

НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ

**«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
імені ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»**

**НН Інститут матеріалознавства та зварювання імені Є.О. Патона
Кафедра високотемпературних матеріалів та порошкової металургії**

«На правах рукопису»
УДК _____

«До захисту допущено»
Завідувач кафедри
_____ Богомол Ю.І.
«___» _____ 20__ р.

Магістерська дисертація

за освітньо-професійною програмою

Нанотехнології та комп'ютерний дизайн матеріалів

зі спеціальності 132 Матеріалознавство

на тему: Атомістична комп'ютерна розробка надтвердого матеріалу на основі
легованого алюмінієм карбиду бору

Виконав: магістрант II курсу, групи ФН-21мп

Білий Владислав Олегович _____

Науковий керівник професор, д.ф.-м.н. Зауличний Я.В. _____

Консультант з експериментальної частини, к.х.н. Васільєв О.О. _____

Консультант з розділу охорона праці та

безпека в надзвичайних ситуаціях

професор, д.е.н. Левченко О.Г. _____

Консультант з організаційного-економічного розділу

доцент, к.е.н. Нараєвський С.В. _____

Консультант з нормоконтролю доцент, к. т. н. Троснікова І. Ю. _____

Рецензент професор, д.ф.-м.н. Карпець М. В. _____

Засвідчую, що у цій дипломній роботі немає
запозичень з праць інших авторів без
відповідних посилань.

Магістрант _____

Київ – 2024 року

Національний технічний університет України

«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

ІНІІ інститут	Матеріалознавства та зварювання імені Є.О. Патона
Кафедра	Високотемпературних матеріалів та порошкової металургії
Рівень вищої освіти	другий (магістерський)
Спеціальність	132 Матеріалознавство
Освітньо- професійна програма	Нанотехнології та комп'ютерний дизайн матеріалів

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри

_____ Ю.І. Богомол

«__» _____ 20__ р.

ЗАВДАННЯ

на магістерську дисертацію магістранту

Білому Владиславу Олеговичу

1. Тема роботи «Атомістична комп'ютерна розробка надтвердого матеріалу на основі легованого алюмінієм карбїду бору»,

Науковий керівник дисертації: д.ф-м.н., професор Зауличний Ярослав Васильович,

затверджені наказом по університету від 08.11.2023 р. № 5195-с

2. Термін подання студентом роботи 4.01.2023 р.

3. Об'єкт дослідження: легований алюмінієм карбід бору.
4. Предмет дослідження: стабільність різних атомних конфігурацій карбіду бору, легованого алюмінієм та поведінка найбільш стабільних атомних конфігурацій.
5. Перелік завдань, які потрібно розробити:
 - а) проаналізувати літературу і визначити місця найбільш імовірного розташування алюмінію в карбіді бору;
 - б) провести підбір параметрів для проведення моделювання із перших принципів;
 - в) оцінити стабільність різних атомних конфігурацій карбіду бору, легованого алюмінієм та визначити найбільш стабільну;
 - г) отримати розподіл інтенсивності для рентгенівського аналізу найбільш стабільної атомної конфігурації;
 - д) розрахувати значення пружних модулів;
 - е) адаптувати методики комп'ютерного моделювання одновісного стику [1], для пакета програм Quantum Espresso, результат апробувати на карбіді бору;
 - ж) для найбільш стабільної конфігурації легованого алюмінієм карбіду бору провести комп'ютерне моделювання одновісного стику;
 - и) визначити шкідливі та небезпечні виробничі фактори;
 - к) розробити заходи для попередження впливу шкідливих та небезпечних виробничих факторів;
 - л) провести розрахунок кількості електроенергії, необхідної для проведення експериментальної частини;
 - м) обґрунтувати необхідну кількість робітників, розмір фонду їх заробітної плати, визначити показники продуктивності праці;
 - н) довести ефективність дисертації та розробити стартап-проект.
6. Орієнтовний перелік ілюстративного матеріалу:
 - методи дослідження легованого алюмінієм карбіду бору;

- приклади вхідних та вихідних файлів програм;
- візуалізація елементарних комірок легованого алюмінієм та чистого карбїду бору;
- візуалізація елементарних комірок графіту, β -бору та ГЦК алюмінію;
- візуалізація суперкомірок до та після комп'ютерного моделювання одновісного стиску легованого алюмінієм та чистого карбїду бору.

7. Орієнтовний перелік публікацій: за результатами магістерської дисертації опубліковано 3 доповіді (тези) на конференціях і 1 статтю у фаховому виданні.

8. Консультанти розділів роботи

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		завдання видав	завдання прийняв
Охорона праці та безпека в надзвичайних ситуаціях	професор, д.е.н. Левченко О.Г.		
Організаційно-економічний розділ	доцент к.е.н. Нараєвський С.В.		

9. Дата видачі завдання 1.09.2023 р.

КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№ з/п	Назва етапів виконання дипломної роботи	Термін виконання етапів роботи	Примітка
1	Аналіз літератури	25.09.23	
2	Підбір параметрів розрахунку	03.10.23	
3	Визначення найстабільнішої конфігурації карбіду бору, легованого алюмінієм	17.10.23	
4	Отримання рентгенівський дифракційний спектр	19.10.23	
5	Розрахунок значень пружних модулів	26.10.23	
6	Адаптація методик комп'ютерного моделювання одновісного стику, для пакета програм Quantum Espresso	15.11.23	
7	Проведення комп'ютерного моделювання одновісного стику	10.12.23	
8	Розробка розділу охорони праці та безпеки в надзвичайних ситуаціях	17.12.23	
9	Розрахунок енергетичного розділу	19.12.23	
10	Розробка організаційно-економічного розділу	26.12.23	
11	Розробка стартап-проєкту	02.01.24	
12	Оформлення пояснювальної записки та графічного матеріалу	04.01.24	

Магістр

Владислав БІЛИЙ

Науковий керівник дисертації

Ярослав ЗАУЛИЧНИЙ

РЕФЕРАТ

Магістерська дисертація вміщує: 123 сторінки, 40 рисунків, 39 таблиць, 77 джерел, 3 додатки.

АТОМІСТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ, АМОРФІЗАЦІЯ, ЕНЕРГІЯ УТВОРЕННЯ, КАРБІД БОРУ, КЕРАМІКА, ПСЕВДОПОТЕНЦІАЛ, САМОУЗГОДЖЕНИЙ РОЗРАХУНОК ПОЛЯ, ТЕОРІЯ ФУНКЦІОНАЛА ГУСТИНИ.

Метою магістерської дисертації є встановлення найбільш стабільної структурної конфігурації легованого алюмінієм карбіду бору та з'ясування її поведінки за одновісного стиску вздовж міжкосаедричного ланцюга шляхом комп'ютерного моделювання.

Об'єкт дослідження – легований алюмінієм карбід бору.

Предмет дослідження – стабільність різних атомних конфігурацій карбіду бору, легованого алюмінієм та поведінка найбільш стабільної.

Методи дослідження. Створення вихідних структур, контроль розрахунку та аналіз результатів вівся в Jupyter Notebook за допомогою бібліотек Python Atomic Simulation Environment, matplotlib, pandas та власних підпрограм. Для моделювання поведінки матеріалів використовувався пакет програм Quantum Espresso. Для генерації рентгенівських дифракційних картин використовувалась Python бібліотека pymatgen.

Результатами комп'ютерного моделювання показано, що при легуванні алюмінієм карбіду бору атоми Al займають положення у середині міжкосаедричного ланцюга зі зміною його конфігурації на кутову $(B_{12})C^{Al}C$. Також можливими, але суттєво менш імовірними є наступні атомні конфігурації: $(B_{11}C_p)C^{Al}C_l$, $(B_{11}C_p)C^{Al}C_m$, $(B_{11}Al_p)C-B-C$.

Було отримано рентгенівський дифракційний спектр для $(B_{12})C^{Al}C$.

Розраховано значення пружних модулів в полікристалічному наближенні для $(B_{12})C^{Al}C$, зокрема $K = 235.730$ ГПа, $E = 480.706$ ГПа та $G = 207.177$ ГПа.

Розраховане значення максимального напруження та максимальної пружної одновісної деформації вздовж міжкосаедричного ланцюга для $(B_{12})C^{Al}C/(B_{12})C-C-C$ становлять 94/161 ГПа та 0.17/0.24 відповідно. Після початкового падіння напруження $(B_{12})C^{Al}C$ стабілізується, що свідчить про утворення фази, що має свій запас міцності.

ABSTRACT

Master's thesis includes: 123 pages, 40 figures, 39 tables, 77 sources, 3 appendices.

ATOMISTIC MODELING, AMORPHIZATION, FORMATION ENERGY, BORON CARBIDE, CERAMICS, PSEUDOPOTENTIAL, SELF-CONSISTENT FIELD CALCULATION, DENSITY FUNCTIONAL THEORY.

The purpose of the master's thesis is to establish the most stable structural configuration of aluminum-doped boron carbide and to find out its behavior under uniaxial compression along the intercosahedral chain by computer modeling.

The object of study is aluminum-doped boron carbide.

The subject of the study is the stability of different atomic configurations of aluminum-doped boron carbide and the behavior of the most stable one.

Research methods. The creation of initial structures, calculation control, and analysis of the results were carried out in Jupyter Notebook using the Python Atomic Simulation Environment, matplotlib, pandas, and our own subroutines. The Quantum Espresso software package was used to model the behavior of materials. The pymatgen Python library was used to generate X-ray diffraction patterns.

The results of computer modeling show that when boron carbide is alloyed with aluminum, Al atoms occupy a position in the middle of the intercosahedral chain with a change in its configuration to the angular $(B_{12})C^{\wedge}Al^{\wedge}C$. The following atomic configurations are also possible, but much less likely: $(B_{11}C_p)C^{\wedge}Al^{\wedge}C_l$, $(B_{11}C_p)C^{\wedge}Al^{\wedge}C_m$, $(B_{11}Al_p)C-B-C$.

The X-ray diffraction spectrum for $(B_{12})C^{\wedge}Al^{\wedge}C$ was obtained.

The values of elastic moduli in the polycrystalline approximation for $(B_{12})C^{\wedge}Al^{\wedge}C$ were calculated, in particular, $K = 235.730$ GPa, $E = 480.706$ GPa, and $G = 207.177$ GPa.

The calculated values of the maximum stress and the maximum elastic uniaxial strain along the intercosahedral chain for $(B_{12})C^{\wedge}Al^{\wedge}C/(B_{12})C-C-C$ are 94/161 GPa and 0.17/0.24, respectively. After the initial stress drop, $(B_{12})C^{\wedge}Al^{\wedge}C$ stabilizes, indicating the formation of a phase with its own safety margin.

ЗМІСТ

ВСТУП.....	13
1 ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД.....	15
1.1 Атомно-кристалічна будова карбіду бору.....	15
1.1.1 Структурні елементи.....	15
1.1.2 Структурні політипи карбіду бору.....	17
1.1.3 Кристалічна структура.....	18
1.1.4 Хімічні зв'язки.....	20
1.2 Властивості карбіду бора.....	21
1.2.1 Густина.....	21
1.2.2 Механічні властивості.....	22
1.2.3 Хімічні властивості.....	25
1.2.4 Електричні властивості.....	26
1.2.5 Ядерні властивості.....	28
1.2.6 Ударні властивості.....	29
1.3 Висновки.....	30
2 МАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ.....	31
2.1 Вхідні дані: атомні конфігурації.....	31
2.2 Управління даними та їх аналіз.....	32
2.3 Моделювання поведінки матеріалів за допомогою квантово-механічних підходів: теорія функціонала електронної густини.....	33
2.4 Quantum Espresso.....	35
2.4.1 Самоузгоджений розрахунок поля.....	35
2.4.2 Оптимізація структури.....	38
2.5 Підбір параметрів SCF розрахунку та тестування різних наборів псевдопотенціалів.....	41
2.5.1 Попередній вибір наборів псевдопотенціалів.....	42
2.5.2 Визначення оптимальних параметрів SCF розрахунку.....	43
2.5.3 Тестування на простіших системах.....	45
2.6 Енергія утворення (Ентальпія утворення).....	45
2.7 Адаптація методики комп'ютерного моделювання одновісного стиску для пакета програм Quantum Espresso.....	46
3 РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕНЬ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ.....	50
3.1 Вихідні атомні конфігурації.....	50
3.1.1 Карбід бору.....	50
3.1.2 Вуглець.....	50
3.1.3 Бор.....	51

3.1.4	Алюміній.....	51
3.1.5	Моделювання карбіду бору легованого алюмінієм.....	52
3.2	Підбір параметрів SCF розрахунку.....	53
3.3	Визначення найбільш імовірного основного стану карбіду бору, легованого алюмінієм.....	55
3.3.1	Оптимізація структури.....	55
3.3.2	Уточнення положення Al в структурах, що мають кутову конфігурацію ланцюга.....	58
3.3.2.1	(B12)C ^{Al} C.....	59
3.3.2.1	(B11Cr)C ^{Al} C.....	60
3.3.3	Неполярна структура.....	62
3.3.4	Енергія утворення.....	64
3.4	Генерація рентгенівського дифракційного спектра.....	65
3.5	Розрахунок пружних модулів.....	66
3.6	Моделювання поведінки (B12)C ^{Al} C під час одновісного стиску вздовж міжкосаєдричного ланцюга.....	66
4	ОХОРОНА ПРАЦІ ТА БЕЗПЕКА В НАДЗВИЧАЙНИХ СИТУАЦІЯХ.....	70
4.1	Аналіз шкідливих і небезпечних виробничих факторів.....	70
4.1.1	Аналіз освітленості приміщення.....	71
4.1.2	Аналіз рівня шуму.....	72
4.2	Забезпечення належних умов праці.....	72
4.2.1	Параметри приміщення.....	72
4.2.2	Електробезпека.....	75
4.3	Розрахунок інженерного рішення.....	75
4.4	Вимоги безпеки в надзвичайних ситуаціях.....	76
4.4.1	Пожежна безпека.....	76
4.4.2	Вимоги безпеки в аварійних ситуаціях.....	77
4.5	Висновки за розділом.....	79
5	ЕНЕРГЕТИЧНИЙ РОЗДІЛ.....	80
6	ОРГАНІЗАЦІЙНО-ЕКОНОМІЧНИЙ РОЗДІЛ.....	84
6.1	Техніко-економічне обґрунтування роботи.....	84
6.1.1	Актуальність теми дослідження.....	84
6.1.2	Мета і завдання.....	85
6.1.3	Розрахунок планової собівартості проведення дослідження.....	86
6.1.4	Розрахунок фонду заробітної плати виконавців.....	86
6.1.4.1	Визначення суми єдиного соціального внеску.....	88
6.1.4.2	Витрати на матеріали, необхідні для виконання НДР.....	88

6.1.4.3 Витрати на спеціальне обладнання для проведення експериментів.....	88
6.1.4.4 Витрати на відрядження.....	88
6.1.4.5 Інші прямі витрати по темі.....	88
6.1.4.6 Накладні витрати.....	89
6.1.5 Економічна ефективність.....	90
7 РОЗРОБЛЕННЯ СТАРТАП-ПРОЄКТУ.....	93
7.1 Мета та завдання розробки стартап-проєкту.....	94
7.2 Опис продукту.....	94
7.3 Технологічний аудит ідеї проєкту.....	96
7.4 Аналіз ринкових можливостей запуску стартап-проєкту.....	97
7.5 Розроблення ринкової стратегії проєкту.....	102
7.6 Розробка маркетингової стратегії стартап проєкту.....	105
7.7 Формування системи збуту.....	106
ВИСНОВКИ.....	107
CONCLUSIONS.....	109
ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАНЬ.....	111
ДОДАТОК А.....	118
ДОДАТОК Б.....	121
ДОДАТОК В.....	123

ПЕРЕЛІК СКОРОЧЕНЬ

- DFT – Density Functional Theory, теорія функції густини;
HEL – Hugoniot Elastic Limit, межа пружності за Гюгоніо;
LDA – Local Density Approximation, тип обмінно-кореляційного функціонала;
NC – Norm-Conserving, тип псевдопотенціалу;
PAW – Projector Augmented Wave, тип псевдопотенціалу;
PBE – Perdew-Burke-Ernzerhof, тип обмінно-кореляційного функціонала;
SCF – Self-Consistent Field самоузгоджений розрахунок поля;
US – Ultrasoft, тип псевдопотенціалу.

ВСТУП

Ударостійка кераміка, відома своєю твердістю, механічною міцністю, термостійкістю та низькою густиною знайшла широке застосування у різних галузях. В аерокосмічній галузі із цих матеріалів створюють обтічники, сопла та інші деталі для космічних апаратів і їх двигунів, у військовій – вони мають вирішальне значення для бронежилетів та броні транспортних засобів завдяки своїй високій температурі плавлення та здатності поглинати й розсіювати енергію балістичного удару [2]–[4]. У промисловості вони використовуються як зносостійкий матеріал для різальних інструментів і футеровок, а в автомобілебудуванні застосовуються у компонентах, що працюють на стирання, наприклад в гальмівних системах. Ці матеріали також використовуються у спортивному спорядженні для забезпечення надійності останнього, в медичних пристроях для біосумісних імплантатів та в електроніці для виготовлення термостійких компонентів [5]–[9]. Крім того, деякі види кераміки можуть застосовуватись в енергетиці, наприклад, карбід бору застосовується в ядерних реакторах через його здатність поглинати нейтрони. В наш час ведуться постійні наукові дослідження для покращення її властивостей та розширення сфер застосування.

Серед ударостійкої кераміки найбільшого поширення набули карбід бору (B_4C), карбід кремнію (SiC), оксид алюмінію (Al_2O_3) та інші. Карбід бору, зокрема, вирізняється своєю низькою густиною і винятковою твердістю (приблизно 45 ГПа), що робить його одним з найбільш твердих серед відомих матеріалів, який поступається лише алмазу і кубічному нітриду бору [10], [11]. Така твердість має вирішальне значення для застосувань, що вимагають стійкості до проникнення і стирання. Крім того, карбід бору має високу межу пружності за Гюгоніо (HEL)¹ [12]–[14], що робить його дуже перспективним матеріалом для виготовлення як особистої, так і транспортної броні [1]. Однак карбід бору має схильність до

¹ Межа пружності за Гюгоніо (англ. *Hugoniot Elastic Limit, HEL*) – максимальне одновісне динамічне напруження, яке матеріал може пружно витримати [12]–[14]

локальної аморфізації в умовах високих негідростатичних навантажень, як статичних, так і динамічних, що веде до різкої втрати міцності за ударних навантажень, які перевищують HEL [10], [12], [15]–[17]. Усунення цього обмеження може призвести до створення матеріалу з покращеними механічними властивостями, що зробить його придатним для ще більш вимогливих застосувань.

Є різні підходи до розв'язання цієї проблеми, зокрема використання сплавів з високим вмістом бору [17], зменшення розмірів зерна до нанометрового розміру [18] і додавання кремнію або алюмінію в карбід бору [19]–[22]. Останній підхід викликає особливий інтерес, оскільки перші два підходи пропонують лише часткове усунення аморфізації.

У цій роботі було проведене атомістичне комп'ютерне моделювання з *перших (квантово-механічних) принципів* для вивчення легування карбиду бору алюмінієм. Створення вихідних структур, контроль розрахунку та аналіз результатів вівся в Jupyter Notebook за допомогою бібліотек Python Atomic Simulation Environment, matplotlib, pandas та власних підпрограм. Для моделювання поведінки матеріалів використовувався пакет програм Quantum Espresso, що базується на найбільш поширеному теоретичному наближенні до *перших принципів* - теорії функціонала електронної густини (DFT)². Для генерації рентгенівських дифракційних картин використовувалась Python бібліотека pymatgen.

² Теорія функціонала електронної густини (англ. *Density Functional Theory, DFT*) – це обчислювальний метод квантово-механічного моделювання, який використовується у фізиці, хімії та матеріалознавстві для дослідження електронної структури (в основному основного стану) систем багатьох тіл, зокрема атомів, молекул і конденсованих фаз.

1 ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД

1.1 Атомно-кристалічна будова карбіду бору

1.1.1 Структурні елементи

Первинними структурними одиницями карбіду бору є 12-атомні ікосаедри, розташовані у вершинах ромбоєдричної решітки тригональної симетрії (просторова група $R\bar{3}m$), та 3-атомні лінійні ланцюги, що зв'язують ікосаедри вздовж (111) ромбоєдричної осі, як показано на рисунках 1.1 та 1.2 [10], [23].

Ця структура також може бути описана через гексагональну решітку на основі не примітивної елементарної комірки, в цьому випадку вісь $[0001]$ гексагональної решітки відповідає напрямку $[111]$ ромбоєдра (рис. 1.1). Наявність ікосаедрів у структурі карбіду бору є наслідком здатності елементарного бору утворювати комірчасті структури різних розмірів; ікосаедри в карбіді бору - це, по суті, дві п'ятикутні піраміди, з'єднані між собою [10].

В межах окремого ікосаедра можливі два типи хімічно відмінних ділянок, полярні та екваторіальні. Полярні ділянки відповідають тим атомам, які з'єднують ікосаедри разом. Полярними атомами в комірці є також три атоми з кожної з двох площин, розташованих навпроти одна одної в кристалічній структурі. З іншого боку, екваторіальні сторони – це ті, до яких приєднані 3-атомні ланцюги, і ці сторони утворюють гексагональне крісло всередині ікосаедра, що показано на рисунку 1.1 [10].

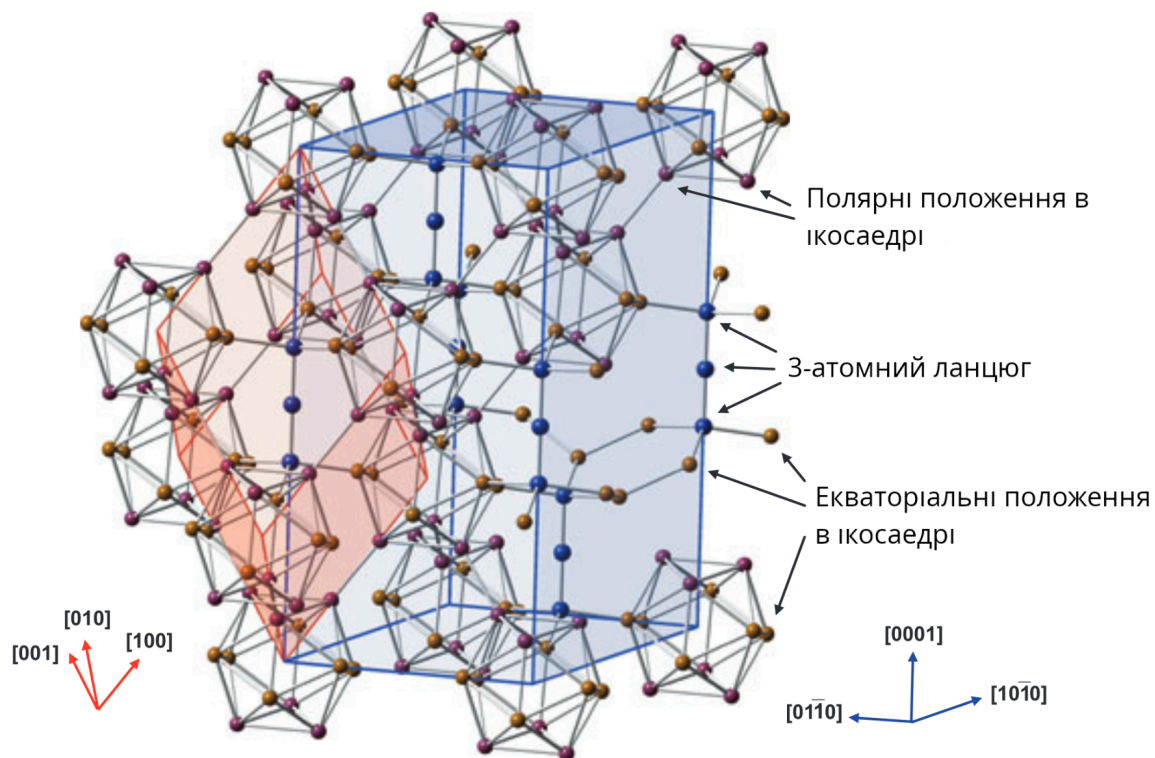


Рисунок 1.1 – Решітка карбіду бору, що показує зв'язок між ромбоєдричною (примітивною) та гексагональною (конвенційною) елементарними комірками.

Нееквівалентні положення ґратки позначені стрілками [10]

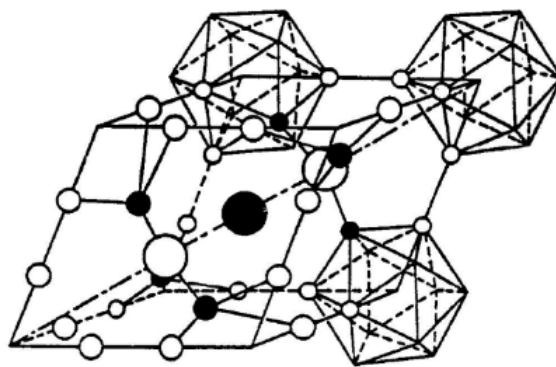


Рисунок 1.2 – Ромбоєдрична елементарна комірка карбіду бору [23]

1.1.2 Структурні політипи карбїду бору

Карбїд бору - це сполука бору та вуглецю з широким діапазоном вмісту вуглецю від 8,8 до 20 моль%, що показано на діаграмі стану за Бові [24], яка зображена на рисунку 1.3. Таким чином, стехіометрія буде в діапазоні від $B_{10}C$ до B_4C [10], [23], [25]. Це пов'язано із тим що карбїду бору притаманний політипїзм, тобто інформація про кристалічну симетрію карбїду бору доступна з дифракційних вимірювань, однак точне заповнення місць атомами вуглецю та бору все ще є предметом дискусій. Ця неоднозначність пов'язана насамперед з близькими атомними радіусами бору та вуглецю, особливо ізотопів ^{11}B та ^{12}C , що дозволяє цим атомам заміщати один одного в кристалічній решітці.

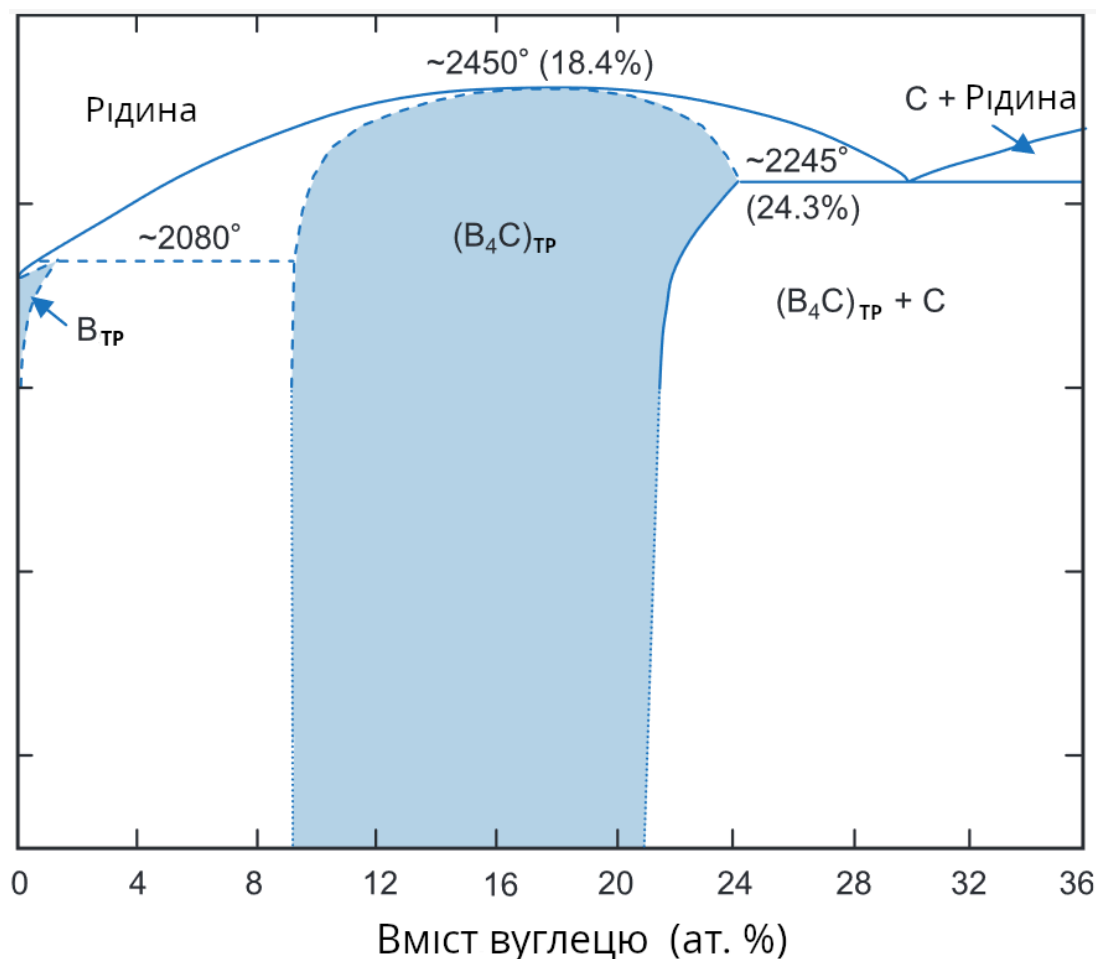


Рисунок 1.3 – Фазова діаграма стану В-С за Бові [10], [24]

Найбільш імовірні політипи, що зустрічаються в карбіді бору, відповідно до [10]:

– $B_{12}CCC$ (або B_4C). Сполука, переважає в розчині, що багатий на вуглець. Описується ідеалізованою структурною конфігурацією $(B_{12})CCC$ де (X_{12}) представляє ікосаедричні атоми, а XXX - атоми ланцюга;

– $B_{12}CBC$ (або $B_{6.5}C$). Сполука, що переважає в розчині, що багатий на бор. Описується ідеалізованою структурною формулою $(B_{12})CBC$, де центральний атом вуглецю в ланцюзі замінений на бор;

– $(B_{11}C)CBC$ В цьому випадку 1 атом вуглецю знаходиться в полярній стороні ікосаедра. Згідно із [10] є більш імовірною ніж $B_{12}CCC$ при розчині, що багатий на вуглець.

Таким чином, "карбід бору" - це не одна сполука, а сімейство сполук різного складу, співвідношення між якими змінюється в залежності від вмісту вуглецю.

1.1.3 Кристалічна структура

Заміщення бору призводить до збільшення об'єму елементарної комірки карбиду бору через різницю в розмірах між атомами вуглецю та бору. Параметри об'єму та ґратки, " a " і " c ", змінюються зі зміною співвідношення бору до вуглецю. Було встановлено прямий зв'язок між параметрами решітки та стехіометрією карбиду бору. Параметр решітки " a " лінійно зростає зі збільшенням співвідношення бор-вуглець, в той час, як параметр " c " зростає лінійно з невеликою зміною нахилу при вмісті вуглецю 13,3%. У таблиці 1.1 та на рисунку 1.4 наведено результати дослідження Aselage та відповідний графік [10], [26].

Таблиця 1.1 – Константи ґратки та об'єми елементарних комірок карбідів бору [26]

C(ат.%)	a (Å)	c (Å)	Об'єм (Å³)
20.5	5.5991	12.0740	327.809
20.0	5.5980	12.0707	327.592

Продовження таблиці 1.1

C(ат.%)	a (Å)	c (Å)	Об'єм (Å ³)
20.0	5.5995	12.7070	327.763
19.7	5.5993	12.0655	327.596
19.3	5.6030	12.0802	328.440
19.0	5.6030	12.0909	328.722
18.6	5.6032	12.0909	328.745
18.2	5.6071	12.1032	329.540
15.4	5.6152	12.1411	331.525
13.3	5.6244	12.1727	333.482
11.8	5.6286	12.1748	334.039
10.0	5.6344	12.1793	324.847
8.7	5.6338	12.1750	335.847
7.7	5.6440	12.1731	335.818

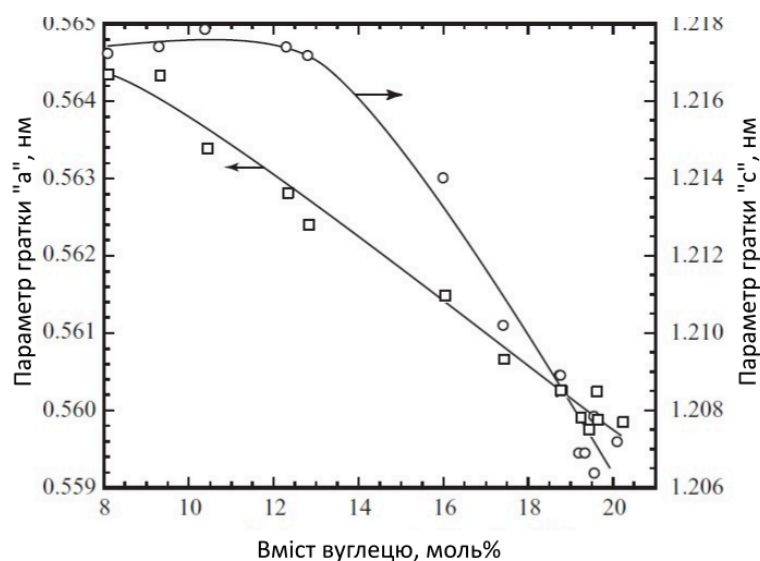
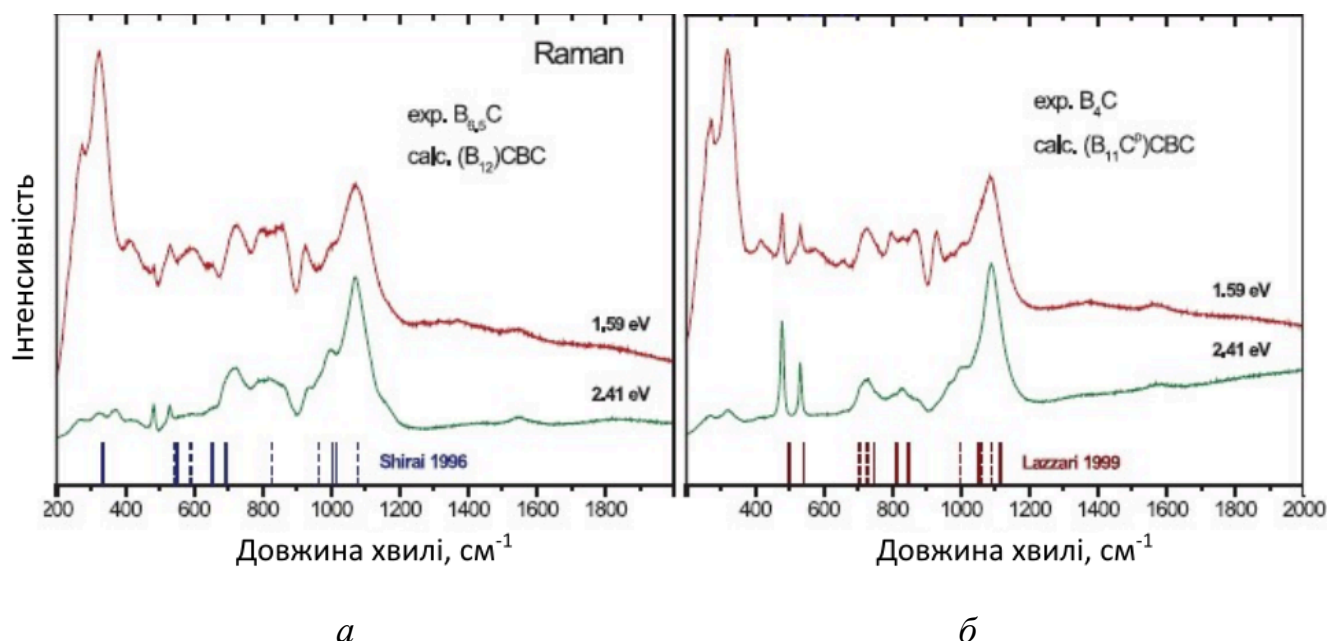


Рисунок 1.4 – Параметри ґратки гексагональної елементарної комірки B_4C в залежності від складу [26]

Ікосаедри та ланцюжки можна ідентифікувати за допомогою спектроскопії комбінаційного розсіювання. Повідомляється про унікальний спектр розсіювання та відгук зв'язків карбіду бору [10], [27]. Піки карбіду бору можна ідентифікувати в діапазоні від 200 до 1200 cm^{-1} . Приклад спектрів комбінаційного розсіювання карбіду бору показано на рисунку 1.5. Піки нижче 600 cm^{-1} , як правило, пов'язані з

лінійними ланцюгами за межами ікосаедра. Ці піки відносяться до ланцюгів CBC, CBV і BVV кількома групами. Існує загальне визнання того, що піки вище 600 cm^{-1} пов'язані з ікосаедричними зв'язками, але існують також інші класифікації цих піків, а саме B_{12} і $B_{11}C$ [10], [27], [28].



$a - B_{6.5}C$; $b - B_4C$

Рисунок 1.5 – Раманівський спектр карбіду бору [10]

1.1.4 Хімічні зв'язки

Основою структури карбіду бору, як і бору, є ікосаедр. У такій структурі кожен атом бору пов'язані з шістьма атомами, тобто утворює шість зв'язків за наявності лише трьох валентних електронів $2s^2p^1$ [23].

Атоми вуглецю в карбіді бору перебувають у різних валентних станах. Центральний атом на тригональній осі ромбоедра знаходиться в стані sp -гібридизації; один s -електрон змішується з одним p -електроном, інший s -електрон з іншим p -електроном. В результаті утворюються дві гібридні електронні хмари, що мають вигляд двох гантелей, витягнутих уздовж однієї осі [23].

Периферійні атоми вуглецю на тригональній осі ромбоедра перебувають у стані sp^2 -гібридизації, утворюючи три рівноцінні зв'язки з трьома атомами бору,

що знаходяться також у стані sp^2 -гібридизації. Четвертий електрон утворює зв'язок із центральним, атомом вуглецю на тригональній осі ромбоєдра. [23].

Зазвичай кристал з ковалентним зв'язком стійкий, якщо є два електрони на кожний зв'язок, тому що в таких структурах енергетичні зони, стани в яких описуються тільки орбіталями, що зв'язують, будуть повністю заповнені. Коли на кожний зв'язок припадає менше двох електронів, енергія мала (або рівень іонності великий), кристал стає нестійким. Щоправда, відомі стійкі структури із електронним дефіцитом. Це структури, утворені киснем, бором, які, маючи два і три електрони на зовнішній оболонці, утворюють складні кристали, де лише частина атомів має сусідів із тетраедричною конфігурацією (B_4Si , B_4C , SiO_2). B_4C найкраще уявити як $(B_{2-12} — C_{2+3})_n$, де шість орбіталей описують зв'язок між ікосаедрами, а шість описують зв'язків з групами C_3 . У разі ікосаедра є тринадцять зв'язувальних орбіталей, для заповнення яких необхідно лише 26 електронів. Якщо зважити, що для утворення зовнішніх зв'язків необхідно ще 12 електронів, то виходить, що треба всього 38 електронів для отримання структури із замкнутою оболонкою. Ця умова виконується у зазначених сполуках боридів, диборанів, фероценів та карбіду бору [23].

1.2 Властивості карбіду бора

1.2.1 Густина

Карбід бору - це легкий матеріал з питомою вагою $2,52 \text{ г/см}^3$ для стехіометричного складу 20 ат% вуглецю. Як і очікувалося, зі зменшенням густини вміст вуглецю зменшується в діапазоні складів (8,8-20%С). Ця залежність визначається наступним рівнянням:

$$\rho (\text{г/см}^3) = 2.422 + 0.0048 \cdot [C],$$

де $[C]$ – вміст вуглецю в %.

Згідно з цією залежністю діапазон густини карбіду бору знаходиться в межах від $2,465 \text{ г/см}^3$ до $2,52 \text{ г/см}^3$ [10].

1.2.2 Механічні властивості

Пружні властивості карбіду бору є анізотропними. Відношення модуля пружності, E , може досягати 8:1 для c_{13}/c_{11} . У цьому випадку E може досягати 523 ГПа на “ c ” [0001] і 63 ГПа в перпендикулярному напрямку. Твердість також залежить від ізоотропії й зменшується на 20% при різних орієнтаціях. Модуль пружності B_4C оцінюється в середньому 470 ГПа для анізотропної структури. Модуль зсуву, G , становить близько 197 ГПа, а коефіцієнт Пуассона - від 0,14 до 0,18. Значення пружних властивостей карбіду бору вищі, ніж у інших конструкційних керамічних матеріалів, за винятком коефіцієнта Пуассона. Ці пружні властивості відносяться до 20% вуглецевого складу, і вони можуть змінюватися зі зміною стехіометрії [29]. У таблиці 1.2 показано вплив анізотропії, а в таблиці 1.3 - вплив вуглецю на пружні властивості.

Таблиця 1.2 – Вплив орієнтації на пружні властивості [29]

(i,j)	11	33	13	12	44
c_{ij} , ГПа	542.8	534.5	63.5	130.6	164.8

Таблиця 1.3 – Вплив вуглецевого складу на пружні властивості [29]

Зразок	E , ГПа	G , ГПа	K , ГПа	N
Монокристал	460.07	195.56	236.84	0.176
20.0 at% C	471	200	243	0.18
18.2 at% C	465	197	245	0.18
15.4 at% C	466	197	243	0.18
13.3 at% C	450	189	241	0.19
11.5 at% C	351	150	178	0.17
10.0 at% C	348	150	170	0.16

B_4C – третій за твердістю матеріал після алмазу та кубічного нітриду бору. Низька щільність і надзвичайна твердість роблять карбід бору дуже бажаним для використання в екстремальних умовах. Відношення міцності до щільності є одним з найвищих, як видно з таблиці 1.4, проте матеріали з карбіду бору дуже важко обробляти через його високу твердість. Твердість також зберігається при високій температурі, і карбід бору є найтвердішим матеріалом за межами $1100^{\circ}C$. Твердість карбіду бору за Кнупом становить $2900-3100 \text{ кг/мм}^2$ при навантаженні на вдавнення 100 г (HK100), $2800-2900 \text{ кг/мм}^2$ при навантаженні на вдавнення 200 г (HK200). Межа текучості карбіду бору пропорційна значенню твердості, яка знаходиться в межах 300-370 МПа. Границя текучості також зберігається при більш високих температурах, як і твердість. Гідростатична міцність і міцність на стиск також високі і становлять 4,0 ГПа. Відношення міцності до щільності помітно вище, ніж у більшості матеріалів [16], [30]–[32].

Таблиця 1.4 – Порівняння властивостей карбіду бору з іншими конструкційними кераміками [33]

Матеріал	Міцність на згин (кг/мм^2)	Густина (г/см^3)	Відношення міцності до щільності
Карбід бору	40	2.5	15.9
WC-Co 94/6	170	14.9	11.4
Карбід кремнію	35	3.2	10.9
Нітрид алюмінію	33	3.3	10
Оксид алюмінію	35	3.9	9
$MgAl_2O_4$ Шпінель	31	3.6	8.5
AlON	31	3.65	8.4
Сталь	60	7.8	7.7
Карбід титану	35	4.9	7.2

Зносостійкість карбіду бору є кращою, ніж в інших конструкційних керамік. Зносостійкість карбіду бору на 30-40% менша, ніж алмазу, але на 30% більша, ніж карбіду кремнію. В'язкість руйнування карбіду бору низька і знаходиться в межах

3-4 МПа·м^{1/2}. В'язкість руйнування зберігається при більш високій температурі [11], [23].

Міцність і твердість В₄С зменшується зі збільшенням пористості та розміру зерна, як показано в залежності Холла-Петча. Збільшення пористості від 2% до 10% знижує міцність приблизно на 40%, що відповідає зниженню міцності на 4-5% на кожен відсоток пористості, а міцність знижується експоненціально після ще більшого збільшення пористості. Розмір зерен впливає на міцність і твердість по-різному, оскільки в'язкість руйнування і міцність можуть зменшуватися зі збільшенням розміру зерен. Твердість може бути збільшена зі збільшенням до критичного розміру зерна і зменшується після цього. У більшості випадків бажаний розмір зерен карбиду бору становить від субмікронного до двох мікронного. Механічні властивості досягають максимуму при малих розмірах зерен і зменшуються зі збільшенням розміру зерен [11], [23], [34]–[36].

Стехіометрія (співвідношення бору до вуглецю) також впливає на механічні властивості карбиду бору. У таблиці 1.4 наведено результати різних досліджень залежності пружних властивостей від стехіометрії. На подальші механічні властивості може впливати вуглецевий ланцюг, який можна позначити як (В₁₁СВС або (В₁₂)С-С-С, причому в цьому випадку С-С-С ланцюг є слабшим. Також Niihara та ін. встановили кореляцію між твердістю карбиду бору та співвідношенням бор-вуглець, і ця залежність показана на рисунку 1.6. Є й інші дослідження, які показують, що вплив стехіометрії не є таким значним, як інші змінні [10], [37]

Таблиця 1.4 – Вплив стехіометрії на пружні властивості [10]

Стехіометрія	в %С	Модуль всесічного стиску (ГПа)	Модуль Юнга (ГПа)	Модуль зсуву (ГПа)	Коефіцієнт Пуассона
В ₄ С	20.0	247	472	200	0.18
		235	462	197	0.17
		199	448	188	0.31
В _{4.5} С	18.2	237	463	197	0.17
В _{5.6} С	15.2	236	462	197	0.17
		237	460	195	0.18

Продовження таблиці 1.4

Стехіометрія	в %C	Модуль всебічного стиску (ГПа)	Модуль Юнга (ГПа)	Модуль зсуву (ГПа)	Коефіцієнт Пуассона
$B_{6.5}C$	13.3	231	446	189	0.18
$B_{7.7}C$	11.5	178	352	150	0.17
B_9C	10.0	183	319	150	0.21
		130	348	132	0.16

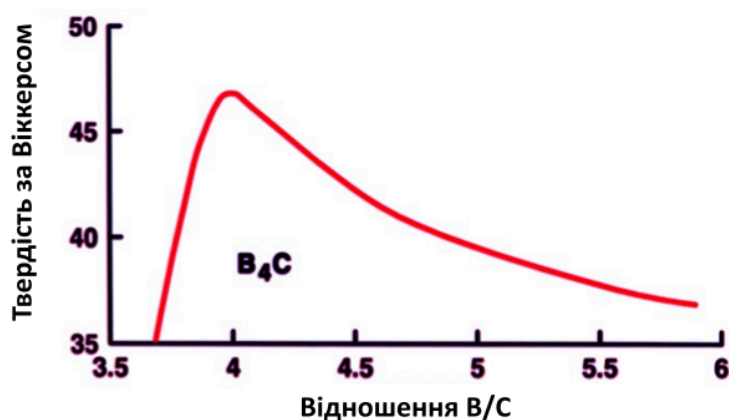


Рисунок 1.6 – Твердість карбіду бору в залежності від стехіометрії.

Присутній пік біля стехіометричного складу [37]

1.2.3 Хімічні властивості

Карбід бору є хорошим матеріалом для хімічної стійкості при кімнатній температурі. Завдяки ковалентному зв'язку між бором і вуглецем карбід бору є хімічно стабільним матеріалом. Як щільний матеріал карбід бору є стійким до окиснення до $600^{\circ}C$, для матеріалу з меншим розміром зерен, з пористою структурою або у вигляді порошку воно може розпочатись при температурі близько $450^{\circ}C$. Після початку окиснення і до $1200^{\circ}C$ карбід бору утворює тонкий шар оксиду бору, який сповільнює цей процес. Гарячі реагенти, такі як хлориди, кислоти та розплавлені солі, впливають на карбід бору і змінюють властивості

поверхні. Карбід бору реагує з металами вище 800°C і утворює бориди металів [38]–[40].

1.2.4 Електричні властивості

Карбід бору не є електроізоляційним матеріалом, але існують різні дані, які стверджують, що він має різні значення ширини забороненої зони та провідності. Ширина забороненої зони карбіду бору менша, ніж у більшості напівпровідникових матеріалів, і може становити від 0,8 еВ до 2,5 еВ. На рисунку 1.7 показана одна з енергетичних зонних структур для карбіду бору з шириною забороненої зони 2,09 еВ [10], [41].

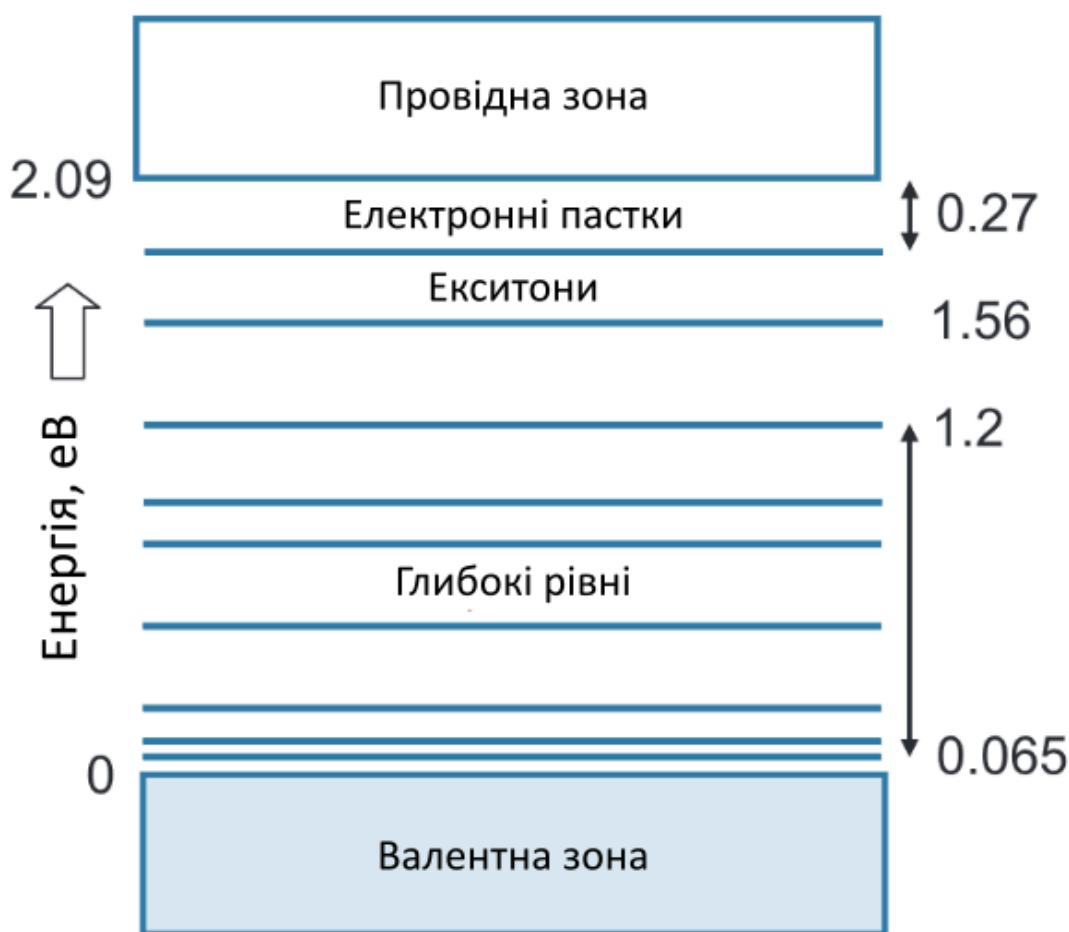


Рисунок 1.7 – Зонна структура карбіду бору [10], [41]

Структура і стехіометрія карбіду бору відіграють важливу роль в електричних властивостях карбіду бору. Як видно з таблиці 1.5, що карбід бору повинен мати металеві електричні властивості з фазами, багатими на бор, але експериментальні результати показують, що матеріал все ще є напівпровідником.

Таблиця 1.5 – Електронні характеристики карбіду бору залежно від стехіометрії [42]

Структура		$B_{13}C_2$ (формула ідеалізованої структури $B_{12}(CVC)$)	$B_{4.3}C$ (формула ідеалізованої структури: $B_{11}(C(CVC))$)	гіпотетичний B_4C (формула ідеалізованої структури: $B_{11}(C(CVC))$)
Ідеалізована кристалічна структура	Валентні стани (на елементарну комірку)	48 [28]	48 [28]	48 [28]
	Валентні електрони (елементарна комірка) ⁻¹	47	47.83	48
	Дефіцит електронів (елементарна комірка) ⁻¹	1	0.17	0
	Електронний характер (теоретичний)	метал	метал	напівпровідник
Реальна кристалічна структура	Електронний характер (експеримен- тальний)	напівпровід- ник	напівпровідник	—
	Власні точкові дефекти [на одиницю комірки]	0.97	0.19(1)	—

Різні дослідження повідомляють про різні значення провідності постійного струму для карбіду бору, але всі вони сходяться на думці, що провідність зростає зі зменшенням вмісту вуглецю до приблизно 13 ат% С ($B_{13}C_2$). Провідність досягає піку при цьому складі і зменшується до кінця діапазону однорідності (~8 ат% С) [42]. Провідність карбіду бору зменшується зі збільшенням пористості, зростає з підвищенням температури, а також зменшується із наявністю кисню в атмосфері (рис. 2.1) [43].

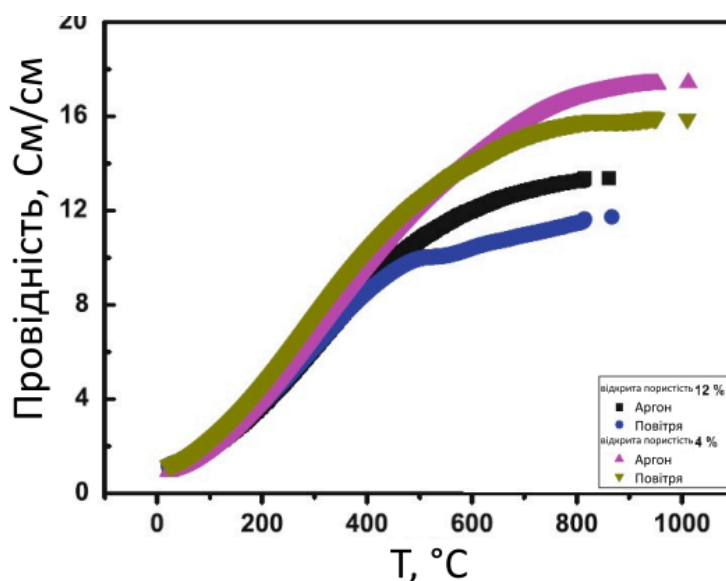


Рисунок 2.1 – Вплив пористості, температури та наявності кисню в атмосфері на провідність [43]

1.2.5 Ядерні властивості

Бор є чудовим поглиначем нейтронів, який широко використовується в ядерній промисловості. Бор існує у вигляді двох ізотопів, ^{10}B та ^{11}B , які існують разом у структурі сполук бору. ^{10}B має надзвичайно високий переріз поглинання нейтронів, один з найвищих серед елементів. Через практичні обмеження, чистий бор зазвичай не використовується в ядерних технологіях. Стехіометричний карбід бору складається з 80 мол.% бору і дає близько 15% ^{10}B . Через це, дешевизну

“натурального” карбиду бору, а також його термічні й хімічні властивості цей матеріал знайшов застосування в ядерних реакторах [11].

1.2.6 Ударні властивості

Унікальне поєднання низької щільності, міцності та високої твердості робить карбід бору чудовим кандидатом для ударостійких застосувань. Багато матеріалів демонструють пластичну поведінку після досягнення критичної точки напруження, межі пружності Гюгоніо (HEL). Однак карбід бору має аномальну поведінку після HEL, яка показана на рисунку 1.7. Визначено, що це значення становить близько 20 ГПа для карбиду бору. Карбід бору дуже добре працює в умовах напружень нижче цього значення. Невеликі дефекти та вакансії не впливають на механічні властивості нижче значення HEL. Ці дефекти і вакансії збільшуються зі збільшенням тиску і викликають екстремальну втрату механічних властивостей за межами значень HEL. Локалізована аморфізація ідентифікується за допомогою електронної мікроскопії, яку можна побачити на рисунку 1.8 [10], [15], [17].

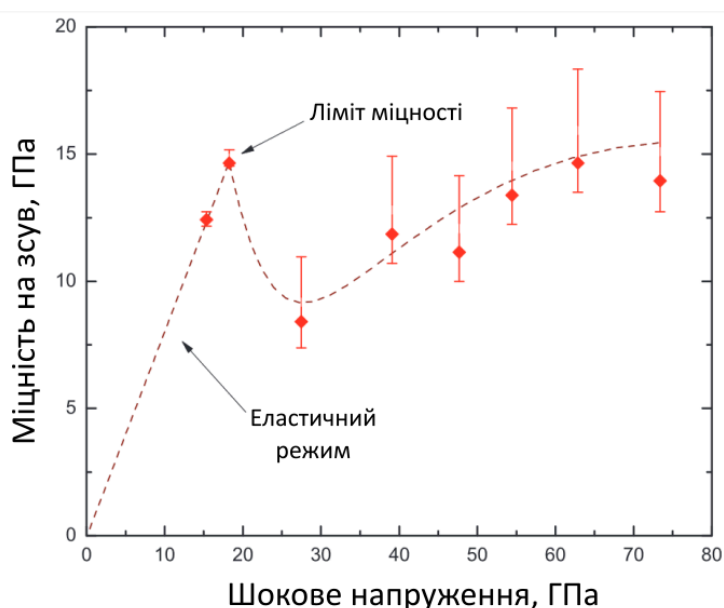
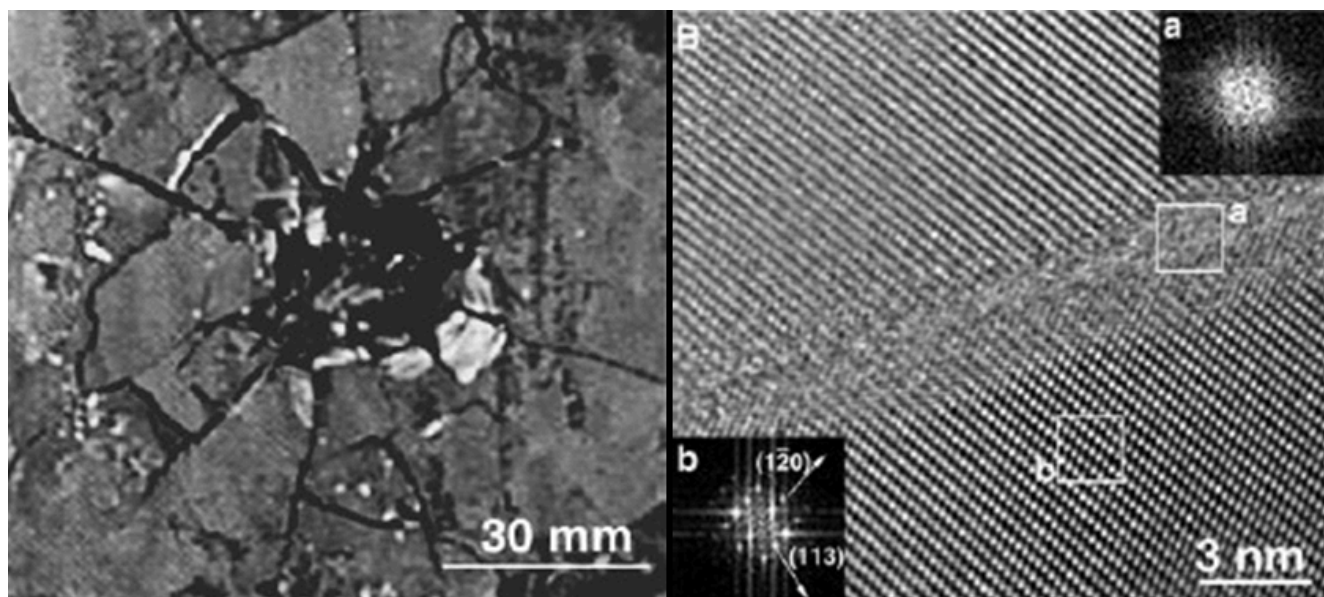


Рисунок 1.7 – Міцність на зсув карбиду бору в ударному стані, оцінена за результатами експериментів з повторного удару і відпускання [10]

*a**б*

a – балістичний вплив на карбід бору; *б* – високороздільна електронна мікроскопія (HRTEM) ударної ділянки показує аморфну область

Рисунок 1.8 – Аморфізація карбіду бору [15]

1.3 Висновки

Є різні підходи до розв'язання цієї проблеми, зокрема використання сплавів з високим вмістом бору [17], зменшення розмірів зерна до нанометрового розміру [18] і додавання кремнію або алюмінію в карбід бору [19]–[22]. Останній підхід викликає особливий інтерес, оскільки перші два підходи пропонують лише часткове усунення аморфізації.

2 МАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

2.1 Вхідні дані: атомні конфігурації

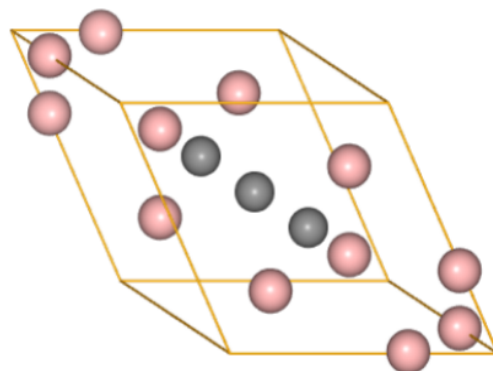
В якості вхідних даних, в цій роботі використовуються атомні конфігурації із баз даних Materials Project [44] та American Mineralogist Crystal Structure Database [45].

Атомна конфігурація – це інформація про розміри комірки, положення та типи атомів у ній, зазвичай зберігається в форматах “*xyz*” або “*cif*”. Приклад “*cif*” файлу та його візуалізація наведена на рисунку 2.2.

```
data_B4C
symmetry space group name H-M 'P 1'
_cell_length_a 5.18446629
_cell_length_b 5.18446629
_cell_length_c 5.18446629
_cell_angle_alpha 65.98122203
_cell_angle_beta 65.98122203
_cell_angle_gamma 65.98122203
_symmetry_Int_Tables_number 1
_chemical_formula_structural B4C
_chemical_formula_sum 'B12 C3'
_cell_volume 111.29297210
_cell_formula_units_Z 3
loop_
_symmetry_equiv_pos_site_id
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
1 'x, y, z'
loop_
_atom_site_type_symbol
_atom_site_label
_atom_site_symmetry_multiplicity
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
atom_site_occupancy
B B0 1 0.30861000 0.80647200 0.80647200 1
B B1 1 0.80647200 0.80647200 0.30861000 1
B B2 1 0.80647200 0.30861000 0.80647200 1
B B3 1 0.69139000 0.19352800 0.19352800 1
B B4 1 0.19352800 0.19352800 0.69139000 1
```

Параметри
ґратки

Координати атомів



a

б

a – частина вхідного *.cif* файлу; *б* – візуалізація *.cif* файлу

Рисунок 2.2 – Примітивна комірка карбіду бору, “*cif*” файл та його візуалізація [44]

2.2 Управління даними та їх аналіз

Обробка та аналіз даних були проведені Jupyter Notebook, інтегрованому в середовище Visual Studio Code. Моделювання атомних конфігурацій, запуск симуляцій й візуалізація структур проводили за допомогою пакету програм та Python модулів Atomic Simulation Environment (ASE). Аналіз та організація даних проводились за допомогою Python бібліотеки pandas, а для графічного представлення результатів використовувалась Python бібліотека matplotlib. Генерація розподілу інтенсивностей для рентгенівської дифракції проводилась за допомогою Python бібліотеки rumatgen. Крім того, для виконання деяких задач використовувалися програми власної розробки. Приклад роботи із Python Jupyter notebook в VSCode наведено на рисунку 2.3.

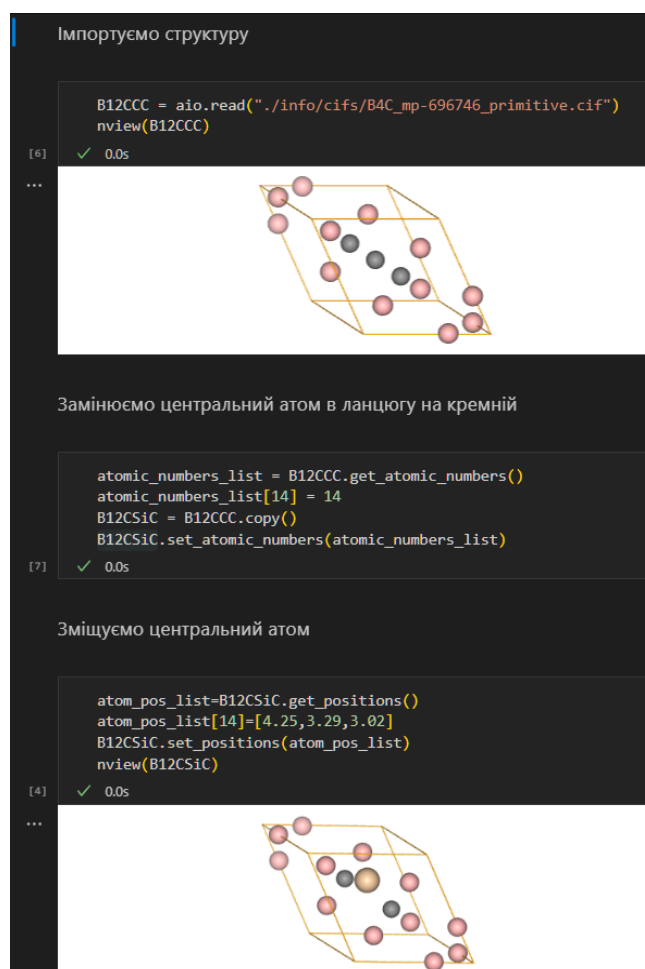


Рисунок 2.3 – Приклад роботи із Python Jupyter notebook в VSCode

2.3 Моделювання поведінки матеріалів за допомогою квантово-механічних підходів: теорія функціонала електронної густини

Теорія функціонала електронної густини (англ. *Density Functional Theory*, *DFT*) – це обчислювальний метод квантово-механічного моделювання, який використовується у фізиці, хімії та матеріалознавстві для дослідження електронної структури (в основному основного стану) систем багатьох тіл, зокрема атомів, молекул і конденсованих фаз [46].

Фундаментальним принципом DFT є теорема Гогенберга-Кона, яка стверджує, що властивості основного стану багатеелектронної системи можна визначити за допомогою енергетичного функціонала електронної густини. Це означає, що замість того, щоб мати справу з хвильовими функціями багатьох електронів, ми можемо мати справу з електронною густиною, яка є функцією лише трьох просторових координат (рис. 2.4). Це значне спрощення, оскільки хвильова функція системи з N електронів є функцією $3N$ просторових координат [46].

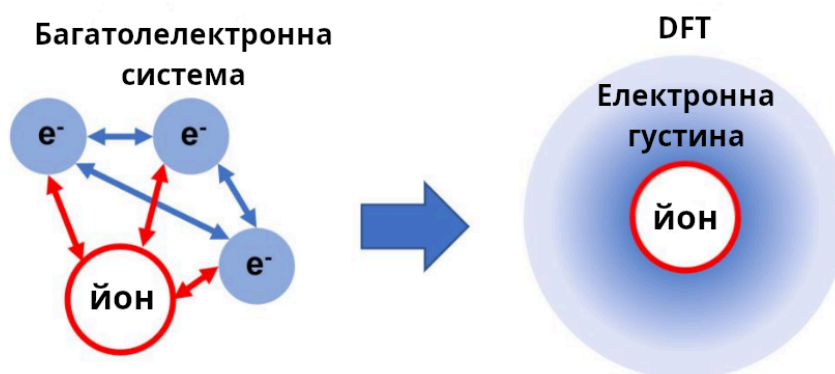


Рисунок 2.4 – Основний принцип DFT [47]

Для подальшого спрощення розрахунків у DFT використовують псевдопотенціали. Ідея полягає в тому, щоб замінити складну взаємодію між електронами та атомним ядром на простішу, ефективнішу взаємодію, яка відтворює важливу фізику (рис. 2.5). Це дозволяє зосередитися на валентних електронах, які найбільше відповідають за хімічну поведінку системи, та

ігнорувати електрони осердя, які знаходяться ближче до ядра і не беруть участі в хімічних реакціях [46], [48].

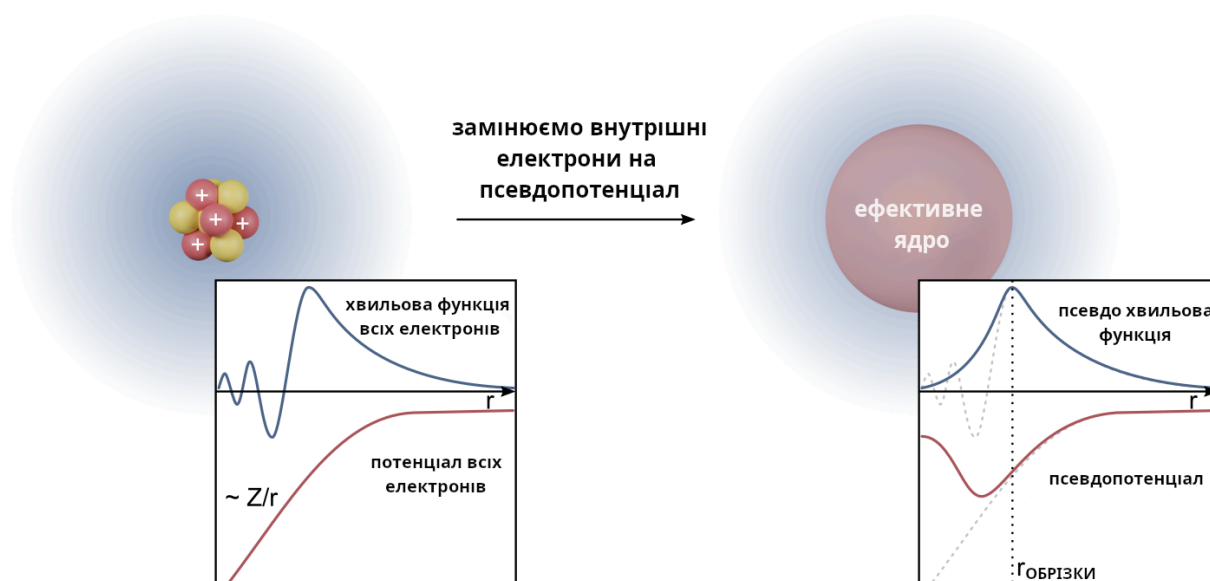


Рисунок 2.5 – Принцип роботи псевдопотенціалу [46], [48]

DFT може надати багато інформації про систему. Деякі з величин, які можна отримати з розрахунків DFT, включають наступні величини [46], [49]:

а) повна енергія: найпростіша величина, яку можна обчислити. Її можна використовувати для визначення стабільності системи або порівняння енергій різних систем;

б) електронна структура: DFT може надати інформацію про енергетичні рівні електронів у системі, яка може бути використана для розуміння її хімічної реакційної здатності, оптичних властивостей тощо;

в) геометрія: мінімізуючи загальну енергію відносно положень атомів, DFT може передбачити рівноважну геометрію системи;

г) вібраційні властивості: шляхом подальшого аналізу кривизни енергетичної поверхні навколо рівноважної геометрії, DFT може передбачити коливальні частоти системи, які можна порівняти з експериментальними спектрами;

д) інші властивості: залежно від конкретної реалізації DFT, його також можна використовувати для розрахунку інших властивостей, таких як магнітні властивості, оптичні властивості та шляхи реакцій.

Важливо зазначити, що хоча DFT є потужним інструментом, він не є досконалим. Точність результатів DFT критично залежить від вжитого обмінно-кореляційного функціонала та типу псевдопотенціалів, а сфера застосування, як правило, обмежена системами, що містять до 300 атомів. Крім того, DFT стикається з проблемами при точному моделюванні систем, в яких присутні ван-дер-ваальсові взаємодії або сильна взаємодія між електронами [46]. Проте, постійно ведеться робота над усуненням цих недоліків, і вже з'явилося кілька часткових рішень, що відображають динамічний характер досягнень у цьому напрямку [50]–[53].

Для моделювання поведінки матеріалів за допомогою DFT в цій роботі використано пакет програм Quantum Espresso.

2.4 Quantum Espresso

Quantum ESPRESSO(QE) - це пакет програм для розрахунків з електронної структури та моделювання матеріалів, що розповсюджується безкоштовно і як вільне програмне забезпечення під ліцензією GNU General Public License. Він базується на теорії функціонала електронної густини, базисних наборах плоских хвиль і псевдопотенціалах [54], [55].

Для проведення розрахунку електронної густини, самоузгодженого розрахунку поля та структурної оптимізації була використана програма pw.x.

2.4.1 Самоузгоджений розрахунок поля

Самоузгоджений розрахунок поля (англ. *self-consistent field, SCF*) - це обчислювальний метод, який використовується для визначення структури та властивостей молекул у квантовій хімії. Він являє собою ітераційний процес, що

спрямований на розв'язання рівняння Шредінгера для багатоелектронної системи [56]. SCF розрахунок проводиться для статичної системи, тобто під час обчислення координати атомів та параметри решітки не змінюються.

Приклад вхідного файлу для проведення SCF розрахунку за допомогою Quantum Espresso, наведено на рисунку 2.6.

```
&CONTROL
  calculation      = 'scf'
  title            = 'MY_B4C_SCF'
  restart_mode     = 'from_scratch'
  tstress          = .true.
  tprnfor          = .true.
  outdir           = './tmp'
  prefix           = 'B12CCC'
  pseudo_dir       = '/home/vladbi/espresso/pseudo'
/
&SYSTEM
  ecutwfc          = 100
  nosym            = .true.
  ntyp             = 2
  nat              = 15
 ibrav             = 0
  occupations      = 'smearing'
  degauss          = 5e-05
  smearing         = 'gauss'
/
&ELECTRONS
  conv_thr         = 1e-08
  diagonalization  = 'david'
/
&IONS
/
&CELL
/
ATOMIC_SPECIES
B 10.81 B.pz-n-rrkjus_psl.0.1.UPF
C 12.011 C.pz-n-rrkjus_psl.0.1.UPF

K_POINTS automatic
8 8 8 0 0 0

CELL_PARAMETERS angstrom
4.58283730577607 -0.00000000000000 -0.00000000000000
1.16129085602021 3.43135714154848 2.80706064880702
1.16129085602021 -2.05537829284453 3.92800475970183

ATOMIC_POSITIONS angstrom
B 3.3619136624 1.0889487689 5.5287949508
B 5.2193189764 2.0978601555 3.4409168209
B 5.2277464203 -0.4835387058 3.9636916835
B 3.6993964849 0.1967777807 1.2335642753
B 1.9508488606 -1.0439963497 3.0002903692
B 1.8302113905 1.8227080958 2.7480896670
B 5.2445056379 1.1556435040 6.9133573703
B 6.4533811907 2.0423337960 5.2094693037
B 6.4055902271 0.2744162540 5.6130491833
B 1.5810644713 -0.0816060140 -0.0021987089
B 0.3279153902 -0.3783839889 1.3098592932
B 0.2595147427 1.2415827200 0.7662406411
C 4.2449402643 0.5456566391 3.9104349192
C 2.7213374781 0.6471416780 2.6511078241
C 3.4353622666 0.6428238700 3.1457544057
```

Рисунок 2.6 – Приклад вхідного файлу для проведення SCF розрахунку

Процес визначення параметрів “*ecutwfc*”, “*degauss*” та “*K_POINTS*” наведений в розділі 2.5.2. Поріг збіжності SCF розрахунку визначає параметр “*conv_thr*”. Місце для зберігання проміжних файлів, що дають змогу отримати розподіл електронної густини задаються параметром “*outdir*”. Назва псевдопотенціалу та вага для кожного типу атомів задається в розділі “*ATOMIC_SPECIES*”. В розділах “*CELL_PARAMETERS*” та “*ATOMIC_POSITIONS*” задаються розміри кристалічної ґратки та позиції атомів

відповідно. Ці та інші параметри більш детально описані в інструкції користувача [57].

Результатом SCF розрахунку є повна енергія системи, розподіл сил, що діють на атоми, напруження комірки та проміжні файли із яких можна отримати розподіл (поле) електронної густини. Частину вихідного файлу після проведення SCF розрахунку наведено на рисунку 2.7.

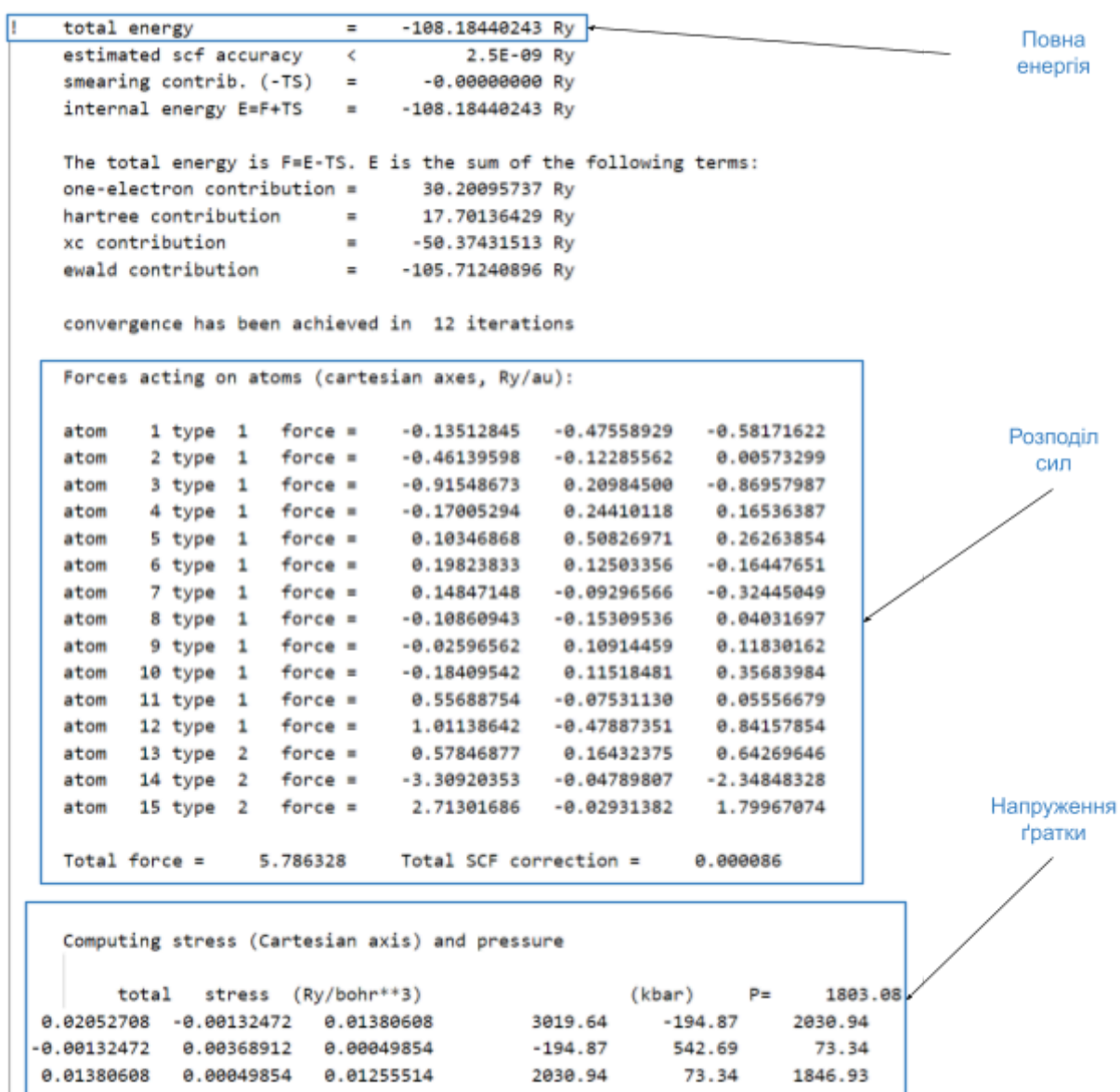


Рисунок 2.7 – Частина вихідного файлу після SCF розрахунку

Повні енергії атомних конфігурацій, що були обчислені одним набором псевдопотенціалів, мають один якісний склад, однакову густину сітки k-точок та

обрізку плоских хвиль, можна порівнювати між собою. Стабільнішою буде та конфігурація енергія якої буде меншою.

2.4.2 Оптимізація структури

Структурна оптимізація у Quantum Espresso (релаксація) - це метод пошуку мінімальної енергетичної конфігурації системи, за яким можуть слідувати інші розрахунки несамоузгодженого поля (non-SCF), наприклад, розрахунки зонної структури[58].

В Quantum Espresso є два основні режими структурної оптимізації: “relax” і “vc-relax”. Режим “relax” є простішим і зберігає параметри комірки фіксованими, зосереджуючись лише на оптимізації положення атомів, тоді як “vc-relax” дозволяє змінювати як параметри ґратки, так і положення атомів, щоб знайти конфігурацію із мінімальною енергією.

Структурна оптимізація це ітераційний процес, із кожним кроком атомна конфігурація дещо змінюється так, щоб сили та тиск і, як наслідок, повна енергія в системі знижувались. Релаксація іде до тих пір, поки не буде досягнуто заданої точності розрахунку. Процес зниження повної енергії під час релаксації, а також зображення вхідної (спотвореної) та вихідної (релаксованої) елементарних комірок карбїду бору показано на рисунку 2.8. В таблиці 2.1 продемонстровано зниження повної енергії, сумарних сили та тиску, а також зміну параметрів ґратки до їх експериментальних значень.

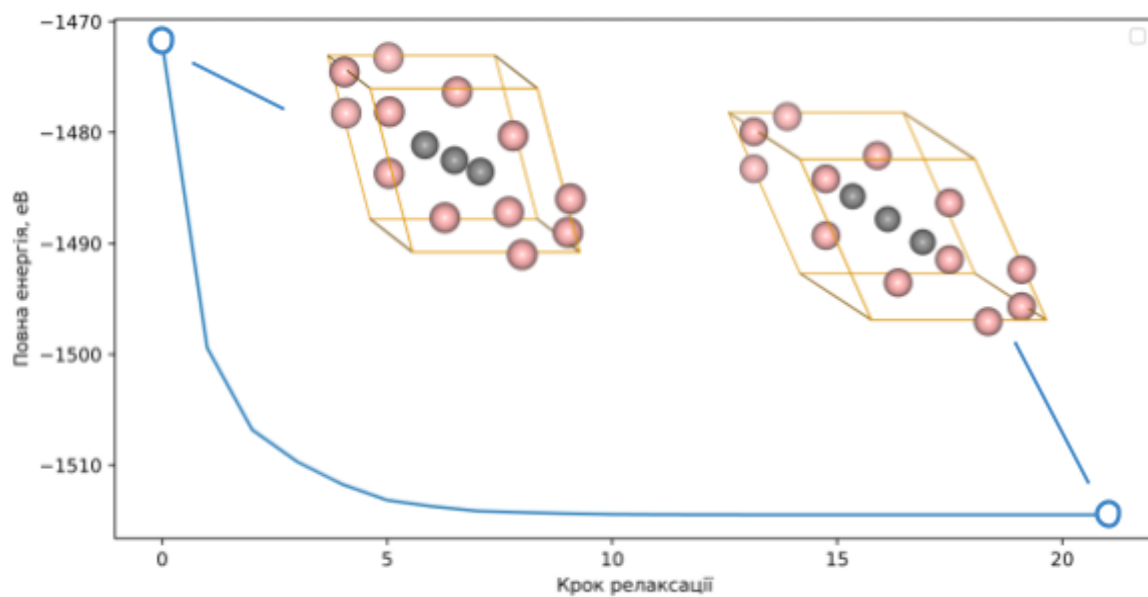


Рисунок 2.8 – Залежність повної енергії від кроку релаксації

Таблиця 2.1 – Параметри системи “до” та “після” релаксації

Атомна конфігурація		Спотворена (до)**	Релаксована (після)
Повна енергія, eV		-1471.920	-1514.465
Сумарна сила, Ry/Bohr		5.786	0.0003
Сумарний тиск, GPa		-180.312	0.039
Розміри ґратки*	a , Å	4.582	5.13
	b , Å	4.582	5.13
	c , Å	4.582	5.13

* – експериментальні параметри ґратки для елементарної комірки стехіометричного карбіду бору $a=b=c=5.16$ Å [10]

** – параметри системи для спотвореної конфігурації були взяті із першого кроку структурної оптимізації

Вхідний файл із параметрами для проведення структурної оптимізації та координатами спотвореної конфігурації наведений на рисунку 2.9.

```

&CONTROL
  calculation      = 'vc-relax'
  title            = 'MY_B4C_RELAX'
  restart_mode     = 'from_scratch'
  tstress          = .true.
  tprnfor          = .true.
  outdir           = './tmp'
  prefix           = 'B12CCC'
  pseudo_dir       = '/home/vladbi/espresso/pseudo'
  etot_conv_thr    = 1e-06
  forc_conv_thr    = 0.001
/
&SYSTEM
  ecutwfc          = 100
  nosym            = .true.
  ntyp             = 2
  nat              = 15
  ibrav            = 0
  occupations      = 'smearing'
  degauss          = 5e-06
  smearing         = 'gauss'
/
&ELECTRONS
  conv_thr         = 1e-08
  diagonalization  = 'david'
/
&IONS
  ion_dynamics     = 'bfgs'
/
&CELL
  cell_dynamics    = 'bfgs'
  press_conv_thr   = 5e-01
/

ATOMIC_SPECIES
B 10.81 B.pz-n-rrkjus_psl.0.1.UPF
C 12.011 C.pz-n-rrkjus_psl.0.1.UPF

K_POINTS automatic
8 8 8 0 0 0

CELL_PARAMETERS angstrom
4.58283730577607 -0.000000000000000 -0.000000000000000
1.16129085602021 3.43135714154848 2.80706064880702
1.16129085602021 -2.05537829284453 3.92800475970183

ATOMIC_POSITIONS angstrom
B 3.3619136624 1.0889487689 5.5287949508
B 5.2193189764 2.0978601555 3.4409168209
B 5.2277464203 -0.4835387058 3.9636916835
B 3.6993964849 0.1967777807 1.2335642753
B 1.9508488606 -1.0439963497 3.0002903692
B 1.8302113905 1.8227080958 2.7480896670
B 5.2445056379 1.1556435040 6.9133573703
B 6.4533811907 2.0423337960 5.2094693037
B 6.4055902271 0.2744162540 5.6130491833
B 1.5810644713 -0.0816060140 -0.0021987089
B 0.3279153902 -0.3783839889 1.3098592932
B 0.2595147427 1.2415827200 0.7662406411
C 4.2449402643 0.5456566391 3.9104349192
C 2.7213374781 0.6471416780 2.6511078241
C 3.4353622666 0.6428238700 3.1457544057

```

Рисунок 2.9 – Приклад вхідного файлу для проведення структурної оптимізації

Як видно із рисунка 2.9 більшість параметрів такі як і у вхідному файлі для SCF розрахунку, проте додаються “*etot_conv_thr*”, “*forc_conv_thr*” та “*press_conv_thr*”, що визначають поріг збіжності для повної енергії, сил та ґратки відповідно. Надалі релаксації проводились в режимі “*vc-relax*” й, за необхідності накласти обмеження на ґратку, задавався параметр “*cell_dofree*” в розділі “*CELL*”. Ці та інші параметри більш детально описані в інструкції користувача [57].

Кінцева частина вихідного файлу після проведення структурної оптимізації в якому наведені її результати, а саме повна енергія, розміри комірки, позиції атомів, густина та кінцевий об’єм комірки показано на рисунку 2.10.

```

Energy error          =      3.3E-07 Ry
Gradient error        =      2.4E-04 Ry/Bohr
Cell gradient error    =      1.5E-01 kbar

bfgs converged in  21 scf cycles and  20 bfgs steps
(criteria: energy <  1.0E-06 Ry, force <  1.0E-03 Ry/Bohr, cell <  5.0E-01 kbar)

End of BFGS Geometry Optimization

Final enthalpy          =      -111.3115084024 Ry

File /home/vladbi/espresso/tmp/pwscf.bfgs deleted, as requested
Begin final coordinates
new unit-cell volume =      726.74078 a.u.^3 (    107.69187 Ang^3 )
density =              2.55580 g/cm^3

CELL_PARAMETERS (angstrom)
5.104184876    0.090243682    0.511016587
1.711135317    3.513433637    3.324115114
1.697325568   -1.957211158    4.428519563

ATOMIC_POSITIONS (angstrom)
B          4.3295702929          1.2443997896          6.3286637051
B          6.0227794805          2.2622088029          4.3816682271
B          6.0158885427         -0.4569582998          4.9307083920
B          4.1900862822          0.3259278195          1.7760881642
B          2.4967797737         -0.6918233526          3.7231348689
B          2.5036690642          2.0274396369          3.1741039296
B          6.8144673406          1.5695008798          7.9699570284
B          7.9166056589          2.2318601526          6.7027123517
B          7.9120777216          0.4621309104          7.0599362824
B          1.7050892846          0.0010216062          0.1348351158
B          0.6029774388         -0.6613082884          1.4022136816
B          0.6074434333          1.1082613140          1.0449183539
C          5.1993242473          0.9668799456          4.9641829189
C          3.3201513055          0.6035334657          3.1404281358
C          4.2594130801          0.7853989305          4.0525200306

End final coordinates

```

Рисунок 2.10 – Кінцева частина вихідного файлу після проведення структурної оптимізації

2.5 Підбір параметрів SCF розрахунку та тестування різних наборів псевдопотенціалів

Щоб бути впевненим в розрахунках, для кожної атомної конфігурації було проведено підбір параметрів SCF розрахунку та тестування різних наборів псевдопотенціалів. Методологія цього процесу наступна:

- попередньо обираються декілька наборів псевдопотенціалів;
- для кожного набору визначаються збіжні параметри SCF розрахунку;

в) тестування із простішими системами.

2.5.1 Попередній вибір наборів псевдопотенціалів

Псевдопотенціали обирались із бібліотек PSlibrary[59] та GBRV[60]. При попередньому виборі псевдопотенціалів було розглянуто рекомендації наведені в бібліотеці Standard Solid State Pseudopotentials (SSSP)[61].

Метод спрощення складних взаємодій між валентними електронами та електронами осердя визначається типом псевдопотенціалу. Зазвичай обирають між “*Norm conserving*” (NC), “*Ultrasoft*” (US) та “*Projector augmented wave*” (PAW) виходячи з задачі та досліджуваної системи. US псевдопотенціали є найшвидшими [62], PAW мають найвищу точність [63], а NC є найстарішими та, як наслідок, сумісні із багатьма пакетами програм.

Обмінно-кореляційний функціонал описує багатоелектронну квантово-механічну поведінку через електронну густину, не вдаючись до багатоелектронних хвильових функцій.

Існують різні типи обмінно-кореляційних функціоналів, такі як апроксимація локальної щільності (LDA), узагальнена градієнтна апроксимація (PBE) та гібридні функціонали, кожен з яких має різні рівні складності та точності. Наприклад, LDA є досить точним для визначення геометрії кристалічної ґратки, але він є досить неефективним для термохімії [64].

Ці псевдопотенціали включають релятивістські поправки, необхідні для точного моделювання важких елементів. Релятивістські ефекти стають все більш важливими для елементів з більшим атомним номером через більший ядерний заряд, який збільшує швидкість електронів внутрішньої оболонки, близьку до швидкості світла [62], [65].

Включення релятивістських ефектів робить релятивістські псевдопотенціали складнішими й, як наслідок, важчими для розрахунку.

2.5.2 Визначення оптимальних параметрів SCF розрахунку

Енергія обрізки плоскохвильових функцій “*ecutwfc*”, сітка Монкхорста-Пака “*K_POINTS*” та гаусове розсіювання для інтегрування зони Бріллюена “*degauss*” було обрано таким чином, щоб сумарна похибка повної енергії не перевищувала 1 меВ/атом. Підбір параметрів проводиться для кожного набору псевдопотенціалів окремо. Похибка оцінюється відносно значення, що точно дасть високу точність, але буде дорогим в обчисленні.

Для визначення параметрів використовувався модуль “*conv*” бібліотеки “*myhelper*”, Python код модуля наведено в додатку А. Результати роботи модуля наведено в таблиці 2.2, а залежність похибки повної енергії на атом від параметра “*ecutwfc*” наведено на рисунку 2.11.

Таблиця 2.2 – Результат роботи модуля “*conv*”

ecutwfc, Рідберг	Повна енергія, еВ	Час розрахунку	Похибка повної енергії на атом*, меВ/атом	Похибка сумарної сили*, еВ/ Å
40	-2623.786	18.71s	8.08	0.0258
60	-2623.864	22.23s	2.89	0.0089
80	-2623.889	25.51s	1.20	0.0034
90	-2623.891	26.52s	1.06	0.0036
100	-2623.895	27.34s	0.80	0.0032
110**	-2623.900	35.59s	0.51	0.0013
120	-2623.902	37.34s	0.32	0.0008
140	-2623.904	44.19s	0.20	0.0007
160	-2623.905	49.35s	0.14	0.0004
400	-2623.907	3m19.03s	0.00	0.0000

* - похибка розраховується відносно “*ecutwfc*” = 400 Рідберг

** - обране значення для подальшого SCF розрахунку

В таблиці 2.2 наведено повну енергію, час обчислень і похибки як для повної енергії на атом, так і для суми сил при зміні параметра “*ecutwfc*”. Похибки розраховано відносно еталонного значення 400 Рідберг. Щоб забезпечити запас точності було обрано значення енергії обрізки 110 Рідберг, оскільки оптимальні величина згладжування “*degauss*” і сітка k-точок будуть вносити похибки.

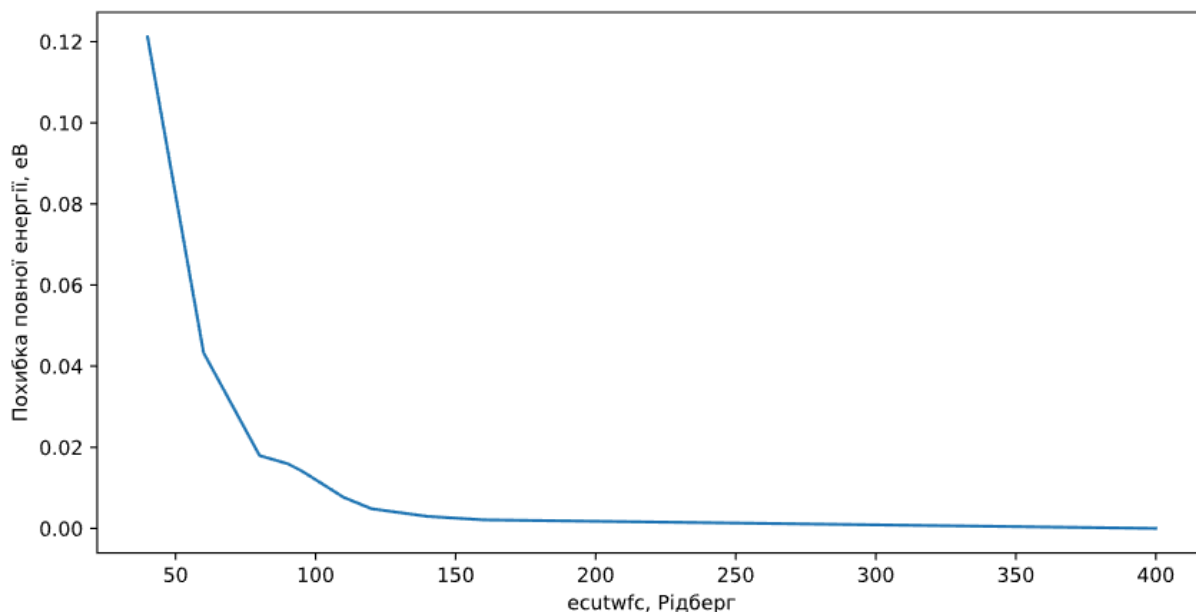


Рисунок 2.11 – Залежність похибки повної енергії на атом від параметра “*ecutwfc*”

Аналогічно визначається оптимальна сітка Монкхорста-Пака “*K_POINTS*” та гаусове розсіювання для інтегрування зони Бріллюена “*degauss*”. Для сітки Монкхорста-Пака похибка визначається відносно сітки із великою кількістю k-точок, а для величини “*degauss*” відносно найменш можливого його значення.

Примітка 1. Похибка від “*ecutwfc*” залежить тільки від якісного складу системи та набору псевдопотенціалів.

Примітка 2. Похибка від сітки k-точок не залежить від обраного набору псевдопотенціалів

2.5.3 Тестування на простіших системах

Перш ніж застосовувати вибрані псевдопотенціали з обраними розрахунковими параметрами до цільових систем, необхідно перевірити їхню точність та обчислювальну ефективність. Цей процес перевірки виконується шляхом застосування псевдопотенціалів до простішої системи, яка є добре дослідженою теоретично та експериментально.

Псевдопотенціали, які дають найкоротший час обчислень при точному відтворенні відомих властивостей, зокрема енергій утворення і параметрів ґратки, вважаються оптимальними для подальших досліджень.

2.6 Енергія утворення (Ентальпія утворення)

Енергія утворення ($\Delta_f E$) представляє енергію вивільнену або поглинену внаслідок формування хімічної сполуки певної структурної конфігурації з відповідних кількостей атомів хімічних елементів, які її утворюють у структурних формах їх простих речовин стійких за стандартних умов [66]. Розраховується за формулою (1):

$$\Delta_f E = E_{tot}(Product) - \sum_{i=1}^n E_{tot}(Reactant_i) \quad (1)$$

де E_{tot} – повна внутрішня енергія системи;

$\Delta_f E$ – енергія утворення.

Усі реагенти мають бути взяті в їхніх термодинамічних основних станах. Наприклад, для вуглецю можна розглядати дві стабільні фази: алмаз і графіт. Перша не підходить, бо утворюється за великих тисків і температур, а друга як раз і буде термодинамічним основним станом.

Також енергію утворення можна записати як **ентальпію утворення** за умов $T = 0\text{ K}$ та $P = 0\text{ Па}$. Енергія Гіббса:

$$G = U + PV - TS = H - TS$$

За умов сталого тиску та температури:

$$\Delta G = \Delta U + P\Delta V - T\Delta S = \Delta H - T\Delta S$$

За $T=0, P=0$:

$$\Delta H^0_0 = \Delta G = \Delta U$$

А зміну внутрішньої енергії можемо порахувати як

$$\Delta U = \Delta_f E = E_{tot}(Product) - \sum_{i=1}^n E_{tot}(Reactant_i)$$

Якщо енергія утворення менша за нуль/від'ємна, то структура може існувати із певною імовірністю. За більших за нуль значень структура є термодинамічно нестабільною.

2.7 Адаптація методики комп'ютерного моделювання одновісного стиску для пакета програм Quantum Espresso

Методологію, що описана в [1] було адаптовано для використання із Quantum Espresso шляхом розробки програмного коду Python, який подано в додатку Б. Алгоритм роботи містить наступні кроки:

а) матеріал піддається одновісному стисненню вздовж заданого кристалографічного напрямку. Це досягається шляхом масштабування атомних

позицій в матеріалі, ефективно імітуючи ефект деформації стиснення. Виконання цієї задачі забезпечує розроблена підпрограма “*scale_in_direction*”;

б) для кожного етапу стиснення проводиться релаксація в режимі “*vc-relax*” із використанням параметра “*cell_dofree = fixc*”, тобто під час релаксації параметр комірки “*c*” не змінюється;

в) потім з вихідного файлу релаксації зчитується повна енергія системи. Ця енергія є важливим параметром, оскільки відображає, як структура матеріалу реагує на стиснення;

в) поряд із повною енергією зчитується значення тиску вздовж осі “*c*” на систему під час стиснення. Цей показник дає уявлення про механічну реакцію матеріалу.

г) процедура повторюється і кожного разу деформація збільшується на 1% відносно початкової структури, що дозволяє проаналізувати, як змінюються енергія і напруження в матеріалі в міру його стиснення.

Методика була апробована на гексагональній суперкомірці 2x2x1 (чотири гексагональних елементарних комірок $B_{12}CCS$ взятих з Materials Project [44]), що була змодельована відповідно до [1]. Візуалізація суперкомірки подана на рисунку 2.11.

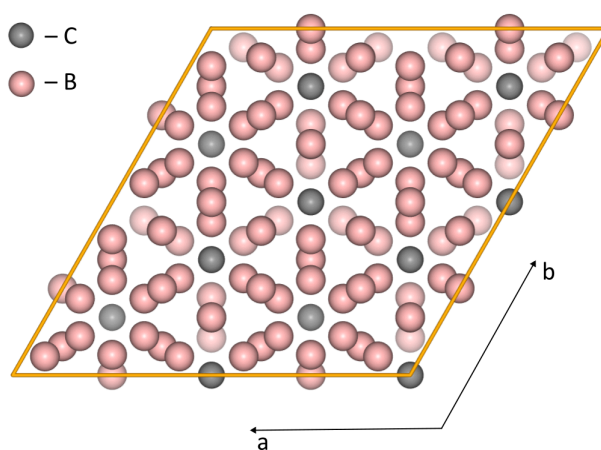


Рисунок 2.11 – Гексагональна суперкомірка 2x2x1

Для забезпечення високої точності та з огляду на велику зміну об'єму при стисканні структури (і очікувану раптову зміну об'єму при фазовому переході),

прийнято високу енергію обрізки 100 і малий поріг збіжності для SCF розрахунку та сил, що діють на атоми 10^{-6} Рідберг та 10^{-3} Рідберг/Бор, відповідно. Оскільки 180-атомна суперкомірка є досить великою, для дискретизації зони Бріллюена використовувалась лише одна Γ -точка (гамма точка). Для стабільності розрахунку було застосовано гаусівське згладжування 10^{-4} Рідберг.

Графік залежності одновісного напруження від одновісної деформації із [1] наведено на рисунку 2.12.

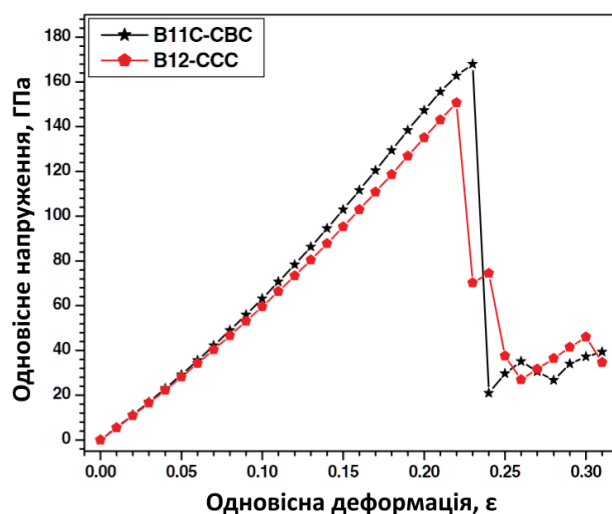


Рисунок 2.12 – Залежність одновісного тиску від одновісної деформації для $(B_{11}C_p)C-B-C$ та $(B_{12})C-C-C$

Графік залежності одновісного напруження від одновісної деформації, що отриманий за допомогою адаптованої методики наведено на рисунку 2.13.

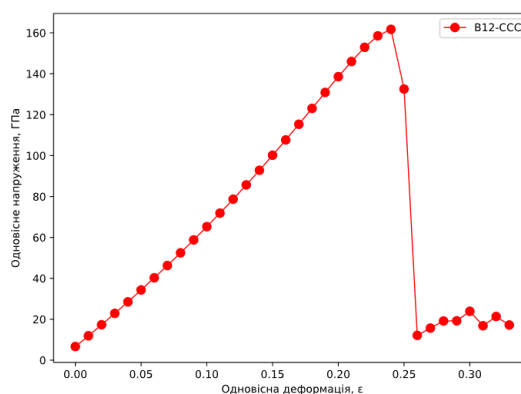


Рисунок 2.13 – Залежність одновісного напруження від одновісної деформації для $(B_{12})C-C-C$

Червоні криві, що зображені на рисунках 2.12 та 2.13, ілюструють залежність одновісного напруження від одновісної деформації для $(B_{12})C-C-C$, що відображає реакцію матеріалу на стиснення вздовж осі “ c ”. На обох графіках Напруження спочатку лінійно зростає з деформацією, що вказує на пружну поведінку. Після досягнення певного порогу деформації (для [1] $\epsilon_{пр} = 0.22$ і $\sigma_{max} = 151$ GPa, а для адаптованої методики $\epsilon_{пр} = 0.24$ і $\sigma_{max} = 162$ GPa) обидва графіки демонструють різке зниження напруження, що свідчить про початок аморфізації або структурного руйнування.

Подібність значень напружень і деформацій між двома графіками свідчить про узгодженість фундаментальної механічної реакції матеріалу, незважаючи на відмінності в методах розрахунку (VASP та Quantum Espresso). Незначні розбіжності можуть виникати через різні псевдопотенціали, точність чисельних методів або відмінності критеріїв збіжності.

Також в обох випадках, як в [1], так і в адаптованій методиці, при аморфізації, ланцюг карбіду бору утворює кутову конфігурацію. Візуалізацію атомної конфігурації аморфного карбіду бора наведено на рисунку 2.14.

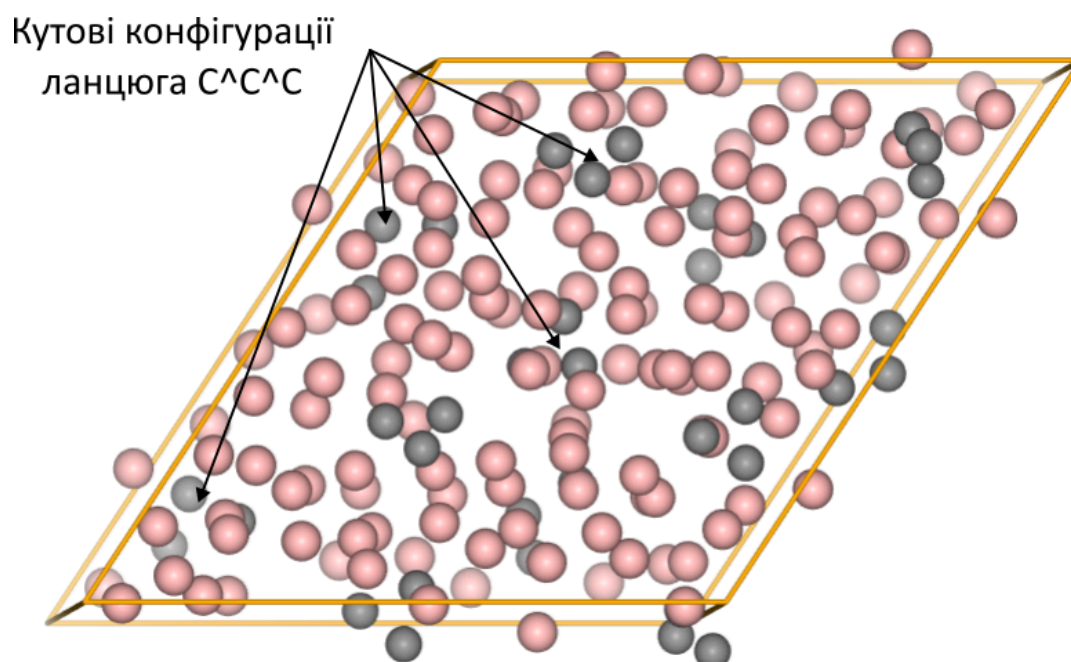


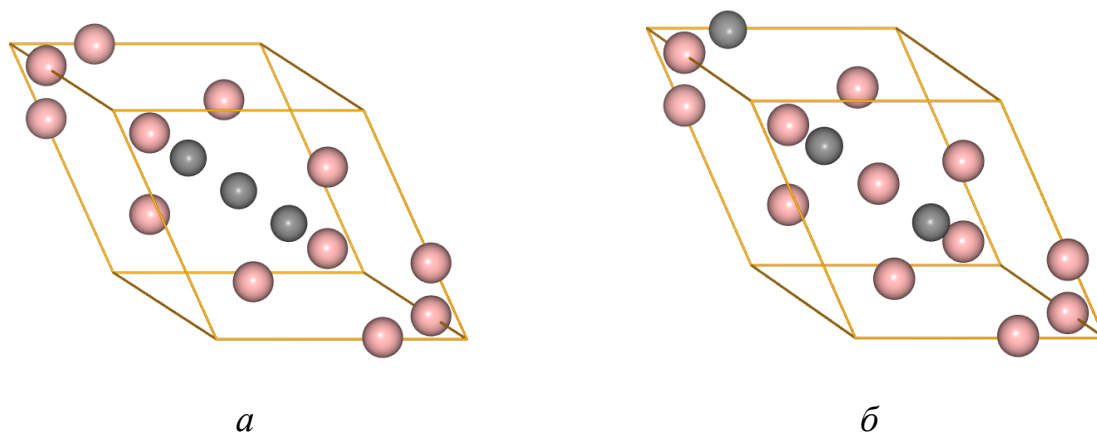
Рисунок 2.14 – Візуалізація атомної конфігурації аморфного карбіду бора

3 РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕНЬ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

3.1 Вихідні атомні конфігурації

3.1.1 Карбід бору

Атомні конфігурації ромбоєдричних комірок основних політипів стехіометричного карбіду бору були взяті із Materials project [44], їх візуалізація наведена на рисунку 3.1.



a – політип карбіду бору $(B_{12}C-C-C)$; *б* – політип карбіду бору $(B_{11}C_p-C-B-C)$

Рисунок 3.1 – Візуалізація примітивних комірок основних політипів стехіометричного карбіду бору

Атомна конфігурація, що зображена на рисунку [3.1 б](#), була отримана шляхом еквівалентного перетворення оригіналу із Materials project [44]. Ціллю цього перетворення було наочно зобразити міжікосаедричний ланцюг, а не ікосаедр.

3.1.2 Вуглець

Термодинамічним основним станом для вуглецю є графіт. Примітивна комірка була отримана із бази даних AMCSD [45]. Ця гексагональна комірка складається із 4-ох атомів вуглецю, її візуалізація наведена на рисунку 3.2.

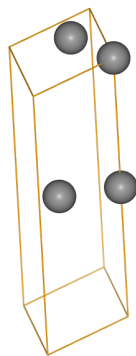


Рисунок 3.2 – Примітивна комірка графіту

3.1.3 Бор

Термодинамічним основним станом для бору є β -бор. Примітивна комірка була взята із бази даних AMCSD [45]. Ця ромбоєдрична комірка складається зі 105-и атомів бору, її візуалізація наведена на рисунку 3.3.

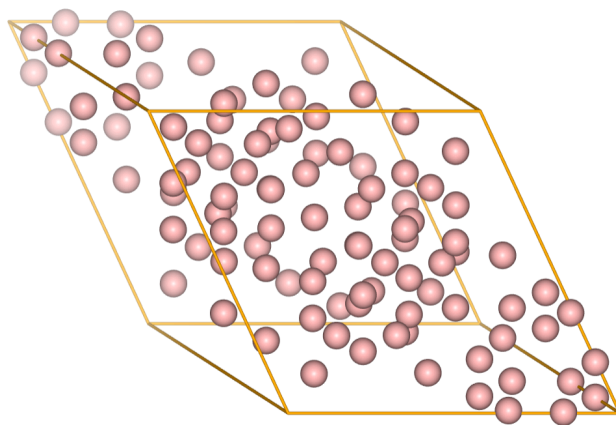


Рисунок 3.3 – Примітивна комірка β -бору

3.1.4 Алюміній

Термодинамічним основним станом для алюмінію є ГЦК алюміній. Примітивна комірка була взята із бази даних AMCSD [45]. Ця кубічна комірка складається із 4-ох атомів алюмінію, її візуалізація наведена на рисунку 3.4.

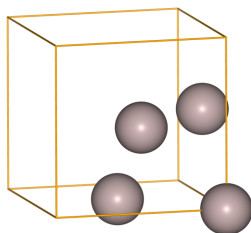


Рисунок 3.4 – Примітивна комірка ГЦК алюмінію

3.1.5 Моделювання карбіду бору легованого алюмінієм

Виходячи із робіт Гарбуза [19] та Васільєва [21] було розглянуто структури $(B_{12})C-Al-C$, $(B_{11}C_p)C-Al-C$, $(B_{12})C-Al-C$, $(B_{11}Al_e)C-C-C$, $(B_{11}Al_p)C-C-C$, $(B_{11}Al_e)C-B-C$, $(B_{11}Al_p)C-B-C$, де алюміній заміщено або у міжікосаедричний ланцюг, зі зміною конфігурації ланцюга на кутову та без неї, або в різні положення ікосаедра карбіду бору. Результати моделювання усіх структур із лінійною конфігурацією ланцюга наведені на рисунку 3.5.

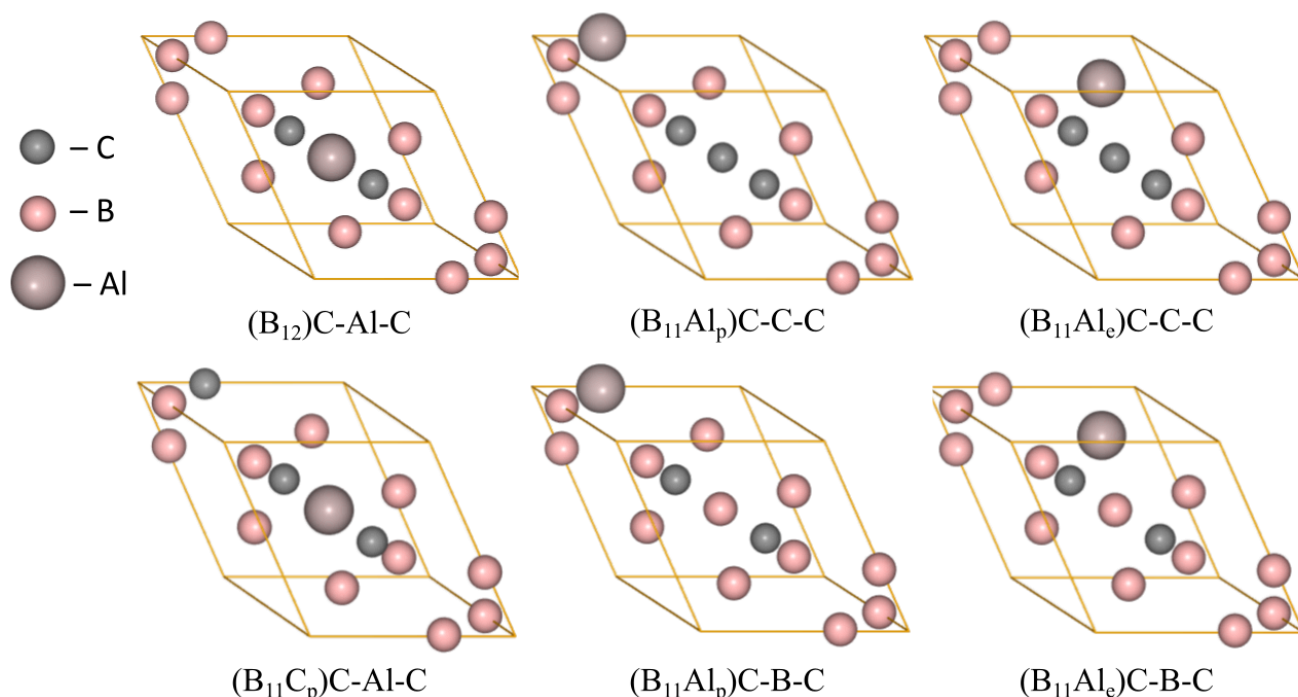


Рисунок 3.5 – Результати моделювання структур із лінійною конфігурацією ланцюга.

Моделювання структури $(B_{12})C\text{--}Al\text{--}C$ із кутовою конфігурацією ланцюга проходило відповідно до [21]. Спочатку було замінено центральний атом в міжкосаедричному ланцюгу й утворено атомну конфігурацію $(B_{12})C\text{--}Al\text{--}C$, що зображена на рисунку 3.5. Потім Al було зміщено таким чином, щоб кут β при вершині трикутника, який утворюється ланцюгом $C\text{--}Al\text{--}C$ дорівнював 120° (sp^2 гібридизація), кут повороту щодо осі $[111]$ довільний. Результати моделювання $(B_{12})C\text{--}Al\text{--}C$ подано на рисунку 3.6.

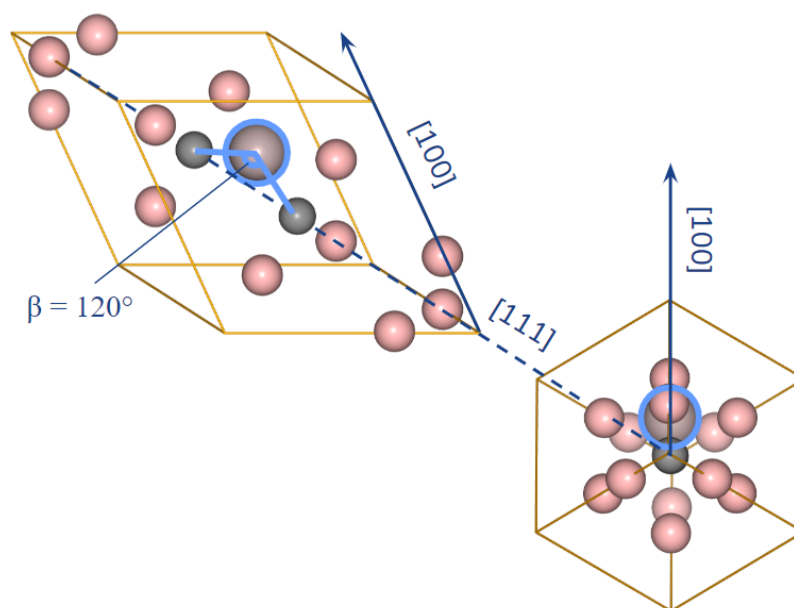


Рисунок 3.6 – Результат моделювання $(B_{12})C\text{--}Al\text{--}C$ із демонстрацією кута β

3.2 Підбір параметрів SCF розрахунку

Відповідно до [1] та [21], а також рекомендацій бібліотеки SSSP [61], для розрахунку енергій утворення та оцінки стабільності конфігурацій було обрано US псевдопотенціали із LDA наближенням для обмінно-кореляційного функціонала, а для дослідження поведінки при одновісному стиску використовувалися PAW псевдопотенціали із PBE наближенням для обмінно-кореляційного функціонала.

Псевдопотенціали були залучені з PSLibrary [59].

Параметри SCF розрахунку були підібрані відповідно до розділу 2.5.2 і використані у роботі значення подано в таблицях 3.1 та 3.2 для наборів US та PAW псевдопотенціалів відповідно.

Таблиця 3.1 – Параметри SCF розрахунку для набору US псевдопотенціалів

Структура	ecutwfc, Ry	Сітка k-точок	degauss, Ry
(B ₁₂)C-C-C	100	6x6x6	0
(B ₁₁ C _p)C-B-C	100	6x6x6	0
B ₄ C-Al*	100	8x8x8	0.00005
Алюміній	100	18x18x18	0.00001
β-бор	100	4x4x4	0
Графіт	100	8x8x4	0

* – Підбір параметрів SCF розрахунку проводився по атомній конфігурації (B₁₂)C-Al-C

Таблиця 3.2 – Параметри SCF розрахунку для набору PAW псевдопотенціалів

Структура	ecutwfc, Ry	Сітка k-точок	degauss, Ry
(B ₁₂)C-C-C	110	6x6x6	0
(B ₁₁ C _p)C-B-C	110	6x6x6	0
B ₄ C-Al*	110	8x8x8	0.00005
Алюміній	100	18x18x18	0.00001
β-бор	100	4x4x4	0
Графіт	110	8x8x4	0

* – Підбір параметрів SCF розрахунку проводився по атомній конфігурації (B₁₂)C-Al-C

3.3 Визначення найбільш імовірного основного стану карбіду бору, легованого алюмінієм

3.3.1 Оптимізація структури

В цьому розділі, було проведено структурну оптимізацію відповідно до розділу 2.4.2, щоб уточнити положення атомів та розміри розрахункові розміри комірок, а також визначити повні енергії структур для LDA US псевдопотенціалів. Повні енергії реагентів та продуктів наведені в таблиці 3.3, а розрахункові та експериментальні розміри елементарних комірок – в таблиці 3.4.

Таблиця 3.3 – Повні енергії реагентів та продуктів

Структура		Повна енергія, eV
Реагенти*	β -бор	-85.412
	Графіт	-162.827
	Алюміній	-74.693
B_4C	$(B_{12})C-C-C$	-1514.475
	$(B_{11}C_p)C-B-C$	-1515.620
	$(B_{12})C-B-C$	-1513.014
B_4C-Al	$(B_{12})C-Al-C$	-1426.476189
	$(B_{12})C^{\wedge}Al^{\wedge}C$	-1427.253039
	$(B_{11}C_p)C^{\wedge}Al^{\wedge}C$	-1503.752928
	$(B_{11}Al_p)C-B-C$	-1425.330847
	$(B_{11}Al_e)C-C-C$	-1501.491315
	$(B_{11}Al_p)C-C-C$	-1501.647518
	$(B_{11}Al_e)C-B-C$	-1424.684868

* – повна енергія наведена для одного атому

Таблиця 3.4 – Розрахункові та експериментальні розміри елементарних комірок

Структура		a, Å	b, Å	c, Å	α , °	β , °	γ , °
Реагенти	Алюміній експ. [67]	4.042	4.042	4.042	90.000	90.000	90.000
	Алюміній	3.980	3.980	3.980	90.000	90.000	90.000
	β -бор експ. [68]	10.106	10.106	10.106	65.275	65.275	65.275
	β -бор	10.002	10.002	10.002	65.372	65.372	65.373
	Графіт експ.[69]	2.462	2.462	6.708	90.000	90.000	120.00
	Графіт	2.446	2.446	6.585	90.000	90.000	120.00
B_4C	B_4C експ. [10]	5.16	5.16	5.16	65.7	65.7	65.7
	$(B_{12})C-C-C$	5.131	5.131	5.131	65.890	65.890	65.890
	$(B_{11}C_p)C-B-C$	4.994	5.152	5.152	65.123	66.115	66.115
B_4C-Al	$(B_{12})C-Al-C$	5.280	5.280	5.280	63.660	63.660	63.660
	$(B_{12})C^{\wedge}Al^{\wedge}C$	5.288	5.196	5.288	64.357	63.578	64.356
	$(B_{11}Al_p)C-B-C$	5.781	5.176	5.176	64.060	62.355	62.355
	$(B_{11}Al_e)C-B-C$	5.250	5.277	5.277	65.143	67.407	67.403
	$(B_{11}C_p)C^{\wedge}Al^{\wedge}C$	5.072	5.275	5.275	63.780	64.811	64.811
	$(B_{11}Al_e)C-C-C$	5.241	5.265	5.265	65.304	67.212	67.212
	$(B_{11}Al_p)C-C-C$	5.765	5.117	5.117	65.445	62.872	62.872

Як видно із таблиці 3.4 розрахункові розміри ґраток добре збігаються з експериментальними, невеликі розбіжності можна пояснити використанням LDA обмінно-кореляційного функціонала, що дещо занижує значення розміру комірки [70], а також іншими теоретичними спрощеннями, що використовуються в Quantum Espresso, зокрема відсутність теплових коливань атомів.

Візуалізацію релаксованих атомних конфігурацій легованого алюмінієм карбиду бору наведено на рисунку 3.7.

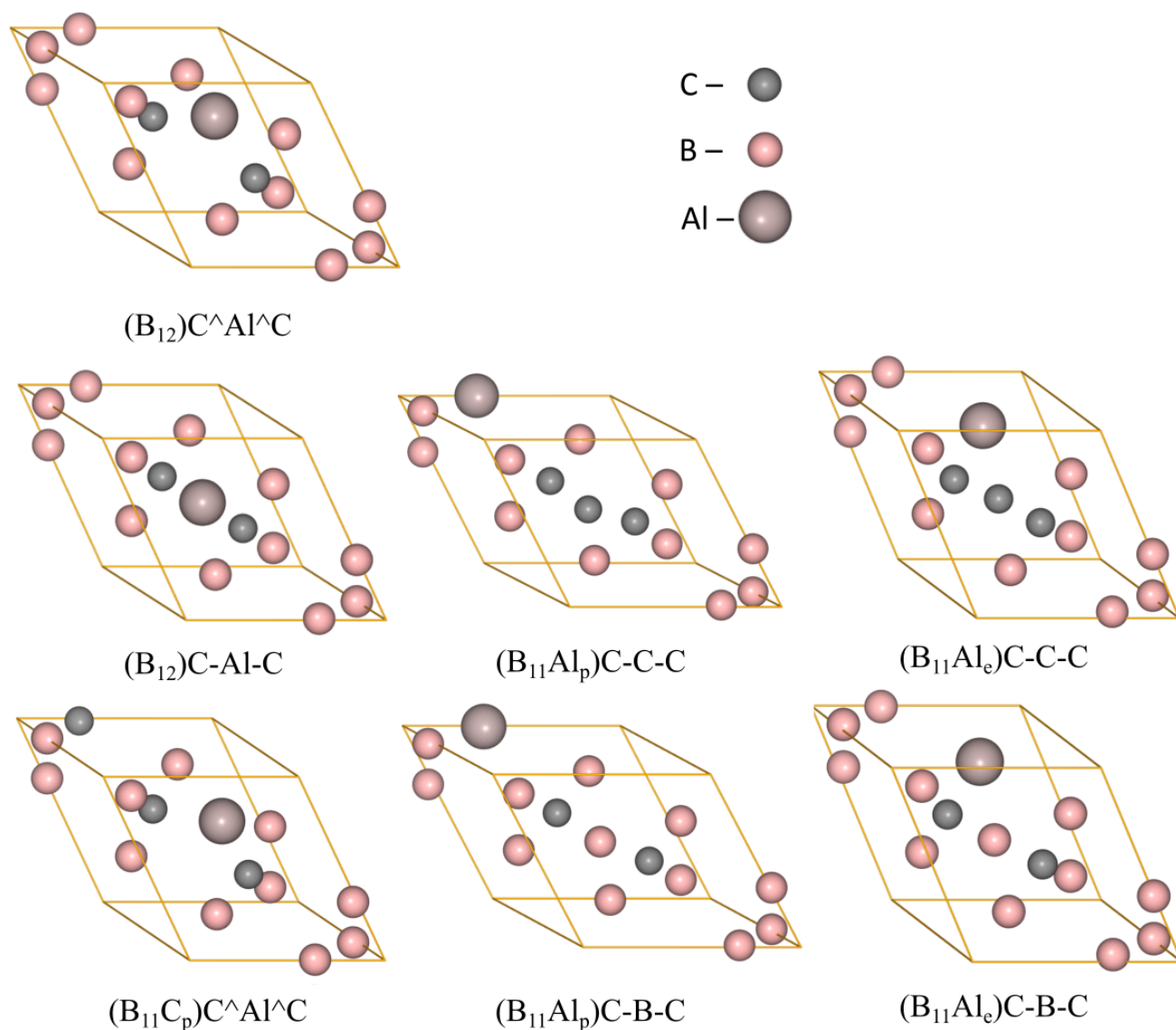


Рисунок 3.7 – Релаксовані атомні конфігурації легованого алюмінієм карбиду бору

Структурна оптимізація показала, що у разі заміщення алюмінію в центр міжкосеадричного ланцюга, останній може утворювати кутову конфігурацію. В наступному розділі буде більш детально розглянуто, точне розташування алюмінію в ланцюгу для конфігурацій $(B_{12})C^{\wedge}Al^{\wedge}C$ та $(B_{11}C_p)C^{\wedge}Al^{\wedge}C$.

3.3.2 Уточнення положення Al в структурах, що мають кутову конфігурацію ланцюга

Детально розглядаємо вплив заміщення Al в центр інтеркосаедричного ланцюга на тонку структуру останнього, яка є визначальним фактором зменшення аморфізації.

Для генерації різних положень алюмінію в ланцюзі використовувалася розроблена спільно автором та співкерівником Васільєвим О.О. підпрограма “*gen_ang_b12c2x_conf*”, текст якої наведено в додатку В. Позицію легуючого атома можна задати вказавши наступні параметри:

- r - радіус від центра лінії між двома атомами вуглецю до атома Al;
- θ - кут, що визначає положення атома Al на крузі із радіусом r , центр якого лежить на середині відрізка, що проходить між двома атомами вуглецю. Цей кут також проходить через кристалографічну вісь $[111]$;

Всі вище названі параметри, а також кут гібридизації ланцюга β зображені на рисунку

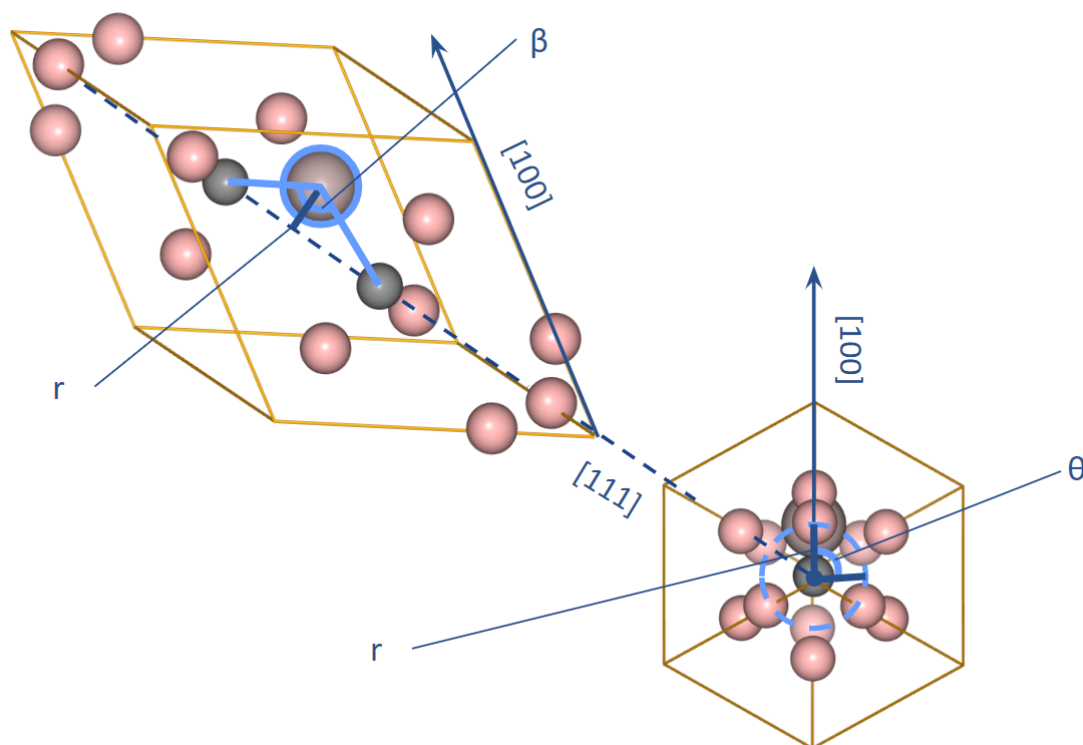


Рисунок 3.8 – Демонстрація параметрів r , θ , β , на прикладі $(B_{12})C^{\wedge}Al^{\wedge}C$

3.3.2.1 $(B_{12})C^{\wedge}Al^{\wedge}C$

Спочатку було розглянуто залежність повної енергії $(B_{12})C^{\wedge}Al^{\wedge}C$ від r при $\theta = 0^\circ$, що наведена на рисунку 3.9.

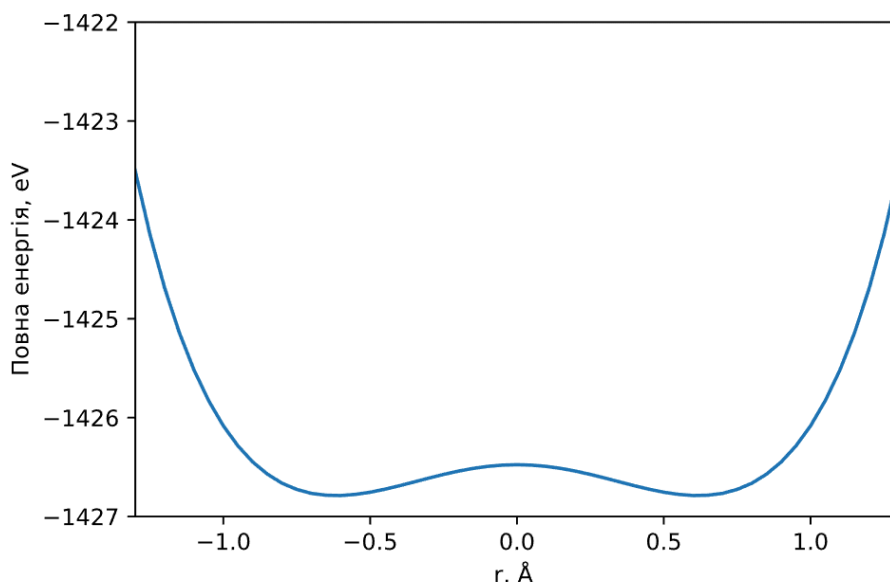


Рисунок 3.9 – Графік залежності повної енергії від r при $\theta = 0^\circ$ для $(B_{12})C^{\wedge}Al^{\wedge}C$

З графіка видно, що не існує активаційного бар'єра між лінійною $(B_{12})C-Al-C$ та кутовою $(B_{12})C^{\wedge}Al^{\wedge}C$ конфігураціями, також остання має меншу енергію. Таким чином, легування Al в ланцюг політипу $(B_{12})C-C-C$ завжди змінює конфігурацію ланцюга на кутову, що своєю чергою потенційно призведе до утворення диполів, а складні диполь-дипольні взаємодії можуть мати суттєвий вплив на енергію утворення легованого алюмінієм карбиду бору.

Потім, шляхом розміщення атомів алюмінію по колу із $r = 0.7 \text{ \AA}$ (оскільки мінімуми енергій на графіку 3.9 припадають саме на цю величину) з кроком $\theta = 11.25^\circ$ і проведення структурної оптимізації для всіх конфігурацій, було визначено оптимальні положення центрального атома Al, які виділено синім кольором на рисунку 3.10. Оптимальні радіус r та значення кута θ становлять $r = 0.94 \text{ \AA}$, $\theta = 0^\circ, 60^\circ, 120^\circ, 180^\circ, 240^\circ, 300^\circ, 360^\circ$. Ці конфігурації є виродженими за енергією і є найкращими кандидатами на дипольне впорядкування.

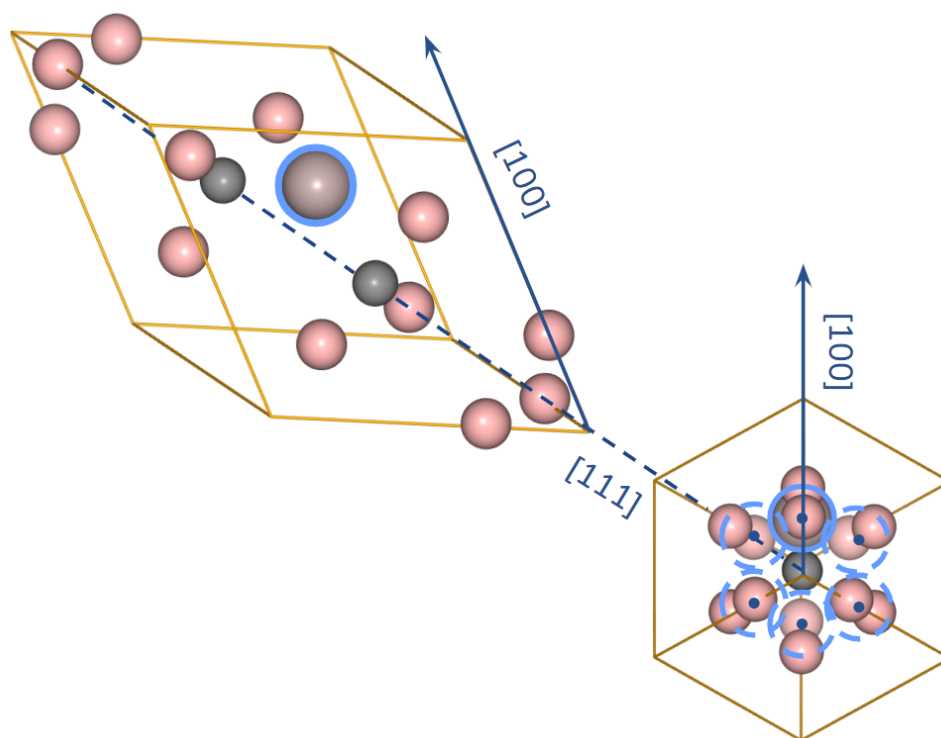


Рисунок 3.10 – Оптимальні положення центрального атома Al в $(B_{12})C^{Al}C$

3.3.2.1 $(B_{11}C_p)C^{Al}C$

Спочатку було розглянуто залежність повної енергії $(B_{12})C^{Al}C$ від r при $\theta = 0^\circ$, що наведена на рисунку 3.11.

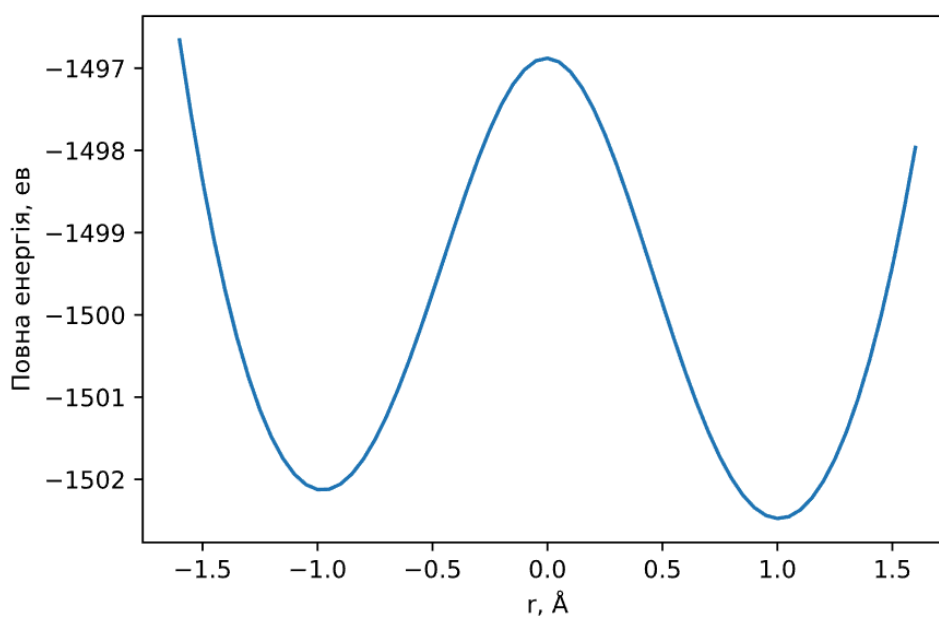


Рисунок 3.11 – Графік залежності повної енергії від r при $\theta = 0^\circ$ для $(B_{11}C)C^{Al}C$

З графіка видно, що лінійна конфігурація $(B_{11}C)C-Al-C$ ($r = 0 \text{ \AA}$) має велике значення повної енергії, а отже вона не може існувати. З цього виходить, що у випадку легування Al в ланцюг політипу $(B_{11}C)C-B-C$ завжди утворюватиметься тільки $(B_{11}C)C^{\wedge}Al^{\wedge}C$. Також на графіку присутні два не еквівалентні мінімуми, що свідчать про наявність двох не вироджених позицій Al в ланцюгу.

Потім шляхом розміщення алюмінію по колу із $r = 1 \text{ \AA}$ (оскільки обидва мінімуми енергій на графіку 3.11 приблизно припадають саме на цю величину) з кроком $\theta = 11.25^\circ$ і проведення структурної оптимізації для всіх конфігурацій, було визначено два не еквівалентні можливі положення легуючого атома в ланцюзі, а саме $(B_{11}C_p)C^{\wedge}Al^{\wedge}C_{\text{lowest}}$ та $(B_{11}C_p)C^{\wedge}Al^{\wedge}C_{\text{meta}}$. Ці атомні конфігурації наведені на рисунку 3.12.

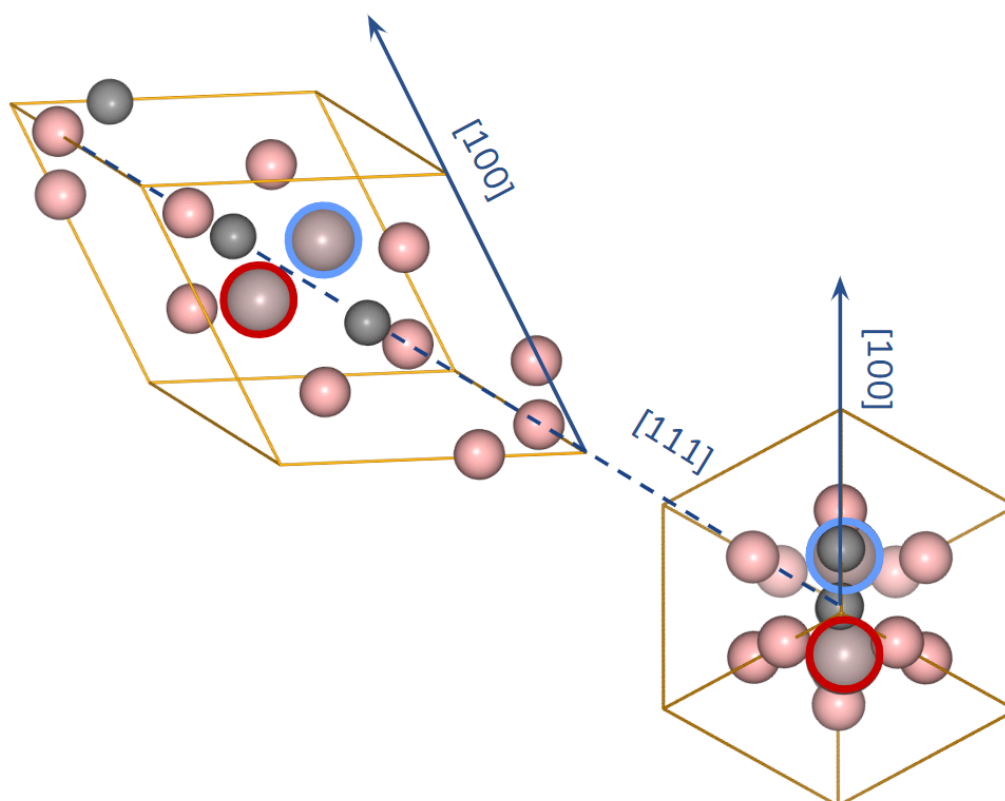


Рисунок 3.12 – Оптимальні положення центрального атома Al в $(B_{11}C)C^{\wedge}Al^{\wedge}C$

Повна енергія, оптимальні радіуси r та кути θ для обох конфігурацій наведено в таблиці 3.5

Таблиця 3.5 – Повна енергія та оптимальне положення алюмінію в ланцюгу для $(B_{11}C_p)C^{\wedge}Al^{\wedge}C$

Атомна конфігурація	Повна енергія, eV	r , Å	θ
$(B_{11}C_p)C^{\wedge}Al^{\wedge}C_{meta}$	-1503.649872	0.84	60°
$(B_{11}C_p)C^{\wedge}Al^{\wedge}C_{lowest}$	-1503.752928	0.78	240°

Як видно із таблиці $(B_{11}C_p)C^{\wedge}Al^{\wedge}C_{lowest}$ має нижчу повну енергію ніж $(B_{11}C_p)C^{\wedge}Al^{\wedge}C_{meta}$, що свідчить про те що остання є менш стабільною.

Варто зазначити, що, відповідно до розділу 3.3.4, обидві конфігурації мають суттєво більшу енергію утворення ніж $(B_{12})C^{\wedge}Al^{\wedge}C$, а отже не будуть далі розглядатись.

3.3.3 Неполярна структура

Через втрату центральної симетрії ланцюжка і досить значну різницю електронегативності між вуглецем і алюмінієм ($\Delta\chi = 0.95$), кутовий ланцюжок може утворювати диполь. При створенні суперкомірок вручну або застосуванні періодичних граничних умов до конфігурацій з кутовим ланцюгом вектор зміщення кожного атома Al був би однаковим, диполі були б спрямовані в однакових напрямках, і структура була б поляризованою, як це показано на рисунку 3.13. В той самий час, із розділу 3.3.2 стало відомо, що алюміній може займати одне із 6-и вироджених положень, при чому довжина і кут зв'язку допанта з вуглецем залишаються незмінними. Таким чином, можна очікувати, що атоми будуть зміщуватися в різних напрямках, щоб мінімізувати сумарний дипольний момент.

Для оцінки впливу різних зміщень Al було підготовлена суперкомірка $2 \times 2 \times 2$ (вісім ромбоєдричних елементарних комірок), в якій атоми алюмінію в парах на найближчій відстані між ними зміщені в антипаралельних напрямках, що зображено на рисунку 3.13. Варто звернути увагу, що межа можливої взаємодії в використаному наближенні встановлена лише для найближчих диполів, що може бути не так на практиці, особливо в конфігураціях з дефіцитом алюмінію. Крім того, ймовірно, існують більш оптимальні взаємні орієнтації диполів відносно повної енергії системи. Наближення, використане тут, було достатнім для оцінки можливого впливу на енергію формування структури в цій роботі.

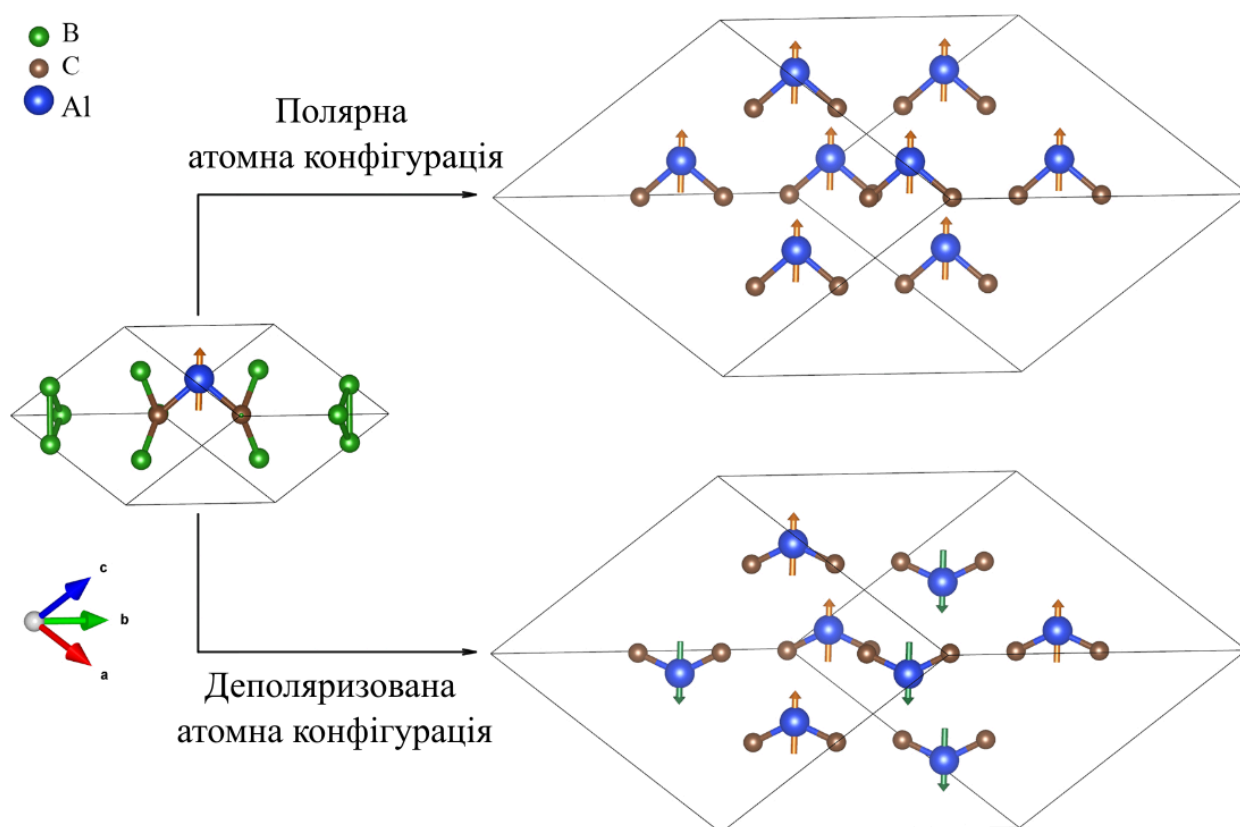


Рисунок 3.13 – Полярна та неполярна атомні конфігурації

Варто зазначити, що повна енергія неполярної атомної конфігурації $(B_{12})C^{Al}C_{np}$ становить -1427.279621 еВ. Це значення буде необхідним для розрахунку енергії утворення.

3.3.4 Енергія утворення

В цьому розділі ми визначаємо ентальпію утворення, завдяки якій можна судити про стабільність та можливість існування структури. В таблиці 3.6 подано ентальпію утворення для кожної структури.

Таблиця 3.6 – Енергії утворення

Структура		Енергія утворення, еВ/атом	Енергія утворення, кДж/моль
B ₄ C	(B ₁₂)C-C-C	-0.070	-100.899
	(B ₁₁ C _p)C-B-C	-0.146	-211.416
	(B ₁₂)C-B-C	-0.108	-156.013
B ₄ C-Al	(B ₁₂)C-Al-C	-0.079	-113.972
	(B ₁₂)C [^] Al [^] C	-0.131	-188.932
	(B ₁₂)C [^] Al [^] C _{np} *	-0.132	-191.497
	(B ₁₁ C _p)C [^] Al [^] C _l **	-0.070	-100.657
	(B ₁₁ C _p)C [^] Al [^] C _m ***	-0.063	-90.713
	(B ₁₁ C _p)C-Al-C	-0.002	-3.456
	(B ₁₁ Al _e)C-C-C	0.081	117.570
	(B ₁₁ Al _p)C-C-C	0.071	102.497
	(B ₁₁ Al _e)C-B-C	0.041	58.875

* – l (lowest) – одна із двох конфігурації, що описувалась в розділі 3.3.2.1 і має нижчу енергію.

** – m (meta) – одна із двох конфігурації, що описувалась в розділі 3.3.2.1 і має вищу енергію.

*** – np (not polarized) – конфігурація, що розглянута в розділі 3.3.3.

Як видно із таблиці 3.6 найнижче значення повної енергії для легованого карбиду бору має атомна конфігурація $(B_{12})C^{Al}C_{np}$, проте вона є досить складною у розрахунку. Тому для визначення пружних модулів та моделювання одновісного стиснення була обрана $(B_{12})C^{Al}C$.

3.4 Генерація рентгенівського дифракційного спектра

Рентгенівського дифракційний спектр, що був побудований за допомогою *рumatgen* показано на рисунку 3.14

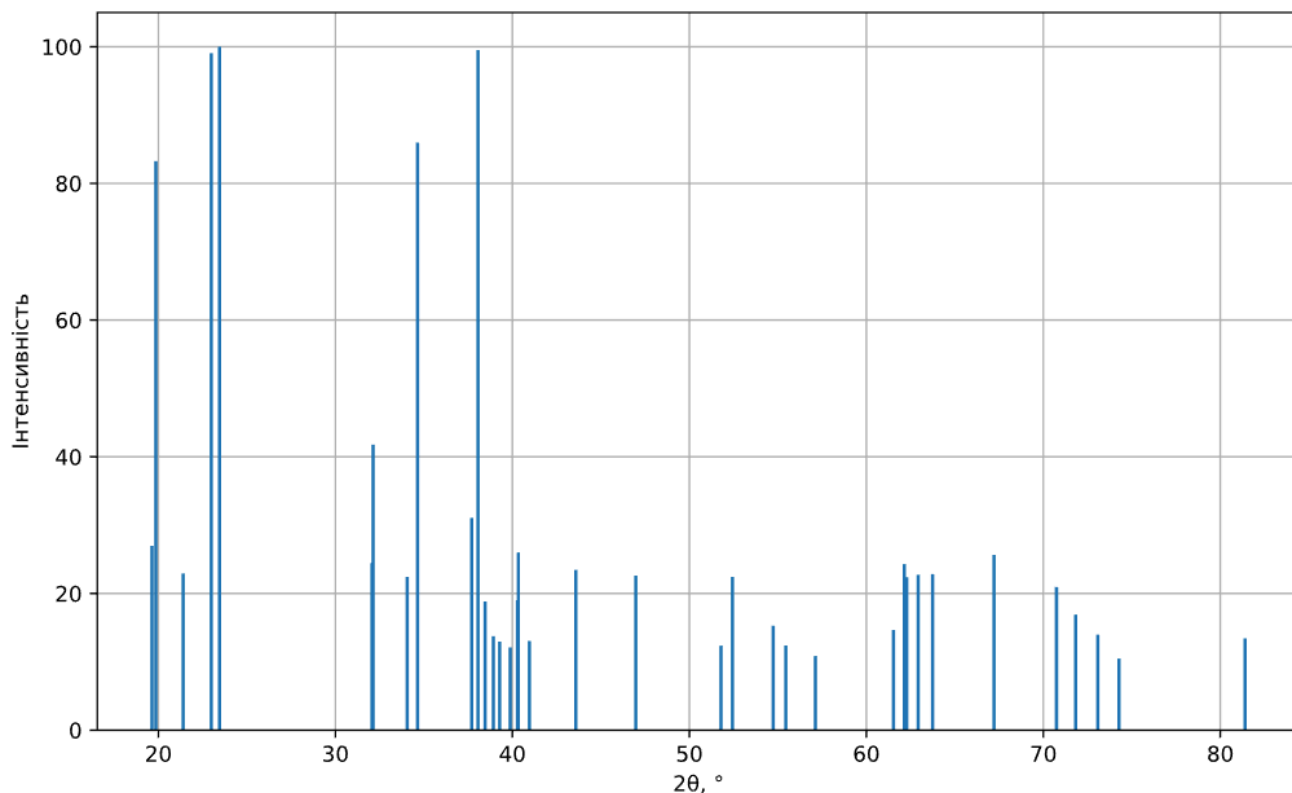


Рисунок 3.14 – Рентгенівського дифракційний спектр

Оскільки структура низькосиметрична, то рентгенівський дифракційний спектр має досить багато піків. Всі піки що мали інтенсивність менше ніж 10, було прибрано.

3.5 Розрахунок пружних модулів

Пружні модулі були розраховані за допомогою thermo_pw [71] із врахуванням полікристалічного наближення. Експериментальні та розрахункові пружні модулі наведені в таблиці 3.7.

Таблиця 3.7 – Експериментальні та розрахункові пружні модулі

Структура	Об'ємний модуль, ГПа	Модуль Юнга, ГПа	Модуль зсуву, ГПа
B ₄ C експ. [10]	247	472	200
(B ₁₂)C-C-C	238.060	433.948	181.405
(B ₁₁ C)C-B-C	253.590	487.231	206.505
(B ₁₂)C-B-C	237.030	420.937	174.831
(B ₁₂)C^Al^C	235.730	480.706	207.177

З таблиці видно, що додавання алюмінію не веде до зниження пружних модулів в порівнянні із карбідом бору.

3.6 Моделювання поведінки (B₁₂)C^Al^C під час одновісного стиску вздовж міжкосаедричного ланцюга

Для моделювання поведінки (B₁₂)C^Al^C під час одновісного стиску вздовж міжкосаедричного ланцюга була побудована гексагональна суперкомірка 2x2x1, що, в свою чергу, складається з чотирьох гексагональних елементарних комірок карбіду бору, де всі центральні атоми вуглецю були змінені на алюміній і зміщені в одному напрямку. Перед проведенням комп'ютерного моделювання стиснення атомна конфігурація була релаксована. Слід підкреслити, необхідність використання достатньо великої надкомірки для комп'ютерного моделювання

стиску, щоб рухи атомів у кристалі не були обмежені періодичною межею комірки, що, в свою чергу, могло б призвести до помилкових результатів [1]. Саме тому було обрано суперкомірку, що містить 180 атомів, її візуалізація наведена на рисунку 3.15

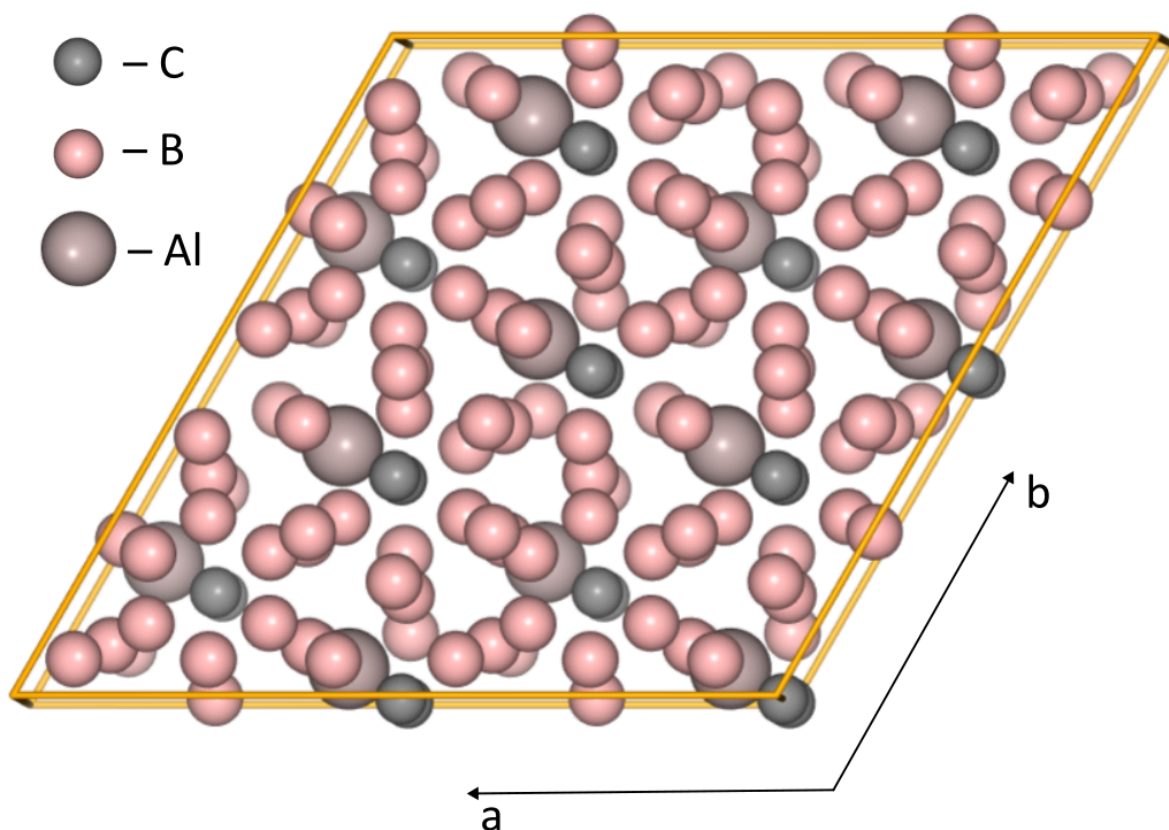


Рисунок 3.15 – Гексагональна суперкомірка 2x2x1

Для досягнення точних результатів, враховуючи значну зміну об'єму під час ущільнення структури, а також очікувану стрибкоподібну зміну об'єму внаслідок фазового переходу, ми використовували високу енергію обрізки – 100 Рідберг. Критерії збіжності для самоузгодженого поля ("SCF") і для сил на атомах були виставлені відповідно 10^{-6} Рідберг і 10^{-3} Рідберг/Бор. З огляду на значний розмір 180-атомної суперкомірки, зона Бріллюена була дискретизована лише в гамма-точці. Для підвищення стабільності розрахунків було застосовано гаусове згладжування 10^{-4} Рідберг.

Комп'ютерне моделювання одновісного стику для $(B_{12})C^{\wedge}Al^{\wedge}C$ було проведено відповідно до методики що описана в розділі 2.7. Графіки залежності одновісного тиску від одновісної деформації для $(B_{12})C^{\wedge}Al^{\wedge}C$ та $(B_{12})C-C-C$ (для зручності порівняння) наведено на рисунку 3.16.

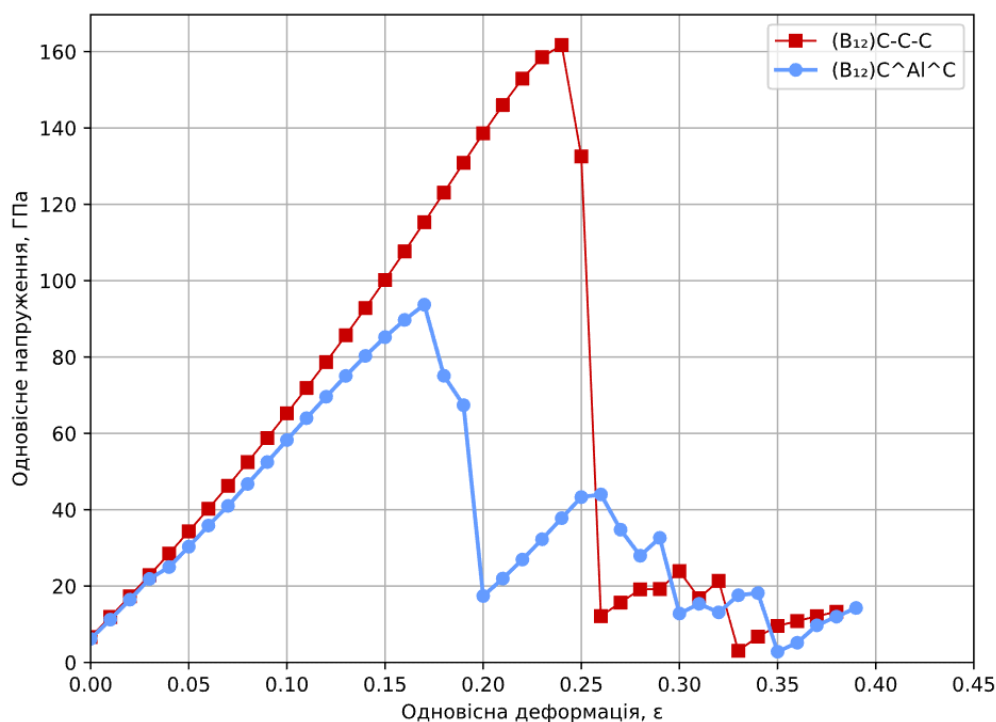


Рисунок 3.16 – Графіки залежності одновісного тиску від одновісної деформації вздовж кристалографічної осі “с” для $(B_{12})C^{\wedge}Al^{\wedge}C$ та $(B_{12})C-C-C$

Як видно із рисунка 3.14 $(B_{12})C-C-C$ демонструє вищу максимальну пружну деформацію (0,24) та одновісне напруження (161 ГПа) порівняно з $B_{12}C^{\wedge}Al^{\wedge}C$, який має максимальну пружну деформацію 0,17 та одновісне напруження 94 ГПа. Це вказує на те, що чистий карбід бору може витримувати більші напруження і деформації до руйнування. Однак графік $(B_{12})C^{\wedge}Al^{\wedge}C$ показує область після пружної деформації, де матеріал не руйнується відразу, а навпаки, демонструє поступове зниження напруги, що вказує на пластичну поведінку матеріалу. Після початкового падіння напруження $(B_{12})C^{\wedge}Al^{\wedge}C$, здається, стабілізується, що свідчить про утворення фази, що має свій запас міцності. На противагу цьому, $(B_{12})C-C-C$ зазнає різкого, майже миттєвого падіння міцності після досягнення

пікового напруження, що вказує на більш крихке руйнування без помітної пластичної області.

Варто зазначити, що отримані дуже високий рівні напружень перед аморфізацією є результатом використання бездефектного ідеального кристала в симуляції та прикладання стиснення вздовж напрямку ланцюга. Малоімовірно, що такий високий рівень може бути досягнутий в експериментах з використанням реальних зразків матеріалу.

4 ОХОРОНА ПРАЦІ ТА БЕЗПЕКА В НАДЗВИЧАЙНИХ СИТУАЦІЯХ

Метою розділу є аналіз шкідливих і небезпечних факторів процесу спрямованої кристалізації щодо створення безпечних і здорових умов праці на робочих місцях, виключення можливості виробничого травматизму, професійних захворювань, пожеж, вибухів. Тому важливою частиною являється дотримання правил безпеки користування обладнанням та вихідними матеріалами.

4.1 Аналіз шкідливих і небезпечних виробничих факторів

В умовах комп'ютерних лабораторій, де дослідження та розробки є переважно цифровими, шкідливі та небезпечні фактори суттєво відрізняються від тих, що діють у традиційних фізичних лабораторіях. Тут ми проаналізуємо ключові фактори, які можуть становити ризики для професійного здоров'я та безпеки.

Ергономічні ризики. Тривала робота за комп'ютером може призвести до ергономічних проблем, таких як розлади опорно-рухового апарату, перенапруження очей і травми, викликані повторюваним перенапруженням. Належний дизайн робочого місця, включаючи регульовані стільці та монітори, а також заохочення до регулярних перерв можуть зменшити ці ризики.

Небезпека ураження електричним струмом. Комп'ютери та інші електронні пристрої становлять ризик ураження електричним струмом, особливо під час несправності або поломки обладнання. Регулярне технічне обслуговування та дотримання протоколів безпеки можуть зменшити ймовірність нещасних випадків, пов'язаних з електричним струмом.

Хімічні речовини. Хоча в комп'ютерній лабораторії вплив хімічних речовин, що містяться в тонеру і миючих засобах для принтерів, менш помітний, він все одно може становити небезпеку. Належне зберігання та поводження з ними, а також належна вентиляція є необхідними запобіжними заходами.

Пожежна небезпека. Електрообладнання становить ризик виникнення пожежі, особливо в разі перевантаження системи або короткого замикання. Встановлення систем виявлення та гасіння пожежі, а також забезпечення вільного доступу до аварійних виходів є важливими заходами безпеки.

Психологічний стрес. Інтенсивна концентрація уваги у дослідницькому середовищі можуть призвести до психологічного стресу. Стратегії управління стресом, включаючи регулярні перерви, сприятливе робоче середовище і доступ до консультаційних послуг, є дуже важливими.

Загрози кібербезпеці. У цифровому дослідницькому середовищі витоки даних і кібератаки можуть мати серйозні наслідки як для цілісності дослідження, так і для безпеки персональних даних. Надійні заходи кібербезпеки та регулярні тренінги з практик цифрової безпеки є життєво важливими.

Кожен з цих факторів потребує ретельного розгляду та управління, щоб забезпечити безпечне та здорове робоче середовище в комп'ютерній лабораторії.

4.1.1 Аналіз освітленості приміщення

Освітлення буває трьох видів: природне, штучне і суміщене. Природне у свою чергу поділяється на бічне, верхнє та комбіноване. Штучне – загальне і місцеве. Характеристика зорової роботи поділяється за класами точності:

- 1) найвищої точності;
- 2) дуже високої;
- 3) високої;
- 4) середньої;
- 5) малої;
- 6) дуже малої точності.

Наша робота підходить під клас середньої точності. У лабораторії, використовується система сумісного освітлення — освітлення, при якому у світлий час доби використовується природне та штучне освітлення, що відповідає нормам освітлення згідно ДБН В.2.5-28-2018 [72].

4.1.2 Аналіз рівня шуму

Джерелом шуму в лабораторії є шум робочих станцій, проте при одночасній роботі всього устаткування рівень шуму не перевищує допустимі норми ДСН 3.3.6.037-99 [73]. Рівень шуму в лабораторії складає до 50 дБА. Він вимірюється шумомірами не менше одного разу в шість місяців.

Для зменшення шкідливого впливу шуму використовуються індивідуальні засоби захисту від шумового впливу, або обмеження часу перебування в зоні підвищеного шуму.

4.2 Забезпечення належних умов праці

4.2.1 Параметри приміщення

Дипломна робота проводиться в «лабораторії обчислювального експерименту в матеріалознавстві» №406 корпусу Б в Інституті проблем матеріалознавства НАН України, специфікацію технологічного обладнання та оснащення наведено в таблиці 4.1.

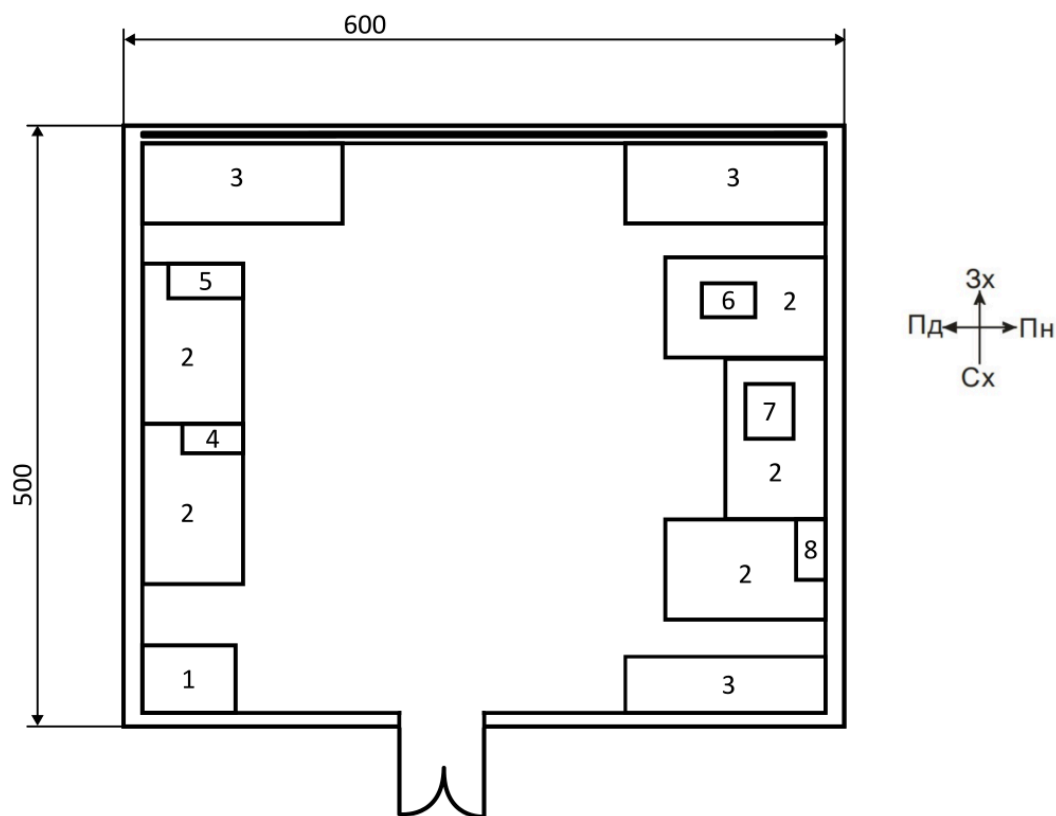
Таблиця 4.1 – Специфікація технологічного обладнання та оснащення вибраного приміщення.

№	Найменування	Розміри, мм Д/Ш/В	Основні характеристики	Кількість	Номер на рисунок
1	Робочий комп'ютер ASUS UX501V	254/20/400	Електроживлення 220В	1	6
2	Робоча станція «STALLION»	560/260/580	Електроживлення 220В	1	5
3	Робоча станція «MARE»	455/220/465	Електроживлення 220В	1	4

Продовження таблиці 4.1

№	Найменування	Розміри, мм Д/Ш/В	Основні характеристики	Кількість	Номер на рисунок
4	Робоча станція «MINI»	455/220/465	Електроживлення 220В	1	8
5	Принтер Samsung C460W	406/362/334	Електроживлення 220В		7

План приміщення в якому проводиться лабораторне дослідження зображений на рисунку 4.1.



1 – умивальник; 2 – робочий стіл; 3 – шафа; 4 – Робоча станція «MARE»; 5 – Робоча станція «STALLION»; 6 – Робочий комп'ютер ASUS UX501V; 7 – Принтер Samsung C460W; 8 – Робоча станція «MINI»

Рисунок 4.1 – План лабораторії №406

Відповідно до основних вимог до будівель виробничого призначення висота виробничих приміщень повинна бути не менше 3,2 м, а об'єм і площа – 20 м³ та 6 м² відповідно на кожного працівника.

У даному випадку площа приміщення складає $S = 5 \cdot 6 = 30 \text{ м}^2$, а об'єм приміщення $V = 5 \cdot 6 \cdot 4,5 = 135 \text{ м}^3$. Під час досліджень в лабораторії працює 4 людини, звідки ми отримуємо, що площа на одного чоловіка складає $S_{\text{л}} = 30/4 = 7.5 \text{ м}^2/\text{людину}$, а об'єм – $V_{\text{л}} = 135/4 = 33,75 \text{ м}^3/\text{людину}$.

Характеристики приміщення в якому знаходиться робоче місце зведені в таблиці 4.2.

Таблиця 4.2 – Реальні та нормативні характеристики приміщень і розміщення технологічного обладнання

№	Параметр приміщення	Реальне значення лабораторії №406	Нормативні значення
1	Площа на 1-го працюючого	7.5 м ²	6 м ²
2	Об'єм на 1-го працюючого	33.75 м ³	20 м ³
3	Мінімальна ширина проходу	2 м	1 м

Таким чином, на одного працівника припадає 7.5 м² площі й 33.75 м³ об'єму, що задовольняє вимогам санітарних норм і правил ДСанПіН 3.3.2.007-98 [74] норма площі на одну особу становить 6,0 м², а норма об'єму приміщення на одну особу – 20 м³.

4.2.2 Електробезпека

У лабораторії №406 використовується струм напругою 220 В для живлення всіх приладів. Опір ізоляції силових та освітлювальних електропроводів контролюється відповідно до вимог та не перевищує 0,5 МОм.

Всі електричні пристрої мають заземлення та програмне забезпечення, що виключає можливість прийняття небезпечних рішень пов'язаних з режимами роботи цих пристроїв.

Також лабораторія №406 обладнана пристроєм захисного вимикання типу АС – високонадійною швидкодіючою системою захисту, яка застосовується в електроустановках, які потребують високого рівня безпеки. Струмопровідні кабелі ізолювані по всій довжині та захищені від механічних ушкоджень. Ізоляція кабелів розрахована на захист від підвищених температур і прокладена під підлогою. Кожні пів року проводиться перевірка проводки відповідним персоналом.

Весь персонал, що обслуговує обладнання проходить інструктаж про безпеку, пов'язану з роботою з установками, та способи надання першої до медичної допомоги. Також біля кожної установки прикріплений відповідний плакат з інструкцією та технікою безпеки.

Електротехнічні вироби з точки зору безпеки відповідають вимогам ПУЕ-2017 [75].

4.3 Розрахунок інженерного рішення

Конструкція місцевих відсмоктувачів вибирається в залежності від виду технологічного процесу, обладнання та оснащення. Вона повинна забезпечувати необхідну чистоту повітря на робочому місці при мінімальних витратах повітря, яке видаляється, запобігати розповсюдженню шкідливих речовин по об'єму приміщення, не заважати виконанню технологічних операцій. Прив'язка

відсмоктувачів до обладнання повинна здійснюватися з урахуванням максимально можливого наближення його до джерела шкідливих виділень.

За наявності даних про інтенсивність виділення шкідливих речовин в атмосферу приміщення повітрообмін в загальних випадках розраховується за формулою (4.1):

$$L=1000\beta V/C_{гдк}, \quad (4.1)$$

де V – інтенсивність виділення шкідливої речовини в одиницю часу г/год;

β – коефіцієнт нерівномірності розподілу шкідливих речовин в об'ємі приміщення;

$C_{вид}$, $C_{пр}$ – концентрації шкідливих речовин у повітрі, що видаляється (витяжне) і надходить (припливне), мг/м³.

Через те, що в роботі використовуються малотоксичні речовини, розрахунок проводиться за загальною формулою:

$$L=1000 \times 1,2/2=600 \text{ м}^3/\text{год}.$$

4.4 Вимоги безпеки в надзвичайних ситуаціях

4.4.1 Пожежна безпека

Відповідно до НАПБ Б.03.002-2007 [76] «Норми визначення категорій приміщень, будинків та зовнішніх установок за вибухопожежною та пожежною небезпекою», лабораторія, у якій проводилась НДР належить до категорії Д, відповідно до характеристик речовин і матеріалів, що знаходяться у приміщенні.

Для запобігання пожежі застосовані наступні заходи забезпечення пожежної безпеки:

а) технічні:

1) лабораторія оснащена автоматичною пожежною сигналізацією;

- 2) будівельні конструкції лабораторії не спалимі з межею вогнестійкості від 0,75 години до 2,5 годин;
 - 3) передбачено систему знеструмлення при пожежі електроустаткування;
 - 4) проведення планово-попереджувальних робіт і оглядів обчислювальних машин, опалювального, вентиляційного, технічного устаткування;
 - 5) в лабораторії знаходиться порошковий вогнегасник ВП-2.
- б) організаційні:
- 1) розроблено інструкції про міри пожежної безпеки;
 - 2) вивішені на поверххах плани евакуації;
 - 3) персонал проходить інструктаж з пожежної безпеки та інші види протипожежної підготовки;
 - 4) призначено відповідальних осіб за протипожежний стан лабораторій та інших приміщень;
- в) режимні:
- 1) обмеження числа осіб, що здійснюють експлуатацію устаткування;
 - 2) виділено визначені місця для паління.

У приміщенні лабораторії встановлено 4 пожежні сигналізатори ИП-105, сигнал з яких надходить на основну панель пожежної сигналізації. Сигналізатори ИП-105 спрацьовують на підвищення температури до $t = 72\text{ }^{\circ}\text{C}$. У коридорі знаходиться пожежний кран із приєднаним пожежним рукавом.

4.4.2 Вимоги безпеки в аварійних ситуаціях

У випадку пробою електричної напруги на корпус електродугового агрегату необхідно відключити рубильник і довести до відома про це майстра або начальника дільниці.

У разі потрапляння кого-небудь під напругу, необхідно відключити електродуговий агрегат від мережі, покласти потерпілого на дерев'яний настил,

підклавши під голову ватник, викликати лікаря за телефоном 103 і, якщо це необхідно, зробити постраждалому штучне дихання.

У випадку загоряння електродугового агрегату необхідно відключити рубильник і починати гасіння пожежі за допомогою вогнегасника.

Кожен робітник і службовець, що виявив пожежу або загоряння, зобов'язаний:

- негайно сповістити про це в заводську пожежну охорону за телефоном 101;
- починати гасіння вогню пожежі наявними в цеху (на дільниці) засобами пожежогасіння (вогнегасник, пісок, пожежний кран тощо);
- викликати до місця пожежі посадових осіб (начальника цеху, дільниці).

У разі одержання травми необхідно довести до відома про це майстра, начальника дільниці та звернутися в медпункт.

План евакуації з лабораторії № 406 наведено на рисунку 4.2.

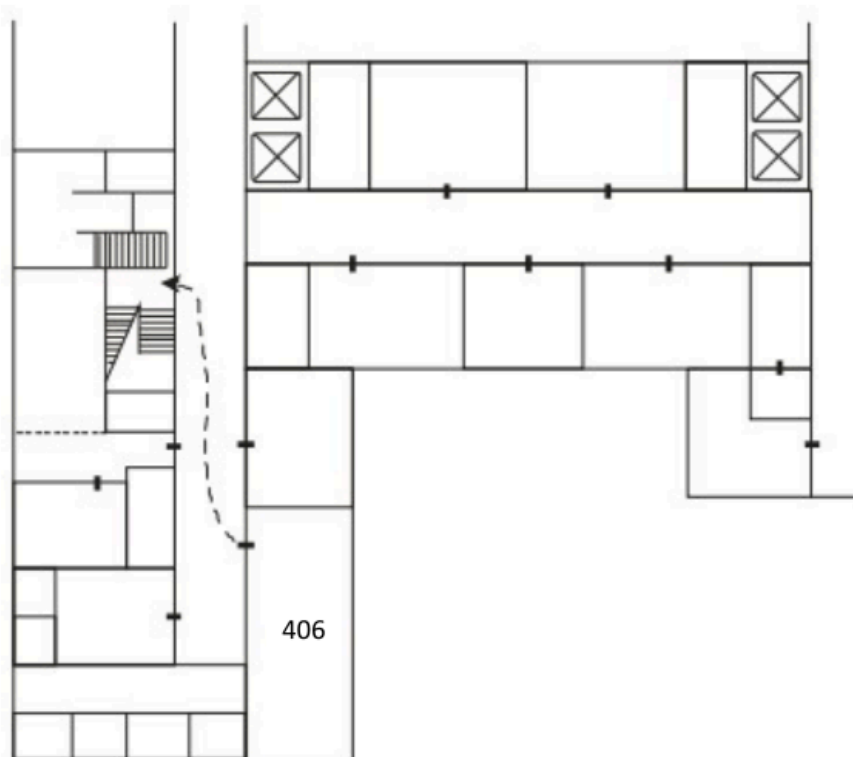


Рисунок 4.2 – План евакуації з лабораторії 406

4.5 Висновки за розділом

Комплексний аналіз потенційних небезпечних і шкідливих факторів у приміщенні комп'ютерної лабораторії свідчить про повну відповідність встановленим нормам безпеки. Технологічне обладнання, що використовується, оснащено необхідними захисними засобами. Робочі місця ергономічно спроєктовані, в лабораторії передбачені зони для відпочинку та релаксації, а також спеціалізовані зони для спостереження за роботою обладнання. Значна частина процесів у лабораторії автоматизована, що додатково підвищує безпеку, зводячи до мінімуму безпосередню взаємодію людини з будь-якими потенційно небезпечними речовинами.

5 ЕНЕРГЕТИЧНИЙ РОЗДІЛ

Витрати енергії для санітарно-технічних пристроїв (вентиляції, опалення) визначають відповідно до вимог з охорони праці та техніки безпеки.

Витрати енергії на компресійні й вакуумні установки розраховують на основі потужності встановлених у цеху пристроїв та режимах їхньої роботи.

Обсяг витрат електроенергії визначають на підставі вибору і розрахунку кількості технологічного обладнання, використання його встановленої потужності при запланованому режимі роботи:

$$\mathcal{E} = M \Phi_0 \eta_{\text{зв}} K_1 K_2, \quad (5.1)$$

де M – встановлена потужність обладнання, кВт; Φ_0 – річний фонд часу роботи обладнання, год.;

$\eta_{\text{зв}}$ – коефіцієнт завантаження обладнання;

K_1 – коефіцієнт одночасності роботи (приймається рівним: для електричних печей – 0,6; для електродвигунів – 0,3; для генераторів високочастотного нагріву – 0,8);

K_2 – коефіцієнт використання потужності (приймається рівним 0,7).

Витрати енергії піднімально-транспортного обладнання визначають виходячи з його потужності.

В умовах малотоннажних виробництв транспортувальне обладнання вибирають разом з основним, а його характеристики вносять у відомість основного обладнання.

Витрати енергії для санітарно-технічних пристроїв (вентиляції, опалення) визначають відповідно до вимог з охорони праці та техніки безпеки.

Витрати енергії на компресійні й вакуумні установки розраховують на основі потужності встановлених у цеху пристроїв та режимах їхньої роботи.

Розрахунок витрат енергії на освітлення для кожного приміщення виконують на основі загального плану цеху. Вихідні дані для розрахунку: площа приміщення, необхідна освітлюваність і режим роботи освітлювальних пристроїв.

Витрати енергії на освітлення розраховують за формулою:

$$Q = Sq\tau f/1000, \quad (5.2)$$

де S – освітлювальна площа, м^2 ;

q – поверхнева густина теплового потоку, $\text{Вт}/\text{м}^2$;

τ – число годин горіння на рік;

f – коефіцієнт одночасного горіння.

Величину q зазвичай приймають: для виробничих приміщень – 11...15 $\text{Вт}/\text{м}^2$, для побутових і службових приміщень – 10 $\text{Вт}/\text{м}^2$.

Залежно від тривалості освітлювального періоду значення приймають рівним: для двозмінної роботи – 2500 год, для тризмінної роботи – 4700 год.

Коефіцієнт, який враховує одночасність горіння ламп, приймають: для виробничих прогонів – 0,8; для побутових та службових приміщень – 0,7; для підвалів – 0,9.

Результати розрахунків витрат електроенергії наведено в таблиці 5.1 та 5.2.

Таблиця 5.2 – Витрати електроенергії на освітлення

Найменування споживача	Освітлювальна площа, м²	Поверхнева щільність теплогового потоку, Вт/м²
Обчислювальна лабораторія	30	15

Продовження таблиці 5.2

Кількість годин горіння на рік, год	Коефіцієнт одночасності горіння	Річні витрати електроенергії, кВт·год
2307	0.8	831
Усього витрат, кВт·год		831

6 ОРГАНІЗАЦІЙНО-ЕКОНОМІЧНИЙ РОЗДІЛ

6.1 Техніко-економічне обґрунтування роботи

6.1.1 Актуальність теми дослідження

Ударостійка кераміка, відома своєю надзвичайною твердістю, механічною міцністю, жаростійкістю та низькою щільністю, знаходить широке застосування в різних галузях промисловості. В аерокосмічній галузі ці матеріали використовуються для виготовлення компонентів космічних кораблів, таких як обтічники та сопла, а в армії вони незамінні для виготовлення броні для кузовів і транспортних засобів завдяки своїй високій температурі плавлення та здатності поглинати енергію. У промисловості вони відіграють ключову роль у створенні зносостійких інструментів та автомобільних гальмівних систем, а також сприяють підвищенню надійності спортивного обладнання, медичних виробів для біосумісних імплантатів та термостійкої електроніки. Специфічне використання карбіду бору в ядерних реакторах для поглинання нейтронів підкреслює важливість матеріалу в енергетичному секторі. З легуванням алюмінієм прагнення покращити властивості карбіду бору та розширити сферу його застосування посилюється.

Атомістичне комп'ютерне моделювання значно пришвидшує розробку таких матеріалів, як легований алюмінієм карбід бору. Цей метод дозволяє детально маніпулювати матеріалом на атомному рівні та досліджувати його властивості, що сприяє оптимізації процесу створення нового або покращення існуючого матеріалу. Атомістичне комп'ютерне моделювання забезпечує економічно ефективний і швидкий спосіб прогнозування характеристик нових матеріалів, спрощуючи весь процес розробки і дозволяючи створювати індивідуальні рішення для різноманітних застосувань.

6.1.2 Мета і завдання

Мета дослідження – встановити найбільш стабільну структурну конфігурацію легованого алюмінієм карбиду бору та з'ясувати її поведінку за одновісного стиску шляхом комп'ютерного моделювання.

Для вирішення поставленої задачі необхідно виконати наступні завдання:

- а) проаналізувати літературу і визначити місця найбільш імовірного розташування алюмінію в карбіді бору;
- б) провести підбір параметрів для проведення моделювання із перших принципів;
- в) оцінити стабільність різних атомних конфігурацій карбиду бору, легованого алюмінієм та визначити найбільш стабільну;
- г) отримати розподіл інтенсивності для рентгенівського аналізу найбільш стабільної атомної конфігурації;
- д) розрахувати значення пружних модулів;
- е) адаптувати методики комп'ютерного моделювання одновісного стику [1], для пакета програм Quantum Espresso, результат апробувати на карбіді бору;
- ж) для найбільш стабільної конфігурації легованого алюмінієм карбиду бору провести комп'ютерне моделювання одновісного стику;
- и) визначити шкідливі та небезпечні виробничі фактори;
- к) розробити заходи для попередження впливу шкідливих та небезпечних виробничих факторів;
- л) провести розрахунок кількості електроенергії, необхідної для проведення експериментальної частини;
- м) обґрунтувати необхідну кількість робітників, розмір фонду їх заробітної плати, визначити показники продуктивності праці;
- н) довести ефективність дисертації та розробити стартап-проект.

6.1.3 Розрахунок планової собівартості проведення дослідження

Розрахунок усіх витрат на дослідницьку роботу, пов'язаних з виконанням даної теми, дає можливість встановити планову кошторисну вартість даної теми. Планування забезпечує зниження трудових і матеріальних витрат з метою отримання найкращих результатів за найменших витрат.

Планова собівартість визначається за наступними статтями витрат:

- а) заробітна плата науково-дослідницького персоналу;
- б) єдиний соціальний внесок;
- в) вартість спеціального обладнання для виконання НДР;
- г) вартість матеріалів, необхідних для проведення НДР;
- д) вартість електроенергії
- е) витрати на відрядження;
- ж) інші прямі витрати по темі;
- и) накладні витрати.

6.1.4 Розрахунок фонду заробітної плати виконавців

Витрати за цією статтею включають заробітну плату працівників усіх категорій, зайнятих виконанням робіт з даної теми.

Заробітна плата розраховується на основі даних про трудомісткість окремих робіт, і посадових окладів виконавців цих робіт. Розрахунок ведеться в людино-днях. Перелік робіт та їх трудомісткість зведено в таблицю 6.1.

Денні зарплати визначаються як відношення місячного окладу до умовного місяця (для НДІ з п'ятиденним робочим тижнем складає 21,2 дня).

Перемножуючи середньоденну заробітну плату за кожною категорією виконавців на відповідну планову трудомісткість робіт, розраховується плановий фонд заробітної плати всіх виконавців. Результати розрахунку фонду заробітної плати з теми зведено в таблицю 6.2.

Таблиця 6.1 – Трудомісткість етапів НДР

Етапи НДР	Трудомісткість, людинодні	
	Відповідальний виконавець, старший науковий співробітник	Інженер-дослідник
Підготовчий етап	5	20
Проведення розрахунків	10	45
Написання записки	8	30
Оформлення, перевірка та захист	4	5
Разом	27	100

Таблиця 6.2 – Фонд заробітної плати

Посада	Трудомісткість, людинодні	Місячна ставка, грн.	Денна заробітна плата, грн.	Сумарна заробітна плата за виконавцями, грн.
Відповідальний виконавець теми, старший науковий співробітник	27	16020	755.66	20402.82
Інженер-дослідник	100	8757	413.07	41307
Разом				61709.82

6.1.4.1 Визначення суми єдиного соціального внеску

Відрахування органам соціального страхування визначаються у відсотках від заробітної плати виконавців з теми. Норматив відрахувань необхідно брати в розмірі 22% заробітної плати.

$$B_c = 61709.82 \cdot 0.22 = 13576.16 \text{ грн.}$$

6.1.4.2 Витрати на матеріали, необхідні для виконання НДР

Робота є розрахунковою тому не передбачає покупку і використання матеріалів.

6.1.4.3 Витрати на спеціальне обладнання для проведення експериментів

В роботі використовуються вже існуюче обладнання: Робочий комп'ютер ASUS UX501V, робоча станція «STALLION», робоча станція «MARE», принтер Samsung C460W

Спеціальне устаткування для виконання ДР не закуповувалось.

6.1.4.4 Витрати на відрядження

Всі роботи проводились безпосередньо в 406 лабораторії Інституту проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича, тому витрати на виробничо-наукові відрядження не передбачені.

6.1.4.5 Інші прямі витрати по темі

Ця стаття поєднує в собі всі витрати на проведення НДР, що не увійшли до попередніх статей (оплата спеціалістів з інших організацій, оплата консультацій,

використання обладнання інших організацій та інше). При проведенні даної роботи інші прямі витрати складають 10% від суми врахованих витрат на НДР.

$$I_b = (61709.82 + 13576.16) \cdot 0.1 = 7528.60 \text{ грн.}$$

6.1.4.6 Накладні витрати

Накладні витрати по НДР визначаються у відсотках до прямих витрат. У Національному технічному університеті України «Київський політехнічний інститут» відсоток накладних витрат складає 20 % від суми всіх прямих витрат по НДР:

$$H_b = (61709.82 + 13576.16 + 7528.60) \cdot 0.20 = 16562.92 \text{ грн.}$$

Розрахунок за всіма статтями витрат зведено в таблиці 6.4.

Таблиця 6.4 – Плановий кошторис витрат на виконання НДР

Назва статей	Умовне позначення	Сума, грн.	Сума, %	Обґрунтування
Заробітна плата виконавців теми	ЗП	61709.82	62.10%	За розрахунками
Єдиний соціальний внесок	В _с	13576.16	13.66%	22,0 % від загальних витрат на оплату праці
Вартість основних матеріалів	В _м	—	—	Не планується
Вартість спецобладнання	В _{об}	—	—	Не планується
Витрати на послуги сторонніх організацій	В _{со}	—	—	Не планується

Продовження таблиці 6.4

Назва статей	Умовне позначення	Сума, грн.	Сума, %	Обґрунтування
Інші прямі витрати	I_v	7528.60	7.58%	10 % від суми прямих розрахованих витрат по темі
Накладні витрати	H_v	16562.92	16.67%	20 % від суми прямих витрат
Разом	$V_{\text{ндр}}$	99377.49	100.00%	Сума всіх попередніх статей

6.1.5 Економічна ефективність

Дослідження, що проводились в даній роботі, є складовою частиною комплексної задачі, яка вирішується декількома організаціями. У зв'язку з цим визначення річного економічного ефекту за допомогою прямих методів розрахунку не виконується. В цьому випадку використовується бальна система оцінки економічної ефективності, за наступними показниками:

- а) важливість розробки (K_1);
- б) можливість використання результатів розробки (K_2);
- в) теоретичне значення та рівень новизни (K_3);
- г) складність розробки (K_4).

Шкала для оцінки важливості розробки K_1 :

- а) ініціативна робота, що не є ані частиною комплексної програми, ані завданням директивних органів – 1 бал;
- б) робота, що виконується за договором про науково-технічні допомоги – 3 бали;
- в) робота представляє собою частину відомчої програми – 5 балів;
- г) робота представляє собою частину відомчої комплексної програми – 7 балів;

д) робота виконується як частина міжнародної комплексної програми – 8 балів.

Шкала для оцінки можливості використання результатів розробки K_2 :

а) результати розробок можуть бути використані в даному підрозділі – 1 бал;

б) результати розробки можуть бути використані в даній організації – 3 бали;

в) результати розробки можуть бути використані в багатьох організаціях – 5 балів;

г) результати розробки можуть бути використані в масштабах галузі – 8 балів;

д) результати розробки можуть бути використані в багатьох різноманітних галузях – 10 балів.

Шкала для оцінки теоретичної значущості й рівня нововведення K_3 :

а) аналіз узагальнення і класифікація відомої інформації, подібні результати були відомі в досліджуваній області – 2 бали;

б) одержання нової інформації, що доповнить подання про суттєвість досліджуваних процесів, не відомої в дослідницькій області – 3 бали;

в) одержання нової інформації, яка частково міняє уявлення про суттєвість дослідження процесів, не відомих раніше – 5 балів;

г) створення нових теорій, методик і т. п. – 6 балів;

д) одержання інформації, що служить формуванню напрямків, не відомих раніше – 6 балів.

Шкала для оцінки показників складності дослідження K_4 :

а) робота виконується одним підрозділом, затрати до 20 тис.грн. – 1;

б) робота виконується одним підрозділом, затрати від 20 до 100 тис.грн. – 3;

в) робота виконується одним підрозділом, затрати від 100 до 200 тис.грн. –

5;

г) робота виконується з урахуванням багатьох підрозділів, затрати від 200 тис.грн. до 1 млн.грн. – 7;

д) робота виконується декількома організаціями, затрати понад 1млн.грн.– 9.

Бальна оцінка ефективності, згідно з даної роботи, наведена в таблиці 6.5.

Таблиця 6.5 – Бальна оцінка ефективності НДР

Показник оцінки ефективності НДР	Умове позначення показника	Характеристики даної роботи	Кількість балів
1.Важливість розробки	K_1	робота являє собою частину відомчої програми	8
2. Можливість використання результатів розробки	K_2	результатами розробки можуть користуватися у різних галузях	10
3.Теоретична значущість та рівень новизни розробки	K_3	одержання нової інформації, яка частково міняє уявлення про суттєвість дослідження процесів, не відомих раніше	5
4.Складність дослідження	K_4	робота виконується одним підрозділом, затрати від 20 до 100 тис.грн	3

Загальна оцінка вираховується перемноженням коефіцієнтів. Умовний ефект на кожен бал становить 500 грн.

$$E_0^y = 500 \cdot K_1 \cdot K_2 \cdot K_3 \cdot K_4$$

де K_1 – коефіцієнт важливості розробки;

K_2 – коефіцієнт можливості використання результатів розробки;

K_3 – коефіцієнт теоретичного значення та рівня новизни;

K_4 – коефіцієнт складності розробки.

$$E_0^y = 500 \cdot 8 \cdot 10 \cdot 5 \cdot 3 = 600000 \text{ грн}$$

Умовний ефект НДР:

$$E_{\text{НДР}}^y = E_0^y - E_n \cdot B_{\text{НДР}}$$

де $E_{\text{НДР}}^y$ – умовний оціночний ефект;

E_n – коефіцієнт ефективності, приймаємо 0.3;

$B_{\text{НДР}}$ – сумарні витрати на дослідницьку роботу.

$$E_{\text{НДР}}^y = 600000 - 0.3 \cdot 99377.49 = 570186.753 \text{ грн.}$$

Тоді коефіцієнт умовної економічної ефективності:

$$E = E_{\text{НДР}}^y / B_{\text{НДР}}$$

де $E_{\text{НДР}}^y$ – умовний ефект НДР;

$B_{\text{НДР}}$ – сумарні затрати на НДР.

$$E = 570186.753 / 99377.49 = 5.74$$

Коефіцієнт умовної ефективності нашої роботи дорівнює 5.74, що свідчить про доцільність її виконання.

7 РОЗРОБЛЕННЯ СТАРТАП-ПРОЄКТУ

7.1 Мета та завдання розробки стартап-проєкту

Метою даного розділу є освоєння інформації та надбання навичок по втіленню ідеї чи проєкту в життя в умовах нинішньої ринкової економіки та конкуренції, відносно до виконаної роботи, яка представлена в попередніх пунктах.

Завдання розробки стартап-проєкту полягає в маркетинговому аналізі перспектив реалізації створення компанії, яка використовує комп'ютерне моделювання для розробки матеріалів на замовлення для конкретних промислових застосувань, пропонуючи клієнтам індивідуальні рішення.

7.2 Опис продукту

Стартап, що спеціалізується на індивідуальних матеріальних рішеннях, має надавати унікальну послугу, яка використовує атомістичне комп'ютерне моделювання для проєктування та розробки матеріалів, пристосованих до конкретних потреб клієнта. Ця послуга ідеально підходить для галузей, де надтверді матеріали мають важливе значення, таких як аерокосмічна, оборонна та виробнича. Клієнти можуть замовляти матеріали з особливими властивостями, такими як підвищена твердість, жаростійкість або специфічні електричні характеристики. Стартап використовуватиме передові обчислювальні моделі для розробки цих матеріалів на атомному рівні, забезпечуючи точність і продуктивність. Такий підхід значно скорочує час і витрати на розробку матеріалів і створення прототипів, пропонуючи клієнтам конкурентну перевагу у відповідних галузях.

Опишемо спочатку ідею про створення такого стартапу (табл.7.1, табл.7.2).

Таблиця 7.1 – Опис ідеї стартап-проєкту

Зміст ідеї	Напрямки застосування	Вигоди користувача
Індивідуальні матеріальні рішення з використанням атомістичного комп'ютерного моделювання	Аерокосмічна промисловість, оборонна промисловість, виробництво, електроніка, автомобільна промисловість та медичне обладнання	Покращені властивості матеріалів, пристосовані до конкретних потреб; скорочення часу та витрат на розробку і створення прототипів; доступ до інноваційних матеріалів з підвищеною твердістю, термостійкістю та іншими бажаними характеристиками; конкурентні переваги в розробці продукції та позиціонуванні на ринку.

Таблиця 7.2 – Визначення сильних, слабких та нейтральних характеристик ідеї проєкту

№	Характеристика ідеї	Мій проєкт	Продукти/концепції конкурентів	W*	N**	S***
1	Точність матеріального дизайну	Висока точність завдяки атомістичному моделюванню	різноманітний; часто менш точні традиційні методи			C
2	Швидкість розвитку	Швидке прототипування та дизайн	Повільніше, експериментальний розвиток			C
3	Ефективність витрат	Зменшені витрати матеріалів і витрати на розробку	Вищі витрати на виробництво та дослідження та розробки			C
4	Проникнення на ринок	Поява на ринку	Налагоджена присутність	B		

* – слабка сторона

** – нейтральна сторона

*** – сильна сторона

Ця таблиця висвітлює порівняльні переваги, нейтральні аспекти та слабкі сторони вашого проєкту порівняно з конкурентами, зосереджуючись на техніко-економічних характеристиках.

Відповідні сильні сторони нашого проєкту мають стати підґрунтям для формування конкурентоспроможності та економічної моделі майбутнього бізнесу.

7.3 Технологічний аудит ідеї проєкту

В межах даного підрозділу необхідно провести аудит технології, за допомогою якої можна реалізувати ідею проєкту (технології створення товару).

Таблиця 7.3 – Технологічна здійсненність ідеї проєкту

Ідея проєкту	Технології його реалізації	Наявність технологій	Ринкова готовність
Індивідуальні матеріальні рішення з використанням атомістичного комп'ютерного моделювання для легованого алюмінієм карбиду бору	Розширене програмне забезпечення для атомістичного моделювання (наприклад, DFT, молекулярна динаміка), високопродуктивна обчислювальна інфраструктура	Широко доступний, але вимагає досвіду в обчислювальному матеріалознавстві	Готовність до нових ринків завдяки зростаючому інтересу до передових матеріалів і обчислювального моделювання

У цій таблиці викладено основну ідею проєкту, необхідні технології для його реалізації, їх доступність та готовність ринку до такого технологічного рішення.

7.4 Аналіз ринкових можливостей запуску стартап-проєкту

Потрібен первинний аналіз ринкових можливостей, які можна використати під час ринкового впровадження в роботу, та ринкових загроз, які можуть перешкодити реалізації проєкту (табл. 7.4, 7.5).

Таблиця 7.4 – Попередня характеристика потенційного ринку стартап-проєкту

№	Показники стану ринку	Характеристика
1	Кількість головних гравців, од	0
2	Загальний обсяг продаж за 2022 рік	10 млрд.
3	Динаміка ринку(якісна оцінка)	Зростаючий
4	Наявність обмежень для входу	Вузька направленість
5	Специфічні вимоги для стандартизації та сертифікації	Відсутні
6	Середня норма рентабельності в галузі, %	16%

Таблиця 7.5 – Характеристика потенційних клієнтів стартап-проєкту

№	Потреба, яка формує ринок	Цільова аудиторія (сегменти цільового ринку)
1	Передові матеріали з чудовими властивостями для високопродуктивних застосувань	Аерокосмічні виробники, оборонні підрядники, автомобільні компанії, виробники медичного обладнання
2	Ефективний і рентабельний процес розробки матеріалів	Науково-дослідні установи, промислові науково-дослідні підрозділи
3	Спеціальні рішення для унікальних завдань застосування	Виробничі підприємства на замовлення, виробники спецтехніки

Продовження таблиці 7.5

№	Відмінності в поведінці різних потенційних цільових груп клієнтів	Вимоги споживача до товару
1	Аерокосмічна промисловість шукає легкі, міцні матеріали; захист зосереджується на довговічності та захисті; автомобілебудування шукає економічні, міцні матеріали; медичні пристрої вимагають біосумісності	Високоякісні, надійні, адаптовані матеріали зі специфічними властивостями, такими як твердість, термостійкість і легкість
2	Науково-дослідні установи підкреслюють інновації та відкриття; промислові дослідження та розробки шукають практичні, масштабовані рішення	Можливості швидкого створення прототипів, точні результати моделювання, економічна ефективність, легкість інтеграції в існуючі робочі процеси
3	Виробникам на замовлення потрібні дуже специфічні матеріали; Виробники обладнання вимагають матеріалів, які відповідають точним галузевим стандартам	Широкі можливості налаштування, дотримання галузевих специфікацій, стабільна якість

Перелік ринкових загроз та ринкових можливостей складається на основі аналізу факторів загроз та факторів можливостей маркетингового середовища. Ринкові загрози та ринкові можливості є наслідками (прогнозованими результатами) впливу факторів, і, на відміну від них, ще не є реалізованими на ринку та мають певну ймовірність здійснення. Наприклад: зниження доходів потенційних споживачів – фактор загрози, на основі якого можна зробити прогноз щодо посилення значущості цінового фактора при виборі товару та відповідно, – цінової конкуренції (табл. 7.6).

Таблиця 7.6 – Фактори загроз

№	Фактор	Зміст загрози	Можлива реакція компанії
1	Технологічні досягнення	Стрімкий розвиток конкуруючих технологій	Інвестуйте в постійні дослідження та розробки, щоб випереджати технологічні тенденції
2	Бар'єри входу на ринок	Потрібні значні початкові інвестиції та досвід у спеціалізованих матеріалах	Шукайте партнерства та фінансування та створюйте команду експертів
3	Інтелектуальна власність	Ризик порушення патентних прав або викрадення запатентованої технології	Впроваджуйте надійні стратегії захисту інтелектуальної власності та захищайте патенти
4	Коливання ринкового попиту	Зміна потреб галузі та економічних умов	Урізноманітнюйте програми та адаптуйтеся до змін ринку

Перелік слабких та сильних сторін та властивостей ідеї потенційної послуги є підґрунтям для формування його конкурентоспроможності та новий метод плавки дає можливість при мінімальних затратах підприємства виготовляти та випускати порівняно якісну та дешеву для клієнта продукцію (табл.7.7).

Таблиця 7.7 – Фактори можливостей

№	Фактор	Зміст можливості	Можлива реакція компанії
1	Зростаючий попит на передові матеріали	Зростання потреби в надтвердих матеріалах у різних галузях промисловості	Розширюйте охоплення ринку та розробляйте цільові маркетингові стратегії

Продовження таблиці 7.7

№	Фактор	Зміст можливості	Можлива реакція компанії
2	Технологічні інновації	Досягнення в обчислювальному моделюванні та моделюванні	Інвестуйте в передові технології та програмне забезпечення для покращення пропозиції продуктів
3	Спільні підприємства	Потенційне партнерство з дослідницькими установами та промисловістю	Шукайте можливості співпраці для спільних дослідницьких проєктів
4	Фокус на сталий розвиток	Зростання інтересу до стійких і ефективних матеріалів	Розробляйте екологічно чисті та стійкі матеріальні рішення для задоволення ринкового попиту

Перелік слабких та сильних сторін та властивостей ідеї потенційної послуги є підґрунтям для формування його конкурентоспроможності та новий метод плавки дає можливість при мінімальних затратах підприємства виготовляти та випускати порівняно якісну та дешеву для клієнта продукцію (табл. 7.8, табл. 7.9).

Таблиця 7.8 – SWOT-аналіз стартап-проєкту (Слабкі та сильні сторони)

Сильні сторони (S):	Слабкі сторони (W):
Передовий досвід атомістичного комп'ютерного моделювання	Високі початкові інвестиції в технології та досвід
Можливість розробляти індивідуальні матеріали для конкретних потреб	Обмежена присутність на ринку як новий стартап
Швидке створення прототипів і розробка, що скорочує час виходу на ринок	Залежність від складної обчислювальної інфраструктури
Потенціал для високоякісних, інноваційних матеріалів	Необхідність постійних досліджень і розробок, щоб випереджати технологічний прогрес

Таблиця 7.9 – SWOT-аналіз стартап-проекту (Можливості та загрози)

Можливості (О):	Загрози (Т):
Зростаючий попит на передові, індивідуальні матеріали в різних секторах	Швидкий прогрес у конкуруючих технологіях
Потенційне партнерство з дослідницькими установами та промисловістю	Коливання ринкового попиту та економічної кон'юнктури
Розширення на стійкі та екологічно чисті матеріали	Ризики інтелектуальної власності та конкуренція з боку визнаних гравців
Диверсифікація застосування в аерокосмічній, оборонній, автомобільній промисловості тощо	Регуляторні проблеми в різних галузях і регіонах

Також порівнюємо товари конкурентів з товарами, які будуть вироблятися в рамках проекту отримання спрямовано закристалізованих евтектичних сплавів на основі карбіду бору (табл. 7.10).

Таблиця 7.10 – Порівняльний аналіз сильних та слабких сторін проекту

№	Фактор конкурентоспроможності	Пункти 1-20	Рейтинг продукції конкурентів у порівнянні з проектом (від -3 до +3)
1	Технологічні інновації	18	+2
2	Можливість налаштування	17	+1
3	Присутність на ринку	10	-2
4	Ефективність витрат	14	0
5	Швидкість розвитку	16	+1
6	Стійкість	12	-1
7	Стратегія інтелектуальної власності	13	-1

На основі SWOT-аналізу розробляються альтернативи ринкової поведінки (перелік заходів) для виведення стартап-проєкту на ринок та орієнтований оптимальний час їх ринкової реалізації з огляду на потенційні проєкти конкурентів, що можуть бути виведені на ринок.

Визначені альтернативи аналізуються з точки зору строків та ймовірності отримання ресурсів (табл. 7.11).

Таблиця 7.11 – Альтернативи ринкового впровадження стартап-проєкту

№	Альтернатива (орієнтований набір заходів) ринкової поведінки	Ймовірність отримання ресурсів	Термін реалізації
1	Співпрацюйте з науково-дослідними установами	Високий	6-12 місяців
2	Спочатку зосередьтеся на ринкових нішах	Помірний	3-6 місяців
3	Урізноманітніть застосування продуктів	Від середнього до високого	12-18 місяців
4	Надійне фінансування для розвитку технологій	Високий	6-12 місяців
5	Розвивайте стратегічні партнерства з ключовими галузями промисловості	Від середнього до високого	12-24 місяці
6	Альтернатива (орієнтований набір заходів) ринкової поведінки	Ймовірність отримання ресурсів	Термін реалізації

7.5 Розроблення ринкової стратегії проєкту

Структура ринкової стратегії, тобто рішень, що визначають взаємовідносини підприємства з ринком ресурсів, багато в чому аналогічна структурі товарно-ринкової стратегії підприємства. Так само як і у випадку товарно-ринкової стратегії, мова тут йде про двох сферах стратегічних рішень: по-перше, рішень, що визначають поведінку підприємства на ринках матеріальних

факторів виробництва (засобів і предметів праці); по-друге, рішень про номенклатуру, обсяги та якість придбаних і використовуваних усередині підприємства ресурсів.

Ринкова стратегія підприємства розробляється на основі досліджень, вивчення покупців, вивчення товарів, конкурентів та інших елементів ринкового господарства (табл. 7.12). Найбільш поширеними стратегіями маркетингу є:

- а) проникнення на ринок;
- б) розвиток ринку;
- в) розробка товару;
- г) диверсифікація

Таблиця 7.12 – Вибір цільових груп потенційних споживачів

№	Опис профілю цільової групи потенційних клієнтів	Готовність споживачів прийняти товар	Цільовий попит у цільовій групі (сегменті)	Інтенсивність конкуренції в сегменті	Легкість входу в сегмент
1	Аерокосмічні виробники	Високий	Високий для легких, міцних матеріалів	Високий	Помірний
2	Оборонні підрядники для бронезишетів і бронезишетів	Помірний	Високий для міцних захисних матеріалів	Помірний	Виклик
3	Автомобільна промисловість для високоефективних компонентів	Помірний	Помірний попит на передові матеріали	Високий	Помірний
4	Виробники медичного обладнання для біосумісних імплантатів	Високий	Зростаючий попит на передові біосумісні матеріали	Низький	Від середнього до високого
Обрано аерокосмічну галузь					

Через те, що ми обрали одну групу споживачів – аерокосмічні підприємства – можемо стверджувати, що компанія буде розвиватися в рамках стратегії концентрованого маркетингу.

Таблиця 7.13 – Визначення базової стратегії розвитку:

№	Обрана альтернатива розвитку проекту	Стратегія охоплення ринку	Ключові конкурентні позиції за обраною альтернативою	Базова стратегія розвитку
1	Зосередьтеся на ринкових нішах і технологічному лідерстві	Вибірковий/нішевий ринок	Технологічна перевага та налаштування	Зосередьтеся на інноваціях і налаштуваннях на нішевих ринках

Наступним кроком є вибір стратегії конкурентної поведінки (табл. 7.14)

Таблиця 7.14 – Визначення базової стратегії конкурентної поведінки

№	Чи є проєкт «піонером» на ринку?	Чи буде компанія шукати нових клієнтів, чи забиратиме існуючих у конкурентів?	Чи буде компанія копіювати основні характеристики продукції конкурентів і які саме?	Стратегія конкурентної поведінки
1	Так	Нові клієнти	Ні, унікальна технологія	Стратегія інновацій та диференціації

Відповідно, в рамках розробки ринкової стратегії проєкту, сформульовано основні вимоги до ринкової стратегії проєкту, а також асоціативно сформульовано ключові позиції проєкту та передумови його конкурентоспроможності на ринку.

Таблиця 7.15 - Визначення стратегії позиціонування:

№	Вимоги до продукту цільової аудиторії	Базова стратегія розвитку	Ключові конкурентні позиції власного стартап-проєкту	Вибір асоціацій, які мають сформувати цілісну позицію власного проєкту
1	Високоякісні, інноваційні та індивідуальні матеріали	Інновації та налаштування	Технологічне лідерство, налаштування	Позиціонування як лідера в інноваційних і нестандартних надтвердих матеріалах для високотехнологічних застосувань

7.6 Розробка маркетингової стратегії стартап проєкту

Першим кроком є формування маркетингової концепції товару, який отримає споживач. Для цього у таблиці 7.16 потрібно підсумувати результати попереднього аналізу конкурентоспроможності товару. Методика, яку планується використовувати, є унікальною. Тому задля забезпечення її від копіювання конкурентами, можна запатентувати методику.

Таблиця 7.16 - Визначення ключових переваг концепції потенційного товару

№	Потреба	Перевага, яку пропонує продукт	Ключові переваги перед конкурентами (існуючими або такими, що будуть створені)
1	Високоєфективні матеріали для промислового застосування	Чудова твердість і термостійкість	Можливість налаштування та розширені властивості матеріалу недоступні в існуючих продуктах
2	Ефективні та економічні матеріали у виробництві	Зменшені витрати матеріалу та подовжений термін служби	Більш економічний у довгостроковій перспективі завдяки довговічності

Наступним кроком у визначення цінових меж, яким необхідно керуватися при встановленні ціни на потенційний товар (остаточне визначення ціни відбудеться під час фінансово-економічного аналізу проєкту), яке передбачає аналіз ціни на товари-аналоги або товари субститути, а також аналіз рівня доходів цільової групи споживачів (табл. 7.17), аналіз проводиться експертним методом.

Таблиця 7.17 – Визначення меж встановлення ціни

№	Рівень цін на товари-замінники	Рівень цін на аналогічні товари	Рівень доходів цільової групи споживачів	Верхня та нижня межа встановлення ціни товару
1	Високий (через спеціалізований характер)	Конкурентоспроможний на ринку передових матеріалів	Високий (орієнтація на галузі зі значними бюджетами на дослідження та розробки)	Верхня межа: трохи вище поточних лідерів ринку, щоб відобразити найвищу якість; Нижня межа: конкуренція з високоякісними матеріалами на ринку

7.7 Формування системи збуту

Проєкт зосереджений на атомістичному комп'ютерному дизайні матеріалів, має значний потенціал завдяки своєму інноваційному підходу в матеріалознавстві. Здатність створювати на замовлення матеріали з вищою твердістю, механічною міцністю і термостійкістю ставить його на передові позиції в розробці передових матеріалів, особливо цінних в таких галузях, як аерокосмічна, оборонна і виробнича промисловість.

Однак перешкодами на шляху до успішного старту і стабільної роботи є високі початкові інвестиції в обчислювальні ресурси, знання, необхідність постійного вдосконалення методів досліджень, а також ринкова конкуренція з боку вже існуючих матеріалів і технологій. Подолання цих викликів матиме вирішальне значення для успіху проєкту, що вимагає стратегічного планування, надійного фінансування та постійних інновацій.

ВИСНОВКИ

Вперше за результатами комп'ютерного моделювання показано, що при легуванні алюмінієм карбіду бору атоми Al займають положення у середині міжкосаедричного ланцюга зі зміною його конфігурації на кутову $(B_{12})C^{\wedge}Al^{\wedge}C$. Також можливими, але суттєво менш імовірними є наступні атомні конфігурації: $(B_{11}C_p)C^{\wedge}Al^{\wedge}C_l$, $(B_{11}C_p)C^{\wedge}Al^{\wedge}C_m$, $(B_{11}Al_p)C-B-C$.

Встановлено, що під час легування алюмінію у ланцюг політипу $(B_{12})C-C-C$, перший може займати одне із 6 вироджених положень. Оптимальний радіус зміщення Al відносно центру міжкосаедричного ланцюга становить 0.94 Å в напрямках, компланарних до C-B зв'язків крайових вуглеців у ланцюзі.

За результатами структурної оптимізації отримано рентгенівський дифракційний спектр для $(B_{12})C^{\wedge}Al^{\wedge}C$, що дозволить ідентифікувати фазу в експериментальних дослідженнях.

Вперше розраховано значення пружних модулів в полікристалічному наближенні для $(B_{12})C^{\wedge}Al^{\wedge}C$, зокрема $K = 235.730$ ГПа, $E = 480.706$ ГПа та $G = 207.177$ ГПа, що виявилися близькими до таких у чистого карбіду бора. Таким чином, впровадження алюмінію в структуру карбіду бору практично не впливає на значення пружних модулів матеріалу.

Вперше проведене комп'ютерне моделювання одновісного стиску $(B_{12})C^{\wedge}Al^{\wedge}C$, що дозволило розрахувати залежність повної енергії та одновісного напруження від одновісної деформації, а також визначити максимальну пружну деформацію вздовж міжкосаедричного ланцюга. Отримані результати показали, що введення в карбід бору алюмінію приводить до зниження максимально пружної деформації й максимального одновісного напруження, які витримує система. Проте після початкового падіння напруження $(B_{12})C^{\wedge}Al^{\wedge}C$ стабілізується, що свідчить про утворення фази, що має свій запас міцності.

Результат буде цікавим для військової та військової та аерокосмічної промисловості, проте до впровадження потрібно провести додаткові дослідження в наступних напрямках:

- детальніше подивитись на механізм взаємодії атомів у вершинах ланцюга;
- подивитись реакцію легованого алюмінієм карбиду бору на зсув та розтяг;
- перевірити можливий вплив інших фаз карбоборидів алюмінію.

CONCLUSIONS

For the first time, computer simulations have shown that when boron carbide is alloyed with aluminum, Al atoms occupy a position in the middle of the intercosahedral chain with a change in its configuration to the angular $(B_{12})C^{\wedge}Al^{\wedge}C$. The following atomic configurations are also possible, but much less likely: $(B_{11}C_p)C^{\wedge}Al^{\wedge}C_l$, $(B_{11}C_p)C^{\wedge}Al^{\wedge}C_m$, $(B_{11}Al_p)C-B-C$.

It has been found that when aluminum is doped into the chain of the $(B_{12})C-C-C$ polytype, the former can occupy one of 6 degenerate positions. The optimum radius of displacement of Al relative to the center of the intercosahedral chain is 0.94 Å in the directions complementary to the C-B bonds of the edge carbons in the chain.

Based on the results of structural optimization, an X-ray diffraction spectrum for $(B_{12})C^{\wedge}Al^{\wedge}C$ was obtained, which will allow the phase to be identified in experimental studies.

For the first time, the values of elastic moduli in the polycrystalline approximation for $(B_{12})C^{\wedge}Al^{\wedge}C$ were calculated, in particular, $K = 235.730$ GPa, $E = 480.706$ GPa, and $G = 207.177$ GPa, which turned out to be close to those of pure boron carbide. Thus, the introduction of aluminum into the structure of boron carbide has virtually no effect on the elastic moduli of the material.

For the first time, a computer simulation of uniaxial compression of $(B_{12})C^{\wedge}Al^{\wedge}C$ was carried out, which made it possible to calculate the dependence of the total energy and uniaxial stress on the uniaxial strain, as well as to determine the maximum elastic strain along the intercosahedral chain. The results obtained showed that the introduction of aluminum boron carbide into aluminum boron carbide leads to a decrease in the maximum elastic strain and the maximum uniaxial stress that the system can withstand. However, after an initial drop in stress, $(B_{12})C^{\wedge}Al^{\wedge}C$ stabilizes, indicating the formation of a phase with its own safety margin.

The result will be of interest to the military and the military and aerospace industries, but additional research in the following areas is needed before implementation:

- take a closer look at the mechanism of interaction of atoms at the top of the chain;
- to look at the reaction of aluminum-doped boron carbide to shear and tension;
- to check the possible influence of other phases of aluminum carboborides.

ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАНЬ

1. Aryal S., Rulis P., Ching W.Y. Mechanism for amorphization of boron carbide B₄C under uniaxial compression // Phys. Rev. B. 2011. Vol. 84, № 18. P. 184112.
2. Zhu D. Aerospace Ceramic Materials: Thermal, Environmental Barrier Coatings and SiC/SiC Ceramic Matrix Composites For Turbine Engine Applications. 2018.
3. syalons_admin. Ceramic Materials in Defence Applications [Electronic resource] // International Syalons. 2019. URL: <https://www.syalons.com/2019/01/08/ceramic-materials-in-defence-applications/> (accessed: 19.12.2023).
4. Uppal R. Ceramics materials for Military Body and Vehicle Armor and Aerospace applications [Electronic resource] // International Defense Security & Technology. URL: <https://idstch.com/technology/materials/ceramics-materials-for-military-body-and-vehicle-armor-and-aerospace-applications/> (accessed: 19.12.2023).
5. Ceramics and glass in electrical and electronic applications - The American Ceramic Society electroceramics, electronic devices [Electronic resource] // The American Ceramic Society. URL: <https://ceramics.org/about/what-are-engineered-ceramics-and-glass/ceramics-and-glass-in-electrical-and-electronic-applications/> (accessed: 19.12.2023).
6. Čedomir Oblak, Peter Jevnikar, Tomaž Kosmač. Properties and clinical application of zirconia bioceramics in medicine // Slov. Med. J. 1970. Vol. 82, № 12.
7. Ceramic capacitor // Wikipedia. 2023.
8. Chasserio N. et al. Ceramic Substrates for High-temperature Electronic Integration // J. Electron. Mater. 2009. Vol. 38, № 1. P. 164–174.
9. Turner I.G. Ceramics and Glasses // Biomedical Materials / ed. Narayan R. Cham: Springer International Publishing, 2021. P. 101–137.
10. Domnich, V. et al. Boron Carbide: Structure, Properties, and Stability under

Stress // J. Am. Ceram. Soc. 2011. Vol. 94, № 11. P. 3605–3628.

11. Thévenot F. Boron carbide—A comprehensive review // J. Eur. Ceram. Soc. 1990. Vol. 6, № 4. P. 205–225.

12. Fanchini G., McCauley J.W., Chhowalla M. Behavior of Disordered Boron Carbide under Stress // Phys. Rev. Lett. 2006. Vol. 97, № 3. P. 035502.

13. Bourne N.K. Shock-induced brittle failure of boron carbide // Proc. R. Soc. Lond. Ser. Math. Phys. Eng. Sci. 2002. Vol. 458, № 2024. P. 1999–2006.

14. Gautam P.C. et al. Determination of Hugoniot Elastic Limit (HEL) and Equation of State (EOS) of Ceramic Materials in the Pressure Region 20 GPa to 100 GPa // Procedia Eng. 2017. Vol. 173. P. 198–205.

15. Chen M., McCauley J.W., Hemker K.J. Shock-Induced Localized Amorphization in Boron Carbide // Science. 2003. Vol. 299, № 5612. P. 1563–1566.

16. Vogler T.J., Reinhart W.D., Chhabildas L.C. Dynamic behavior of boron carbide // J. Appl. Phys. 2004. Vol. 95, № 8. P. 4173–4183.

17. Chauhan A. et al. Experimental observations of amorphization in stoichiometric and boron-rich boron carbide // Acta Mater. 2019. Vol. 181. P. 207–215.

18. Subhash G. et al. In search of amorphization-resistant boron carbide // Scr. Mater. 2016. Vol. 123. P. 158–162.

19. Garbuz V.V. et al. Location of Al and Si atoms in substituted boron carbide // Him. Fiz. Ta Tehnol. Poverhni. 2023. Vol. 14, № 1. P. 76–82.

20. Proctor J.E. et al. Stabilization of boron carbide via silicon doping // J. Phys. Condens. Matter. 2015. Vol. 27, № 1. P. 015401.

21. Vasiliev O. et al. Silicon in intericosahedra chains of boron carbide // J. Eur. Ceram. Soc. 2022. Vol. 42, № 13. P. 5515–5521.

22. Xiang S. et al. Tuning the deformation mechanisms of boron carbide via silicon doping // Sci. Adv. 2019. Vol. 5, № 10. P. eaay0352.

23. Karbid bora. Nauch. izd / ed. Kislyi P.S. Kiev: Nauk. dumka, 1988. 215 p.

24. Beauvy M. Stoichiometric limits of carbon-rich boron carbide phases // J. Common Met. 1983. Vol. 90, № 2. P. 169–175.

25. Barick P., Jana D.C., Thiagarajan N. Effect of particle size on the mechanical properties of reaction bonded boron carbide ceramics // *Ceram. Int.* 2013. Vol. 39, № 1. P. 763–770.
26. Aselage T.L., Tissot R.G. Lattice Constants of Boron Carbides // *J. Am. Ceram. Soc.* 1992. Vol. 75, № 8. P. 2207–2212.
27. Tallant D.R. et al. Boron carbide structure by Raman spectroscopy // *Phys. Rev. B.* 1989. Vol. 40, № 8. P. 5649–5656.
28. Werheit H. et al. On surface Raman scattering and luminescence radiation in boron carbide // *J. Phys. Condens. Matter.* 2010. Vol. 22, № 4. P. 045401.
29. McClellan K.J. et al. Room temperature single crystal elastic constants of boron carbide // *J. Mater. Sci.* 2001. Vol. 36, № 14. P. 3403–3407.
30. Chocron S. et al. Intact and Predamaged Boron Carbide Strength under Moderate Confinement Pressures // *J. Am. Ceram. Soc.* / ed. Subhash G. 2012. Vol. 95, № 1. P. 350–357.
31. Johnson G.R., Holmquist T.J. Response of boron carbide subjected to large strains, high strain rates, and high pressures // *J. Appl. Phys.* 1999. Vol. 85, № 12. P. 8060–8073.
32. Hollenberg G.W., Walther G. The Elastic Modulus and Fracture of Boron Carbide // *J. Am. Ceram. Soc.* 1980. Vol. 63, № 11–12. P. 610–613.
33. Medvedovski E. E. Medvedovski, Alumina Ceramics for Ballistic Protection. Part 1. The American Ceramic Society Bulletin, vol. 81, N.3, 2002, pp. 27-32 // *Am. Ceram. Soc. Bull.* 2002. Vol. 81.
34. Madhav Reddy K. et al. Enhanced mechanical properties of nanocrystalline boron carbide by nanoporosity and interface phases // *Nat. Commun.* 2012. Vol. 3, № 1. P. 1052.
35. Osipov A.D. et al. Effect of porosity and grain size on the mechanical properties of hot-pressed boron carbide // *Sov. Powder Metall. Met. Ceram.* 1982. Vol. 21, № 1. P. 55–58.
36. Barick P., Jana D.C., Thiagarajan N. Effect of particle size on the mechanical

properties of reaction bonded boron carbide ceramics // *Ceram. Int.* 2013. Vol. 39, № 1. P. 763–770.

37. Niihara K., Nakahira A., Hirai T. The Effect of Stoichiometry on Mechanical Properties of Boron Carbide // *J. Am. Ceram. Soc.* 1984. Vol. 67, № 1.

38. Jain A. et al. Kinetics of oxidation of boron powder // *Thermochim. Acta.* 2011. Vol. 514, № 1–2. P. 67–73.

39. Steinbrück M. Oxidation of boron carbide at high temperatures // *J. Nucl. Mater.* 2005. Vol. 336, № 2–3. P. 185–193.

40. Gogotsi Yu.G., Yaroshenko V.P., Porz F. Oxidation resistance of boron carbide-based ceramics // *J. Mater. Sci. Lett.* 1992. Vol. 11, № 5. P. 308–310.

41. Werheit H. Are there bipolarons in icosahedral boron-rich solids? // *J. Phys. Condens. Matter.* 2007. Vol. 19, № 18. P. 186207.

42. Schmechel R., Werheit H. Correlation between structural defects and electronic properties of icosahedral boron-rich solids // *J. Phys. Condens. Matter.* 1999. Vol. 11, № 35. P. 6803–6813.

43. Lankau V. et al. Preparation and Thermoelectric Characterization of SiC-B4C Composites // *J. Electron. Mater.* 2010. Vol. 39, № 9. P. 1809–1813.

44. Jain A. et al. Commentary: The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation // *APL Mater.* 2013. Vol. 1, № 1. P. 011002.

45. Downs R.T., Hall-Wallace M. The American Mineralogist crystal structure database.

46. Density functional theory // Wikipedia. 2023.

47. Posysaev S. Applications of density functional theory for modeling metal-semiconductor contacts, reaction pathways, and calculating oxidation states. 2018.

48. Pseudopotential // Wikipedia. 2023.

49. what can QE do [Electronic resource] // Quantum Espresso. URL: <https://www.quantum-espresso.org/what-can-qe-do/> (accessed: 10.12.2023).

50. Chakraborty D., Berland K., Thonhauser T. Next-Generation Nonlocal van der Waals Density Functional // *J. Chem. Theory Comput.* 2020. Vol. 16, № 9. P. 5893–5911.

51. Berland K. et al. van der Waals forces in density functional theory: a review of the vdW-DF method // *Rep. Prog. Phys.* 2015. Vol. 78, № 6. P. 066501.

52. Grimme S. et al. A consistent and accurate ab initio parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H-Pu // *J. Chem. Phys.* 2010. Vol. 132, № 15. P. 154104.

53. Cococcioni M., De Gironcoli S. Linear response approach to the calculation of the effective interaction parameters in the LDA + U method // *Phys. Rev. B.* 2005. Vol. 71, № 3. P. 035105.

54. Giannozzi P. et al. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials // *J. Phys. Condens. Matter.* 2009. Vol. 21, № 39. P. 395502.

55. Giannozzi P. et al. Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO // *J. Phys. Condens. Matter.* 2017. Vol. 29, № 46. P. 465901.

56. Shakin C.M., Weiss M.S. Translationally invariant self-consistent field theories // *Phys. Rev. C.* 1977. Vol. 15, № 5. P. 1911–1916.

57. pw.x: input description [Electronic resource]. URL: https://www.quantum-espresso.org/Doc/INPUT_PW.html#idm3 (accessed: 12.12.2023).

58. 3.4 Optimization and dynamics [Electronic resource]. URL: https://www.quantum-espresso.org/Doc/pw_user_guide/node11.html#:~:text=You%20may%20follow%20a%20structural,of%20the%20kind%20of%20dynamics!!! (accessed: 10.12.2023).

59. Dal Corso A. Pseudopotentials periodic table: From H to Pu // *Comput. Mater. Sci.* 2014. Vol. 95. P. 337–350.

60. Garrity K.F. et al. Pseudopotentials for high-throughput DFT calculations // *Comput. Mater. Sci.* 2014. Vol. 81. P. 446–452.

61. Prandini G. et al. Precision and efficiency in solid-state pseudopotential

calculations // Npj Comput. Mater. Nature Publishing Group UK London, 2018. Vol. 4, № 1. P. 72.

62. Pseudo potentials • Quantum Espresso Tutorial [Electronic resource]. URL: <https://pranabdas.github.io/espresso/setup/pseudo-potential/> (accessed: 15.12.2023).

63. Ishibashi S. Construction of Electron-Positron Momentum Density from Pseudo-Wavefunctions with Better Accuracy // Mater. Sci. Forum. 2004. Vol. 445–446. P. 401–403.

64. Aamir Iqbal M. et al. Fundamentals of Density Functional Theory: Recent Developments, Challenges and Future Horizons // Density Functional Theory - Recent Advances, New Perspectives and Applications / ed. Glossman-Mitnik D. IntechOpen, 2022.

65. Schwerdtfeger P. The Pseudopotential Approximation in Electronic Structure Theory // ChemPhysChem. 2011. Vol. 12, № 17. P. 3143–3155.

66. Calculation of Formation Energies — | QuantumATK V-2023.12 Documentation [Electronic resource]. URL: https://docs.quantumatk.com/tutorials/formation_energies/formation_energies.html (accessed: 25.12.2023).

67. Nakashima P.N.H. The Crystallography of Aluminum and Its Alloys // Encyclopedia of Aluminum and Its Alloys. 1st ed. Boca Raton: CRC Press, 2019.

68. Bykova E. et al. The crystal structure of aluminum doped β -rhombohedral boron // J. Solid State Chem. 2012. Vol. 194. P. 188–193.

69. Sumiyoshi Y., Ushio M., Suzuki S. Formation of Graphite Single Crystal from Iron Solution by the Slow Cooling Method // Bull. Chem. Soc. Jpn. 1988. Vol. 61, № 5. P. 1577–1585.

70. Fuchs M. et al. Pseudopotential study of binding properties of solids within generalized gradient approximations: The role of core-valence exchange correlation // Phys. Rev. B. 1998. Vol. 57, № 4. P. 2134–2145.

71. Welcome to Thermo_pw [Electronic resource] // Welcome to Thermo_pw. URL: https://dalcorso.github.io/thermo_pw/ (accessed: 01.01.2024).

72. ДБН В.2.5-28-2018. Природне і штучне освітлення.
73. ДСН 3.3.6.037-99. Санітарні норми виробничого шуму, ультразвуку та інфразвуку.
74. ДСанПіН 3.3.2.007-98 Державні санітарні правила і норми роботи з візуальними дисплейними терміналами електронно-обчислювальних машин.
75. ПУЕ-2017. Правила улаштування електроустановок (перше переглянуте, перероблене, доповнене та адаптоване до умов України видання).
76. НАПБ Б.03.002-2007 Норми визначення категорій приміщень, будинків та зовнішніх установок за вибухопожежною та пожежною небезпекою.
77. Halverson D.C. et al. Processing of Boron Carbide-Aluminum Composites // J. Am. Ceram. Soc. 1989. Vol. 72, № 5. P. 775–780.

ДОДАТОК А

Частина програмного модуля “conv”

```
def opt_ecut_inp(prefix,
    structure,
    ecut_list,
    pseudos,
    qe_params_c,
    kpts, koffset=(0, 0, 0),
    np=4,
    wkdir='job/conv/ecut/',
    pseudo_dir=os.environ['ESPRESSO_PSEUDO'],
    outdir=None,
    tstress=True,
    tprnfor=True,
    ecutmult=4,
    com_params="",
    **qe_params_v):
    """
```

Prepare input files for cutoff energy convergence studies.

```
:param prefix: Prefix to attach to the input files.
:param structure: Structure as ASE Atoms object.
:param ecut_list: List of cutoff energies to test.
:param pseudos: A filename for each atomic species.
:param qe_params_c: Input parameters for pw.x, static during the whole calculation.
:param kpts: k-points for the calculation.
:param koffset: kpoint grid offset.
:param np: Number of MPI processes to pass to mpirun.
:param wkdir: Working directory for the work.
:param pseudo_dir: Path to the directory containing pseudopotentials.
:param outdir: Output directory for temporary files.
:param tstress: Whether to calculate the stress.
:param tprnfor: Whether to calculate the forces.
:param ecutmult: Multiplier for cutoff energy for charge density.
:param com_params: Additional command parameters for pw.x.
:param qe_params_v: Additional QE input variables as keyword arguments.
```

This function creates input files in the specified work directory to test cutoff energy convergence. It iterates over the ecut_list, generating the input files and a bash script to run them.

```
"""
```

```

# Define or generate the outdir
if outdir is None:
    base_tmp_dir = os.environ['ESPRESSO_TMPDIR']
    while True:
        random_number = random.randint(1, 1000000)
        outdir = os.path.join(base_tmp_dir, f"tmp{random_number:07d}")
        if not os.path.exists(outdir):
            os.makedirs(outdir)
            break

# Create the working directory if it does not exist
if not os.path.exists(wkdir):
    os.makedirs(wkdir)

# Initialize the bash script content
shell_inc = '#! /bin/bash\n\n'

# Iterating over ecut_list to generate input files and bash script content
for ecut in ecut_list:
    out_filename = f'{wkdir}{prefix}.{ecut}.ecut.out'
    in_filename = f'{wkdir}{prefix}.{ecut}.ecut.in'

    # Check if output file already exists, if yes then skip the iteration
    if os.path.exists(out_filename):
        continue

    # Open the input file and write the parameters
    with open(in_filename, 'w+') as f:
        write_espresso_in(f,
            structure,
            input_data=qe_params_c,
            pseudopotentials=pseudos,
            kpts=kpts,
            koffset=koffset,
            prefix=prefix,
            title=f'{prefix} ecut convergence',
            ecutwfc=ecut,
            ecutrho=ecut * ecutmult,
            pseudo_dir=pseudo_dir,
            outdir=outdir,
            tstress=tstress,
            tprnfor=tprnfor,
            **qe_params_v

```

```

        )
        file_prefix = f'{prefix}.{ecut}'
        shell_inc += f'mpirun -np {np} pw.x {com_params} -i {file_prefix}.ecut.in |& tee {file_prefix}.ecut.out\n'

# Write the bash script content to file and make it executable
with open(wkdir + 'run.sh', 'w+') as r:
    r.write(shell_inc)

st = os.stat(wkdir + 'run.sh')
os.chmod(wkdir + 'run.sh', st.st_mode | stat.S_IEXEC)

# No explicit return value as the function is used for creating files and changing file permissions

def ecutopt_to_df(prefix, ecut_list, wkdir='job/conv/ecut/'):
    etot_list = []
    forces_list = []
    wall_time_list = [] # my linE

    for ecut in ecut_list:
        datum = aio.read('{}{}.{}.ecut.out'.format(wkdir, prefix, ecut), format='espresso-out')
        etot_list.append(datum.get_total_energy())
        forces_list.append(datum.get_forces())
        # start of walltime calc
        data_4_time = open('{}{}.{}.ecut.out'.format(wkdir, prefix, ecut), "r") # my linE opening qe output file
        data_4_time_r = data_4_time.read() # my linE reading qe output file
        time_position = data_4_time_r.find("PWSCF      :") # my linE searching first position of wall time
        wall_time_list.append(
            data_4_time_r[time_position + 29:time_position + 29 + 12]) # my linE making array from walltime data
        # end of walltime calc
    data = {'ecut_ry': ecut_list,
           'etot_ev': np.array(etot_list),
           'wall_time': wall_time_list} # my linE
    data = pd.DataFrame(data)
    data['ediff'] = np.abs(data['etot_ev'] - data['etot_ev'].iloc[-1])
    forces_list = np.array(forces_list)
    data['maxdf'] = np.max(np.linalg.norm(forces_list - forces_list[-1], axis=2), axis=1)
    return data

```

ДОДАТОК Б

Підпрограма, що виконує стиснення комірки

```
def scale_in_direction(atoms, crystallographic_direction, scale):
    """
    Function that scales an ASE Atoms object in a specified crystallographic direction.

    Parameters:
    atoms (ase.Atoms): The Atoms object to be scaled.
    crystallographic_direction (list): The crystallographic direction for scaling.
    scale (float): The scale factor.

    Returns:
    ase.Atoms: The scaled Atoms object.
    """

    # Create a copy of the atoms object to prevent changes to the original
    atoms = atoms.copy()

    # Get the first vector of the initial cell and normalize it
    init_a = atoms.get_cell()[0]
    unit_init_a = init_a/np.linalg.norm(init_a)

    # Convert the crystallographic direction to a Cartesian vector
    direction = atoms.cell.cartesian_positions(crystallographic_direction)

    # Normalize the direction vector
    unit_vector = direction / np.linalg.norm(direction)

    # Rotate the cell such that the z-axis coincides with the direction vector
    atoms.rotate(unit_vector, [0,0,1], rotate_cell=True)

    # Scale the cell in the z-axis
    atoms.set_cell(atoms.get_cell()*np.array([1, 1, scale]), scale_atoms=True)

    # Rotate the cell back to the initial orientation
    atoms.rotate(atoms.get_cell()[0], unit_init_a, rotate_cell = True)

    return atoms
```

```

delta = 0.01
B12CCC_array_out_rattle=[]
wkdir="/job/B12CCC_conv_2x2x1/relax/g_compression_c_fixed/PBE_pslPAW/"
plotArgs={"e":[], "tot_energy":[], 'pressure': []}

for i in range(37):
    e = i*delta
    if i == 0:
        Input_str = B12CCC_conv_2x2x1.copy()

    else:
        prev_file_path = f"{wkdir}Relax_e_{round(e-delta,2)}.pwo"
        Input_str = aio.read(prev_file_path, format = "espresso-out")

    Input_str_sheared = scale_in_direction(Input_str,[0,0,1],(1-e)/(1-e+delta) )
    file_name = f"Relax_e_{round(e,2)}"
    B12CCC_array_out_rattle.append(make_espresso(Input_str_sheared,
                                                    pseudopotentials = pseudos_PBE_pslPAW,
                                                    input_data = vc_rlx_qe_vars,
                                                    nstep = 1000,
                                                    np=54,
                                                    label = file_name,
                                                    directory=wkdir,
                                                    ecutwfc = 100,
                                                    cell_dofree = 'fixc',
                                                    electron_maxstep = 200,
                                                    kpts = 'gamma', koffset=(0, 0, 0),
                                                    restart_mode = "from_scratch",
                                                    nbnd =1024,
                                                    mixing_beta = 0.1,
                                                    occupations = 'smearing', smearing = 'gauss', degauss = 5e-4,
                                                    com_params="-ndiag 2",
                                                    nosym = True))

    plotArgs["e"].append(e)
    plotArgs["tot_energy"].append(B12CCC_array_out_rattle[i].get_total_energy())
    stress_arr = B12CCC_array_out_rattle[i].get_stress(voigt = True, apply_constraint=True)
    p = (stress_arr[2].sum())/GPa*(-1)
    plotArgs["pressure"].append(p)
    print(p)

```

ДОДАТОК В

Підпрограма, що будує кутові конфігурації

```
def get_bonded_carbons(atoms, dop_index):
    dist = {}
    for a in atoms: # перебираємо всі атоми в структурі
        if a.symbol == 'C': # шукаємо тільки атоми вуглецю
            dist[a.index] = atoms.get_distance(dop_index, a.index) # записуємо в словник індекс атому вуглецю, як
назву ключа, а як величину записуємо відстань до атома Si

    dist_keys = list(dist.keys())
    dist_values = list(dist.values())
    min_dist = min(list(dist.values()))
    c1_buf = dist_keys[dist_values.index(min_dist)] # знаходимо індекс атома вуглецю із мінімальною дистанцією
    dist.pop(c1_buf) # видаляємо індекс атома вуглецю із мінімальною дистанцією з словника

    dist_keys = list(dist.keys())
    dist_values = list(dist.values())
    min_dist = min(list(dist.values()))
    c2_buf = dist_keys[dist_values.index(min_dist)] # знаходимо індекс наступного атома вуглецю із мінімальною
дистанцією

    # Визначаємо який вуглець вище знаходиться вище, а який нижче і відповідно до цього присвоюємо
відповідні значення
    if list(atoms[c1_buf].position)[2] >= list(atoms[c2_buf].position)[2]:
        c1, c2 = c1_buf, c2_buf
    else:
        c1, c2 = c2_buf, c1_buf

    return (c1, c2)

def gen_ang_b12c2x_conf(supercell: 'ase.Atoms', r: 'float or list', ang: 'float or list'=0, symbol: str='Si'):
    """
    Generates angular chain configs

    Parameters
    -----
    supercell: ASE Atoms; This may also be a unit cell.

                IMPORTANT: Dopants must be substituted beforehand.
                IMPORTANT: Lateral chain carbons (near the dopant) MUST have indices 1 and 2 lower than the
                dopant's atoms indices.

    r:         float or list of floats, radii in Angstrom
    ang:       float or list of floats, angles in degrees
```

symbol: str, 'Si' or 'Al' for our usecases

Returns

ang_conf: ASE Atoms; configuration with angular chain with atoms `symbol`
displaced at distance `r` from the linear position and
angle `ang` relative to initial position at ang=0

Tests

- [x] General test (b4c_si/polarization/ang_pos_sc_dev.ipynb):

```
```python
lin_config = aio.read('info/B12CSiC.rlx.out', format='espresso-out')
supercell = lin_config.repeat(2)
rs = [i/5 for i in range(1,9)]
angs = [i*45 for i in range(0, 8)]
dsc = gen_ang_b12c2x_conf(supercell, rs, angs, symbol='Si')
```
```

Підготовка

Копіюємо структуру supercell, щоб не змінювати оригінал.

```
inc = supercell.copy()
```

Отримуємо координати всіх атомів структури

```
pos = inc.get_positions()
```

Рахуємо к-сть заміщених атомів в структурі

```
sa_counter = list(inc.get_chemical_symbols()).count(symbol)
```

Перетворюємо r та/або тета в float, якщо вони задані як int

```
if type(r) == int:
```

```
    r = float(r)
```

```
if type(ang) == int:
```

```
    ang = float(ang)
```

Якщо r та/або тета задані як float, то перетворюємо їх в масив, довжина якого відповідає к-сті заміщених атомів

```
if type(ang) == float:
```

```
    ang=[ang]*sa_counter
```

```
if type(r) == float:
```

```
    r=[r]*sa_counter
```

```

## Перевіряємо чи в структурі є заміщені атоми
if sa_counter == 0:
    print('В структурі нема заміщених атомів із вказаною назвою')
    return None

## Перевіряємо чи кількість заміщених атомів та величина масивів r та Θ співпадають
if len(r)!=sa_counter:
    print('Масив r не співпадає із к-тю заміщених атомів')
    return None
if len(ang)!=sa_counter:
    print('Масив Θ не співпадає із к-тю заміщених атомів')
    return None
## Перетворюємо масиви в ітератори
ang = iter(ang)
r = iter(r)
# Заміщуємо атоми
## Запускаємо цикл, який перебирає всі атоми
for a in inc:

    ## Виокремлюємо лише заміщені атоми
    if a.symbol == symbol:

        ## Визначаємо позиції, сусідніх до атому "X", атомів карбону
        c1, c2 = get_bonded_carbons(inc, a.index)
        c1_pos = pos[c1]
        c2_pos = pos[c2]
        ## Визначаємо координати вектора v0, початком і кінцем якого є положення атомів карбону
        v0 = c2_pos - c1_pos

        ## Визначаємо координати середини відрізка, що з'єднує два атоми карбону
        center = (c1_pos + c2_pos)/2

        ## Отримуємо координати двох одиничних векторів v1 та v2, що є ортогональними між собою і до v0
        v1, v2 = get_normals(v0)

        ## Отримуємо координати зміщеного атому
        circ_pos = circle(center, next(r), v1, v2, next(ang), deg=True)
        ## Присвоюємо координати скопійованій структурі
        pos[a.index] = circ_pos

    inc.set_positions(pos)
## Повертаємо вихідну структуру
return inc

```