

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ

Белорусский национальный технический университет

**Визуализация структуры сенсорных
наноматериалов с использованием программы
VESTA**

Учебно-методическое пособие
для студентов специальностей

1 – 55 01 01 “Интеллектуальные приборы, машины
и производства”,

1-55 01 02 “Интегральные сенсорные системы”

Электронный учебный материал

Авторы:

В. М. Колешко

А. В. Гулай

В. А. Гулай

Н. В. Левченко

Электронное учебно-методическое пособие содержит материал для изучения студентами кафедры “Интеллектуальные системы”, который позволяет студентам понять основные идеи визуализации наноматериалов с помощью программы VESTA на примере оксида иттрия (Y_2O_3), а также предоставляет возможности для реализации творческого потенциала при визуализации собственных наноструктур. Изложены основные способы визуализации наноматериалов, описана визуализация наноматериалов при различных реконструкциях поверхности: 3D, 2D и 1D структур. Разработанный материал раскрывает творческий потенциал студентов в направлении визуализации наноматериалов для интегральных сенсорных и интеллектуальных систем.

Белорусский национальный технический университет
пр-т Независимости, 65, г. Минск, Республика Беларусь
Тел. (017) 292-77-52 факс (017) 292-91-37
E-mail: isev@tut.by
Регистрационный № БНТУ/МСФ82-5.2014

© БНТУ, 2014

© Колешко В. М., Гулай А. В., Гулай В. А.,
Левченко Н. В., 2014

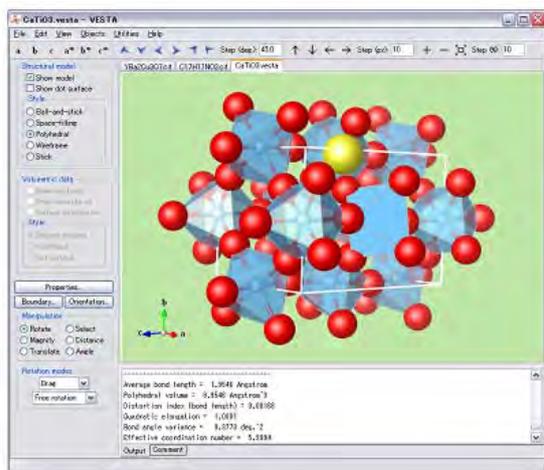
ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	4
ГЛАВА 1	6
ХАРАКТЕРИСТИКА СТРУКТУРЫ ОКСИДА ИТТРИЯ (Y_2O_3)	6
ГЛАВА 2	7
ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ЭЛЕМЕНТАРНОЙ ЯЧЕЙКИ ОКСИДА ИТТРИЯ (Y_2O_3)..	7
2.1. Способы визуализации структур в программе VESTA	7
2.1.1. Построение элементарной ячейки оксида иттрия из файла.	7
2.1.2 Построение элементарной ячейки оксида иттрия созданием новой структуры вручную.....	11
2.2 Добавление связей в элементарную ячейку	15
2.3 Изменение свойств атомов элементарной ячейки	17
2.3.1 Изменение свойств рамки элементарной ячейки	18
2.3.2 Изменение свойств атомов структуры.....	18
2.3.3 Изменение свойств связей структуры	19
ГЛАВА 3	21
ВИЗУАЛИЗАЦИЯ 3D, 2D И 1D СТРУКТУР ОКСИДА ИТТРИЯ (Y_2O_3).....	21
3.1 Построение 3D структуры оксида иттрия	21
3.2 Построение 2D структуры оксида иттрия	22
3.3 Построение 1D структуры оксида иттрия	25
ГЛАВА 4	28
ВИЗУАЛИЗАЦИЯ 2D СТРУКТУРЫ ОКСИДА ИТТРИЯ (Y_2O_3) С ДОБАВЛЕНИЕМ АТОМОВ ВОДОРОДА (H) НА ПОВЕРХНОСТЬ	28
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	32

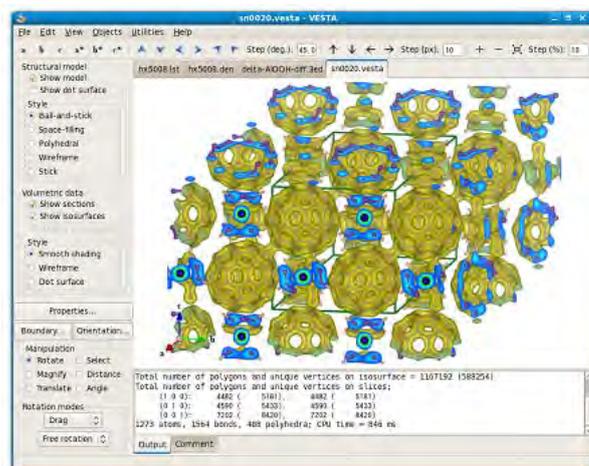
ВВЕДЕНИЕ

3D-визуализаторы молекул (Molecular Visualization Programs), позволяющие на основе содержащихся во входном файле данных построить модель биомолекулы и рассмотреть ее с разных сторон, вращая при помощи мыши, приближая или удаляя, изменить способ ее отображения, выделить и исследовать отдельные элементы – такие, как активные центры ферментов, небелковые компоненты протеидов.

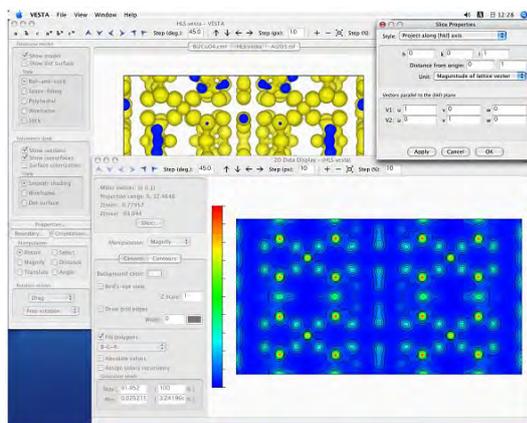
Одним из таких визуализаторов является программа VESTA (Visualisation for Electronic and Structural Analysis), разработанная Национальным институтом материаловедения в Японии с 2001 по 2006 год [1]. На рисунке изображено рабочее окно программы VESTA для операционных систем: а) Windows; б) Linux; в) Mac OS X



а)



б)



в)

Рассмотрим визуализацию наноматериалов на примере 3D, 2D и 1D структур оксида иттрия (Y_2O_3), а также визуализацию 2D структуры оксида иттрия (Y_2O_3) с добавлением водорода (H).

ГЛАВА 1

ХАРАКТЕРИСТИКА СТРУКТУРЫ ОКСИДА ИТТРИЯ (Y_2O_3)

Оксид иттрия имеет структуру биксбиита, то есть образует объемно-центрированную кубическую элементарную ячейку с 80 атомами и Ia-3 (№206) пространственной группой симметрии [2-7]. Кристаллическая ячейка состоит из 6 квадратных граней со стороной 10,5818 Å под углом 90° друг к другу. Каждая грань пересекает одну из кристаллографических осей, ориентированных перпендикулярно относительно двух других. Кристаллографические параметры оксида иттрия сведены в табл. 1.

Таблица 1 – кристаллографические параметры оксида иттрия

Наименование	Группа симметрии	Номер группы симметрии	Параметры решетки					
			Постоянные решетки			Углы между гранями		
			a, Å	b, Å	c, Å	$\alpha, ^\circ$	$\beta, ^\circ$	$\gamma, ^\circ$
Оксид иттрия (Y_2O_3)	Ia-3	206	10,5818	10,5818	10,5818	90	90	90

Для построения структуры оксида иттрия, мы используем относительные координаты позиций атомов соединения. Зная номер и пространственную группу симметрии, можно найти относительные координаты, например, на сайте вычислительного центра материаловедения Вашингтона <http://cst-www.nrl.navy.mil/>.

ГЛАВА 2

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ЭЛЕМЕНТАРНОЙ ЯЧЕЙКИ ОКСИДА ИТТРИЯ (Y_2O_3)

2.1. Способы визуализации структур в программе VESTA

Независимо от дальнейшей модификации структуры поверхности, первоначально необходимо визуализировать элементарную ячейку.

Визуализация структур в программе VESTA может проводиться двумя способами:

1. Построение элементарной ячейки оксида иттрия из файла;
2. Создание новой структуры вручную.

2.1.1. Построение элементарной ячейки оксида иттрия из файла.

Построение элементарной ячейки оксида иттрия начинается с формирования входного файла в любом текстовом редакторе (например, блокнот или WordPad), в котором:

- 1-ая строка - количество атомов элементарной ячейки;
- 2-ая строка – комментарий;
- 3-ая строка и далее – наименование элемента и координаты атомов относительно направлений XYZ (см. табл. 2.1.1.1).

Для визуализации элементарной ячейки оксида иттрия (Y_2O_3) первоначально ее необходимо достроить – транслировать атомы, которые находятся на гранях ячейки. Для этого копируем координаты с нулевыми значениями по осям X, Y, Z и прибавляем единицу к нулевым значениям. Визуализация при запуске из файла с расширением .xyz требует предварительного увеличения всех координат в 10 раз.

Таблица 2.1.1.1 – данные файла для визуализации элементарной ячейки Y_2O_3

```

92
Y2O3 в объеме
Y 9.680800 0.000000 2.500000
Y 9.680800 10.000000 2.500000
Y 0.319200 0.000000 7.500000
Y 0.319200 10.000000 7.500000
...
O 3.903500 1.514500 3.803700
O 6.096500 8.485500 6.196300
O 6.096500 3.485500 3.803700
O 3.903500 6.514500 6.196300
...

```

После формирования файла сохраняем его с расширением .xyz и запускаем в визуализаторе VESTA. Открытие файла в VESTA представлено на рис.2.1.1.1 и рис.2.1.1.2.

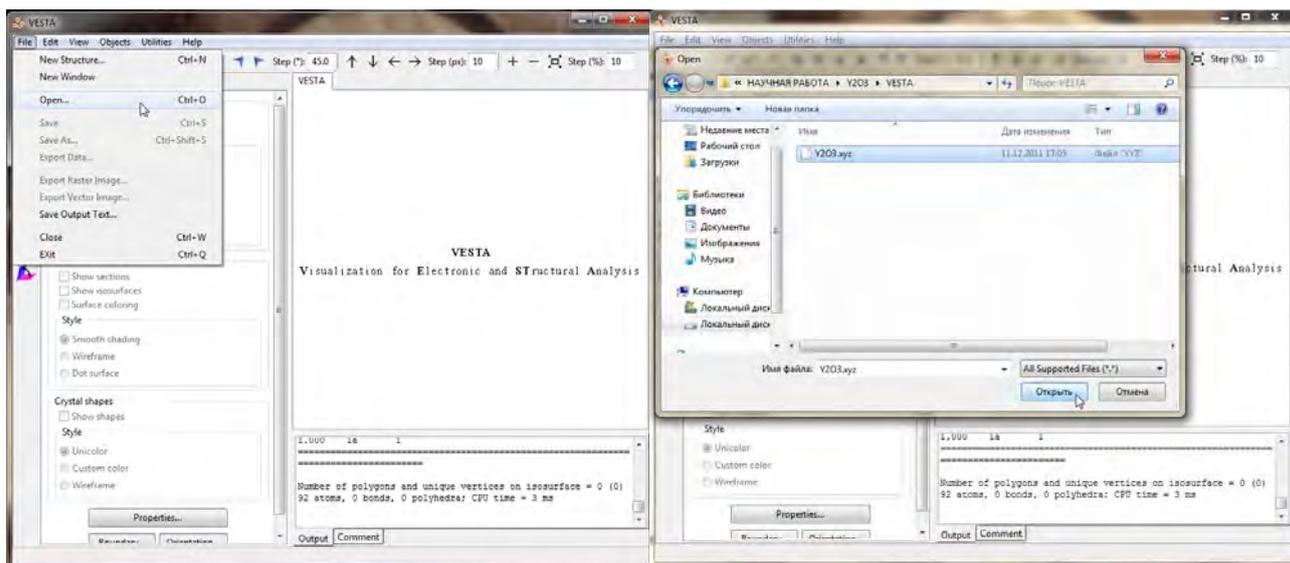


Рис.2.1.1.1 – запуск файла в VESTA

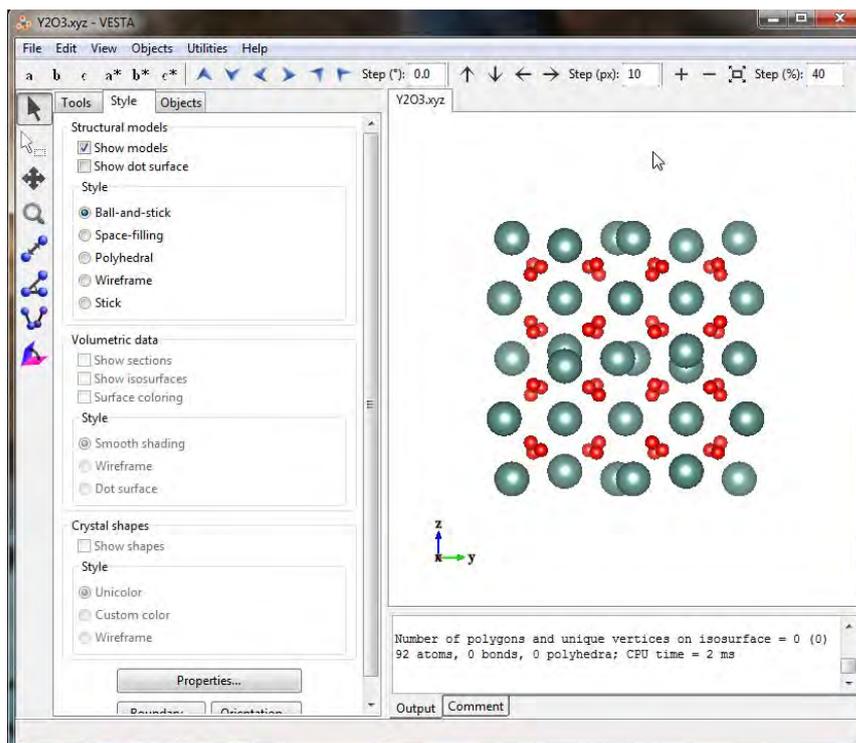


Рис. 2.1.1.2– визуализация оксида иттрия при запуске данных из файла с расширением .xyz

Трансляция атомов в VESTA возможна только после уточнения кристаллографических параметров: номера и пространственной группы соединения (задание связей и кристаллографических параметров будет рассмотрено ниже). Однако при запуске из файла с расширением .xyz изменения кристаллографических параметров структуры: уточнение номера и пространственной группы ячейки, а также задание векторов может привести к неверному построению структуры. Поэтому при запуске из файла с таким расширением трансляцию атомов проводить не получится.

Поскольку VESTA является утилитой для программного комплекса VASP, то в ней также можно использовать для визуализации входной файл POSCAR, который и описывает кристаллографическую структуру соединения. Структура оксида иттрия показана в табл. 2.1.1.2.

Таблица 2.1.1.2 - описание POSCAR файла оксида иттрия до проведения релаксации

1	2
Y2O3	комментарий.
10.5818	задание универсального масштабного фактора («постоянной решетки»), которая используется для задания всех векторов решетки и всех координат атомов.
1.0000 0.0000 0.0000 0.0000 1.0000 0.0000 0.0000 0.0000 1.0000	значения векторов решетки для кубической решетки.
32 48	количество атомов по атомным группам.
Direct	определяет задание позиций атомов. В данном случае позиции атомов заданы во взаимной системе координат.
0.968080 0.000000 0.250000 0.031920 0.000000 0.750000 0.031920 0.500000 0.250000 0.968080 0.500000 0.750000 0.250000 0.968080 0.000000 ... 0.348550 0.119630 0.109650 0.348550 0.619630 0.890350 0.651450 0.380370 0.109650 0.651450 0.119630 0.609650 0.348550 0.880370 0.390350 0.348550 0.380370 0.609650 0.651450 0.619630 0.390350	координаты атомов в кристаллической решетке.

Запуск POSCAR файла для визуализации представлен на рис. 2.1.1.3:

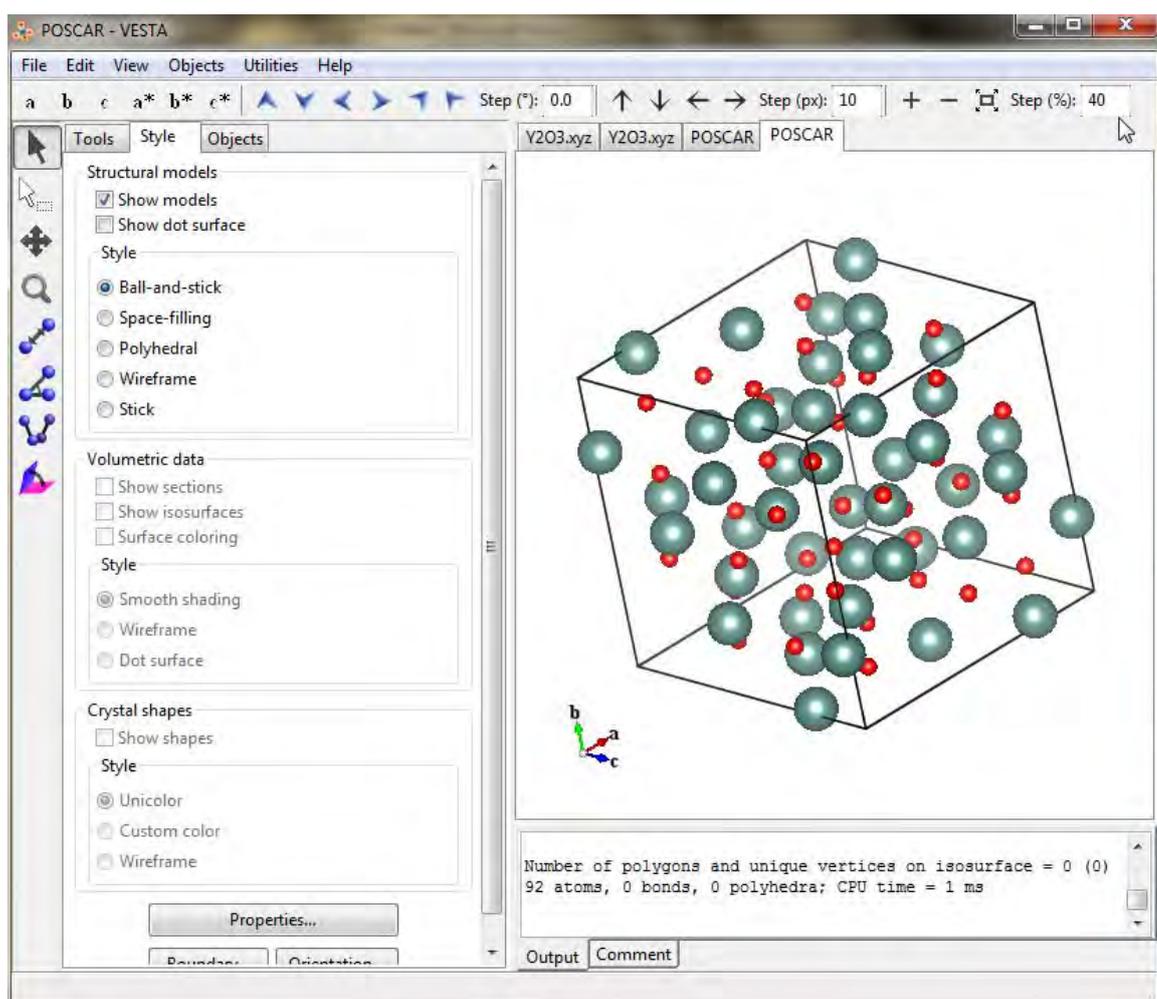


Рис. 2.1.1.3 – визуализация оксида иттрия из POSCAR файла

Рамка в виде куба обозначает, что VESTA определила структуру по кристаллографическим параметрам и при их уточнении структура не поменяет свой вид. В этом случае возможна трансляция.

2.1.2 Построение элементарной ячейки оксида иттрия созданием новой структуры вручную.

Создаем новую структуру на примере построения элементарной ячейки оксида иттрия. Открываем File/New Structure (см. рис. 2.1.2.1):

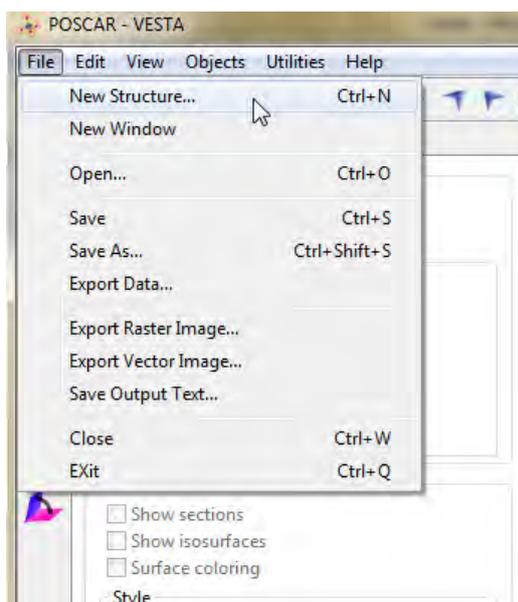


Рис. 2.1.2.1 – создание новой структуры

Заполняем окно Phase: присваиваем название новой структуры путем нажатия кнопки New двойного клика по полю Title (см. рис. 2.1.2.2), остальное оставляем неизменным.

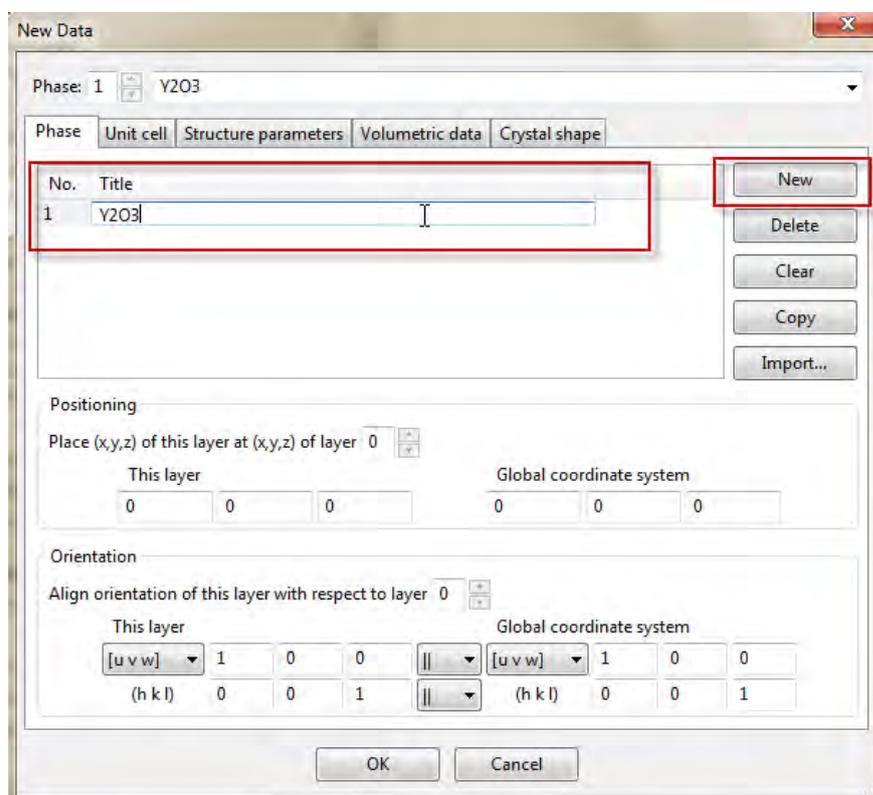


Рис. 2.1.2.2 – присваивание названия новой структуре

Переходим во вкладку Unit cell. Задаем кристаллографические параметры элементарной ячейки оксида иттрия (см. рис. 2.1.2.3):

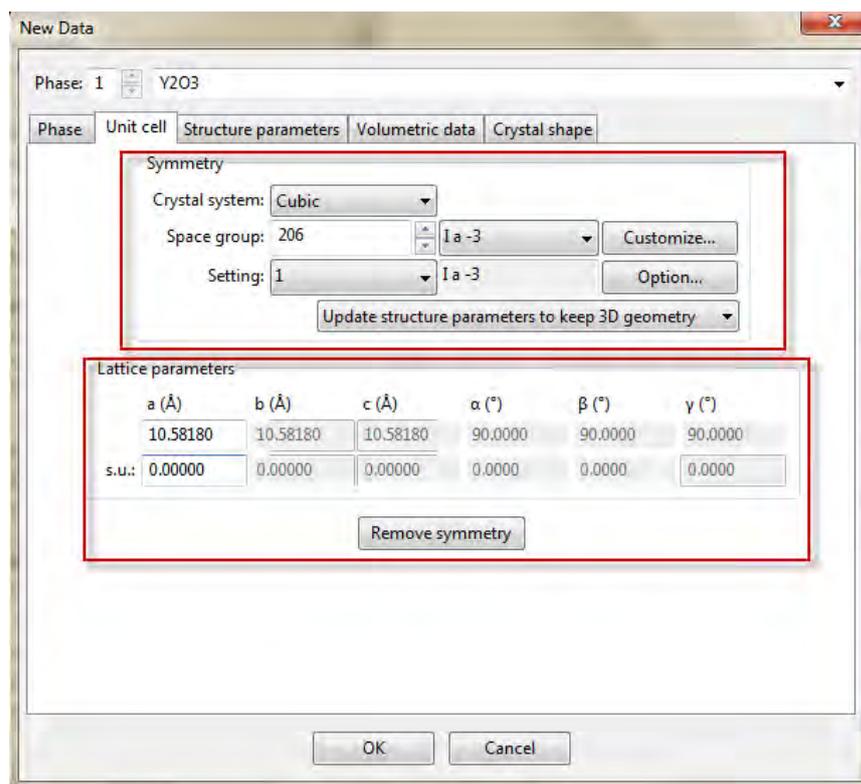


Рис. 2.1.2.3 – задание кристаллографических параметров оксида иттрия

После нажатия на кнопку Option переходим в окно Additional Lattice Settings и задаем значения векторов (см. рис. 2.1.2.4):

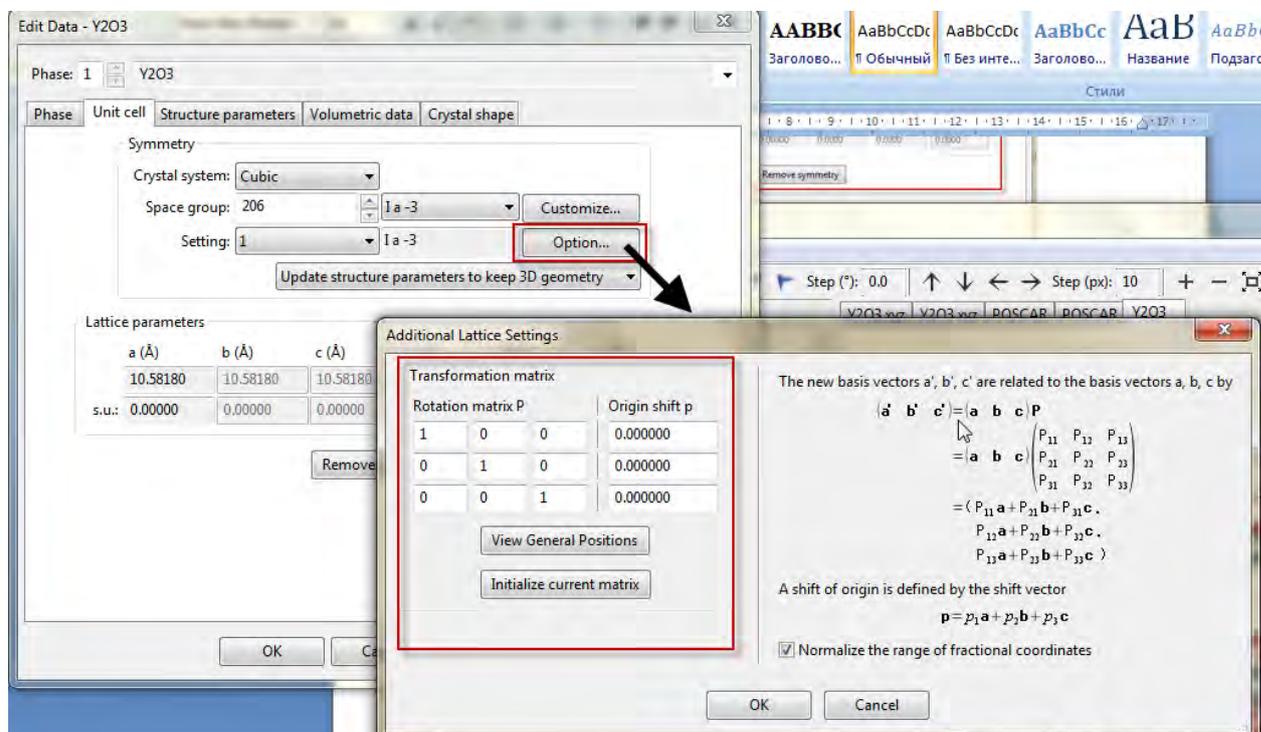


Рис. 2.1.2.4 – задание значения векторов

Далее переходим на вкладку Structure parameters (см. рис. 2.1.2.5) добавляем значения координат атомов (см. рис. 2.1.2.6). Для того чтобы не заносить все значения координат вручную, можно задать только основные координаты атомов, которые затем автоматически транслируются на всю ячейку (см. табл. 2.1.2.1)[6].

Таблица 2.1.2.1 – координаты атомов элементарной ячейки оксида иттрия

Наименование	X	Y	Z
Y1	0.96808	0.00000	0.25000
Y2	0.25000	0.25000	0.25000
O	0.39000	0.15145	0.38037

Нажимаем на кнопку New и заполняем координаты атомов элементарной ячейки оксида иттрия (см. рис. 2.1.2.7)

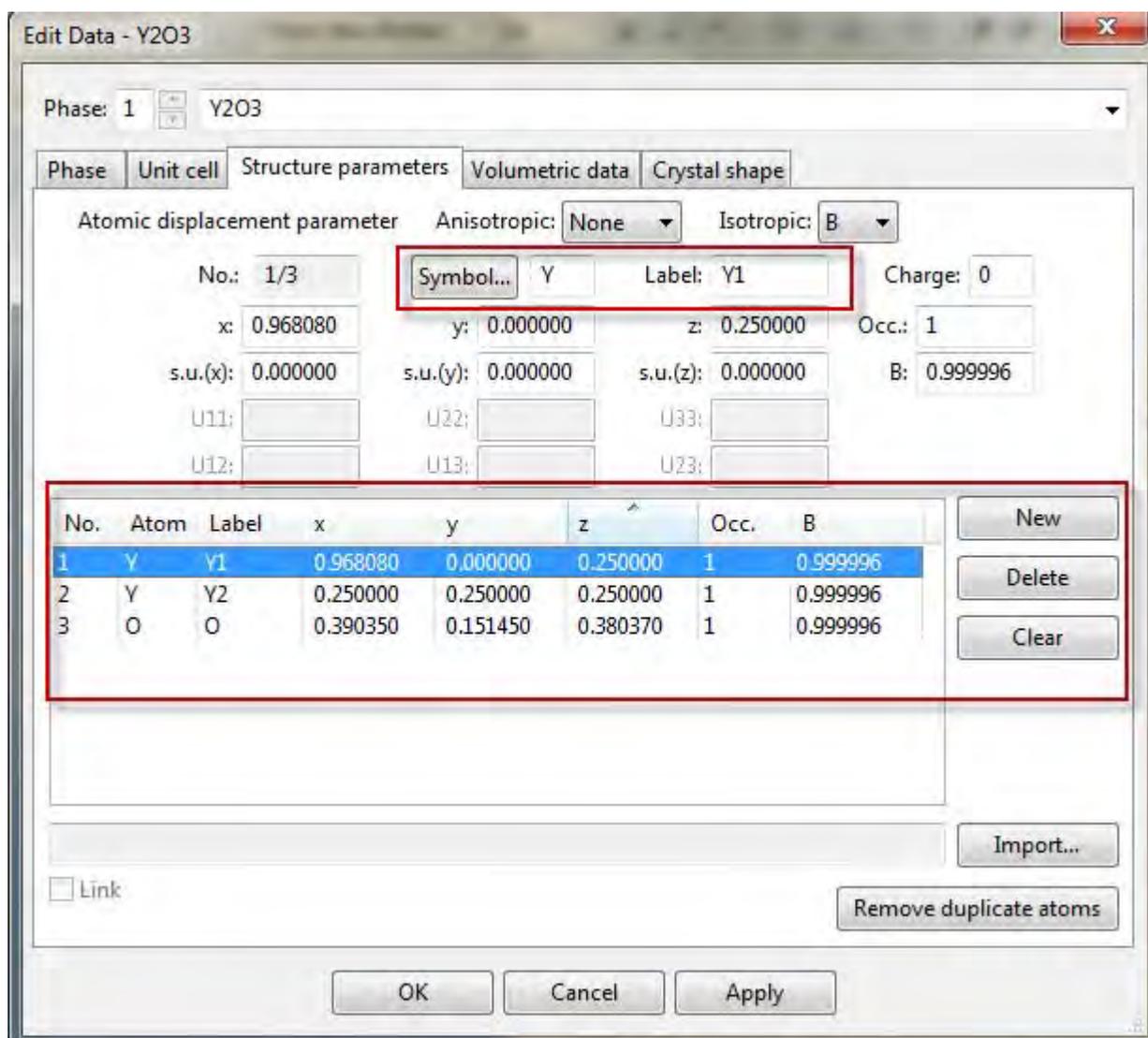


Рис. 2.1.2.8 – задание значения координат атомов

В результате получаем структуру, представленную на рис. 2.1.2.9:

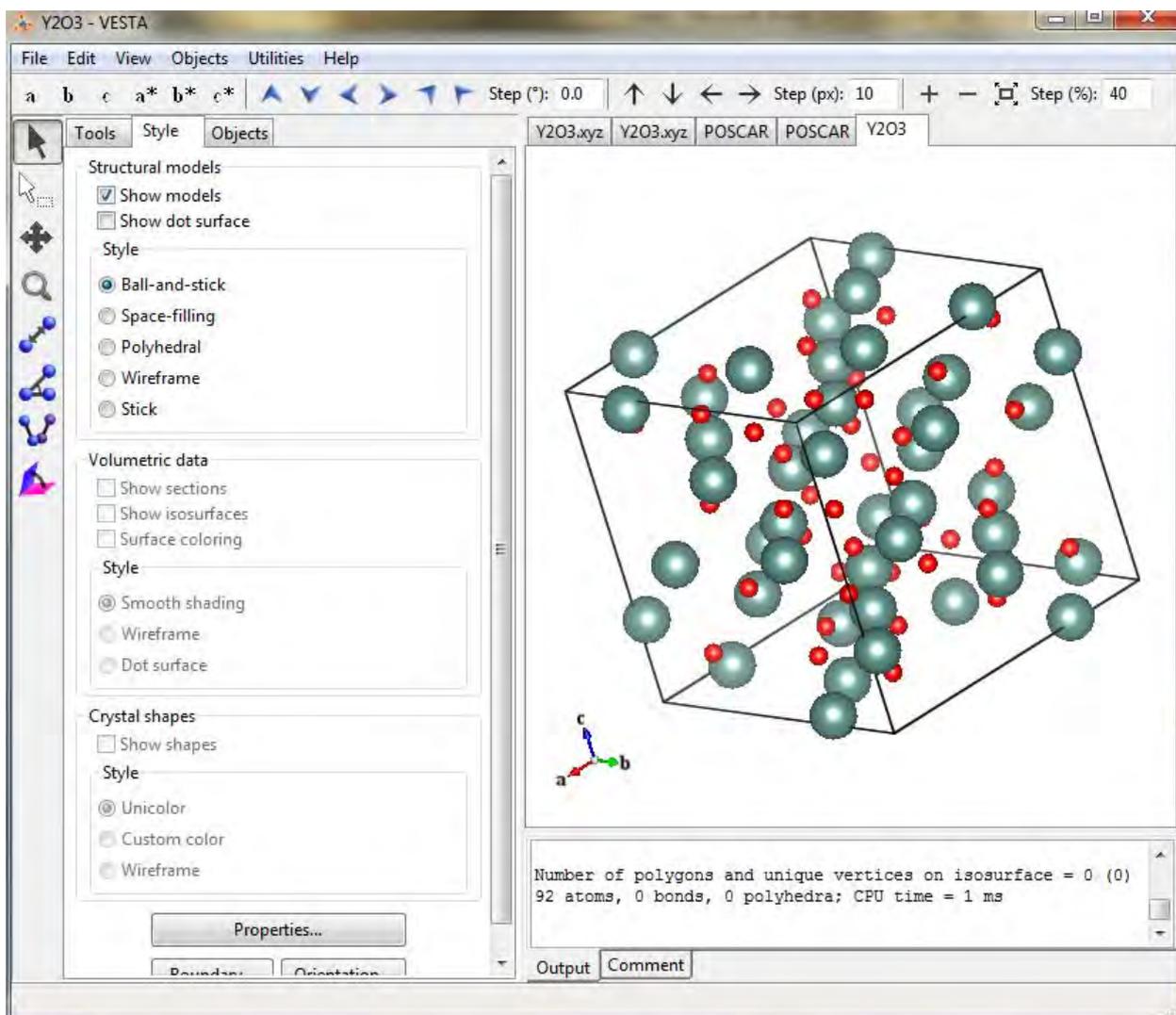


Рис. 2.1.2.9 – результат визуализации элементарной ячейки оксида иттрия путем создания структуры вручную

2.2 Добавление связей в элементарную ячейку

Переходим в окно добавления связей Edit/Bonds (см. рис. 2.2.1)

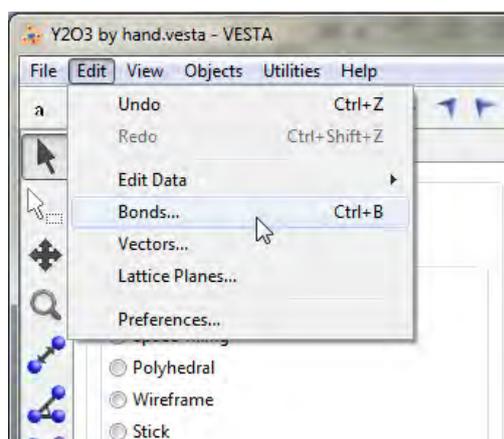


Рис. 2.2.1 – переход в окно добавления связей Bonds

В окне Bonds устанавливаем связи от A2 к A1 (Search A2 bonded to A1), не учитываем связи атомов вне элементарной ячейки (Do not search atoms beyond the boundary). Нажимаем New, выбираем атомы для поиска связи между ними для A1 и A2 соответственно, подбираем максимальную длину связи (Max. length) - наименьшее значение при котором появляются связи, минимальная длина связи (Min. length) остается неизменной (см. рис. 2.2.1.1).

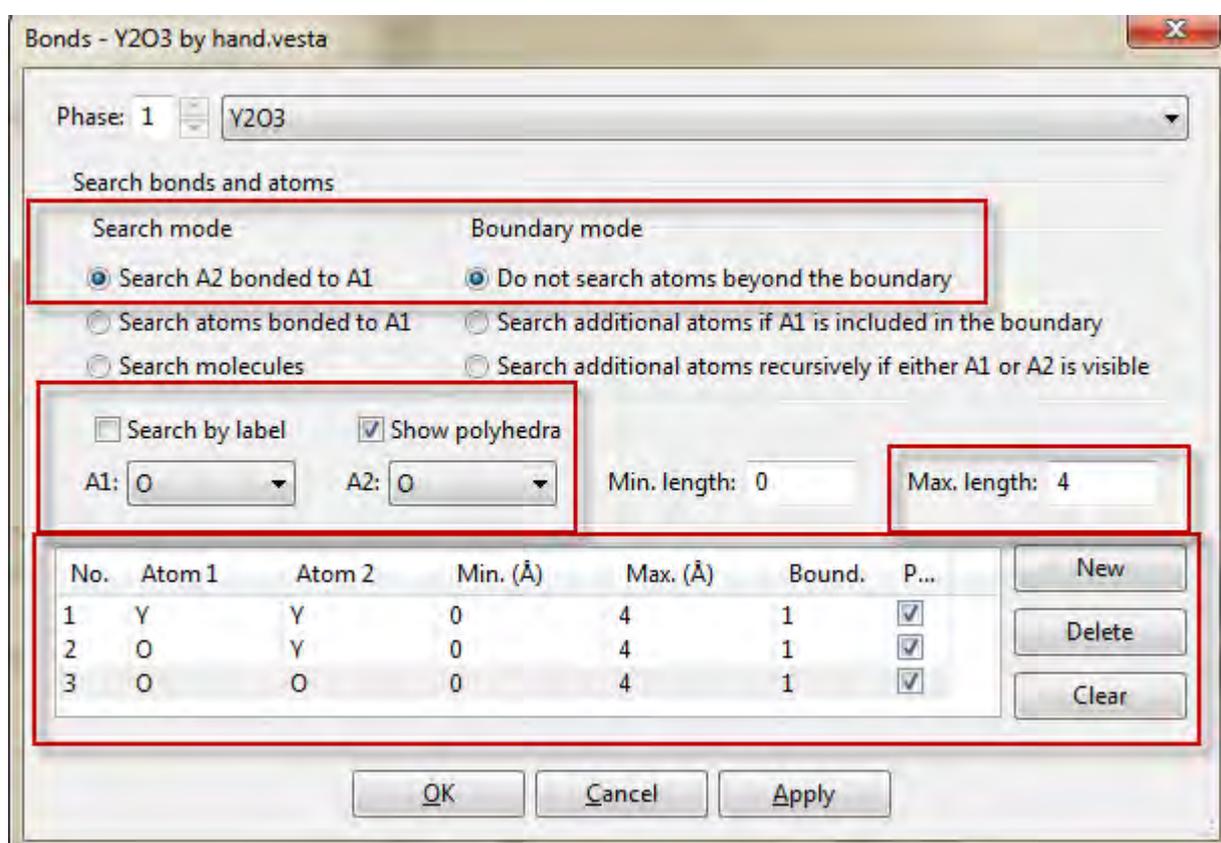


Рис. 2.2.1.1 – поиск связей между атомами

Получаем элементарную ячейку оксида иттрия со связями (см. рис. 2.2.1.2).

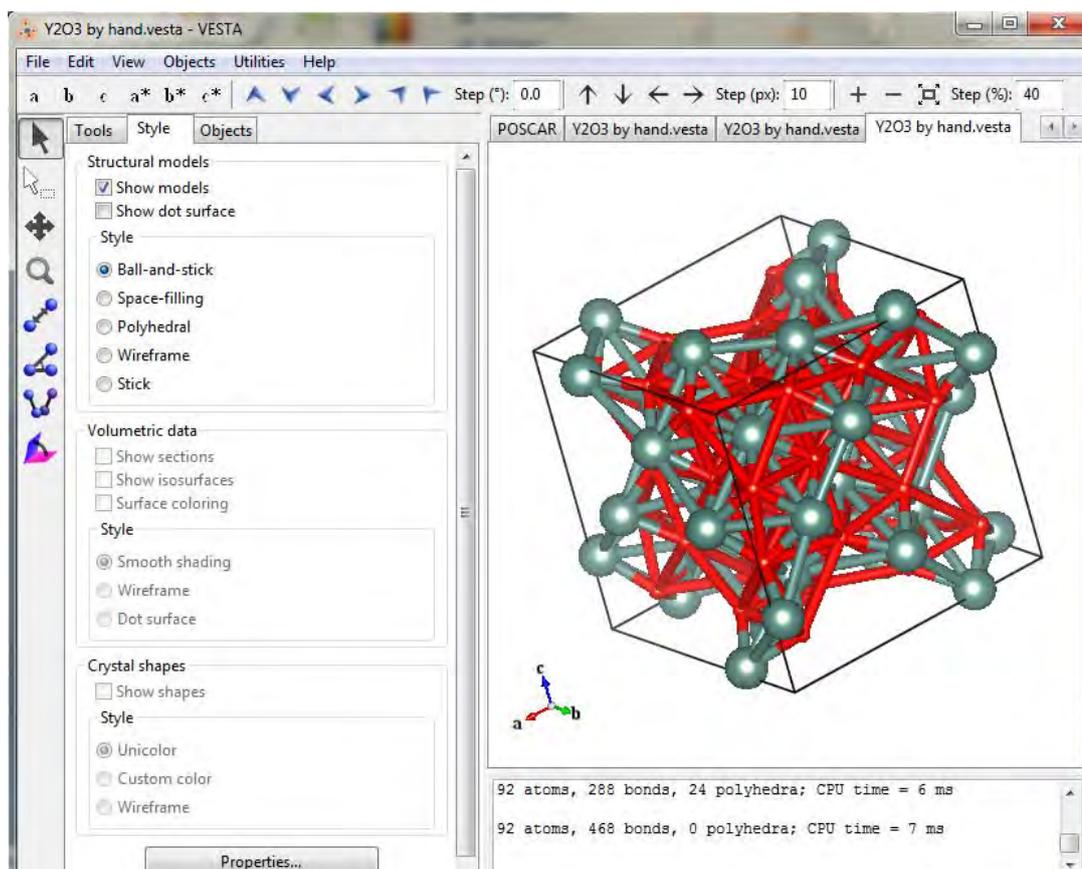


Рис. 2.2.1.2 – элементарная ячейка оксида иттрия со связями

2.3 Изменение свойств атомов элементарной ячейки

Для изменения свойств атомов нажимаем Objects на панели инструментов, далее Properties (см. рис. 2.1.3.1).

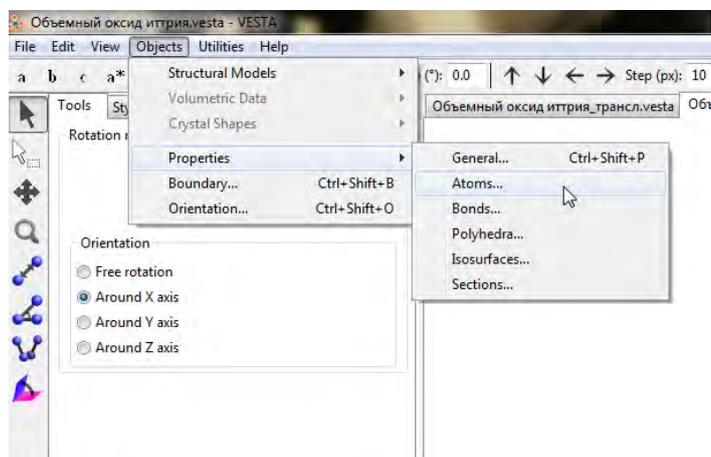


Рис. 2.1.3.1 – переход к изменению свойств атомов

2.3.1 Изменение свойств рамки элементарной ячейки

Переходим к общим свойствам структуры Objects/ Properties/General. В этой вкладке можно задать наличие либо отсутствие рамки кубической структуры как для одной элементарной ячейки, так и для нескольких, изменить ее цвет, способ отображения. Также можно изменить отображения координатных осей и их наименования и задать наличие границы структуры и задать цвет границы (см. рис. 2.3.1.1).

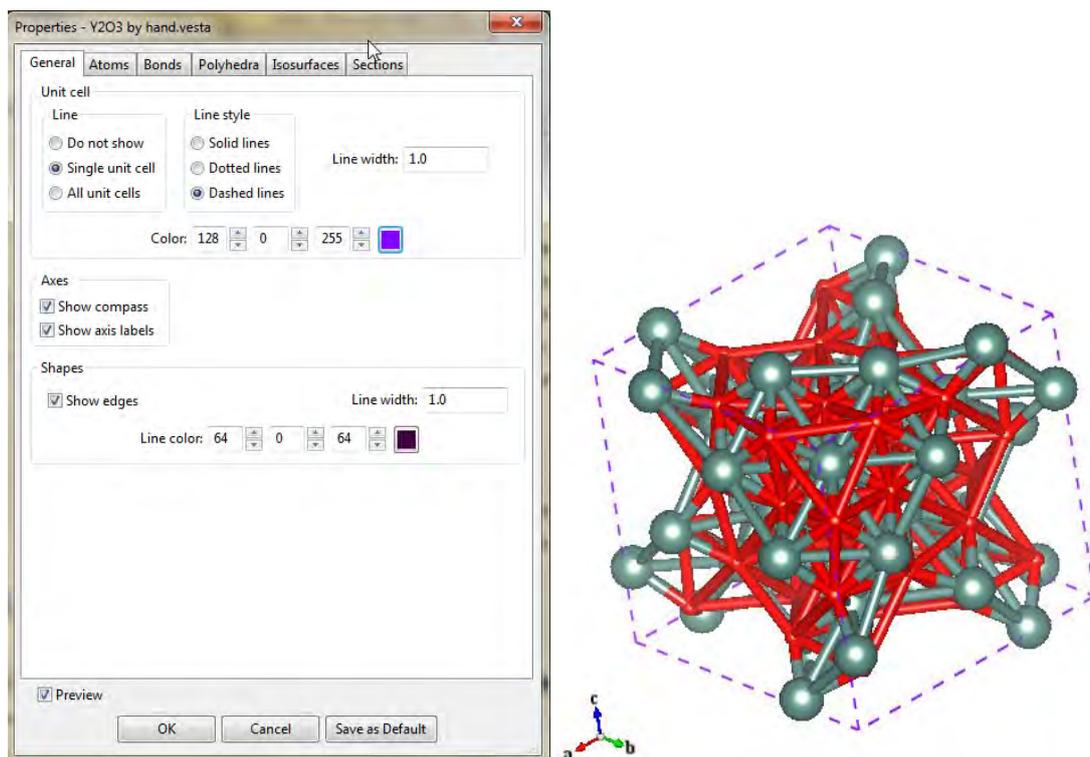


Рис. 2.3.1.1 – изменение свойств рамки структуры

2.3.2 Изменение свойств атомов структуры

В окне Properties переходим на вкладку Atoms. Здесь можно изменить зеркальность поверхности атомов, величина блика на поверхности атомов, тип радиуса атомов, задать собственный радиус, цветовую гамму для атомов, наименование и его размещение на рисунке. С помощью чекбокса Preview можно вернуть все изменения к исходному изображению (см. рис. 2.3.2.1).

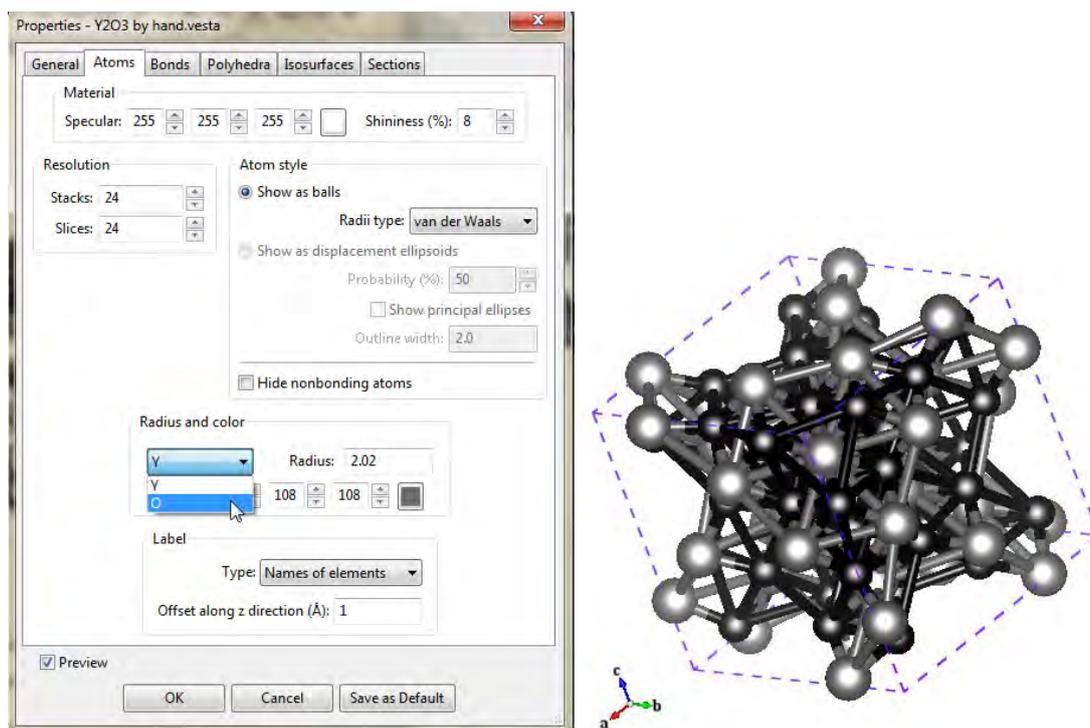


Рис. 2.3.2.1– изменение свойств атомов структуры

2.3.3 Изменение свойств связей структуры

Как и во вкладке Atoms, во вкладке Bonds того же окна Properties можно изменять зеркальность поверхности связей, величина блика на поверхности связей, кроме того возможно изменить разрешение, стиль связи, радиус и цвет связи (см. рис.2.3.3.1).

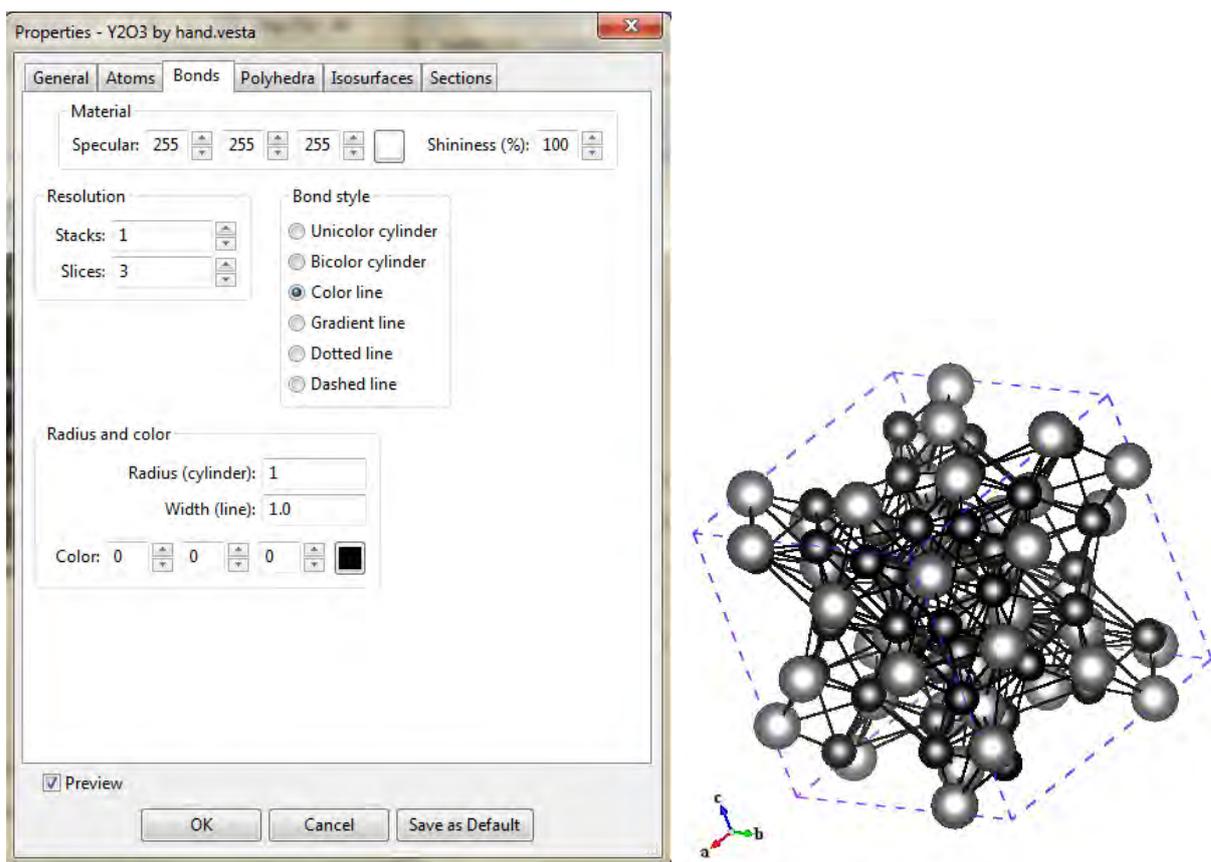


Рис. 2.3.3.1– изменение свойств связей структуры

ГЛАВА 3

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ 3D, 2D И 1D СТРУКТУР ОКСИДА ИТТРИЯ (Y_2O_3)

3.1 Построение 3D структуры оксида иттрия

На основе созданной элементарной ячейки оксида иттрия, создадим 3D структуру оксида иттрия. Для этого переходим в окно Bonds (Edit/Bonds)/ Нажимаем New, затем выбираем искать молекулы (Search molecules) и искать соответствующие атомы рекурсивно, если видны A1 либо A2 (Search additional atoms recursively if either A1 or A2 is visible)(см. рис. 3.1.1).

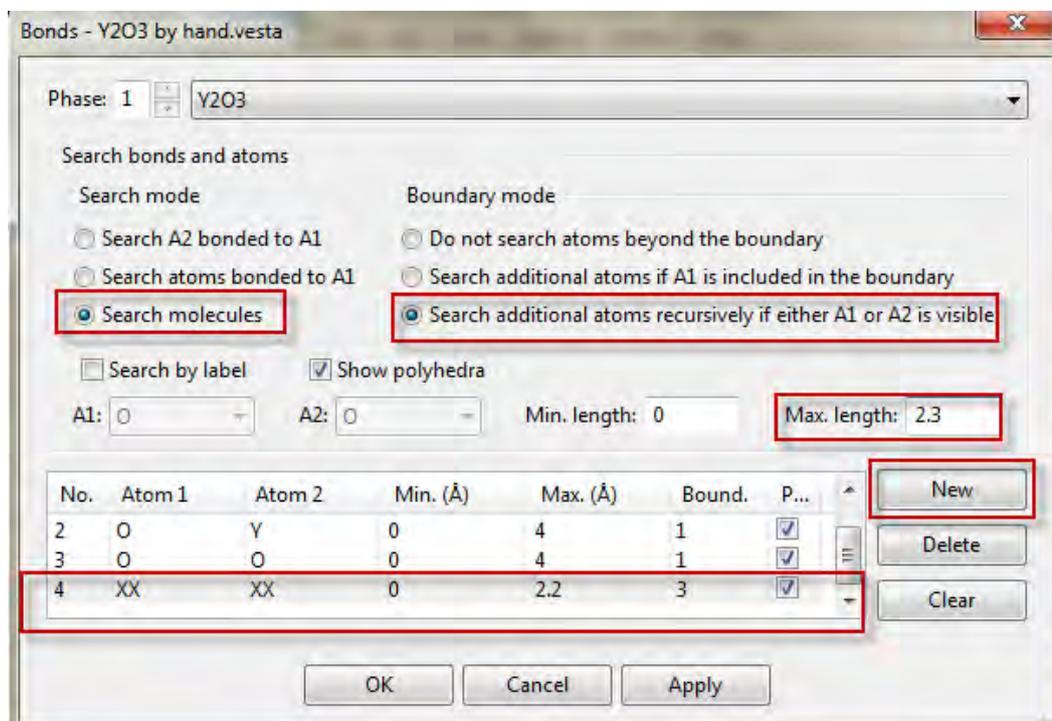


Рис. 3.1.1– задание параметров связей для 3D структуры оксида иттрия

Изображение 3D структуры представлено на рис.3.1.2:

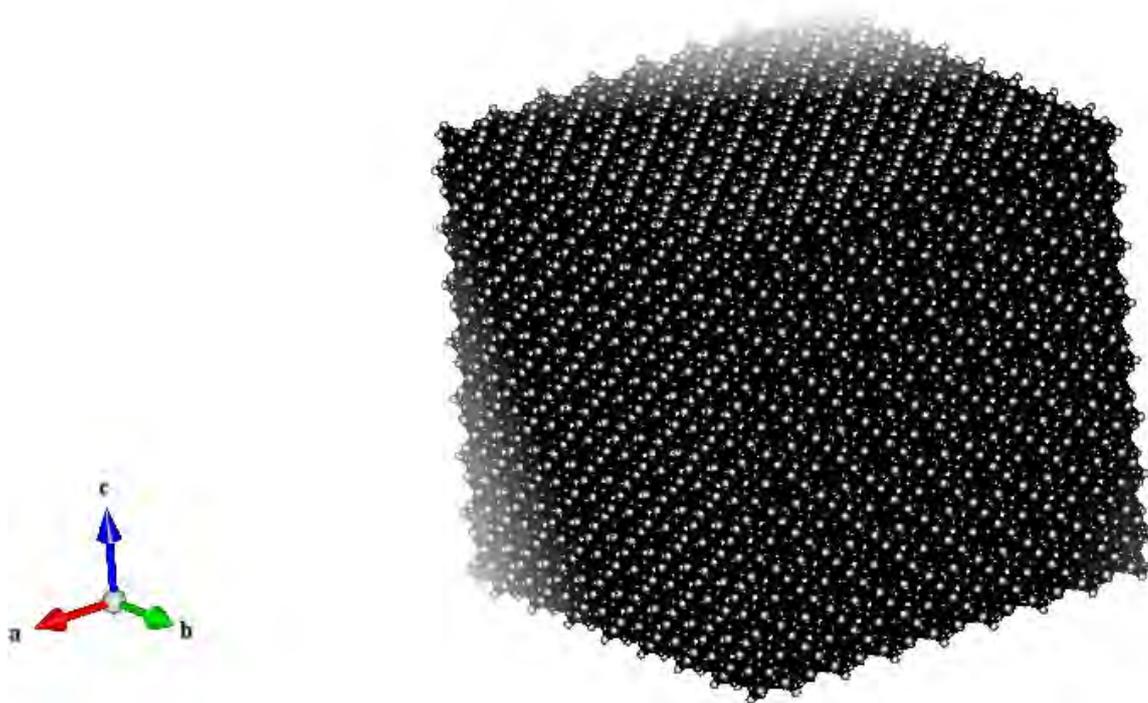


Рис. 3.1.1– изображение 3D структуры оксида иттрия

3.2 Построение 2D структуры оксида иттрия

Поскольку элементарная ячейка 2D структуры является модифицированной элементарной ячейкой 3D структуры оксида иттрия, то ее построение будет достаточно затруднительно вручную из-за большого количества данных, которые надо изменить. Поэтому изменим POSCAR файл для получения элементарной ячейки и на основе полученной элементарной ячейки создадим 2D структуру оксида иттрия.

Для получения POSCAR файла для 2D структуры оксида иттрия необходимо:

- вектор Z трансляционного куба увеличивается до значения, равного отношению суммы периода решетки и корректирующей поправки (10 \AA) к периоду решетки.

- координаты атомов по оси Z элементарной ячейки, заданной в объеме кристалла, делим на величину вектора по оси Z , полученную для 2D структуры (см. табл. 3.2.1).

Таблица 3.2.1 – фрагменты POSCAR файлов для 3D и 2D структур соответственно

POSCAR для 3D структуры			POSCAR для 2D структуры		
Y2O3			Y2O3		
10,58180			10,58180		
1,00000	0,00000	0,00000	1,00000	0,00000	0,00000
0,00000	1,00000	0,00000	0,00000	1,00000	0,00000
0,00000	0,00000	1,00000	0,00000	0,00000	$= (10,58180 + 10) * 1,00000 / 10,58180$ $= 1,94502$
Y	O		Y	O	
32	48		32	48	
0,96808	0,00000	0,25000	0,96808	0,00000	$0,25000 / 1,94502 = 0,12853$
0,03192	0,00000	0,75000	0,03192	0,00000	$0,75000 / 1,94502 = 0,38560$
0,03192	0,50000	0,25000	0,03192	0,50000	$0,25000 / 1,94502 = 0,12853$
0,96808	0,50000	0,75000	0,96808	0,50000	$0,75000 / 1,94502 = 0,38560$
0,25000	0,96808	0,00000	0,25000	0,96808	$0,00000 / 1,94502 = 0,00000$
0,75000	0,03192	0,00000	0,75000	0,03192	$0,00000 / 1,94502 = 0,00000$
0,75000	0,53192	0,00000	0,75000	0,53192	$0,00000 / 1,94502 = 0,00000$
0,25000	0,46808	0,00000	0,25000	0,46808	$0,00000 / 1,94502 = 0,00000$
0,00000	0,25000	0,96808	0,00000	0,25000	$0,96808 / 1,94502 = 0,49772$
0,00000	0,75000	0,03192	0,00000	0,75000	$0,03192 / 1,94502 = 0,01641$
...			...		

Открываем POSCAR файл File/Open. Изображение элементарной ячейки 2D структуры оксида иттрия без связей и со связями представлено на рис. 3.2.1:

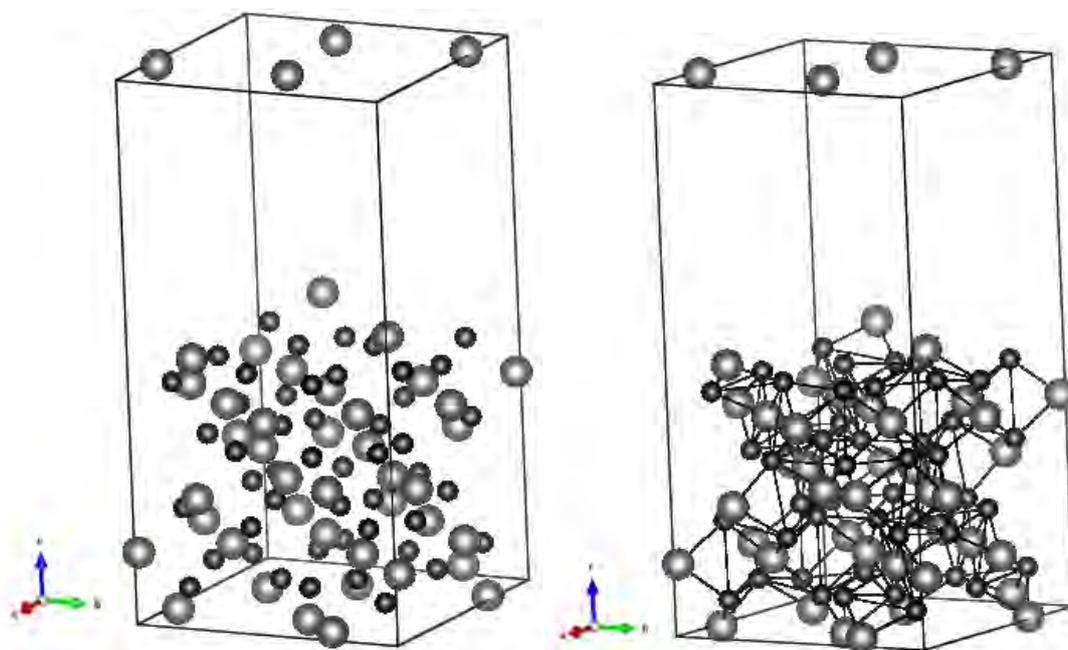


Рис. 3.2.1– изображение элементарной ячейки 2D структуры оксида иттрия без связей и со связями

Трансляция элементарной ячейки для получения 2D структуры осуществляется заданием максимальной длины (Max. length.) связи в окне Bonds (см. раздел 3.1). В результате получаем два слоя, которые отделены друг от друга на расстояние 10 \AA (см. рис.3.2.2).

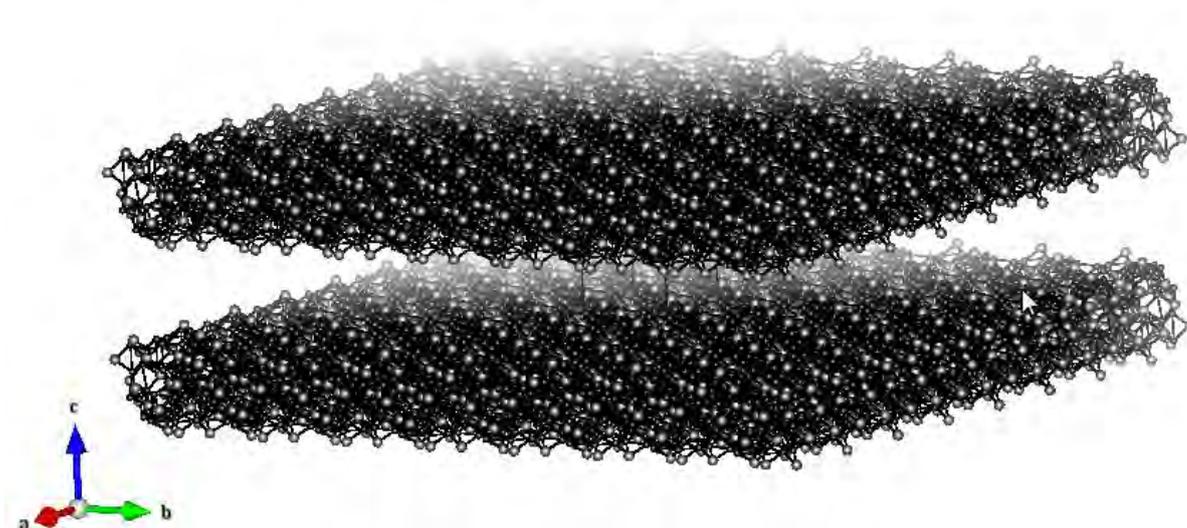


Рис. 3.2.2– изображение 2D структуры оксида иттрия

Для получения однослойной 2D структуры уберем слой. Для этого, с помощью инструмента Select выделяем верхний слой и нажимаем Delete (см. рис.3.2.3, рис.3.2.4). Кроме этого убираем рамку в окне General: Object/Properties/General. В окне General ставим галочку в чекбоксе Do not show.

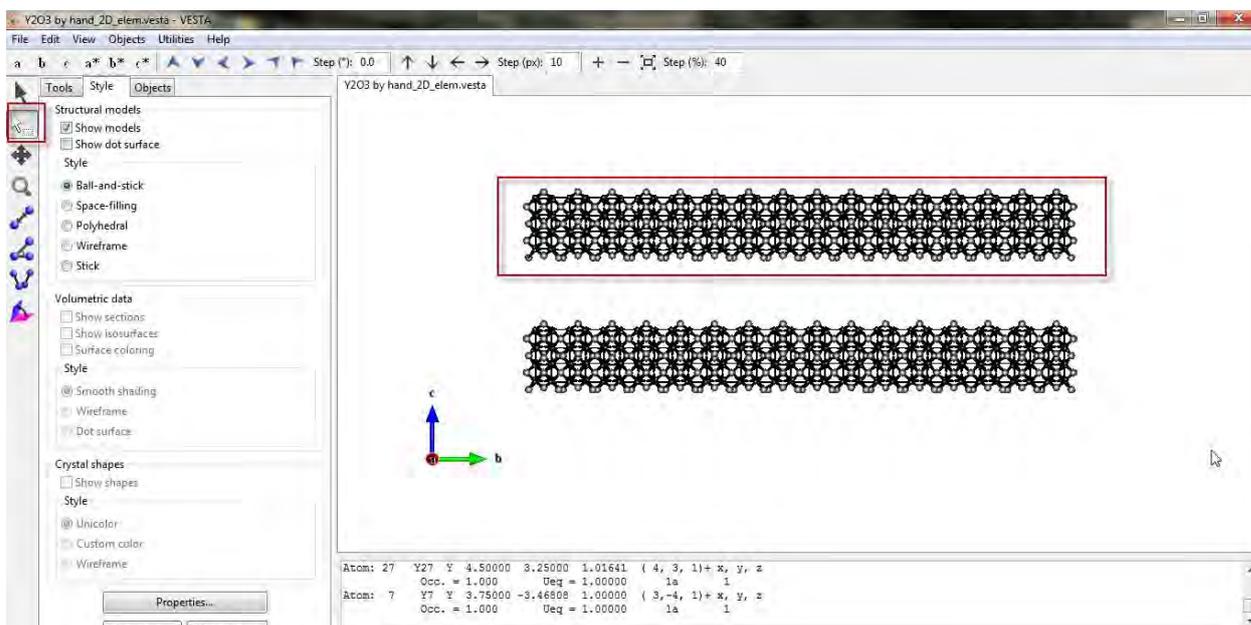


Рис. 3.2.3– изображение 2D структуры оксида иттрия при удалении верхнего слоя

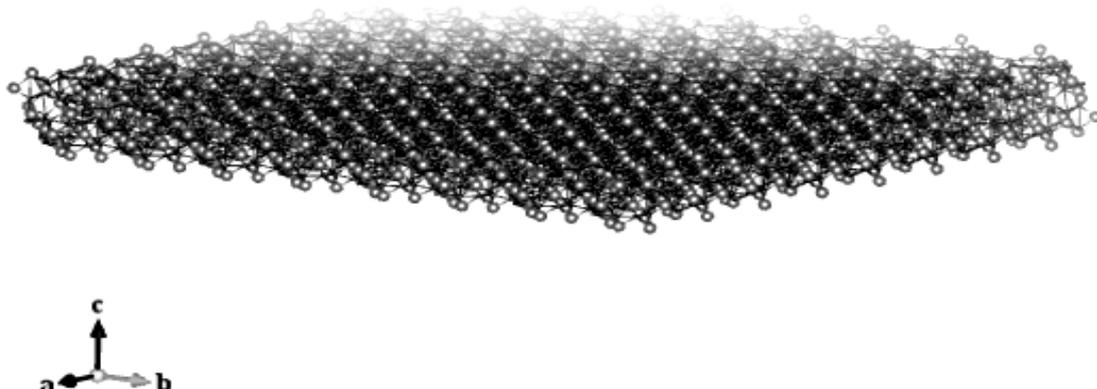


Рис. 3.2.4– изображение 2D структуры оксида иттрия после удаления верхнего слоя

3.3 Построение 1D структуры оксида иттрия

Элементарную ячейку оксида иттрия для 1D структуры строим аналогично 2D структуре путем создания POSCAR файла.

Для получения POSCAR файла для 2D структуры оксида иттрия необходимо:

- вектора X и Y трансляционного куба увеличиваются до значения, равного отношению суммы периода решетки и корректирующей поправки (10 Å) к периоду решетки.

- координаты атомов по осям X и Y элементарной ячейки, заданной в объеме кристалла, делим на величины векторов по осям X и Y соответственно, полученных для 1D структуры соответственно (см. табл. 3.3.1).

Таблица 3.3.1 – фрагмент POSCAR файлов для 3D и 1D структур соответственно

POSCAR для 3D структуры			POSCAR для 1D структуры		
Y2O3			Y2O3		
10,58180			10,58180		
1,00000	0,00000	0,00000	1,94502	0,00000	0,00000
0,00000	1,00000	0,00000	0,00000	1,94502	0,00000
0,00000	0,00000	1,00000	0,00000	0,00000	1,00000
Y	O		Y	O	
32	48		32	48	
0,96808	0,00000	0,25000	0,49772	0,00000	0,25000
0,03192	0,00000	0,75000	0,01641	0,00000	0,75000
0,03192	0,50000	0,25000	0,01641	0,25707	0,25000
0,96808	0,50000	0,75000	0,49772	0,25707	0,75000
0,25000	0,96808	0,00000	0,12853	0,49772	0,00000
0,75000	0,03192	0,00000	0,38560	0,01641	0,00000
0,75000	0,53192	0,00000	0,38560	0,27348	0,00000
0,25000	0,46808	0,00000	0,12853	0,24066	0,00000
0,00000	0,25000	0,96808	0,00000	0,12853	0,96808
0,00000	0,75000	0,03192	0,00000	0,38560	0,03192
...			...		

Открываем POSCAR файл File/Open. Изображение элементарной ячейки 1D структуры оксида иттрия без связей и со связями представлено на рис. 3.3.1:

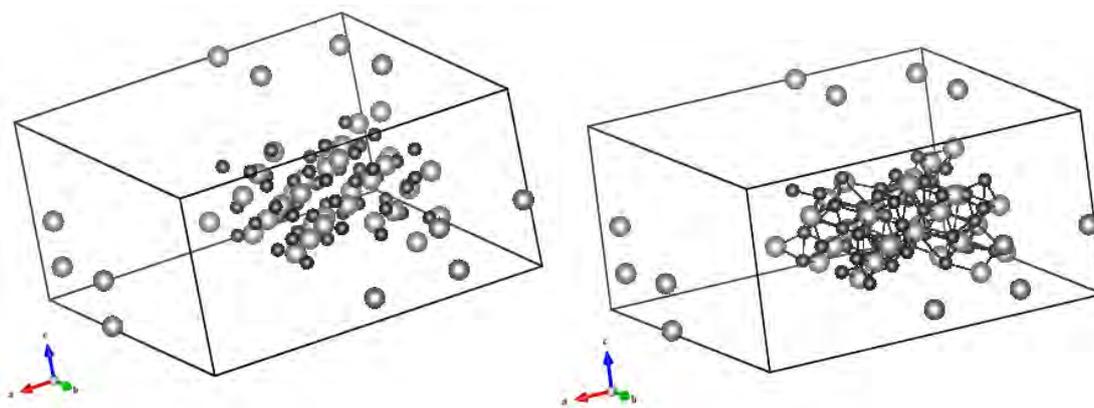


Рис. 3.3.1– изображение элементарной ячейки 1D структуры оксида иттрия без связей и со связями

Изображение 1D структуры оксида иттрия после трансляции представлено рис.3.3.2.

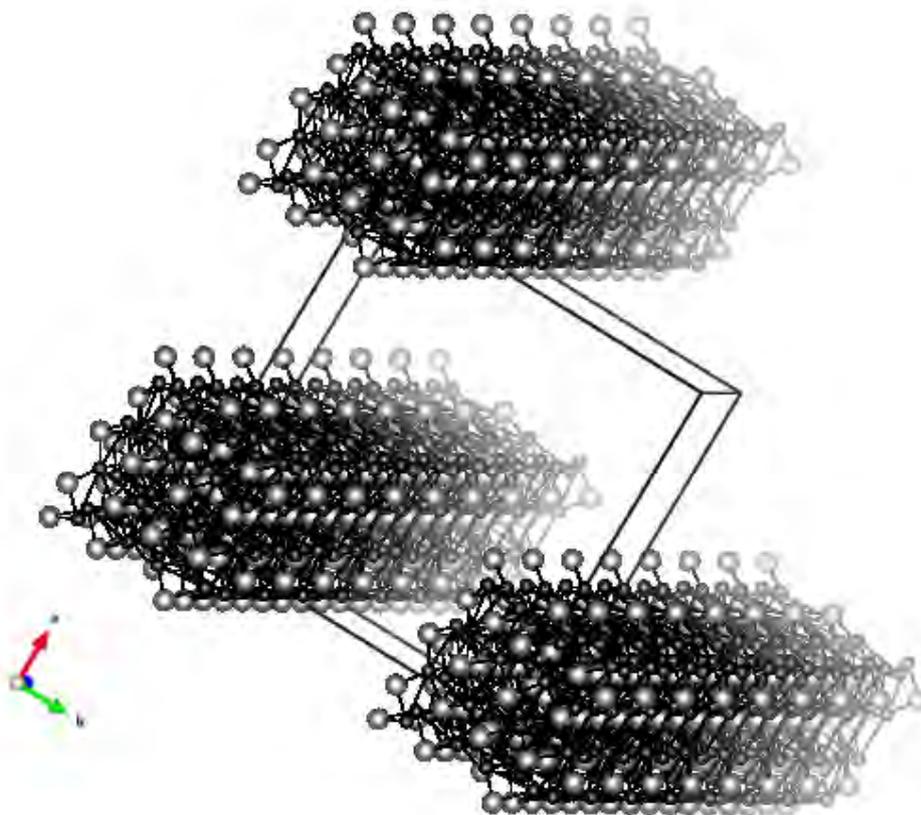


Рис. 3.3.2– изображение 1D структуры оксида иттрия

Для получения одной 1D структуры уберем две нанонити аналогично как и для 2D структуры. Получаем изображение 1D структуры оксида иттрия:

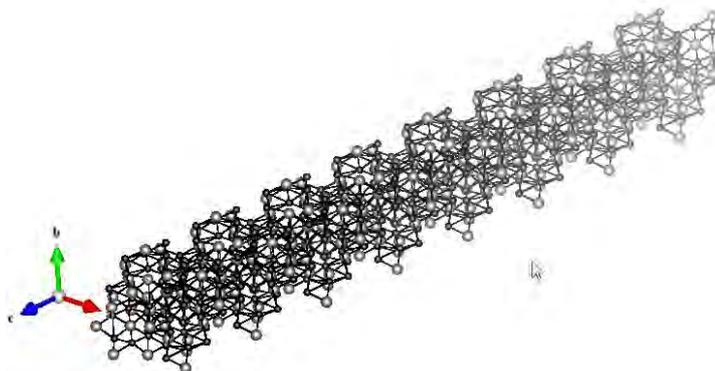


Рис. 3.3.2– изображение 1D структуры оксида иттрия

ГЛАВА 4

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ 2D СТРУКТУРЫ ОКСИДА ИТТРИЯ (Y_2O_3) С ДОБАВЛЕНИЕМ АТОМОВ ВОДОРОДА (H) НА ПОВЕРХНОСТЬ

Для построения такого рода структуры необходимо достроить элементарную ячейку по оси Z: выбираем атомы с нулевыми координатами по оси Z. Копируем и заменяем нулевые значения по оси Z единицами (программа VESTA достраивает элементарную ячейку автоматически). Затем строим 2D структуру, как описано в разделе 3.2, и добавляем атомы водорода. Количество атомов водорода на поверхности будет такое же, как и количество атомов с нулевыми значениями по оси Z. Координаты по X и Y совпадают с координатами для атомов с нулевыми значениями по оси Z. Координата Z водорода устанавливается экспериментально, в зависимости для свойств материала.

Таким образом, добавим в элементарную ячейку для 2D структуры оксида иттрия 4 атома водорода с координатами:

Таблица 4.1 – координаты атомов водорода для 2D структуры оксида иттрия

Наименование элемента	X	Y	Z
H	0.2500	0.9681	0.8500
H	0.7500	0.0319	0.8500
H	0.7500	0.5319	0.8500
H	0.2500	0.4681	0.8500

Для визуализации в VESTA открываем предварительно построенную 2D структуру оксида иттрия (см. раздел 3.2), затем переходим Edit/ Edit Data/Structure parameters. В окне Edit Data нажимаем на кнопку New и добавляем атомы водорода (см. рис. 4.1).

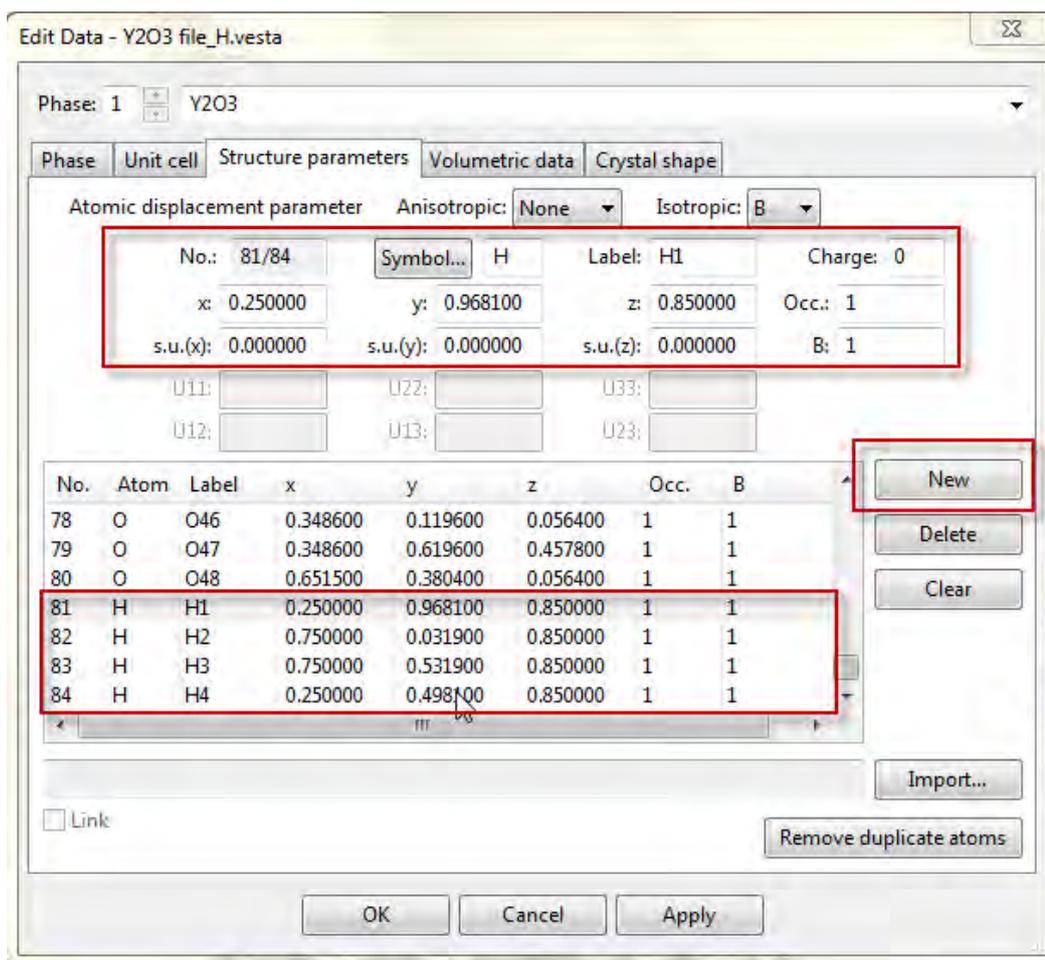


Рис. 4.1 – добавление атомов водорода

Изменяем цвет и атомный радиус водорода для лучшей визуализации. Изображение элементарной ячейки 2D структуры оксида иттрия с добавленными атомами водорода представлены на рис. 4.2:

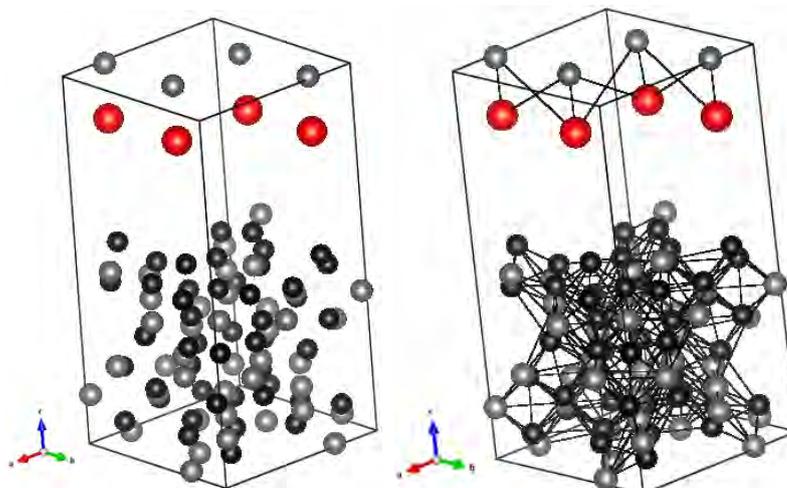


Рис.4.2– изображение элементарной ячейки 2D структуры оксида иттрия с добавлением водорода без связей и со связями

Транслируем элементарную ячейку, как и в предыдущих разделах, для получения 2D структуры в континууме (см. рис. 4.3).

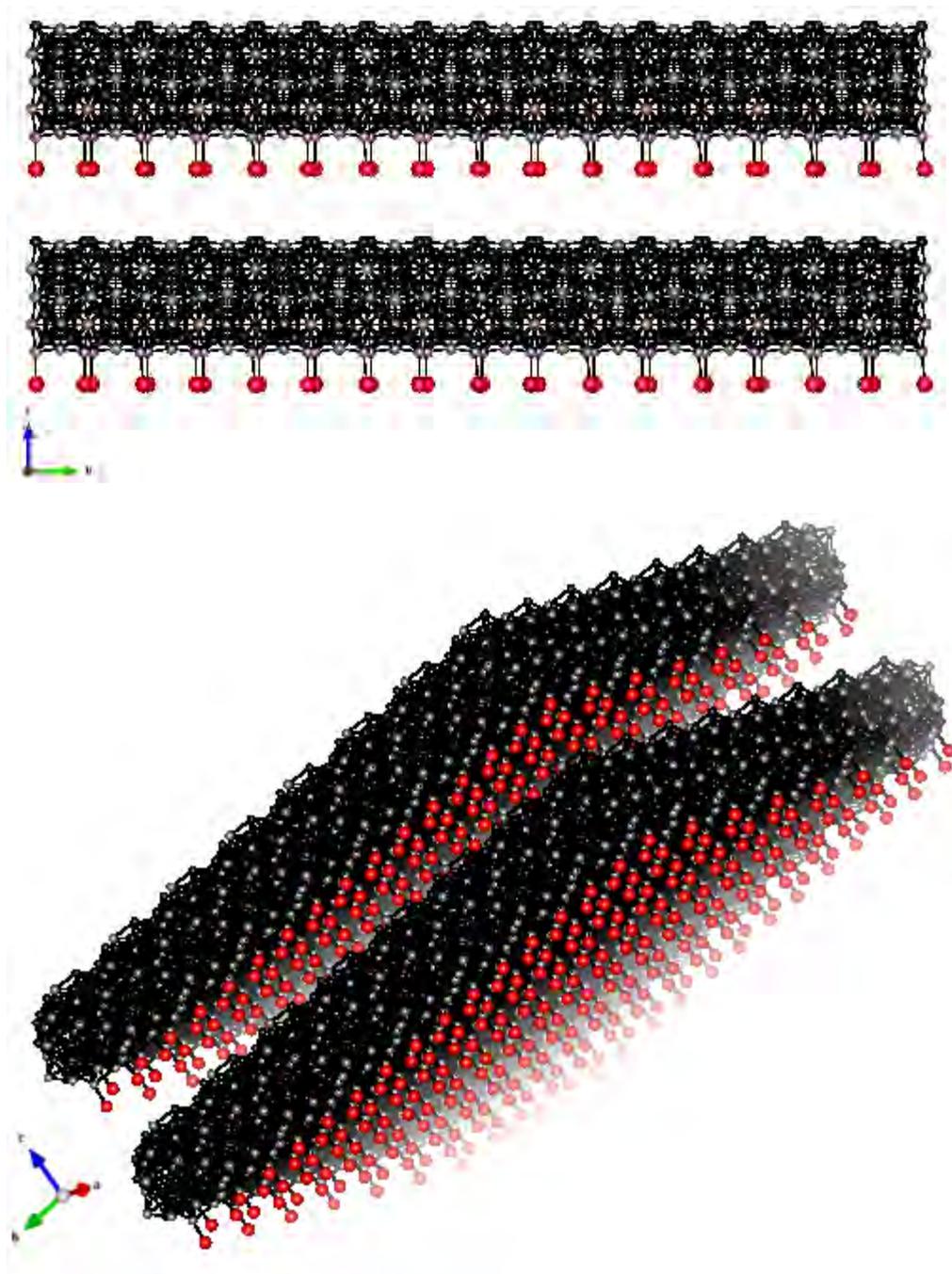


Рис. 4.3– изображение 2D структуры оксида иттрия с добавлением водорода после трансляции

После удаления верхнего слоя получаем структуру изображенную на рис. 4.4.

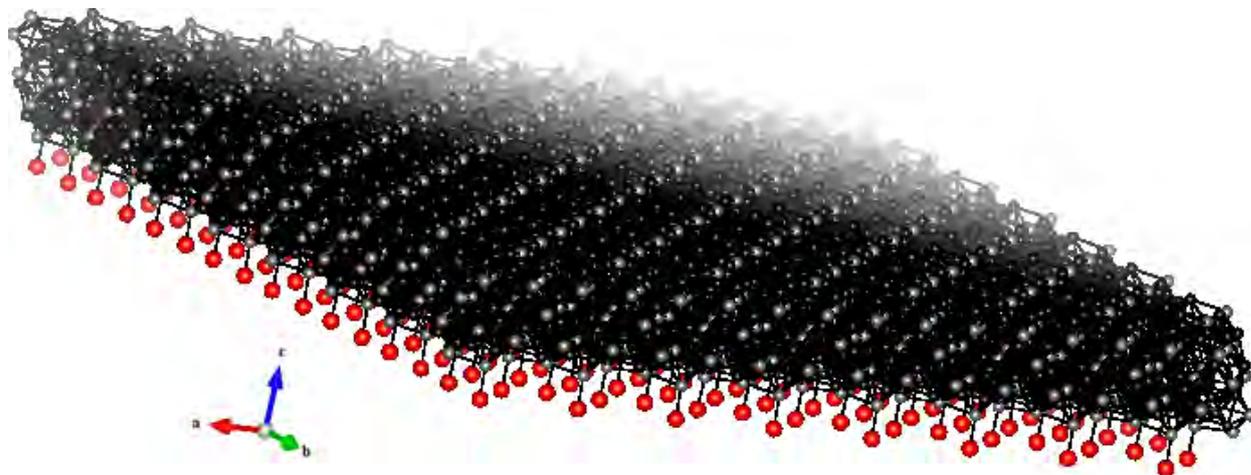


Рис. 4.4—изображение 2D структуры оксида иттрия с добавлением водорода

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Koichi Momma, Fugio Izumi, VESTA: a Three Dimensional Visualisation System for Electronic and Structural Analysis – Japan, 2011. – 1 – 8 p.
2. Takeuchi Noboru // Phys. Rev. B. – 2001. - № 63. – 245325.
3. Атомно-структурные, электронные и ферромагнитные свойства соединений типа $A^2B^4C^5_2$ / Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники; Рук. темы В.Е. Борисенко. – Минск, 2007. – 47 с.
4. Колешко В. М., Гулай А. В., Гулай В. А. Наносенсоры на основе сверхтонких пленок редкоземельных соединений // Нанотехника. — 2009. — № 1. — 45–48 с.
5. Koichi Momma, Fugio Izumi, VESTA: a Three Dimensional Visualisation System for Electronic and Structural Analysis – Japan, 2011. – 1 – 8 p.
6. Baldinozzi, G.;Berar, J.-F.;Calvarin, G., Rietveld refinement of two-phase Zr-doped Y_2O_3 // Materials Science Forum - 1998. – 278, 680-685 p.
7. Левченко, Н.В. Особенности обработки информации в системах мониторинга строительных конструкций / Н.В. Левченко, И.Ф. Мирошниченко // Новые математические методы и компьютерные технологии в проектировании, производстве и научных исследованиях: материалы XII Республиканской научной конференции студентов и аспирантов, Гомель, 16-18 марта 2009 года: в 2 ч. / Гомельский гос. ун-т им. Ф. Скорины; отв. за выпуск Е.А. Ружицкая. – Гомель, 2009. – Ч. 2. – С. 137-138.
8. Левченко, Н.В. Теоретическое изучение объемных и поверхностных свойств редкоземельных металлов / Н.В. Левченко, Е.В. Крупская // Сборник тезисов докладов конференции молодых ученых [Электронный ресурс]. - 2010. – Вып. 5: посвящен 110-годовщине со дня создания СПбГУ ИТМО. – Режим доступа : <http://fppo.ifmo.ru/kmu/kmu7/oleg-31.html>. - Дата доступа : 26.05.2011.

9. Левченко, Н.В. Моделирование электронных свойств сенсорных материалов на основе редкоземельных оксидов / Н.В. Левченко, В.М. Колешко, А.В. Гулай, В.В. Лысковский, В.А. Гулай, Е.В. Крупская // Современные информационные компьютерные технологии (mcIT) [Электронный ресурс]. – 2010. – Режим доступа : – http://data.mf.grsu.by/lib/mcit2010/Section_6/7_Koleshko.pdf – Дата доступа : 26.05.2011.
10. Левченко, Н.В. Сенсорные материалы на основе редкоземельных оксидов: моделирование электронных свойств / Н.В. Левченко, В.М. Колешко, А.В. Гулай, В.В. Лысковский, В.А. Гулай, Е.В. Крупская // XXVI Международная научно-техническая конференция «Материалы, оборудование и ресурсосберегающие технологии в машиностроении» [В печати]. – Минск, 2010.
11. Levchenko, N. Simulation of electronic properties of Y_2O_3 and MoS_2 as advanced materials for MEMS applications / N. Levchenko, O. Kozlova // VII-th International Conference PERSPECTIVE TECHNOLOGIES AND METHODS IN MEMS DESIGN (MEMSTECH) – Lviv, 2011.