**Звіт про науково-дослідну роботу: „** **Особливості електронної будови і фізико-хімічних властивостей нанорозмірних та кристалічних нітридних, силіцидних, оксидних, халькогенідних і галогенідних фаз – перспективних матеріалів нелінійної оптики та мікроелектроніки”**

**Мета роботи** - вивчення особливостей електронної структури та міжатомної взаємодії низки нітридних, оксидних, силіцидних, халькогенідних і галогенідних фаз для вдосконалення фізико-хімічних основ їх синтезу.

**задачі дослідження:**

* + - Дослідити особливості хімічного зв’язку та енергетичного розподілу електронних станів у валентній смузі сполук APb2X5 і A3PbX5 при кімнатній температурі за допомогою РФС-методу.
		- У випадку наявності в сполуках типу APb2X5 і A3PbX5 високотемпературного фазового переходу виконати *in situ* дослідження можливої зміни при цьому зарядового стану атомів та енергетичного розподілу електронних станів у валентній зоні за даними РФС.
		- Провести дослідження параметрів елементарної комірки синтезованих сполук типу APb2X5 і A3PbX5 за даними рентгеноструктурного аналізу.

Терміни виконання наукової роботи: початок І кв. 2014 р.

 закінчення IV кв. 2016 р.

 **Керівник роботи**: Хижун Олег Юліанович, д.ф.м.н., (Email: Khyzhun@ipms.kiev.ua)

**Скорочений зміст висновків рецензентів.**

 Потрійні кристалічні матеріали розглядаються наразі дослідниками в якості найперспективніших низькоенергетичних фононних матеріалів для використання в компактних твердотільних лазерах, що випромінюють у середньому і довгохвильовому ІЧ–діапазоні, з великою перспективою їх застосування для зв’язку в умовах відкритого космосу, оптичного дистанційного зондування LIDAR, дистанційного зондування відбитків пальців та процесу перебігу біохімічних реакцій, для ІЧ–спектроскопії в медицині з метою діагностики хвороб людини, в надчутливих методиках виявлення наркотичних та вибухових речовин, тощо. Тому дослідження особливостей електронної будови та структурних характеристик кристалічних матеріалів є безумовно актуальним завданням. В роботі звіту автори, на основі «першопринципних» зонних DFT-розрахунків, встановили, що у галогенідних сполуках, основний внесок у валентну зону (переважно у її верхню та центральну частини) здійснюють валентні Х*р*-стани, в той час як дно та нижня частина валентної зони формуються переважно за рахунок внесків Pb6*s-* і Tl6*s-*станів. Автори виконали комплексні дослідження оптичних спектрів поглинання в об’єктах типу APb2X5 i Tl3PbX5, та виявили три області спектральної залежності коефіцієнта поглинання: експоненційну область в інтервалі 0–100 см–1 і області непрямих і прямих оптичних переходів вище цієї області. Дані оптичних спектрів поглинання показують лінійну залежність зміни ширини забороненої зони при зміні температури від 100 до 300 К. Збільшення ступеня іонної складової хімічного зв’язку Pb–X (X = Br, I) при переході від Tl3PbI5 до Tl3PbBr5 веде до зростання ширини забороненої зони від 2,39 еВ до 3,2 еВ. На основі «першопринципних» зонних розрахунків, а також рентгеноспектральних та рентгеноструктурних досліджень, було встановлено, що сполука Cu2ZnGeSe4 – кристалізується в тетрагональній структурі типу кестеріту (пр. гр. *I*), а не типу станіту (пр. гр. *I*2m), як вважалося раніше. Також показано, що сполука Cu2ZnGeSe4 є прямозонним напівпровідником з параметрами елементарної комірки *a* = 5.6112(1) Å і *c* = 11.0473(3) Å, а основний вклад у валентну зону здійснюють Cu3d-стани (в її центральній і верхній частинах), в той час як дно зони провідності формується за рахунок незаповнених Zn 3d-станів. На основі даних рентгенівської емісійної спектроскопії авторами показано, що зміни, які спостерігаються в тонкій структурі рентгенівських емісійних Si*Lα*- та O*Kα*-смуг при переході від чистих нанокремнеземів до механоактивованих порошкових вуглець-кремнеземних композицій, є наслідком утворення в них Si-C-O зв’язків. З рентгенівських фотоелектронних досліджень виявлено, що розширення С1*s*-спектрів в бік більших енергій зв’язку та зміщення низькоенергетичних контурів Si2*p*-та О1*s*-ліній в бік менших енергій є наслідком перенесення С*р*-валентних електронів до атомів кремнію та кисню в результаті механоактиваційного нашарування вуглецю на наночастинки кремнезему. Заплановані завдання авторами роботи виконані повністю, робота є завершеним дослідженням, проведеним на високому методичному рівні, а наведені в звіті результати стануть у нагоді при прогнозуванні властивостей нових функціональних матеріалів.

**Пропозиції про подальше використання результатів роботи.**

 Результати роботи можуть бути використані для розробки рекомендацій щодо науково обґрунтованого керування властивостями кристалічних матеріалів та складних вуглець-кремнеземних порошкових композицій з прогнозування та поліпшенням їх характеристик.

 **РЕФЕРАТ**

 **Об’єкти дослідження** – нанорозмірні матеріали, карбід, нітрид, оксид, халькогенід, галогенід.

**Мета роботи** – дослідження особливостей електронної структури та міжатомної взаємодії низки нітридних, оксидних, силіцидних, халькогенідних і галогенідних фаз для вдосконалення фізико-хімічних основ їх синтезу.

**Методи дослідження** – рентгенівська емісійна спектроскопія, рентгенівська фотоелектронна спектроскопія, першопринципні розрахунки.

Експериментальними і теоретичними методами досліджена електронна структура і оптичні властивості низки нітридних, оксидних, силіцидних, халькогенідних і галогенідних фаз.

Виконані в роботі “першопринципні” зонні DFT-розрахунки вказують на те, що TlPb2X5 i Tl3PbX5 (X = Cl, Br, I) сполуки - непрямозонні напівпровідники, основний внесок у валентну зону котрих (переважно у її верхню та центральну частини) здійснюють валентні Хр-стани, в той час як дно та нижня частина валентної зони формуються переважно за рахунок внесків Pb6s- і Tl6s-станів.

Результати “першопринципних” DFT-розрахунків бромідів КPb2Br5 і RbPb2Br5 дозволяють стверджувати, що внесок у валентну зону електронних станів атомів калію і рубідію незначний у порівнянні з внеском Br4p- (верхня і центральна частини) та Pb6s- (дно зони) станів. Розширення С1s-спектрів в бік більших енергій зв’язку та зміщення низькоенергетичних контурів Si2p-та О1s-ліній в бік менших енергій є наслідком перенесення Ср-валентних електронів до атомів кремнію та кисню. **Ключові слова:** НАНОРОЗМІРНІ МАТЕРІАЛИ, ЕЛЕКТРОННА СТРУКТУРА, ГАЛОГЕНІД, ХАЛЬКОГЕНІД, НІТРИД, ОКСИД.

 **Публікації**

В. Парасюк, А.О. Федорчук // Seventh international workshop “Relaxed, nonlinear and acoustic optical processes and materials” – RNAOPM’2014. In Memoriam: prof. Georgiy Davydyuk - June 8-12, 2014, Lutsk-Lake “Svityaz’”, UKRAINE.

Ilkiv Bogdan. Electronic structure of hollow graphitic carbon nanoparticles made from acetylene carbon black / Bogdan Ilkiv, Oleksandr Foya, Svitlana Petrovska, Ruslan Sergiienko, Oleksandra Ilkiv, Yaroslav Zaulychnyy // Науково-технічна конференція: фізика, електроніка, електротехніка ФЕЕ-2014. 21–26 квітня 2014 року, Суми. Україна. С. 74.

Бондаренко Т.Н. Изучение зарядности на ионах титана и кислорода в некоторых сегнетоэлектриках и сходных с ними объектах / Т.Н. Бондаренко, Б.И. Илькив // IV-я Международная Самсоновская конференция “Материаловедение тугоплавких соединений”. 21 – 23 мая 2014г. Киев, Украина. С24.

Илькив Б.И. Рентгеноспектральное исследование особенностей электронной структуры пустых графитных наночастиц / Б.И. Илькив, А.А. Фоя, С.С. Петровская, Р.А. Сергиенко, А.В. Илькив, Я.В. Зауличный // IV-я Международная Самсоновская конференция “Материаловедение тугоплавких соединений”. 21 – 23 мая 2014 г. Киев, Украина. С145.

Илькив Б.И. Рентгеноспектральное исследования особенностей электронной структуры смеси углеродных нанокапсул и графитовых нанолистов / Б.И. Илькив // XІ Российская ежегодная Zaulychnyy Ya.V. Morphological and electronic characteristics of nanoalumina alone and in high- and low-temperature mixtures with nanosilica / Ya.V. Zaulychnyy, V.Ya Ilkiv, V.I. Zarko, М.V. Karpetz, М.V. Pereginiak, S.S. Petrovska,V.М. Gun'kо. Chem. // Phys. Technol. Surf. 5 (2014) 136–144.

Афтандилянц Е. Г. Фазовые превращения в наночастицах, полученных электроискровой обработкой металлических гранул / Е.Г. Афтандилянц, К.Г. Лопатько, Я.В. Зауличный, М.В. Карпец, А.А. Щерецкий // Труды Института проблем материаловедения им. И.Н. Францевича НАН Украины. Серия «Композиционные, слоистые и градиентные материалы и покрытия». – Киев, 2014.- с.112-128 (269 с.).

Dranenko A.S. High-temperatyre and anodic oxidation of thin NiSi and NiSi2 films / A.S. Dranenko, V.A. Lavrenko, V.N. Talash, M.V. Koshelev // Powder Metallurgy and Metal Ceramics, Vol.52, Nov.9-10, January, 2014, pp.572-576.

Onoprienko A.A. Production of Ti – Al – Si – B – N films by magnetron sputtering and their mechanical properties / A.A. Onoprienko, V.I. Ivashchenko, I.A. Podchernyaeva, O.Yu. Khizhun, I.I. Timofeeva, O.A. Butenko // Powder Metal. Met. Ceram. – 2014. – Vol. 53. – p. 353 – 358.

Лаврентьев А.А. Рентгеновские фотоэлектронные спектры и особенности электронно-энергетической структуры кислородстабилизированных фаз Zr4Fe2O и Zr4Ni2O / А.А. Лаврентьев, П.Н. Шкумат, Е.И. Копылова, Б.В. Габрельян, А.К. Синельниченко, И.Ю Завалий, О.Ю. Хижун // Доп. НАН України. –2014. – № 4. - С. 76–81.

Khyzhun O.Y. First-principles band-structure calculations and X-ray photoelectron spectroscopy studies of the electronic structure of TlPb2Cl5 / O.Y. Khyzhun, V.L. Bekenev, N.M. Denysyuk, O.V. Parasyuk, A.O. Fedorchuk // [Journal of Alloys and Compounds](https://docviewer.yandex.ua/r.xml?sk=83af3317b2616cb0f4e52e1c8096f0ba&url=http%3A%2F%2Fwww.sciencedirect.com%2Fscience%2Fjournal%2F09258388%22+%5Co+%22Go+to+Journal+of+Alloys+and+Compounds+on+ScienceDirect),[Volume 582](https://docviewer.yandex.ua/r.xml?sk=83af3317b2616cb0f4e52e1c8096f0ba&url=http%3A%2F%2Fwww.sciencedirect.com%2Fscience%2Fjournal%2F09258388%2F582%2Fsupp%2FC%22+%5Co+%22Go+to+table+of+contents+for+this+volume%2Fissue), 5 January 2014, Pages 802-809.

Brik M. G. Specific Q12 features of the electronic structure of a novel ternary Tl3PbI5 optoelectronic material / M.G. Brik, I.V. Kityk, N.M. Denysyuk, O.Y. Khyzhun, S.I. Levkovets, O.V. Parasyuk, A.O. Fedorchuk and G.L. Myronchuk // [Physical Chemistry Chemical Physics](https://docviewer.yandex.ua/r.xml?sk=83af3317b2616cb0f4e52e1c8096f0ba&url=http%3A%2F%2Feuropepmc.org%2Fsearch%3Bjsessionid%3DHJ8im5kNKevm1bOGaZj6.26%3Fpage%3D1%26query%3DJOURNAL%3A%2522Phys%2BChem%2BChem%2BPhys%2522) 16(25) 2014, 12838-12847.

Ilkiv Bogdan. Electronic Structure of Hollow Graphitic Carbon Nanoparticles Fabricated from Acetylene Carbon Black / Bogdan Ilkiv, Svitlana Petrovska, Ruslan Sergiienko, Oleksandr Foya, Oleksandra Ilkiv, Etsuro Shibata, Takashi Nakamura, and Yaroslav Zaulychnyy // Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures. – 2014. – V.23. – P. 443-448.

Ilkiv Bogdan. Synthesis, characterization and X-ray spectral investigation of hollow graphitic carbon nanospheres / Bogdan Ilkiv, Svitlana Petrovska, Ruslan Sergiienko, Oleksandr Foya, Oleksandra Ilkiv, Etsuro Shibata, Takashi Nakamura and Yaroslav Zaulychnyy // Journal of Alloys and Compounds. – 2014. – V.617. – P. 616-621.

Gun'ko V.М. Structural features of fumed silica and alumina alone, blend powders and fumed binary systems / V.М. Gun'ko, V.Ya. Ilkiv, Ya.V. Zaulychnyy, V.I. Zarko, E.M. Pakhlova, М.V. Karpetz // Journal of Non-Crystalline Solids. 403 (2014) 30–37.

Dobrovolsky V.D. Influence of Exposure to Air and Mechanical Dispersion upon Thermal Stability and Decomposition Temperature of -MgH2 Phase, a Component of Composites Derived by Different Methods / V.D. Dobrovolsky, O.G. Ershova, O.Y. Khyzhun, Y.M. Solonin.// Current Physical Chemistry. –2014. –Vol. 4. –P. 106 – 113.

Single Crystal Growth and Electronic Structure of Thiogermanate AgGaGeS4, a Novel Nonlinear Optical Material / O.Y. Khyzhun, O.V. Parasyuk, A.O. Fedorchuk // Advances in Alloys and Compounds. –2014. –Vol. 1, No. 1. –P. 15–29.

Atuchin V.V. Synthesis and Electronic Properties of -RbNd(MoO4)2 / V.V. Atuchin, V.L. Bekenev, O.D. Chimitova, M.S. Molokeev, B.G. Bazarov, J.G. Bazarova, O.Y. Khyzhun, C.S. Lim // Asian J. Chem. – 2014. – Vol. 26, No. 5. – P. 1284–1286.

Bozhko V.V. Electronic structure of non-centrosymmetric Ag2HgSnS4 single crystal / V.V. Bozhko, A.P. Tretyak, O.V. Parasyuk, V.A. Ocheretova, O.Y. Khyzhun // Opt. Mater. – 2014. –Vol. 36. –P. 977–981.

Khyzhun O.Y. Electronic structure and photoelectrical properties of Ag2In2SiSe6 and Ag2In2GeSe6 / O.Y. Khyzhun, G.L. Myronchuk, O.V. Zamuruyeva, O.V. Parasyuk // Opt. Mater. –2014. –Vol. 38. –P. 10–16.

Denysyuk N.M. Electronic structure of the orthorhombic and tetragonal phases of Tl3PbBr5 / N.M. Denysyuk, O.Y. Khyzhun, V.L. Bekenev, O.V. Parasyuk, S.P. Danylchuk, A.O. Fedorchuk // IV-я международная Самсоновская конференция “Материаловедение тугоплавких соединений” - 21 – 23 мая 2014 г. Киев, Украина.

Денисюк Н.М. Дослідження електронної структури монокристалів TlPb2X5 (X = Cl, Br) методом рентгенівської фотоелектронної спектроскопії / Н.М. Денисюк, О.Ю. Хижун, В.Л. Бекенев, Оконференция молодых научных сотрудников и аспирантов "Физико-химия и технология неорганических материалов" (с международным участием). 16.10. - 19.10.2013г. ИМЕТ РАН, г. Москва - 2014, С.130.

Драненко А.С. Размерная зависимость електросопротивления в тонких пленках диборида титана. ΙV-я Международная Самсоновская конференция. Материаловедение тугоплавких соединений, Труды конференции, 21-23 мая 2014г. Ч 2. 122с.

А. Г. Пригунова, М. В. Кошелев, С. С. Петров, С. В. Пригунов Термический анализ и структура заэвтектических силуминов при модифицировании расплавов электрическим током. Процессы литья. 2015. № 3 (111), с 27– 36.

Пушкарьов О.В, Руденко І.М., Кошелєв М.В., Скрипкін В.В., Долін В.В.(мол), Приймаченко В.М. Мінеральний адсорбент тритію на основі сапоніту та цеоліту. // Збірник наукових праць Інститут геохімії навколишнього середовища НАН України 2015 вип.24 с. 117–128.

B.I. Ilkiv, S.S. Petrovska, R.A. Sergienko, О.О. Foya, O.V. Ilkiv, Bondarenko T.N., E. Shibata, T. Nakamura, Ya.V. Zaulychnyy. X-ray Photoelectron Spectroscopy Study of Electronic Structure of Graphene Nanosheets. Physics and Chemistry of Solid State. – 2015. – V. 16, №2. – P. 289-292.

Я.В. Зауличний, В.Я. Ільків, Ю.В. Яворський, О.І. Дудка, В.І. Зарко, М.В. Карпець. «[Вплив механоактивації сумішей нанопорошків SiO2/Al2O3 на їх морфологію та енергетичний розподіл валентних електронів](http://www.pu.if.ua/inst/phys_che/start/pcss/vol16/anotu1603.htm#up11)» Фізика і хімія твердого тіла. Т.16, №3(2015) с. 506-511.

Я.В. Зауличний, В.Я. Ільків, Ю.В. Яворський, В.М. Гунько, В.І. Зарко, М.В. Карпець. «Зміна енергетичного розподілу валетних електронів при формуванні нанорозмірних сумішей SiO2+Al2O3 пірогенним синтезом» Фізика і хімія твердого тіла. Т.16, №2 (2015) с. 425-432.

Ільків В.Я., Зауличний Я.В., Гунько В.М., Зарко В.І., Яворський Ю.В., Карпець М.В., Дудка О.І.  «Енергетичний перерозподіл валентних електронів сумішей Al2O3 + TiO2 з різним вмістом компонентів внаслідок механоактивації» Фізична інженерія поверхні. Т. 13, № 3(2015) с. 390-398.

Я.В. Зауличний, Ю.В. Яворський, В.М. Гунько, В.І. Зарко, В.Я. Ільків та ін.. Механоактивація сумішей SiO2/g-Fe2O3 та її вплив на розподіл валентних електронів. Фізика і хімія твердого тіла. Т.16, №1(2015) с. 55-61.

Яворський Ю.В., Зауличний Я.В., Ільків В.Я., Дудка О.І., Чмерук А.П., Зарко В.І., Карпець М.В. [«Вплив механо-активаційного методу на розподіл валентних електронів сумішей SiO2/TiO2](http://www.pse.scpt.org.ua/rus/jornal/3_15/13.pdf)» Фізична інженерія поверхні. Т. 13, № 3(2015) с. 371-382.

Y. V. Zaulychnyy, V. M. Gun’ko, Yu. V. Yavorskyi, V. I. Zarko, S. S. Piotrowska, and V. M. Mishchenko. Effect of Mechanical Activation of Highly Disperse SiO2/α-Fe2O3 Mixtures on Distribution of Valence Electrons // Metallofiz. Noveishie Tekhnol., v. 37, № 8, pp. 1063—1075 (2015).

Ya.V. Zaulychnyy, Y.V. Yavorskyi, V.I. Zarko, V.M. Gun’ko, S.S. Piotrowska, I.M. Gasuk, V.V. Ugorchuk, M.M. Vidluvanyy, M.B. Harlan. Effect of mass ratio of initial precursors and mechanical activation on distribution of valence electrons in Al2O3+Fe2O3 mixtures // Наноструктурное материаловедение, №1, сс. 4-12, (2015).

M. Spodaryk, L. Shcherbakova, A. Sameljuk, A. Wichser, V. Zakaznova-Herzog, M. Holzer, B. Braem, O. Khyzhun, P. Mauron, A. Remhof, Y. Solonin, A. Züttel. **Description of the capacity degradation mechanism in LaNi5-based alloy electrodes** // J. Alloys Compd. –2015. –Vol. 621. –P. 225–231.

V.V. Atuchin, O.Y. Khyzhun, O.D. Chimitova, M.S. Molokeev, T.A. Gavrilova, B.G. Bazarov, J.G. Bazarova. Electronic structure of β-RbNd(MoO4)2 by XPS and XES // J. Phys. Chem. Solids. – 2015. – Vol. 77. – P. 101–108.

O.Y. Khyzhun, V.L. Bekenev, V.A. Ocheretova, A.O. Fedorchuk, O.V. Parasyuk. Electronic structure of Cu2ZnGeSe4 single crystal: Ab initio FP-LAPW calculations and X-ray spectroscopy measurements // Physica B. –2015. –Vol. 461. –P. 75–84.

Г.В. Лашкарев, И.И. Штеплюк, А.И. Евтушенко, О.Ю. Хижун, В.В. Картузов, Л.И. Овсянникова, В.А. Карпина, Д.В. Миронюк, В.В. Хомяк, В.Н. Ткач, И.И. Тимофеева, В.И. Попович, Н.В. Дранчук, В.Д. Храновский, П.В. Демидюк. Свойства твердых растворов, легированных пленок и нанокомпозитных систем на остове оксида цинка // Физика низких температур. –2015. –Т. 41, № 2. –С. 169–184.

A.A. Lavrentyev, B.V. Gabrelian, V.T. Vu, P.N. Shkumat, G.L. Myronchuk, M. Khvyshchun, A.O. Fedorchuk, O.V. Parasyuk, O.Y. Khyzhun. Electronic structure and optical properties of Cs2HgI4: Experimental study and band-structure DFT calculations // Opt. Mater. –2015. –Vol. 42. –P. 351–360.

T. Babuka, I.V. Kityk, O.V. Parasyuk, G. Myronchuk, O.Y. Khyzhun, A.O. Fedorchuk, M. Malowska-Janusik. Origin of electronic properties of PbGa2Se4 crystal: Experimental and theoretical investigations // J. Alloys Compd. –2015. –Vol. 633. –P. 415–423.

V.V. Bozhko, A.V. Novosad, O.V. Parasyuk, O.Y. Khyzhun, N. Vainorius, A. Nekrošius, V. Vertelis,V. Kažukauskas. Electrical properties and electronic structure of Cu1–xZnxInSe2 and Cu1–xZnxInS2 single crystals // J. Phys. Chem. Solids. –2015. –Vol. 82. –P. 42–49.

V.A. Ocheretova, O.V. Parasyuk, A.O. Fedorchuk, O.Y. Khyzhun. Electronic structure of Cu2CdGeSe4 single crystal as determined from X-ray spectroscopy data // Mater. Chem. Phys. –2015. –Vol. 160. –P. 345–351.

A.A. Lavrentyev, B.V. Gabrelian, V.T. Vu, P.N. Shkumat, O.V. Parasyuk, A.O. Fedorchuk, O.Y. Khyzhun. Single crystal growth, electronic structure and optical properties of Cs2HgBr4 // J. Phys. Chem. Solids. –2015. –Vol. 85. –P. 254–263.

A.A. Lavrentyev, B.V. Gabrelian, V.T. Vu, P.N. Shkumat, V.A. Ocheretova, O.V. Parasyuk, O.Y. Khyzhun. Electronic structure and optical properties of Cu2CdGeS4: DFT calculations and X-ray spectroscopy measurements // Opt. Mater. –2015. –Vol. 47. –P. 435–444.

A.A. Lavrentyev, B.V. Gabrelian, P.N. Shkumat, I.Ya. Nikiforov, O.V. Parasyuk, O.Yu. Khizhun. The electron ic structure of defect chalcopyrite CdGa2Se4 as determined from first principles calculations and X-ray spectroscopy data // J. Struct. Chem. –2015. –Vol. 56, No. 3. –P. 492–496.

O.G. Ershova, V.D. Dobrovolsky, Y.M. Solonin, O.Y. Khyzhun, A.Y. Koval. The effect of Al on thermal stability and kinetics of decomposition of MgH2 prepared by mechanochemical reaction at different conditions // Mater. Chem. Phys. –2015. –Vol. 162. –P. 408–416.

P. Demchenko, O.Y. Khyzhun, P.M. Fochuk, S.I. Levkovets, G.L. Myronchuk, O.V. Parasyuk. Single crystal growth, structure and properties of TlHgBr3 // Opt. Mater. –2015. –Vol. 49. –P. 94–99.

P.M. Sylenko, A.M. Shlapak, S.S. Petrovska P.M. Sylenko, A.M. Shlapak, S.S. Petrovska, O.Y. Khyzhun, Y.M. Solonin, V.V. Atuchin. Direct nitridation synthesis and characterization of Si3N4 nanofibers // Res. Chem. Intermed. –2015. –Vol. 41, No. 12. –P. 10037–10048.

Dranenko A.S., Koshelev M.V. High Temperature Oxidation of Nickel Silicides Films Formed From Thin Ni Films (ICPTTFN-XV) ХV INTERNATIONAL CONFERENCE ON PHYSICS AND TECHNOLOGY OF THIN FILMS AND NANOSYSTEMS Ivanо-Frankivsk, May, 11-16, 2015, p.262.

Пригунова А.Г., Кошелев М.В, Петров С. С. «Влияние обработки расплава электрическим током на параметры фазовых превращений и структуру заэвтектического сплава Al-18,5 мас.% Si» – Сб. тез. докл. Межд. научно-техн. конф. «Университетская наука-2015» Мариуполь, ГВУЗ «ПГТУ» 19-20 мая 2015 с. 49 -50.

А.Г. Пригунова, М.В. Кошелев, С.С. Петров, С.В. Пригунов Температурные и термодинамические параметры заэвтектического силумина после обработки расплава импульсным электрическим током.// Литье. Металлургия. 2015: Материалы XI Международной научно-практической конференции (26-28 мая 2015 г., г. Запорожье) с. 200 – 203.

N. Denysyuk, [Khyzhun](http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S092534671200537X), V.L. Bekenev, [O.V. Parasyuk](http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S092534671200537X). Electronic structure of Tl3PbI5, a prospective nonlinear optical material. ХV Міжнародна конференція з фізики і технології тонких плівок та наносистем Івано-Франківськ, 11-16 травня, 2015.

N. Denysyuk, O.Y. Khyzhun, O.V. Parasyuk. Ray photoelectron spectroscopy of Tl3PbI5 single crystal. Восьма міжнародна конференція студентів, аспірантів та молодих вчених «Перспективні технології на основі новітніх фізико-матеріалознавчих досліджень та комп’ютерного конструювання матеріалів» 23-24 квітня, 2015, Київ, Україна.

Н. Денисюк, О. Ю. Хижун, Г. Л. Мирончук, О.В. Парасюк. Особливості краю оптичного поглинання монокристала Tl3PbI5. Міжнародна інтернет-конференція молодих учених та студентів «Актуальні проблеми фундаментальних і прикладних досліджень» 27-28 січня 2015.

Н. Денисюк. С. В. Маїло. Оптичні властивості монокристалів твердих розчинів TlPb2Br5 – TlPb2І5. Міжнародна інтернет-конференція молодих учених та студентів «Актуальні проблеми фундаментальних і прикладних досліджень» 27-28 січня 2015.

Н. Денисюк, О.Ю. Хижун, В.Л. Бекенев, О.В. Парасюк, А.О. Федорчук . Особливості краю оптичного поглинання монокристалів систем TlPb2X5 і Tl3PbX5 (X=Cl, Br). Конференція молодих вчених з фізики напівпровідників «Лашкарьовські читання - 2015» 1-3 квітня, Київ.

Илькив Б.И. Рентгеновское фотоэлектронное исследования особенностей электронной структуры графеновых нанолистов // XIІ Российская ежегодная конференция молодых научных сотрудников и аспирантов "Физико-химия и технология неорганических материалов". 13.10.-16.10.2015г. ИМЕТ РАН, г. Москва - 2015, С.52.

Яворський Ю. В., Зауличний Я. В., Ільків В. Я., Зарко В. І.. Зміна енергетичного розподілу валентних електронів сумішей x-SiO2+y-α-Fe2O3 до і після механоактивації//Матеріали Міжнародної інтернет-конференції молодих учених та студентів «Актуальні проблеми фундаментальних і прикладних досліджень», 47 (2015).

Ільків В. Я., Зауличний Я. В., Яворський Ю. В., Зарко В. І.. Енергетичний перерозподіл валентних Op-, Alsd- та Sisd-електронів внаслідок механоактивації сумішей 0.2\*Al2O3+0.8\*SiO2//Матеріали Міжнародної інтернет-конференції молодих учених та студентів «Актуальні проблеми фундаментальних і прикладних досліджень», 47 (2015).

Яворський Ю. В., Зауличний Я. В., Ільків В. Я., Зарко В. І.. Зміна енергетичного розподілу валентних електронів сумішей x-SiO2+y-α-Fe2O3 до і після механоактивації//Матеріали Міжнародної інтернет-конференції молодих учених та студентів «Актуальні проблеми фундаментальних і прикладних досліджень», 49 (2015).

Яворський Ю.В., Зауличний Я. В., Зарко В.І., Гасюк І.М., Гунько. В. М., Петровська С. С., Угорчук В.В. Зміна енергетичного розподілу валентних електронів сумішей x-Al2O3+y-α-Fe2O3 до і після механоактивації // Матеріали конференції молодих вчених з фізики напівпровідників «Лашкарьовські читання», 93 (2015).

avorskyi Y.V., Zaulychnyy Ya.V., Ilkiv V.Ya., Zarko V.I., Karpets M.V., Kotsyubynsky V.O. The Energy Distribution Changes Of the Valence Electrons of Mixtures x-SiO2 + y-γ-Fe2O= Before and After Mechanical Activation // ХV international conference on physics and technology of thin films and nanosystems, 218 (2015).

Яворський Ю.В., Ільків В.Я., Зауличний Я.В. Механоактивація та її вплив на розподіл валентних електронів та інтеркалаційні властивості сумішей SiO2/α-Fe2O3 // Матеріали та програма науково-технічної конференції «Фізика, електроніка, електротехніка», 82 (2015).

Яворський Ю.В., Зауличний Я. В., Ільків В. Я., Петровська С. С., Гасюк І.М., Груб’як А. Б., Колковський П. І. Вплив механоактивації на розподіл валентних електронів та інтеркаляційні властивості сумішей x-Al2O3+y-α-Fe2O3 (x=0,2; 0,5; 0,8; y=0,8; 0,5; 0,2) // Збірка тез доповідей восьмої міжнародної конференції студентів, аспірантів та молодих вчених «Перспективні технології на основі новітніх фізико-матеріалознавчих досліджень та комп’ютерного конструювання матеріалів» ,97 (2015.

Зауличний Я. В., Дудка О. І., Яворський Ю.В., Харлан М. Б., Відливаний М. М. Зміна енергетичного розподілу валентних електронів сумішей SiO2/γ-Fe2O3 в результаті механоактивації // Збірка тез доповідей восьмої міжнародної конференції студентів, аспірантів та молодих вчених «Перспективні технології на основі новітніх фізико-матеріалознавчих досліджень та комп’ютерного конструювання матеріалів» ,89 (2015).

Ilkiv V.Ya., Zaulychnyy Ya.V., Yavorskyy Yu.V., Gun’ko V.М., Zarko V.І. Formation of Interatomic Bonds on the Fumed Synthesis of Composites x-SiO2 +y-Al2O3 // ХV international conference on physics and technology of thin films and nanosystems, 171 (2015).

Ільків В. Я., Зауличний Я. В., Яворський Ю. В., Зарко В. І. Енергетичний перерозподіл валентних Op-, Alsd- та Sisd- електронів внаслідок механоактивації сумішей 0.2\*Al2O3+0.8\*SiO2 // Матеріали Міжнародної інтернет-конференції молодих учених та студентів «Актуальні проблеми фундаментальних і прикладних досліджень», 47 (2015).

Зауличний Я. В., Дудка О. І., Яворський Ю.В., Відливаний М. М., Харлан М. Б. Вплив механоактивації на розподіл валентних електронів сумішей 0,2 SiO2/ 0.8 γ-Fe2O3. // Збірка тез доповідей восьмої міжнародної конференції студентів, аспірантів та молодих вчених «Перспективні технології на основі новітніх фізико-матеріалознавчих досліджень та комп’ютерного конструювання матеріалів» ,18 (2015).

Яворський Ю.В., Зауличний Я. В., Ільків В. Я., Петровська С. С., Гасюк І.М., Груб’як А. Б., Колковський П. І. Вплив механоактивації на розподіл валентних електронів та інтеркалаційні властивості сумішей x-Al2O3+y-α-Fe2O3 (x=0,2; 0,5; 0,8; y=0,8; 0,5; 0,2) // Збірка тез доповідей восьмої міжнародної конференції студентів, аспірантів та молодих вчених «Перспективні технології на основі новітніх фізико-матеріалознавчих досліджень та комп’ютерного конструювання матеріалів» ,97 (2015).

V.D. Dobrovolsky (від. 58), O.G. Ershova (від. 58), Yu.M. Solonin (від. 58), O.Yu. Khyzhun. Influence of titanium and iron additives to magnesium on hydrogen-sorption properties, thermal stability, and kinetics of hydrogen desorption from MgH2 phase of mechanical alloy // Порошковая металлургия. – 2016. –№7/8. – С. 124–137.

A.A. Lavrentyev (Don State Technical University), B.V. Gabrelian (Don State Technical University), V.T. Vu (Don State Technical University), N.M. Denysyuk, P.N. Shkumat (Don State Technical University), A.Y. Tarasova (Institute of Geology and Mineralogy), L.I. Isaenko (Institute of Geology and Mineralogy), O.Y. Khyzhun Electronic structure and optical properties of RbPb2Br5 // J. Phys. Chem. Solids. –2016. –Vol. 91. –P. 25–33.

A.A. Lavrentyev (Don State Technical University), B.V. Gabrelian (Don State Technical University), V.T. Vu (Don State Technical University), N.M. Denysyuk, P.N. Shkumat (Don State Technical University), A.Y. Tarasova (Institute of Geology and Mineralogy), L.I. Isaenko (Institute of Geology and Mineralogy), O.Y. Khyzhun Specific features of the electronic structure and optical properties of KPb2Br5: DFT calculations and X-ray spectroscopy measurements // Opt. Mater. –2016. –Vol. 53. –P. 64–72.

M. Piasecki (J.Dlugosz University Częstochowa), G.L. Myronchuk (Eastern European National University), O.V. Zamurueva (Eastern European National University), O.Y. Khyzhun, O.V. Parasyuk (Eastern European National University), A.O. Fedorchuk (Lviv National University of Veterinary Medicine and Biotechnologies), A. Albassam (King Saud University), A.M. El-Naggar (King Saud University), I.V. Kityk (Czestochowa University of Technology) Huge operation by energy gap of novel narrow band gap Tl1–xIn1–xBxSe2 (B = Si, Ge): DFT, x-ray emission and photoconductivity studies // Mater. Res. Express. –2016. –Vol. 3, No. 2. –P. 025902 (17 pages).

O.Y. Khyzhun, P.M. Fochuk (Fedkovich Chernivtsi National University), I.V. Kityk (Czestochowa University of Technology), M. Piasecki (J.Dlugosz University Częstochowa), S.I. Levkovets (Eastern European National University), A.O. Fedorchuk (Lviv National University of Veterinary Medicine and Biotechnologies), O.V. Parasyuk (Eastern European National University) Single crystal growth and electronic structure TlPbI3 // Mater. Chem. Phys. –2016. –Vol. 172. –P. 165–172.

O.Y. Khyzhun, V.V. Halyan (Eastern European National University), I.V. Danyliuk (Eastern European National University), I.A. Ivashchenko (Eastern European National University). Electronic structure of (Ga55In45)2S300 and (Ga54.59In44.66Er0.75)2S300 single crystals // J. Mater. Sci.: Mater. Electron. –2016. –Vol. 27, No. 4. –P. 3258–3264.

V.V. Atuchin (Institute of Semiconductor Physics), E.N. Galashov (Novosibirsk State University), O.Y. Khyzhun, V.L. Bekenev (від. 44), L.D. Pokrovsky (Institute of Semiconductor Physics), Y.A. Borovlev (Institute of Inorganic Chemistry), V.N. Zhdankov (Institute of Semiconductor Physics). Low Thermal Gradient Czochralski growth of large CdWO4 crystals and electronic properties of (010) cleaved surface // J. Solid State Chem. – 2016. – Vol. 236. – P. 24–31.

L.I. Isaenko ( V.S. Sobolev Institute of Geology and Mineralogy), A.A. Goloshumova ( V.S. Sobolev Institute of Geology and Mineralogy), A.P. Yelisseyev ( V.S. Sobolev Institute of Geology and Mineralogy), Y.V. Shubin (Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry), O.Y. Khyzhun, D.Y. Naumov (Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry), A.Y. Tarasova ( V.S. Sobolev Institute of Geology and Mineralogy). New SrPb3Br8 crystals: Growth, crystal structure and optical properties // J. Alloys Compd. –2016. –Vol. 682. –P. 832–838.

O.Y. Khyzhun, V.L. Bekenev (від. 44), V.V. Atuchin (Institute of Semiconductor Physics), L.D. Pokrovsky (Institute of Semiconductor Physics), V.N. Shlegel (Institute of Inorganic Chemistry), N.V. Ivannikova (Institute of Inorganic Chemistry), The electronic structure of Pb2MoO5: First-principles DFT calculations and X-ray spectroscopy measurements, Materials and Design 105 (2016) 315–322.

A.A. Lavrentyev (Don State Technical University), B.V. Gabrelian (Don State Technical University), V.T. Vu (Don State Technical University), O.V. Parasyuk (Eastern European National University), A.O. Fedorchuk (Lviv National University of Veterinary Medicine and Biotechnologies), O.Y. Khyzhun. Electronic structure and optical properties of Cs2HgCl4: DFT calculations and X-ray photoelectron spectroscopy measurements // Opt. Mater. –2016. –Vol. 60. –P. 169–180.

O.Y. Khyzhun, M. Piasecki (J.Dlugosz University Częstochowa), I.V. Kityk (Czestochowa University of Technology), I. Luzhnyi, A.O. Fedorchuk (Lviv National University of Veterinary Medicine and Biotechnologies),, P.M. Fochuk (Fedkovich Chernivtsi National University), S.I. Levkovets (Eastern European National University), M.V. Karpets (від. 58), O.V. Parasyuk (Eastern European National University). Tl10Hg3Cl16: Single crystal growth, electronic structure and piezoelectric properties // J. Solid State Chem. – 2016. – Vol. 242. – P. 193–198.

A.A. Lavrentyev (Don State Technical University), B.V. Gabrelian (Don State Technical University), V.T. Vu (Don State Technical University),, L.N. Ananchenko (Don State Technical University), L.I. Isaenkо (Institute of Geology and Mineralogy), A. Yelisseyev (Institute of Geology and Mineralogy), P.G. Krinitsin (Institute of Geology and Mineralogy), O.Y. Khyzhun.Electronic structure and optical properties of noncentrosymmetric LiGaGe2Se6, a promising nonlinear optical material // Physica B. –2016. –Vol. 501. –P. 74–83.

S. Rajagopal (Bharathiar University), M. Bharaneswari (VIT University), D. Nataraj (Bharathiar University), O.Y. Khyzhun, Yahia Djaoued (Université de Moncton-Campus de Shippagan). Crystal structure and electronic properties of facile synthesized Cr2O3 nanoparticles // Mater. Res. Express. –2016. –Vol. 3. –P. 095019 (10 pages).

S. Rajagopal (Bharathiar University), M. Bharaneswari (VIT University), D. Nataraj (Bharathiar University), O.Y. Khyzhun, Yahia Djaoued (Université de Moncton-Campus de Shippagan). Systematic synthesis and analysis of change in morphology, electronic structure and photoluminescence properties of 2,2′-dipyridyl intercalated MoO3 hybrid nanostructures and investigation of their photocatalytic activity // RSC Adv. –2016. –Vol. 6. –P. 88287–88299.

O.V. Parasyuk (Eastern European National University), V.V. Pavlyuk, (Ivan Franko National University of Lviv) O.Y. Khyzhun, V.R. Kozer (Eastern European National University), G.L. Myronchuk (Eastern European National University), V.P. Sachanyuk (Eastern European National University), G.S. Dmytriv (Ivan Franko National University of Lviv), A. Krymus (Eastern European National University), I.V.Kityk (Czestochowa University Technology), A.M. El-Naggar (King Saud University), A.A. Albassam (King Saud University), M.Piasecki (J. Dlugosz Academy). Synthesis and structure of novel Ag2Ga2SiSe6 crystals: promising materials for dynamic holographic image recording // RSC Adv. –2016. –Vol. 6. –P. 90958–90966.

A.A. Lavrentyev (Don State Technical University), B.V. Gabrelian (Don State Technical University), T.V. Vu (Don State Technical University), P.N. Shkumat (Don State Technical University), P.M. Fochuk (Yuriy Fedkovych Chernivtsi National University), O.V. Parasyuk (Eastern European National University), I.V. Kityk (Częstochowa University of Technology), I.V. Luzhnyi, O.Y. Khyzhun, M. Piasecki (J. Dlugosz Academy). Manifestation of Anomalous Weak Space-Charge-Density Acentricity for a Tl4HgBr3 Single Crystal // Inorg. Chem. – 2016. – Vol. 55. –P. 10547–10557.

G. Kharlamova (Taras Shevchenko National University), O. Kharlamov (лаб.73), M. Bondarenko (лаб.73), O. Khyzhun. Hetero-Carbon Nanostructures as the Effective Sensors in Security Systems. In: Nanomaterials for Security, NATO Science for Piece and Security Series A: Chemistry and Biology, (J. Bonča, S. Kruchinin (eds.), Springer Science+Business Media Dordrecht, 2016. –P. 239–258.

O. Kharlamov (лаб.73), M. Bondarenko (лаб.73), O. Khyzhun, G. Kharlamova (Taras Shevchenko National University). Anthology and Genesis of Nanodimensional Objects and GM Food as the Threats for Human Security. In: Nanomaterials for Security, NATO Science for Piece and Security Series A: Chemistry and Biology, (J. Bonča, S. Kruchinin (eds.), Springer Science+Business Media Dordrecht, 2016. –P. 297–310.

Денисюк Н.М., Хижун О.Ю., Мирончук Г.Л. (Eastern European National University) Особливості краю власного поглинання галегрнідів TlPb2Cl5 і TlPb2Br5 «Лашкарьовські читання - 2016» Конференція молодих вчених з фізики напівпровідників, 6-8 квітня, 2016, м. Київ, Україна.

Денисюк Н.М., Хижун О.Ю., Лаврентьєв А.А. (Don State Technical University), Тарасова А.Ю. (Institute of Geology and Mineralogy) Першопринципні розрахунки щільності електронних станів броміду KPb2Br5 Релаксаційні, нелінійні й акустооптичні процеси та матеріали РНАОПМ’2016, VIII Міжнародна наукова конференція, 1-4 червня, 2016, Луцьк-Світязь, Україна.

Dranenko A.S., Koshelev M.V. High-temperature oxidation of NiSi and NiSi2 films.// Materials of Int. research and practice conference: Nanotechnology and nanomaterials (NANO-2016) 24–27 August 2016, Abstract book, Lviv, Ukraine, p.603.

Ільків Б.І., Фоя О.О., Петровська С.С., Бондаренко Т.М., Лужний І.В., Ільків О.В., Зауличний Я.В. Рентгеноспектральне дослідження особливостей електронної структури вуглець-кремнеземних порошкових композицій // Науково-технічна конференція: фізика, електроніка, електротехніка ФЕЕ-2016. 18–22 квітня 2016 року, Суми. Україна. С.100.