

DOI: 10.31319/2519-8106.2(39)2018.154239

УДК 539.2+546.06

О.С. Баскевич, к.ф.-м.н., старший науковий співробітник, abaskevich@ukr.net

В.Г. Верещак, д.т.н., професор, vereschak@bigmir.net

М.В. Ніколенко, д.х.н., професор, nikolay_nikolenko@ukr.net

Державний вищий навчальний заклад "Український державний хіміко-технологічний університет", м. Дніпро

МОДЕЛЮВАННЯ БЛИЗЬКОГО ПОРЯДКУ АМОРФНИХ ОКСИДІВ $Zr_{1-x}Y_xO_2$

У даній роботі було проведено моделювання близького порядку аморфних оксидів $Zr_{1-x}Y_xO_2$ отриманих з метансульфонатів цирконію та ітрію. Моделювання проводили з допущенням, що аморфний стан складається з областей впорядкованого розміщення атомів визначеної геометричної форми між якими знаходяться невпорядковані атоми, які не належать до жодної структурної одиниці. Близький порядок розміщення атомів в аморфних оксидах $Zr_{1-x}Y_xO_2$ ($x=6,8,10$ ат.%) досліджували методом сумісного моделювання профілю головного максимуму структурного фактору і методом апроксимації функції радіального розподілу атомів на основі експериментальних даних ширококутового розсіяння рентгенівських променів. В результаті моделювання встановлено, що області впорядкованого розміщення атомів мають форму близьку до октаєдрів. Середні розміри областей впорядкованого розміщення атомів складають 5 нм, а координаційні числа 11—14, що відповідають структурам близьким до гранецентрованих кубічних структур. Порівняння модельних характеристик аморфних оксидів з експериментальними даними мікроскопа з високою роздільною здатністю показало добре співпадіння результатів.

Ключові слова: моделювання близького порядку, аморфні оксиди, області впорядкованого розміщення атомів, функція радіального розподілу атомів.

In this paper a simulated short-range order simulation of amorphous $Zr_{1-x}Y_xO_2$ oxides obtained from methanesulfonates zirconium and yttrium was performed. The simulation was carried out with the assumption that an amorphous state consists of regions of ordered arrangement of atoms of a definite geometric form, among which there are disordered atoms, which do not belong to any structural unit. The short-range order of atomic arrangement in amorphous oxides $Zr_{1-x}Y_xO_2$ ($x = 6,8,10$ at.%) was investigated by the method of joint simulation of the main structural factor maximum and by the method of approximation of function of the radial distribution of atoms based on experimental data of wide-angle scattering of X-rays. As a result of simulation, it was found that the regions of ordered placement of atoms are in the form close to the octahedron. The average dimensions of the ordered arrangement of the atoms are 5 nm, and the coordinating numbers 11—14 correspond to the structures close to the faced cubic structures. Comparison of model characteristics of amorphous oxides with experimental data of a high resolution microscope showed a good coincidence of results.

Keywords: short-range modelling, amorphous oxides, areas of ordered atomic placement, atom radial distribution function.

Постановка проблеми

Сучасною тенденцією в розробці та використанні порошкових матеріалів, у тому числі і оксидних є концепція одержання їх в нанорозмірному стані [1, 2]. Отримання тієї чи іншої твердофазної сполуки має на меті дві основні мети: по перше, виготовлення матеріалів з заданим фазовим і хімічним складом, а по друге — отримання матеріалів з оптимальним розміром часток, які є найбільш оптимальними для конкретної галузі застосування. На даний час, концепція нанорозмірних матеріалів є домінуючою при розв'язанні задач технології одержання сучасних твердофазних порошкових матеріалів [3]. В сучасному матеріалознавстві під терміном нанорозмірні матеріали мають на увазі твердофазні хімічні сполуки, які мають хоч би один параметр в нанорозмірному діапазоні з розмірами до 100 нм) [1].

Утворення наноструктурних матеріалів і порошків, як одного із стану існування твердого тіла, впливає з фундаментальних принципів існування матерії, згідно з якими матерія може знаходитися в плазмовому, газоподібному, рідинному і твердому станах. Перехід одного стану речовини в інший супроводжується фазовими переходами першого роду. Фізико-хімія цих перетворень, а також фундаментальні властивості кожного стану існування матерії наводяться в низці монографій [4, 5].

Аналіз останніх досліджень та публікацій

Отримання нанодисперсних порошків стабілізованого діоксиду цирконію при заданому хімічному і фазовому складі порошкоподібного матеріалу надзвичайно важливим процесом. Також важливим фактором є його дисперсні характеристики: розмір первинних часток та розподіл їх за розмірами. Встановлено, що утворення вторинних часток — агрегатів або агломератів від передісторії їх формування і інтегральних характеристик порошку — питомої поверхні, наявності пор та розподілу їх за розмірами [6]. Так для носіїв каталізаторів необхідні порошки стабілізованого діоксиду цирконію з великою питомою поверхнею, для високоміцної, конструкційної і біокераміки — монодисперсні порошки нанорозмірного діапазону [7]. Застосування стабілізованого діоксиду цирконію в технології «Fuel Cell» потребує як нанодисперсних порошків для виготовлення твердого електроліту, так і агрегованих нанокристалічних порошків для виготовлення поруватих анодів [8]. Тому для успішного застосування даного методу в технології отримання нанорозмірних порошків стабілізованого діоксиду цирконію необхідно системно вивчити фізико-хімічні процеси утворення твердої фази діоксиду цирконію на всьому шляху перетворень «розчин → осад гідроксиду цирконію → аморфний діоксид цирконію → кристалічний діоксид цирконію» та розробити на їх основі ефективні чинники управління процесом формування мікро- і макроструктури порошків стабілізованого діоксиду цирконію. Сучасні погляди на процес стабілізації високотемпературних модифікацій діоксиду цирконію базуються на гіпотезі утворення твердих розчинів заміщення, які наближають параметри кристалічної решітки діоксиду цирконію до відповідності щодо вимог класичної кристалографії відносно стійкості кубічних структур [9]. Введення донорних катіонів в кристалічну решітку ZrO_2 з радіусами іонів, більшими, ніж у іона цирконію збільшує об'єм елементарної решітки діоксиду цирконію, а це дає можливість атомам кисню зайняти позиції, характерні для кубічного або тетрагонального діоксиду цирконію і підвищити його термодинамічну стійкість даних структур при низьких температурах. Ефект стабілізації істотним чином залежить від розчинності оксидів металів в матриці ZrO_2 і характеру взаємодії між ними. Вивчення процесів розчинності здійснюється, як правило, експериментальними методами. Таким чином, актуальним є розробка теоретичних і експериментальних або близького порядку в сполуках $Zr_{1-x}Y_xO_2$.

Матеріали та методика досліджень

Аморфні оксиди $Zr_{1-x}Y_xO_2$, отримані з розчину метансульфонату цирконію і ітрію. Дифрактограми аморфних оксидів отримували за допомогою рентгенівського дифрактометра ДРОН-3.0 в монохроматизованому $Mo-K_{\alpha}$ випромінюванні. Розміри і структуру наночастинок визначали за допомогою електронного мікроскопу Superprobe 733 (JEOL).

Виклад основного матеріалу

Для з'ясування процесів утворення нанокристалічної структури порошків $Zr_{1-x}Y_xO_2$, при отриманні його з розчинів, важливе значення мають дані про близький порядок розташування атомів в аморфному діоксиді цирконію, який є основною передструктурою при переході його в нанокристалічний і кристалічні стани. Вивчення близького порядку аморфного $Zr_{1-x}Y_xO_2$ має суттєве значення для пояснення фізико-хімічних процесів утворення нанокристалічної структури порошків діоксиду цирконію. Близький порядок розміщення атомів в аморфному оксиді $Zr_{1-x}Y_xO_2$ досліджувались методом сумісного моделювання профілю головного максимуму структурного фактору і апроксимації функції радіального розподілу атомів (ФРПА) на основі експериментальних даних ширококутового розсіяння рентгенівських променів. Нормування кривих інтенсивностей ширококутового розсіяння рентгенівських променів здійснювались за методи-

кою [10—12]. Структурні фактори порошоків аморфного діоксиду цирконію зі вмістом 6, 8, 10 ат. % ітрію подані на рис. 1. Аналіз експериментальних даних дозволив визначити наступні загальні закономірності для всіх зразків: висота першого максимуму структурного фактору зменшується, а його положення незначно зміщується в бік великих кутів при збільшенні вмісту ітрію в зразках; другі максимуми структурних факторів мають майже однакову форму.

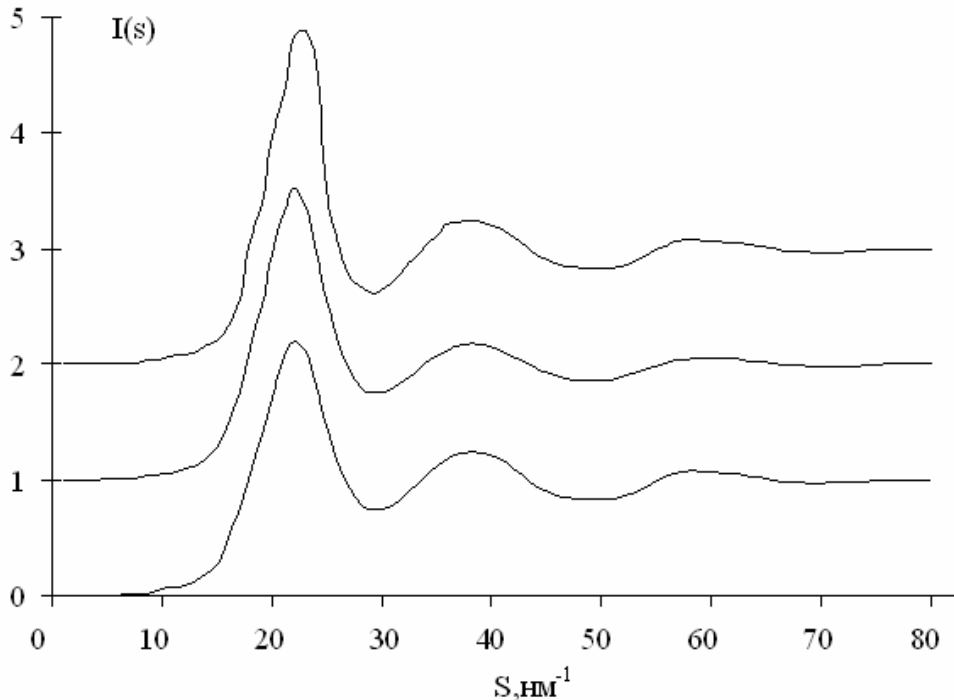


Рис. 1. Структурні фактори аморфних оксидів: 1 — $Zr_{0,94}Y_{0,06}O_2$; $Zr_{0,92}Y_{0,08}O_2$; $Zr_{0,9}Y_{0,1}O_2$. Мо- K_α випромінювання

Для визначення типу упаковки атомів та найбільш вірогідних радіусів координаційних сфер і координаційних чисел проведено розрахунок (рис. 2) і моделювання ФРРА. Аналіз отриманих результатів згідно за даною методикою показав, що найкращі результати при розшифрування близького порядку аморфних речовин дає аподизована функція радіального розподілу атомів [10—11]:

$$G(r) = 4\pi r \rho_0 + \frac{2}{\pi} \int_0^{S_m} (i(s) - 1) s \exp(-\tau s^2) \sin(sr) ds,$$

де r — найбільш ймовірна відстань між атомами; $i(s)$ — експериментальний структурний фактор; s — вектор оберненої решітки; ρ_0 — середня атомна густина; τ — коефіцієнт аподизації (в даному випадку $\tau = 0,01$).

Моделювання структури аморфних порошоків стабілізованого діоксиду цирконію виконано в припущенні, що тип упаковки атомів цирконію областях впорядкованого розміщення атомів (ОВРА), із яких утворюється близький порядок, має прості геометричні многогранники (поліедри). Моделювання близького порядку виконували апроксимацією ФРРА набором гаусових кривих [12]:

$$G(r) = \sum_m \frac{Z_m}{r_m \sqrt{\pi(2\bar{u}_m^2 + 4\pi\tau)}} \left\{ \exp\left[-\frac{(r-r_m)^2}{(2\bar{u}_m^2 + 4\pi\tau)}\right] - \exp\left[-\frac{(r+r_m)^2}{(2\bar{u}_m^2 + 4\pi\tau)}\right] \right\},$$

де Z_m — координаційні числа m — координаційної сфери; \bar{u}_m^2 — середньоквадратичні відносні зміщення атомів з положення рівноваги, які визначаються із формули [12]:

$$u_{Zr-Y}^2 = \frac{18k_B T}{\sqrt{M_{Zr} M_Y} (2\pi C K_m)^2} \left[\sqrt{\frac{M_{Zr}}{M_Y}} + \sqrt{\frac{M_Y}{M_{Zr}}} - \frac{Si(2\pi K_m r_1)}{2\pi K_m r_1} \right],$$

де k_B — постійна Больцмана; T — абсолютна температура системи; $Si(x)$ — інтегральний синус; M — маса атомів; K_m — максимальне значення хвильового вектору $K_m \cong 1,5 \cdot r_1$; Y — атом O або Zr, r_1 — найменше значення відстані між атомами, яке визначається з ФРРА.

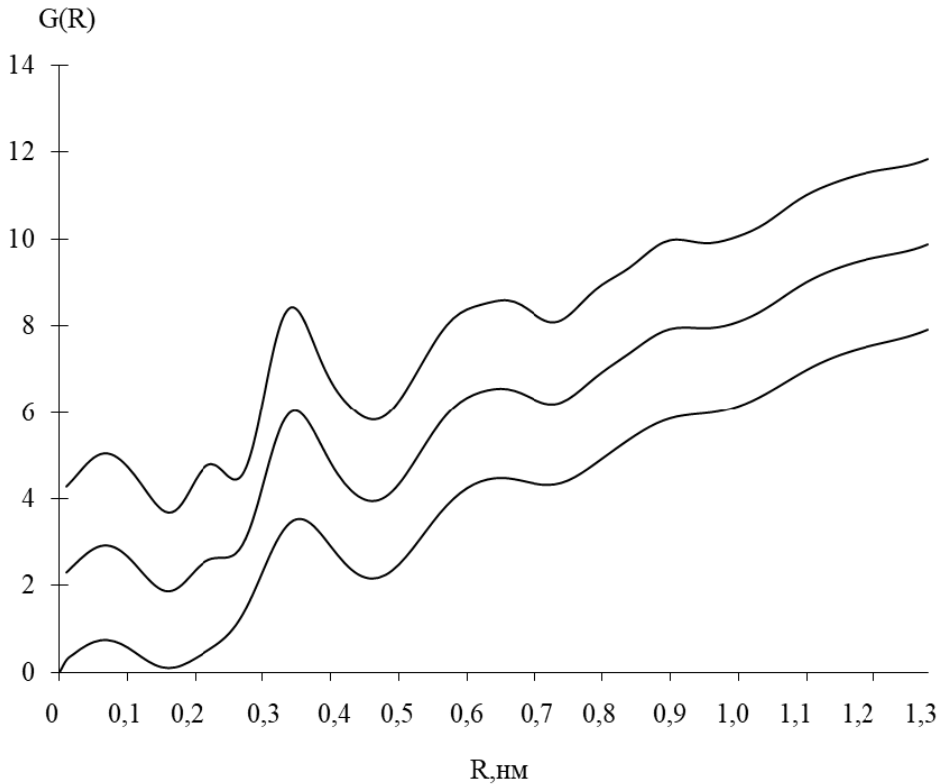


Рис. 2. Функції радіального розподілу атомів: 1 — $Zr_{0,94}Y_{0,06}O_2$; 2 — $Zr_{0,92}Y_{0,08}O_2$; 3 — $Zr_{0,9}Y_{0,1}O_2$

В рамках запропонованої моделі близького порядку для аморфного оксиду $Zr_{1-x}Y_xO_2$ вибирали форми ОБРА виходячи з принципу Браве, який вказує на те, що грані кристалу з найбільшою ретикулярною густиною атомів мають мінімальну поверхневу енергію і міжплощинні відстані з малими індексами. До таких форм відносяться щільні упаковки елементарних поліедрів двох типів: октаедрів та тетраедрів.

Моделювання проводили з використанням моделі кластерної будови аморфного стану. Згідно до цієї моделі, побудовано вираз для профілю головного піку структурного фактору, який враховує основні фізичні характеристики близького порядку: скінченність областей впорядкованості, розподіл областей впорядкованості за розмірами, відносні середньоквадратичні зміщення атомів з положення рівноваги [13]:

$$i(s_0) = \frac{Q_2 Q_3}{d_{hkl}} \exp\left(-\frac{\bar{u}^2 s_0^2}{2}\right) \int_{-\infty}^{\infty} V(t) \cdot g(L, t) \cdot e^{-\gamma|t|} \cos(s_0 t) dt,$$

де Q_2 і Q_3 — коефіцієнти, які враховують вплив відносних середньоквадратичних зміщень атомів з положень рівноваги (\bar{u}^2) в межах площини відбиття на профіль дифракційного піку, d_{hkl} — міжплощинні відстані, $g(L,t) = \mu \cdot \langle L \rangle \cdot e^{-\beta t^2}$ — розподіл ОБРА за розмірами, в якому μ і β визначаються за умови його нормування, $V(t)$ — функція форми ОБРА (табл. 1—2), γ — коефіцієнт, який визначає вплив відносних середньоквадратичних статичних зміщень атомів у напрямку, перпендикулярному до площини відбиття (під час ізотермічного відпалювання $\gamma \rightarrow 0$, \vec{t} — нормаль до ряду атомних площин, що відбивають випромінювання в межі досліджуваного дифракційного піку, $s_0 = s - s_{\max}$.

Отримано аналітичний вираз для апроксимації профілю головного піку структурного фактору [13]:

$$i(s_0) = \frac{Q_2 Q_3}{d_{hkl}} \cdot \mu \cdot \langle L \rangle \cdot \exp\left(-\frac{\bar{u}^2 s_0^2}{2}\right) \cdot I^*$$

I^* — визначаються за табл. 1.

Таблиця 1. Функція форми $V(t)$ ОБРА відбиття $\{111\}$ структури ГЦК

Форма ОБРА	$V(t)$	I^*	L
Октаедр	$1 - \frac{3}{2}t + \frac{1}{2}t^2$	$I_0 - \frac{3}{2}I_1 + \frac{1}{2}t^2$	$a\sqrt{\frac{2}{3}}$
Тетраедр	$(1-t)^3$	$I_0 - 3I_1 + 3I_2 - I_3$	$a\sqrt{\frac{2}{3}}$
Куб	$(1-t)^3$	$I_0 - 3I_1 + 3I_2 - I_3$	$a\sqrt{3}$

Де a — довжина грані ОБРА, L — середній розмір ОБРА, а I_n визначається за формулою [13]:

$$I_n = \left(\frac{-1}{2\beta}\right)^n \sqrt{\frac{\pi}{\beta} \exp\left(\frac{\gamma^2 - s^2}{4\beta}\right)} \sum_{k=0}^{E\left(\frac{n}{2}\right)} \frac{n!}{(n-2k)!k!} \cdot \sum_{j=0}^{n-2k} \binom{n-2k}{j} \cdot \gamma^{n-2k-j} \cdot s_0^j \cdot \cos\left(\frac{s_0\gamma}{2\beta} - \frac{\pi}{2}j\right) \beta^k,$$

де $E(n/2)$ — ціла частина дійсного числа $n/2$, а $\binom{n-2k}{j} = \frac{(n-2k) \cdot (n-2k-1) \cdot \dots \cdot (n-2k-j+1)}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot \dots \cdot j} \binom{n-2k}{0} = 1$.

Проведене моделювання близького порядку аморфних оксидів $Zr_{1-x}Y_xO_2$ показало, що ОБРА мають форму близьку до октаєдрів. Розміри ОБРА мають середню величину 5 нм, а тип упаковки кубічний з координаційним числом 11—14.

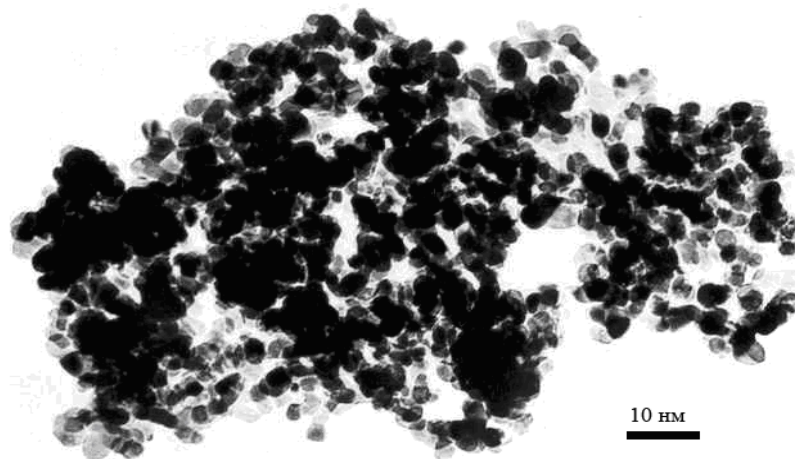
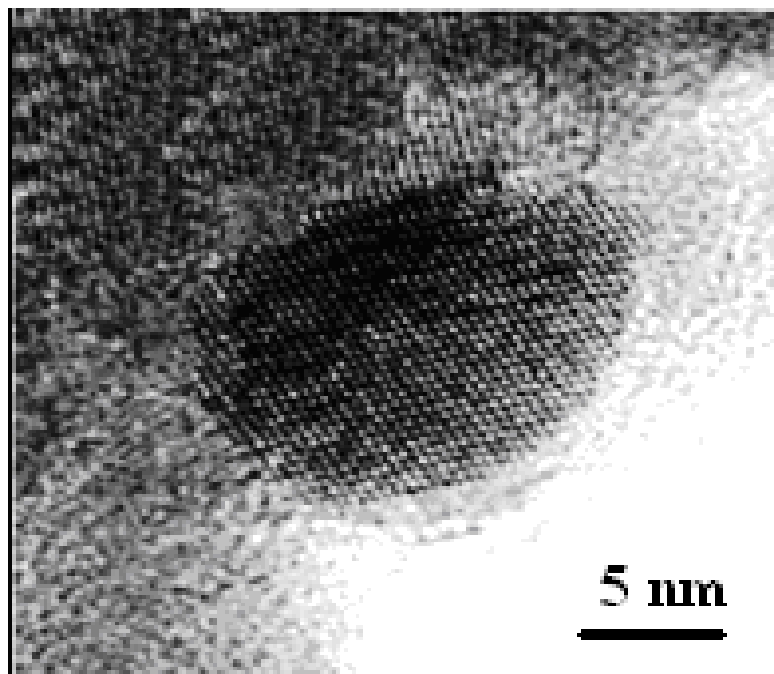
Для підтвердження проведених теоретичних досліджень були проведені електронномікроскопічні дослідження оксидів за допомогою мікроскопа з високою роздільною здатністю. Було встановлено, що розміри аморфного порошку в мають один і той же порядок з теоретичними розрахунками (рис. 3), а структура окремих частинок на фоні аморфної матриці показує як зароджуються наночастинки (рис. 4). На рис. 4 зображено атомне розміщення в аморфному і нанокристалічному оксиді $Zr_{1-x}Y_xO_2$ в процесі формування нанокристалічної частинки. На фоні сформованої наночастинки видно аморфну структуру оксиду у вигляді неупорядкованих і хаотично розміщених угруповань атомів. В аморфній частині видно як фрагменти ОБРА (частинки на поверхні), так і зазори між ними, що розміщені хаотично.

Детальний розгляд наночастинки показав, що його атоми мають три розміри, які відповідають розмірам атомів Zr, Y і O. При чому, кристалічна структура наночастинки ще не сформована, а це видно із того, що між атомами існують дефекти і вакансії у вигляді чорних пустот. А на границі наночастинки спостерігається її зародження з аморфного оксиду.

Таблиця 2. Параметри близького порядку оксидів $Zr_{1-x}Y_xO_2$

Вміст X, мас.%	R_{O-O} , нм	R_{Zr-Zr} , нм	R_{Zr-O} , нм	N	L , нм
6	0,428	0,345	0,238	12,12	4,45
8	0,433	0,344	0,225	11,71	4,83
10	0,426	0,43	0,255	13,68	5,52

Де R_{O-O} , R_{Zr-Zr} , R_{Zr-O} — міжатомні відстані, N — координаційні числа.

Рис. 3. Структура стабілізованих оксидів $Zr_xY_{1-x}O_2$ Рис. 4. Електронномікроскопічне зображення атомного розміщення в оксиді $Zr_xY_{1-x}O_2$

Таким чином, можна стверджувати, що кристалізація розпочинається з елементарних ОБРА найпростіших форм шляхом їх об'єднання та впорядкування структури.

Висновки та перспективи подальших досліджень

1. В результаті моделювання встановлено, що в аморфному стані найбільш ймовірні форми ОБРА мають форму октаєдрів з середніми розмірами 5 нм і координаційними числами 11—14.

2. Встановлено, що формування наноструктурних частинок оксиду $Zr_{1-x}Y_xO_2$ відбувається з аморфної матриці, шляхом росту ОБРА та поступового впорядкування атомної структури.

3. Запропонована методика моделювання за допомогою сумісного використання ФРРА і апроксимації профілю головного піку структурного фактору дає хороші результати в порівнянні з експериментальними результатами.

4. Дана методика моделювання близького порядку аморфних оксидів $Zr_{1-x}Y_xO_2$ дає можливість визначати близький порядок аморфних речовин різного складу в умовах відсутності електронного мікроскопа з високою роздільною здатністю та прискорити розробку нових нанорозмірних матеріалів різного призначення з унікальними властивостями.

Список використаної літератури

1. Пул Ч. Мир материалов и технологий. Нанотехнологии / Пул Ч., Оуэнс Ф. – М.: Техносфера, 2006. – 336 с.
2. Суздаев И. П. Нанотехнология. Физико-химия наноструктуры и наноматериалов / Суздаев И. П. – М.: Ком. Книга, 2006. – 592 с.
3. Шабанов Н. А. Химия и технология нанодисперсных оксидов / Шабанов Н. А., Попов В. В., Саркисов П. Д. – М.: ИКЦ «Академкнига», 2007. – 300 с.
4. Скороход В.В. Теория физических свойств / В. В. Скороход // Порошковая металлургия. – 1995. – № ½. – С. 53–71.
5. Майер К. Физико-химическая кристаллография / Майер К. – М.: Металлургия, 1972. – 480 с.
6. Рао Ч.Н.Р. Новые направления в химии твердого тела (структура, синтез, свойства, реакционная способность и дизайн материалов) / Рао Ч.Н.Р., Гапалакримнан Дж. – Новосибирск: Наука, 1990. – 520 с.
7. Piconi C. Zirconia as ceramic biomaterial / C. Piconi, G. Maccaro // Biomaterials. – 1999. – 20. – P. 1–25.
8. Lange F.F. Powder processing science and technology for increased reliability / F.F. Lange // I. Amer. Ceram. Soc. – 1989. – Vol. 72, № 1. – P. 3–15.
9. Шевченко А.В. Биоинертные имплантаты на основе нанокристаллических порошков ZrO_2 / А.В. Шевченко, Е.В. Дудник, В.А. Дудник и др. // Техника машиностроения. – 2006. – Т. 58, № 2. – С. 32–35.
10. Baskevich O.S. Modeling of short-range structure in Ni-P alloys / Baskevich O.S., Gulivetz A.N., Zabudovsky V.O. // Ukr.J.Phys. – 2004. – V.49, № 12. – P.1196–1199.
11. Баскевич А.С. Близкий порядок рентгеноаморфных сплавов Ni-P и Co-P, полученных импульсным электроосаждением / А.С. Баскевич, А.Н. Гуливец, В.А. Забудовский // Металлофизика и новейшие технологии. — 2004. – Т. 26, № 9. – С. 1151–1161.
12. Baskevich A. Study of short range ordering of amorphous Cr-C alloys obtained by pulse electrodeposition/ A. Baskevich, V. Soboliev // Journal "Scientific Israel – Technological Advantages". – Vol.13. – № 4. – 2011. – P. 103–110.
13. Надеждін Ю.Л. Методика визначення розмірів кластерів нанокристалічних порошків діоксиду цирконію за аналізом профілю головного піку структурного фактору / Ю. Л. Надеждін, О.С. Баскевич, В.Г. Верещак, О.О. Шань // Проблемы и перспективы развития железнодорожного транспорта: тезисы докл. 74 Междунар. науч.-практ. конференция (Днепропетровск, 15–16 мая 2014 г.). – Днепропетровск, 2014. – С. 415–417.

**MODELLING OF SHOT-RANGE ORDER OF AMORPHOUS OXIDES OF $Zr_{1-x}Y_xO_2$
Baskevich A.S., Vereshchak V.G., Nikolenko M.V.****Abstract**

The use of stabilized zirconia dioxides as high-strength materials for structural materials, bio-ceramics and as solid electrolyte for "Fuel Cells" is an extremely promising area for the development of new materials with unique properties. Obtaining powdered nanodispersed powders of stabilized zirconia at a given chemical and phase composition, the size of the primary particles and their distribution in size is a very complicated process. For their successful obtaining it is necessary to systematically study the physico-chemical processes of the formation of solid phase stabilized zirconium dioxide throughout the path of transformation "solution \rightarrow a precipitate of zirconium hydroxide \rightarrow amorphous zirconium dioxide \rightarrow crystalline zirconium dioxide" and develop on the basis of effective control factors of the process of forming the micro- and macrostructure of stabilized powders zirconia dioxide.

In order to find out the processes of formation of a nanocrystalline structure of $Zr_{1-x}Y_xO_2$ powders ($x = 6,8,10\%$) when obtained from solutions, data on the short-range order arrangement of atoms in amorphous zirconia, which is the main prestructure in its transition in nanocrystalline and crystalline states. The short-range order arrangement of atoms in the amorphous oxide $Zr_{1-x}Y_xO_2$ was investigated by the method of joint simulation of the main structural factor maximal profile and the approximation of the atom radial distribution function (ARDF) based on experimental data of wide-angle X-ray scattering.

In the framework of the proposed shot-range order model for the amorphous $Zr_{1-x}Y_xO_2$ oxide, the form of regions of the ordered arrangement of atoms (ROAA) was selected based on the Bragg principle, which indicates that the crystal faces with the highest reticular density of atoms have minimal surface energy and interplane spacings with small indices. These forms include dense packings of elemental polyhedron of two types: octahedron and tetrahedron. The simulated shot-range order simulation of amorphous oxides $Zr_{1-x}Y_xO_2$ showed that ROAA has the form close to the octahedron, and ROAA sizes have an average value of 5 nm, and the type of packaging is cubic with an average coordination number of 11–14.

Comparison of the results of theoretical modeling with the results of high resolution electron microscopy showed good coincidence, and it was also established that the formation of nanosized $Zr_{1-x}Y_xO_2$ oxide particles occurs from an amorphous matrix, by streamlining the atomic structure.

The proposed simulation method by means of the combined use of ARDF and the approximation of the profile of the main peak of the structural factor makes it possible to determine the close order of amorphous substances of different composition in the absence of high-resolution electron microscopy.

References

- [1] Pul Ch., F. Ounce. Mir materialov i tekhnologii. Nanotekhnologii [Material World. Nanotechnology]. M.: Tekhnosfera, 2006, 336 p. (in Russian).
- [2] Suzdalev I.P. Nanotekhnologii. Fiziko-khimiia nanostruktury i nanomaterialov [Nanotechnology. Physicochemistry of nanostructure and nanomaterials]. M.:Kom.Kniga, 2006, 592 p. (in Russian).
- [3] Shabanov N.A., Popov V.V., Sarkisov P.D. Khimiia i tekhnologii nanodispersnykh oksidov [The chemistry and Technology of nanodispersed oxides]. M.: IKTZ "Akademkniga", 2007, 300 p. (in Russian).
- [4] Skorokhod V.V. Teoriia fizicheskikh svoistv [The theory of physical properties]. *Poroshkovaia metallurgii*, 1995, no.1/2, pp.53-71 (in Russian).
- [5] Maier K. Fiziko-khimicheskaia kristallografiia [The physical-chemical crystallography]. M.:Metallurgii, 1972, 480 p. (in Russian).
- [6] Rao Ch. N. R., Galakrimnan Dzh. Novyie napravleniia v khimii tverdogo tela (struktura, sintez, svoistva, reaktzionnaia sposobnost i dizain materialov) [New direction in the chemistry of solids. Structure, synthesis, properties and desing of materials]. Novosibirsk.: Nauka, 1990, 520 p. (in Russian).

- [7] Lange F.F. Powder processing science and technology for increased reliability, *Journal of The American Ceramical Societe*, 1989, vol. 72, no. 1, pp.3–15.
- [8] Piconi C., Maccauro G. Zirconia as ceramic biomaterial, *Biomaterials*, 1999, no. 20, pp.1–25.
- [9] Shevchenko A.V., Dudnik Ye. V., Dudnik V.A. i dr. Bioinertnyie implanty na ocnovie nanokristallicheskikh poroshkov ZrO_2 [Bioinert implants based on crystalline ZrO_2 powders]. *Tekhnika mashinostroeniia*, 2006, vol. 58, no. 2, pp. 32–35 (in Russian).
- [10] Baskevich A.S., Gulivetz A.N., Zabludovsky V.O. Modeling of short-range structure in Ni-P alloys. *Ukrainian Journal of Physics*, 2004, vol.49, no. 12, pp.1196-1199.
- [11] Baskevich A.S., Gulivetz A.N., Zabludovsky V.A. Blizhnii poriadok rentgenoamorfnykh splavov Ni-P i Co-P, poluchennykh impulsnym elektroosazhdeniim [Short-range order amorphous Ni-P and Co-P alloys, obtained by pulse electrodeposition]. *Metallofizika i noveishyie tekhnologii*, 2004, vol. 26, no. 9, pp.1151–1161.
- [12] Baskevich A., Soboliev V. Study of short range ordering of amorphous Cr-C alloys obtained by pulse electrodeposition. *Journal "Scientific Israel – Technological Advantages"*, 2011, vol. 13, no. 4, pp.103–110.
- [13] Nadezhdin Yu. L., Baskevich O.S., Vereshchak V.G., Shan O.O. “Metodyka vyznachennia rozmiriv klasteriv nanokrystalichnykh poroshkiv dioksydiv zyrkoniiu za analizom profilu golovno-go piku strukturnogo faktoru” [Method of the size of clusters of nanocrystalline powders of zirconium dioxides by analysis of the profile of the main peak of structural factor]. *Tezisy dokadov. 74 Mezhdunarodnoi nauchno–prakticheskoi Konferentsii “Problemy i perspektivy razvitiia zheleznodorozhnogo transporta”* [Thesis of the 74th Int. Sci. and pract. Conf. “Problems and Prospect for the development of Railway”]. Dnepropetrovsk, 2014, pp.415–417. (in Ukrainian).