УДК 536.21:546.271:544.183.2

B. S. Rao, E. Kishor*
School of Mechanical Engineering, VIT-AP University,
Beside AP Secretariat, Amaravati, Andhra Pradesh, India
**kishor.e@vitap.ac.in, kishoreshwar@gmail.com*

Порівняльне дослідження теплофізичних властивостей кубічних структур BC_3 за допомогою атомістичного моделювання

Досліджено три кубічні структури BC_3 (c-BC_3) з різною щільністю зв'язків бор–бор (B–B) для прогнозування їхніх теплофізичних властивостей за допомогою атомістичного моделювання. Для оцінки термічної поведінки цих структур застосовано метод молекулярної динаміки. Було прогнозовано, що c-BC_3 є надтвердим матеріалом і розглянуто його як потенційний кандидат для використання в якості матеріалу для різального інструменту в процесах механічної обробки. Крім того, завдяки наявності бору, c-BC_3 може слугувати перспективним матеріалом для уповільнювачів у ядерній енергетиці. Очікується, що як у процесах механічної обробки, так і у разі застосування в ядерній енергетиці робоча температура матеріалу суттєво зростатиме. Тому ефективне розсіювання тепла є критично важливим, оскільки недостатня теплопередача може призвести до виникнення локальних зон перегріву (хот-спотів), що негативно вплине на твердість та інші структурні властивості. Прогнозовано значення теплопровідності й питомої теплоємності трьох структур c-BC_3 з метою вивчення впливу щільності зв'язків B–B на їхні термічні характеристики. Отримані результати дозволяють глибше зрозуміти роль зв'язків B–B у керуванні процесами теплопередачі в c-BC_3, що є визначальним для його потенційного застосування в умовах високих температур і механічних напружень.

Ключові слова: *зв'язок B–B, питома теплоємність, теплопровідність, молекулярна динаміка.*

ВСТУП

Бор (B) з атомним номером 5 виявляє низку унікальних властивостей [1]. Завдяки своїй здатності утворювати стабільні зв'язки, попри дефіцит електронів, він легко утворює сполуки з високою концентрацією бору, такі як NaB_{15}, $B_{12}P_2$, $B_{13}P_2$, $B_{50}N_2$ та PuB_{100} [2]. Бор існує у двох стабільних ізотопних формах: ^{10}B (з 5 нейтронами) та ^{11}B (з 6 нейтронами). Зокрема, ^{10}B має дуже високий переріз захоплення теплових нейтронів, який становить 3837 барн, тоді як ^{11}B має значно нижче значення – 0,05 барн [3]. Завдяки цій властивості збагачений ^{10}B широко використовують в таких матеріалах, як B_4C, для застосування у якості уповільнювача ядерного випромінювання [4].

Крім того, матеріали на основі бору демонструють надпровідну поведінку [5, 6] і відомі своєю високою твердістю та термічною стабільністю. Ці характеристики роблять їх придатними для використання як вогнетривких матеріалів в аерокосмічній та ядерній промисловості [7].

Було прогнозовано, що бор і вуглець (C) утворюють широкий спектр сполук з різною стехіометрією, що включають B_5C, B_4C, B_3C, B_2C, BC, BC_2, BC_3,

© B. S. RAO, E. KISHOR, 2026

BC_4 та BC_5 [8]. Проте однією з головних проблем під час вивчення систем B–C є складність точного визначення положення атомів за допомогою експериментальних методів [9]. Незважаючи на те, що такі матеріали, як BC_3 [10], BC_5 [11] та B_4C [12], були синтезовані, їхнє точне атомне розташування залишається предметом постійних дискусій.

Для вирішення цієї проблеми широко застосовують *ab-initio* (першопринципні) розрахунки, які дозволяють передбачити стабільні кристалічні структури сполук бору та вуглецю [13–16]. Ці прогнозовані структури згодом можуть бути використані в моделюванні методом молекулярної динаміки (МД) для дослідження поведінки матеріалів у більших просторових і часових масштабах, ніж ті, що доступні для методів *ab-initio*.

МД є методом атомістичного моделювання, в якому часова еволюція системи взаємодіючих атомів визначається за допомогою чисельного розв'язання рівнянь руху Ньютона. Сили, що діють на атоми, розраховують за допомогою відповідних міжатомних потенціалів, що дозволяє отримувати траєкторії всіх атомів у системі як функцію часу [17]. Такі моделювання можуть бути застосовані для оцінки таких характеристик, як механічна поведінка [18–25] та стійкість до радіаційного пошкодження [26–36].

Матеріали на основі бору та вуглецю знаходять застосування в механічній обробці [4], ядерній [37] та напівпровідниковій промисловості [15, 16]. У цих сферах застосування матеріали часто піддаються жорстким умовам експлуатації, зокрема високим температурам, що може суттєво вплинути на їхні механічні характеристики. Підвищення температури в таких матеріалах визначається їхніми внутрішніми теплофізичними властивостями, такими як теплопровідність і питома теплоємність, які можна ефективно оцінити за допомогою МД-моделювання. Для отримання надійних результатів МД-моделювання необхідно ретельно верифікувати як кристалічну структуру, так і міжатомний потенціал. Було встановлено, що міжатомний потенціал Терсоффа, запропонований Мацунагою та ін. [38], є придатним для прогнозування механічних властивостей [25] та характеристик радіаційного пошкодження [36] структур BC_3.

У цьому дослідженні теплофізичні властивості структур BC_3 оцінювали за допомогою МД-моделювання. Вичерпний перелік структур BC_3, прогнозованих за допомогою методів *ab-initio*, наведено в табл. 1.

Таблиця 1. Прогнозовані та експериментально визначені кристалічні структури BC_3

Структура	Метод	Рік	Посилання
BC_3(a), BC_3(b)	*ab-initio*	2005	[13]
$P\bar{4}2m$	*ab-initio*	2006	[39]
BC_3(a)	*ab-initio*	2010	[40]
$P\bar{4}2m$, *Pmma-a*, *Pmma-b*	*ab-initio*	2011	[41]
кубічна	експериментальний	2012	[10]
*R*3*m*	*ab-initio*	2013	[9]
*P*4*m*2	*ab-initio*	2014	[8]
$I\bar{4}3m$	*ab-initio*	2015	[42]
*C*2/*m*	*ab-initio*	2015	[43]

Оскільки згідно з літературними джерелами експериментально синтезований BC_3 має кубічну структуру [10], ми розглядали лише кубічні конфігурації (c-BC_3), прогнозовані в дослідженнях *ab-initio*. Три проаналізовані кубічні структури включають BC_3(a) та BC_3(b), описані в [13], а також третю структуру з просторовою групою $I\bar{4}\,3m$, прогнозовану Чжаном та ін. [42], яка надалі позначається як BC_3(c). Ці структури відрізняються щільністю зв'язків B–B, що, як було показано, суттєво впливає на їхню механічну та термічну поведінку. Потенціал Мацунаги–Терсоффа [38] був верифікований для трьох кубічних структур BC_3 за допомогою порівняння значень модуля всебічного стиску, енергій когезії та параметрів кристалічної ґратки цих трьох структур із літературними даними, отриманими методами *ab-initio* [25]. У попередніх дослідженнях повідомляли, що збільшення кількості зв'язків B–B призводить до погіршення механічних властивостей через зниження жорсткості ґратки [25]. Крім того, спостерігали збільшення коефіцієнта теплового розширення зі зростанням щільності зв'язків B–B [36], що вказує на посилення ангармонізму ґратки. Очікується, що такий ангармонізм відіграє вирішальну роль у керуванні теплопередачею та накопиченням енергії всередині ґратки [44–46] та впливає у такий спосіб на теплопровідність і питому теплоємність. У даній роботі досліджували внутрішні теплофізичні властивості трьох різних кристалічних структур BC_3 з різною щільністю зв'язків B–B з метою розуміння їхнього впливу на термічну поведінку.

МЕТОДОЛОГІЯ

Деталі моделювання

Моделювання виконували за допомогою програмного пакета LAMMPS [47], а для візуалізації використовували програму OVITO [48].

Кристалічна структура та використаний міжатомний потенціал

Базові структури BC_3(a) та BC_3(b) складаються з кубічної структури типу алмазу, в якій два атоми C заміщені двома атомами B у відповідних вузлах ґратки (рис. 1). Структура BC_3(c) є суперкоміркою розміром 2×2×2, що містить 64 атоми, в якій 16 атомів B розташовані вздовж чотирьох головних діагоналей, як зазначено в [42].

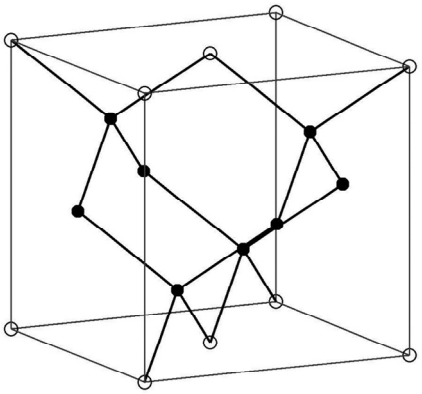


Рис. 1. Структура BC_3(a) типу кубічного алмазу, параметр кристалічної ґратки *a* становить 3,601 Å: вуглець (●), бор (○).

Однією з важливих особливостей, що відрізняє ці три структури, є ступінь зв'язування бор–бор (B–B), наявний у кожній конфігурації. Структура BC_3(a)

не містить жодного зв'язку B–B (див. рис. 1), у структурі BC_3(b) наявний один зв'язок B–B в межах елементарної комірки (рис. 2), тоді як у конфігурації BC_3(c) всі атоми B, розташовані на головних діагоналях, є зв'язаними між собою (рис. 3). Нами як міжатомний потенціал використано потенціал Терсоффа у параметризації, запропонованій Мацунагою [38].

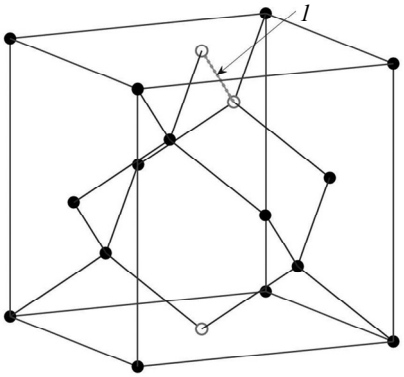


Рис. 2. Структура BC_3(b) типу кубічного алмазу, параметр кристалічної ґратки *a* становить 3,685 Å: вуглець (●), бор (○), зв'язок B–B (*1*).

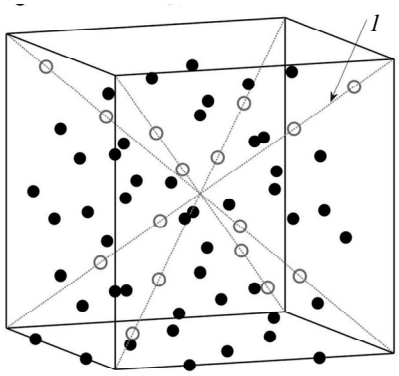


Рис. 3. Структура BC_3(c), суперґратка розміром 2×2×2 з кубічною структурою $I\bar{4}3m$, параметр кристалічної ґратки *a* становить 7,33 Å: вуглець (●), бор (○), зв'язок B–B (*1*).

Етапи виходу на рівновагу (термостабілізації)

На початковому етапі швидкості атомів масштабували для досягнення температури 300 K. Потім систему приводили до рівноважного стану за допомогою канонічного ансамблю (NVT) протягом 10 пс, після чого застосовували ізобарно-ізотермічний ансамбль (NPT) протягом 20 пс. Згодом використовували мікроканонічний ансамбль (NVE) протягом 20 пс, щоб переконатися, що температура і тиск системи коливаються навколо заданих значень. Для всіх розрахунків використовували крок за часом 0,1 фс. Зміна тиску та температури для структури BC_3(a) під час роботи в ансамблі NVE показана на рис. 4 та 5 відповідно.

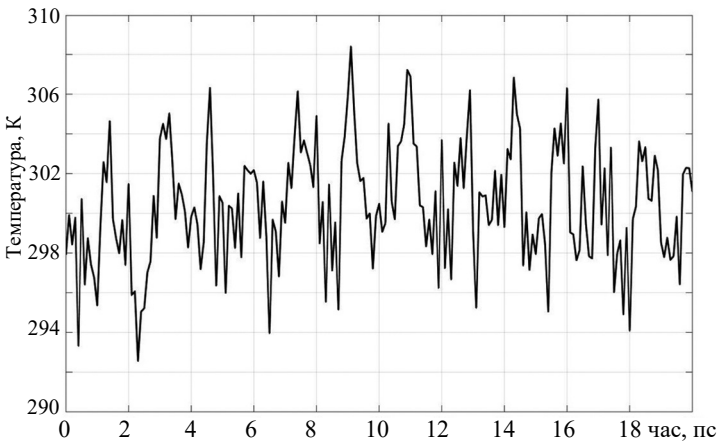


Рис. 4. Графік температурної рівноваги для структури BC_3(a).

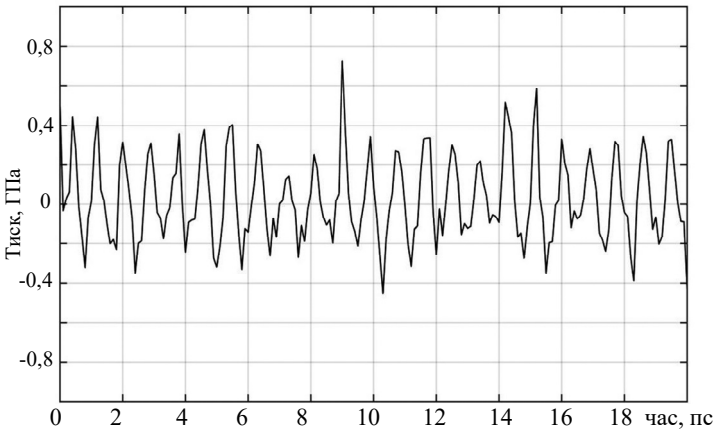


Рис. 5. Графік тиску на етапі виходу на рівновагу для структури BC_3(a).

Методологія оцінки питомої теплоємності

Питому теплоємність (C) визначали за допомогою розрахунку внутрішньої енергії трьох кубічних структур с-BC_3 після їхньої термостабілізації за температур 300, 600, 900 та 1200 K без дії тиску. Розраховані значення енергії потім апроксимували лінійною функцією температури. Зміна внутрішньої енергії Q системи масою m внаслідок зміни температури ΔT пов'язана з її питомою теплоємністю згідно з рівнянням

$$Q = mC\Delta T. \quad (1)$$

Для моделювання було розглянуто систему, що складається з 8000 атомів (2000 атомів ^{10}B та 6000 атомів ^{12}C) із загальною масою ~ $15{,}3\cdot10^{-23}$ кг. Для структур BC_3(a) та BC_3(b) область моделювання містить 10×10×10 елементарних комірок, тоді як для BC_3(c) використовували суперкомірку (розширену комірку) розміром 5×5×5 через більший розмір її елементарної комірки. Типове зображення (знімок) системи BC_3(b) наведено на рис. 6. Для відтворення поведінки об'ємного матеріалу в усіх трьох напрямках застосовували періодичні граничні умови (ПГУ).

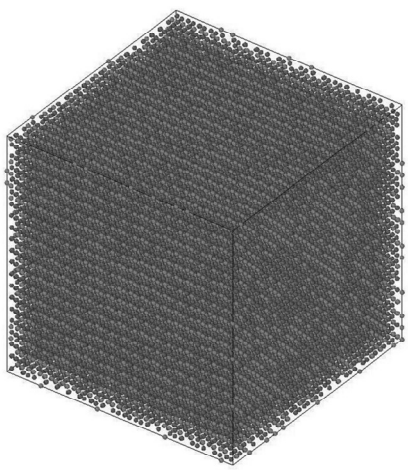


Рис. 6. Знімок кубічної суперкомірки розміром 10×10×10 для структури BC_3(a), використаної для визначення питомої теплоємності, із застосуванням періодичних граничних умов (ПГУ) в усіх трьох напрямках.

Спочатку систему термостабілізували за заданої температури та без тиску з використанням ансамблю NPT. Після цього моделювання продовжували в ансамблі NVE протягом 10 пс із кроком за часом 0,1 фс. Під час роботи в ансамблі NVE значення енергії когезії фіксували з інтервалом 50 фс, на основі чого обчислювали середні значення енергії когезії та температури. Цю процедуру повторювали для всіх трьох кубічних структур BC_3 за температур 600, 900 та 1200 K. Залежність енергії когезії від температури потім апроксимували лінійною функцією, а питому теплоємність визначали за допомогою рівняння (1).

Методологія оцінки теплопровідності

Три кубічні структури BC_3 спочатку термостабілізували за температури 300 K без тиску. Область моделювання складається з 64 000 атомів. Для структур BC_3(a) та BC_3(b) області побудовані з використанням 20×20×20 елементарних комірок, тоді як для BC_3(c) застосовують суперкомірку розміром 10×10×10 через більший розмір її елементарної комірки. Комірка моделювання побудована у формі прямокутного паралелепіпеда (кубоїда), температура двох торців якого була різною для створення потоку тепла через структуру. Періодичні граничні умови в цьому разі не застосовували, щоб запобігти взаємодії між атомами в гарячій та холодній областях.

Постійний тепловий потік задавали через підведення тепла ($+q$) до одного кінця системи (область 1) та відведення такої самої кількості тепла ($-q$) з протилежного кінця (область 2). Це створює градієнт температури, де температури двох областей позначали T_1 (область 1) та T_2 (область 2). Відстань між цими областями позначали L (рис. 7).

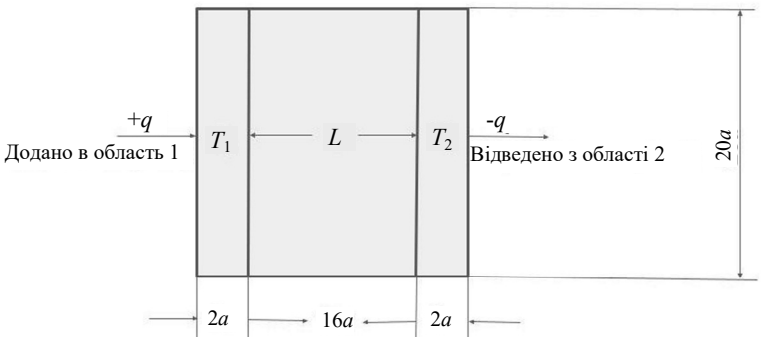


Рис. 7. Схема визначення теплопровідності структури.

Теплопровідність є тензором другого рангу, і для кубічних структур він зводиться до такого вигляду:

$$\begin{bmatrix} k & 0 & 0 \\ 0 & k & 0 \\ 0 & 0 & k \end{bmatrix}.$$

Теплопровідність k розраховували за допомогою рівняння

$$q = -kA\frac{T_1 - T_2}{L}, \qquad (2)$$

де A – площа поперечного перерізу системи, перпендикулярна до напрямку теплового потоку. Градієнт температури підтримували протягом 20 пс із кроком за часом 0,5 фс, щоб переконатися, що він залишається стабільним та істотно не змінюється з часом.

Система моделювання складається з 64 000 атомів, розташованих у кубічній геометрії. Для BC_3(a) та BC_3(b) структури побудовані з використанням 20×20×20 елементарних комірок, тоді як для BC_3(c) застосовували суперкомірку розміром 10×10×10. Області 1 та 2 (див. рис. 7) містять по 6400 атомів кожна. Для BC_3(a) та BC_3(b) ці області відповідають 10×10×2 елементарним коміркам, а для BC_3(c) вони складаються з 5×5×1 елементарних комірок.

Оскільки параметр кристалічної ґратки a відрізняється для трьох структур, відповідна площа поперечного перерізу A та довжина L також є різними, як узагальнено в табл. 2.

Таблиця 2. Геометричні розміри трьох кубічних структур BC_3

Структура	Параметр кристалічної ґратки a, Å	Довжина L, Å $L = 16\times a$	Площа A, Å^2 $A = 20a\times 20a$
BC_3(a)	3,601	57,616	5186,88
BC_3(b)	3,685	58,960	5431,69
BC_3(c)	$\frac{7,33}{2}$ (2×2×2 суперкомірка)	58,640	5372,89

Усі три матеріали спочатку термостабілізували за температури 300 К та тиску 0 ГПа. Потім у структурі було створено градієнт температури за допомогою мікроканонічного ансамблю (NVE) протягом 20 пс із кроком за часом 0,1 фс. Задавали три набори градієнтів температури через зміну значень теплового потоку: 4, 20 та 100 еВ/пс. У кожному разі градієнт температури підтримували протягом 10 пс. Під час моделювання значення температури у двох областях, а також середню температуру системи фіксували з інтервалом 0,5 фс для подальшого розрахунку теплопровідності.

РЕЗУЛЬТАТИ ТА ОБГОВОРЕННЯ

Питома теплоємність

Середню температуру T, К та енергію когезії Q, еВ використовували для визначення питомої теплоємності C. Величини ΔT та ΔQ відображають різницю між максимальними та мінімальними значеннями температур і енергій когезії відповідно для кожної кубічної структури BC_3. Питому теплоємність визначали за допомогою апроксимації залежності енергії когезії від температури за допомогою лінійної залежності, як показано для структури BC_3(a) на рис. 8.

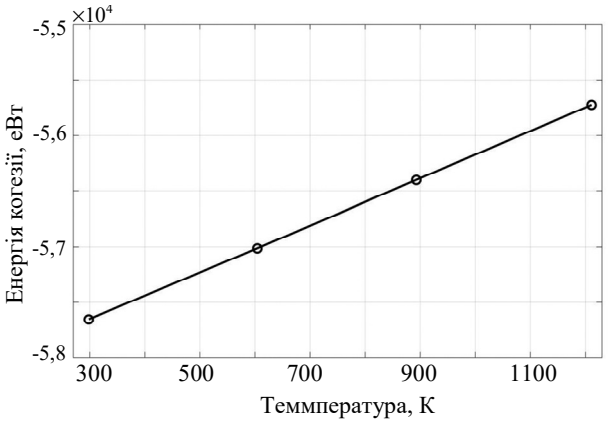


Рис. 8. Залежність енергії когезії для структури BC_3(a).

Розраховані значення питомої теплоємності для трьох структур наведено в табл. 3. Результати вказують на незначне зростання питомої теплоємності зі збільшенням щільності зв'язків B–B у кубічних структурах BC_3.

Таблиця 3. Значення термостабілізованих температур та повних енергій когезії для трьох кубічних структур BC_3

BC_3(a)		BC_3(b)		BC_3(c)	
T, K	Q, eB	T, K	Q, eB	T, K	Q, eB
298,4	–57653,5	298,5	–57062,9	300,0	–57076,9
604,6	–57010,8	604,2	–56419,9	605,1	–56437,0
892,6	–56401,7	894,7	–55804,7	896,3	–55820,3
1211,1	–55722,3	1203,5	–55145,1	1198,0	–55170,2
ΔT, K	ΔQ, eB	ΔT, K	ΔQ, eB	ΔT, K	ΔQ, eB
912,7	1931,2	905,0	1917,8	898,0	1906,7
C, Дж/(кг·K)		C, Дж/(кг·K)		C, Дж/(кг·K)	
1371,0		1386,0		1388,7	

Теплопровідність

Середні температури двох областей, а саме області 1 (гаряча область) та області 2 (холодна область), визначали для оцінки різниці температур (ΔT). Цю різницю температур згодом використовували для розрахунку теплопровідності k. Протягом усього моделювання середню температура системи підтримували на рівні ~ 300 K. Різниці температур та відповідні значення теплопровідності обчислено для різних значень теплових потоків і узагальнено в табл. 4.

Таблиця 4. Теплопровідність кубічних структур BC_3

Матеріал	q, eB/пс	T, K	T_1, K	T_2, K	δT, K	k, Вт/(м·K)
BC_3(a)	4	299,70±0,65	300,18±2,84	299,18±2,78	1,00	71,19
	20	299,91±0,70	302,81±3,27	296,87±2,87	5,94	59,92
	100	299,60±0,69	316,75±3,22	285,01±2,73	31,74	56,07
BC_3(b)	4	300,50±0,67	301,23±3,55	299,96±3,00	1,27	54,78
	20	300,45±0,68	302,63±3,04	297,40±3,05	5,23	66,51
	100	300,54±0,63	313,65±3,50	288,92±3,65	24,73	70,33
BC_3(c)	4	300,78±0,57	301,57±3,45	300,31±3,08	1,26	55,51
	20	300,85±0,69	303,86±2,87	297,00±3,00	6,86	50,98
	100	300,81±0,65	318,88±2,70	283,59±3,40	35,29	49,55

Для розрахунку теплопровідності обирали триваліший проміжок часу порівняно з розрахунками питомої теплоємності. Ця більша тривалість є необхідною, оскільки системі потрібно більше часу для виходу на стаціонарний (стабільний) режим, що пов'язано насамперед із безперервним підтриманням градієнта температури. На теперішній час значення теплопровідності k визначено для всіх трьох кубічних структур BC_3. Середні температури, а також температури гарячої та холодної областей разом із середньоквадратичним

(стандартним) відхиленням протягом стаціонарного періоду для теплового потоку 100 еВ/пс показано на рис. 9, 10 та 11 відповідно для структур BC_3(a), BC_3(b) та BC_3(c).



Рис. 9. Зміна температури структури BC_3 (a) для потоку 100 еВ/пс.



Рис. 10. Зміна температури структури BC_3(b) для потоку 100 еВ/пс.



Рис. 11. Зміна температури структури BC_3(c) для потоку 100 еВ/пс.

Отримані результати чітко демонструють, що збільшення кількості зв'язків B–B у структурі BC_3(c) призводить до зниження теплопровідності. Водночас із цих результатів не є очевидним, яка саме структура – BC_3(a) чи BC_3(b) – має найвищу теплопровідність.

ВИСНОВКИ

Зміна теплофізичних властивостей кубічних структур BC_3 зумовлена відмінностями у зв'язках B–B, які впливають на ангармонізм кристалічної ґратки. Збільшення щільності зв'язків B–B посилює ангармонічні взаємодії всередині ґратки, що призводить до більшої інтенсивності коливань атомів та зростання коефіцієнта теплового розширення. Цей підвищений ангармонізм впливає на перенесення тепла через збільшення фонон-фононного розсіювання, тим самим знижували теплопровідність. Водночас посилення ангармонізму зумовлює незначне зростання питомої теплоємності, оскільки для забезпечення як коливань ґратки, так і об'ємного розширення за підвищених температур потрібна додаткова енергія.

Отже, спостережуване зниження теплопровідності та відповідне зростання питомої теплоємності зі збільшенням щільності зв'язків B–B узгоджуються з фундаментальними змінами в динаміці кристалічної ґратки, які визначаються взаємодіями B–B.

КОНФЛІКТ ІНТЕРЕСІВ

Автори заявляють про відсутність конфлікту інтересів.

ПОДЯКИ

Усі розрахунки були проведені з використанням високопродуктивного обчислювального кластера Університету VIT-AP. Автори висловлюють щиру вдячність за надання цього ресурсу.

B. S. Rao, E. Kishor

School of Mechanical Engineering, VIT-AP University,

Beside AP Secretariat, Amaravati, Andhra Pradesh, India

Comparative study of thermal properties of cubic BC_3 structures using atomistic simulation

Three cubic BC_3 (c-BC_3) structures with varying boron–boron (B–B) bond densities are investi- gated to predict their thermal properties using atomistic simulations. Molecular dynamics (MD) simulations are employed to evaluate the thermal behavior of these structures. c-BC_3 is predicted to be a superhard material and is considered a potential candidate for machining applications as a cutting tool material. Additionally, due to the presence of boron, c-BC_3 may also serve as a prospective nu- clear moderator material. In both machining and nuclear applications, the operating temperature of the material is expected to increase significantly. Efficient heat dissipation is therefore essential, as inadequate thermal transport can lead to localized hotspots, adversely affecting hardness and other structural properties. The heat dissipation capability of a material is governed by its intrinsic thermal properties, such as thermal conductivity and specific heat capacity. In this work, the thermal conductivity and specific heat capacity of three c-BC_3 structures are predicted to examine the influence of B–B bonding density on their thermal performance. The results provide insights into the role of B–B bonding in governing heat transport in c-BC_3, which is crucial for its potential application in high-temperature and high-stress environments.

***Keywords**: B–B bonding, specific heat capacity, thermal conductivity, molecular dynamics.*

1. Oganov A., Solozhenko V. Boron: a hunt for superhard polymorphs. *J. Superhard Mater*. 2009. Vol. 31, no. 5. P. 285–291.
2. Douglas B.E., Ho S.-M. Structure and Chemistry of Crystalline Solids. USA, NY: Springer-Verlag New York, 2006. 346 p.

3. Subramanian C., Suri A., Murthy T. Development of boron-based materials for nuclear applications. *BARC Newsl*. 2010. Vol. 313. P. 14–22.
4. Suri A., Subramanian C., Sonber J., Murthy T.C. Synthesis and consolidation of boron carbide: a review. *Int. Mater. Rev*. 2010. Vol. 55, no. 1. P. 4–40.
5. Nagamatsu J., Nakagawa N., Muranaka T., Zenitani Y., Akimitsu J. Superconductivity at 39 K in magnesium diboride. *Nature*. 2001. Vol. 410, no. 6824. P. 63–64.
6. Eremets M.I., Struzhkin V.V., Mao H.K., Hemley R.J. Superconductivity in boron. *Science*. 2001. Vol. 293, no. 5528. P. 272–274.
7. Murthy T.S., Sonber J., Sairam K., Majumdar S., Kain V. Boron-based ceramics and composites for nuclear and space applications: synthesis and consolidation. *Handb. Adv. Ceram. Compos.* 2019. P. 1–36.
8. Wang D.Y., Yan Q., Wang B., Wang Y.X., Yang J., Yang G. Predicted boron-carbide compounds: A first-principles study. *J. Chem. Phys*. 2014. Vol. 140, no. 22, art. 224703.
9. Mikhaylushkin A.S., Zhang X., Zunger A. Crystal structures and metastability of carbon-boron compounds C_3B and C_5B. *Phys. Rev. B.* 2013. Vol. 87, no. 9, art. 094103.
10. Zinin P., Ming L., Ishii H., Jia R., Acosta T., Ehellebrand E. Phase transition in BC_x system under high-pressure and high-temperature: Synthesis of cubic dense BC_3 nanostructured phase. *J. Appl. Phys*. 2012. Vol. 111, no. 11, art. 113505.
11. Solozhenko V.L., Kurakevych O.O., Andrault D., Le Godec Y., Mezouar M. Ultimate metastable solubility of boron in diamond: synthesis of superhard diamondlike BC_5. *Phys. Rev. Lett.* 2009. Vol. 102, no. 1, art. 015506.
12. Andrievski R.A. Micro- and nanosized boron carbide: synthesis, structure and properties. *Russ. Chem. Rev*. 2012. Vol. 81, no. 6. P. 549–562.
13. Lowther J. Potential super-hard phases and the stability of diamond-like boron–carbon structures. *J. Phys. Condens. Matter*. 2005. Vol. 17, no. 21. P. 3221–3229.
14. Balakrishnarajan M.M., Pancharatna P.D., Hoffmann R. Structure and bonding in boron carbide: The invincibility of imperfections. *New J. Chem*. 2007. Vol. 31, no. 4. P. 473–485.
15. Liang Y., Zhang W., Zhao J., Chen L. Superhardness, stability, and metallicity of diamond-like BC_5: Density functional calculations. *Phys. Rev. B.* 2009. Vol. 80, no. 11, art. 113401.
16. Li Q., Wang H., Tian Y., Xia Y., Cui T., He J., Ma Y., Zou G. Superhard and superconducting structures of BC_5. *J. Appl. Phys*. 2010. Vol. 108, art. 023507.
17. Allen M.P. Introduction to molecular dynamics simulation. *Comput. Soft Matter*. 2004. Vol. 23, no. 1. P. 1–28.
18. Lund A.C., Hodge A.M., Schuh C.A. Incipient plasticity during nanoindentation at elevated temperatures. *Appl. Phys. Lett.* 2004. Vol. 85, no. 8. P. 1362–1364.
19. Nair A.K., Parker E., Gaudreau P., Farkas D., Kriz R.D. Size effects in indentation response of thin films at the nanoscale: A molecular dynamics study. *Int. J. Plasticity*. 2008. Vol. 24, no. 11. P. 2016–2031.
20. Liu C.-L., Fang T.-H., Lin J.-F. Atomistic simulations of hard and soft films under nanoindentation. *Mater. Sci. Eng. A*. 2007. Vol. 452. P. 135–141.
21. Goel S., Joshi S.S., Abdelal G., Agrawal A. Molecular dynamics simulation of nanoindentation of fe3c and fe4c. *Mater. Sci. Eng. A*. 2014. Vol. 597. P. 331–341.
22. Jang J.-i., Lance M., Wen S., Tsui T.Y., Pharr G. Indentation-induced phase transformations in silicon: influences of load, rate and indenter angle on the transformation behavior. *Acta Materialia.* 2005. Vol. 53, no. 6. P. 1759–1770.
23. Szlufarska I., Kalia R.K., Nakano A., Pashishta P. Nanoindentation-induced amorphization in silicon carbide. *Appl. Phys. Lett.* 2004. Vol. 85, no. 3. P. 378–380.
24. Kucharski S., Mroz Z. Identification of plastic hardening parameters of metals from spherical indentation tests. *Mater. Sci. Eng. A*. 2001. Vol. 318, nos. 1–2. P. 65–76.
25. Kishor E., Swaminathan N. A molecular dynamics based comparison of the mechanical properties of three polytypes of cubic BC_3. *J. Superhard Mater*. 2019. Vol. 41, no. 2. P. 69–83.
26. Samaras M., Derlet P., Van Swygenhoven H., Victoria M. Atomic scale modelling of the primary damage state of irradiated fcc and bcc nanocrystalline metals. *J. Nucl. Mater*. 2006. Vol. 351, nos. 1–3. P. 47–55.
27. Millett P.C., Wolf D., Desai T., Yamakov V. Time scale for point-defect equilibration in nanostructures. *Appl. Phys. Lett*. 2008. Vol. 93, no. 16, art. 161905.
28. Bai X.-M., Voter A.F., Hoagland R.G., Nastasi M., Uberuaga B.P. Efficient annealing of radiation damage near grain boundaries via interstitial emission. *Science*. 2010. Vol. 327, no. 5973. P. 1631–1634.

29. Farrell D.E., Bernstein N., Liu W.K. Thermal effects in 10 keV SI PKA cascades in 3C–SiC. *J. Nucl. Mater.* 2009. Vol. 385, no. 3. P. 572–581.
30. Sahoo D.R., Szlufarska I., Morgan D., Swaminathan N. Role of pre-existing point defects on primary damage production and amorphization in silicon carbide (β-SiC). *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B*. 2018. Vol. 414. P. 45–60.
31. Vincent-Aublant E., Delaye J., Van Brutzel L. Self-diffusion near symmetrical tilt grain boundaries in uo2 matrix: A molecular dynamics simulation study. *J. Nucl. Mater*. 2009. Vol. 392, no. 1. P. 114–120.
32. Liu C., Szlufarska I. Distribution of defect clusters in the primary damage of ion irradiated 3C–SiC. *J. Nucl. Mater*. 2018. Vol. 509. P. 392–400.
33. Cowen B.J., El-Genk M.S., Hattar K., Briggs S.A. A study of irradiation effects in TiO_2 using molecular dynamics simulation and complementary in situ transmission electron microscopy. *J. Appl. Phys*. 2018. Vol. 124, no. 9, art. 095901.
34. Zheng M.-J., Swaminathan D., Morgan D., Szlufarska I. Energy barriers for point-defect reactions in 3C–SiC. *Phys. Rev. B.* 2013. Vol. 88, no. 5, art. 054105.
35. Jiang C., Zheng M.-J., Morgan D., Szlufarska I. Amorphization driven by defect-induced mechanical instability. *Phys. Rev. Lett.* 2013. Vol. 111, no. 15, art. 155501.
36. Kishor E., Swaminathan N. Molecular-dynamics-based characterization and comparison of the radiation damage properties of three polytypes of cubic BC_3. *Sādhanā*. 2020. Vol. 45, no. 1, art. 161.
37. Wu J.-C., Feng Q.-J., Liu X.-K., Zhan C.-Y., Zou Y., Liu Y.-G. A combination method for simulation of secondary knock-on atoms of boron carbide induced by neutron irradiation in SPRR-300. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B*. 2016. Vol. 368. P. 1–4.
38. Matsunaga K., Fisher C., Matsubara H. Tersoff potential parameters for simulating cubic boron carbonitrides. *Jpn. J. Appl. Phys.* 2000. Vol. 39, no. 1A. P. L48–L51.
39. Liu Z., He J., Yang J., Guo X., Sun H., Wang H.-T., Wu E., Tian Y. Prediction of a sandwich-like conducting superhard boron carbide: First-principles calculations. *Phys. Rev. B*. 2006. Vol. 73, no. 17, art. 172101.
40. Nkambule S.M., Lowther J. Crystalline and random “diamond-like” boron–carbon structures. *Solid State Commun*. 2010. Vol. 150, nos. 1–2. P. 133–136.
41. Liu H., Li Q., Zhu L., Ma Y. Superhard and superconductive polymorphs of diamond-like BC_3. *Phys. Lett. A*. 2011. Vol. 375, no. 3. P. 771–774.
42. Zhang M., Liu H., Li Q., Gao B., Wang Y., Li H., Chen C., Ma Y. Superhard BC_3 in cubic diamond structure. *Phys. Rev. Lett.* 2015. Vol. 114, no. 1, art. 015502.
43. Ma M., Yang B., Zi L., Hu M., Wang Q., Cui L., Yu D., He J. A metallic superhard boron carbide: first-principles calculations. *Phys. Chem. Chem. Phys*. 2015. Vol. 17, no. 15. P. 9748–9751.
44. Cahill D.G., Ford W.K., Goodson K.E., Mahan G.D., Majumdar A., Maris H.J., Merlin R., Phillpot S.R. Nanoscale thermal transport. *J. Appl. Phys*. 2003. Vol. 93, no. 2. P. 793–818.
45. Slack G.A. The thermal conductivity of nonmetallic crystals. *Solid State Phys*. 2013. Vol. 34. P. 1–71.
46. Wallace D.C. Thermodynamics of Crystals. *Wiley*, 1972. 484 p.
47. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *J. Comput. Phys*. 1995. Vol. 117, no. 1. P. 1–19.
48. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO–the open visualization tool. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng*. 2009. Vol. 18, no. 1, art. 015012.

Надійшла до редакції 21.05.26
Після доопрацювання 03.06.26
Прийнята до опублікування 08.06.26