1. В журнале публикуются статьи о полупроводниковых приборах на базе новых физических принципов, таких как квантовые размерные эффекты и сверхпроводимость. Данное направление исследований охватывает гетероструктуры, нанотранзисторы и полупроводниковые реализации квантовых битов (кубитов).

2. Фамилии авторов статьи располагаются в алфавитном порядке, инициалы ставятся перед фамилией. (Сведения об авторах с указанием имени, отчества, почтового домашнего адреса, места работы и телефонов (каждого из соавторов), а также адреса электронной почты, по которому будет выслана корректура, помещаются дополнительно на отдельной странице после текста статьи и фигур).

3. Статья должна быть представлена в электронном виде (Word– шрифт № 14 Times New Roman), формулы должны быть отделены от текста бóльшим интервалом и напечатаны более свободно, чем основной текст.

4. “Шапка” статьи (и, по желанию, ее перевод в конце статьи) должны быть оформлены по единому стандарту. Вся информация об авторах размещается в “шапке” статьи.

а) Ссылки на места работы авторов латинскими буквами: a, b, c и т.д.;

б) Ссылки на электронные адреса: \*, \*\* и т.д.

**Образец оформления шапки приведен ниже:**

УДК 0000

Ab initio МОДЕЛИРОВАНИЕ АДСОРБЦИИ ЗОЛОТА НА ПОВЕРХНОСТЬ ДЕФЕКТНОГО ГРАФЕНА

© 2023 г. М. М. Асадов1, 2, \*, С. О. Маммадова3, С. С. Гусейнова3, С. Н. Мустафаева3, В. Ф. Лукичев4,

\*\*1Институт катализа и неорганической химии им. М.Ф. Hагиева Национальной академии наук Азербайджана, пр. Г. Джавида, 113, Баку, AZ-1143 Азербайджан

2Научно-исследовательский институт геотехнологических проблем нефти, газа и химия, пр. Азадлыг, 20, Баку, AZ-1010 Азербайджан

3Институт физики Национальной академии наук Азербайджана, пр. Г. Джавида, 131, Баку, AZ-1143 Азербайджан

4Физико-технологический институт им. К.А. Валиева Российской академии наук, Нахимовский просп., 36, корп. 1, Москва, 117218 Россия

\*E-mail:
\*\*E-mail:

Поступила в редакцию 01.01.2022 г.
После доработки 01.01.2022 г.
Принята к публикации 01.01.2022 г.

Представлены результаты теоретического исследования локальных структурных изменений и адсорбционных характеристик поверхности графена в присутствии комплекса “вакансия + адатом Auads”. На основе теории функционала плотности (DFT) рассчитаны адсорбционные свойства на поверхности графеновых суперъячеек, содержащих 50 атомов углерода с вакансиями (GP(Auads), GPV(Auads).Определена наиболее стабильная конфигурация суперъячеек GPV(Auads) с комплексом “вакансия + адатом Auads”. Рассчитано влияние адатома Auads на зонную структуру и локальный магнитный момент в GPV(Auads). Анализ данных проводился на основе равновесной атомной конфигурации GPV(Auads), локальной плотности электронных состояний и спиновой поляризации. Расчеты проводились с использованием обменно-корреляционного функционала в приближении локальной электронной спиновой плотности (LSDA).

Ключевые слова: графен, вакансия, адсорбция атома золота, DFT LSDA, магнитный момент.

5. Все материалы статьи – текст, подстрочные примечания, литература печатаются через 1.5 интервала. Там, где впервые в тексте встречается ссылка на рисунок, необходимо сделать отметку на полях или выделить цветом. Нумерация рисунков последовательная цифровая, независимо от их количества в тексте. Так же оформляются ссылки на таблицы. В заголовках таблиц следует пользоваться обозначениями. Таблицы и список цитируемой литературы следует печатать на отдельных от текста страницах

Формулы нумеруются по порядку, сквозной нумерацией через всю статью. Точки в конце формул не ставятся.

6. Статья должна состоять из пронумерованных разделов, включая введение. Заключение не нумеруется. После заключения указываются благодарности, отсутствие конфликта интересов и ссылки на финансирование. Литература приводится по порядку цитирования в конце статьи с указанием фамилии и инициалов автора, полного названия книги (статьи), издательства, названия журнала полностью (год, том, номер, номера страниц; в тексте должны быть ссылки в квадратных скобках: [1], [2, 3] и т.д. Ссылки на иностранные источники даются обязательно на языке оригинала.

**Технические требования:**

1. Иллюстрационный материал прилагается на отдельных страницах. Графики должны быть пригодными для прямого воспроизведения; необходимо тщательно следить за точным соответствием обозначений в тексте и на рисунках.

2. Подрисуночные подписи должны быть на русском языке и даны на отдельной странице списком.

3. Иллюстрации должны иметь размеры, соответствующие их информативности.

4. В случае изменения размера иллюстрации на процессе внесения редакционной правки, текст уменьшается пропорционально всему изображению.

5. Если иллюстрация состоит из нескольких изображений (графиков), то каждое из этих изображений (графиков) обозначается буквами кириллического алфавита, заключенными в скобки – (а), (б), и т.д., шрифтом 10 pt, по центру каждого изображения (графика).

6. Точка не ставится после размерностей (с – секунда, г – грамм, мин – минута, сут – сутки, град – градус) и некоторых числительных (млн миллион, млрд – миллиард, трлн – триллион).

7. К статье должны прилагаться файлы с рисунками в одном из форматов: eps, tiff, jpg, bmp, ppt, png.