решітці гетероатомами, що призводить до глибинної перебудови енергетичних рівнів і локальної електронної густини [16, 36]. Введення гетероатомів здатне зменшувати ширину забороненої зони, стабілізувати носії заряду, формувати нові донорно-акцепторні рівні й підсилювати фотогенерацію електрон-діркових пар, що критично важливо для застосувань у сенсориці, фотокаталізі та оптоелектроніці. Особливий інтерес становлять три типи легувальних атомів - азот, бор і фосфор, які радикально по-різному впливають на електронну структуру ГКТ.

Азот, будучи електронодонором, привносить n-тип провідності: це означає збільшення концентрації електронів як носіїв заряду, що підвищує густину станів поблизу рівня Фермі та сприяє підсиленню фотолюмінесценції [16, 36]. Натомість бор - класичний електроноакцептор, що формує р-тип провідності: у таких матеріалах основними носіями заряду є «дірки» тобто відсутні електрони у валентній зоні, що знижує енергію переходів і підвищує реакційну здатність крайових областей [16, 36]. Фосфор, завдяки своїй високій електронегативності, не лише викривлює локальну π -решітку й індукує сильні поляризаційні ефекти, але й здатен істотно змінювати бар'єри між локальними електронними рівнями, що робить Р-леговані ГКТ перспективними для керування зарядовим транспортом і стійкістю до окиснення [16, 36]. Таким чином, систематичне порівняння легування азотом, бором та фосфором дозволяє встановити оптимальні механізми модифікації електронних станів ГКТ, що буде ключовим у подальшій частині нашого дослідження.

Висновки до розділу 2

Аналіз сучасних підходів до моделювання процесів дефектоутворення в наноматеріалах дав можливість зробити наступні висновки:

1. Методична основа моделювання сьогодні базується на поєднанні квантово-механічних підходів та методів машинного навчання. DFT залишається «золотим стандартом» для опису електронної структури, визначення енергій утворення дефектів, ширини забороненої зони та інших фундаментальних характеристик. Однак його обчислювальна складність істотно обмежує масштаби моделювання.

2. Перспективним напрямом подолання обмежень DFT є МПМН, зокрема модель МАСЕ. Ці підходи поєднують точність квантово-механічних розрахунків з ефективністю класичних потенціалів, що дозволяє моделювати великі системи з тисячами атомів, зберігаючи фізичну достовірність.

3. Найбільш широко застосовуваними об'єктами для моделювання є графен і його деривати, зокрема ГКТ. Вони слугують еталонними системами для тестування квантово-механічних методів та міжатомних потенціалів машинного навчання завдяки простій топології, добре вивченим властивостям та можливості контролювати дефекти, розмір, форму й тип функціоналізації. ГКТ використовуються як модельні наноструктури, що дозволяють досліджувати вплив дефектів, легування та функціональних груп на електронні, оптичні та механічні характеристики з високою точністю.

4. Точкові дефекти (моновакансії, дивакансії, дефекти SW) визначають ключові фізико-хімічні властивості ГКТ. Кожен тип дефекту вносить унікальний внесок: моновакансії створюють локальні магнітні моменти, дивакансії стабілізують структуру через енергетично вигідні реконструкції, а дефекти SW змінюють механічні та електронні властивості без втрати атомів.

5. Функціоналізація та легування є потужними інструментами цілеспрямованого керування властивостями ГКТ. Функціоналізація оксигеновмісними та азотовмісними групами визначає оптичні та електронні характеристики реальних матеріалів, тоді як легування гетероатомами (N, B, P) дозволяє радикально змінювати електронну структуру і тип провідності.

6. Синергія дефектів, функціоналізації та легування створює складний електронний ландшафт, в якому дефектні області виступають природними центрами для приєднання функціональних груп. Ця взаємодія визначає реакційну здатність, каталітичну активність та сенсорні властивості ГКТ.

РОЗДІЛ 3. МОДЕЛЮВАННЯ ДЕФЕКТОУТВОРЕННЯ У НАНОМАТЕРІАЛАХ

Для дослідження механізмів утворення дефектів у наноматеріалах застосовують методи тривимірного моделювання, атомістичної оптимізації та машинного навчання. Такий підхід дозволяє відтворити структурні особливості графенових нанофрагментів та локальні енергетичні характеристики, що визначають стабільність дефектів. Розробка моделей передбачає побудову вихідних атомних конфігурацій, їх оптимізацію та аналіз енергетичного рельєфу для різних типів дефектів, включно з вакансіями, дивакансіями та топологічними перебудовами типу SW.

У наступних розділах розглядається, як хімічна функціоналізація ГКТ змінює їхню реактивність, електронну структуру та схильність до формування дефектів. Аналізується вплив легування різними атомами на енергетику дефектоутворення, стабільність модифікованих нанофрагментів та їхні оптичні й електронні властивості. Додатково представлено освітній аспект дослідження - підхід до створення навчального заняття, присвяченого моделюванню ГКТ та демонстрації ролі дефектів у формуванні їхніх властивостей.

3.1. Моделювання дефектів у графенових квантових точках

Побудова вихідних моделей ГКТ є першим етапом у процесі комп'ютерного моделювання дефектних структур. Для цього використовується програмне середовище Jmol[43, 44], яке забезпечує тривимірну візуалізацію молекулярних систем і дозволяє проводити базову структурну підготовку до квантово-механічних або молекулярно-динамічних розрахунків. У Jmol можливе створення і редагування атомних конфігурацій, введення вакансій, поворотів зв'язків (моделювання

дефектів SW), а також пасивація країв воднем для запобігання штучним поверхневим ефектам.

Інтерфейс Jmol дозволяє інтерактивно аналізувати міжатомні відстані, кути і симетрію, що особливо важливо при моделюванні локальних дефектів у графенових нанофрагментах. Для підготовки моделей ГКТ зазвичай використовують фрагменти з діаметром 1-3 нм, що включають від 100 до 400 атомів вуглецю. Візуальний контроль геометрії в Jmol забезпечує коректне формування початкової структури перед подальшою енергетичною оптимізацією. Таким чином, Jmol виконує роль початкового етапу побудови наномodelей, забезпечуючи візуальну перевірку симетрії, координат атомів та топології дефектів [43, 44].

Після побудови початкових моделей ГКТ відбувається етап оптимізації та релаксації геометрії, який має на меті досягнення мінімальної енергії системи. Для цього використовуються сучасні інструменти автоматизації атомістичних розрахунків - зокрема, бібліотека ASE, яка дозволяє інтегрувати різні обчислювальні методи, включно з DFT, класичними потенціалами та моделями машинного навчання [31, 42].

ASE - це потужна модульна програмна бібліотека мовою Python, створена для побудови, керування та аналізу атомістичних моделей матеріалів. Її основна перевага полягає в універсальності: вона дозволяє виконувати розрахунки з використанням різних симуляторів через уніфікований інтерфейс [45, 46]. Завдяки цьому дослідники можуть швидко змінювати обчислювальні методи або потенціали, не змінюючи базову структуру коду, що значно підвищує ефективність і гнучкість роботи.

В ній реалізовано широкий набір інструментів для побудови, модифікації та аналізу атомних конфігурацій. Користувач може генерувати кристалічні ґратки, наночастинки, графенові фрагменти, а також вводити структурні дефекти (вакансії, домішки, розриви зв'язків). Бібліотека забезпечує засоби для симуляції процесів

дифузії, релаксації, хімічної адсорбції чи термодинамічної рівноваги. Особливо важливим є модуль, який дозволяє проводити геометричну оптимізацію за допомогою чисельних алгоритмів, таких як BFGS або FIRE, що мінімізують потенційну енергію системи з урахуванням сил на атомах і градієнтів енергії [8, 23, 45, 46].

Інтеграція бібліотеки ASE із моделлю MACE здійснюється через механізми, які забезпечують двосторонню взаємодію між середовищем оптимізації та квантово-механічними або машинними розрахунками [8, 46]. У такій зв'язці ASE виступає як «керівний модуль», що задає атомні координати, обчислює сили та поступово змінює геометрію системи для досягнення мінімуму енергії, тоді як MACE виступає у ролі «енергетичного ядра», яке на основі тренованої нейронної моделі миттєво обчислює енергії та сили для кожної конфігурації атомів [46]. Такий підхід дозволяє реалізувати релаксацію структур у напівавтоматичному режимі: ASE динамічно оновлює координати атомів, а MACE забезпечує фізично коректну відповідь системи без необхідності запуску повного DFT-розрахунку для кожного кроку. Це не лише суттєво скорочує час обчислень, а й робить можливим аналіз великих ГКТ і їх дефектних конфігурацій у реалістичних масштабах.

Завдяки використанню MACE-потенціалів стає можливим моделювання систем із сотень і навіть тисяч атомів, що особливо важливо для реалістичних ГКТ-композитів. Модель MACE побудована на принципах еківаріантних нейронних мереж, які враховують симетрію системи відносно просторових обертань, що забезпечує фізично коректне відтворення сил і енергій у процесах релаксації. У порівнянні з DFT, MACE дозволяє отримати результати зі збереженням квантової точності в 10-100 разів швидше, відкриваючи можливість дослідження енергетичних бар'єрів, реконструкції ґратки та динаміки дефектів у наноструктурах. Таким чином, комбінація інструментів Jmol, ASE та MACE формує ефективний багаторівневий підхід до моделювання дефектних структур у ГКТ - від

побудови атомних моделей до отримання їх енергетично стабільних конфігурацій.[8, 46, 47]

Завдяки використанню MACE стає можливим моделювання систем із сотень атомів, що особливо важливо для реалістичних ГКТ-композитів, у яких взаємодія між атомами вимагає одночасного врахування локальних дефектів, граничних умов і полімерного оточення. На відміну від класичних емпіричних потенціалів, MACE ґрунтується на принципах еківаріантних нейронних мереж E(3), які гарантують збереження фізичної інваріантності енергії та сил відносно обертань і трансляцій системи [43]. Така архітектура забезпечує високу точність у відтворенні PES навіть для складних систем, у яких звичайні нейронні мережі втрачають фізичну узгодженість.

Ключовою перевагою MACE є її здатність поєднувати DFT-рівень точності з масштабованістю класичних методів. Навчена на базах даних *ab initio* (наприклад, MACE-MP або), модель здатна зберігати похибку енергії на рівні менше 0.02 eV для одного атому, що практично не відрізняється від квантово-механічних обчислень, але виконується у 10-100 разів швидше [8]. Це відкриває можливість вивчення динамічних процесів, таких як міграція вакансій, релаксація зв'язків, обертання структур SW та формування енергетичних бар'єрів у ГКТ, що раніше було недосяжним у рамках стандартних DFT-розрахунків через надмірні обчислювальні витрати.

Таким чином, комбінація інструментів Jmol, ASE та MACE формує ефективний багаторівневий підхід до дослідження дефектних структур у ГКТ: від побудови атомних моделей і візуалізації структурних особливостей - до геометричної оптимізації та розрахунку енергетичних характеристик на рівні машинного навчання з точністю, порівнянною до *ab initio*. Такий підхід не лише розширює масштаби моделювання, а й відкриває шлях до автоматизованого

проектування нанокомпозитів нового покоління з керованими електронними та механічними властивостями.

З огляду на викладені теоретичні підходи та інструменти, наступним кроком є застосування цієї методології безпосередньо до побудови та аналізу ГКТ з дефектами. Поєднання можливостей Jmol, ASE та MACE дозволяє реалізувати повний цикл моделювання - від створення вихідних атомних конфігурацій до отримання енергетично стабільних релаксованих структур і розрахунку їхніх властивостей.

Саме такою послідовністю кроків ми скористалися у власному дослідженні. Спочатку були побудовані вихідні моделі ГКТ із різними типами дефектів (вакансії, перебудови зв'язків за механізмом SW, крайові модифікації). Далі ці структури були оптимізовані із використанням зв'язки ASE-MACE, що забезпечило коректне відтворення потенційної енергетичної поверхні та дало змогу отримати фізично обґрунтовані геометрії. На основі цих релаксованих конфігурацій були проаналізовані енергетичні характеристики та локальні структурні зміни, що виникають під час формування дефектів.

Нами було створенно атомну конфігурацію (див. рис 3.1.) яка демонструє надзвичайно цікаві структурні особливості та великий потенціал для подальших нанофізичних досліджень.

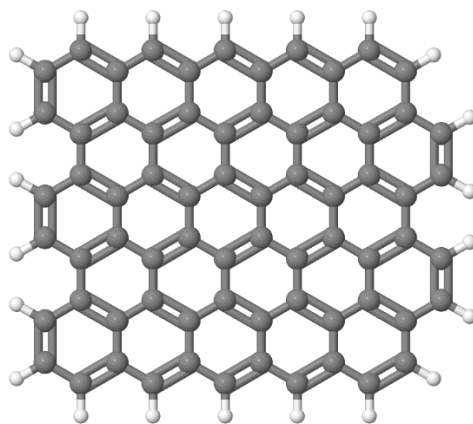


Рис. 3.1. Графенова квантова точка розміром близько 1,5 нанометра.

Особливий науковий інтерес становлять крайові області квантової точки, де атомна конфігурація змінює симетрію й формує два типи країв - зигзагоподібний (zigzag) та сідлоподібний (armchair).

У верхній і нижній частинах структури ми бачимо зигзагоподібні краї, які створюють «зубчасту» межу, що визначає характер локальної стабільності та реакційної здатності матеріалу.

Натомість лівий і правий краї утворюють сідлоподібну конфігурацію, яка відзначається більш рівномірним розподілом напружень у решітці та вищою структурною стабільністю.

Подальший етап дослідження пов'язаний із аналізом точкових дефектів у межах цієї структури. Такі дефекти можуть виникати внаслідок локального обертання бензольних кілець або зміщення міжатомних зв'язків, що порушує ідеальну симетрію ґратки. Їх вивчення дозволить глибше зрозуміти механізми зміни енергетичного рельєфу та стабільності квантової точки.

Моделювання цих процесів проводиться із використанням методів міжатомних потенціалів машинного навчання (MACE) та візуалізаційних інструментів ASE і Jmol. Це дає змогу визначити енергетично мінімальні стани системи, оцінити вплив локальної деформації на орієнтацію зв'язків і встановити взаємозв'язок між дефектами та фізичними властивостями матеріалу.

Таким чином, графенова квантова точка розміром 1,5 нм є не лише моделлю ідеальної гексагональної структури, а й чудовим об'єктом для аналізу крайових та точкових дефектів, які визначають функціональні характеристики наноматеріалів нового покоління.

Далі ми провели моделювання енергії утворення вакансій у графеновій квантовій точці (див. рис. 3.2) розміром близько 1,5 нанометра, отриманої за допомогою міжатомних потенціалів машинного навчання MACE. Для забезпечення

коректності аналізу кожен атом у структурі було пронумеровано, що дало змогу точно ідентифікувати положення потенційної вакансії.

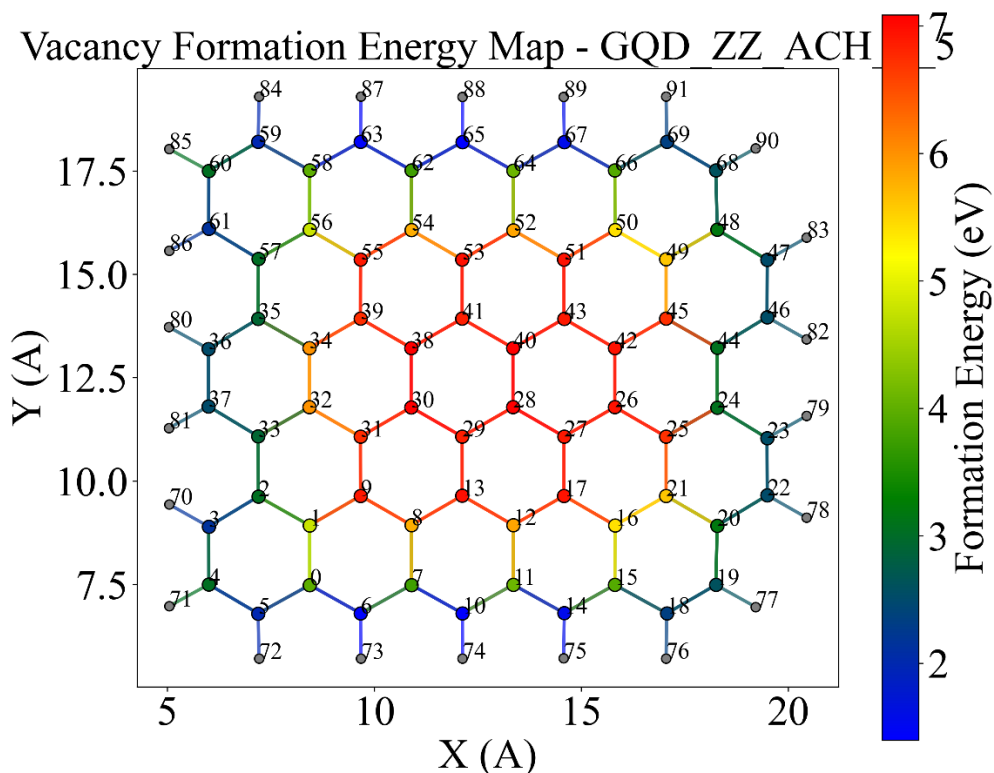


Рис. 3.2. карта енергій формування вакансії у графеновій квантовій точці розміром близько 1,5 нанометра.

Крім того, для кожного атома проілюстровано його енергетичний зв'язок із найближчими сусідами, що дозволило визначити локальні ділянки ослабленої зв'язності та виявити атоми, найбільш схильні до видалення. Такий підхід забезпечує детальніше розуміння просторового розподілу енергії в нанофрагменті та ролі локальної координації в процесах дефектоутворення.

Отримана карта енергій формування моновакансії демонструє чітко виражений радіальний розподіл енергетичних значень: найнижчі енергії утворення дефекту (1.0-1.5 eV) локалізовані на периферії квантової точки, тоді як центральні атоми характеризуються значно вищими значеннями до 3.5 eV. Цей контраст обумовлений різною координацією атомів: крайові вузли мають меншу кількість

сусідів і слабші зв'язки, що робить їх енергетично «м'якшими» для видалення, тоді як у центрі структура є жорсткішою і щільніше пов'язаною. Такий розподіл повністю узгоджується з очікуваною поведінкою двовимірних вуглецевих систем і підтверджує коректність міжатомного потенціалу MACE для задач дефектоутворення.

Подальше моделювання процесів формування дивакансії (див. рис. 3.3) також показало залежність енергії від положення дефекту.

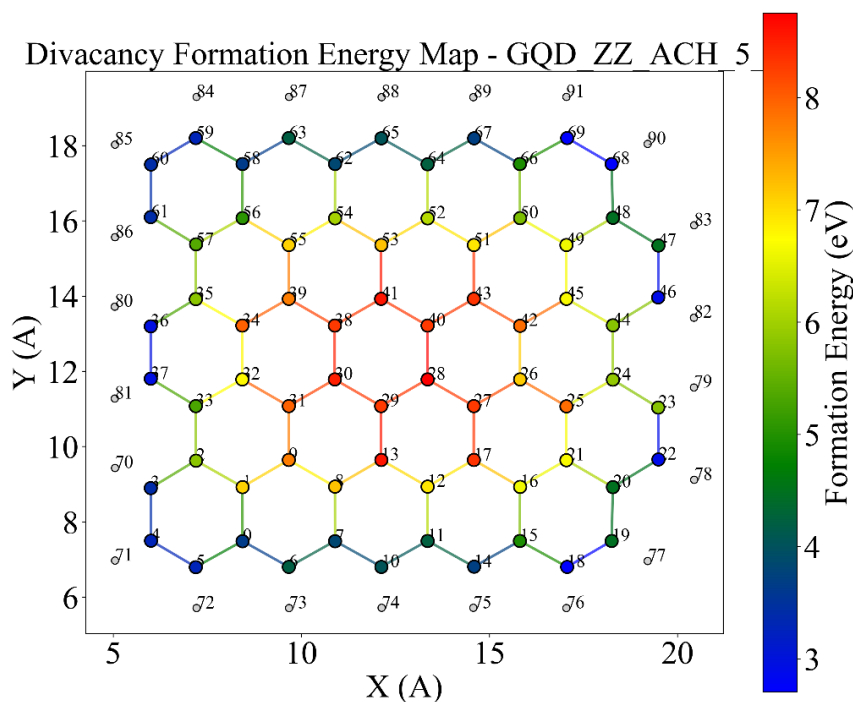


Рис. 3.3. карта енергій формування дивакансії у графеновій квантовій точці розміром близько 1,5 нанометра.

Хоча абсолютні значення енергії тут значно вищі 4-8 еВ, загальна закономірність зберігається: крайові атоми демонструють мінімальні енергетичні значення, тоді як центральна область характеризується максимальними значеннями (близько 8-9 еВ). Це свідчить про те, що видалення двох суміжних атомів є значно більш енергетично затратним процесом, а його енергетична «дорожнеча» зростає зі

збільшенням координації й зменшенням можливості локальної релаксації структури.

Аналіз карти енергії утворення дефекту SW (див. рис. 3.4) показав проміжні значення між моно- та дивакансією: мінімальні енергії перебувають у діапазоні 2-2.5 еВ на краях, тоді як у центрі бар'єр досягає 4.5 еВ.

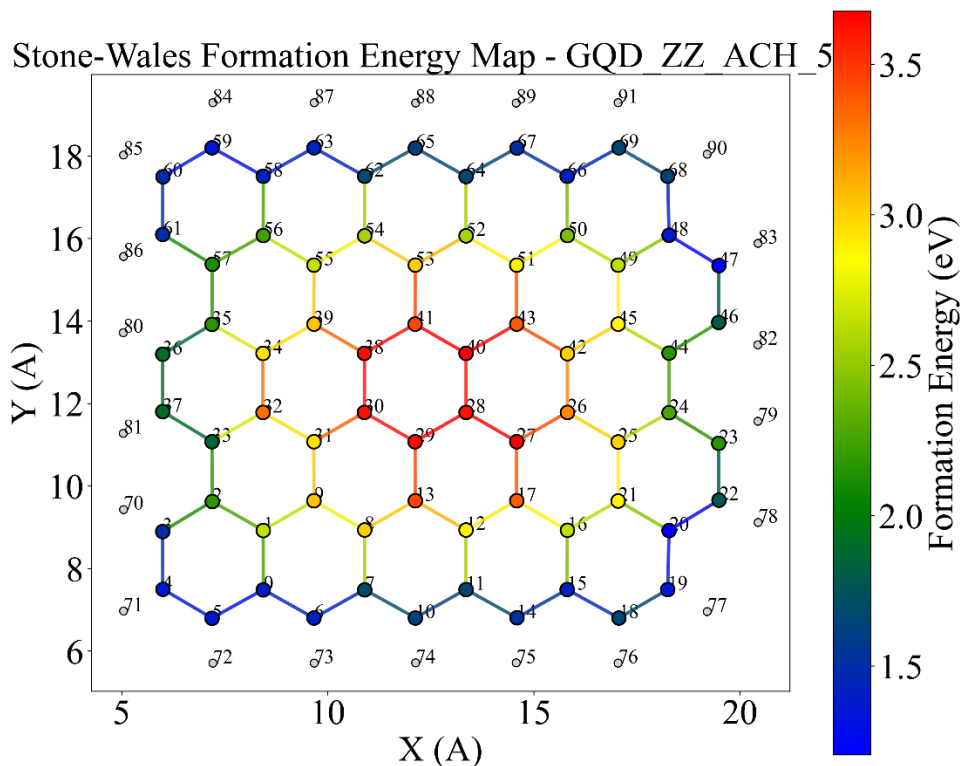


Рис. 3.4. карта енергій формування дефекту SW графеновій квантовій точці розміром близько 1,5 нанометра.

Оскільки цей дефект не передбачає видалення атомів, а лише перебудову зв'язків, його енергія формується переважно за рахунок локальних деформацій у шпальтовій структурі. Тому навіть у центральних областях ГКТ утворення перестановки зв'язків є менш енергетично затратним, ніж повне видалення атомів у випадку дивакансії, але все одно суттєво залежить від жорсткості центральної області.

Сукупний аналіз трьох моделей демонструє послідовну картину: у ГКТ дефекти легше утворюються на краях, тоді як центральні області залишаються енергетично стабільними й менш схильними до структурних порушень. Така поведінка визначає реакційну здатність ГКТ, впливає на їх електронні стани та визначає ділянки, де легування або функціоналізація будуть найбільш ефективними. Це створює основу для подальшого дослідження взаємодії дефектів із гетероатомами та хімічними групами, а також для прогнозування властивостей модифікованих наноматеріалів.

Враховуючи встановлену закономірність щодо просторової залежності енергій дефектоутворення, доцільно порівняти отримані результати з поведінкою структур інших конфігурацій, зокрема гексагональних ГКТ із різними типами країв. Відомо, що саме геометрія краю істотно впливає на локальну електронну густину та міцність зв'язків, а отже - і на енергетичну вартість утворення вакансій або інших точкових дефектів. Перехід до аналізу гексагональних структур (див. рис. 3.5). дозволяє простежити, як зміна топології та симетрії краю модифікує енергетичний ландшафт: у системах із певними типами країв можуть утворюватися ділянки з різними енергіями формування, тоді як інші демонструють більш рівномірний і підвищений енергетичний профіль.

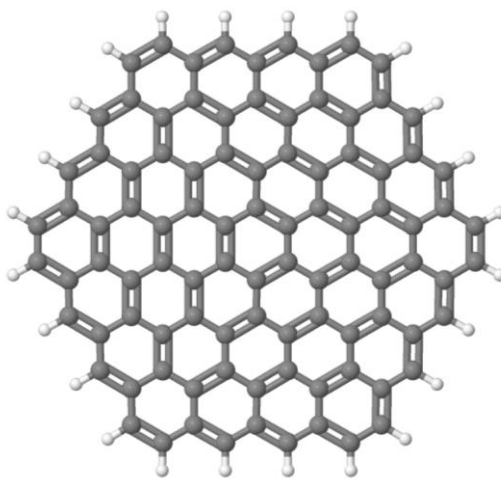


Рис. 3.5. Графенова квантова точка гексагональної конфігурації розміром близько 1 нанометра.

Саме ці особливості визначають відмінності у стабільності дефектів і створюють передумови для подальшого аналізу впливу геометрії краю на поведінку вакансій у гексагональних ГКТ.

Наступним кроком стала побудована карта енергій за допомогою очислювального фреймворку (див. рис. 3.6a) та приклад структури вакансії для 55 атому (див. рис. 3.6b) які продемонстрували наступні результати.

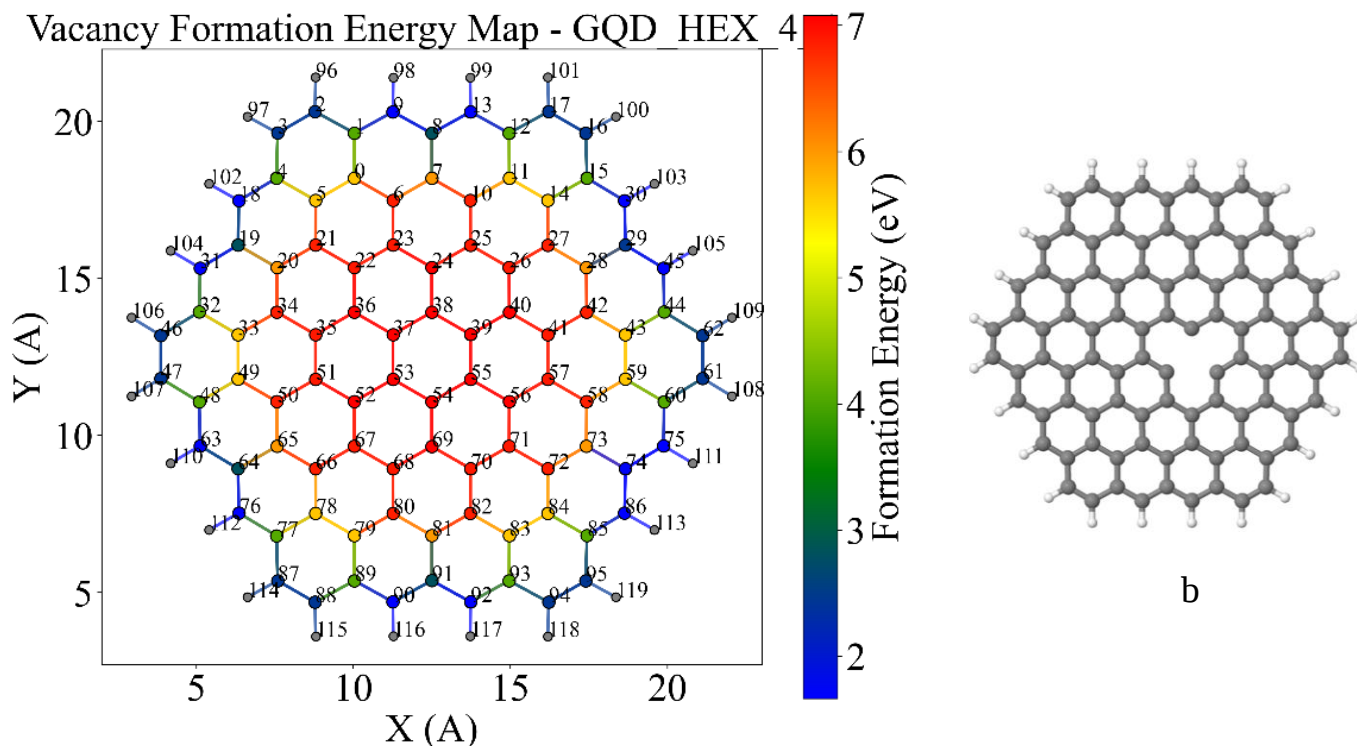


Рис. 3.6. Карта енергій утворення вакансії (a) та приклад конфігурації вакансії для окремого (55-го атома) (b).

На поданій карті чітко простежується характерний для ГКТ ефект: найвищі енергії утворення вакансій зосереджені в центральній частині структури, що відображено червоними відтінками 5.8-7.0 еВ. Геометрично це відповідає атомам, які знаходяться в умовах максимальної координації. Центральна зона демонструє дуже рівномірний розподіл високих значень, що свідчить про стабільну та

однорідну локальну кристалічну конфігурацію без значних внутрішніх деформацій чи асиметрій.

На відміну від центру, перехідна зона між серединою структури та периферією характеризується плавним спадом енергії утворення вакансій. Вона має жовто-зелене забарвлення 4.0-5.5 eV. Ця область демонструє зміну координаційних умов: атоми розміщені ближче до межі кластера, тому вони дещо менше стабілізовані міжатомними взаємодіями. Разом із тим, розподіл енергій у цьому шарі не є цілком симетричним - деякі ділянки мають вищі локальні значення (наприклад, області уздовж окремих «радіальних» ланцюгів), що може свідчити про неоднорідний розподіл напружень у структурі або особливості геометрії квантової точки, такі як неідеальна кутова рівновіддаленість.

Ближче до країв графенової квантової точки значення енергії помітно зменшуються, досягаючи синіх та зелених тонів 2.0-3.5 eV. Карта демонструє, що цей спад є різким, особливо по лініях, які відповідають «крайовим» атомам. Візуально крайова область має найнижчі значення у всій структурі - це вказує на дуже низьку енергетичну вартість вакансії саме на периферії, що узгоджується з відомою хімічною активністю країв графенових систем.

Інтерес викликає також асиметрія між різними сегментами краю. Хоч загальна тенденція зниження енергії зберігається для всього периметра, окремі ділянки демонструють відносно підвищені значення у порівнянні з іншими крайовими атомами. Наприклад, у верхньому сегменті (область навколо атомів 96-103) присутні зелені відтінки, тоді як бічні райони ближче до атомів 106-112 характеризуються майже чисто синім кольором.

Загальна структура карти енергій демонструє радіальну організацію енергій, характерну для ідеалізованих графенових кластерів із гексагональною симетрією. Центральні області найбільш стабільні, проміжна зона має середні енергії, а периферія - найменші. Карта не містить різких «аномалій» чи хаотичних викидів,

що свідчить про коректну побудову моделі та фізично послідовну поведінку. При цьому тонкі відмінності між різними напрямками розподілу енергій показують, що квантова точка не є абсолютно симетричною і має локальні варіації, які важливо враховувати при подальшому аналізі структурної стабільності.

Отже, проаналізована карта енергій утворення моновакансій у графеновій квантовій точці чітко демонструє закономірний радіальний розподіл стабільності атомів: максимальні значення зосереджені у центрі, тоді як мінімальні - на периферії. Така структурна організація дає можливість оцінити локальну стійкість окремих атомів і дозволяє виявити потенційні області, де виникнення дефектів є енергетично найімовірнішим. Однак моновакансія є лише одним типом точкового дефекту, і для повного розуміння дефектної поведінки недостатньо аналізувати лише ізольоване вилучення одного атома.

Саме тому наступним етапом є дослідження дивакансій, які становлять складнішу дефектну конфігурацію та часто проявляються як результат релаксації двох сусідніх моновакансій або як первинний дефектний стан у зонах із зниженими енергетичними бар'єрами. На відміну від моновакансії, утворення дивакансії супроводжується суттєвим перебудуванням локальної топології решітки, що може призводити до трансформації шестикутників у 5-8-5 або 555-777 реконструкції. Відповідно, енергетична картина для цього виду дефектів є якісно іншою та потребує окремого аналізу.

Докладний аналіз карт енергій утворення дивакансій дозволяє визначити не лише загальні тенденції, а й сильну залежність стабільності дефектної пари від просторової орієнтації та положення пари атомів у структурі. Це особливо важливо, оскільки різні конфігурації дивакансій можуть мати суттєво відмінні енергетичні характеристики навіть для атомів, розташованих на однаковій відстані від центру квантової точки. З цією метою було побудовано спеціальну карту енергій для всіх можливих комбінацій сусідніх атомів.

На Рис. 3.7 представлено результати цього аналізу: на рис. (a) наведена карта енергій утворення дивакансій, яка ілюструє просторову нерівномірність енергетичних характеристик для різних пар атомів, тоді як рис (b) демонструє конкретний приклад утворення дивакансії для пари 38-39-го атомів. Така ілюстрація дозволяє не лише порівняти локальну стабільність різних дефектних конфігурацій, а й показати характерні перебудови кристалічної решітки, які виникають після релаксації дефекту.

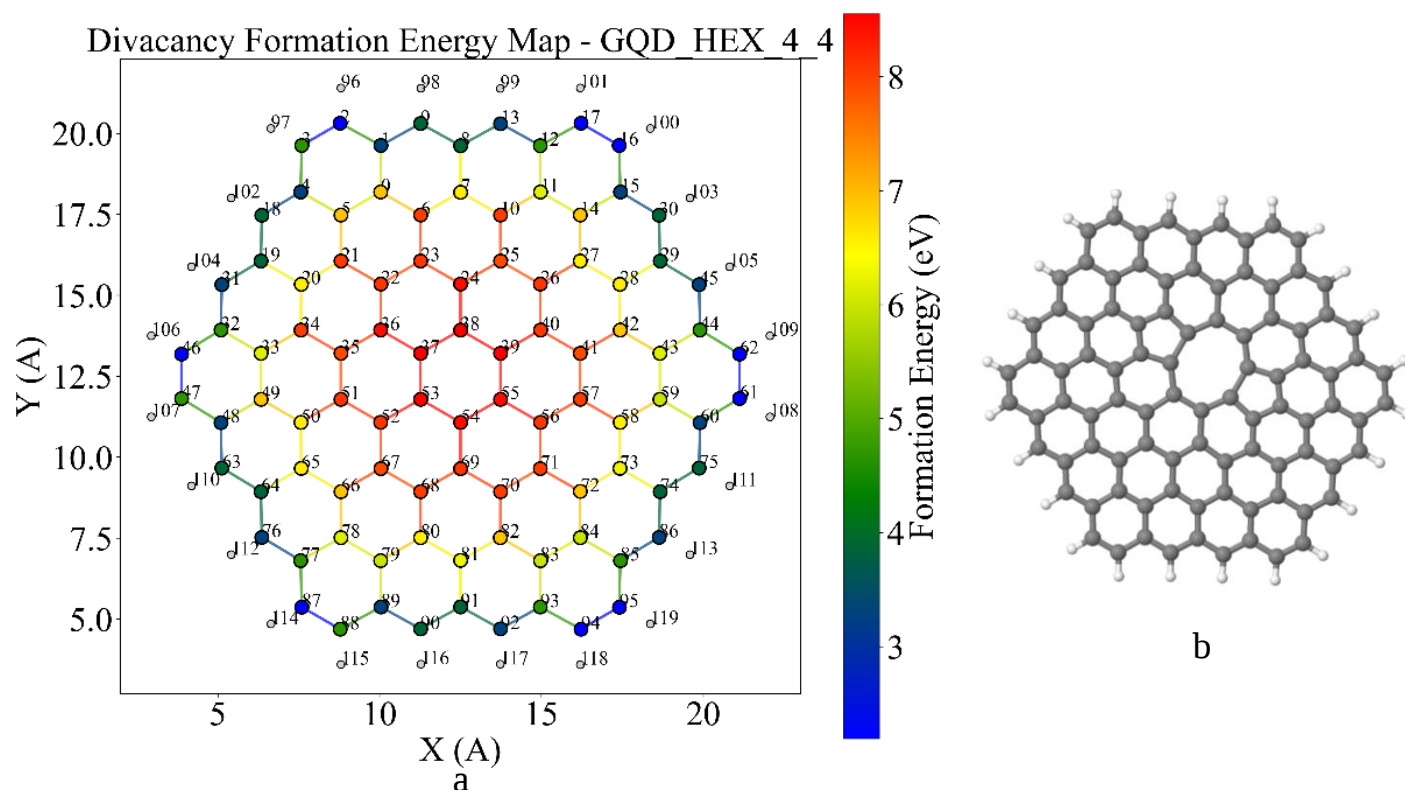


Рис. 3.7. Карта енергій утворення дивакансії (a) та приклад конфігурації дивакансії для окремого (38-39-го атома) (b).

На карті енергій утворення дивакансій спостерігається чіткий радіальний градієнт значень, що відповідає очікуваній поведінці для регулярної гексагональної графенової квантової точки. Центральна область демонструє найвищі значення енергії (7.5-8.2 еВ), що проявляється у яскраво-червоних ділянках. Це означає, що вилучення сусідньої пари атомів у центрі викликає найбільш значне порушення

локальної координаційної структури, оскільки обидва атоми є повністю оточені шестивугільниками, а перебудова після утворення дефекту потребує суттєвого розриву зв'язків.

Проміжна зона між центром і периферією демонструє поступове зниження енергетичних значень у межах 5.5-7.0 еВ. Візуально ця область представлена жовтими та жовто-зеленими кольорами. Важливо, що зміна кольору від центру до середньої зони відбувається плавно та без різких перепадів, що свідчить про однорідність решітки та рівномірність топологічних умов для різних комбінацій сусідніх атомів. Незначні варіації кольору уздовж окремих напрямів зумовлені локальною геометрією шестикутників, але не свідчать про існування різних типів краю - у цій моделі всі краї однакові.

Периферійна частина квантової точки має найнижчі значення енергії утворення дивакансій, які досягають 3.0-4.5 еВ, що видно з синьо-зелених ділянок. На межі структури атоми вже мають меншу кількість сусідів, тож утворення дивакансії порушує меншу кількість зв'язків і вимагає менших енергетичних затрат. На відміну від центрів, крайова зона характеризується широким діапазоном кольорів, але ця варіативність не пов'язана з типом краю - вона пояснюється лише локальними позиційними відмінностями атомів уздовж гексагонального контуру.

Сукупна структура карти вказує на високу симетрію моделі, оскільки внутрішні ділянки (орієнтовно атоми 20-34) демонструють близькі значення енергій і формують плавний, рівномірний перехід між різними радіальними зонами. Це підтверджує, що досліджувана графенова квантова точка має ідеальну гексагональну геометрію без відмінностей у типах країв чи їхній кристалографічній орієнтації.

Наостанок, важливо зазначити, що асиметрія між окремими номерами атомів у крайовій зоні є мінімальною і має локальний характер, пов'язаний зі специфікою розміщення пар атомів уздовж гексагонального периметра. Модель не демонструє

суттєвих структурних викривлень або кутових відмінностей, які могли б вказувати на наявність різних типів краю - усі крайові позиції мають однакове топологічне оточення. Отже, після аналізу енергетичного ландшафту утворення дивакансій наступним кроком є дослідження топологічних перебудов решітки. Такі перебудови не зводяться до простого видалення атомів, а передбачають переналаштування міжатомних зв'язків (див. рис. 3.8).

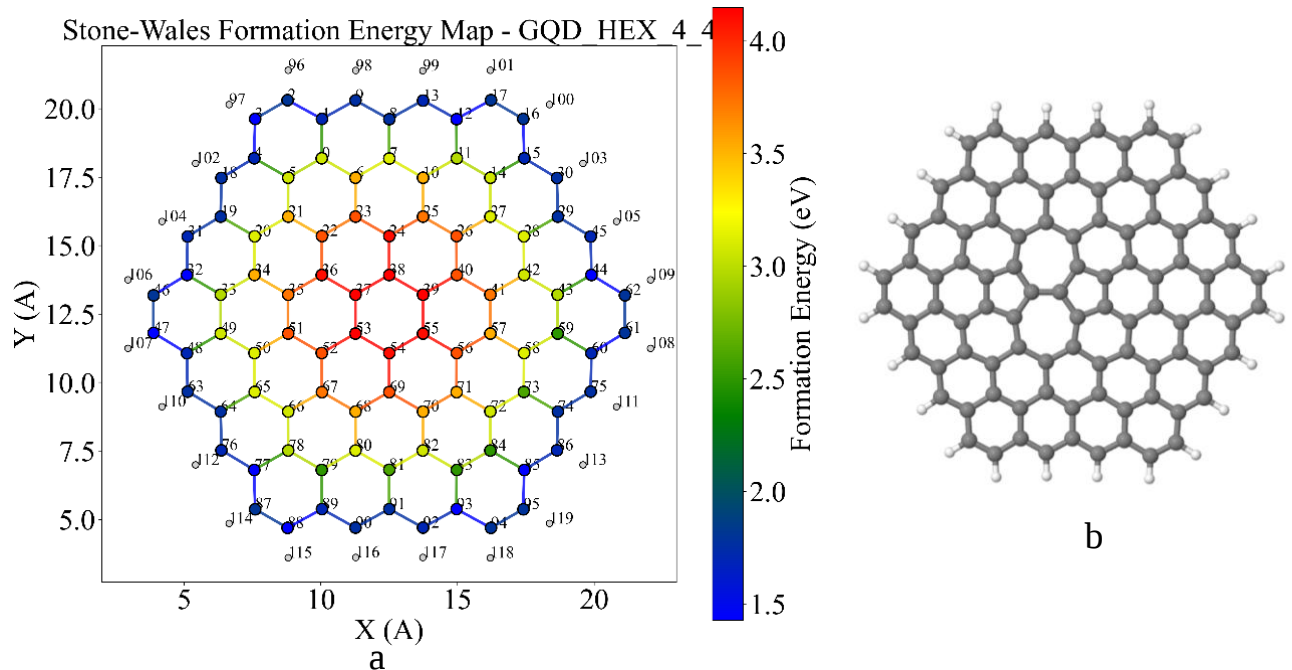


Рис. 3.8. Карта енергій утворення дефекту типу SW (a) та приклад конфігурації дефекту SW для окремого (38-53-го атома) (b).

Одним із характерних прикладів є дефект типу SW - перестановка одного зв'язку з поворотом на 90° , що призводить до трансформації початкового шестикутника у пару п'ятикутника та семикутника. На відміну від дивакансії, дефект SW змінює топологію без порушення кількості атомів (див. рис. 3.8), тому карта енергій для цього випадку відображає інші фізичні механізми - локальний перерозподіл енергії зв'язків та релаксацію навколишньої решітки.

Карта енергій утворення дефекту SW, наведена на (рис. 3.8a), демонструє розподіл енергетичних затрат, необхідних для повороту зв'язку в різних ділянках

графенової квантової точки. На відміну від дефектів, пов'язаних із видаленням атомів, утворення Стоун-Вельса відбувається за рахунок локальної перебудови зв'язків, тому загальний характер карти визначається більш м'яким радіальним градієнтом. Центральна частина структури має помірно підвищені значення, однак їхній діапазон набагато вузький, ніж у випадку дивакансій, де енергії різко зростають у центрі через глибоке порушення координаційного оточення.

У проміжній зоні значення енергії залишаються доволі рівномірними. Плавний перехід від центральної області до периферії характеризується поступовим зменшенням енергії, але без чітко виражених стрибків. Це свідчить про те, що локальні варіації у геометрії шестикутників менше впливають на процес формування цього типу дефекту. Візуально проміжна частина представлена переважно жовтими та світло-зеленими відтінками, що вказує на обмежене коливання енергетичних значень у цьому регіоні.

Найбільш помітною відмінністю від картини для дивакансій є поведінка крайових областей, де енергія формування дефекту SW є мінімальною в межах усієї структури. На карті вони чітко представлені синьо-блакитними тонами, що відповідає дуже низьким енергетичним значенням порядку 1.5-2.0 eV. Така суттєва різниця зумовлена тим, що на периферії графенової квантової точки координація атомів ослаблена, а поворот зв'язку відбувається зі значно меншими деформаціями сусідніх кілець. На відміну від дивакансій, де край також має найнижчі значення, але залишається в межах 3.0-4.5 eV, дефект SW на краю формує область найменших енергетичних затрат серед усіх розглянутих типів дефектів.

Загальний вигляд карти підтверджує високу симетрію та структурну однорідність графенової квантової точки. Внутрішні шари демонструють близькі значення, що формують плавний радіальний перехід без різких локальних відхилень. Така поведінка чітко відображає сутність дефекту SW: він належить до топологічних перебудов, що мінімально порушують глобальну структуру, а його

енергія визначається передусім локальними змінами у зв'язках, а не масивними структурними деформаціями.

Отже, проведений аналіз енергетичних характеристик основних типів точкових дефектів - моновакансій, дивакансій та перебудови SW - дозволив встановити просторові закономірності їх утворення та визначити ділянки графенової квантової точки з мінімальними й максимальними енергетичними затратами. Отримані карти енергій відображають стійкість локальної структури та надають цілісне уявлення про те, які зони кластера є найбільш схильними до топологічних трансформацій. Важливо, що різні механізми дефектоутворення демонструють різний ступінь чутливості до координаційного оточення, що підкреслює багатогранність поведінки ГКТ на атомарному рівні.

Разом із тим, дефекти становлять лише один з аспектів модифікації властивостей ГКТ. Окрім внутрішніх перебудов решітки, значний вплив на їхні фізичні, хімічні та електронні характеристики має взаємодія із зовнішніми хімічними групами та зміна поверхневої хімії матеріалу. Саме зовнішня модифікація, спрямована на зміну реакційної здатності, полярності, оптичної активності або функціональних властивостей квантових точок, дає можливість цілеспрямовано формувати необхідні характеристики наноструктур.

У цьому контексті наступним етапом дослідження є розгляд процесів функціоналізації досліджуваної структури, що охоплює як хімічне приєднання функціональних груп, так і модифікацію поверхневих атомів, здатну суттєво змінювати поведінку системи. Перехід до цього розділу є логічним продовженням попереднього аналізу, оскільки функціоналізація тісно пов'язана з реакційними центрами, стабільністю структури та характером локальних дефектів, визначених у рамках проведених досліджень.

Далі ми вирішили перевірити, як зміниться карта енергій дефектів залежно від початкової конфігурації графенової квантової точки (див. рис. 3.9).

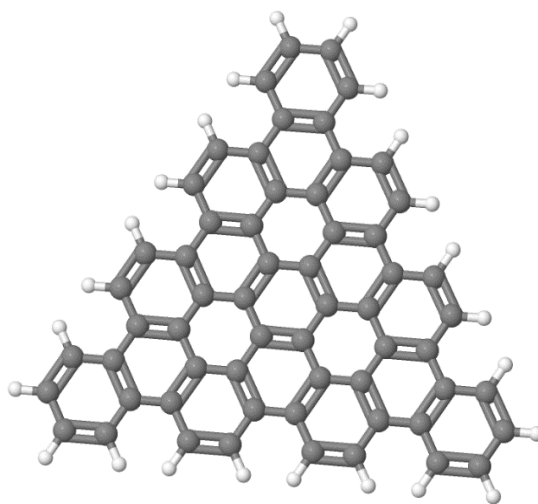


Рис. 3.9. графенова квантова точка трикутної конфігурації.

Для цієї структури ми побудували карту енергій для утворення дефекту вакансії (див. рис. 3.10.) що продемонструвало цікаві результати.

Vacancy Formation Energy Map - GQD_TRI_ACH_4_4

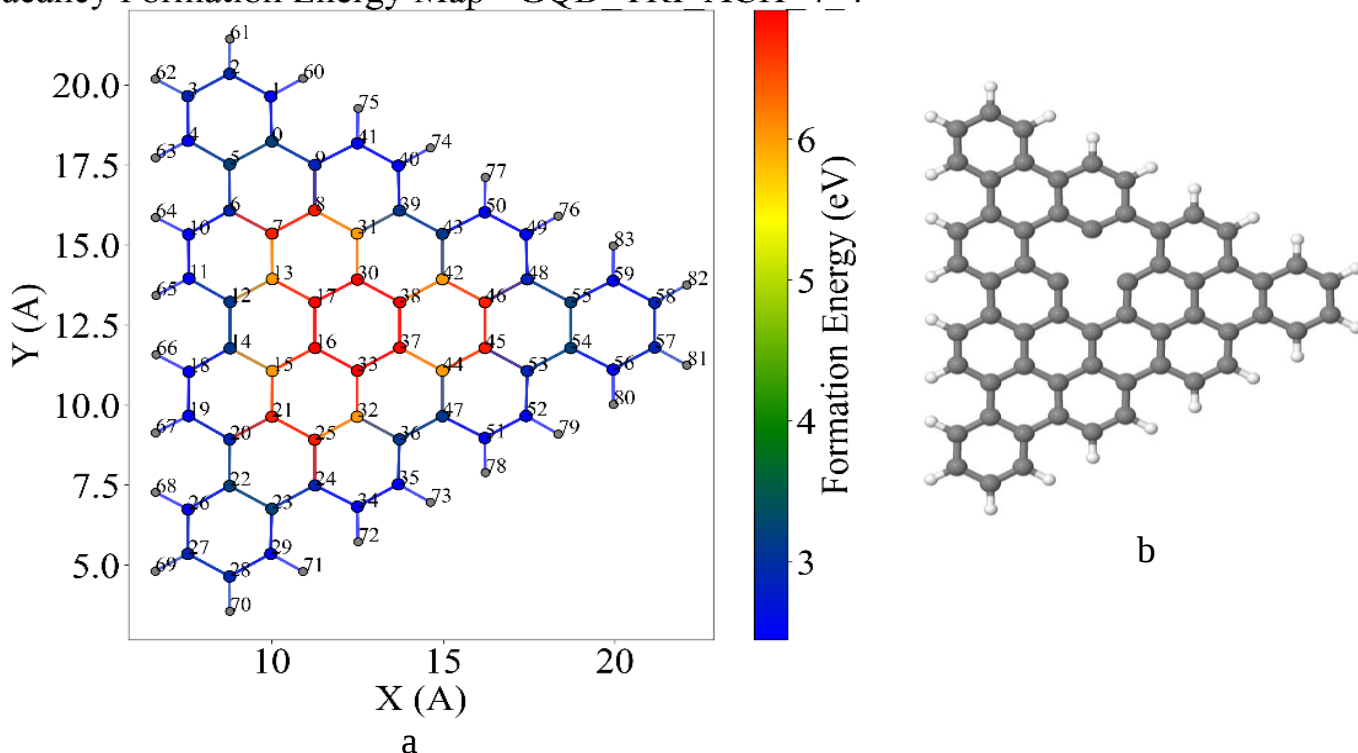


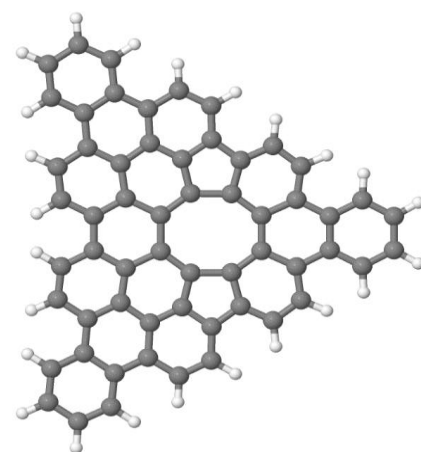
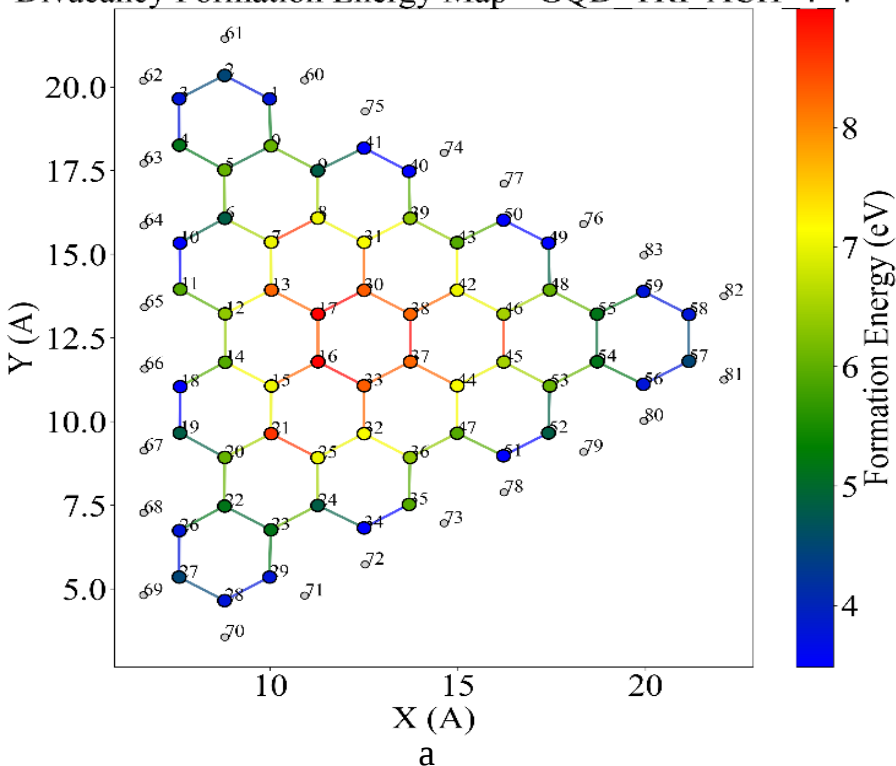
Рис. 3.10. Карта енергій утворення вакансії (а) та приклад конфігурації вакансії для окремого (30-го атома) (b).

Аналіз отриманої карти енергій утворення вакансій у трикутній конфігурації показує, що центральна область графенової квантової точки знову характеризується підвищеними енергетичними значеннями, що узгоджується з очікуваною більшою стабільністю внутрішніх атомів порівняно з крайовими. Краї структури традиційно демонструють нижчі енергії утворення дефектів, де атоми менш зв'язані та більш схильні до локальних деформацій.

Хоча числові значення частково відрізняються від результатів, отриманих для попередньої (шестикутної) моделі, загальна просторово-енергетична динаміка - зростання енергії до центру та зменшення до країв - залишається стабільною. Це свідчить про те, що топологія початкової конфігурації впливає на локальні значення, але не змінює фундаментальний характер розподілу енергій у ГКТ.

Далі було проведено дослідження карти енергій утворення дивакансії (див. рис. 3.11.) яка продемонструвала певні стабільні закономірності.

Divacancy Formation Energy Map - GQD TRI ACH 4 4



b

Рис. 3.11. Карта енергій утворення дивакансії (а) та приклад конфігурації дивакансії для окремої пари (37-38-го атома) (b).

Аналіз карти енергій утворення дивакансій для трикутної конфігурації показує, що центральна частина графенової квантової точки знову демонструє найвищі енергетичні бар'єри. Це вказує на те, що видалення двох сусідніх атомів у внутрішній області структури залишається енергетично менш сприятливим порівняно з краями, де атоми мають менше координаційних зв'язків і, відповідно, нижчі енергії утворення дефектів.

Як і у випадку з моновакансіями, попри певні кількісні відмінності у значеннях енергій порівняно з попередньою (шестикутною) моделлю, загальна динаміка зберігається стабільною. Енергія поступово зменшується від центру до периферії, що підтверджує, що зміна стартової геометрії впливає лише на локальні числові варіації, але не змінює фундаментальний характер розподілу енергетичних характеристик дивакансій у ГКТ.

Наступним кроком було дослідження карти енергій для дефекту SW (див. рис. 3.12.).

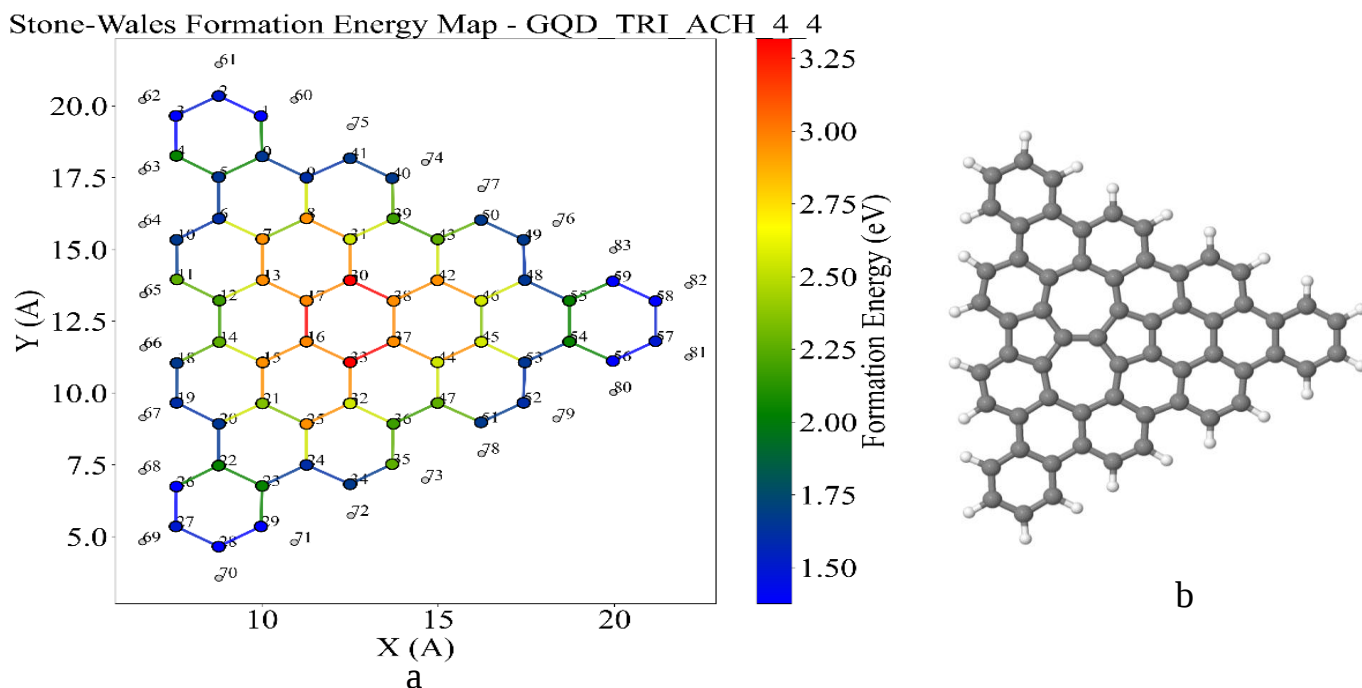


Рис. 3.12. Карта енергій утворення дефекту типу SW (а) та приклад дефекту SW для окремої прай (16-17-го атома) (b).

Карта енергій утворення дефекту SW для трикутної конфігурації демонструє характерний розподіл, у якому максимальні значення зосереджені переважно у центральній частині графенової квантової точки.

Це пов'язано з тим, що внутрішні зв'язки є більш жорсткими й енергетично затратними для перебудови, тоді як крайові атоми мають вищу структурну гнучкість, що знижує енергію утворення повороту зв'язку.

Попри певні кількісні розбіжності з попередньою (гексагональною) моделлю, загальна тенденція зберігається: енергія дефекту поступово зменшується від центру до периферії. Це свідчить про те, що зміна геометрії впливає на локальні варіації, однак фундаментальний характер просторового розподілу енергій утворення дефекту SW залишається стабільною для різних конфігурацій ГКТ.

3.2. Функціоналізація графенових квантових точок

Наступним нашим кроком стало дослідження залежності енергій формування точкових дефектів у ГКТ функціоналізованих киснем та азотом. Результатом стало створення наступних структур (див. рис. 3.13.) гексагональної та трикутної конфігурації.

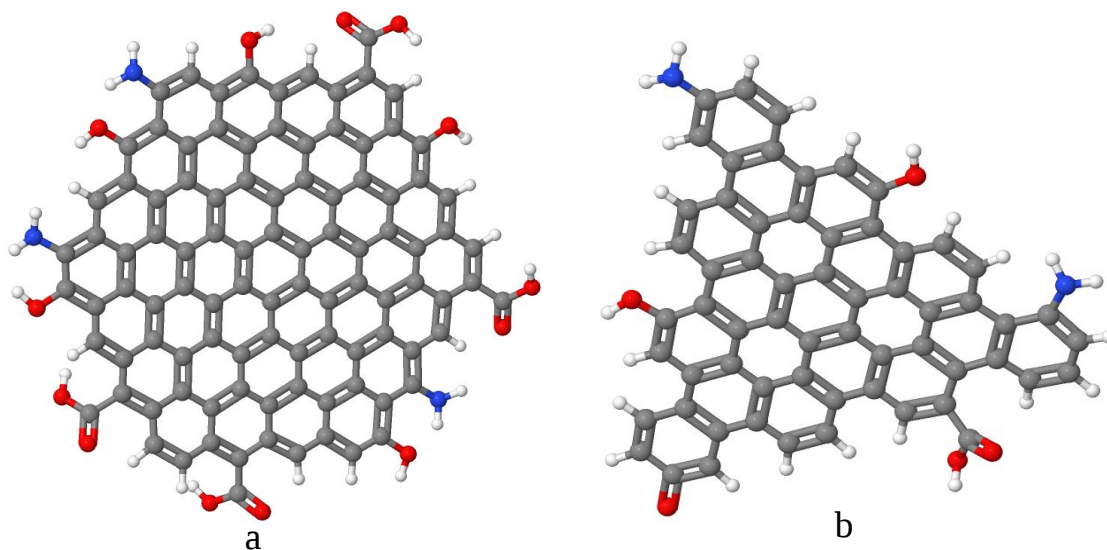


Рис. 3.13. графенова квантова точка гексагональної конфігурації (a)
графенова квантова точка трикутної конфігурації (b).

Для цих структур було проведено розрахунки та розраховано карти енергій які продемонстрували закономірності які узгоджуються з теоретичними відомостями.

Карта енергій для вакансії гексагонально та трикутної атомної структури які зображені на (рис. 3. 14) продемонстрували принципово схожі результати.

Вакансії демонструють чіткий градієнт енергії формування: від нижчих значень на периферії (4-5 eV) до значно вищих у центрі (7-8 eV), тобто з різницею близько 2-3 eV. Функціоналізація загалом знижує ці значення на 1-1.5 eV по всій площі ГКТ.

У гексагональній та трикутній конфігураціях карти енергій мають подібний характер: мінімальні значення зосереджені на краях, тоді як у центрі спостерігається їх різкий зріст. Причина полягає у різній координації атомів: крайові області здатні легше релаксувати після видалення атома, тоді як у центральній частині більш жорстка структура спричиняє підвищені енергетичні бар'єри.

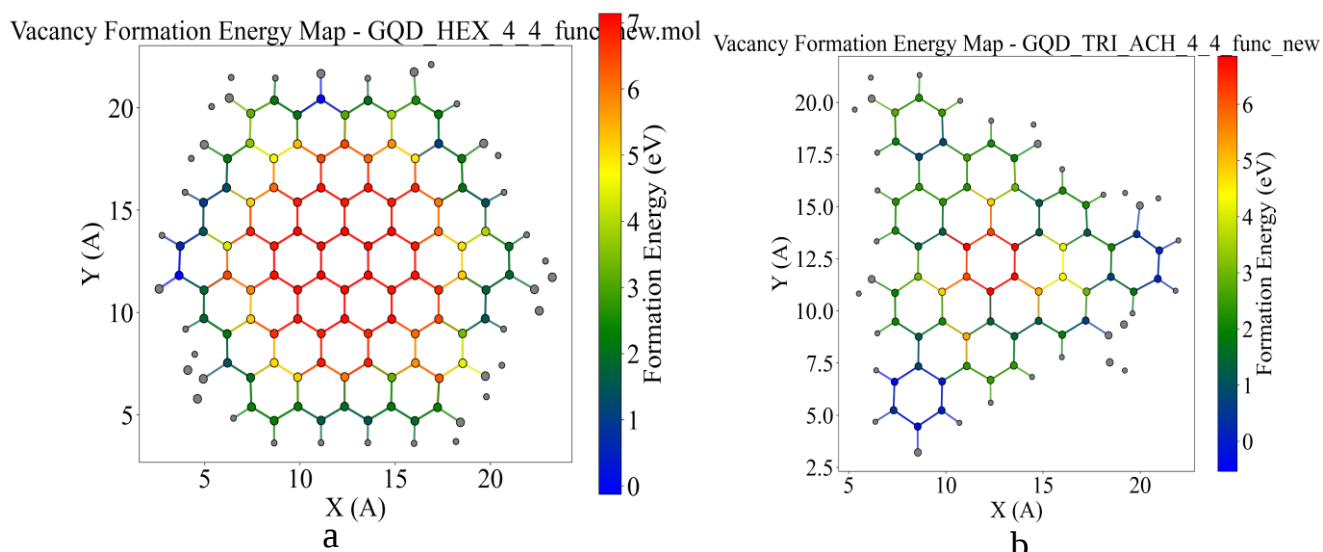


Рис. 3.14. Карта енергій утворення вакансії в гексагональній структурі (а) та трикутній (b).

Попри деякі відмінності у локальних значеннях між двома геометріями - зокрема, зміщення окремих максимумів і мінімумів - загальний розподіл енергій залишається подібним. Це підтверджує, що ключові механізми формування вакансій визначаються насамперед локальною координацією атомів, а не формою квантової точки.

Хоча гексагональні та трикутні моделі демонструють певні відмінності в деталях, вони не впливають на загальну тенденцію: енергія зростає від країв до центру, а у функціоналізованих ГКТ енергетичні бар'єри систематично нижчі.

Для підтвердження було побудовано карти енергій для утворення дивакансій в гексагональній та трикутній структурах (див. рис. 3.15.).

У гексагональних і трикутних моделях дивакансії формують подібний просторовий розподіл енергій: найнижчі значення спостерігаються на краях квантової точки, тоді як центральна зона демонструє максимальні бар'єри.

Це зумовлено тим, що периферійні атоми мають більше можливостей для релаксації після видалення двох сусідніх атомів, тоді як центральна частина зберігає жорстку каркасну структуру.

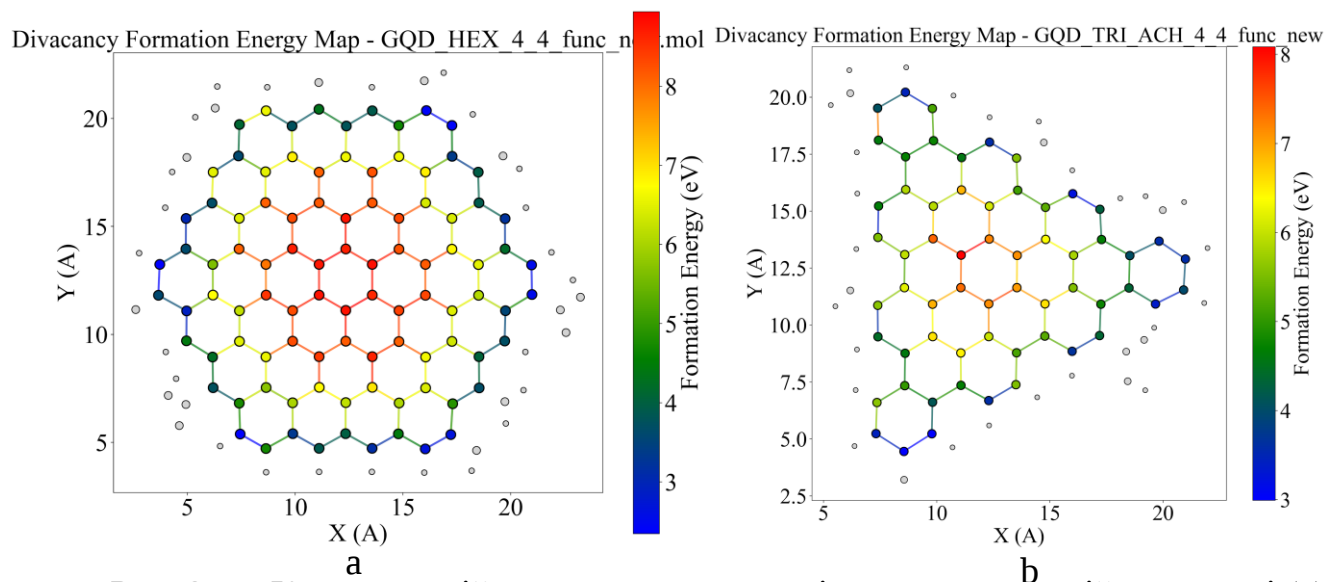


Рис. 3.15. Карта енергій утворення дивакансії в гексагональній структурі (a) та трикутній (b).

Попри певні відмінності у чисельних значеннях між гексагональною та трикутною конфігураціями, загальна топологія енергетичних карт залишається незмінною. У функціоналізованих ГКТ енергії формування значно нижчі, що свідчить про спрощення утворення дивакансій. Зміни електронної густини та ослаблення локальних С-С зв'язків під впливом функціональних груп покращують здатність структури до релаксації, роблячи появу двоатомного дефекту енергетично менш затратною незалежно від форми квантової точки.

У кількісному вимірі дивакансії демонструють той самий градієнт, що й моноакансії, але з вищими абсолютними значеннями: від 3-5 еВ на краях до 8-9 еВ у центральній частині. Функціоналізація знижує ці бар'єри на 1.5-2 еВ, причому найбільший ефект спостерігається саме в периферійних областях.

Для підтвердження було побудовано карти енергій утворення дефекту SW в гексагональній та трикутній структурах (див. рис. 3.16).

Обидві розглянуті конфігурації демонструють схожий просторовий характер розподілу енергій: у центрі графенової квантової точки значення найбільш високі, тоді як на краях перебудова зв'язків потребує значно менших затрат.

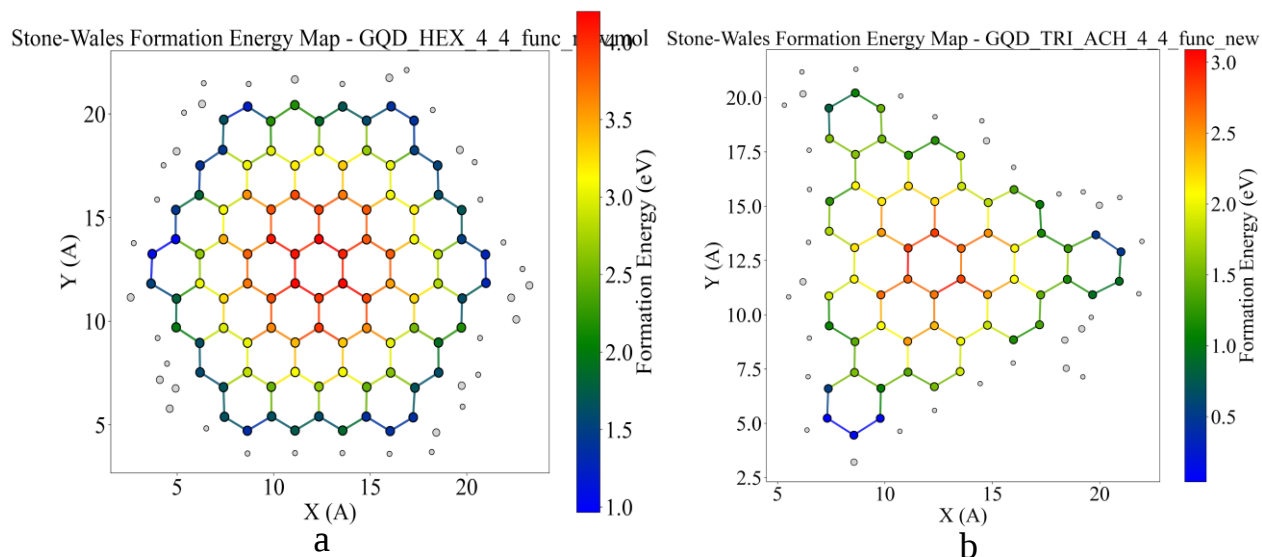


Рис. 3.16. Карта енергій утворення дефекту типу Стоуна-Велса у гексагональній структурі (a) та трикутній (b).

Хоча числові показники в гексагональній та трикутній моделях можуть дещо різнитися, загальний профіль залишається незмінним. У функціоналізованих структурах енергетичні бар'єри ще більше знижуються, що вказує на підсилену здатність системи до локальної релаксації та спрощену перебудову С-С зв'язків незалежно від вихідної геометрії.

Для дефектів SW градієнт менш контрастний, однак тенденція до зростання енергії від країв до центру зберігається: 1-2 еВ на периферії та 3,5-4 еВ у середині області. Функціоналізація зменшує ці значення на 1-1.8 еВ, роблячи поворот зв'язків суттєво енергетично доступнішим.

Таким чином, утворення точкових дефектів у ГКТ, модифікованих киснем та азотом, підпорядковується стійким закономірностям: мінімальні енергії характерні для периферійних ділянок, тоді як центр виявляється найбільш жорстким через обмежену рухливість атомних зв'язків. Незалежно від форми квантової точки - гексагональної або трикутної - енергетичні карти для вакансій, дивакансій і дефектів SW зберігають однакову логіку розподілу, а функціоналізація стабільно зменшує бар'єри перебудови. Отримані результати узгоджуються з теоретичними уявленнями та підтверджують універсальність механізмів, що визначають формування дефектів у графенових квантових точках.

3.3. Вплив легування на дефектоутворення та властивості графенових квантових точок

У цьому підрозділі розглянуто особливості замісного легування ГКТ, попередньо функціоналізованих атомами кисню та азоту. На Рис. 3.17 подано дві базові геометрії таких систем: гексагональну (а) та трикутну (b), які слугують вихідними моделями для подальшого дослідження впливу легуючих атомів на локальну енергетику решітки.

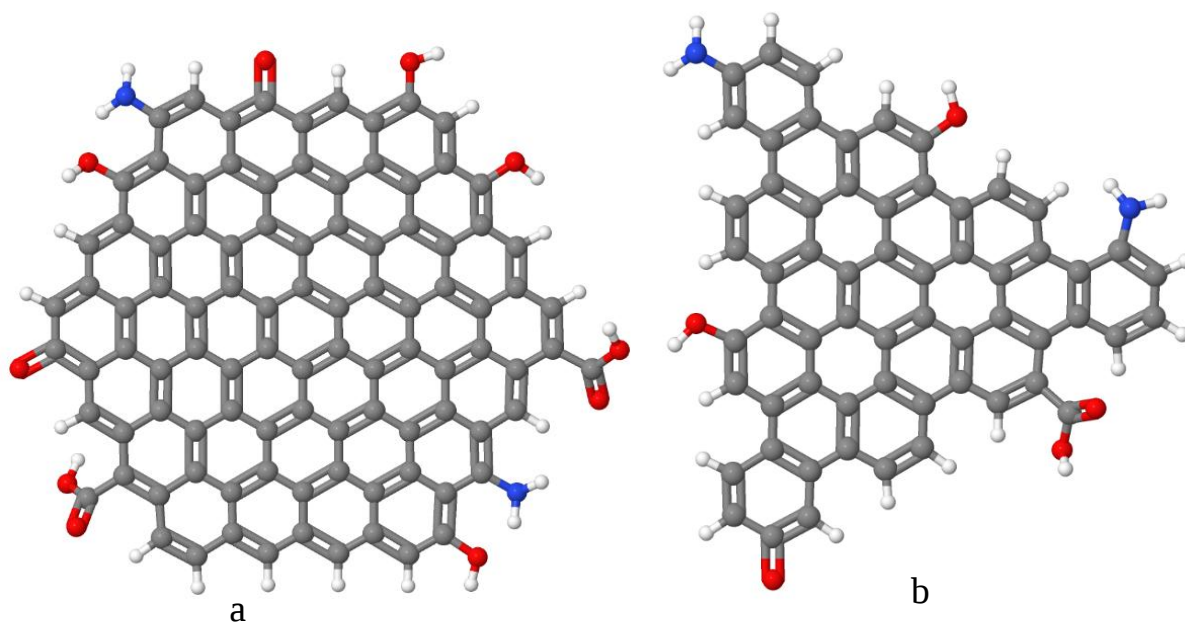


Рис. 3.17. Графенова квантова точка гексагонольної структури функціоналізована киснем та азотом (а) та трикутній (б).

Вибір саме цих конфігурацій зумовлений їхньою типовою симетрією для ГКТ та суттєвими відмінностями у краєвих станах, що визначають енергетичну вигідність заміщення вуглецевих атомів допантами. Встановлення того, як змінюється енергія формування при введенні різних легуючих елементів у конкретні позиції цих функціоналізованих структур, дозволяє глибше зрозуміти механізми стабілізації дефектів і сформулювати прогноз щодо електронних властивостей модифікованих ГКТ. Саме тому далі подано порівняльний аналіз карт енергій для трьох допантів, що уможливило безпосереднє зіставлення ефектів замісного легування для гексагональних та трикутних структур.

На картах енергії формування для замісного легування атомом фосфору чітко простежується відмінність між гексагональною та трикутною графеновими квантовими точками. Для гексагональної конфігурації (ліва частина Рис. 3.18) найвищі значення енергії заміщення Р спостерігаються в центральній області структури й становлять приблизно 3.0 еВ, що вказує на значні локальні деформації при вбудовуванні фосфору у густо зв'язаний центр решітки.

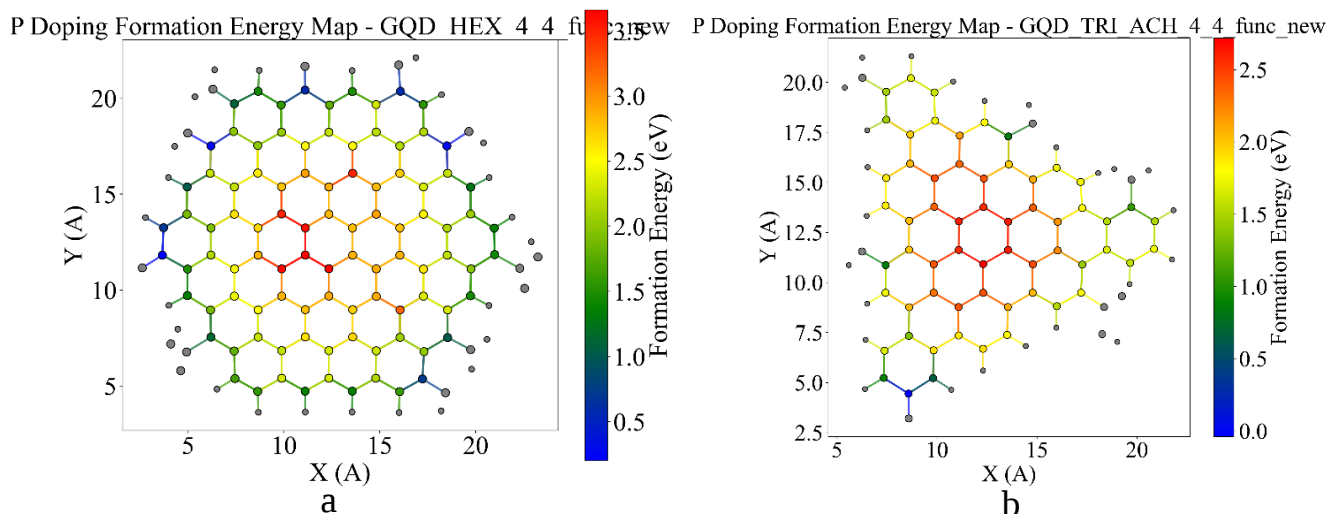


Рис. 3.18. Моделювання введення допантів у різні конфігурації ГКТ: (а) гексагональна та (б) трикутна. Атом фосфору (Р) займає позиції в ґратці, де могла б утворитися вакансія, модифікуючи електронні властивості матеріалу.

У середній зоні ГКТ енергія знижується до 2.2-2.7 еВ, а на периферії сягає мінімальних значень, близьких до 0.8 еВ, що демонструє значно сприятливіші умови для замісного введення Р саме на краях. Особливо помітними є синьо-блакитні ділянки з енергією нижче 1.0 еВ, де фосфор стабілізується з мінімальними енергетичними затратами.

У трикутній структурі (права частина Рис. 3.18) загальна тенденція зберігається - центральна область характеризується підвищеними значеннями енергії в межах 2.3-2.6 еВ, однак вони дещо нижчі за центральні значення у гексагональній ГКТ. Це може бути пов'язано з анізотропією трикутного контуру, який частково розвантажує внутрішню напругу. Водночас крайові ділянки виявляють ще нижчі значення, доходючи до 0.0 еВ, тобто практично енергетично нейтральні для замісного легування Р. Найнижчі точки припадають на нижній край структури (сині області), що свідчить про високу стабільність Р саме в цих локальних зонах.

Порівняння двох форм ГКТ показує, що легування Р енергетично вигідніше в трикутній конфігурації, де мінімальні значення енергії формування сягають 0 еВ,

тоді як у гексагональній структурі найнижчі значення не опускаються нижче 0.8 еВ. Таким чином, трикутна ГКТ створює більш сприятливе середовище для локального стабільного вбудовування атома фосфору, особливо на окремих краях. У той же час центральна область обох структур залишається енергетично не вигідною для замісного легування, що важливо враховувати при практичному прогнозуванні електронних властивостей.

На відміну від фосфору, який демонстрував широкий діапазон енергій до 3 еВ, легування азотом (див. рис. 3.19) характеризується загалом нижчим енергетичним профілем, що зумовлено меншим атомним радіусом N і його здатністю ефективно перебудовувати локальну електронну густину.

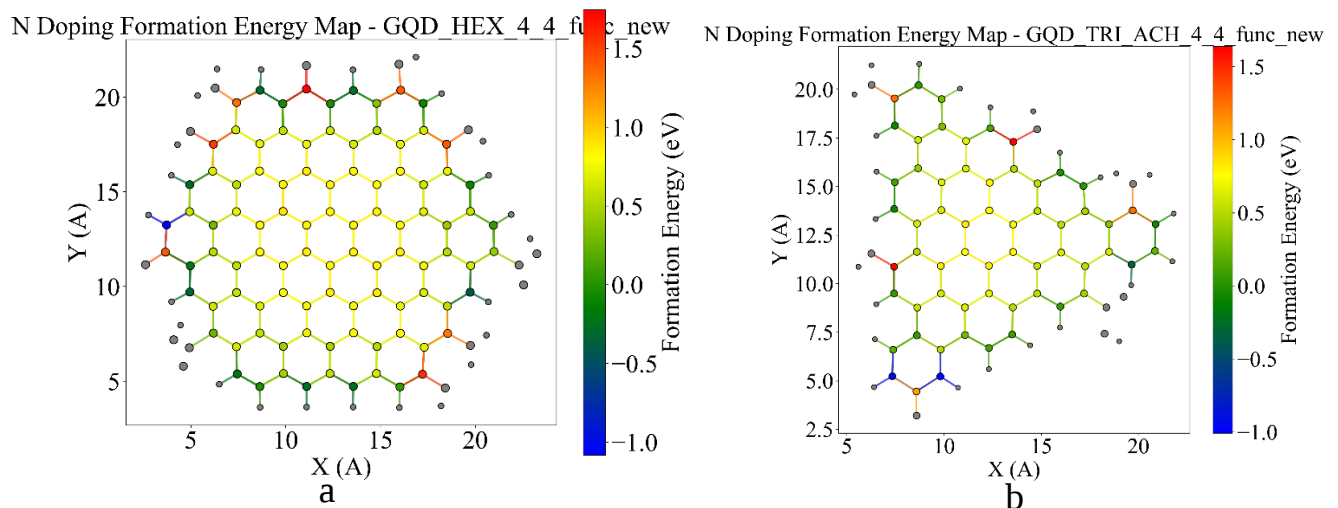


Рис. 3.19. Моделювання введення допантів у різні конфігурації ГКТ: (а) гексагональна та (б) трикутна. Атом азоту (N) займає позиції в ґратці, де могла б утворитися вакансія, модифікуючи електронні властивості матеріалу.

У гексагональній конфігурації мінімальні значення енергії формування спостерігаються на окремих периферійних позиціях, де колірна шкала переходить у синю область. Ці значення сягають приблизно -1.0 еВ, що свідчить про енергетично вигідне заміщення C на N на певних фрагментах краю. Решта крайових ділянок демонструє помірно низькі значення у межах 0.5-0.0 еВ, а більша частина середньої зони ГКТ має близькі до нульових або слабко позитивні значення (0.1 -

0.4 eV). Внутрішні ділянки червонуватого та оранжевого забарвлення сигналізують про зростання енергії формування до 1.0-1.5 eV, що вказує на менш сприятливе легування у щільно зв'язаному центрі структури. Таким чином, гексагональна ГКТ відзначається чітко вираженою тенденцією до стабільного легування N саме на краях.

Для трикутної конфігурації спостерігається схожа, але більш виражена анізотропія у розподілі енергій. Найнижчі значення енергії, що знову досягають рівня -1.0 eV, локалізовані у нижній лівій частині структури, де наявні найсильніше релаксовані крайові зв'язки. Інші периферійні ділянки мають значення у межах 0.5 та до 0.0 eV, що також свідчить про відносно легке та енергетично вигідне вбудовування азоту. Середня зона переважно демонструє значення в діапазоні 0.5 - 1 eV, тоді як локальні осередки з червоним забарвленням сягають 1.2 - 1.5 eV, аналогічно до гексагональної структури вказуючи на складність легування у центральних позиціях.

Порівняльний аналіз двох форм ГКТ показує, що легування азотом відбувається енергетично вигідно переважно на крайових ділянках, а за мінімальними значеннями енергії гексагональна та трикутна структура є фактично еквівалентними. Водночас трикутна конфігурація є більш анізотропною: у ній окремі лінії краю забезпечують значно вигідніші умови для заміщення, тоді як інші ділянки лише слабо сприяють легуванню. Таким чином, N-привнесення є структурно чутливим і відчутно залежить від локальних особливостей краю, але загалом енергетично доступним у порівнянні з фосфором.

Аналізуючи карти енергій формування на (рис. 3.20), видно, що легування бором загалом є енергетично менш вигідним, ніж у випадку азоту.

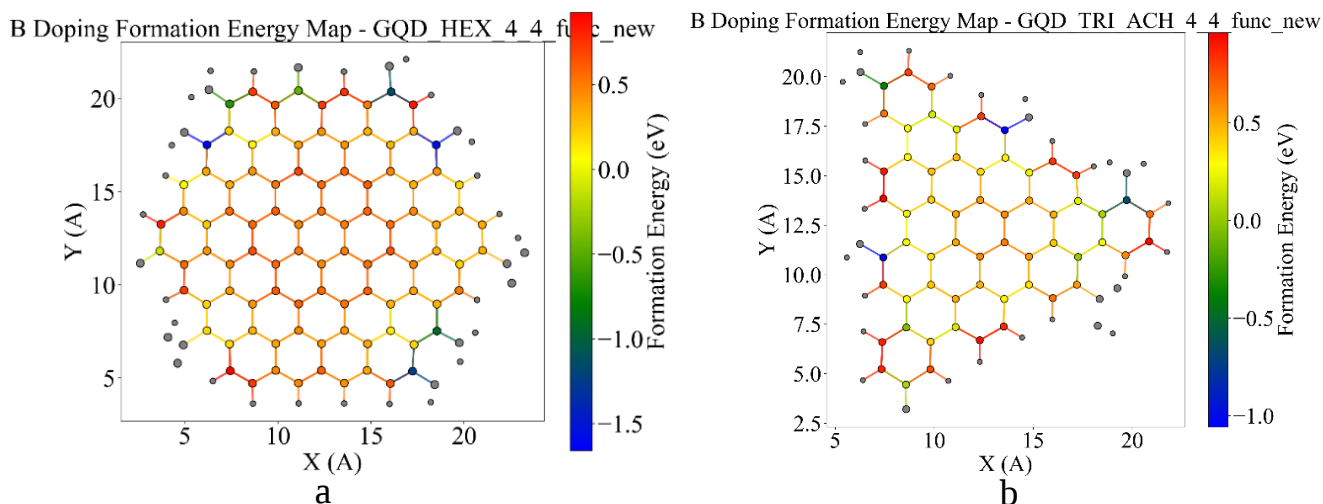


Рис. 3.20. Моделювання введення допантів у різні конфігурації ГКТ: (а) гексагональна та (б) трикутна. Атом бору (В) займає позиції в ґратці, де могла б утворитися вакансія, модифікуючи електронні властивості матеріалу.

Це зумовлено тим, що атом В має більший атомний радіус і дефіцит електронів (три валентні електрони), через що його заміщення в структурі призводить до сильнішої локальної деформації зв'язків. У результаті більшість значень енергії формування є позитивними, а області зі слабо негативними значеннями зустрічаються лише фрагментарно на краях.

У гексагональній конфігурації найнижчі енергії формування В локалізовані переважно на периферії, де колір переходить у зелено-синю зону. Ці значення опускаються приблизно з -1.0 по -1.3 еВ, що свідчить про відносну стабільність легування саме на окремих релаксованих крайових вузлах. Проте більшість інших крайових ділянок демонструють близькі до нуля або помірно позитивні значення 0.2 - 0.6 еВ, а центральні області переходять у помаранчево-червоний діапазон 0.8 - 1.5 еВ. Це означає, що вбудовування В у центр гексагональної ГКТ є енергетично небажаним і супроводжується суттєвими структурними напруженнями.

Для трикутної конфігурації характерна ще більш виражена анізотропія розподілу енергії. Найвигідніші позиції для В, з енергіями до -1.0 еВ, зосереджені на окремих сегментах нижнього краю, де геометрія створює умови для локального

розслаблення. Однак більша частина периферії має значення з -0.5 по 0.0 eV, що вказує на лише обмежено сприятливе легування. Центр структури демонструє 0.3-0.7 eV, а локальні червоні області сягають 1.0-1.4 eV, що, як і в гексагональному випадку, робить центральні позиції найменш бажаними для заміщення.

Порівняння двох конфігурацій показує, що обидві структури демонструють чітку тенденцію до стабілізації бору на краях, однак загальний енергетичний профіль для В суттєво вищий, ніж у випадку азоту, тобто легування потребує більшої енергії. Гексагональна ГКТ відзначається більш рівномірним розподілом енергій, тоді як трикутна структура проявляє сильну анізотропність: окремі лінії краю є значно сприятливішими, тоді як інші майже не підтримують легування. Це підкреслює, що стабільність В-допування значною мірою визначається конкретною локальною геометрією та напруженнями в області краю.

3.4. Дидактичні основи вивчення квантових явищ на прикладі моделювання графенових квантових точок і дефектів у них під час занять шкільного фізичного гуртка

Ознайомлення учнів із природою квантових точок (ГКТ) доцільно здійснювати через поєднання елементів моделювання, візуалізації та експериментального мислення, що дозволяє поєднати абстрактні поняття квантової фізики з наочними прикладами. На початковому етапі важливо сформувати в учнів розуміння того, що на нанорівні властивості речовини змінюються не лише кількісно, а й якісно. Для цього використовуються демонстраційні експерименти або відеофрагменти, які ілюструють зміну кольору люмінесценції наночастинок кадмій-селеніду (CdSe) залежно від їхнього розміру. Такі приклади дозволяють показати суть квантового обмеження - явища, коли розмір наночастинки впливає на енергетичний розподіл електронів і, відповідно, на колір випромінювання.

Після цього учні переходять до практичної частини, де створюють віртуальну модель ГКТ у середовищі Jmol. Ця програма дає змогу будувати тривимірні атомні структури, змінювати їхню геометрію, видаляти атоми для утворення дефектів або модифікувати крайові області, спостерігаючи, як це впливає на симетрію та стабільність системи. Завдяки інтерактивним інструментам учні можуть самостійно виявити зв'язок між розміром, формою та типом гібридизації атомів вуглецю, а також обговорити, як ці параметри визначають електронну будову й оптичні властивості матеріалу. Такі дії сприяють формуванню експериментального мислення, адже учні виступають у ролі дослідників, які ставлять гіпотези та перевіряють їх на віртуальних моделях.

Використання інтерактивного середовища Jmol реалізує принцип конструктивістського навчання, коли знання не передаються у готовому вигляді, а будуються через активну діяльність і рефлексію. Учні не просто спостерігають результати, а взаємодіють із моделями, модифікують їх і аналізують наслідки своїх дій. Як зазначають в статті [21], ефективність такого підходу істотно зростає при поєднанні симуляційного навчання з інтелектуальним тьюторством на основі ІІІ, яке може виконувати роль віртуального асистента. Такий асистент здатен пояснювати фізичні процеси, пропонувати корекцію параметрів моделі, підказувати напрям дослідження та ставити запитання, що стимулюють критичне мислення.

Завдяки цьому освітній процес набуває ознак персоналізованого навчання - кожен учень може рухатися у власному темпі, отримуючи підказки й пояснення відповідно до свого рівня розуміння. Крім того, ІІІ може допомагати учням аналізувати результати моделювання, наприклад, інтерпретувати графіки залежності енергії від геометрії або пояснювати причини появи дефектів у структурі. Такий підхід не лише робить складні фізичні явища доступними для

розуміння, але й підвищує мотивацію до навчання, оскільки учні бачать безпосередній зв'язок між власними діями та результатами моделювання [21].

Поєднання візуалізації у Jmol, розрахункових інструментів ASE і потенціалів машинного навчання MACE створює ефективну основу для реалізації STEM-підходу у позакласній навчально-дослідницькій діяльності. Така інтеграція дозволяє учням виконати повний цикл наукового дослідження - від побудови атомної моделі графенової квантової точки до її геометричної оптимізації за допомогою міжатомних потенціалів, отримуючи досвід, максимально наближений до сучасної наукової практики. Учні навчаються працювати з реальними науковими інструментами, розуміють етапи формування гіпотези, збору та аналізу даних, а також інтерпретації отриманих результатів, що забезпечує глибоке занурення у методологію STEM-освіти.

У цьому процесі вчитель виступає не як єдине джерело знань, а як фасилітатор, який організовує навчальне середовище, сприяє розвитку дослідницьких компетентностей та критичного мислення. Водночас роль «віртуального наставника» може виконувати система штучного інтелекту, подібна до NMC2025, описаної в роботі [21]. Така система здатна не лише аналізувати параметри моделі, а й надавати рекомендації, пояснення й контекстні підказки, адаптуючи навчальний процес під рівень підготовки кожного учня.

Як зазначають[14], поєднання симуляційних інструментів і систем на основі ШІ сприяє зростанню дослідницької автономії учнів, оскільки вони отримують змогу самостійно планувати експерименти, ставити запитання, перевіряти гіпотези та аналізувати результати. Інтелектуальна підтримка при цьому не обмежує свободу мислення, а навпаки - підсилює когнітивну активність, спонукаючи учнів до самостійного пошуку рішень і формулювання власних висновків.

Важливою педагогічною перевагою такого підходу є зниження когнітивного навантаження. Система ШІ бере на себе технічні аспекти дослідження - перевірку

параметрів симуляції, побудову енергетичних діаграм, візуалізацію результатів, - тоді як учні зосереджуються на аналітичній і творчій діяльності. Завдяки цьому вони розвивають уміння працювати з великими даними, критично оцінювати результати розрахунків і формулювати наукові висновки.

Крім того, постійна взаємодія з інтелектуальною системою стимулює розвиток критичного мислення: учні мають не просто приймати рекомендації ІІІ, а порівнювати їх із власними спостереженнями, перевіряти коректність моделей і пояснень. Такий підхід сприяє формуванню наукової культури мислення, коли навчальний процес перетворюється на спільне дослідження, а ІІІ виступає як інструмент для підтримки рефлексії, аналізу та творчого розвитку [21].

Таким чином, інтеграція ІІІ, Jmol, ASE та MACE у навчальний процес створює інноваційне освітнє середовище, у якому поєднуються теоретичне розуміння, практична діяльність і цифрові технології. Вона не лише формує комплексні STEM-компетентності нового покоління - уміння працювати з науковими даними, аналізувати результати моделювання, здійснювати візуалізацію наноструктур і застосовувати обчислювальні методи у фізиці, - але й сприяє розвитку метанавичок дослідника, таких як критичне мислення, аналітична гнучкість і здатність до міждисциплінарної інтеграції знань.

Завдяки використанню інтелектуальних систем і симуляційних середовищ навчання набуває дослідницького характеру: учні самостійно формулюють гіпотези, перевіряють їх шляхом моделювання та роблять науково обґрунтовані висновки. Взаємодія з ІІІ допомагає створити персоналізовану траєкторію навчання, де кожен учень рухається у власному темпі, отримуючи адаптивні підказки та зворотний зв'язок, що підсилює мотивацію та інтерес до природничих наук.

Інтеграція таких інструментів, як Jmol, ASE і MACE, робить можливим проведення віртуальних експериментів з візуалізацією атомних структур,

оптимізацією конфігурацій і розрахунком енергетичних характеристик, що раніше було доступним лише у спеціалізованих наукових лабораторіях. Це не лише підвищує доступність наукового досвіду для школярів, але й забезпечує зв'язок навчання з реальними дослідженнями, демонструючи практичне застосування сучасних фізичних і комп'ютерних методів.

Отже, впровадження штучного інтелекту та цифрових моделей у навчання відкриває шлях до нового типу STEM-освіти, орієнтованої на дослідження, співпрацю та технологічну грамотність. Такий підхід сприяє підготовці молодого покоління до роботи у світі, де наука, технології та ІІІ є ключовими рушіями інновацій, і формує передумови для появи нової культури навчання, заснованої на поєднанні людської творчості й обчислювального інтелекту [21].

Таким чином, сучасні технології моделювання та штучний інтелект не лише відкривають нові горизонти для наукових досліджень, а й надають школярам можливість безпосередньо брати участь у дослідницькому процесі. Вони можуть самостійно формулювати гіпотези, перевіряти їх на віртуальних моделях, спостерігати результати та робити обґрунтовані висновки. Це особливо корисно для пропедевтики вивчення квантових явищ, оскільки дає можливість у доступній формі ознайомитися з квантовими ефектами на прикладі ГКТ та їх дефектів.

На наступному етапі пропонується конкретний план-конспект уроку, який демонструє, як використання інструментів Jmol, ASE і MACE може бути реалізовано у практичній діяльності учнів для дослідження квантових явищ та структурних особливостей наноматеріалів. План-конспект уроку наведено в додатку Б.

Висновки до розділу 3

Моделювання процесів дефектоутворення в наноматеріалах та розробка навчального заняття дали можливість зробити наступні висновки:

1. Утворення вакансій у ГКТ має виражену залежність від положення атомів: крайові ділянки виявилися енергетично сприятливими для формування дефектів через знижену координацію атомів та меншу енергію їх зв'язків.

2. Формування дефектів у центральній частині є енергетично затратним та супроводжується значними локальними деформаціями. Це суттєво підвищує енергію утворення вакансії та впливає на загальну стабільність наноструктури.

3. Легування та функціоналізація ГКТ змінюють енергетичний профіль дефектоутворення: введення гетероатомів або хімічних груп може знижувати або підвищувати локальну реакційну здатність, стабілізувати або дестабілізувати певні типи дефектів. Це відкриває можливість керування електронними та хімічними властивостями наноматеріалу шляхом вибору природи легувального елемента чи функціональної групи.

4. Отримані результати моделювання дозволяють визначати оптимальні стратегії контролю дефектів для налаштування провідності, оптичної активності та каталізаторних властивостей наноматеріалів. Поєднання дефектоутворення, легування та функціоналізації формує комплексний інструментарій для створення матеріалів із заданими характеристиками.

5. Розробка навчального заняття на основі цих результатів продемонструвала потенціал використання сучасних методів квантово-механічного моделювання й машинного навчання в освітньому процесі. Матеріали сприяють формуванню дослідницького мислення, показують взаємозв'язок між мікроскопічними змінами структури та макроскопічними властивостями та підвищують мотивацію учнів до вивчення фізики та наноматеріалознавства.

Висновки

Проведене комплексне дослідження графенових квантових з використанням міжатомних потенціалів машинного навчання дозволило нам виконати поставлені завдання та зробити загальні висновки:

1. Проведено аналіз наукової літератури з тематики ГКТ, їхніх дефектів, методів функціоналізації та сучасних підходів моделювання за допомогою міжатомних потенціалів машинного навчання, що підтвердило актуальність використання MLIP для прогнозування енергетичних та структурних характеристик наноматеріалів.

2. Систематизовано відомості про типові дефекти у ГКТ (вакансії, дивакансії, дефекти SW), визначено їхній вплив на локальні електронні та механічні властивості матеріалів, а також встановлено закономірності розподілу енергій дефектоутворення залежно від положення в структурі.

3. Адаптовано методику створення моделей функціоналізованих ГКТ у середовищі Jmol з подальшою оптимізацією їхньої структури за допомогою ASE та моделей MACE, що дозволило поєднати зручність підготовки моделей, автоматизацію оптимізації геометрії та наближення енергетичних розрахунків до DFT-точності при значно менших витратах часу.

4. Здійснено розрахунок енергій формування дефектів залежно від їхнього розташування та типу функціональної групи, встановлено стабільність дефектів і вплив функціоналізації та легування на енергетичний ландшафт ГКТ, що створює передумови для цілеспрямованого налаштування провідності, оптичних та каталізаторних властивостей матеріалів.

5. Підготовлено методичну розробку з використанням штучного інтелекту, що дозволяє учням виконати повний цикл комп'ютерного експерименту - від побудови моделі до аналізу карти енергій - і сприяє формуванню

дослідницького мислення та розуміння зв'язку між мікроскопічною структурою та макроскопічними властивостями наноматеріалів.

6. Сформульовано висновки щодо перспектив застосування міжатомних потенціалів машинного навчання для оптимізації нанокompозитних матеріалів із заданими функціональними властивостями, що відкриває можливості для масштабного моделювання складних систем, швидкого скринінгу структурних модифікацій і розробки прикладних рішень у нанотехнологіях та освіті.

Отримані результати не є вичерпним розв'язанням проблем та задач, що виникають в інженерії наносистем і приладів на їх основі. Подальші дослідження можуть бути спрямовані на системний аналіз ефектів квантового конфайнменту у різних топологіях ГКТ, оцінку впливу різних механізмів функціоналізації та легування на стабільність дефектів і локальні електронні властивості, моделювання комплексних багатокомпонентних наноматеріалів, включаючи багаторівневі гетероструктури, інтеграцію машинного навчання для скринінгу структурних модифікацій з метою прогнозування оптимальних конфігурацій для заданих функціональних властивостей, а також розробку практичних рекомендацій для інженерії нанопристроїв, що враховують локальну структурну та електронну неоднорідність. Таким чином, отримані результати створюють міцну основу для подальшого експериментального підтвердження та прикладної розробки функціональних компонентів на базі ГКТ, а застосування міжатомних потенціалів машинного навчання відкриває перспективи масштабного та ефективного моделювання наноматеріалів із заданими властивостями.

Список використаних джерел.

1. Novoselov K. S., Geim A. K., Morozov S. V., Jiang D., Zhang Y., Dubonos S. V., Grigorieva I. V., Firsov A. A. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science*. 2004. Vol. 306, No. 5696. P. 666-669. DOI: <https://doi.org/10.1126/science.1102896>.
2. Kadyan P., Malik R., Bhatia S., Al Harrasi A., Mohan S., Yadav M., Dalal S., Ramniwas S., Kataria S. K., Arasu T. Comprehensive Review on Synthesis, Applications, and Challenges of Graphene Quantum Dots (GQDs). *Journal of Nanomaterials*. 2023. DOI: <https://doi.org/10.1155/2023/2832964>.
3. Tan X., Zhou F., Li W., Ao G., Xu X., Yang L. Research Progress on the Application of Graphene Quantum Dots. *Coatings*. 2023. Vol. 13, No. 11. Art. 1956. DOI: <https://doi.org/10.3390/coatings13111956>.
4. Kadyan P., Arasu P. T., Kataria S. K. Graphene Quantum Dots: Green Synthesis, Characterization, and Antioxidant and Antimicrobial Potential. *Journal of Nanomaterials*. 2024. DOI: <https://doi.org/10.1155/2024/2626006>.
5. Dananjaya V., Grace N., Marimuthu S., Abeykoon C., Yang R. (Chunhui) Synthesis, properties, applications, 3D printing and machine learning of graphene quantum dots in polymer nanocomposites. *Progress in Materials Science*. 2024. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2024.101282>.
6. Cui Y., Liu L., Shi M., Wang Y., Meng X., Chen Y., Huang Q., Liu C. A Review of Advances in Graphene Quantum Dots: From Preparation and Modification Methods to Application. *Carbon*. 2024. Vol. 10, Iss. 7. DOI: <https://doi.org/10.3390/c10010007>.
7. Meyer J. C., Kisielowski C., Erni R., Rossell M. D., Crommie M. F., Zettl A. Direct imaging of lattice atoms and topological defects in graphene membranes. *Nano Letters*. 2008. Vol. 8, No. 11. P. 3582-3586. DOI: <https://doi.org/10.1021/nl801386m>.

8. Tuzhykov A., Kiv A., Soloviev V., Bielinskyi A., Kavetsky T., Slusarenko M., Korotych V. Artificial Intelligence Methods in Quantum Chemistry. Nanotechnological Advances in Environmental, Cyber and CBRN Security / Ed. by P. Petkov, M. E. Achour, C. Popov. Springer, 2025. P. 67-83. DOI: https://doi.org/10.1007/978-94-024-2316-7_4.
9. Kotakoski J., Krasheninnikov A. V., Kaiser U., Meyer J. C. From point defects in graphene to two-dimensional amorphous carbon. Physical Review Letters. 2011. Vol. 106, No. 10. Art. 105505. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.106.105505>.
10. Banhart F., Kotakoski J., Krasheninnikov A. V. Structural defects in graphene. ACS Nano. 2011. Vol. 5, No. 1. P. 26-41. DOI: <https://doi.org/10.1021/nn102598m>.
11. Xu T., Shen Y., Yin K., Sun L. Precisely monitoring and tailoring 2D nanostructures at the atomic scale. APL Materials. 2019. Vol. 7. Art. 050901. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.5096584>.
12. Thiemann F. L., Scalliet C., Müller E. A., Michaelides A. Defects induce phase transition from dynamic to static rippling in graphene. Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 2025. Vol. 122, No. 9. Art. e2416932122. DOI: <https://doi.org/10.1073/pnas.2416932122>.
13. Stone A. J., Wales D. J. Theoretical studies of icosahedral C₆₀ and some related species. Chemical Physics Letters. 1986. Vol. 128, No. 5-6. P. 501-503. DOI: [https://doi.org/10.1016/0009-2614\(86\)80661-3](https://doi.org/10.1016/0009-2614(86)80661-3).
14. Tiwari S. K., Pandey S. K., Pandey R., Wang N., Bystrzejewski M., Mishra Y. K., Zhu Y. Stone-Wales Defect in Graphene. Small. 2023. DOI: <https://doi.org/10.1002/sml.202303340>.

15. Im M. J., Kim J. I., Hyeong S.-K., Moon B. J., Bae S. From Pristine to Heteroatom-Doped Graphene Quantum Dots: An Essential Review and Prospects for Future Research. *Small*. 2023. DOI: <https://doi.org/10.1002/sml.202304497>.
16. Zhou Y., He X., Li M. Roles of doping in enhancing the performance of graphene/graphene-like semiconductors. *AIP Advances*. 2025. Vol. 15, No. 1. Art. 010701. DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0248505>.
17. Martin R. M. *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods*. 2nd ed. Cambridge University Press, 2020. 804 p. ISBN 978-1-108-55558-6.
18. Rano N. A., Martsinovich N. Stability of sp^3 Carbons in Hydrogenated Graphene Quantum Dots and Their Electronic and Optical Properties Studied Using Density Functional Theory. *J. Phys. Chem. A*. 2025. Vol. 129. P. 3790-3806. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.4c07825>.
19. Burke K. Perspective on density functional theory. *The Journal of Chemical Physics*. 2012. Vol. 136, No. 15. Art. 150901. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4704546>.
20. Sholl D. S., Steckel J. A. *Density Functional Theory: A Practical Introduction*. 2nd ed. John Wiley & Sons, 2021. 224 p. ISBN 978-1-119-84086-2.
21. Barrionuevo F., Aguirre D. AI-guided quantum material simulator for education. *arXiv preprint*. 2025. Art. arXiv:2509.20372v1. URL: <https://arxiv.org/abs/2509.20372>.
22. Neumann M., Gin J., Rhodes B., Bennett S., Li Z. et al. Orb: A Fast, Scalable Neural Network Potential. *arXiv preprint*. 2024. DOI: <https://doi.org/10.48550/arXiv.2410.22570>.
23. Guénolé J., Nöhring W. G., Vaid A., Houllé F., Xie Z., Prakash A., Bitzek E. Assessment and optimization of the fast inertial relaxation engine (FIRE) for energy minimization in atomistic simulations and its implementation in LAMMPS. *Computational Materials Science*. 2020. Vol. 175. Art. 109584. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.109584>.

24. Ohno K., Esfarjani K., Kawazoe Y. Ab initio methods. Computational Materials Science. Springer, Berlin, Heidelberg, 2018. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-662-56542-1_2.
25. The Nobel Prize in Physics 2010. [NobelPrize.org](https://www.nobelprize.org). 2010. URL: <https://www.nobelprize.org/prizes/physics/2010/summary/> (дата звернення: 24.10.2025).
26. The Nobel Prize in Chemistry 2023: Popular Information. [NobelPrize.org](https://www.nobelprize.org). URL: <https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/2023/popular-information/> (дата звернення: 24.10.2025).
27. The Nobel Prize in Physics 2024: Summary. [NobelPrize.org](https://www.nobelprize.org). URL: <https://www.nobelprize.org/prizes/physics/2024/summary/> (дата звернення: 24.10.2025).
28. The Nobel Prize in Chemistry 2024: Summary. [NobelPrize.org](https://www.nobelprize.org). URL: <https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/2024/summary/> (дата звернення: 24.10.2025).
29. Rajamanickam D., Naganathan A., Rajeswari N. The History of Nanoscience and Nanotechnology: From Chemical -Physical Applications to Nanomedicine. Molecules. 2020. Vol. 25, No. 1. Art. 112. DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules25010112>.
30. Jeevanandam J., Barhoum A., Chan Y. S., Dufresne A., Danquah M. K. Review on nanoparticles and nanostructured materials: history, sources, toxicity and regulations. Beilstein Journal of Nanotechnology. 2018. Vol. 9. P. 1050-1074. DOI: <https://doi.org/10.3762/bjnano.9.98>.
31. Castro Neto A. H., Guinea F., Peres N. M. R., Novoselov K. S., Geim A. K. The electronic properties of graphene. Reviews of Modern Physics. 2009. Vol. 81, No. 1. P. 109-162. DOI: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.81.109>.

32. Geim A. K. Graphene: status and prospects. *Science*. 2009. Vol. 324, No. 5934. P. 1530-1534. DOI: <https://doi.org/10.1126/science.1158877>.
33. Rabeya R., Mahalingam S., Manap A., Satgunam M., Akhtaruzzaman M., Chia C. H. Structural defects in graphene quantum dots: A review. *International Journal of Quantum Chemistry*. 2022. DOI: <https://doi.org/10.1002/qua.26900>.
34. Panda S., Jakmunee J., Devi K. S. Sh., Prakash J., Tsujimura S., Kumar S. Recent advances in graphene quantum dots: Chemistry of synthesis, surface modifications, and improved properties for biomedical applications. *TrAC - Trends in Analytical Chemistry*. 2025. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.trac.2025.118293>.
35. Jan A., Batool M., Khanday W. A., Akram S., Wani W. A., Malik A. H., Sheikh R. A., Rather J. A., Kannan P. Functionalized Graphene Quantum Dots (FGQDs): A review of their synthesis, properties, and emerging biomedical applications. *Carbon Trends*. 2024. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cartre.2024.100442>.
36. Tian P., Tang L., Teng K.-S., Lau S.-P. Graphene quantum dots: preparations, properties, functionalizations and applications. *Mater. Futures*. 2024. Vol. 3. Art. 022301. DOI: <https://doi.org/10.1088/2752-5724/ad08cb>.
37. Kohn W., Sham L. J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*. 1965. Vol. 140, No. 4A. P. A1133-A1138. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133>.
38. Parr R. G., Yang W. Density-functional theory of atoms and molecules. Oxford University Press, 1995. 352 p. ISBN 978-0195092769.
39. Ma J., Alfè D., Michaelides A., Wang E. G. Stone-Wales defects in graphene and other planar sp^2 -bonded materials. *Physical Review B*. 2009. Vol. 80. Art. 033407. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.033407>.
40. Zhou W., Zou X., Najafi E., Liu Z., Shi Y., Kong J., Idrobo J. C., Terrones H., Terrones M., Krasheninnikov A. V., Pennycook S. J. Intrinsic structural defects in

monolayer graphene: formation, healing, and imaging. Nano Letters. 2013. Vol. 13, No. 6. P. 2615-2622. DOI: <https://doi.org/10.1021/nl4007479>.

41. Georgakilas V., Otyepka M., Bourlinos A. B., Chandra V., Kim N., Kemp K. C., Hobza P., Zboril R., Kim K. S. Functionalization of graphene: covalent and non-covalent approaches, derivatives and applications. Chemical Reviews. 2012. Vol. 112, No. 11. P. 6156-6214. DOI: <https://doi.org/10.1021/cr3000412>.

42. Dreyer D. R., Park S., Bielawski C. W., Ruoff R. S. The chemistry of graphene oxide. Chemical Society Reviews. 2010. Vol. 39, No. 1. P. 228-240. DOI: <https://doi.org/10.1039/b917103g>.

43. Hanson R. M. Jmol - a paradigm shift in crystallographic visualization. Journal of Applied Crystallography. 2010. Vol. 43, No. 5. P. 1250-1260. DOI: <https://doi.org/10.1107/S0021889810030256>.

44. Jmol: an open-source Java viewer for chemical structures in 3D. [Jmol.org](https://jmol.sourceforge.net/), 2024. URL: <https://jmol.sourceforge.net/> (дата звернення: 25.10.2025).

45. Larsen A. H. et al. The Atomic Simulation Environment - a Python library for working with atoms. Journal of Physics: Condensed Matter. 2017. Vol. 29, No. 27. Art. 273002. DOI: <https://doi.org/10.1088/1361-648X/aa680e>.

46. Atuzhykov. GQD_defects : репозиторій / Atuzhykov. GitHub, 2025. URL: https://github.com/atuzhykov/GKT_defects (дата звернення: 24.11.2025).

47. Batatia I., Kovács D. P., Simm G. N. C., Ortner C., Csányi G. A foundation model for atomistic materials chemistry. The Journal of Chemical Physics. 2025. Vol. 163, No. 18. Art. 184110. DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0297006>.

АПРОБАЦІЯ РЕЗУЛЬТАТІВ ДОСЛІДЖЕННЯ

Апробація результатів дослідження здійснювалася шляхом участі в наукових конференціях, публікацій у фахових виданнях та подання тез доповідей.

1. Публікації

1. Tuzyhkov A., Kiv A., Soloviev V., Bielinskyi A., Kavetskyu T., Slusarenko M., Korotych V. Artificial Intelligence Methods in Quantum Chemistry. Nanotechnological Advances in Environmental, Cyber and CBRN Security / P. Petkov, M. E. Achour, C. Popov, Eds. Springer, 2025. P. 67–83. DOI: https://doi.org/10.1007/978-94-024-2316-7_4.

2. Міжнародні конференції

1. Ювілейна XX Міжнародна Фреїківська конференція з фізики і технології тонких плівок та наносистем (МКФТТПН-XX / ICPTTFN-XX) (06-10 жовтня 2025 р., м. Івано-Франківськ). URL: <https://conference.pnu.edu.ua/icpttfn/>.

2. Восьма міжнародна конференція молодих учених «Харківський природничий форум» (м. Харків, 14-15 травня 2025 р.). URL: <http://hnpu.edu.ua/uk/shchorichna-mizhnarodna-konferenciya-molodyh-uchenyh-harkivskyy-pryrodnychy-forum>.

3. VII Міжнародна науково-практична конференція «Інформаційні технології в освіті, науці і техніці» (ІТОНТ-2024) (23-24 травня 2024 р., м. Черкаси). URL: <https://itest.chdtu.edu.ua/>.

4. Методологія сучасних наукових досліджень. Ювілейна XX Міжнародна науково-практична конференція «Наука, освіта, мистецтво: у пошуках обрисів поствоєнного світу» (22-23 лютого 2024 р., м. Харків). URL: <https://dspace.hnpu.edu.ua/handle/123456789/15248>.

5. Глобалізація наукових знань: міжнародна співпраця та інтеграція галузей наук. VII Міжнародна студентська наукова конференція (м. Суми, 29 листопада 2024 р.). DOI: <https://doi.org/10.62732/liga-inter-29.11.2024>.

3. Інші конференції

1. Розвиток інтелектуальних умінь і творчих здібностей учнів та студентів у процесі навчання природничо-математичного циклу «ІТМплюс - 2024» (21-22 листопада 2024 р., м. Суми). URL: https://sspu.edu.ua/images/2024/docs/nauka/konf/zbirnyk_736d4.pdf.

4. Тези доповідей

1. Quasi-phase transitions in the process of deformation fracture of metals. Методологія сучасних наукових досліджень : матеріали XX Міжнародної науково-практичної конференції (м. Харків, 22-23 лютого 2024 р.). URL: <https://dspace.hnpu.edu.ua/handle/123456789/15248>.

2. Використання міжатомних потенціалів машинного навчання для моделювання фотоструктурних перетворень у біополімерах. Глобалізація наукових знань : матеріали VII Міжнародної студентської наукової конференції (м. Суми, 29 листопада 2024 р.). DOI: <https://doi.org/10.62732/liga-inter-29.11.2024>.

3. Modeling of the photostructural transformations in biopolymers. Інформаційні технології в освіті, науці і техніці : матеріали VII Міжнародної науково-практичної конференції (ІТОНТ-2024) (м. Черкаси, 23-24 травня 2024 р.). URL: <https://itest.chdtu.edu.ua/>.

4. Використання міжатомних потенціалів машинного навчання при дослідженнях функціоналізації графенових квантових точок у полімерів та нанокompозитах. *Матеріали конференції «ІТМплюс - 2024»* (м. Суми, 21-22 листопада 2024 р.). URL: https://sspu.edu.ua/images/2024/docs/nauka/konf/zbirnyk_736d4.pdf.

5. Вплив легування домішками на формування дефектів у графенових квантових точках з використанням штучного інтелекту. Восьма міжнародна конференція молодих учених «Харківський природничий форум» (м. Харків, 14-15 травня 2025 р.). URL: <http://hnpu.edu.ua/uk/shchorichna-mizhnarodna-konferenciya-molodyh-uchenyh-harkivskyy-pryrodnychy-forum>.

План-конспект уроку

Клас: 10-11 (старша школа, профільний фізичний гурток) **Дата:** _____

Тема: Вивчення квантових явищ на прикладі графенових квантових точок і дефектів у них

Мета:

Навчальна: ознайомити учнів із концепцією квантових точок, квантовим конфайнментом та впливом структурних дефектів на властивості матеріалу; закріпити навички користування простими обчислювальними інструментами (Jmol, ASE, базова робота з ML-фреймворком GQD_defects);

Розвивальна: формувати алгоритмічне мислення, здатність аналізувати взаємозв'язок структури й властивостей матеріалів, розвивати математичну та комунікативну компетентності;

Виховна: виховувати впевненість у виконанні наукових дослідів, охайність записів, критичне мислення і цікавість до сучасних нанотехнологій.

Тип уроку: комбінований (теоретико-практичний, дослідницький)

Дидактичні матеріали, обладнання: Комп'ютери з встановленим обчислювальним фреймворком; Матеріали GitHub фреймворку URL: https://github.com/atuzhykov/GQD_defects; Навчальна презентація.

План уроку

- I. Організаційна частина (5 хв)
- II. Актуалізація опорних знань учнів (7 хв)
- III. Дослідницька частина (40 хв)
- IV. Підбиття підсумків уроку (8 хв)
- V. Домашнє завдання (5 хв)

Структура уроку

I. Організаційна частина (5 хв)

Налаштувати учнів на роботу, мотивувати до вивчення теми.

Дії:

- Привітання, перевірка присутніх.
- Ознайомлення з темою та метою уроку: коротко пояснити, що таке ГКТ та чому дефекти важливі для властивостей матеріалу.
- Пояснити, що урок буде дослідницьким і STEM-орієнтованим: учні не тільки слухатимуть теорію, але й будуть працювати з моделями та обчислювальними інструментами.

Результат: учні розуміють мету уроку та форму роботи (дослідницька, інтерактивна).

II. Актуалізація опорних знань (7 хв)

Нагадати учням базові знання, необхідні для розуміння теми шляхом фронтального опитування.

Завдання для учнів: Дати визначення наноматеріалам та графену.

- Описати основи електронної структури речовини.
- Обговорити: як дефекти можуть змінювати електронні, оптичні та механічні властивості матеріалу.

Результат: учні пригадують базові поняття і готуються до практичної роботи.

III. Дослідницька частина (40 хв)

Міні-експеримент 1: Візуалізація ГКТ у Jmol (5 хв)

Завдання: Учні відкривають модель ГКТ у Jmol.

Вивчають структуру атомів, форми країв (центральні області та крайові атоми).

Результат: учні орієнтуються в структурі ГКТ і розуміють, де можуть виникати дефекти.

Міні-експеримент 2: Аналіз дефектів (10 хв)

Завдання: Поділ на групи: кожна група досліджує свій тип дефекту:

- Група 1: моновакансії
- Група 2: дивакансії
- Група 3: дефекти SW

Кожна група в Jmol видаляє атом або змінює зв'язки.

Фіксують спостереження:

- Локальна деформація структури
- Зміни симетрії та довжин зв'язків

Результат: учні наочно бачать, як дефекти впливають на структуру матеріалу.

Міні-експеримент 3: Обчислювальна оптимізація та енергії дефектів (15

хв)

Завдання: Використати GQD_defects для:

- Генерації дефектів (видалення атомів, реконструкції)
- Оптимізації геометрії (ASE + MACE)
- Розрахунку енергії формування дефектів

Кожна група аналізує:

- Дефекти на краях чи в центрі - які енергетично більш вигідні?
- Як тип дефекту впливає на стабільність структури?

Учні записують дані у таблицю для порівняння між групами.

Результат: учні навчаються працювати з обчислювальними інструментами та робити висновки про стабільність дефектів.

Міні-експеримент 4: Вплив функціоналізації та легування (10 хв)

Завдання: Демонстрація прикладу: додавання функціональної групи (O або N) на краю дефекту.

Учні спостерігають:

- Зміни в енергетичному профілі дефекту
- Релаксацію структури
- Можливі зміни електронних властивостей

Обговорення: які функціональні групи стабілізують дефекти, а які роблять їх менш доступними.

Результат: учні розуміють, як модифікація може керувати властивостями матеріалу.

IV. Підбиття підсумків уроку (8 хв)

Завдання: Кожна група коротко представляє результати своїх спостережень та розрахунків (2-3 ключових висновки).

Обговорення ключових понять:

- Квантові точки
- Дефекти
- Енергія формування

Пояснення практичного значення квантових явищ у матеріалознавстві та нанотехнологіях.

Результат: учні систематизують знання та усвідомлюють практичну цінність досліджень.

V. Домашнє завдання (5 хв)

1. Підготувати короткий опис власного «квантового експерименту» з дефектами в графені (схема або рисунок).

2. За бажанням: спробувати змінити параметри моделі в GQD_defects та зробити короткий звіт про вплив змін на енергію дефектів та стабільність структури.