

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Київський національний університет імені Тараса Шевченка
Фізичний факультет
Кафедра фізики металів

На правах рукопису

**Першопринципне моделювання процесу
аморфізації сплавів системи Ni-Zr**

Галузь знань: 10 Природничі науки
Спеціальність: 104 Фізика та астрономія
Освітня програма: Фізика наносистем

Кваліфікаційна робота магістра
студента 2 року навчання
Андрія МАЙСТРЕНКА

Науковий керівник:
доцент кафедри фізики металів
Інна ПЛЮЩАЙ

Робота заслухана на засіданні кафедри фізики металів та рекомендована до захисту на ЕК, протокол №9 від «22» травня 2023р.

Завідувач кафедри фізики металів



Василь КУРИЛЮК

Київ – 2023

ВИТЯГ

з протоколу № _____

засідання Екзаменаційної комісії

Визнати, що студент Андрій МАЙСТРЕНКО виконав та захистив кваліфікаційну роботу магістра з оцінкою _____.

Голова ЕК _____ чл.- . , .

«_____» _____ 2023 р.

АНОТАЦІЯ

Майстренко А.О. Першопринципне моделювання процесу аморфізації сплавів системи Ni-Zr.

Кваліфікаційна робота магістра за спеціальністю 104 Фізика та астрономія, освітня програма «Фізика наносистем». – Київський національний університет імені Тараса Шевченка, фізичний факультет, кафедра фізики металів. – Київ – 2023.

Науковий керівник: доцент кафедри фізики металів Плющай Інна Вячеславівна

Для аналізу процесу аморфізації в системі Ni-Zr застосовано метод abinitio молекулярної динаміки із розглядом як еволюції атомної структури, так і змін електронних спектрів. Положення атомів у надкомірці Ni₂₁Zr₁₁ були змодельовані шляхом числового відпалу за допомогою теорії функціоналу густини в узагальненому градієнтному наближенні. Обговорюються зміни гістограми міжатомних відстаней надкомірки Ni₂₁Zr₁₁ при фазових переходах "кристал-рідина-аморфна фаза". Показано, що значна варіація локального оточення атомів (до 30% від середнього значення в межах першої координаційної сфери) призводить до помітної варіації локальних електронних спектрів для "аморфної" фази. Доведено незастосовність електронного критерію Нагеля-Таука у випадку аморфних сплавів на основі Ni-Zr, що демонструють найвищу термічну стабільність.

Ключові слова: фазові переходи, аморфні сплави, перехідні метали, електронна структура, abinitio молекулярна динаміка.

SUMMARY

Maistrenko A.O. *Ab initio modeling of the process of amorization of alloys Ni-Zr*

Master's qualification in specialty 104 Physics and astronomy, educational program «Physics of nanosystems». – Taras Shevchenko National University of Kyiv, Faculty of Physics, Metal Physics Department. – Kyiv. – 2023.

Research supervisor: *Dr. of Physics and Mathematics, Associate Professor of the Department of Metal Physics, Inna V. Plyushchay,.*

Ab initio molecular dynamic approach have been applied to analyze the amorhization process in Ni-Zr system with the control both the atomic structure evolution and the electronic spectrums changes. The atomic positions in the Ni₂₁Zr₁₁ supercell were modeled by simulating annealing by the density functional theory in the generalized gradient approximation. Changes in the histogram of interatomic distances of the Ni₂₁Zr₁₁ supercell under “crystalline-liquid-amorphous” phase transitions are discussed. It was shown that a significant variation in the local environment of the atoms (up to 30% of the mean value within the first coordination sphere) leads to a marked variation in the local electron spectra for the “amorphous” phase. The inapplicability of the Nagel-Tauc electronic criterion in the case of Ni-Zr-based amorphous alloys demonstrating the highest thermal stability has been proved.

Keywords: phase transitions, amorphous alloys, transition metals, electronic structure, abinitio molecule dynamic.

ЗМІСТ

ВСТУП.....	3
I. ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД.....	5
II. МЕТОДИКА ДОСЛІДЖЕНЬ.....	12
III. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ.....	15
ВИСНОВКИ.....	24
СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ.....	26

ВСТУП

Сплави системи Ni-Zr широко використовуються як функціональні матеріали, особливо в біомедицині, водневій промисловості, при виготовленні ядерних реакторів та паливних елементів. Можливим шляхом покращення властивостей таких матеріалів є зміна їх атомної структури, зокрема аморфізація. Відомо, що однорідність аморфних матеріалів покращує їх функціональні властивості, наприклад, корозійну стійкість, механічні та магнітні властивості. Аморфні сплави ряду Ni-Zr демонструють багато корисних технічних характеристик: теплостійкість, високу механічну твердість, високе значення пластичності, стійкість в широкому діапазоні температур тощо. Отже практичне застосування сплавів системи Ni-Zr потребує глибокого вивчення особливостей утворення аморфної фази, а саме моделювання еволюції атомної структури за відповідних перетворень.

Програмний пакет Abinit дозволяє вивчення аморфного сплаву Ni-Zr з використанням методів першопринципної молекулярної динаміки, що дає можливість дослідити не тільки еволюцію атомної структури матеріалу а також отримувати дані про стан електронної підсистеми, зокрема дослідити питання застосовності електронного критерію

термостабільності Нагеля-Таука до аморфних сплавів системи Ni-Zr.

I. ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД

Аморфні металеві сплави - це тверді тіла, які не мають порядку у віддаленому розташуванні атомів, але мають близьку топологію та порядок (розташування атомів різної природи) (близька топологія - це, як правило, просторове розташування атомів, незалежно від їх типу). Їх отримують в основному гартуванням рідкого стану. Зазвичай вони охолоджуються зі швидкістю приблизно від 10^3 до 10^{10} градусів Цельсія за секунду. Збільшення цієї температури пов'язане з тим, що товщина самого шару досягає близько 10 мкм.

З наукової та практичної точки зору аморфні сплави Ni-Zr є цікавим предметом дослідження, що обумовлено їх властивостями: термостійкістю, пластичністю, механічною міцністю, деформованість в певному інтервалі температур. Ці сплави є аморфними в широкому діапазоні концентрацій Ni від 10% до 90%. Аморфна структура сплаву характеризується суворим проміжним хіміко-топологічним порядком. Це призводить до можливості їх застосування як матеріалів з низькими або негативними температурними коефіцієнтами опору та як каталізаторів.

Сплави системи Ni-Zr добре аморфізуються в широкому діапазоні концентрації Zr ($20 < \text{Zr ат \%} < 80$) [1,2]. Перші дослідження [3] кристалізації аморфних сплавів системи Ni-Zr виявили наявність двох максимумів температури кристалізації при концентраціях цирконію навколо 36% і 55% поблизу евтектичного складу [4], але аморфні сплави

біля евтектики в багатій Zr області схильні до дестабілізації через передчасне осадження фази ω -Zr. Подальші дослідження підтвердили, що найбільш термостабільними є аморфні сплави із концентрацією Zr ~35-36%. Для аморфних сплавів отриманих механічним спіканням відповідних інтерметалевих структур максимальна температура кристалізації також спостерігається при 36 % [5]. Також треба відмітити одну з останніх робіт [6], в якій метод машинного навчання застосований для передбачення термостабільності аморфних сплавів на основі Ni.

Дослідники відмічають що поведінка аморфних сплавів системи Ni-Zr відрізняється від звичної для такого типу матеріалів, наприклад від сплавів системи Cu-Zr [7], не зважаючи на те що Cu є сусідом Ni в періодичній таблиці елементів. На сьогодні є роботи, в яких методом класичної молекулярної динаміки проведене моделювання атомної структури аморфних чи нанокристалічних сплавів системи Ni-Zr при розмірах комірки порядку нанометрів, але при цьому не проводилось моделювання стану електронної підсистеми, а отже неможливо відповісти на питання про застосовність критерію термостабільності Нагеля-Таука.

Як вже зазначалось для порівняння можна розглянути систему Cu-Zr. Щодо подвійної системи Cu-Zr, то автори [7] припустили, що вона є репрезентативним об'ємним склоформульником, який демонструє високу здатність до склоутворення завдяки вираженому ікосаедричному

локальному впорядкуванню. На перший погляд, система Ni-Zr є найбільш природним об'єктом, від якого можна очікувати такої ж поведінки, оскільки нікель і мідь є сусідами в періодичній таблиці та мають схожі фізико-хімічні властивості. Але структурний аналіз показує, що ікосаедричне впорядкування в сплавах Ni-Zr значно менш виражене, ніж у Cu-Zr. Відповідно виникла гіпотеза, що відсутність ікосаедричного впорядкування через особливості міжатомних взаємодій є причиною відносно слабкої склоутворюючої здатності системи Ni-Zr.

В статті [8] представлена технологія виготовлення аморфної плівки Ni-Zr. Тонкі плівки Ni-Zr були виготовлені магнетронним розпиленням постійного струму при кімнатній температурі з елементних мішеней з чистого нікелю та цирконію з вмістом 99,6 ат.% Zr та 99,9 ат.% Ni відповідно у високовакуумній камері з базовим тиском приблизно 1×10^{-6} мбар. В якості технологічного газу використовувався очищений аргон під тиском $1,2 \times 10^{-3}$ мбар. Під час осадження при кімнатній температурі зсув підкладки не застосовувався. Нагрівання підкладки плазмою було перевірено за допомогою термопари, що наближається до підкладки, і було виявлено незначним ($\Delta T < 3$ К). Була застосована загальна потужність постійного струму 500 Вт, що призвело до постійної швидкості осадження Zr і Ni приблизно $0,52 \pm 0,02$ г/с. У цій установці швидкість осадження пов'язана досить лінійно з потужністю джерела, за винятком дуже низького діапазону потужності через неоднорідності

плазми. Залежно від передбачуваного складу плівки, що росте, потужність постійного струму (500 Вт) розподілялася між обома мішенями. Завдяки контролю сталості напруги генератора, кінетична енергія розпилених речовин не змінюється суттєво при використанні різних потужностей розпилення. Товщина плівки в будь-якому випадку залишалася рівною 500 нм. Це було перевірено одразу після осадження разом із хімічним складом плівок за допомогою рентгенівської флуоресцентної спектроскопії. Отримана рентгенівська дифрактограма тонких плівок Ni–Zr у всьому діапазоні хімічного складу представлена на рис.1.

Аналіз отриманої картини (рис. 1) дозволив проаналізувати структуру нанесеної плівки. Для чистих плівок Zr можна побачити очікувану гексагональну фазу кімнатної температури (α -Zr). Коли вміст Ni перевищує 2 ат.%, виявляється високотемпературна кубічна фаза Zr (типу вольфраму; β -Zr). Понад 14 ат.% Ni аморфна фаза стає все більш присутньою всередині плівки приблизно до 18 ат.% Ni, де кристалічна фаза зникає, а аморфний стан домінує, поки вміст Ni не досягне 93 ат.%. Понад 93 ат.% визначається гранецентрована кубічна Ni-фаза. Піковий зсув Ni-(ГЦК)-пиків відповідає міжатомним відстаням, які зменшуються з меншим вмістом Zr. Положення аморфного піку також зміщується в бік вищих значень тета зі збільшенням вмісту Ni. На рис.2 для порівняння наведена фазова діаграма системи Ni-Zr.

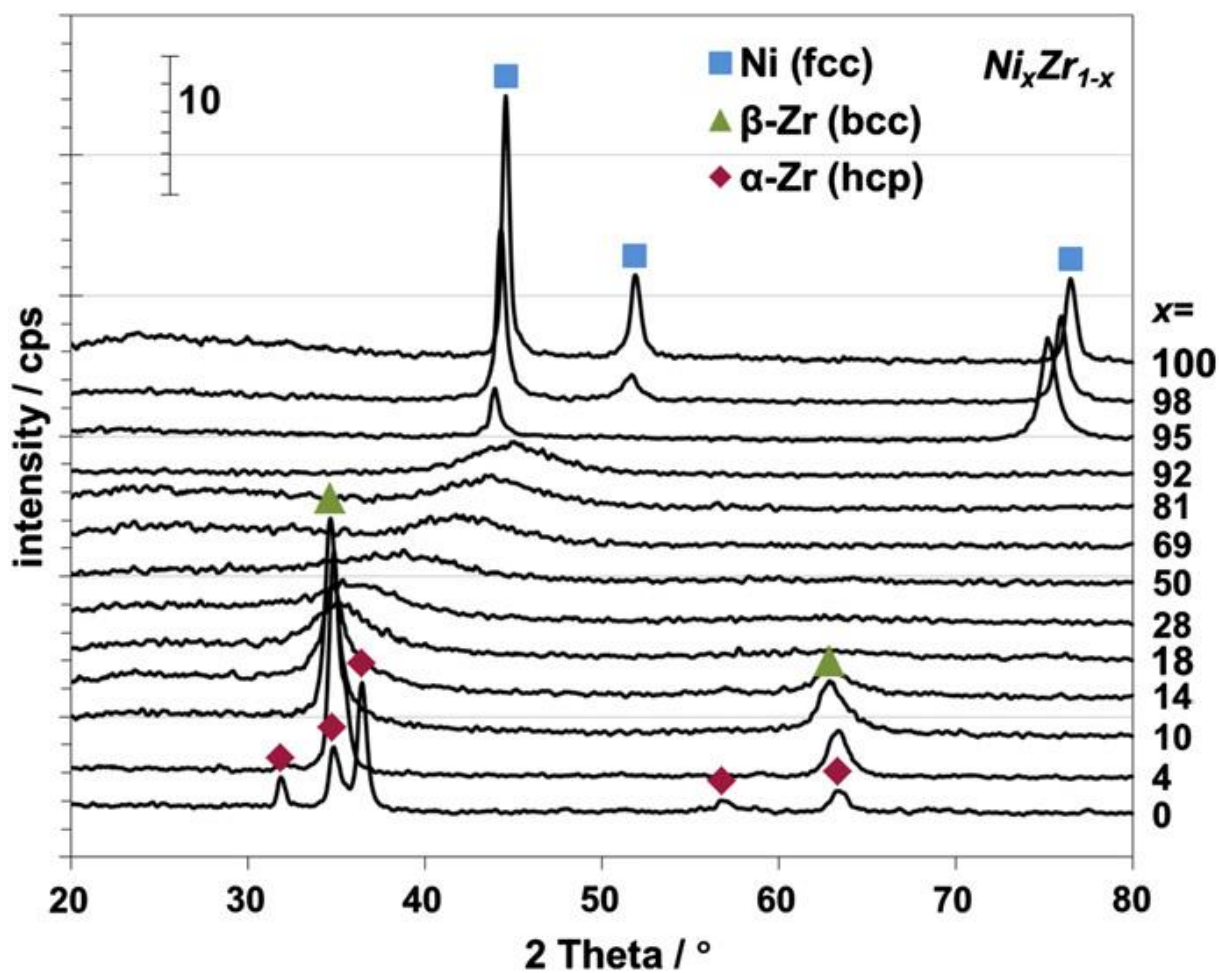


Рис. 1. Вибрана рентгенівська дифрактограма тонких плівок Ni–Zr у всьому діапазоні хімічного складу.

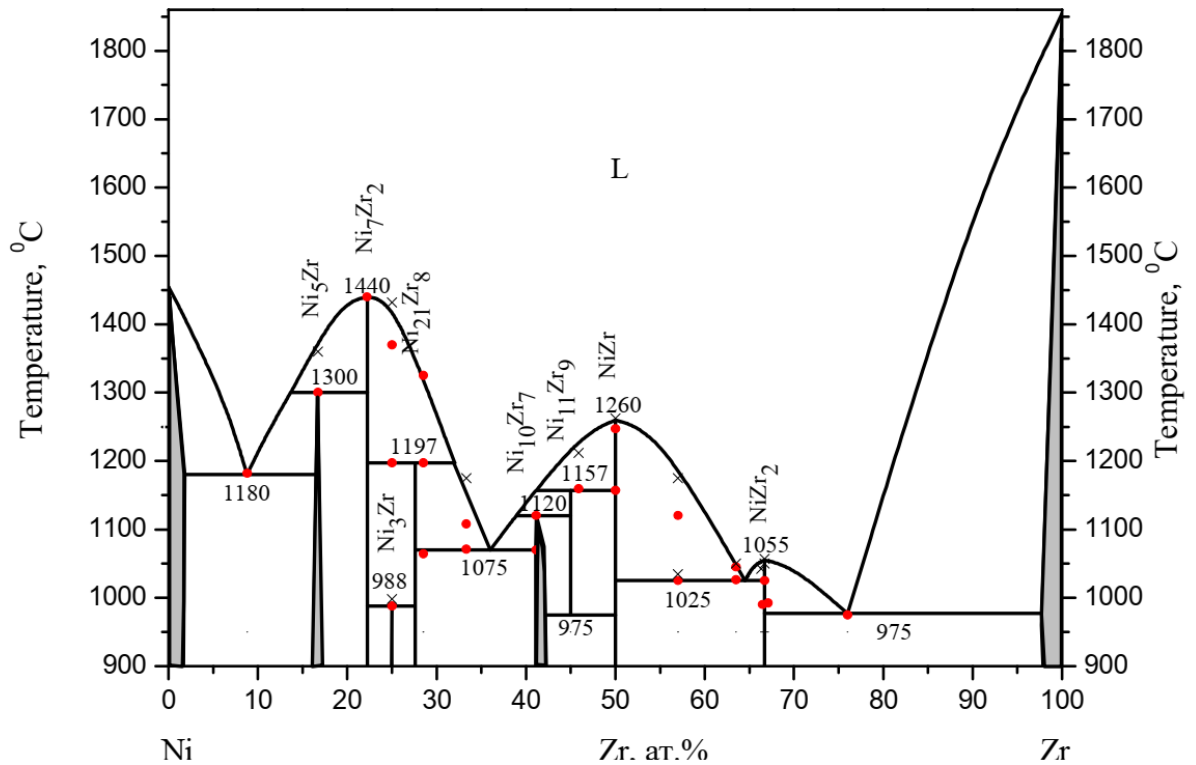


Рис. 2. Фазова діаграма системи Ni-Zr.

У статті [9] автори досліджували електрокаталітичну активність аморфних сплавів Zr-Ni щодо реакції виділення води (р.в.в.), включаючи склад та площу активної поверхні. Коефіцієнти шорсткості поверхні одержувалися із вимірювань імпедансу. Електрокаталітична активність двох досліджених сплавів $Zr_{100-y}Ni_y$ з $y=33$, $y=60$ пов'язують з особливістю електронної структури сплавів Zr-Ni. Підвищена електрокаталітична активність у сплавів системи Zr-Ni пов'язана зі швидким збільшенням густини електронних станів на Фермі рівні $D(E_F)$ смуги 3d-зони Ni у сплавів з більшим значенням концентрації Ni. Було показано, що легування Zr-Ni металевого скла може бути використане для оптимізації електрокаталітичних властивостей Zr-Ni скла та його

застосування в електролізі води, що забезпечує довготривалу стабільність електродних матеріалів. Подальше просування в розв'язанні цієї проблеми також потребує вивчення особливостей електронної структури аморфних сплавів системи Ni-Zr.

II. МЕТОДИКА ДОСЛІДЖЕНЬ

Програмний пакет Abinit

Розрахунки проводились з використанням пакету Abinit.

Програмний пакет Abinit, доступний за адресою <https://www.abinit.org/>, є потужним інструментом для наукових розрахунків у сфері теоретичної фізики та хімії. Програмний пакет Abinit надає користувачам широкі можливості для проведення розрахунків, що охоплюють різноманітні системи і матеріали.

Цей програмний пакет використовує методи з перших принципів, такі як теорія функціоналу густини, для дослідження властивостей електронної структури, електронних спектрів та реакційних шляхів. Програмний пакет Abinit забезпечує розрахунки енергії, оптимізацію геометрії, вирахування сил та властивостей різноманітних матеріалів.

Пакет Abinit має інтуїтивний і легкий у використанні інтерфейс, який дозволяє користувачам визначати та налаштовувати параметри розрахунків. Крім того, програмний пакет Abinit підтримує інтеграцію з іншими пакетами та програмами, що розширює його функціональність.

За допомогою програмного пакету Abinit можуть виконуватись розрахунки електронної структури, включаючи розрахунки енергії та властивостей різних матеріалів, таких як кристали, поверхні та молекули.

Програмний пакет Abinit дозволяє вивчати електронні спектри, оптичні властивості, фазові переходи, термодинамічні властивості та багато іншого. Програмний пакет Abinit також підтримує розрахунки механічних властивостей, таких як модуль Юнга та коефіцієнт Пуассона, дозволяючи вам вивчати поведінку матеріалів під дією напружень.

Загалом, програмний пакет Abinit (<https://www.abinit.org/>) є потужним інструментом для проведення розрахунків електронної структури та властивостей матеріалів з високою точністю та гнучкістю. Крім того, за допомогою Abinit можна реалізувати рішення для оптимізації кристалічних і аморфних структур, задач молекулярної динаміки, а також визначити деякі макроскопічні властивості об'єкта, такі як: кінетичні, механічні, діелектричні, термодинамічні, магнітні та інші властивості.

Молекулярна динаміка в Abinit

Програмний пакет Abinit (<https://www.abinit.org/>) використовує метод першопринципної молекулярної динаміки (First-Principles Molecular Dynamics, FPMD) для моделювання поведінки молекул і матеріалів на основі основних фізичних принципів. Основні принципи методу FPMD включають наступні етапи:

Визначення початкової геометрії: Спочатку задається початкова геометрія системи, включаючи позиції атомів, швидкості і можливі інші параметри. Ця геометрія може бути визначена на основі експериментальних даних або згенерована теоретично.

Розрахунок енергії та сил: Використовуючи метод функціонала густини, програмний пакет Abinit обчислює енергію системи та сили, що діють на атоми. Ці величини визначаються на основі взаємодій між електронами та ядрами атомів.

Інтегрування рівнянь руху: На основі розрахованих сил та мас атомів, виконується інтегрування рівнянь руху атомів системи в часі за допомогою чисельних методів, таких як метод Верле або метод оберненої інтеграції.

Оновлення геометрії: Після кожного кроку інтеграції руху, програмний пакет Abinit перераховує нову геометрію системи на основі змінених позицій атомів. Це дозволяє відстежувати зміни в структурі та конформації системи з плином часу.

Термостатування та термодинамічні ансамблі: Для дослідження системи при певній температурі або в інших термодинамічних умовах, використовуються методи термостатування та різні термодинамічні

ансамблі. Зокрема в цій роботі використовується канонічний та ізотермічно/ізентальпійний ансамблі.

III. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Як зазначається в літературному огляді в попередніх дослідженнях була висунута гіпотеза про те, що на відміну від інших аморфних сплавів до аморфних сплавів системи Ni-Zr є незастосовний електронний критерій Нагеля-Таука. Для з'ясування цього питання ми провели моделювання процесу аморфізації аморфного сплаву системи Ni-Zr методом *abinitio* молекулярної динаміки. Метод першопринципної молекулярної динаміки дозволяє дослідити не тільки еволюцію атомної структури матеріалу а також отримувати дані про стан електронної підсистеми, зокрема отримувати електронні спектри. Недоліком при цьому є значна обмеженість розмірів систем що можуть розглядатися.

Методом *abinitio* молекулярної динаміки ми дослідили еволюцію атомної структури та електронних спектрів в системі Ni-Zr при аморфізації. Для моделювання була обрана надкомірка Ni₂₁Zr₁₁ зі складом близьким до евтектичного (~35% Zr). Як вже було зазначено в літературному огляді, саме в цій області концентрацій спостерігається найбільша температура кристалізації сплавів системи Ni-Zr порядку 850 К

Розрахунок проводився методом функціоналу густини в узагальненому градієнтному наближенні за допомогою програмного пакету *Abinit*, детально описаного в розділі методика.

Для числового моделювання процесу отримання аморфної фази з розплаву використовували надкомірку, що містить 32 атома з ГЦК структурою. Остання була обрана так як притаманна Ni та є прикладом структури щільного пакування жорстких сфер, що непогано описує будову рідких металів. Далі 11 атомів Ni були замінені на атоми Zr так, щоб останні були розташовані на максимально можливій відстані один від одного. Останнє необхідно для того, щоб уникнути кластеризації. Для релаксації внутрішніх напружень в надкомірці проведено числовий відпал положень атомів за алгоритмом, який описаний в [10].

При числовому відпалі відбувалася релаксація положень атомів у відповідності з силами, розрахованими з перших принципів. При цьому була дозволена зміна об'єму надкомірки зі збереженням її форми (кубічна). Так як радіус атомів Zr в металевому стані приблизно на 30% більший за радіус Ni, то вже навіть на цьому етапі на побудованій нами гістограмі міжатомних відстаней навколо атомів Ni та Zr спостерігалось достатньо помітне (в межах 15-17 %) варіювання міжатомних відстаней у першій та другій координаційній сферах та помітна зміна електронних спектрів (Рис.1).

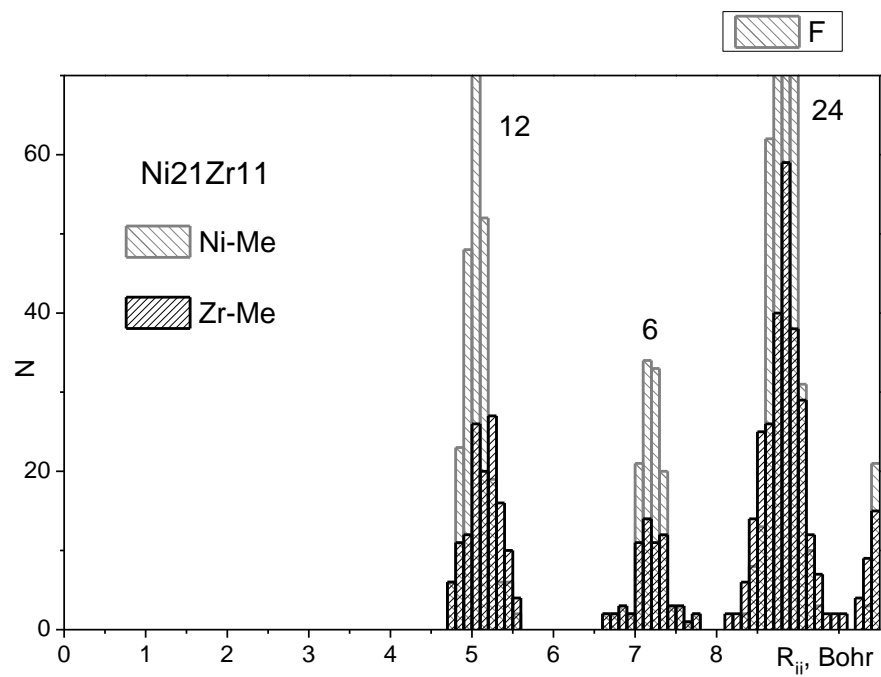
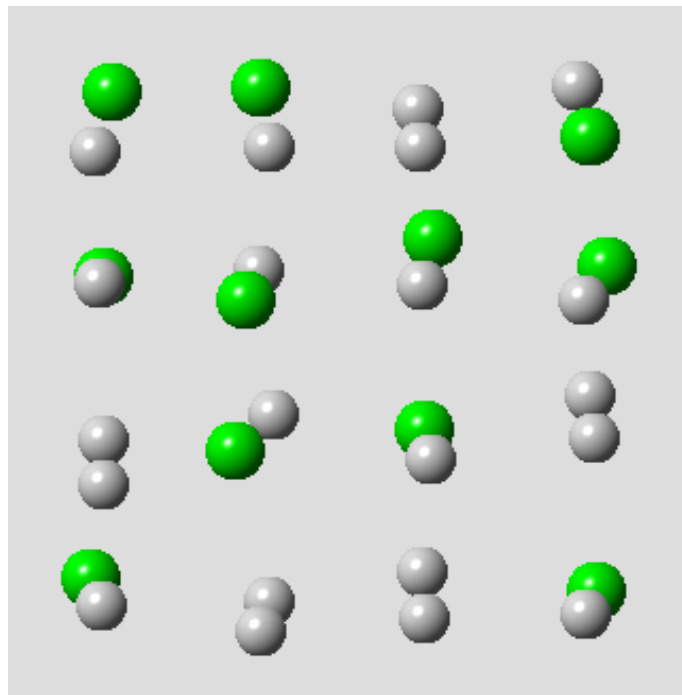


Рис. 1 Надкомірка Ni₂₁Zr₁₁ та гістограма міжатомних відстаней навколо атомів Ni та Zr після початкового відпалу положень атомів (над піками позначені координаційні числа вихідної кристалічної структури).

Далі для відтворення реальної процедури отримання аморфних матеріалів ми провели числове нагрівання вихідної надкомірки методом abinitio молекулярної динаміки в канонічному (NVT) ансамблі при температурі 1600 К, близькій до евтектичної. Побудована гістограма міжатомних відстаней отриманої (умовно «рідкої») структури (рис.2) продемонструвала подальше «розширення» першого координаційного піка до приблизно 30% від середнього значення. Піки на гістограмі, що відповідають другій координаційній сфері практично зливаються з третім, як для атомів Ni так і для атомів Zr.

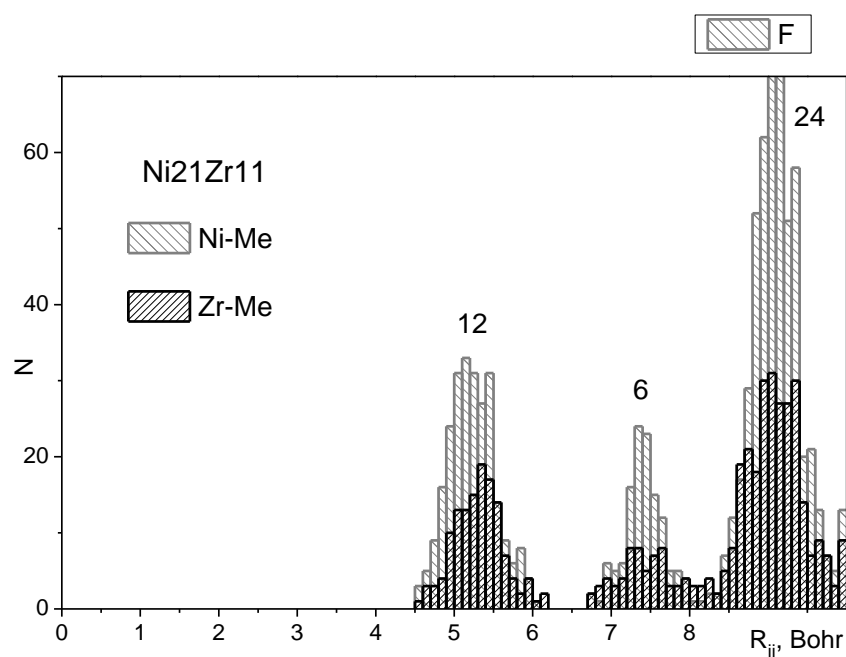


Рис. 2 Гістограма міжатомних відстаней навколо атомів Ni та Zr в надкомірці Ni₂₁Zr₁₁ після відпалу положень атомів при температурі 1600 К (умовно «рідка» фаза).

Для моделювання саме процесу аморфізації методом *abinitio* молекулярної динаміки ми обрали ізотермічно/ізоентальпійний ансамбль, оскільки структурні фазові перетворення часто супроводжуються зміною власного об'єму. Числовий відпал при температурі 300 К супроводжувався зменшенням повної енергії нашої надкомірки, якісних змін гістограми міжатомних відстаней при цьому не спостерігалось (рис.3). Останнє цілком зрозуміло, оскільки для аморфної фази характерне заморожування атомної структури рідкого металу.

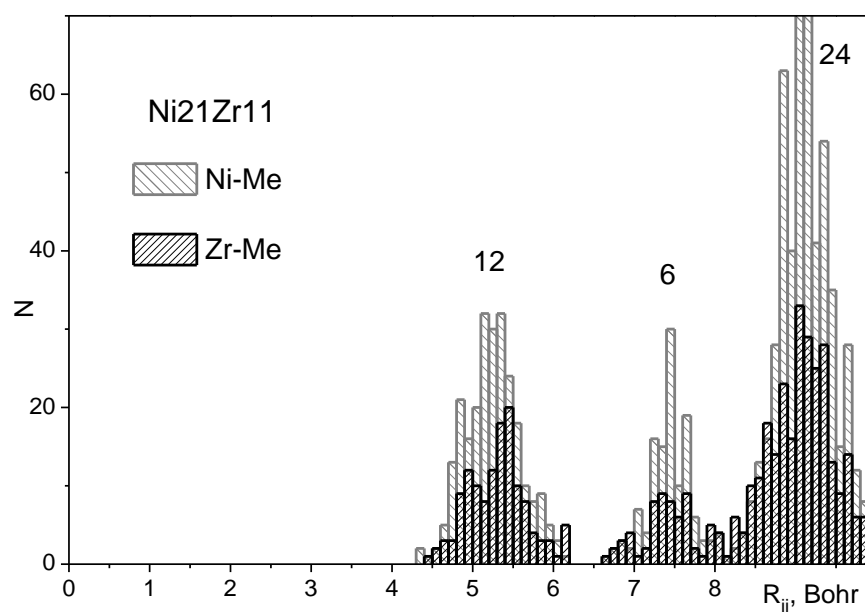


Рис. 3 Гістограма міжатомних відстаней навколо атомів Ni та Zr в надкомірці Ni₂₁Zr₁₁ після відпалу положень атомів разупорядкованої структури при температурі 300 К (умовно «аморфна» фаза).

Отриманий нами результат моделювання еволюції атомної структури надкомірки Ni₂₁Zr₁₁ (~35% Zr) при аморфізації добре корелює з результатами експериментальних досліджень аморфного сплаву Ni_{64.4}Zr_{35.6} [11], для якого було показано що в аморфному стані він проявляє парамагнітну поведінку, а в кристалічному – феромагнітну. Відсутність магнітного впорядкування в аморфній фазі сплаву Ni_{64.4}Zr_{35.6} може бути, таким чином, пояснена значним варіюванням міжатомних відстаней навіть у першій координаційній сфері (~30%).

Як вже зазначалось, використання методу першопринципної молекулярної динамік з одного боку значно обмежує розміри модельованої системи, але з іншого боку дозволяє отримувати інформацію про стан електронної підсистеми розглянутих структур. Саме тому нами і був обраний метод першопринципної молекулярної динаміки для аналізу застосовності електронного критерію Нагеля-Таука у випадку аморфних сплавів на основі Ni-Zr. Основною особливістю електронного спектра отриманої описаним вище чином «аморфної» структури є усереднена 3d-смуга в околі рівня Фермі без помітних особливостей. Аналіз локальних спектрів навколо окремих атомів (рис.4) виявив значну відмінність 3d-смуг в залежності від локального оточення атомів Ni (різною кількістю атомів Zr в першій координаційній сфері), що узгоджується з отриманими даними по значній модифікації міжатомних

відстаней в системі (~30% в першій координаційній сфері).

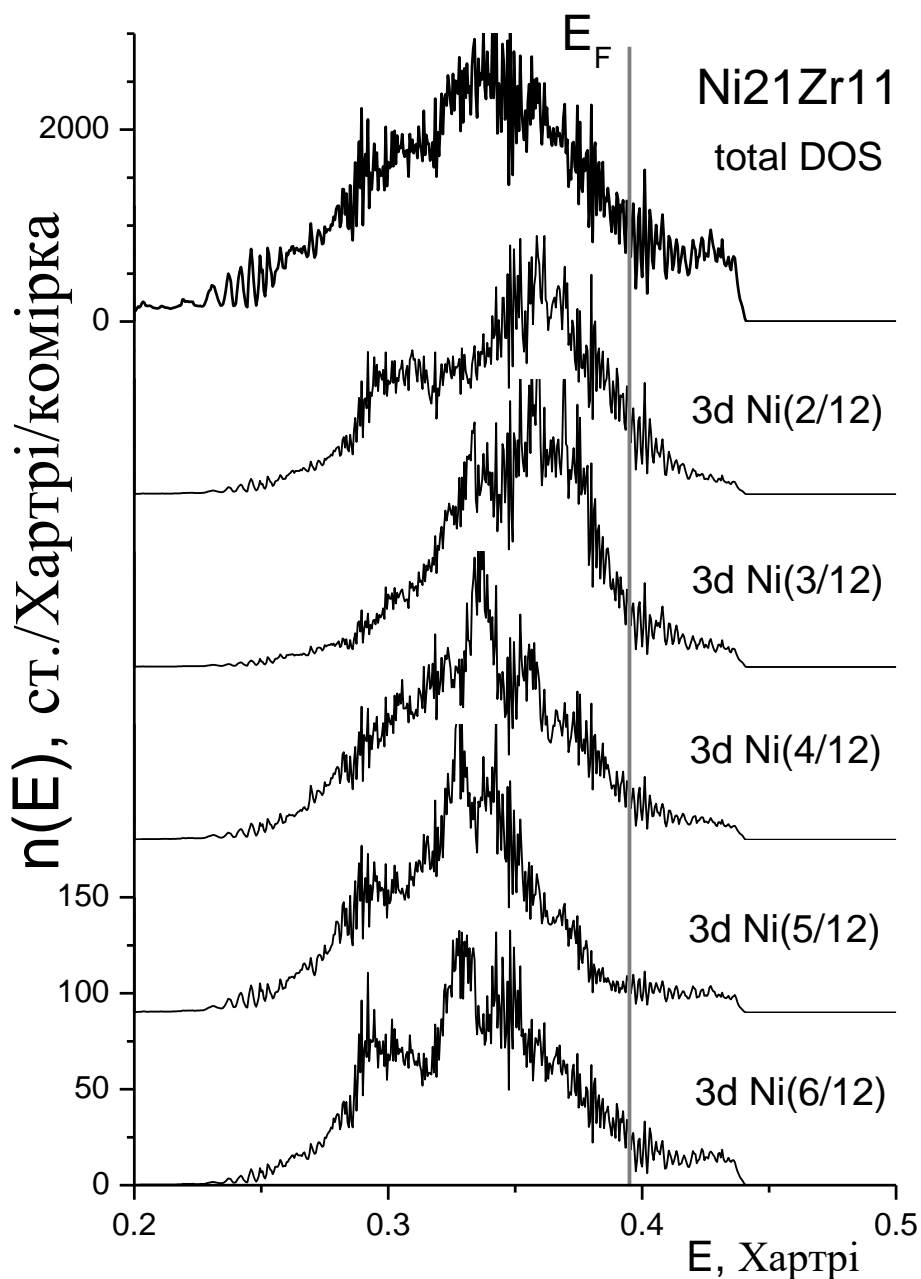


Рис.4 Энергетична залежність густини електронних станів «аморфної» надкомірки Ni₂₁Zr₁₁ та 3d локальні електронні спектри навколо атомів Ni з різною кількістю атомів Zr в першій координаційній сфері. Вертикальною лінією позначено положення рівня Фермі.

Отже, згідно наших розрахунків, локальний мінімум в околі рівня Фермі не спостерігається, що свідчить про незастосовність критерію Нагеля-Таука у випадку аморфних сплавів на основі Ni-Zr, що узгоджується з попередніми висновками в роботі [12].

За результатами виконання магістерської роботи були опубліковані тези конференції [13] та подана до друку стаття «Першопринципне моделювання процесу аморфізації сплавів системи Ni-Zr» у журнал «Металофізика та новітні технології» (індексується у базі даних Scopus).

ВИСНОВКИ

1. Методом abinitio молекулярної динаміки досліджено еволюцію атомної структури та електронних спектрів в системі Ni-Zr при фазових переходах "кристал-рідина-аморфна фаза". Встановлено, що навіть на першому етапі числового відпалу на побудованій гістограмі міжатомних відстаней навколо атомів Ni та Zr спостерігається достатньо помітне (в межах 15-17 %) варіювання міжатомних відстаней у першій та другій координаційній сферах, що вочевидь пов'язано із значною різницею радіусів атомів Zr та Ni в металевому стані.
2. Показано, що для умовної «рідкої» та «аморфної» фази сплавів системи Ni-Zr спостерігається розширення першого координаційного піка на гістограмі міжатомних відстаней до приблизно 30% від середнього значення. Піки на гістограмі міжатомних відстаней, що відповідають другій координаційній сфері практично зливаються з третім, як для атомів Ni так і для атомів Zr.
3. Показано, що для аморфних сплавів на основі Ni-Zr локальний мінімум в околі рівня Фермі на енергетичній залежності густини електронних станів не спостерігається, що свідчить про

незастосовність електронного критерію термостабільності Нагеля-
Таука.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- [1] Compositional-induced structural change in Zr_xNi_{100-x} thin film metallic glasses/ M. Ghidelli, S. Gravier, J. Blandin [et al.] *Alloys Compd.* 615 (2014), pp. 348–351.
- [2] Synthesis and characterization of amorphous Ni–Zr thin films/ H. Turnow, H. Wendrock, S. Menzel [et al.]. *Thin Solid Films.* 561 (2014), pp. 48–52.
- [3] Z. Altounian, Tu Guo-hua, J. O. Strom-Olsen Crystallization characteristics of Ni-Zr metallic glasses from Ni₂₀Zr₈₀ to Ni₇₀Zr₃₀ *Journal of Applied Physics* 54, 3111 (1983)
- [4] Kosorukova T, Ivanchenko V, Firstov G. [et al.]. Experimental Reinvestigation of Ni-Zr System. *Solid State Phenomena.* 2012 Vol. 194 ;194:14–20.
- [5] Lee, P.Y., Koch, C.C. Formation of amorphous Ni-Zr alloy powder by mechanical alloying of intermetallic powder mixtures and mixtures of nickel or zirconium with intermetallics. *J Mater Sci* 23, 2837–2845 (1988).

[6]Junhyub Jeon, Gwanghun Kim. Combined data-driven model for the prediction of thermal properties of Ni-based amorphous alloys Journal of Materials Research and Technology Vol. 16, January–February 2022, Pages 129-138.

[7]B.A. Klumov, R.E. Ryltsev, N.M. Chtchelkatchev Structure and glass-forming ability of simulated Ni-Zr alloys. The Journal of Chemical Physics Vol. 149 (13), 134501 (2018).

[8] Synthesis and characterization of amorphous Ni–Zr thin films/ Henning T. , Horst W. , Siegfried M. [et al.]. Thin Solid Films 561 (2014) 48–52.

[9] M. Metikos̃-Hukovic, A. Jukic, Correlation of electronic structure and catalytic activity of Zr–Ni amorphous alloys for the hydrogen evolution reaction, Electrochimica Acta 45 (2000) 4159–4170.

[10] H. B.Schlegel Optimization of equilibrium geometries and transition structures J. Comput. Chem., 3: 214 (1982);

[11] Особенности структуры и магнетосопротивления сплава $\text{Ni}_{64.4}\text{Zr}_{35.6}$ в аморфном и закристаллизованном состояниях / В.Н. Варюхин, Т.Т. Мороз, В.В. Бурховецкий, та ін. // Физика и

техника високих давлень. — 2017. — Т. 27, № 3. — С. 80-89. —

Бібліогр.: 14 назв. — рос.

[12] Y.D. Dong, G. Grogan, M.G. Scott Formation and stability of nickel-zirconium glasses, *J. Non-Cryst. Sol.* 43 (1981) pp. 403-415.

[13] Плющай І.В., Майстренко А.О., Цареградська Т.Л., Плющай О.І., Каленик О.О. Першопринципне моделювання процесу аморфізації сплавів системи Ni-Zr. //Матеріали III Всеукраїнської конференції «Сучасне матеріалознавство. Матеріали та технології. СММТ-2021». - 19–20 жовтня 2021 р. - м. Київ, Україна. - С.31.