



UDC 539.2:669.24

ADHESION STRENGTH OF ELECTRODEPOSITED METAL FILMS WITH METAL SUBSTRATES

Eduard Ph. Shtapenko,¹ Eugene O. Voronkov,¹ Vladimir A. Zabludovsky,¹ Valentina V. Tytarenko*,²
Violetta S. Kraeva,³ Vitalii N. Kuznetsov¹

¹Ukrainian State University of Science and Technologies, 2 Lazaryana St., Dnipro, 49010, Ukraine

²Dnipro University of Technology, 19 av. Dmytra Yavornytskoho, Dnipro, 49005, Ukraine

³Yuzhnoye State Design Office, 3 Kryvorizka St. Dnipro, 49008, Ukraine

Received 13 August 2023; accepted 13 September 2023; available online 25 October 2023

Abstract

The paper considers the adhesive strength of electrodeposited coatings of nickel, iron, copper and zinc on copper and steel substrates. To determine the theoretical values of adhesive strength, a theoretical approach to determining the adhesive strength at the metal-metal interface is proposed. Based on the analysis of the adhesion mechanism and the nature of the contact interaction, the authors obtained an analytical expression for calculating the adhesive strength values for certain pairs of metals, however, finding the exact value of a number of quantities included in this expression, for example, the specific binding energy and elastic modulus, presents great difficulties. The calculation of the energy of interaction between the atoms of the coating and the substrate was carried out by the method of density functional theory. As a result, the theoretical values of the adhesive strength of nickel, iron, copper, and zinc electrodeposited coatings on copper and steel substrates were obtained, which are in good agreement with the experimental values of the adhesive strength. However, the existing discrepancies between theoretical and experimental data are caused by certain difficulties in finding the specific binding energy and elastic modulus, which are associated with the complexity of modeling the real structure of both the film and the substrate. Finding solutions to these issues will be the subject of further research.

Keywords: bond energy; adhesive strength; electrolytic coatings; coating-substrate boundary.

АДГЕЗІЙНА МІЦНІСТЬ ЕЛЕКТРООСАДЖЕНИХ МЕТАЛЕВИХ ПЛІВОК З МЕТАЛЕВИМИ ПІДКЛАДКАМИ

Едуард П. Штапенко,¹ Євген О. Воронков,¹ Володимир О. Заблудовський,¹

Валентина В. Титаренко,² Віолетта С. Краєва,³ Віталій М. Кузнецов¹

¹Український державний університет науки і технологій, вул. Лазаряна 2, м. Дніпро, 49010, Україна

²НТУ Дніпровська політехніка, пр. Д. Яворницького 19, Дніпро, 49005, Україна

³Державне підприємство «Конструкторське бюро «Південне», вул. Криворізька 3, м. Дніпро, 49008, Україна

Анотація

У роботі розглянуто адгезійну міцність електроосаджених покриттів нікелю, заліза, міді та цинку на мідній та сталевій підкладках. Для визначення теоретичних значень адгезійної міцності запропоновано теоретичний підхід до визначення адгезійної міцності на межі метал-метал. Авторами на основі аналізу механізму адгезії і природи контактної взаємодії отримано аналітичний вираз для розрахунку значень адгезійної міцності для певних пар металів, проте знаходження точного значення ряду величин, що входять у цей вираз, наприклад, питомої енергії зв'язку та модуля пружності, становить великі труднощі. Розрахунок енергії взаємодії атомів покриття та підкладки проводили за методом теорії функціоналу густини. У результаті було отримано теоретичні значення адгезійної міцності електроосаджених покриттів нікелю, заліза, міді та цинку на мідній та сталевій підкладках, які добре узгоджуються з експериментальними значеннями адгезійної міцності. Однак, існуючі розбіжності між теоретичними та експериментальними даними викликані певними труднощами знаходження питомої енергії зв'язку та модуля пружності, які пов'язані зі складністю моделювання реальної структури як плівки, так і підкладки. Пошуки вирішення цих питань стануть предметом подальших досліджень.

Ключові слова: енергія зв'язку; адгезійна міцність; електролітичні покриття; межа покриття - підкладка.

*Corresponding author: e-mail: tytarenko.valentina@gmail.com

© 2023 Oles Honchar Dnipro National University;

doi: 10.15421/jchemtech.v31i3.285916

Вступ

Одним із головних критеріїв якості покриттів є адгезія. Дослідження взаємодії на межі покриття – підкладка є важливим завданням у покращенні технології нанесення покриттів. Це завдання не може бути вирішено без комплексного підходу, який повинен включати встановлення механізму адгезії та виявлення природи контактної взаємодії між атомами покриття з атомами підкладки [1–8]. Адгезія на межі поділу «кераміка-метал» визначає термін служби та механічні властивості металокерамічних композитів. Із-за невідповідності металевої і керамічної ґраток, їх термодинамічних і механічних властивостей, характерні слабкі межі між керамікою і металом, що обмежує широке застосування таких композитів. Авторами роботи [1] було запропоновано новий метод напилення керамічного покриття на метал з утворенням оксидного шару, який значно покращує адгезію між ними. Алмазоподібні вуглецеві плівки, які наносять на металеві деталі, мають проблему недостатньої адгезії із-за невідповідності температурного розширення, високого рівня залишкових стискуючих напруг, наявності забруднюючих речовин на межі поділу вказаних матеріалів. Ці проблеми можуть бути вирішеними шляхом попередньої обробки підкладки бомбардуванням швидких іонів [2] або лазерним текстуруванням [3]. Встановлено [4], що адгезійні властивості феніленізофталамідних покриттів, що наносяться на вуглецеві сталі, залежать від їх феритної складової. Для виявлення механізмів адгезії і деформаційної поведінки систем покриття/підкладка автори робіт досліджували багат шарові покриття CrN на високомодульній нержавіючій сталі 316L і титановому сплаві TC4 [5]; адгезію фторопластових покриттів до металевих поверхонь [6], покриттів із різних матеріалів, нанесених гіперзвуковою металізацією [7]. Автори роботи [8] розглядали аналітичні спроби передбачити вплив сил зчеплення між контактуючими тілами, що підлягають деформації. Проблеми у вирішенні завдань з покращення адгезії пов'язані також і з проблемами експериментального визначення істинного значення адгезійної міцності. Існуючі різноманітні методи визначення адгезійної міцності дають оціночну характеристику та значення, які дуже різняться [9–12]. Через велику кількість

невирішених питань проблема адгезії постійно знаходиться в полі зору не тільки експериментаторів, а й теоретиків. На даний момент існує ряд теорій, що описують адгезійні процеси [13–17]. Так, у роботі [13] адгезія наноконтактів досліджувалась з точки зору молекулярної динаміки; в роботі [14] використовували тест на адгезію лазерною ударною хвилею LaSAT, і було запропоновано атомістичне моделювання, яке дозволяє розкрити механізм адгезії; для розуміння електронних і атомістичних факторів, що впливають на адгезію і опір зсуву. Для прогнозування адгезійних властивостей у [15–17] застосовували теоретичну модель, засновану на розрахунку поверхневої енергії металів на основі термодинамічних параметрів із застосуванням теорії функціонала густини. На думку ряду дослідників, неможливість створення єдиної теорії адгезії пов'язана з різною природою взаємодії між атомами покриття та атомами підкладки на межі «метал-метал», «метал-діелектрик». Існуючі теорії та гіпотези адгезії не суперечать, а лише доповнюють одна одну. Також застосування певної теорії має бути обґрунтовано з урахуванням конкретних умов отримання покриттів та процесів, що протікають на межі покриття-підкладка. У кожному застосуванні тієї чи іншої теорії адгезії потрібен конкретний аналіз адгезійних явищ.

У даній роботі запропоновано теоретичний підхід до визначення значень адгезійної міцності на межі метал-метал та їх експериментальна перевірка для електроосаджених покриттів нікелю, заліза, міді та цинку на мідній та сталевій підкладках.

Умови експерименту та методи розрахунку

Осадження металевих плівок нікелю, міді, цинку та заліза проводили за допомогою постійного струму: уніполярним, біполярним та програмним імпульсним струмом [18]. Плівки осаджували з водних розчинів електролітів наступних складів, у г/л:

міднення – $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ – 250; H_2SO_4 – 75, pH – 0–1;

нікелювання – $\text{Ni}_2\text{SO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ – 300, H_3BO_3 – 30, $\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ – 50, pH – 5;

залізнення – $\text{FeCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ – 410–450, NaBr – 0.5, H_2SO_4 – 1.9, pH – 2–2.5;

цинкування – $\text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ – 250, Na_2SO_4 – 75, $\text{Al}(\text{SO}_4)_3$ – 30, pH – 4.

Температуру електроліта підтримували постійною і рівною 295 К. Частота імпульсів струму (f) змінювалась від 30 до 1000 Гц. Шпаруватість імпульсів струму (Q – відношення періоду до тривалості імпульсу) змінювалась від 2 до 50.

У якості підкладки для електроосадження використовували фольгу міді та сталі. Фольга для підкладок піддавались механічному та хімічному поліруванню. У якості розчину для хімічного полірування виступав 5 %-ий розчин нітратної кислоти.

У роботі для визначення адгезійної міцності використовували метод Жаке [10]. За цим методом ділянка підкладки покривалась тонким шаром струмопровідного лаку. Це забезпечувало дуже низьку адгезію покриття, отриманого на цій ділянці. Після процесу

$$W = U - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_{\text{затонн}}} \int \varphi_i^*(r) \nabla^2 \varphi_i(r) dr - \sum_K Z_K \int \frac{\rho(r)}{|r - R_K|} dr + \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r - r'|} dr dr' + E_{XC}[\rho], \quad (1)$$

де Z_K і R_K – заряд та просторові координати нерухомого ядра з номером K відповідно та електронна густина

$$\rho(r) = \sum_{i=1}^{N_{\text{затонн}}} |\varphi_i(r)|^2, \quad (2)$$

де $\varphi_i(r)$ – одноелектронна Кон-Шемівська (молекулярна) орбіталь.

У згорнутому вигляді вираз (2) має вигляд:

$$W = U + T_S \{ \varphi_i(r) \}_{i=1}^{N_{\text{затонн}}} + V_{ne}[\rho] + J[\rho] + E_{XC}[\rho]. \quad (3)$$

У правій частині рівняння (3) перший член – U – потенційна енергія взаємодії ядер, другий – T_S – описує електронну кінетичну енергію, третій – V_{ne} – тяжіння електронів до ядер, четвертий – J – класичний внесок у енергію міжелектронного відштовхування та останній внесок – E_{XC} – обмінно-кореляційний функціонал, що включає статичну електронну кореляцію.

Численні дослідження характеристик молекул та кластерів методом ТФГ [21; 22] показали хороші результати за умови правильного вибору обмінно-кореляційного функціоналу. У наявних монографіях та оглядах, наприклад [22; 23], викладено фізичні основи вибору того чи іншого функціоналу.

Як зазначено у [24; 25], найбільш задовольняючим для розрахунків структурних та термодинамічних характеристик комплексів металів є трьохпараметричний гібридний функціонал B3LYP [26–28]. У роботі [29] методом ТФГ були вивчені структура та енергетика утворення макроциклічних комплексів. Показано, що метод ТФГ з

осадження частина покриття, осажденного на лаку, відривалась і загиналась під прямим кутом, а далі виконувалось відривання основного покриття. Міцність зчеплення виражається часткою від відношення сили, що відриває або зрізує, до площі зчеплення. Товщина покриття становила 10 ± 0.2 мкм і розраховувалась теоретично з урахуванням виходу металу за струмом.

Розрахунок енергії взаємодії атомів покриття та підкладки проводили методом теорії функціоналу густини (ТФГ), яка останнім часом є одним із найпопулярніших методів розрахунку електронної структури атомів, молекул, кластерів, твердих тіл тощо. [19; 20].

У теорії функціоналу густини повна енергія (W) визначається наступним чином:

використанням гібридного функціоналу B3LYP дає точну інформацію про структурні, енергетичні та кінетичні характеристики.

Вибір базисного набору ґрунтувався на тому, що розрахунок енергетичних та термодинамічних величин проводився для металів, для яких найбільшу роль відіграє взаємодія валентних електронів. Для опису таких взаємодій використовуються валентно-розщеплені набори базових орбіталей. З них для опису взаємодії у багатоелектронних системах рекомендується базис 6-31g або розширений базис 6-31-g(d), що містить атомні орбіталі d-типу для врахування поляризації електронної густини важких металів.

Для проведення розрахунків енергій молекул у конденсованому стані [30–33] був використаний пакет програм GAUSSIAN 03 [33]. У розрахунках було обрано температуру 295 К і тиск 10^5 Па.

Результати та їх обговорення

У теоретичному підході до визначення адгезійної міцності гальванічних покриттів

необхідно враховувати високу швидкість зародкоутворення нормального росту гальванічних покриттів і, як наслідок, малий час заповнення підкладки атомами матеріалу покриття [34–36]. Крім того, проведені нами дослідження поверхонь розриву показали, що розрив здебільшого відбувається по межі плівки та підкладки. Всі ці перелічені фактори дозволили виключити з урахування дифузійну складову адгезійної міцності.

На підставі аналізу існуючих теорій адгезійної міцності і того факту, що зчеплення гальванічних покриттів здебільшого зумовлено міжатомною взаємодією між атомами покриття та підкладки, для розрахунку теоретичної адгезійної міцності ($\sigma_{адг}$) було обрано вираз

$$\sigma_{адг} = \sqrt{\frac{E_a E}{\pi h}}, \quad (4)$$

де E_a – енергія адгезії; E – модуль нормальної пружності матеріалу покриття; h – товщина покриття.

Застосування формули (4) представляє низку труднощів, і в першу чергу це складність визначення енергії адгезії. Експериментальні методи визначення енергії адгезії відсутні, а теоретичний розрахунок даної величини супроводжується великими припущеннями та наближеннями. Все це дає великий розкид у значеннях адгезійної міцності.

Ми вважаємо, що для теоретичної оцінки адгезійної міцності гальванічних покриттів у формулі (4) енергія адгезії може бути замінена питомою енергією зв'язку між атомами покриття та підкладки. Ця величина найточніше характеризує енергію зчеплення атомів покриття з атомами підкладки. В результаті формула для розрахунку теоретичної адгезійної міцності має вигляд:

$$\sigma_{адг} = \sqrt{\frac{W_{пит.зв.} E}{\pi h}}, \quad (5)$$

де $W_{пит.зв.} \frac{\Delta W}{\pi r^2}$ – питома енергія зв'язку; ΔW – енергія зв'язку, що припадає на один атом; r – радіус атома покриття. В остаточному вигляді формула для розрахунку теоретичного значення адгезійної міцності має вигляд:

$$\sigma_{адг} = \sqrt{\frac{\Delta W E}{\pi^2 r^2 h}}. \quad (6)$$

Під енергією зв'язку ми розумітимемо різницю між повною енергією кристала (W_{total}) і сумою енергій його складових частин (W_0):

$$\Delta W = W_{total} - W_0. \quad (7)$$

У розрахунках W_{total} моделювались кристалічні ґратки підкладки з атомами матеріалу покриття. Кількість атомів, що враховуються в розрахунках, варіювалась від 28 до 60 таким чином, щоб енергія взаємодії враховувалась, як мінімум, у межах трьох координаційних сфер. Застосування у розрахунках великої кількості атомів не призводило до підвищення точності розрахунків і знаходилось в межах похибки методу.

У таблиці наведені необхідні для розрахунку константи – теоретичні, отримані за формулою (6), та експериментальні, визначені методом Жаке, а також значення адгезійної міцності. Експериментальні значення наведені тільки для покриттів товщиною 10 мкм, для покриттів товщиною 1 мкм визначення адгезійної міцності експериментальним методом неможливе в рамках даного методу.

Table

Adhesion strength of electrodeposited coatings

Таблиця

Адгезійна міцність електроосаджених покриттів							
Матеріал підкладки	Матеріал покриття	$r_{ат}$, пм	E, ГПа	ΔW , еВ/ат	h, мкм	$\sigma_{адг}$, МПа	
						Теор	Експ
Cu	Ni	124	210	2.1	1	680	---
					10	220	200-600
	Zn	138	120	1.8	1	430	---
					10	140	120-370
	Fe	126	190	1.1	1	460	---
					10	150	100-170
Сталь	Ni	124	210	1.8	1	630	---
					10	200	125-275
	Zn	138	120	1.5	1	390	---
					10	120	100-170
	Cu	128	110	1.7	1	430	---
					10	140	70-175

З таблиці видно, що теоретичні значення, розраховані за формулою (6), узгоджуються з експериментальними значеннями адгезійної міцності електроосаджених покриттів. Розкид експериментальних значень адгезійної міцності пов'язаний з різними умовами осадження, хоча в процесі отримання кожного окремо взятого покриття основні параметри осадження (склад електроліту, середня густина струму) залишались постійними у процесі осадження. Зміни частоти та шпаруватості слідування імпульсів струму значно впливають на адгезійну міцність. На даний момент підвищення точності розрахунку, в першу чергу, енергії зв'язку, пов'язане з труднощами моделювання структури підкладок, особливо сталевих та інших багатокомпонентних систем. У наших розрахунках у моделюванні структури сталеві підкладки крім атомів заліза враховувалась лише наявність атомів вуглецю, в той час як реальні сталеві підкладки, які використовувались для електроосадження, мали більше компонентів у складі. Такі системи на даний момент є дуже важким завданням для їх моделювання. Так, наприклад, зміни положення атома вуглецю

сильно впливає на енергію зв'язку. Тому визначали середнє значення енергії зв'язку для сталевих підкладок за різних положень атома вуглецю. Наявність інших атомів, які входять до складу сталевих підкладок, не було враховано.

Висновки

Запропонований метод розрахунку значення адгезійної міцності, що базується на енергії взаємодії атомів покриття з атомами підкладки, показує задовільні результати з експериментальними значеннями, особливо для підкладок із чистого металу.

Для підкладок, які представляють бінарні сплави або більш складні сполуки, основна проблема полягає у визначенні енергії зв'язку, зокрема, у побудові моделі підкладки, знаходженні геометричного місця розташування атомів і атомів покриття. Пошуки вирішення цих питань стануть предметом наших подальших досліджень.

Подяка

Дана робота виконана у рамках НДР «Адгезійна міцність гальванічних покриттів», № держ. реєстрації 0121U113278.

References

- [1] Qiaolei, L., Peng S., Kaiyue L., Weifan H., Wenhao D., Taihong H. (2018). Enhanced interface adhesion by in-situ oxidation within metal-ceramic coatings. *Ceramics International*, 44(18), 23273–23278. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2018.08.332>
- [2] Santiago, J. A., Fernández-Martínez, I., Wennberg, A., Molina-Aldareguia, J. M., Castillo-Rodríguez, M., Rojas, T. C., Sánchez-López, J. C., González, M. U., García-Martín, J. M. (2018) Adhesion enhancement of DLC hard coatings by HiPIMS metal ion etching pretreatment. *Surface and Coatings Technology*, 349, 787–796. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2018.04.090>
- [3] Kedong, Z., Chuang, Z., Haishan, L., Bangzhu, D., Xuhong, G., Yayun, L. (2022). Study on the substrate surface micro-texturing/carburizing regulating the film-substrate adhesion and wear behavior of DLC coatings. *Diamond Relat. Mater.*, 130, 109535. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2022.109535>
- [4] Klymenko, A., Sytar, V., Kolesnyk, I. (2014). Adhesion of poly (m-, p-phenylene isophthalamide) coatings to metal substrates. *Prog. Org. Coat.* 77(11), 1597–1602. <https://doi.org/10.1016/j.porgcoat.2014.04.028>
- [5] Shuai, X., Zhuo, Z., Yanwen, Z., Dongxu, C., Kaice, Z., Tong, L., Yangtao, Z., Aihuai, W. (2023). Interface feature via key factor on adhesion of CrN multilayer and alloy substrate. *Applied Surface Science*, 630, 157492. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2023.157492>
- [6] Oleksandrenko, V.P., Sviderskyj, V.P., Kyrychenko, L. M., Jefimenko, V. V. (2021). Vplyv skladu i tekhnologichnykh faktoriv na adgheziynu micnistj ftoroplastovykh pokryttiv do metalevykh poverkhonj. *Visnyk Khmeljnyckogho nacionaljnogho universytetu*, 301(5), 45–51. <https://doi.org/10.31891/2307-5732-2021-301-5-45-51>
- [7] Ciavarella, M., Joe, J., Papangelo, A., Barber, J. R. (2019). The role of adhesion in contact mechanics. *Journal of the royal society interface*, 16(151). <https://doi.org/10.1098/rsif.2018.0738>
- [8] Panteleenko, F.I., Karpets, M.N., Belotserkovsky, M.A., Sosnovsky, A.V. (2021). Determination of Adhesive and Cohesive Strength in Metal Coatings Deposited by Hypersonic Metallization. *Science & Technique*, 20(6), 459–464. <https://doi.org/10.21122/2227-1031-2021-20-6-459-464>
- [9] Escobar Galindo, R., Veen, A. van, Schut, H., Janssen, G. C. A. M., Hoy, R., de Hosson, J. Th. M. (2005). Adhesion behaviour of CrNx coatings on pre-treated metal substrates studied in situ by PBA and ESEM after annealing. *Surface and Coatings Technology*, 199(1), 57–65. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2005.04.018>
- [10] Yudhanto, A., Li, X., Tao, R., Melentiev, R., Lubineau, G. (2023). Identifying adhesion characteristics of metal-polymer interfaces: Recent advances in the case of electroplated acrylonitrile butadiene styrene. *Mater. Today Commun.*, 35, 1–10. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2023.106218>
- [11] Watanabe, Y., Fujisawa, S., Yonezu, A., Chen, X. (2016). Quantitative evaluation of adhesion quality of surface coating by using pulse laser-induced ultrasonic waves. *Surface and Coatings Technology*, 286, 231–238. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2015.12.026>
- [12] Pedrolli, O., Nadimi, S., Maramizonouz, S., Achiaga Menor, B., López, A. (2023). Kinetic adhesion test to determine particle surface energy. *HardwareX*, 14, e00437. <https://doi.org/10.1016/j.ohx.2023.e00437>

- [13] González-Tortuero, S., Garrido, M. A., Rodríguez, J. (2023). An adhesion study in Ni and Cu nanocontacts from a molecular dynamics perspective. *European Journal of Mechanics - A Solids*, 99, 104942. <https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2023.104942>
- [14] Yasuda, S., Miyagawa, T., Yonezu, A., Ishibashi, K. (2023). Laser shock-wave adhesion test (LaSAT) and ab initio calculations for adhesive strength evaluation of thin metallic films. *Mater. Today Commun.*, 35, 106237. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2023.106237>
- [15] Miraz, A. S. M., Sun, S., Shao, S., Meng, W. J., Ramachandran, B. R., Wick, C. D. (2019). Computational study of metal/ceramic interfacial adhesion and barriers to shear displacement. *Comput. Mater. Sci.*, 168, 104–115. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.06.006>
- [16] Chen, L. H., Rigney, D. A. (1990). Adhesion theories of transfer and wear during sliding of metals. *Wear*, 136(2), 223–235. [https://doi.org/10.1016/0043-1648\(90\)90148-4](https://doi.org/10.1016/0043-1648(90)90148-4)
- [17] Roman, T., Agerico Diño, W., Nakanishi, H., Kasai, H., Miyako, Y., Naritomi, M. (2004). PPS-metal adhesion: a density functional theory-based study. *Solid State Commun.*, 132(6), 405–408. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2004.07.073>
- [18] Zabludovsky, V. A., Shtapenko, E. Ph., Gribok, V. S., Ganitsh, R. Ph., Gulivets, A. N., Gadgilov, M. V. (2000). The Application of Program-Controlled Pulsed Current for Obtaining Metallic Coatings with Specific Properties. *Trans. IMF*, 78(3), 110–112. <https://doi.org/10.1080/00202967.2000.11871320>
- [19] Parr, R. G., Yang Density, W. (1989). *Functional Theory of Atoms and Molecules*. Oxford University Press, N. Y. <https://doi.org/10.1002/qua.560470107>
- [20] Fatima, Y. L., Sara, A. T., Luis, A. R. P., Wenjie, X., Chapter, O. (2023). Electronic structure and density functional theory. *Fundamentals of Multiscale Modeling of Structural Materials*, 3–35. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-823021-3.00007-5>
- [21] Mei, G., Bhattacharya, S., Yacout, A. M. (2019). Adhesion of ZrN and Al₂O₃ coatings on U metal from first-principles. *Applied Surface Science*, 473, 121–126. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2018.12.111>
- [22] Jia, Z., Zhao, X., Zhang, G., Kang, Y., Xu, H., Zhao, Z. (2022). A comparable study of Fe/Cu interfaces by first-principles method: The surface energy, work of adhesion and electronic structures. *Physica B: Condensed Matter*, 646, 414348. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2022.414348>
- [23] Alexei, V., Arbuznikov, Martin Kaupp. (2007). Local hybrid exchange-correlation functionals based on the dimensionless density gradient. *Chem. Phys. Lett.*, 440(1-3), 160–168. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2007.04.020>
- [24] Matczak, P. (2012). Assessment of B3LYP combined with various ECP basis sets for systems containing Pd, Sn, and Pb. *Computational and Theoretical Chemistry*, 983, 25–30. <https://doi.org/10.1016/j.comptc.2011.12.023>
- [25] Schreckenbach, G., Hay, P. J., Martin, R. L. (1999). Density Functional Calculations on Actinide Compounds. Survey of Recent Progress and Application to [UO₂X₄]₂ – (X = F, Cl, OH) and AnF₆ (An = U, Np, Pu). *J. Comput. Chem.*, 20, 70. [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1096-987X\(19990115\)20:1<70::AID-JCC9>3.0.CO;2-F](https://doi.org/10.1002/(SICI)1096-987X(19990115)20:1<70::AID-JCC9>3.0.CO;2-F)
- [26] Claude, N. N. S., Jean, M. O., Idrice, A. A., Désiré, B. M. (2023). Mononuclear half-sandwich nd7 metallo drug complexes based on bidentate N₂N dendritic scaffolds: DFT (B3LYP; BP86 and B3PW91) examination. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 120, 108417. <https://doi.org/10.1016/j.jmgm.2023.108417>
- [27] Lee, C., Yang, W., Parr, R. G. (1988). Development of the Colle – Salvetti correlation – energy formula into a functional of the electron density. *Phys. Rev. B*, 37, 785. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.37.785>
- [28] Miehlich, B., Savin, A., Stoll, H., Preuss, H. (1989). Results obtained with the correlation – energy density functionals of Becke and Lee, Yang and Parr. *Chem. Phys. Lett.*, 157, 200. [https://doi.org/10.1016/0009-2614\(89\)87234-3](https://doi.org/10.1016/0009-2614(89)87234-3)
- [29] Keire, D. A., Jang, Y. H., Lin, L., Dasgupta, S., Goddard, W. A., Shively, J. E. (2001). Chelators for Radioimmunotherapy. *Inorg. Chem.*, 17(40), 4310. <https://doi.org/10.1021/ic00235a031>
- [30] Kraiev, M., Voronkov, E., Kraieva, V. (2021). Calculation of energy and magnetic susceptibility of Fe atomic system during dislocation motion in magnetic field. *Multidiscip. Model. Mater. Struct.*, 17(6), 1183–1192. <https://doi.org/10.1108/MMMS-02-2021-0026>
- [31] Tytarenko, V. V., Shtapenko, E. Ph., Voronkov, E. O., Zabludovsky, V. A., Kolodziejczyk, W., Kapusta, K., Kuznetsov, V. N. (2021). Quantum mechanical modeling of the interaction of carbon nanostructures with metal ions. *J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech.*, 15(4), 866–871. <https://doi.org/10.1134/S102745102104039X>
- [32] Shalashilin, D. V., Makhov, D. V. (2022). Gaussian Wave Packet and Coherent State Based Methods in Chemical Quantum Dynamics. *Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering*. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-821978-2.00026-X>
- [33] Tang, Z., Gui, X., Fei, W. (2011). Utilization of Molecular Simulation Software Gaussian 03 to Design Absorbent for CO₂ Capture. *Procedia Eng.*, 12, 87–92. <https://doi.org/10.1016/j.proeng.2011.05.015>
- [34] Shtapenko, E. P., Zabludovsky, V. O., Tytarenko, V. V., Kraeva, V. S., Afanasov, A. M. (2019). Formation of layered structure in films of nickel at electrodeposition by a pulse current. *Metallofizika i Noveishie Tekhnologii*. 1(41), 27. <https://doi.org/10.15407/mfint.41.01.0027>
- [35] Shtapenko, E. F., Zabludovsky, V. A., Tytarenko, V. V. (2018). Diffusion at the Film-Substrate Interface during Nickel Electrocrystallization on a Copper Substrate. *J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech.*, 2(12), 377. <https://doi.org/10.1134/S1027451018020362>
- [36] Tytarenko, V. V., Zabludovsky, V. A., Shtapenko, E. Ph., Tytarenko, I. V. (2022). Kinetic regularities of the formation of composite electrolytic coatings containing ultradispersed diamond particles. *Physics and Chemistry of Solid State*, 23(3), 461–467. <https://doi.org/10.15330/pcss.23.3.461-467>