

Школа _____ инженерная школа ядерных технологий
 Направление подготовки _____ 14.03.02 Ядерная физика и технологии
 Отделение школы _____ отделение ядерно-топливного цикла

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы Особенности взаимодействия гелия и гелий-вакансионного комплекса с наноразмерными многослойными покрытиями цирконий/ниобий
--

УДК 546.291:621.793-022.532:669.29

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0А7Б	Терентьева Дарья Витальевна		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ОЯТЦ	Яковлева Валентина Станиславовна	д.т.н.		

Консультант

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОЭФ	Святкин Леонид Александрович	к.ф.-м.н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ОСГН	Гасанов Магеррам Али оглы	д.э.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОЯТЦ	Передерин Юрий Владимирович	к.т.н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОЯТЦ	Бычков П.Н.	к.т.н.		

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОСВОЕНИЯ ООП

Код компетенции	Наименование компетенции
Универсальные компетенции	
УК(У)-1	Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач
УК(У)-2	Способен определять круг задач в рамках поставленной цели и выбирать оптимальные способы их решения, исходя из действующих правовых норм, имеющихся ресурсов и ограничений
УК(У)-3	Способен осуществлять социальное взаимодействие и реализовывать свою роль в команде
УК(У)-4	Способен осуществлять деловую коммуникацию в устной и письменной формах на государственном и иностранном (-ых) языке
УК(У)-5	Способен воспринимать межкультурное разнообразие общества в социально-историческом, этическом и философском контекстах
УК(У)-6	Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни
УК(У)-7	Способен поддерживать должный уровень физической подготовленности для обеспечения полноценной социальной и профессиональной деятельности
УК(У)-8	Способен создавать и поддерживать безопасные условия жизнедеятельности, в том числе при возникновении чрезвычайных ситуаций
Общепрофессиональные компетенции	
ОПК(У)-1	способностью использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования
ОПК(У)-2	способностью понимать сущность и значение информации в развитии современного информационного общества, сознавать опасности и угрозы, возникающие в этом процессе, соблюдать основные требования информационной безопасности, в том числе защиты государственной тайны
ОПК(У)-3	владением основными методами защиты производственного персонала и населения от возможных последствий аварий, катастроф, стихийных бедствий
Профессиональные компетенции	
ПК(У)-1	способностью использовать научно-техническую информацию, отечественный и зарубежный опыт по тематике исследования, современные компьютерные технологии и информационные ресурсы в своей предметной области
ПК(У)-2	способностью проводить математическое моделирование процессов и объектов на базе стандартных пакетов автоматизированного проектирования и исследований
ПК(У)-3	готовностью к проведению физических экспериментов по заданной методике, составлению описания проводимых исследований и анализу результатов

ПК(У)-4	способностью использовать технические средства для измерения основных параметров объектов исследования, к подготовке данных для составления обзоров, отчетов и научных публикаций
ПК(У)-5	готовностью к составлению отчета по выполненному заданию, к участию во внедрении результатов исследований и разработок
ПК(У)-6	способностью использовать информационные технологии при разработке новых установок, материалов и приборов, к сбору и анализу исходных данных для проектирования приборов и установок
ПК(У)-7	способностью к расчету и проектированию деталей и узлов приборов и установок в соответствии с техническим заданием с использованием стандартных средств автоматизации проектирования
ПК(У)-8	готовностью к разработке проектной и рабочей технической документации, оформлению законченных проектно-конструкторских работ
ПК(У)-9	способностью к контролю соответствия разрабатываемых проектов и технической документации стандартам, техническим условиям, требованиям безопасности и другим нормативным документам
ПК(У)-10	готовностью к проведению предварительного технико-экономического обоснования проектных решений при разработке установок и приборов
ПК(У)-12	способностью к контролю за соблюдением технологической дисциплины и обслуживанию технологического оборудования
ПК(У)-13	способностью к организации метрологического обеспечения технологических процессов, к использованию типовых методов контроля качества выпускаемой продукции
ПК(У)-14	готовностью к эксплуатации современного физического оборудования и приборов, к освоению технологических процессов в ходе подготовки производства новых материалов, приборов, установок и систем
ПК(У)-15	способностью к монтажу, наладке, настройке, регулировке, испытанию и сдаче в эксплуатацию оборудования и программных средств
ПК(У)-17	способностью к оценке ядерной и радиационной безопасности, к оценке воздействия на окружающую среду, к контролю за соблюдением экологической безопасности, техники безопасности, норм и правил производственной санитарии, пожарной, радиационной и ядерной безопасности, норм охраны труда
ПК(У)-18	готовностью разрабатывать способы применения ядерно-энергетических, плазменных, лазерных, сверхвысокочастотных и мощных импульсных установок, электронных, нейтронных и протонных пучков, методов экспериментальной физики в решении технических, технологических и медицинских проблем
ПК(У)-20	способностью к составлению технической документации (графиков работ, инструкций, планов, смет, заявок на материалы, оборудование), а также установленной отчетности по утвержденным формам

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
 федеральное государственное автономное
 образовательное учреждение высшего образования
 «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ)

Школа _____ инженерная школа ядерных технологий
 Направление подготовки _____ 14.03.02 Ядерная физика и технологии
 Отделение школы _____ отделение ядерно-топливного цикла

УТВЕРЖДАЮ:
 Руководитель ООП
 _____ Бычков П.Н.
 (Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

бакалаврской работы

Студенту:

Группа	ФИО
0А7Б	Терентьевой Дарье Витальевне

Тема работы:

Особенности взаимодействия гелия и гелий-вакансионного комплекса с наноразмерными многослойными покрытиями цирконий/ниобий	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	29-47/с от 29.01.2021

Срок сдачи студентом выполненной работы:	08.06.2021
--	------------

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе	<ul style="list-style-type: none"> – Атомная и электронная структуры системы цирконий-гелий-вакансия. – Гелий и наноразмерное многослойное покрытие из чередующихся слоев циркония и ниобия.
Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов	<ul style="list-style-type: none"> – Обзор литературных источников; – Проведение оптимизацию атомной структуры и релаксацию кристаллической решетки чистого α-циркония и системы Zr-He при концентрациях атомов гелия в решетке циркония ~ 3 и 6 ат. %. – Расчет энергии внедрения атомов гелия в решетку циркония. – Вычисление плотности электронных состояний и распределения валентной электронной плотности чистого циркония и системы Zr-He при концентрациях атомов гелия в решетке циркония ~ 3 и 6 ат. %.

	<ul style="list-style-type: none"> – Проведение релаксации кристаллических решеток циркония и ниобия в присутствии атомов гелия и вакансий вблизи границы раздела между металлическими слоями Zr/Nb. – Расчет энергии образования гелий-вакансионного комплекса в ниобии и в цирконии во всех неэквивалентных положениях атома гелия вблизи границы раздела между металлическими слоями Zr/Nb. – Расчет энергии внедрения атома гелия в систему $Zr_{63}Nb_{40}He$ при расположении гелия в различных октаэдрических и тетраэдрических междоузлиях близи границы раздела между металлическими слоями Zr/Nb. – Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение; – Социальная ответственность; – Заключение.
Перечень графического материала	Презентация
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы	
Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Гасанов Магеррам Али оглы
Социальная ответственность	Передерин Юрий Владимирович

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	12.02.2021
---	------------

Задание выдал руководитель / консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Процессор ОЯТЦ	Яковлева ВалентинаСтаниславовна	д.т.н.		12.02.2021
Доцент ОЭФ	Святкин Леонид Александрович	к.ф.-м.н.		12.02.2021

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0А7Б	Терентьева Дарья Витальевна		12.02.2021

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»**

Студенту:

Группа	ФИО
0А7Б	Терентьевой Дарье Витальевне

Школа	ИЯТШ	Отделение	ОЯТЦ
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	Ядерная физика и технологии

Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:	
<p>1. <i>Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i></p> <p>2. <i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i></p> <p>3. <i>Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i></p>	<p><i>Работа с информацией, представленной в российских и иностранных научных публикациях, аналитических материалах, статических бюллетенях и изданиях, нормативно-правовых документах; анкетирование; опрос.</i></p>
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
<p>1. <i>Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения</i></p> <p>2. <i>Определение возможных альтернатив проведения научных исследований</i></p> <p>3. <i>Планирование процесса управления НИИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок</i></p> <p>4. <i>Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности</i></p>	<p><i>Проведение предпроектного анализа. Определение целевого рынка и проведение его сегментирования. Выполнение SWOT-анализа проекта</i></p> <p><i>Определение целей и ожиданий, требований проекта. Определение заинтересованных сторон и их ожиданий.</i></p> <p><i>Составление календарного плана проекта. Определение бюджета НИИ</i></p> <p><i>Проведение оценки экономической эффективности исследования получения полиметилметакрилата суспензионным способом</i></p>
Перечень графического материала:	
<p>1. <i>Оценка конкурентоспособности технических решений</i></p> <p>2. <i>Матрица SWOT</i></p> <p>3. <i>График проведения НИИ</i></p> <p>4. <i>Определение бюджета НИИ</i></p> <p>5. <i>Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИИ</i></p>	

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	12.02.2021
--	------------

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ОСГН	Гасанов Магеррам Али оглы	д.э.н.		12.02.2021

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0А7Б	Терентьева Дарья Витальевна		12.02.2021

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»**

Студенту:

Группа	ФИО
0А7Б	Герентьевой Дарье Витальевне

Школа	ИЯТШ	Отделение (НОЦ)	ОЯТЦ
Уровень образования	бакалавриат	Направление/специальность	14.03.02 Ядерные физика и технологии/ Физика атомного ядра и частиц

Тема ВКР:

Особенности взаимодействия гелия и гелий-вакансионного комплекса с наноразмерными многослойными покрытиями цирконий/ниобий	
Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	Атомная и электронная структура системы цирконий-гелий-вакансия и наноразмерное многослойное покрытие из чередующихся слоев циркония и ниобия.
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности: – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.	– ГОСТ 12.0.003-2015 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Опасные и вредные производственные факторы. Классификация. – ГОСТ 30494-96 Здания жилые и общественные. Параметры микроклимата в помещениях. – ГОСТ 12.1.003-83 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Шум. Общие требования безопасности (с Изменением N 1) – СНиП 23-05-95* Естественное и искусственное освещение (с Изменением N 1) – СП 12.13130.2009. Определение категорий помещений, зданий и наружных установок по взрывопожарной и пожарной опасности (в ред. изм. № 1, утв. приказом МЧС России от 09.12.2010 № 643). – ГОСТ 12.1.004-91 Система стандартов безопасности труда. Пожарная безопасность. Общие требования. – ГОСТ 12.1.009-76 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Электробезопасность. Термины и определения

	<ul style="list-style-type: none"> – ГОСТ Р 12.1.019-2017 ССБТ Электробезопасность – ГОСТ Р МЭК 61140-2000 Защита от поражения электрическим током. Общие положения по безопасности, обеспечиваемой электрооборудованием и электроустановками в их взаимосвязи. – СанПиН 2.6.1.2523-09 Нормы радиационной безопасности НРБ-99/2009 – СанПиН 2.2.4.548-96 Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений – ГОСТ 32548-2013 Вентиляция зданий. Воздухораспределительные устройства. Общие технические условия. – СНиП 41-01-2003 Отопление, вентиляция и кондиционирование – ГОСТ 12.1.029-80 Средства и методы защиты от шума. – ГОСТ 12.4.026-76* Система стандартов безопасности труда. Цвета сигнальные и знаки безопасности – СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 О введении в действие санитарно-эпидемиологических правил и нормативов – ГОСТ 12.1.006-84 Электромагнитные поля радиочастот. Допустимые уровни на рабочих местах и требования к проведению контроля – ГОСТ Р 22.0.02-2016 Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Термины и определения.
<p>2. Производственная безопасность: 2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов 2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия</p>	<ul style="list-style-type: none"> – Микроклимат – возможное отклонение в показателе микроклимата – Шум – возможное превышение уровня шума – Освещенность рабочей зоны – возможная отклонение от санитарных норм – Пожароопасность – возможное несоответствие нормам пожарной безопасности – Электробезопасность – возможное несоответствие нормам электробезопасности – Радиационная безопасность – возможное несоответствие нормам радиационной безопасности
<p>3. Экологическая безопасность:</p>	<ul style="list-style-type: none"> – Данное исследование не наносит вреда окружающей среде, но может быть нанесен вред в процессе

	создания вычислительного оборудования.
4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:	<ul style="list-style-type: none"> – Возникновение пожара – Удар электрическим током – Падение с высоты собственного роста – Падение с лестницы – Наиболее типичная ЧС: падение с высоты собственного роста

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	22.04.2021
---	------------

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОЯТЦ ИЯТШ	Передерин Ю.В.	к.т.н.		22.04.2021

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0А7Б	Терентьева Дарья Витальевна		22.04.2021

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
 федеральное государственное автономное
 образовательное учреждение высшего образования
 «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ)

Школа _____ инженерная школа ядерных технологий
 Направление подготовки _____ 14.03.02 Ядерная физика и технологии
 Уровень образования _____ бакалавриат
 Отделение школы _____ отделение ядерно-топливного цикла
 Период выполнения _____ весенний семестр 2020 /2021 учебного года

Форма представления работы:

бакалаврская работа

КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН выполнения выпускной квалификационной работы

Срок сдачи студентом выполненной работы:	08.06.2021
--	------------

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
12.02.2021	Обзор литературных источников	10
26.02.2021	Изучение основных приближений и методов расчета из первых принципов	15
26.03.2021	Исследование атомной и электронной структур системы цирконий-гелий-вакансия	10
12.05.2021	Исследование взаимодействия гелия и гелий-вакансионного комплекса с границей раздела между металлическими слоями цирконий/ниобий	10
21.05.2021	Анализ результатов	15
25.05.2021	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	15
25.05.2021	Социальная ответственность	15
26.05.2021	Заключение	10

СОСТАВИЛ:

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ОЯТЦ	Яковлева В.С.	д.т.н.		12.02.2021

Консультант

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОЭФ	Святкин Л.А.	к.ф.-м.н.		12.02.2021

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОЯТЦ	Бычков П.Н.	К.Т.Н.		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 110 с., 16 рис., 24 табл., 84 источника.

Ключевые слова: расчеты из первых принципов, вакансии, гелий, цирконий, многослойные покрытия, энергия внедрения, плотность электронных состояний.

Объектом исследования является(ются): атомная и электронная структура системы цирконий-гелий-вакансия и наноразмерное многослойное покрытие из чередующихся слоев циркония и ниобия.

Цель работы – исследовать влияние вакансии и атома гелия на атомную и электронную структуру α -циркония и выявление влияния взаимодействия гелий-вакансионного комплекса с границей раздела между металлическими слоями Zr/Nb.

В процессе исследования проводились: выбор параметров расчетов, оптимизация атомной структуры и релаксация решетки циркония и систем Zr–He, Zr–He–vac, расчет электронного строения системы, расчет энергий внедрения гелия в решетку циркония и в область вблизи границы раздела многослойного покрытия цирконий/ниобий.

В результате исследования выявлено смещение атома гелия из центра вакансии в область с меньшей гибридизацией $2s$ электронов гелия с $4d$ электронами циркония. Также установлено, что энергии образования вакансии и гелий-вакансионных комплексов уменьшаются при приближении к границе раздела между металлическими слоями цирконий/ниобий.

Основные конструктивные, технологические и технико-эксплуатационные характеристики: расчетные суперячейки системы $Zr_{36}Nb_{36}$, состоящая из 4 атомных слоев циркония и 9 атомных слоев ниобия, и системы $Zr_{63}Nb_{40}$, состоящая из 9 атомных слоев циркония и 10 атомных слоев ниобия, с одним атомом водорода.

Степень внедрения: результаты представлены на международных научных конференциях «Перспективы развития фундаментальных наук» и

«Международной Тулиновской конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами».

Область применения: результаты исследований могут быть использованы для разработки материалов ядерной энергетики в качестве первичной информации при интерпретации результатов экспериментальных исследований физических и механических свойств защитных покрытий.

Экономическая эффективность/значимость работы заключается в выявлении особенностей взаимодействия примеси гелия с наноразмерными многослойными покрытиями, что позволит изготавливать более эффективные защитные покрытия.

В будущем планируется проведение расчетов их первых принципов профилей миграционных барьеров для атома гелия по решетке циркония и в наноразмерном многослойном покрытии Zr/Nb.

Оглавление

Введение	18
1 Гелий и вакансии в металлах	21
1.1 Вакансии в металлах	21
1.2 Поведение атомов гелия в материалах.....	23
1.3 Взаимодействие комплекса гелий-вакансия с материалами.....	26
1.4 Наноразмерные многослойные металлические покрытия	28
2 Основные приближения и методы расчета из первых принципов	34
2.1 Постановка задачи.....	34
2.2 Адиабатическое приближение.....	35
2.3 Зонное приближение	35
2.4 Одноэлектронное приближение. Теория функционала электронной плотности.....	37
2.5 Решение уравнения Кона-Шема.....	41
2.6 Схема самосогласованного расчета	42
2.7 Метод псевдопотенциала	44
2.8 Связывающие и антисвязывающие состояния	45
3 Взаимодействие гелий-вакансионного комплекса с цирконием	48
3.1 Метод и детали расчета.....	48
3.2 Энергия внедрения атомов гелия в решетку циркония и энергия образования вакансии	49
3.3 Распределение валентной электронной плотности	51
3.4 Плотность электронных состояний.....	53
4 Взаимодействие гелия и гелий-вакансионного комплекса с границей раздела между металлическими слоями цирконий/ниобий	57
4.1 Метод и детали расчета.....	57

4.2 Энергия внедрения атома гелия в междуузлия.....	59
4.3 Энергии образования вакансии и гелий-вакансионного комплекса.....	61
5 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.....	63
5.1 Потенциальные потребители результатов исследования.....	63
5.2 Анализ конкурентных технических решений.....	63
5.3 SWOT-анализ.....	66
5.4 Определение возможных альтернатив проведения научных исследований	69
5.5 Планирование научно-исследовательских работ	69
5.5.1 Структура работ в рамках научного исследования	69
5.5.2 Определение трудоемкости выполнения работ.....	70
5.5.3. Разработка графика проведения научного исследования	71
5.6 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)	75
5.6.1 Расчет материальных затрат НТИ	75
5.6.2 Расчет затрат на оборудование для научно-экспериментальных работ	76
5.6.3 Основная заработная плата исполнителей темы	76
5.6.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления).....	78
5.6.5 Накладные расходы.....	79
5.6.6. Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта	80
5.7 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	80
6 Социальная ответственность	83
6.1 Оценка вредных и опасных факторов	83
6.1.1 Микроклимат	84

6.1.2 Шум.....	86
6.1.3 Освещение	88
6.1.4 Электромагнитные поля.....	91
6.1.5 Пожаробезопасность	92
6.1.6 Электробезопасность	94
6.1.7 Радиационная безопасность.....	94
6.2 Аварийные ситуации.....	96
Заключение	99
Список использованных источников	102

Введение

Важное значение для эффективной работы современных ядерно-энергетических систем имеют конструкционные материалы, способные выдерживать высокие дозы облучения, чьи механические свойства активно изучаются в последнее десятилетие.

Циркониевые сплавы – широко распространенные конструкционные материалы, из которых изготавливают важнейшие элементы активной зоны ядерных реакторов. Это связано с их низким коэффициентом сечения захвата тепловых нейтронов, высокой температурой плавления, хорошей коррозионной стойкостью и прочностными характеристиками [1].

При комнатной температуре цирконий достаточно устойчив к воздействию на него различных газов (O, He, H, N и др.), однако при высоких температурах он начинает легко с ними взаимодействовать. Так, было обнаружено, что предел прочности и предел текучести чистого циркония при температурах 400 °С и 20 °С уменьшаются в два раза. Вследствие низких механических свойств чистого циркония при высоких температурах, а также коррозионной нестабильности, чистый цирконий не может быть использован в качестве конструкционного материала для изготовления оболочек тепловыделяющих элементов (ТВЭЛ). На данный момент создаются сплавы на основе циркония, в которых важной задачей легирующих элементов является повышение механических свойств данного материала при использовании его в высокотемпературных условиях. Таковыми элементами для циркония являются ниобий, олово, хром, молибден, титан, а в качестве материалов для оболочек ТВЭЛов выступает сплав циркония с содержанием 1% и 2,5% ниобия. Еще в СССР были проведены испытания в реакторе ВК–50 при температурах 280–350°С (продолжительность испытания составила 17000 ч), в ходе которых наблюдалось упрочнение сплава на 70%, и снижение пластичности на 60% [2].

Эффекты макроскопического радиационного повреждения структурных компонентов ядерных реакторов, являются следствием двух принципиально разных типов взаимодействий между частицами при облучении ими атомов

материала: атомные смещения, приводящие к образованию вакансий, и образованию дефектов решетки междоузельного типа (He, H, V, Li, Mn), образующихся в результате ядерных трансмутаций.

Наиболее важными продуктами ядерных реакций трансмутации являются газообразные гелий и водород. Атомы гелия образуются в материалах в результате реакций трансмутации (n, α) [3] и имеют тенденцию накапливаться в вакансиях и междоузлиях с образованием пузырьков гелия, что приводит к изменению макроскопических свойств облучаемого материала: потере пластичности, низко- и высокотемпературному радиационному охрупчиванию, радиационной ползучести, росту, набуханию [1-8].

Все вышеописанные следствия радиационного повреждения значительно ухудшают эксплуатационные свойства металлов и сплавов [2]. Для понимания данных эффектов, возникающих из-за накопления гелия, необходимо рассматривать данные проблемы на микроскопическом уровне (электронная конфигурация и положение атомов гелия в металлической кристаллической решетке и энергетические характеристики, соответствующие этим положениям), заканчивая изучением механизмов диффузии, кинетики зарождения и роста пузырьков с утверждением корреляции между развитием микроструктуры и изменением макроскопических свойств материала.

При разработке новых материалов главной задачей является достижение минимального или допустимого изменения этих характеристик с целью обеспечения требуемой надежности и долговечности элементов конструкции [2]. Для этого интерес представляет изучение многослойных покрытий гексагонально-кубических систем. Вследствие большого структурного несоответствия решеток границы разделов являются стоком большого количества дефектов, а также препятствием движению дислокаций при деформации. Примером ГПУ/ОЦК систем являются системы Ta/Ti, Co/W, Zr/Nb и т.д [8–14].

Чтобы исследовать поведение примеси в решетке, используют теоретические расчеты, в том числе и расчеты из первых принципов. Под этими

расчетами подразумеваются расчеты без эмпирических предположений с использованием ряда упрощений и приближений, которые необходимы для нахождения различных характеристик материалов.

Целью настоящего исследования является исследование влияния вакансии и атома гелия на атомную и электронную структуру α -циркония и выявление влияния взаимодействия гелий-вакансионного комплекса с границей раздела между металлическими слоями Zr/Nb.

Для достижения данной цели были поставлены следующие задачи:

1. Изучить современное состояние вопроса об особенностях взаимодействия гелия и гелий-вакансионного комплекса с цирконием и ниобием.

2. Ознакомиться с теорией функционала электронной плотности и метода псевдопотенциала.

3. Вычислить плотность электронных состояний и распределение валентной электронной плотности чистого циркония и системы Zr–He при концентрациях атомов гелия и вакансий в решетке циркония ~ 3 и 6 ат.%.

4. Провести оптимизацию значений параметров кристаллической решетки и релаксацию положений атомов чистых циркония и ниобия, твердого раствора Zr–He при концентрации гелия и вакансий ~ 3 и 6 ат.% и вблизи границы раздела между металлическими слоями Zr/Nb.

5. Рассчитать энергии внедрения гелия и образования гелий-вакансионного комплекса в цирконии и ниобии при концентрации гелия и вакансий ~ 3 и 6 ат.% и вблизи границы раздела между металлическими слоями Zr/Nb.

6. Провести анализ результатов и выявить влияние границы раздела между наноразмерными металлическими слоями Zr/Nb на энергии внедрения гелия и образования гелий-вакансионного комплекса в ниобии и цирконии.

1 Гелий и вакансии в металлах

1.1 Вакансии в металлах

Поведение атомных дефектов оказывает большое влияние на механические и термические свойства материалов в экстремальных условиях эксплуатации, таких как облучение [15, 16]. В частности, вакансии не только сильно влияют на диффузионные свойства межузельных атомов и других дефектов (например, растворенных атомов), но также являются источником зарождения петель/пустот. Скопление вакансий в виде пустот или петель может привести к ухудшению механических и термических свойств материалов, таких как набухание, охрупчивание, упрочнение и снижение теплопроводности. Следовательно, детальное знание образования и связывающих свойств вакансионных дефектов неизбежно для понимания атомистического и макроскопического поведения ядерных материалов [17].

Ряд работ посвящен исследованию влияния вакансий на механические свойства различных материалов [17-20].

Так, в статье [17] было рассмотрено поведение вакансий в решетках различных материалах. Методом псевдопотенциала были рассчитаны энергии образования моновакансии в цирконии и ниобии, которые составили 1,94 эВ и 2,71 эВ, соответственно. Результаты расчетов, представленные авторами, хорошо согласуются с экспериментальными данными. Также были рассчитаны энергии образования дивакансии/тривакансии для циркония (3,72/3,81 эВ) и ниобия (5,10/4,97 эВ). Чтобы понять устойчивость кластеризации вакансий в металлах, авторы работы [17] оценили энергии связи вакансий с размерами кластеров для металлов с ГПУ и другими структурами (см. рисунок 1.1). Таким образом, с увеличением числа вакансий в кластере с нуля, энергия связи резко увеличивается. При достижении количества вакансий в кластере порядка двадцати, энергия связи начинает очень медленно возрастать в дальнейшем с увеличением числа вакансий в кластере. В работе [17] также рассматривалась зависимость энергии растворения вакансии от температуры плавления материала. Отмечено, что при высоких температурах в условиях облучения,

меньшая энергия растворения вакансий означает более легкую диссоциацию вакансионных кластеров и, следовательно, более высокую скорость рекомбинации междоузельных вакансий, что указывает на лучшие характеристики материала.

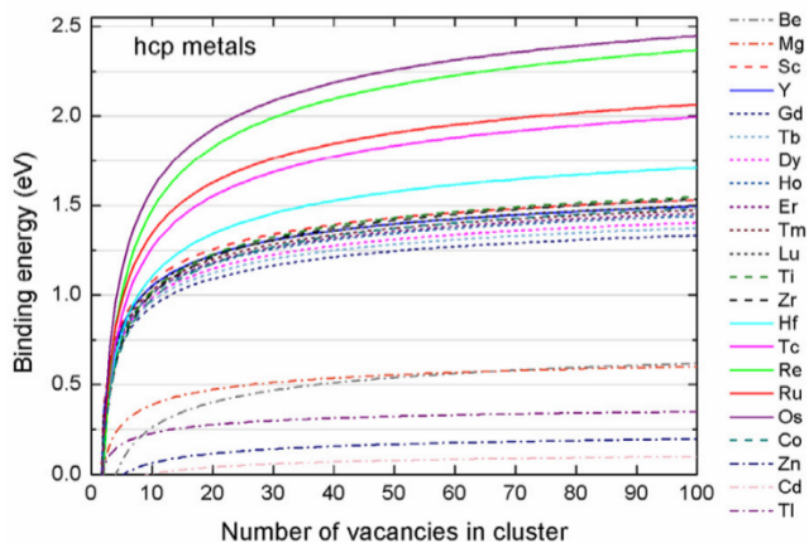


Рисунок 1.1 – Зависимость энергии связи вакансии и вакансионных кластеров от количества вакансий в кластере в различных материалах [17]

С помощью теоретических расчетов, используя теорию функционала электронной плотности, авторами работы [18] было исследовано влияние вакансионных кластеров на механические свойства циркония. Согласно полученным результатам, наиболее стабильными являются дивакансионные и тривакансионные кластеры, вакансии в которых находятся наиболее близко друг к другу. Установлено, что присутствие вакансии в материале понижает объемный модуль упругости, но понижает значения модуля сдвига и модуля Юнга. Также было выявлено, что присутствие вакансии в решетке материала приводит к уменьшению пластичности и увеличению твердости материала. Однако при достижении концентрации вакансий порядка 0,25%, значения модуля сдвига и модуля Юнга начинают монотонно уменьшаться, а коэффициент Пуассона – возрастать, как показано на рисунке 1.2, то есть механические свойства циркония при достаточно большой концентрации вакансий частично восстанавливаются.

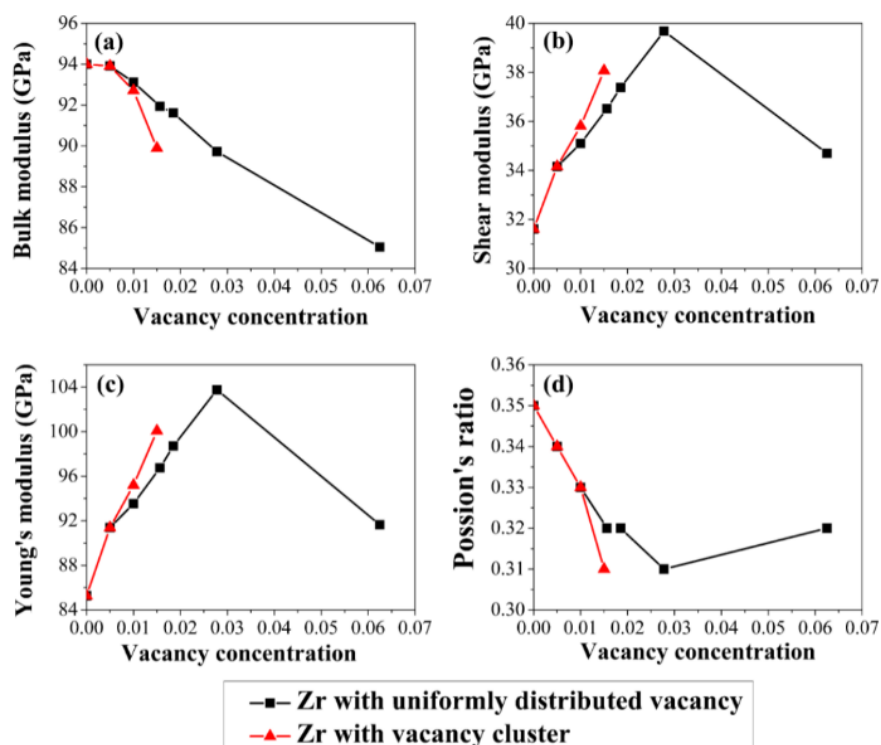


Рисунок 1.2 – Зависимость объемного модуля упругости (а), модуля сдвига (б), модуля Юнга (в) и коэффициента Пуассона (г) от концентрации вакансий в материале. Черной линии соответствует случаю равномерного распределения вакансий в Zr, красной – присутствие вакансионных кластеров в Zr [18]

1.2 Поведение атомов гелия в материалах

К настоящему времени накоплен обширный экспериментальный материал в области исследования системы металл-гелий и металл-гелий-водород [21-31].

Решающими параметрами, определяющими поведение гелия в металлах, являются энергии атомов He в разных позициях в идеальной и неидеальной кристаллических решетках. Зная эти энергии, можно судить о растворимости, миграционных путях, захвате атомов гелия дефектами, а также детектировать зарождение и рост пузырьков. В работе [21] показано, что наибольшей энергией связи обладают атомы гелия, расположенные в междоузлия и в вакансиях кристаллической решетки. Миграция атомов гелия происходит скачками через междоузлия, энергия активация которых очень мала (0,2 эВ для вольфрама, 0,35 эВ для никеля). Когда гелий связан с вакансией, он может продолжать миграцию по междоузлию только тогда, когда преодолевает барьер диссоциации [22].

Свободная междоузельная миграция будет наблюдаться только в решетках, свободных от вакансий и других ловушек для гелия [21].

При облучении материала с непрерывным образованием гелия наиболее важными ловушками для образовавшихся атомов гелия являются ранее сформированные пузырьки гелия. Из-за чрезвычайно низкой растворимости гелия, вскоре достигаются высокие уровни насыщения, которые неизбежно приводят к образованию кластеров или пузырьков He [21].

Согласно результатам работы [25], в случае внедрения ионов гелия в никель, при комнатной температуре, атомы гелия начинают скапливаться в пузырьки при температуре около 1173 К, а атомы гелия не могут покинуть вакансии, если температура ниже 573 К. Следовательно, вакансии, захваченные атомами гелия, вообще не могли мигрировать во время отжига, и рост вакансионных кластеров не наблюдался.

В работе [29] установлено, что атомы гелия, расположенные в окта- и тетра- междоузлиях, имеют очень низкую энергию миграции и притягиваются друг к другу, что позволяет предположить, что пузырьки гелия могут образовываться при низких температурах в решетках, изначально свободных от вакансий.

Вследствие низкой растворимости атомов гелия, важно исследовать места образования пузырьков гелия на границах зерен, поскольку образование пузырьков гелия там может вызвать их охрупчивание. Оказалось, что большая часть пузырьков гелия образовалась на зернограницных дислокациях. Причем местами их образования были узлы дислокаций и оба конца зернограницных дислокаций, что было таким же, как и для дислокаций внутри зерна. В результате было подтверждено, что пузырьки гелия не образуются случайно, даже на границах зерен, а образуются преимущественно в узлах дислокации, где свободная энергия пузырьков гелия будет небольшой [27].

В работе [30] была исследована миграция атомов гелия в α -Fe, нержавеющей стали, Ni, α -Zr в зависимости от температуры. В мишенях из никеля и нержавеющей стали наблюдалась очень небольшая миграция гелия

вплоть до максимальной температуры испытания 973 К. В α -железе гелий становился подвижным при температурах выше 773 К, а в цирконии значительные перемещения наблюдались при 700 К. В α -железе и α -Zr, которые обладают большей устойчивостью к набуханию и охрупчиванию, гелию мигрировать легче.

Результаты, полученные экспериментально, характеризуются большим разбросом значений, погрешностью измерений, а также исходя из экспериментальных результатов достаточно сложно найти причину существования какого-либо явления. Поэтому экспериментальным работам достаточно часто не хватает теоретического обоснования и подтверждения. Среди множества теоретических исследований можно выделить расчеты из первых принципов. Исследовать даже простейшие системы металл с одним атомом примеси стало возможным с появлением мощных вычислительных машин, так как сам процесс расчета такой системы является достаточно трудоемким.

К настоящему времени опубликован ряд теоретических работ [32-36], посвященных теоретическим расчетам систем металл-гелий. Были рассмотрены такие металлы, как Zr, Fe, Cr, Nb, W, Cu, Ag, Pd, Ni, Er.

В работе [33] была исследована энергетика взаимодействия атома гелия в ОЦК решетках металлов Fe, Cr, Mo, W и ГЦК решетках металлов Ni, Cu, Ag, Pd. Для всех металлов показано, что наименьшей энергией образования системы металл-гелий являются случаи, когда атом гелия располагается в вакансии. В работе также заострено внимание на том, что положение атома гелия в тетраэдрическом междоузлии ОЦК структуры Fe является энергетически наиболее выгодным, нежели в октаэдрическом. Сделано предположение, что данный результат связан с магнитными свойствами железа. В дальнейшем в статье произведен расчет ОЦК структуры Fe с положениями гелия в окта- и тетраэдрических междоузлиях с учетом спин-поляризационного эффекта и без него. Выяснилось, что энергетически наиболее стабильными системами с положениями гелия в обоих междоузлиях являются с учетом спин-

поляризационных эффектов. Также для обоснования данного наблюдения в статье приведены плотности электронных состояний (ПЭС) систем железо-гелий в тетраэдрическом и октаэдрическом междоузлиях. Взаимодействие гелия с соседним атомом железа приводит к меньшему значению ПЭС на уровне Ферми, когда гелий находится в тетра- междоузлии, что символизирует более сильную связь атома гелия с ближайшим атомом железа. Также качественное сходство ПЭС Fe *d*- и He *p*- отражает сильную гибридизацию между этими состояниями без магнетизма, в отличие от предыдущего исследования, где магнитные свойства приводят к сильной гибридизации между Fe *d*- и He *p*-состояния, что приводит к тому, что тетраэдрическое междоузлие He становится более стабильным в ОЦК Fe [33].

1.3 Взаимодействие комплекса гелий-вакансия с материалами

В работах [15, 37-39] было исследовано поведение атомов гелия в различных материалах. Известно, что, если атомы гелия попали в материал, то они захватываются вакансиями, что приводит к практически невозможному самопроизвольному возврату атомов гелия в металлическую матрицу. Рассмотренные в статьях процессы миграции атомов гелия показывают, что атом He внутри вакансии очень неподвижен по сравнению со случаями, соответствующими миграции атомов гелия из одних междоузлий в другие.

Авторами работы [15] были исследованы процессы миграции атома гелия в Cu и W в различных конфигурациях. Кроме того, есть указание на то, как атом He может мигрировать вместе с вакансией, меняя свое положение с первым соседним атомом металла. Это конкретное движение влечет за собой высокие затраты энергии для системы: 2,54 эВ для Cu, 4,83 эВ для W. Механизм такого рода миграции таков, что атом He подвергается десорбции в междоузельное положение, в то время как вакансия мигрирует.

Также авторами работы [15] был рассмотрен процесс миграции отдельно *n*-вакансий и *n*-вакансий с атомом гелия. С увеличением количества вакансий энергетический барьер пустых *n*-вакансий (без атомов He) уменьшается, а миграция комплекса (*n*-вакансий + He) не имеет четкой зависимости.

Энергетические барьеры значительно выше, чем значения, полученные для пустых *n*-вакансий, почти во всех случаях, что ясно показывает, что включение атома He стабилизирует *n*-вакансию внутри кристаллов в обоих металлах.

В работе [37] было произведено энергетическое рассмотрение захвата конечного числа атомов гелия моновакансией и 9-ти атомным вакансионным кластером, образованных в ОЦК ванадии (см. рисунок 1.3). Из анализа данных на рисунке 1.3 следует, что энергия захвата атомов гелия вакансиями увеличивается по мере увеличения количества примесных атомов гелия в решетке ванадия. В предельном рассмотренном случае, когда 18 атомов гелия располагаются возле моновакансии, энергия захвата составляет -0,12 эВ, что является энергетически наиболее выгодным по сравнению со значением энергии растворения гелия в тетраэдрическом междоузлии ванадия.

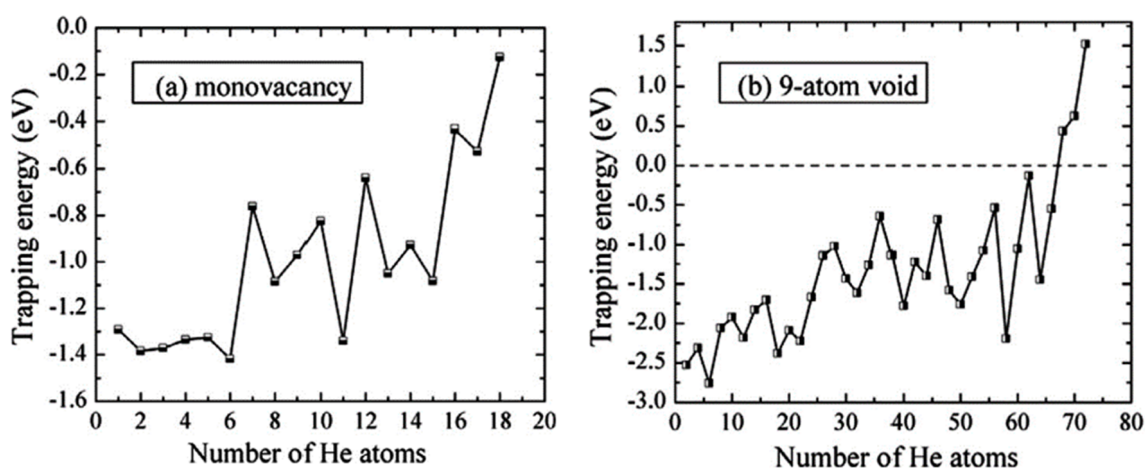


Рисунок 1.3 – Зависимость энергии захвата атомов гелия (а) моновакансией и (б) 9-ти атомным вакансионным кластером от концентрации атомов гелия в решетке. Пунктирная линия на рисунке соответствует энергии растворения одного атома гелия в тетраэдрическом междоузлии, расположенном вдали от вакансии [37]

Другими словами, одна моновакансия может вместить не менее восемнадцати примесей He. Таким образом, вероятно, что вакансионные дефекты обеспечивают места зарождения для образования пузырьков He.

Отмечено, что отрицательная энергия захвата указывает на экзотермический процесс диффузии междоузельного атома гелия в вакансию, а

положительная – на эндотермическую. Согласно вычисленным энергиям захвата, в моновакансии и в комплексе из 9 вакансий могут находиться около 18 и 66 атомов He, соответственно. Таким образом, сильное отталкивание He–He и He–ванадий приводит к высокому внутреннему давлению (до 7,5 ГПа в моновакансии и 20 ГПа в комплексе) в решетке ванадия [37].

Ряд теоретических исследований [38-39] посвящен растворению гелия в решетке железа. Авторами работы [38] отмечено, что гелий, находясь в междоузлиях, искажает решетку материала значительно сильнее, чем если бы он располагался в вакансии, что свидетельствует о короткодействующем взаимодействии между атомом гелия и атомами железа. В работе [39] были рассчитаны энергии растворения атома гелия в вакансии, тетра- и октаэдрических междоузлиях решетки α -Fe. Результаты расчетов показали, что атому гелия энергетически наиболее выгодно располагаться именно в вакансии, нежели в междоузлиях.

1.4 Наноразмерные многослойные металлические покрытия

Облучение конструкционных материалов приводит к возникновению вакансий, которые коагулируют в кластеры, междоузлий, дислокаций и прочих дефектов, что приводит к радиационному охрупчиванию, набуханию материала, появлению радиационной ползучести и радиационному росту. Возникает необходимость в уменьшении влияния дефектов на свойства конструкционных материалов, тем самым повысив устойчивость к радиационным повреждениям.

Разрабатываются различные способы достижения данной задачи. Например, в работе [40] указано, что хотя и границы зерен служат мощным стоком скопления дефектов, это приводит к повышенной радиационной устойчивости материала. Однако причины повышения радиационной устойчивости до сих пор не являются детально изученными. Используя три метода атомистического моделирования, авторы работы [40] исследовали взаимодействие дефектов с границей зерен в меди во временном диапазоне от пикосекунд до микросекунд. Этими авторами выявлено, что границы зерна

имеют неожиданный эффект «загрузки-разгрузки». После облучения междоузельные атомы скапливаются на границе зерна. Эта граница действует как источник, способный испускать эти частицы, при этом цепочки до пяти атомов проталкиваются от границы зерна к вакансиям в объеме материала, причем каждый атом перемещается на расстояние одного ближайшего соседа. В этом процессе вакансии не перемещаются. Этот неожиданный механизм рекомбинации имеет гораздо более низкий энергетический барьер, чем обычная диффузия вакансий, и эффективен для уничтожения неподвижных вакансий, что приводит к самовосстановлению радиационных повреждений.

Одним из вариантов повышения радиационной стойкости материалов является разработка нанокристаллических покрытий. При производстве покрытия используются металлы с различными кристаллическими структурами и параметрами решетки, тем самым можно получить когерентную или некогерентную границу раздела. Важно отметить, что система именно с некогерентной границей раздела, обладает свойством скапливать дефекты в область интерфейса.

Имеется большое количество систем наноразмерных металлических покрытий с разными структурами решеток:

- ГПУ/ГПУ: Mg/Nb [11], Mg/Ti [13],
- ГЦК/ОЦК: Cu/Nb [43], Cu/W, Cu/Fe [44],
- ГПУ/ГЦК: Cu/Zr [14],
- ГПУ/ОЦК: Co/W, Ti/Ta, Co/Mo [12], Zr/Nb [9, 10, 45-48].

С помощью современных методов нанесения покрытий, создаются покрытия, толщина которых может быть равной единицам нанометров, тем самым есть возможность изучения влияния толщины покрытия на радиационную устойчивость материалов. Авторами работы [41] показано, что в системе Cu/V со слоями толщиной 2,5 нм наблюдается повышенная радиационная стойкость: меньшее упрочнение и меньшая плотность гелиевых пузырьков.

В работе [42], используя реакционно-диффузную модель, показано, что скрытые внутри материала интерфейсы могут одновременно уменьшать концентрацию и потоки радиационно-индуцированных дефектов. Это значит, что границы раздела могут быть использованы для контроля таких эффектов, как радиационное упрочнение и распухание.

Исходя из данных, представленных на рисунке 1.4, видно, что дефекты, которые мигрируют к границе раздела, эффективно захватываются ею и довольно быстро претерпевают рекомбинацию.

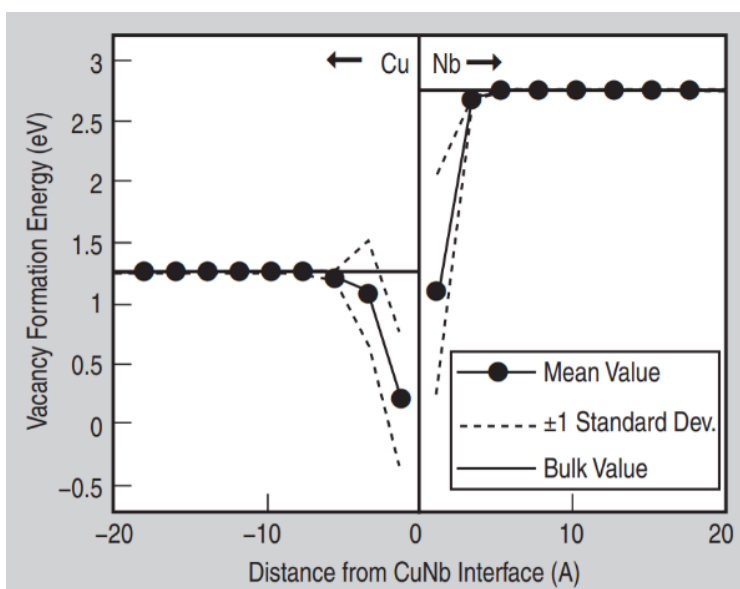


Рисунок 1.4 – График зависимости энергии образования вакансии от расстояния от границы раздела Cu/Nb [43]

Исследования изменения плотности и размеров кластеров дефектов проводились в работе [44] на облученном монолитном образце Cu, слоях Cu многослойных образцов Cu/Fe толщиной 100 нм и Cu/Fe толщиной 5 нм. Показано, что плотность дефектов в чистом Cu значительно выше, чем в многослойном образце Cu/Fe. Также отмечено, что плотность дефектов в Cu/Fe толщиной 5 нм гораздо меньше, чем в том же образце толщиной 100 нм.

Ряд преимуществ по сравнению с другими системами ГПУ/ОЦК имеет покрытие из циркония и ниобия. Эти материалы являются конструкционными материалами, используемыми в ядерной энергетике (например, сплавы Э110 и Э125), имеющими более высокую коррозионную стойкость и температуру

плавления. структурами, так как у данной системы присутствует некогерентная граница раздела, которая является поглотителем точечных дефектов.

Работа [45] посвящена измерению механических свойств металлических покрытий Zr/Nb в зависимости от толщин бинарного слоя ($\lambda = 10; 30; 60$ нм). Установлено, что при уменьшении λ с 60 до 30 нм предел текучести практически не изменяется. Иная ситуация складывается при уменьшении λ с 30 до 10 нм, и предел текучести уменьшается с 1,97 ГПа до 1,79 ГПа. Также отмечено, что с увеличением λ с 30 до 60 наблюдается уменьшение значения модуля Юнга с 108,81 ГПа до 97,37 ГПа. Объясняется это наличием аморфных областей на границах раздела при $\lambda = 10$ нм. В работе [45, 46] с помощью моделирования молекулярной динамики показали, что 8% атомов Nb внутри слоя Zr или 20% атомов Zr внутри слоя Nb достаточно для аморфизации слоя при комнатной температуре. Эти аморфные области действуют как сток для дислокаций, что приводит к более низкому пределу текучести и, следовательно, более низким значениям твердости покрытий.

В работе [48] было произведено теоретическое исследование механических свойств и взаимодействия вакансия-интерфейс-гелий в многослойном композите Zr/Nb. Авторы представляют распределение плотности заряда в данной системе (рисунок 1.5). Сравнение плотности заряда на границе раздела между случаями, когда части Nb и Zr разделены и сведены вместе, показывает, что некоторые заряды вблизи поверхностных атомов движутся к центру границы раздела (от области от синего до красного), как показано на рисунке 1.5 (а). Красные области в основном находятся между ближайшими атомами противоположных поверхностей, что указывает на образование связи между этими атомами. Это видно на рисунке 1.5 (b), где черные стрелки указывают расположение атомов, лежащих в поперечном сечении на рисунке 1.5 (а).

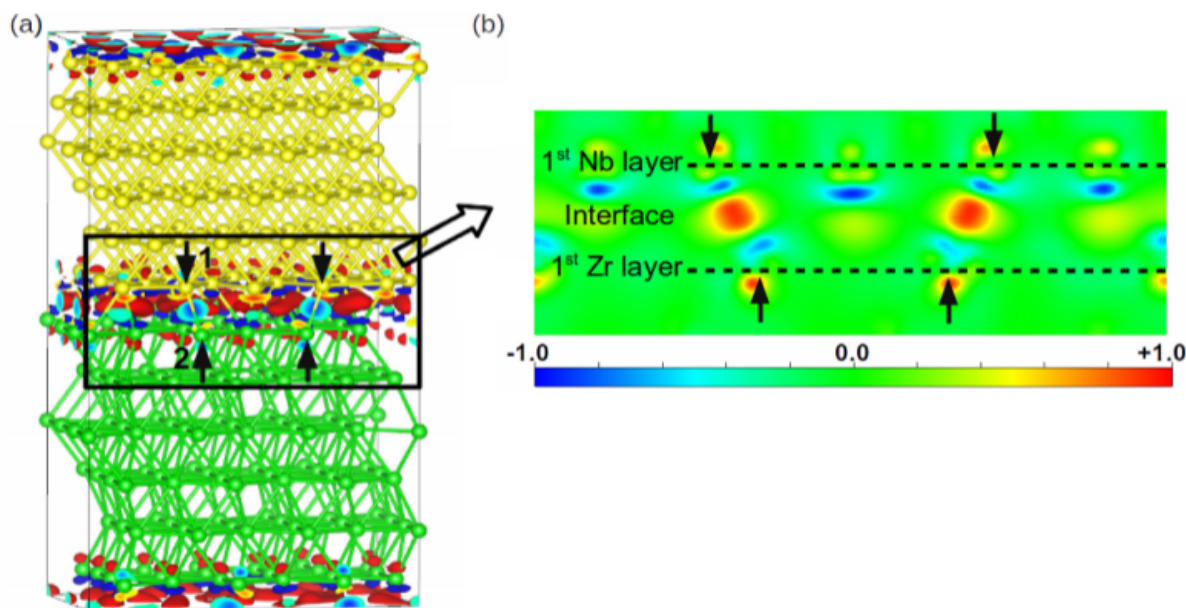


Рисунок 1.5 – а) Профиль плотности заряда. Зеленые и желтые сферы представляют атомы Zr и Nb, соответственно. б) Двухмерный график плотности заряда для поперечного сечения, показанный в (а) прямоугольником. Черные стрелки в (а) и (б) указывают положение атомов, которые находятся на поперечном разрезе [48]

По результатам расчетов, проделанных в работе, установлено, что наименьшая энергия образования вакансии в 0,88 эВ достигается, когда вакансия образуется в первом слое Zr. Со стороны первого слоя ниобия эта энергия принимает значение 1,7 эВ. В первой конфигурации атом Nb, находящийся с другой стороны, немного перемещается вниз, в то время как во второй конфигурации атом Zr располагается гораздо ближе к вакансии, практически заполняя ее. Когда вакансия создается во втором слое (для обеих сторон), чтобы минимизировать энергию, атом из первого слоя перемещается, чтобы заполнить его, оставляя вакансию в первом слое. Таким образом, даже при температуре 0К наблюдается миграция дефектов к границе раздела. При температуре работы реактора у вакансий будет достаточно энергии, чтобы преодолеть энергетические барьеры миграции и скопиться, в конечном счете, вблизи границы раздела. Атомы гелия, попавшие в материал, также будут скапливаться вблизи границы раздела. Более того, из результатов расчетов свидетельствует,

что гелию энергетически наиболее выгодно располагаться именно в вакансиях вблизи границы раздела, а не в междоузлиях. Взаимодействие вакансии с атомом He уменьшается по мере отдаления атома He от вакансии, поэтому атом He и вакансия перестают взаимодействовать после того, как они разделятся примерно на 7 \AA перпендикулярно границе раздела. Аналогичный результат наблюдается и при перемещении атома гелия от вакансии параллельно границе раздела в пределах первого атомного слоя Zr. По мере увеличения расстояния свыше 9 \AA между атомом He и вакансией, они перестают взаимодействовать. Следовательно, диапазон взаимодействия атома He и вакансии в одном слое выше, чем когда они находятся в разных слоях, что позволяет предположить, что динамика взаимодействия различна для направлений, параллельных и перпендикулярных границе раздела [48].

2 Основные приближения и методы расчета из первых принципов

2.1 Постановка задачи

Любое твердое тело состоит из $\sim 10^{23}$ частиц на сантиметр кубический, которые взаимодействуют между собой. В связи с этим, выполнить расчет энергетических уровней и волновых функций можно, используя некоторые упрощения [49].

Рассмотрим стационарное уравнение Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + U\Psi = E\Psi, \quad (2.1)$$

где \hbar – постоянная Дирака, m – масса частицы, ∇ – оператор Лапласа, Ψ – волновая функция, U – потенциальная энергия частицы, E – полная энергия частицы.

Тогда уравнение (2.1) можно переписать в виде:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi, \quad (2.2)$$

Здесь \hat{H} – полный гамильтониан.

Внутри кристалла электроны взаимодействуют с ядрами, поэтому полный гамильтониан распишется следующим образом [49]:

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{T}_L + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{eL} + \hat{V}_{LL}, \quad (2.3)$$

где $\hat{T}_e, \hat{T}_L, \hat{V}_{ee}, \hat{V}_{eL}, \hat{V}_{LL}$ – операторы кинетической энергии электронов и атомных ядер, взаимодействия электронов друг с другом, электронов с ядром, ядер друг с другом соответственно:

$$\begin{aligned} \hat{T}_e &= -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2, \quad \hat{T}_L = -\sum_I \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_I^2, \\ \hat{V}_{ee} &= \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}, \quad \hat{V}_{eL} = \sum_{i,I} \frac{Z_I e^2}{|\vec{R}_I - \vec{r}_i|}, \quad \hat{V}_{LL} = \sum_{I \neq J} \frac{Z_I Z_J e^2}{|\vec{R}_I - \vec{R}_J|}, \end{aligned} \quad (2.4)$$

где индексы i, j и I, J относятся, соответственно, к электронам и ядрам, через Z обозначен заряд ядра; e – заряд электрона. M – масса ядра.

Волновая функция в общем случае будет зависеть от пространственных и спиновых координат всех ядер и электронов, входящих в систему. Чтобы решить

уравнение (2.1), нужно учесть всевозможные взаимодействия между огромным количеством атомов в кристалле. Это является очень трудоемкой задачей, поэтому используется ряд приближений, с помощью которых задачу можно свести к более простому виду [49].

2.2 Адиабатическое приближение

Так как решать данную задачу, как описано выше, проблематично, то существует адиабатическое приближение, суть которого заключается в том, чтобы разбить задачу на две взаимосвязанные для электронов и ядер [49]:

$$\begin{aligned}\widehat{H}\Psi_{\text{ядер}}(\{\vec{R}\},\{\vec{r}\}) &= E\Psi_{\text{ядер}}(\{\vec{R}\},\{\vec{r}\}), \\ \widehat{H}\Psi_{\text{эл.}}(\{\vec{R}\},\{\vec{r}\}) &= E\Psi_{\text{эл.}}(\{\vec{R}\},\{\vec{r}\}).\end{aligned}\tag{2.5}$$

Здесь $(\{\vec{R}\},\{\vec{r}\})$ – совокупности пространственных и спиновых координат всех ядер и электронов.

Допускается такое упрощение из соображений, что масса электрона много меньше массы ядра, а скорость электрона будет во много раз больше. Следовательно, пока ядро сделает одно колебание относительно своего положения равновесия, электрон совершит большое число оборотов вокруг ядра, поэтому можно предположить, что относительно электрона ядро покоится. В связи с этим, сначала решается задача для электронов при фиксированных положениях ядер. Затем решается задача для ядер, находящихся в поле, создаваемом электронами [49].

2.3 Зонное приближение

Применение описанного выше метода перехода от многоэлектронной задачи к одноэлектронной явно недостаточно для практических расчетов вследствие того, что рассматриваемая система содержит большое количество электронов и самосогласованно решать систему с таким числом одноэлектронных волновых функций невозможно.

Выход из этой ситуации можно найти, предположив, что рассматривается идеальный кристалл, в котором положения атомных ядер образуют

периодическую кристаллическую решетку, строго подчиняясь требованиям трансляционной симметрии. Кроме того, исключают влияние поверхности, считая кристалл бесконечно протяженным во всех направлениях и накладывая периодические граничные условия [50].

Оператор потенциальной энергии в уравнении Шредингера (2.1) удовлетворяет условию периодичности [49]:

$$U(\vec{r} + \vec{T}) = U(\vec{r}), \quad (2.6)$$

где \vec{r} – пространственные координаты, \vec{T} – вектор трансляции решетки Бравэ.

Отсюда следует важное свойство стационарных электронных состояний в кристалле: собственные состояния одноэлектронного гамильтониана могут быть выбраны так, чтобы их волновые функции $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ имели форму плоской волны, умноженной на функцию $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ с периодичностью решетки Бравэ [50]:

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2.7)$$

где $u_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{T})$ для всех \vec{T} , принадлежащих решетке Бравэ, индекс \vec{k} помогает классифицировать состояния, соответствуя волновому вектору электронов в кристалле.

Это утверждение называется теоремой Блоха. Она дает возможность ограничиться решением уравнения Шредингера (2.1) внутри одной элементарной ячейки кристалла. Система из бесконечного числа связанных между собой уравнений распадается на бесконечное число независимых уравнений для разных значений волнового вектора \vec{k} , хотя и обычно ограничиваются решением уравнения Шредингера для конечного числа волновых векторов. Применимость зонной теории, однако, ограничивается слабой чувствительностью физических свойств кристалла к нарушениям идеального периодического строения кристаллической решетки – появлению примесных атомов в узлах и междоузлиях, вакансий, искажениям решетки, связанным со смещениями атомов. Особый случай представляют электронные состояния вблизи поверхности кристалла. Во многих случаях нарушения

правильного строения кристаллической решетки определяют физико-химические характеристики кристалла, поэтому их изучение представляет большой интерес [49].

Если же изменение потенциала, вызванное дефектами, невелико (например, свойства примесных атомов замещения близки к свойствам атомов матрицы), то можно рассчитать электронную структуру кристалла без дефектов, а затем воспользоваться теорией возмущений. Если же изменение потенциала в кристалле значительное – на дефектах возникают локализованные электронные состояния, такой подход не применим.

Можно предположить, что дефекты расположены в кристалле периодически и образуют некоторую сверхрешетку, причем расстояние между соседними дефектами такое, что взаимодействие между ними можно считать пренебрежимо малым. В этом случае для изучения электронной структуры неидеального кристалла можно в принципе применить вычислительные методы зонной теории. Однако практическая реализация такого подхода связана с огромным объемом вычислений и как правило, ограничена мощностью имеющихся вычислительных машин, поскольку при этом необходимо рассматривать элементарную ячейку, содержащую по меньшей мере несколько десятков или даже больше сотни атомов [49].

2.4 Одноэлектронное приближение. Теория функционала электронной плотности

Уравнение (2.5) все равно является трудновыполнимой задачей, и для упрощения используют одноэлектронные приближения в рамках теории функционала электронной плотности. Для реализации этого приближения были разработаны два подхода.

Первый из них – это метод Хартри–Фока [51], заключающийся в самосогласовании волновой функции. Электрон в атоме рассматривается движущимся в самосогласованном поле, которое создается ядром и другими электронами. Сначала решается задача о движении электрона в определенном потенциале, который фкак можно лучше описывает все взаимодействия этого

электрона с другими электронами и ядрами атомов. Далее задача решается самосогласованно, то есть найденные волновые функции используются для уточнения этого потенциала.

Основной целью теории функционала плотности (DFT) является замена многоэлектронной волновой функции на электронную плотность, что существенно упрощает задачу, так как эта волновая функция зависит от трех пространственных координат на каждый из N электронов, в то же время плотность зависит только от трех пространственных координат. Сама ТФП базируется на модели Томаса–Ферми [51], однако, несмотря на ее важную роль в развитии квантовой механики, ее точность является недостаточной, так как она не учитывает обменное взаимодействие, которое впоследствии было введено П. Дираком [52]. Несмотря на это, все равно оставалась большая погрешность. Во-первых, источником погрешности служило выражение для кинетической энергии, которое в дальнейшем приводило к погрешности обменной энергии. Во-вторых, не была учтена энергия обменной корреляции.

Само собой разумеется, что внешний потенциал в принципе определяет все свойства системы: это нормальный подход к квантово-механическим задачам, когда решается уравнение Шрёдингера для собственных состояний системы. Соответствие между электронной плотностью и внешним потенциалом описывается согласно теореме Кона–Хоэнберга [53]:

1. Плотность может использоваться вместо потенциала в качестве основной функции, однозначно характеризующей систему. Это можно сформулировать так: плотность основного состояния $n(\vec{r})$ однозначно определяет потенциал $\hat{V}_{ext}(\{\vec{R}\}, \{\vec{r}\}) = \hat{V}_{eL}$ с точностью до произвольной постоянной [53].

2. Универсальный функционал для энергии $E[n(\vec{r})]$ может быть определен через понятие плотности. Точное основное состояние – это глобальное минимальное значение этого функционала. Другими словами, энергия основного состояния системы задается функционалом $E[n(\vec{r})]$. Если

входная плотность и плотность основного состояния одинаковы, функционалу $E[n(\vec{r})]$ будет соответствовать наименьшая энергия. Следовательно, функционал можно минимизировать, варьируя плотность, чтобы получить энергию основного состояния для внешнего потенциала [53].

Данные теоремы имеют важное значение, однако не предусматривают практических методов для вычисления наблюдаемых величин. Практическое значение метод приобрел только после того, как Кон и Шэм [54] предложили подход для вычисления функционала плотности.

Это приводит уравнение Кона-Шема к проблеме нахождения собственных значений волновых функций, где все величины зависят от плотности электронов [54]:

$$\widehat{H}[n]\varphi_i[n] = \varepsilon_i[n]\varphi_i[n]. \quad (2.8)$$

Здесь $\varphi_i[n]$ – одночастичная волновая функция i -го электрона, $\varepsilon_i[n]$ – полная энергия i -го электрона.

Таким образом, уравнение для описания независимых электронов, движущихся в эффективном потенциале $\widehat{V}_{eff}(\{\vec{R}\}, \{\vec{r}\})$ выглядит следующим образом [54]:

$$\widehat{H}_{KSH}[n]\varphi_i(\vec{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{eff}(\{\vec{R}\}, \{\vec{r}\})\right]\varphi_i(\vec{r}). \quad (2.9)$$

Здесь \hbar – постоянная Дирака, m – масса частица, ∇ – оператор Лапласа, \vec{R} – пространственные координаты, описывающие положение ядер.

Эффективный потенциал включает в себя потенциал атомных ядер $\widehat{V}_{ext}(\{\vec{R}\}, \{\vec{r}\})$, а также учитывает кулоновское взаимодействие между электронами $\widehat{V}_H(\vec{r})$ (потенциал Хартри), обменное взаимодействие и электронную корреляцию $\widehat{V}_{xc}(\vec{r})$:

$$\widehat{V}_{eff}(\{\vec{R}\}, \{\vec{r}\}) = \widehat{V}_{ext}(\{\vec{R}\}, \{\vec{r}\}) + \widehat{V}_H(\vec{r}) + \widehat{V}_{xc}(\vec{r}) \quad (2.10)$$

Тогда полная энергия реальной системы запишется следующим образом:

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^{N_{occ}} \varphi_i^*(\vec{r}) \nabla^2 \varphi_i(\vec{r}) d\vec{r} - \sum_I Z_I e \int \frac{n(\vec{r}_i)}{|\vec{R}_I - \vec{r}_i|} d\vec{r} + \frac{1}{2} \iint \frac{n(\vec{r}_i) n(\vec{r}_j)}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} d\vec{r}_i d\vec{r}_j + E_{xc}[n],$$

$$E = T_s \{ \varphi_i(\vec{r}) \}_{i=1}^{N_{occ}} + \vec{V}_{ext}[n] + \vec{V}_H[n] + E_{xc}[n], \quad (2.11)$$

$$n(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{N_{occ}} |\varphi_i(\vec{r})|^2 = \langle \varphi(\vec{r}) | \sum_{i=1}^{N_{occ}} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) | \varphi(\vec{r}) \rangle,$$

где N_{occ} – число занятых состояний.

В формуле (2.11) первый член описывает кинетическую энергию невзаимодействующих электронов, второй – взаимодействие электронов с ядрами, третий – взаимодействие электронов друг с другом, четвертый – обменно-корреляционное взаимодействие.

Описание обменного и корреляционного взаимодействия $\hat{V}_{xc}(\vec{r})$ (ОКВ) представляет основную сложность метода ТФП в формулировке Кона–Шэма и состоит в том, чтобы понять, как его учесть в расчетах. Для описания этих взаимодействий введены различные приближения. Достаточно длительное время использовали приближение локальной плотности (ПЛП), в котором обменно-корреляционный функционал записывается в виде интеграла от некоторой функции пространственных переменных, определяющейся только электронной плотностью в данной точке пространства. ПЛП возникает в теории электронного газа и оказывается успешным для описания твердых тел трехмерно-периодических систем [55]. Однако для описания атомов и молекул, у которых распределение электронной плотности не есть однородный электронный газ, ПЛП оказывается довольно грубым приближением. Тем не менее, используя разложения для энергии однородного электронного газа можно вычислить энергию локального обмена [49]:

$$E_{xc}[n] = \int \varepsilon_{xc}(n) n(\vec{r}) d^3r, \quad (2.12)$$

где $\varepsilon_{xc}(n) = -C_x n^{\frac{4}{3}}(\vec{r})$ – обменно-корреляционная энергия, $C_x = \frac{3}{2} \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{\frac{1}{3}}$.

В ОГП обменно-корреляционный функционал, помимо электронной плотности, использует информацию о ее неоднородном распределении, т.е. учитывается градиент этой плотности [55, 56]:

$$E_{xc}[n_{\uparrow}, n_{\downarrow}] = \int \varepsilon_{xc}(n_{\uparrow}, n_{\downarrow}, \nabla_{n_{\uparrow}}, \nabla_{n_{\downarrow}}) n(\vec{r}) d^3r \quad (2.13)$$

2.5 Решение уравнения Кона-Шема

Решить уравнение Кона-Шема (2.9) – достаточно трудоемкая задача в силу того, что оно является дифференциальным уравнением второго порядка. Самый простой способ – разложить искомую волновую функцию по базису [49]:

$$\varphi_{i,\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} C_{i,\vec{k},\vec{G}} \varphi_{i,\vec{G}}(\vec{k}, \vec{r}), \quad (2.14)$$

где $\vec{K} = \vec{G} + \vec{k}$, \vec{G} – вектор обратной решетки кристалла.

Среднее значение энергии системы электронов в кристалле вычисляется по формуле [57]:

$$E = \frac{\int \varphi_{i,\vec{k}}^*(\vec{r}) \widehat{H}_{KШ} \varphi_{i,\vec{k}}(\vec{r}) d^3r}{\int \varphi_{i,\vec{k}}^*(\vec{r}) \varphi_{i,\vec{k}}(\vec{r}) d^3r} \quad (2.15)$$

Если продифференцировать это выражение по коэффициентам разложения и приравнять производную к нулю, то получим систему линейных уравнений относительно коэффициентов разложения (секулярное уравнение), определяющая среднее состояние системы с минимальной энергией [57]:

$$[\mathbf{H}(\vec{k}) - \bar{\mathbf{E}}\mathbf{S}(\vec{k})]C_{i,\vec{k}} = 0, \quad (2.16)$$

$$\mathbf{H}(\vec{k}) = \int \varphi_{i,\vec{k}}^*(\vec{r}) \widehat{H}_{KШ} \varphi_{i,\vec{k}}(\vec{r}) d^3r, \quad (2.17)$$

$$\mathbf{S}(\vec{k}) = \int \varphi_{i,\vec{k}}^*(\vec{r}) \varphi_{i,\vec{k}}(\vec{r}) d^3r. \quad (2.18)$$

где $\mathbf{H}(\vec{k})$ – матрица гамильтониан, $\mathbf{S}(\vec{k})$ – матрица перекрытия, $C_{i,\vec{k}}$ – матрица-столбец, состоящая из коэффициентов разложения волновой функции, $\bar{\mathbf{E}}$ – значения энергии при данном волновом векторе \vec{k} . Таким образом, вместо решения дифференциального уравнения второго порядка решается система линейных уравнений, решать которую намного проще.

Так как разложение производится по плоским волнам, то можно выделить некоторые преимущества и недостатки. Достоинством является то, что при их использовании достаточно легко рассчитываются матричные элементы

Гамильтониана, недостатком – значительно увеличивающийся размер базиса при описании поведения электронов в сильно изменяющемся кристаллическом поле.

2.6 Схема самосогласованного расчета

На рисунке 2.1 представлена схема, по которой происходит процесс самосогласования электронной плотности в кристалле. В качестве исходных данных выступают порядковый номер химического элемента в периодической таблице Д. И. Менделеева и координаты расположения атомов в решетке. Рассчитываются атомные зарядовые плотности для следующих электронных конфигураций: Zr $4s^2 4p^6 4d^2 5s^2$, Nb $4s^2 4p^6 4d^4 5s^1$, He $1s^2$.

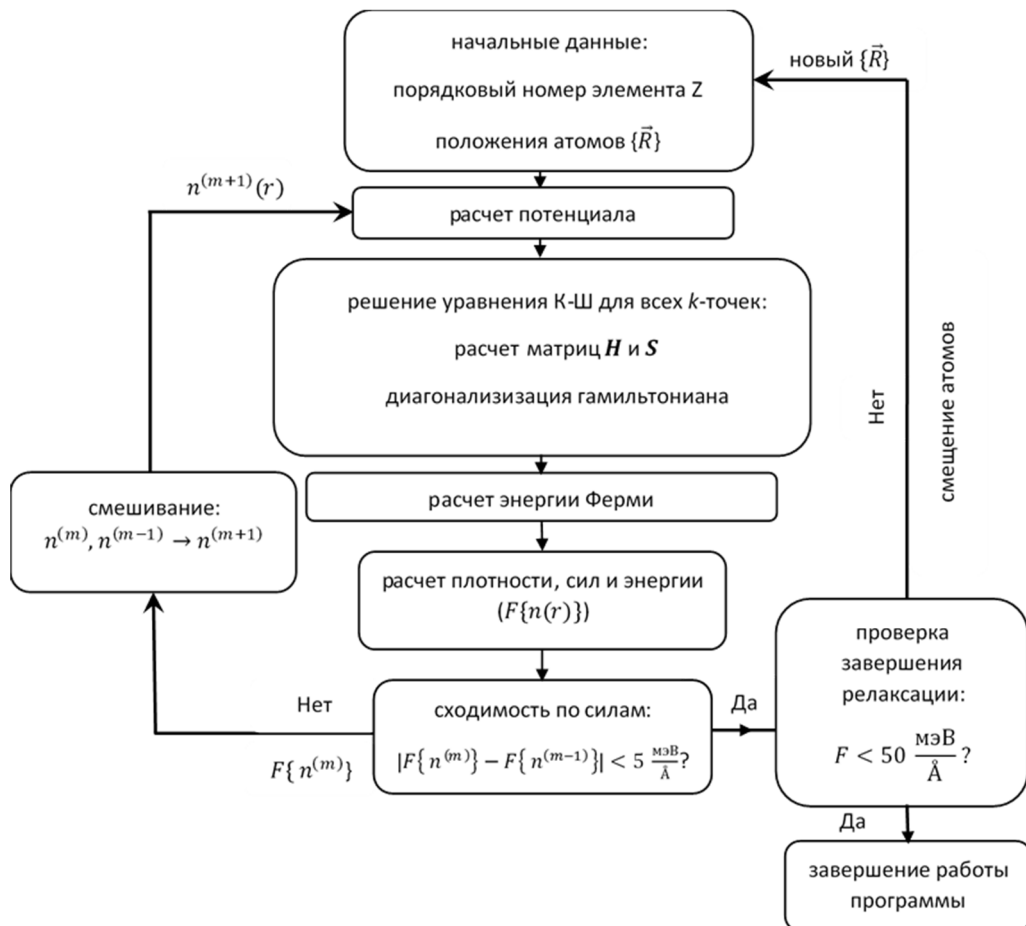


Рисунок 2.1 – Блок-схема реализации процедуры самосогласования электронной плотности в кристалле

Вводится начальная волновая функция ядер и электронов, которая выбирается как можно ближе к реальной: по принципу суперпозиции зарядовых

плотностей отдельных изолированных атомов находится стартовая зарядовая плотность. По формулам (2.10)-(2.13) находится эффективный потенциал в уравнении (2.8). Далее решается уравнение Кона-Шема. Чтобы найти энергию в формуле (2.15), необходимо знать коэффициенты в разложении волновой функции. Решается уравнение (2.16), которое сводится к виду:

$$\mathbf{H}(\vec{k})\mathbf{C}_{i,\vec{k}} = \bar{E}\mathbf{C}_{i,\vec{k}} \quad (2.18)$$

$$\bar{E} = \bar{E}\mathbf{S}(\vec{k}) \quad (2.19)$$

Диагонализируя матрицу гамильтониана, получаем собственные значения энергии \bar{E} для каждого волнового вектора \vec{k} . Расчет энергии и нахождение волновых функций производится путем интегрирования по первой зоне Бриллюэна [57]. Интегрирование производится так, что в ходе каждой итерации последовательно для всех \vec{k} в k -пространстве в зоне Бриллюэна рассчитываются значения энергии и волновых функций, а затем по всем этим точкам выполняется численное интегрирование [57]. Точность расчетов зависит от количества k -точек, которые использованы в расчете.

Зная \bar{E} , находятся коэффициенты разложения $\mathbf{C}_{i,\vec{k}}$. Таким образом определяется искомая волновая функций электронов (2.14). Далее устанавливается энергия Ферми путем интегрирования всех \bar{E} по всем \vec{k} , после чего определяется, какие состояния являются занятыми, а какие – свободными. В дальнейшем используются только занятые состояния, и для них рассчитывается электронная плотность.

Для получения искомой (реальной) электронной плотности проводятся самосогласованные расчеты, в которых уравнение Кона-Шема (2.9) решается итеративно до достижения требуемой сходимости по электронной плотности: до тех пор, пока входная электронная плотность не станет равна выходной плотности в пределах требуемой точности (рисунок 2.1). Если значение среднеквадратического отклонения между входной и выходной электронными плотностями больше заданного параметра, то эффективный потенциал считается

заново, используя значение новой найденной плотности. В ходе самосогласования достигается сходимость полной энергии рассматриваемых систем не более 10^{-5} эВ. Потенциал атомных ядер явно зависит от положения всех атомов, которые меняются в ходе оптимизации атомной структуры (каждого шага алгоритма молекулярной динамики). Волновые функции также зависят от положения атомов в решетке. После выполнения условия самосогласования для электронной плотности происходит смещение атомов с некоторым шагом $\{\vec{R}(t) \rightarrow \vec{R}(t + \Delta t)\}$ и процедура самосогласования повторяется с самого начала для новых положений атомов [57]. Так продолжается до тех пор, пока силы, действующие на атомы системы, не будут меньше $50 \text{ мЭВ/\text{Å}}$.

2.7 Метод псевдопотенциала

Основная проблема заключается в том, что, если представлять волновые функции как линейную комбинацию плоских волн, то необходимо большое количество членов в разложении по этому базису [58]. В связи с этим, в области вблизи ядра, в которой волновая функция осциллирует достаточно сильно, предлагается использовать некоторую псевдоволновую функцию, а в межатомной области, где волновая функция ведет себя плавно, – линейную комбинацию плоских волн [58].

В данном методе используется тот факт, что волновые функции валентной зоны и зоны проводимости должны быть ортогональны волновым функциям остовных электронов. Волновая функция электрона в валентной зоне или в зоне проводимости удовлетворяет уравнению Шрёдингера [58]:

$$\varphi_{\vec{k}} = e^{i\vec{k}\vec{r}} - \sum_c b_c \psi_{\vec{k}}^c \quad (2.19)$$

Коэффициенты b_c можно найти из условия ортогональности волновых функций:

$$b_c = \int \psi_{\vec{k}}^c e^{i\vec{k}\vec{r}} d\vec{r} \quad (2.20)$$

Поскольку плоские волны и волновые функции остовных электронов удовлетворяют теореме Блоха, то и реальные волновые функции также будут удовлетворять этой теореме [58]:

$$\psi_{\vec{k}} = \sum_{\vec{G}} C_{\vec{G}} \varphi_{\vec{G}+\vec{k}}, \quad (2.21)$$

где $\varphi_{\vec{G}+\vec{k}}$ – псевдоволновая функция.

2.8 Связывающие и антисвязывающие состояния

Чтобы определить характер взаимодействия между атомами в твердом теле, необходимо извлечь информацию о химических связях из электронной зонной структуры, которая вычисляется с помощью квантово-механических алгоритмов. Атомы взаимодействуют за счет «валентных связей», которые образуются вследствие взаимодействия валентных электронов различных атомов. Идея метода расчета орбитальной заселенности Гамильтониана в кристалле (crystal orbital Hamilton population, COHP) состоит в разделении энергии зонной структуры на вклады от различных орбитальных пар и основан на подходе сильно связанных электронов [59].

Например, взаимодействие между μ -й и ν -й орбиталями, относящиеся к соседним атомам, описывается их матричным элементом гамильтониана $H_{\mu\nu} = \langle \varphi_{\mu} | \hat{H} | \varphi_{\nu} \rangle$, умноженного на соответствующую матрицу плотностей состояний. Данное произведение служит количественной мерой, характеризующей величину связи между двумя орбиталями: отрицательное значение характеризует связывание, а положительное – антисвязывание [60].

Предположим, что нам удалось провести самосогласованный расчет электронной структуры с использованием базиса плоских волн с набором k -точек в обратном пространстве в соответствии с теоремой Блоха. В результате мы получаем зонные функции $\psi_j(\vec{k}, \vec{r})$, в которых j обозначает номер зоны. На первый взгляд, эти зонные волновые функции представляют собой просто математическую конструкцию, а именно линейную комбинацию плоских волн с использованием векторов обратной решетки \vec{G} и коэффициентов разложения

$C_{j\vec{G}}$. Такое разложение, описывает электронную структуру системы так же точно, как линейная комбинация атомных орбиталей (ЛКАО). Другими словами: волновые функции ЛКАО и зонные функции $\psi_j(\vec{k}, \vec{r})$ должны быть очень похожи друг на друга, несмотря на их сильно различающееся происхождение. Запишем такую зависящую от \vec{k} функцию $\psi_j(\vec{k}, \vec{r})$ для j -й зоны [60]:

$$\psi_j(\vec{k}, \vec{r}) = \sum_{\vec{G}} C_{j\vec{G}} \exp\left[i(\vec{k} + \vec{G}) \cdot \vec{r}\right] \approx c_{j\mu}(\vec{k}) \varphi_{\mu}(\vec{r}) + c_{j\nu}(\vec{k}) \varphi_{\nu}(\vec{r}) + \dots \quad (2.22)$$

Подчеркнем, что выбор локализованных орбиталей $\left\{ \left| \varphi_{\mu}(\vec{r}) \right\rangle \right\}$, в принципе, произвольный. Это означает, что можно использовать любой набор базисных функций, который хорошо подходит для соответствующей химической задачи. Тем не менее, нам все еще необходимо количественно оценить, насколько хорошо любой базисный набор позволяет нам моделировать зонные функции плоских волн $\left| \psi_j(\vec{k}, \vec{r}) \right\rangle$. Поэтому вычисляется матрица перекрытия $S_{j\mu}(\vec{k})$ между зонными функциями и локальными орбиталями $\left| \varphi_{\mu}(\vec{r}) \right\rangle$. Информация о химических связях извлекается из атомных орбитальных коэффициентов c_{μ} , а умножение двух коэффициентов c_{μ} и c_{ν} дает элемент матрицы плотности $P_{\mu\nu}$. При использовании плоских волн аналогичная информация содержится в матрице перекрытия. Таким образом, вычисляется проецируемая матрица плотности $P^{(proj)}$ для каждой зоны j и каждой \vec{k} -точки [60]:

$$S_{j\mu}(\vec{k}) = \left\langle \psi_j(\vec{k}) \left| \varphi_{\mu} \right\rangle, P_{\mu\nu j}^{(proj)}(\vec{k}) = S_{j\mu}^*(\vec{k}) S_{j\nu}(\vec{k}) \quad (2.23)$$

Наконец, для реализации метода СОНР, необходимо получить матричные элементы гамильтониана $H_{\mu\nu}(\vec{k})$. Гамильтониан плоских волн \widehat{H}^{PW} в базисе локальных функций после упрощения имеет вид [60]:

$$H_{\mu\nu}^{(proj)}(\vec{k}) = \sum_j \varepsilon_j(\vec{k}) S_{j\mu}^*(\vec{k}) S_{j\nu}(\vec{k}) \quad (2.24)$$

Теперь, используя матрицы $P_{\mu\nu j}^{(proj)}$ и $H_{\mu\nu}^{(proj)}(\vec{k})$, можно построить аналог традиционного СОНР, который называется «проекционная орбитальная заселенность Гамильтона в кристалле» (pСОНР) [60]:

$$\text{pСОНР}_{\mu\nu}(E, \vec{k}) = \sum_j R \left[P_{\mu\nu j}^{(proj)}(\vec{k}) H_{\mu\nu}^{(proj)}(\vec{k}) \right] \times \delta(\varepsilon_j(\vec{k}) - E) \quad (2.25)$$

Приведенное выше выражение зависит от энергии, т.к. дельта-функция гарантирует, что матрица плотности имеет ненулевые элементы только при определенной энергии $\varepsilon_j(\vec{k})$ зоны, иначе говоря, матрица плотности была переписана в матрицу плотности состояний. Чтобы получить pСОНР(E) в реальном пространстве, вычисляется сумма по всем орбиталям μ (принадлежащим первому атому, участвующем в рассматриваемой связи) и ν (принадлежащим второму атому), и выполняется последующее интегрирование в \vec{k} -пространстве [60].

3 Взаимодействие гелий-вакансионного комплекса с цирконием

3.1 Метод и детали расчета

Все расчеты в настоящей работе выполнены в рамках теории функционала электронной плотности с использованием обобщенно-градиентного приближения методом присоединенных плоских волн, реализованным в пакете программ ABINIT [61, 62], с обменно-корреляционным потенциалом GGA – PBE [63]. Оптимизация параметров решетки и релаксация атомной структуры чистого α -циркония и системы Zr–He при двух различных концентрациях атомов гелия: ~ 3 и 6 ат.% производились с использованием алгоритма Бройдена-Флетчера-Гольдфарба-Шанно.

Максимальная энергия в базисе плоских волн выбиралась равной 820 эВ. Занятость электронных состояний была описана путем интегрирования зоны Бриллюэна, используя метод «холодного размытия» Метфесселя-Пакстона, с параметром размытия 0,03 эВ. На каждой итерации самосогласования собственные значения гамильтониана рассчитывались в сетке k -точек $5 \times 5 \times 5$ для ячейки на рисунке 3.1 (а) и $5 \times 5 \times 3$ для ячейки на рисунке 3.1 (б) неприводимой части зоны Бриллюэна. Критерий сходимости по силам взят равным 50 мэВ/Å. Для расчета локальной парциальной плотности электронных состояний радиус атомных сфер Zr и He был выбран равным 1,169 и 0,689 Å, соответственно. Населенности кристаллических орбиталей Гамильтона (СОНР), помогающие идентифицировать связывающие и антисвязывающие взаимодействия, были вычислены с использованием алгоритма СОНР [64].

Чтобы определить наиболее стабильные конфигурации позиций гелия в междоузлиях, мы исследовали две суперячейки, состоящие из 16 атомов и 36 атомов циркония. Концентрация как вакансий, так и атомов гелия в этих конфигурациях соответствовала ~ 3 и ~ 6 ат.%. Гелий располагался в тетраэдрических (T1, T2), октаэдрических (O) междоузлиях и в базальной плоскости над октаэдрическим междоузлем (BO). Данные возможные положения атома гелия были выбраны на основе соображений симметрии и

представлены на рисунке 3.1. Также изучалось влияние вакансии на положение атома гелия в решетке циркония. Это было достигнуто путем удаления одного из атомов циркония (окрашенного в темно-зеленый цвет в суперячейках на рисунке 3.1). В решетке циркония с ранее существовавшей вакансией атом гелия может находиться в двух различных тетраэдрических междуузлиях вблизи вакансии: Т1 и Т2. Положение атома гелия в октаэдрическом междуузлии не рассматривается в дальнейшем, поскольку это метастабильное положение для атома гелия: атом He смещается из позиции О в позицию ВО в ходе релаксации.

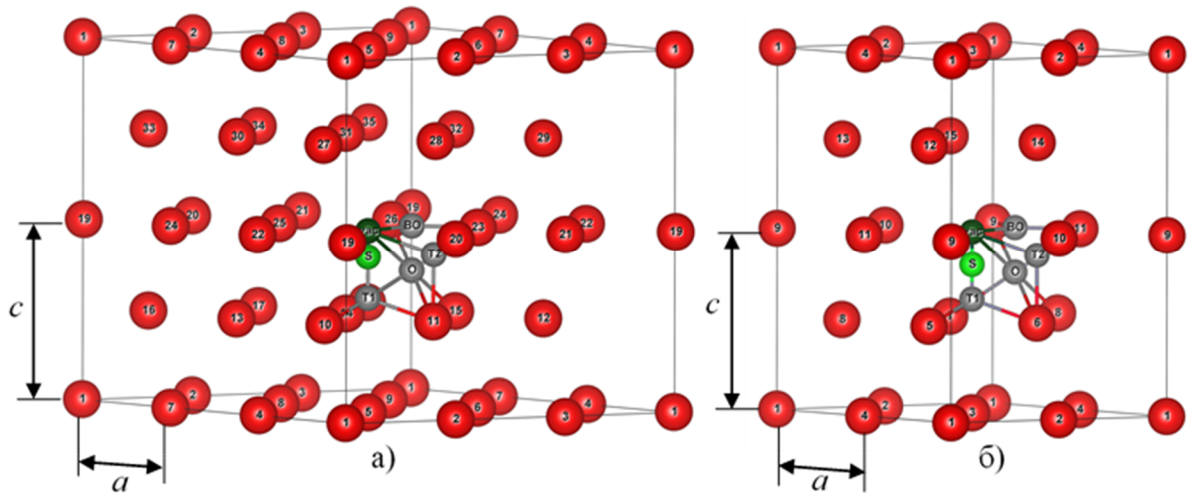


Рисунок 3.1 – Расчетная ячейка с концентрацией дефекта (а) 3 ат.% и (б) 6 ат.%.

Красным цветом обозначены атомы циркония, темно-зеленым цветом показан атом, где создавалась вакансия, светло-зеленым – положение смещенного атома гелия из вакансии

3.2 Энергия внедрения атомов гелия в решетку циркония и энергия образования вакансии

Для исследования влияния гелия и вакансии на энергетику их взаимодействия с цирконием были рассчитаны энергия внедрения атома гелия в решетку циркония с ранее образованной вакансией:

$$E_{\text{He}} = E(\text{Zr}_{N-x}\text{He}) - E(\text{He}) - E(\text{Zr}_{N-x}), \quad (3.1)$$

энергия образования вакансии:

$$E_{\text{vac}} = E(\text{Zr}_{N-x}) - \frac{N-x}{N} E(\text{Zr}_N) \quad (3.2)$$

где $E(\text{He})$ – полная энергия изолированного атома гелия, $E(\text{Zr}_N)$ – полная энергия N атомов чистого циркония, $E(\text{Zr}_{N-x})$ и $E(\text{Zr}_{N-x}\text{He})$ – полные энергии циркония и системы цирконий-гелий с x/N – концентрацией вакансий (x и N – количество вакансий и узлов решетки в расчетной ячейке, соответственно).

Рассчитанные параметры решетки для чистого циркония и систем цирконий-гелия и цирконий-гелий-вакансия. Результаты расчетов представлены в таблице 3.1. Из данных в таблице 3.1 видно, что энергия образования вакансии для низкой концентрации на 1,8 % ниже, чем в случае высокой. Это связано с тем, что при более низкой концентрации, оба дефекта не так сильно искажают параметры решетки a и c по сравнению с более высокой их концентрацией.

Таблица 3.1. Результаты расчетов энергии внедрения атома гелия и параметров решетки циркония и параметры решетки циркония

Система	Параметры решетки				Энергия внедрения, эВ		Энергия образования вакансии, эВ	
	a , Å		c , Å					
	3 ат. %	6 ат. %	3 ат. %	6 ат. %	3 ат. %	6 ат. %	3 ат. %	6 ат. %
Чистый Zr	3,234 3,231 [7] 3,232 [65] 3,232 [66]		5,167 5,169 [7] 5,169 [65] 5,167 [66]			-		-
Zr-He ^{TI}	2,234	3,233	5,211	5,272	2,699 2,67 [7]	2,685	-	-
Zr-He ^{BO}	3,244	3,256	5,279	5,215	2,433 2,42 [7]	2,456	-	-
Zr-vac	3,222	3,220	5,137	5,070			2,069 1,97 [7] 2,05 [65] 2,01 [48]	2,106
Zr-He ^{vac}	3,226	3,236	5,166	5,028	1,248	1,388	-	-
Zr-He ^S	3,217	3,231	5,149	5,149	1,251	1,305	-	-

Рассмотрим, как влияет гелий на параметры решетки циркония в системах, в которых отсутствует вакансия. Относительные увеличения параметров решетки a и c при внедрении гелия не превышают 2%. Из анализа рассчитанных энергий внедрения следует, что наименьшее значение энергии

соответствует системе $Zr-He^{BO}$. Данные результаты находятся в хорошем согласии с выводами авторов работы [7].

В настоящей работе были рассмотрены поведение атома гелия, расположенного в междоузлиях вблизи вакансии. Несмотря на то, что атомы гелия достаточно легко захватываются вакансиями, обнаружено, что расположенный в тетраэдрическом междоузлии атом гелия в ходе релаксации мигрирует не в вакансию, а в положение, смещенное относительно ее центра на $\sim 0,8 \text{ \AA}$ вдоль гексагональной оси (позиция обозначена буквой S на рисунке 3.1). Отдельно рассмотрим систему с атомом гелия, находящимся в положении S . Из полученных в таблице 3.1 данных видно, что параметры решетки системы с данным расположением гелия изменяются значительно слабее, нежели в системе с расположенным в вакансии атомом гелия. Сравнивая положения атома гелия в вакансии и в S позиции, выяснилось, что во втором случае энергия внедрения меньше на величину 0,003 эВ и 0,083 эВ для концентраций 3 и 6 ат.%, соответственно. Данные факты свидетельствуют о более выгодном расположении атом гелия не в вакансии, а в ее окрестности.

3.3 Распределение валентной электронной плотности

С целью определить, как гелий влияет на взаимодействие между атомами циркония, был произведен сравнительный анализ распределения валентной электронной плотности (ВЭП) в чистом Zr и системах $Zr-vac$ и $Zr-He^{vac}$ и $Zr-He^S$ (рисунок 3.2). Из данных, представленных на рисунке 3.2, видно заметное влияние дефектов на распределение зарядовой плотности металла. Происходит это вследствие того, что гелий имеет свои собственные заполненные $1s$ электронные состояния и вытесняет электроны металла из области, в которой он находится, а это, в свою очередь, и приводит к заметному перераспределению электронной плотности системы.

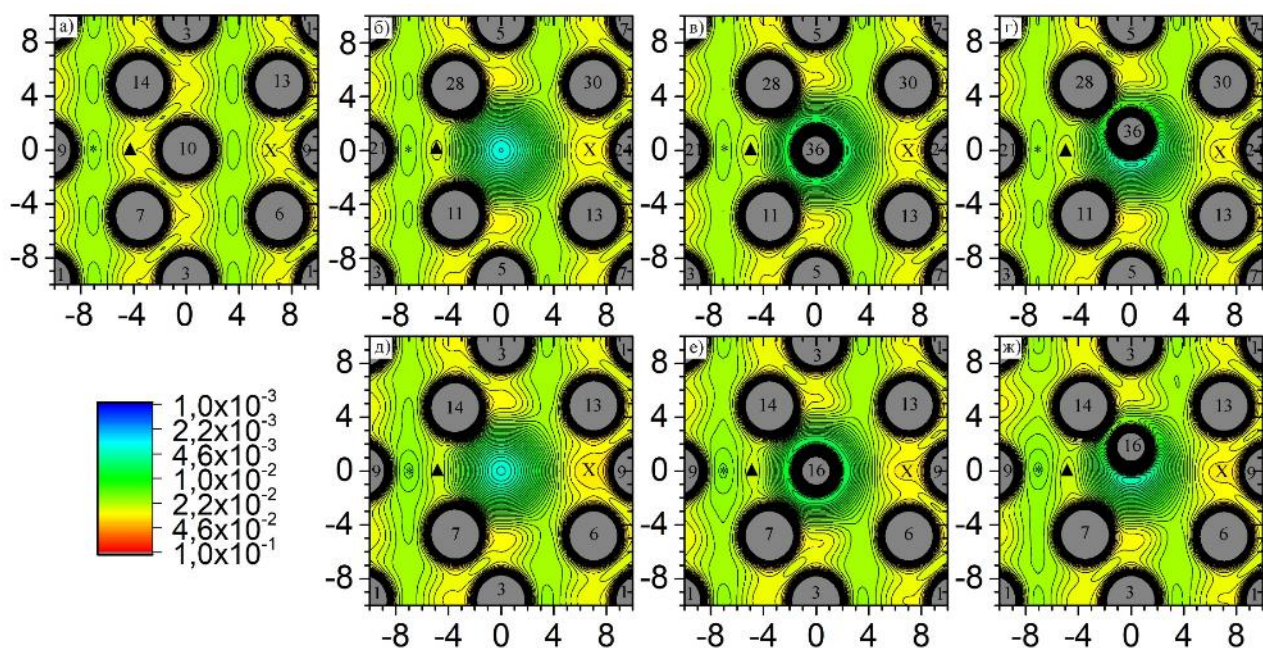


Рисунок 3.2 – Распределение валентной электронной плотности в чистом цирконии (а), системах Zr–vac (б, д) Zr–He^{vac} (в, е) и Zr–He^S (г, ж) для 3 и 6 ат.%, соответственно. Плоскость (11 $\bar{2}$ 0) проходит через атомы циркония и через вакансию. Шкала градаций цвета приведена в единицах электрон/Бор³.

Цифрами указаны номера атомов циркония в расчетной ячейке

Из анализа данных, представленных на панелях а), б) и д) рисунка 3.2, видно, что вакансия заметно влияет на распределение заряда системы. В области, отмеченной ▲, видно уменьшение количества общих изолинии между вакансией и атомами циркония 7 и 14, в связи с чем наблюдается понижение ВЭП на ~ 11 % для низкой концентрации дефекта и на ~ 16 % – для высокой. В области ГПУ-пустот (отмечены X на рисунке 3.2) для обеих концентраций дефекта происходит значительное увеличение значения ВЭП на ~ 14 % для 6 ат.% и на ~ 7 % для 3 ат.%. В области ГЦК-пустот (отмечены * на рисунке 3.2) наблюдается уменьшение значения ВЭП на 3 % для 3 ат.% и ~ 13 % для 6 ат.%. В области, отмеченной ▲ на рисунке 3.2, значение ВЭП в случае 3 ат.% выше (на ~ 3 %), чем для 6 ат.%.

На панелях в) и е) представлено распределение ВЭП для системы Zr–He^{vac} для 3 и 6 ат.%, соответственно. Область ГПУ-пустот уменьшается в размерах в

случае внедрения атома гелия в вакансию для обеих концентраций дефектов. Отметим, что в ГПУ и ГЦК пустотах, а также в области, отмеченной ▲, наблюдается понижение электронной плотности, что свидетельствует об ослаблении связей металл-металл.

На панелях *г* и *ж* представлены случаи расположения гелия в окрестности вакансии. Из рисунков наблюдается увеличение в размерах области ГЦК-пустот, в то время как размеры ГПУ-пустоты не изменяется для обеих концентраций дефекта. Электронная плотность в этих областях не изменилась. Стоит отметить сильное увеличение электронной плотности между атомом гелия и атомами циркония 28 (рисунок 3.2 г)) и 14 (рисунок 3.2 ж)), появление области с пониженной электронной плотностью под атомом гелия (отмечена голубым на рисунке 3.2), что может быть в дальнейшем использовано при интерпретации результатов исследования циркония с гелием с помощью методов электронно-позитронной аннигиляции.

3.4 Плотность электронных состояний

Для дальнейшего исследования взаимодействия атома гелия с атомами циркония были рассчитаны локальные парциальные плотности электронных состояний для чистого циркония, циркония с вакансией, а также для систем Zr_NHe . Результаты расчетов для двух вышеупомянутых концентрация дефекта представлены на рисунке 3.3 и 3.4.

Из рисунков 3.3-3.4 б) видно, что ПЭС для атомов циркония 19 и 10 (соответствует ячейке на рис. 3.1 а)) и для атомов циркония 9 и 5 (соответствует ячейке на рис. 3.1 б)) слабо отличаются друг от друга. Это означает, что вакансия слабо влияет на *s*-, *p*-, *d*- состояния атомов металла.

Для систем, в которых гелий находится в вакансии (рисунки 3.3-3.4 в)), видны отчетливые пики *1s*-состояния гелия. В обоих случаях состояние гелия находится на расстоянии -12 эВ относительно уровня Ферми. На рисунке 3.3 в) при данном значении энергий также наблюдаются линии (синие и зеленые на графике) *s*- и *p*- циркония.

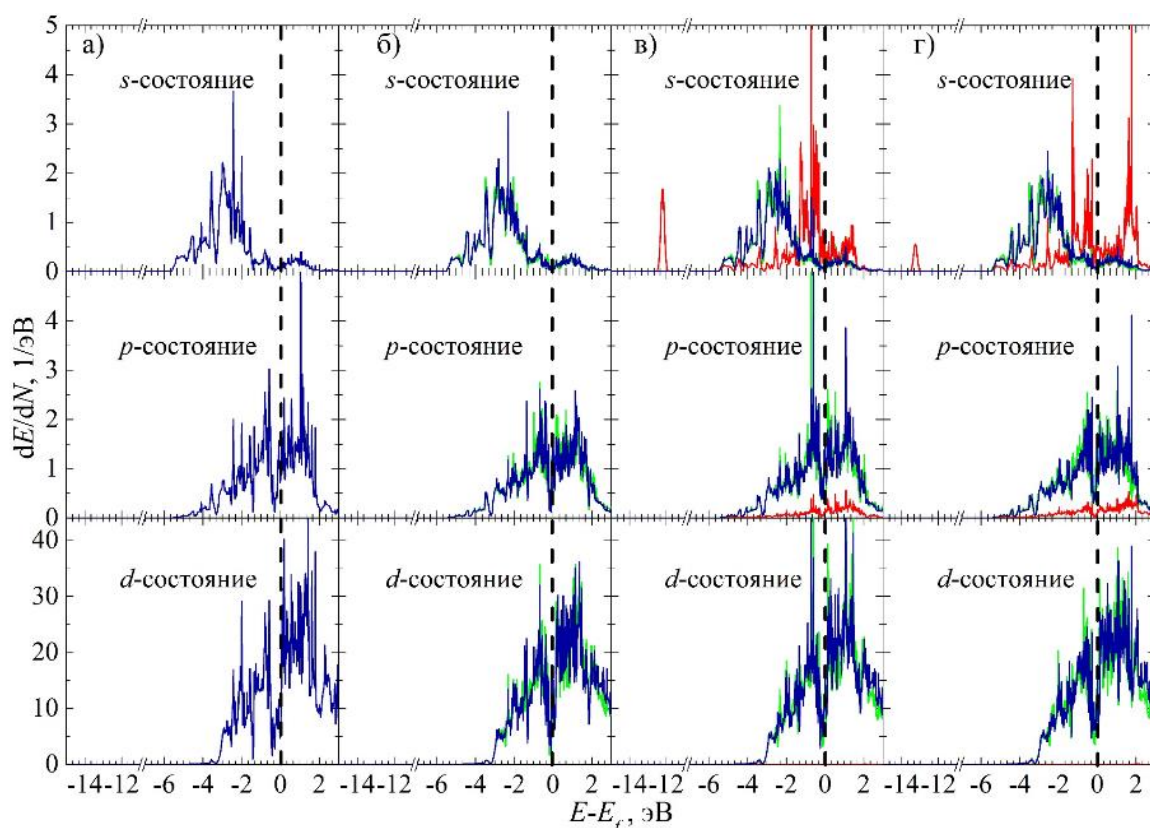


Рисунок 3.3 – Локальная парциальная ПЭС для чистого циркония а), систем Zr–vac б), Zr–He^{vac} в), Zr–He^S г) с концентрацией дефекта 3 ат.%. Синей линии соответствует ПЭС 19-го атома циркония, зеленой – 10-го атома циркония, красной – атома гелия. Пунктирной линией обозначен уровень Ферми

Также стоит отметить на рисунках 3.3-3.4 в) *s*- и *p*-состояния гелия в диапазоне от -4 до -2 эВ, в котором общий вид кривых парциальных ПЭС *2s*-состояний гелия и *4d*-состояний циркония очень схож. Однако в диапазоне от -1,5 до 2 эВ наблюдаются отличительные от *d*-состояния циркония пики в *s*-состоянии гелия.

На рисунках 3.3-3.4 г) представлены локальные ПЭС для конфигурации с расположением атома гелия в *S* позиции. Отметим, что состояние гелия смещается ниже относительно уровня Ферми до величины порядка 14 эВ и 13,5 эВ для суперячеек на рисунках 3.1 а) и б), соответственно. Также наблюдаются повтор пиков *2s*-состояния гелия и *4d*-состояний циркония. Данный факт свидетельствует о сильной гибридизации этих состояний.

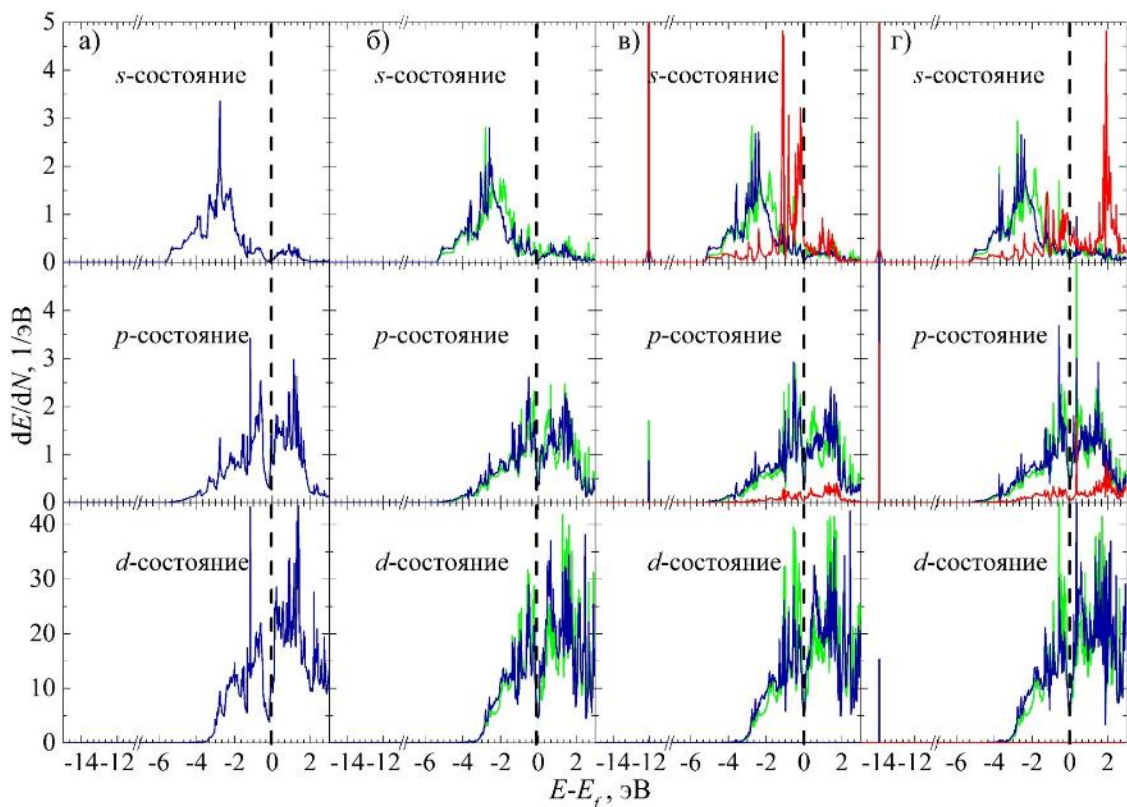


Рисунок 3.4 – Локальная парциальная ПЭС для чистого циркония а), систем Zr–vac б), Zr–He^{vac} в), Zr–He^S г) с концентрацией дефекта 6 ат.%. Синей линии соответствует ПЭС 9-го атома циркония, зеленой – 5-го атома циркония, красной – атома гелия. Пунктирной линией обозначен уровень Ферми

Для подробного анализа образовавшихся гибридизированных состояний He 2s и Zr 4d мы рассчитали кривые СОНР (см. рисунок 3.5).

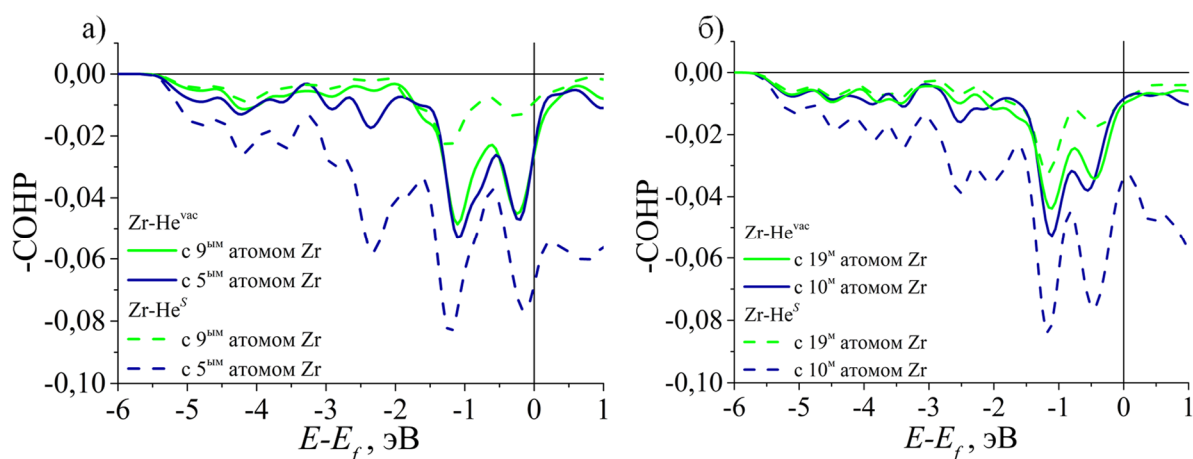


Рисунок 3.5 – СОНР кривые для взаимодействия He–Zr в системах Zr–He–vac с концентрацией дефектов 3 ат.% а) и 6 ат.% б). Нумерация атомов ведется согласно рисунку 3.1

Отрицательные значения (-СОНР) для гибризованных $2s$ -состояния гелия и $4d$ -состояний циркония указывают на их антисвязывающий характер.

Значения СОНР для системы $Zr-He^{vac}$ примерно одинаковы для всех соседних атомов Zr . В случае расположения атома гелия в S позиции наблюдается увеличение антисвязывающих состояний с атомами 10, 11, 14 (5–7) и их уменьшение с атомами Zr 19, 20, 22–26 (9–11) для концентрации дефектов 3 ат.% (6 ат.%). Таким образом, когда гелий находится в вакансии, вокруг него находится двенадцать соседних атомов Zr . При смещении атома гелия из вакансии он отдаляется от атомов Zr 19, 20, 22–26 (9–11), лежащих в одной базисной плоскости с вакансией и сближается с атомами 10, 11, 14 (5–7), лежащих в соседней базисной плоскости при концентрации дефектов 3 ат.% (6 ат.%). Таким образом, несмотря на образование более сильных антисвязывающих состояний между атомами He и Zr 10, 11, 14 (5–7) для 3 ат.% (6 ат.%), из-за смещения атома He из вакансии в S позицию, это положение энергетически более выгодно для атома гелия из-за значительного ослабления его взаимодействия с девятью другими соседними атомами Zr .

4 Взаимодействие гелия и гелий-вакансионного комплекса с границей раздела между металлическими слоями цирконий/ниобий

4.1 Метод и детали расчета

В данной главе представлены результаты теоретического исследования взаимодействия гелия и гелий-вакансионного комплекса с границей раздела между слоями металлов, образованной поверхностями Zr (002) и Nb (111). Расчетная суперячейка пленки $Zr_{63}Nb_{40}$ состояла из 7 атомных слоев циркония и 10 атомных слоев ниобия (см. рисунок 4.1). Расчетные параметры решеток чистых Zr и Nb составили $a_{Zr} = 3,234 \text{ \AA}$, $c_{Zr} = 5,167 \text{ \AA}$ и $a_{Nb} = 3,292 \text{ \AA}$. Чтобы сформировать суперячейку пленки $Zr_{63}Nb_{40}$, теоретический параметр решетки a_{Nb} чистого Nb был уменьшен, а параметры решетки a_{Zr} и c_{Zr} чистого Zr были увеличены так, чтобы полная энергия суперячейки стала минимальной. В результате в суперячейке слой Zr имеет параметры решетки $a = 3,165 \text{ \AA}$ и $c = 5,160 \text{ \AA}$, а слой ниобия имеет параметр $a = 3,341 \text{ \AA}$. Найденное равновесное расстояние между атомными слоями Zr (002) и Nb (111) равно $2,215 \text{ \AA}$. Релаксация атомов металлов проводилась в ближайших к границе раздела трех атомных слоях циркония и пяти атомных слоях ниобия. Критерий сходимости по силам взят равным 50 мэВ/\AA . Максимальная энергия в базисе плоских волн выбиралась равной 420 эВ . Занятость электронных состояний была описана путем интегрирования зоны Бриллюэна, используя метод «холодного размытия» Метфесселя-Пакстона, с параметром размытия $0,03 \text{ эВ}$. На каждой итерации самосогласования собственные значения гамильтониана рассчитывались в сетке k -точек $3 \times 3 \times 1$.

Были исследованы различные положения атома гелия в T и O междоузлиях решетки ниобия (рисунок 4.2) и T1, O и VO междоузлиях решетки циркония (рисунок 3.1) с концентрацией гелия $\sim 3 \text{ ат.}\%$. Всевозможные неэквивалентные положения тетраэдрических и октаэдрических междоузлий в пленке $Zr_{63}Nb_{40}$ и представлены на рисунке 4.1 б) и в). Также изучалось влияние вакансии на положение атома гелия в решетке циркония. Это было достигнуто

путем удаления по одному атому из решетки циркония и ниобия. Удаленные атомы отмечены цифрами на рисунке 4.1 а).

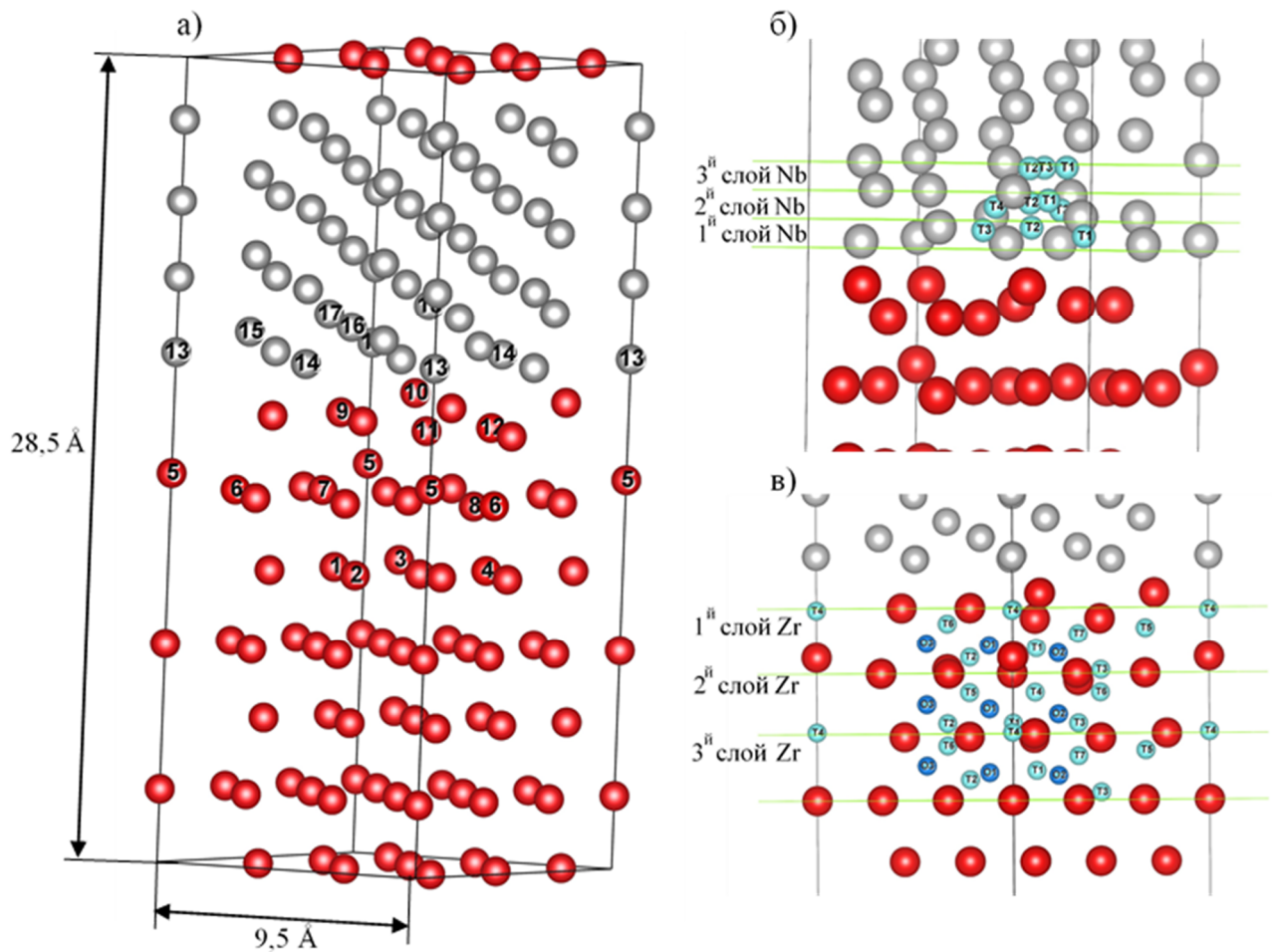


Рисунок 4.1 – а) Расчетная суперячейка пленки $Zr_{63}Nb_{40}$ и положения тетраэдрических (Т) и октаэдрических (О) междуузлий в системе $Zr_{63}Nb_{40}$: б) в ниобии, в) в цирконии. Серым цветом показаны атомы ниобия, красным – циркония. Цифрами отмечены атомы, где образовывались вакансии

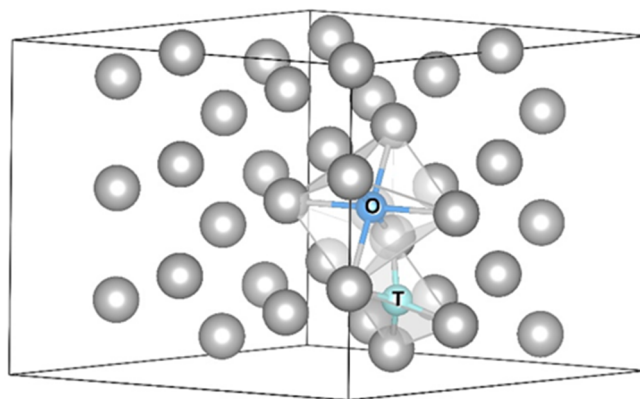


Рисунок 4.2 – Положения тетраэдрического (Т) и октаэдрического (О) междуузлий в решетке ниобия

4.2 Энергия внедрения атома гелия в междузлия

Энергия внедрения атома гелия в междузлия решеток циркония и ниобия, а также пленки $Zr_{63}Nb_{40}$ была посчитана по следующей формуле:

$$E_{He} = E(Zr_m Nb_n He) - E(He) - E(Zr_m Nb_n), \quad (4.1)$$

где $E(Zr_m Nb_n He)$ – полная энергия системы с гелием, находящимся в тетраэдрическом или октаэдрическом междузлиях, $E(Zr_m Nb_n)$ – полная энергия m атомов циркония и n атомов ниобия в расчетной ячейке.

Результаты расчетов, производимых по формуле (4.1), представлены в таблице 4.1.

Таблица 4.1. Результаты расчетов энергии внедрения атома гелия в систему $Zr_{63}Nb_{40}$

Междузлие	№	E_{He} , эВ					
		в 1-м монослое Zr	во 2-м монослое Zr	в 3-м монослое Zr	в 1-м монослое Nb	во 2-м монослое Nb	в 3-м монослое Nb
		Т	1	1,911	2,486	2,371	1,754
2	2,392		2,331	2,759	2,451	2,457	3,321
3	2,760		2,996	2,820	2,452	1,957	2,749
4	1,741		1,909	1,990	-	2,456	3,395
5	1,764		2,379	2,561	-	-	-
6	2,125		2,530	2,863	-	-	-
7	2,559		-	2,777	-	-	-
О	1	2,057	2,468	2,827	-	-	-
	2	2,431	2,479	2,937	-	-	-
	3	2,303	2,364	2,369	-	-	-

Отдельно были рассчитаны энергии внедрения атома гелия в междузлия чистого циркония (таблица 3.1) и ниобия. При концентрации гелия ~ 3 ат.% его энергия внедрения в тетра- и октаэдрические междузлия решетки ниобия составляет 3,170 и 3,438 эВ, соответственно. Поскольку энергия внедрения гелия

в тетраэдрические междоузлия ниже, чем в октаэдрическое, то в случае пленки $Zr_{63}Nb_{40}$ были рассмотрены только тетраэдрические координации атома гелия.

Из результатов таблицы 4.1 видно, что энергия внедрения в каждом слое циркония и ниобия достаточно сильно варьируется. На рисунке 4.3 представлена зависимость минимальных значений энергий внедрения атома гелия по слоям в пленке $Zr_{63}Nb_{40}$. Из рисунка 4.3 видно, что при отдалении атома гелия от границы раздела, значение энергии внедрения увеличивается как в цирконии, так и в ниобии. Отметим, что значения E_{He} в случае с гелием в слоях, расположенных дальше от границы раздела, присутствуют гораздо больше значений, сопоставимых со значениями E_{He} систем $Zr_{36}He$ и $Nb_{36}He$.

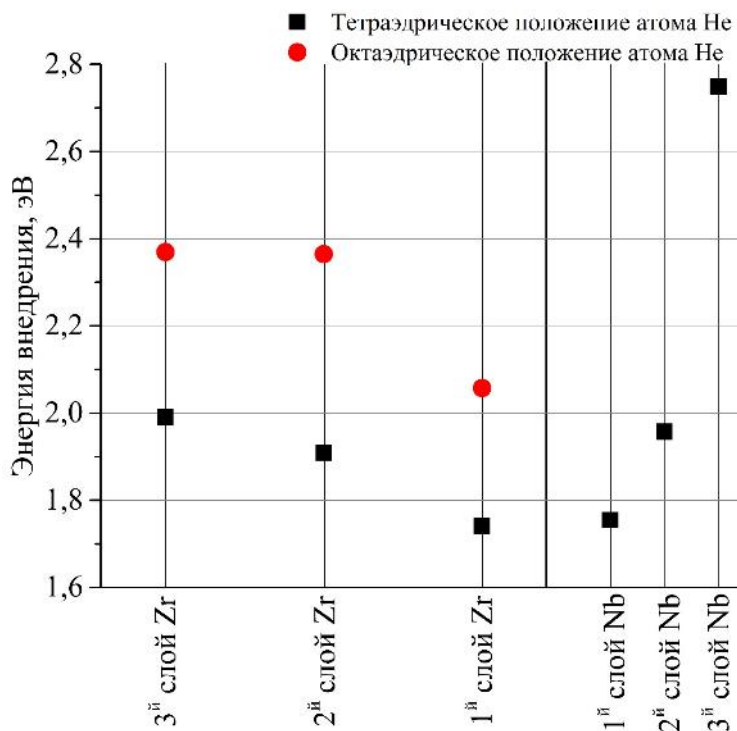


Рисунок 4.3 – Минимальные значения энергии внедрения He в тетра- и октаэдрические междоузлия в атомных слоях циркония и ниобия пленки $Zr_{63}Nb_{40}$. Черная вертикальная линия указывает положение границы раздела.

Номер слоя отсчитывается от границы раздела

4.3 Энергии образования вакансии и гелий-вакансионного комплекса

Для исследования влияния гелия и вакансии на энергетику их взаимодействия с цирконием были рассчитаны энергия образования вакансии в решетке:

$$E_{vac} = E(\text{Zr}_{m-x}\text{Nb}_{n-y}) + xE(\text{Zr}) + yE(\text{Nb}) - E(\text{Zr}_m\text{Nb}_n), \quad (4.2)$$

и энергия образования гелий-вакансионного (He-vac) комплекса:

$$E_{\text{He-vac}} = E(\text{Zr}_{m-x}\text{Nb}_{n-y}\text{He}) + xE(\text{Zr}) + yE(\text{Nb}) - E(\text{He}) - E(\text{Zr}_m\text{Nb}_n), \quad (4.3)$$

где, $E(\text{Zr})$ и $E(\text{Nb})$ – полная энергия, приходящаяся на один атом циркония и ниобия, соответственно, в решетке чистого металла, $E(\text{He})$ – полная энергия изолированного атома гелия, $E(\text{Zr}_{m-x}\text{Nb}_{n-y})$ – полная энергия системы цирконий-ниобий с вакансией, $E(\text{Zr}_{m-x}\text{Nb}_{n-y}\text{He})$ – полная энергия гелий-вакансионного комплекса системы цирконий-ниобий.

Рассчитанное значение энергии образования вакансии в чистом ниобии составило 2,67 эВ, что находится в неплохом согласии со значением 2,88 эВ, посчитанным авторами работы [48]. На рисунке 4.4 представлена зависимость минимальных энергий образования вакансии и гелий-вакансионного комплекса от номера атомного слоя металла в пленке $\text{Zr}_{63}\text{Nb}_{40}$.

Из анализа результатов, представленных на рисунке 4.5, следует, что значения энергий образования вакансии и гелий-вакансионного комплекса увеличиваются при отдалении от границы раздела в пленке $\text{Zr}_{63}\text{Nb}_{40}$. Однако отметим, что в случае циркония значение энергии образования вакансии и гелий-вакансионного комплекса в первом и втором слоях сопоставимы. Таким образом, подтверждается факт скопления дефектов возле границы раздела. Интересен тот факт, что в первом атомном слое Nb энергия образования вакансии меньше практически в 2 раза, чем в первом атомном слое Zr. То есть, вакансии и гелий-вакансионному комплексу более выгодно образовываться в первом атомном слое ниобия, нежели циркония. Однако, с увеличением номера слоя величина энергии образования вакансий и комплексов в ниобии растет заметно быстрее, чем в

цирконии, что может свидетельствовать о том, что вакансии и гелий-вакансионные комплексы будут все-таки образовываться по большей части в цирконии, нежели в ниобии.

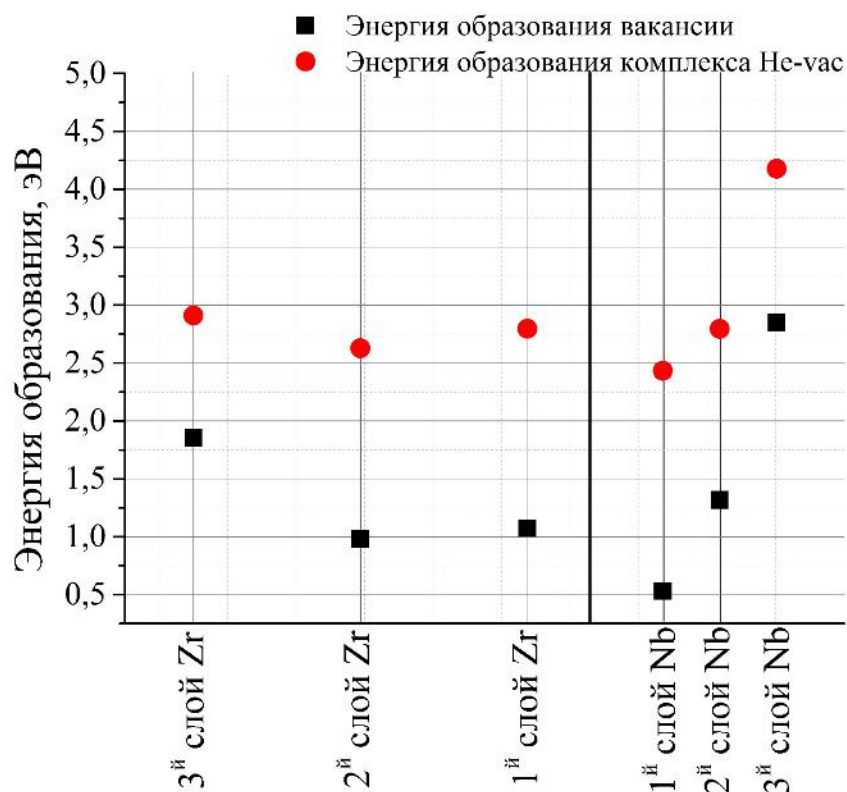


Рисунок 4.4 – Минимальные значения энергии образования вакансии и гелий-вакансионного комплекса в атомных слоях вблизи границы раздела в пленке $Zr_{63}Nb_{40}$. Черная вертикальная линия указывает положение границы раздела.

Номер слоя отсчитывается от границы раздела

5 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

В рамках текущей работы проводится моделирование многослойного покрытия цирконий/ниобий. В частности, рассматривается влияние внедренного атома гелия на атомную структуру нанометаллического покрытия цирконий/ниобий. Моделирование проводилось в пакете программ Abinit на высокопроизводительном сервере НРС-РНТД, принадлежащему Томскому Политехническому университету.

Многослойное покрытие цирконий/ниобий в последние десятилетия получило широкое распространение в отечественной промышленности. Данное покрытие увеличивает срок службы тепловыделяющего элемента за счет описанных выше свойств.

5.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Потенциальными потребителями выступают атомные станции, как находящиеся в эксплуатации, так и только строящиеся. Стоит сказать, что с расширением сферы влияния госкорпорации «Росатом» на Ближнее Зарубежье, выражающееся в заключении договор о строительстве атомных станций на территориях соседних государств, рынок потребителей тепловыделяющих элементов, при производстве на которые было нанесено многослойное покрытие цирконий/ниобий, существенно расширяется. Исходя из этого, целевым рынком следует считать госкорпорацию «Росатом» и ее дочернюю компанию «ТВЭЛ».

В данной ситуации сегментирование рынка не требуется, так как сегментирование подразумевает наличие нескольких потребителей, отличающихся масштабом и производством.

5.2 Анализ конкурентных технических решений

При ведении собственного производства необходим систематический анализ конкурирующих разработок во избежание потери занимаемой ниши рынка, что позволяет оценить эффективность научной разработки

Позиция разработки и конкурентов оценивается по каждому показателю экспертным путем градации от 1 до 5 от слабого к сильному.

Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле:

$$K = \sum B_i B_i \quad (5.1)$$

Здесь B_i – вес показателя (в долях единицы);

B_i – балл i -го показателя.

В таблице 5.1 приведена оценочная карта, включающая конкурентные технические разработки в области производства оболочек тепловыделяющих элементов. Были рассмотрены следующие покрытия: Zr/Nb, Cu/Nb и Cu/W.

Таблица 5.1 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических разработок

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентно-способность		
		Б _ф	Б _{к1}	Б _{к2}	К _ф	К _{к1}	К _{к2}
1	2	3	4	5	6	7	8
Технические критерии обогащаемого материала							
1. Сложность производства	0,21	3	3	3	0,63	0,63	0,63
2. Сечение захвата тепловых нейтронов	0,09	5	4	2	0,45	0,36	0,18
3. Температура плавления	0,04	5	4	4	0,2	0,16	0,16
4. Коррозионная стойкость	0,06	4	5	3	0,24	0,3	0,18
5. Предел прочности	0,052	4	3	3	0,208	0,156	0,156
6. Срок эксплуатации	0,108	3	3	3	0,324	0,324	0,324
7. Микроструктура	0,03	5	4	3	0,15	0,12	0,09
8. Дополнительные условия производства	0,14	3	5	4	0,42	0,7	0,56
9. Радиационная стойкость	0,07	5	4	3	0,35	0,28	0,21
Экономические критерии оценки эффективности							
10. Цена	0,1	5	5	2	0,5	0,5	0,2
11. Конкурентоспособность продукта	0,05	4	3	1	0,2	0,15	0,05
12. Финансирование научной разработки	0,05	5	4	4	0,25	0,2	0,2
Итого:	1				3,922	3,88	2,94

Б_ф – рассматриваемое Zr/Nb покрытие;

Б_{к1} – покрытие Cu/Nb;

Б_{к2} – покрытие Cu/W.

Для лучшего понимания приведем разбор каждого критерия из таблицы:

- сложность производства – характеризуется затратами и требованиями к установке по осуществлению напыления покрытий;
- сечение захвата тепловых нейтронов – высокие значения сечения характеризуются большими потерями нейтронов и как следствие снижению эффективности покрытия;
- температура плавления – низкая температура плавления приводит к невозможности использования в различных режимах работы ядерного реактора;
- коррозионная стойкость – высокое значение стойкости не позволяет разрушаться материалу под внешним воздействием;
- предел прочности – достижение данного предела приводит к разрушению покрытия;
- срок эксплуатации – общее время эксплуатации тепловыделяющего элемента с данным покрытием;
- микроструктура – меньшие размеры зерен приводят к усилению стойкости к разрушению;
- дополнительные условия производства – необходимость проведения дополнительных термических обработок;
- радиационная стойкость – способность покрытия «сопротивляться» воздействию дефектов, возникающих при работе ядерного реактора;
- цена – общие затраты на создание покрытия;
- конкурентоспособность продукта – заинтересованность в данном покрытии со стороны производителя;
- финансирование научной разработки – количество исследований, проводимое по тематике данного покрытия.

По результатам проведенного анализа видно, что многослойное наноразмерное покрытие Zr/Nb значительно преобладает над покрытием Cu/W и незначительно над Cu/Nb. Последнее объясняется использованием ниобия в обоих покрытиях.

5.3 SWOT-анализ

Сначала необходимо выявить сильные и слабые стороны проекта, и его возможности и угрозы. Результаты SWOT-анализа представлены в таблице 5.2.

Таблица 5.2 – Первый этап SWOT-анализа

	Сильные стороны научно-исследовательского проекта:	Слабые стороны научно-исследовательского проекта:
	<p>C1. Заявленная экономичность и энергоэффективность метода расчета.</p> <p>C2. Сопоставимая стоимость производства по сравнению с другими покрытиями.</p> <p>C3. Легкий интерфейс управления</p> <p>C4. Безопасность проведения исследований.</p> <p>C5. Упрощенность подготовки материалов перед исследованием.</p>	<p>Сл1. Недостаточность доказательства пригодности и достоверности.</p> <p>Сл2. Низкий уровень проникающей способности на рынок.</p> <p>Сл3. Отсутствие необходимого оборудования для выполнения расчетов.</p> <p>Сл4. Длительный срок расчетов.</p>
Возможности:		
<p>V1. Решение фундаментальных задач исследования.</p> <p>V2. Хороший спрос на рынке антикоррозионного металлического покрытия.</p> <p>V3. Появление дополнительного спроса на покрытие.</p> <p>V4. Повышение стоимости конкурентных разработок.</p>		
Угрозы:		
<p>У1. Несвоевременное финансирование научного исследования при дальнейшем развитии проекта.</p> <p>У2. Развитая конкуренция из похожих научно-исследовательских проектов.</p> <p>У3. Недостаточность точности расчетов.</p>		

Второй этап состоит в выявлении соответствия сильных и слабых сторон научно-исследовательского проекта внешним условиям окружающей среды. Это соответствие или несоответствие должны помочь выявить степень необходимости проведения стратегических изменений.

В рамках данного этапа необходимо построить интерактивную матрицу проекта. Ее использование помогает разобраться с различными комбинациями взаимосвязей областей матрицы SWOT. Каждый фактор помечается либо знаком «+» (означает сильное соответствие сильных сторон возможностям), либо знаком «-» (что означает слабое соответствие); «0» – если есть сомнения в том, что поставить «+» или «-». Интерактивные матрицы представлены в таблицах 5.3, 5.4, 5.5 и 5.6.

Таблица 5.3 – Интерактивная матрица проекта «Сильные стороны и возможности»

		Сильные стороны				
		C1	C2	C3	C4	C5
Возможности проекта	B1	-	-	-	-	+
	B2	-	-	-	-	-
	B3	-	-	-	-	-
	B4	-	+	-	-	-

Таблица 5.4 – Интерактивная матрица проекта «Слабые стороны и возможности»

		Слабые стороны			
		Сл1	Сл2	Сл3	Сл4
Возможности проекта	B1	+	-	-	+
	B2	-	+	-	-
	B3	-	+	-	-

Таблица 5.5 – Интерактивная матрица проекта «Сильные стороны и угрозы»

		Сильные стороны				
		C1	C2	C3	C4	C5
Угрозы	У1	-	-	-	-	-
	У2	+	-	-	-	-
	У3	+	-	-	-	-

Таблица 5.6 – Интерактивная матрица проекта «Слабые стороны и угрозы»

		Слабые стороны			
		Сл1	Сл2	Сл3	Сл4
Угрозы	У1	-	-	+	-
	У2	+	+	-	+
	У3	-	-	-	-

Таким образом, в рамках третьего этапа должна быть составлена итоговая матрица SWOT-анализа (таблица 5.7).

Таблица 5.7 – Итоговая матрица SWOT-анализа

	<p>Сильные стороны научно-исследовательского проекта:</p> <p>С1. Заявленная экономичность и энергоэффективность метода расчета.</p> <p>С2. Сопоставимая стоимость производства по сравнению с другими покрытиями.</p> <p>С3. Легкий интерфейс управления</p> <p>С4. Безопасность проведения исследований.</p> <p>С5. Упрощенность подготовки материалов перед исследованием.</p>	<p>Слабые стороны научно-исследовательского проекта:</p> <p>Сл1. Недостаточность доказательства пригодности и достоверности.</p> <p>Сл2. Низкий уровень проникающей способности на рынок.</p> <p>Сл3. Отсутствие необходимого оборудования для выполнения расчетов.</p> <p>Сл4. Длительный срок расчетов.</p>
<p>Возможности:</p> <p>В1. Решение фундаментальных задач исследования.</p> <p>В2. Хороший спрос на рынке антикоррозионного металлического покрытия.</p> <p>В3. Появление дополнительного спроса на покрытие.</p> <p>В4. Повышение стоимости конкурентных разработок.</p>	<p>В4С2. Понижение стоимости исследования покрытия по сравнению с аналогами приводит к повышению спроса на данное покрытие.</p> <p>В1С5. Проведение фундаментальных исследований по покрытию не требует серьезной предварительной подготовки, что упрощает эти исследования.</p>	<p>В1Сл1. Правильность решения фундаментальных задач ограничивается отсутствием экспериментальной проверки.</p> <p>В2В3Сл2. Низкий уровень проникновения на рынок и спроса характеризуется ограниченным кругом отечественных потребителей, которые уже используют данное покрытие.</p> <p>В1Сл4. Многие из фундаментальных исследовательских задач требуют больших временных затрат на их реализацию.</p>
<p>Угрозы:</p> <p>У1. Несвоевременное финансирование научного исследования при дальнейшем развитии проекта.</p> <p>У2. Развитая конкуренция из похожих научно-исследовательских проектов.</p> <p>У3. Недостаточность точности расчетов.</p>	<p>У2С1. Схожие научно-исследовательские проекты обладают сопоставимыми характеристиками по экономичности и энергоэффективности метода расчета.</p>	<p>У1У2У3Сл1Сл2Сл3Сл4. Отсутствие финансирования скажется на доступности мощного оборудования, имеющегося у конкурентов, что скажется как на конкурентоспособности, так и на точности и времени расчетов, что может привести к расхождению с экспериментальными результатами. Это в совокупности помешает проникновению на иностранный рынок.</p>

5.4 Определение возможных альтернатив проведения научных исследований

В таблице 5.8 представлена морфологическая матрица для выполнения расчетов, являющихся основной частью работы.

Таблица 5.8 – Морфологическая матрица

	1	2
А. Оборудование для расчетов	ТПУ, Высокопроизводительный сервер HPC-PHTD	ТГУ, Высокопроизводительный сервер СКИФ Cyberia
Б. Пакет программ для выполнения расчетов	Abinit	VASP
В. Затраты на приобретение лицензии	Бесплатно	5 600\$ / бесплатно (Зависит от наличия лицензии у владельцев сервера)

5.5 Планирование научно-исследовательских работ

5.5.1 Структура работ в рамках научного исследования

Планирование комплекса предполагаемых работ осуществляется в следующем порядке:

- разработка технического задания
- выбор направления исследования
- теоретические и практические исследования
- обобщение и оценка результатов
- оформление комплекта документации по ВКР

Для выполнения научных исследований формируется рабочая группа, в состав которой входят: бакалавр (Б), научный руководитель (НУ) и консультант (К). Составим перечень этапов и работ в рамках проведения НИ и проведем распределение исполнителей по видам работ (таблица 5.9).

Таблица 5.9 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Основные этапы	№ работ	Содержание работ	Должность исполнителя
Разработка технического задания	1	Составление и утверждение технического задания	НУ, К, Б
Выбор направления исследования	2	Подбор и изучение материалов по выбранной теме	Б
	3	Выбор направления исследований	НУ, К, Б
	4	Календарное планирование работ по теме	НУ, К, Б
Теоретические и практические исследования	5	Выбор методики для исследований	НУ, К, Б
	6	Ознакомление с методикой исследования и программным обеспечением	Б
	7	Определение параметров расчета	НУ, К, Б
	8	Проведения расчета на ЭВМ	Б
Обобщение и оценка результатов	9	Проверка полученных результатов	Б
	10	Оформление заключения	Б
Оформление комплекта документации по ВКР	11	Составление пояснительной записки	Б

5.5.2 Определение трудоемкости выполнения работ

Трудовые затраты в большинстве случаев образуют основную часть стоимости разработки, поэтому важным моментом является определение трудоемкости работ каждого из участников научного исследования.

Трудоемкость выполнения научного исследования оценивается экспертным путем в человеко-днях и носит вероятностный характер, т.к. зависит от множества трудно учитываемых факторов. Для определения ожидаемого (среднего) значения трудоемкости $t_{ож\ i}$ используется следующая формула (5.2):

$$t_{ож\ i} = \frac{3t_{\min\ i} + 2t_{\max\ i}}{5} \quad (5.2)$$

Здесь $t_{ож\ i}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения i -ой работы чел.-дн.;

$t_{\min\ i}$ – минимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы (оптимистическая оценка: в предположении наиболее благоприятного стечения обстоятельств), чел.-дн.;

$t_{\max i}$ – максимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы (пессимистическая оценка: в предположении наиболее неблагоприятного стечения обстоятельств), чел.-дн.

Исходя из ожидаемой трудоемкости работ, определяется продолжительность каждой работы в рабочих днях T_{pi} , учитывающая параллельность выполнения работ несколькими исполнителями:

$$T_{pi} = \frac{t_{ож\ i}}{Ч_i} \quad (5.3)$$

где $Ч_i$ – численность исполнителей, выполняющих одновременно одну и ту же работу на данном этапе, чел.

5.5.3. Разработка графика проведения научного исследования

Наиболее удобным и наглядным является построение ленточного графика проведения научных работ в форме диаграммы Ганта.

Для удобства построения графика, длительность каждого из этапов работ из рабочих дней следует перевести в календарные дни. Для этого необходимо воспользоваться следующей формулой:

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k_{\text{кал}}, \quad (5.4)$$

где T_{ki} – продолжительность выполнения i -й работы в календарных днях;

$k_{\text{кал}}$ – коэффициент календарности.

Коэффициент календарности определяется по следующей формуле (5.5):

$$k_{\text{кал}} = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}}}, \quad (5.5)$$

где $T_{\text{кал}}$ – количество календарных дней в году;

$T_{\text{вых}}$ – количество выходных дней в году;

$T_{\text{пр}}$ – количество праздничных дней в году.

Таким образом:

$$k_{\text{кал}} = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}}} = \frac{365}{365 - 96 - 22} = 1,477$$

Все рассчитанные значения необходимо свести в таблицу 5.10.

Для удобства введены следующие обозначения:

На основе таблицы 5.10 строится календарный план-график в виде диаграммы Ганта, представленной на рисунке 5.1.

Таблица 5.10 – Временные показатели проведения научного исследования

№	Название	Трудоемкость						Исполнитель	Т _р , раб. дн		Т _к , кал. дн	
		t _{min}		t _{max}		t _{ож}			Исп.1	Исп.2	Исп.1	Исп.2
		Исп.1	Исп.2	Исп.1	Исп.2	Исп.1	Исп.2					
1	Составление и утверждение технического задания	0,3	0,3	1	1	0,58	0,58	НР	0,12	0,12	0,17	0,17
		0,3	0,3	1	1	0,58	0,58	К	0,12	0,12	0,17	0,17
		0,3	0,3	1	1	0,58	0,58	Б	0,12	0,12	0,17	0,17
2	Подбор и изучение материалов по выбранной теме	5	5	10	10	7	7	Б	7,00	7,00	10,34	10,34
3	Выбор направления исследований	1	1	2	2	1,4	1,4	НР	0,47	0,47	0,69	0,69
		1	1	2	2	1,4	1,4	К	0,47	0,47	0,69	0,69
		1	1	2	2	1,4	1,4	Б	0,47	0,47	0,69	0,69
4	Календарное планирование работ по теме	1	1	2	2	1,4	1,4	НР	0,47	0,47	0,69	0,69
		1	1	2	2	1,4	1,4	К	0,47	0,47	0,69	0,69
		1	1	2	2	1,4	1,4	Б	0,47	0,47	0,69	0,69
5	Выбор методики для исследований	0,3	0,3	1	1	0,58	0,58	НР	0,19	0,19	0,29	0,29
		0,3	0,3	1	1	0,58	0,58	К	0,19	0,19	0,29	0,29
		0,3	0,3	1	1	0,58	0,58	Б	0,19	0,19	0,29	0,29
6	Ознакомление с методикой исследования и программным обеспечением	7	7	14	14	9,8	9,8	Б	9,80	9,80	14,48	14,48
7	Определение параметров расчета	1	1	2	2	1,4	1,4	НР	0,47	0,47	0,69	0,69
		1	1	2	2	1,4	1,4	К	0,47	0,47	0,69	0,69
		1	1	2	2	1,4	1,4	Б	0,47	0,47	0,69	0,69
8	Проведения расчета на ЭВМ	30	30	40	40	34	34	Б	34,00	34,00	50,24	50,24
9	Проверка полученных результатов	12	12	17	17	14	14	Б	8,20	8,20	12,13	12,13
10	Оформление заключения	3	3	4	4	3,4	3,4	Б	3,40	3,40	5,02	5,02
11	Составление пояснительной записки	8	8	12	12	9,6	9,6	Б	9,60	9,60	14,19	14,19

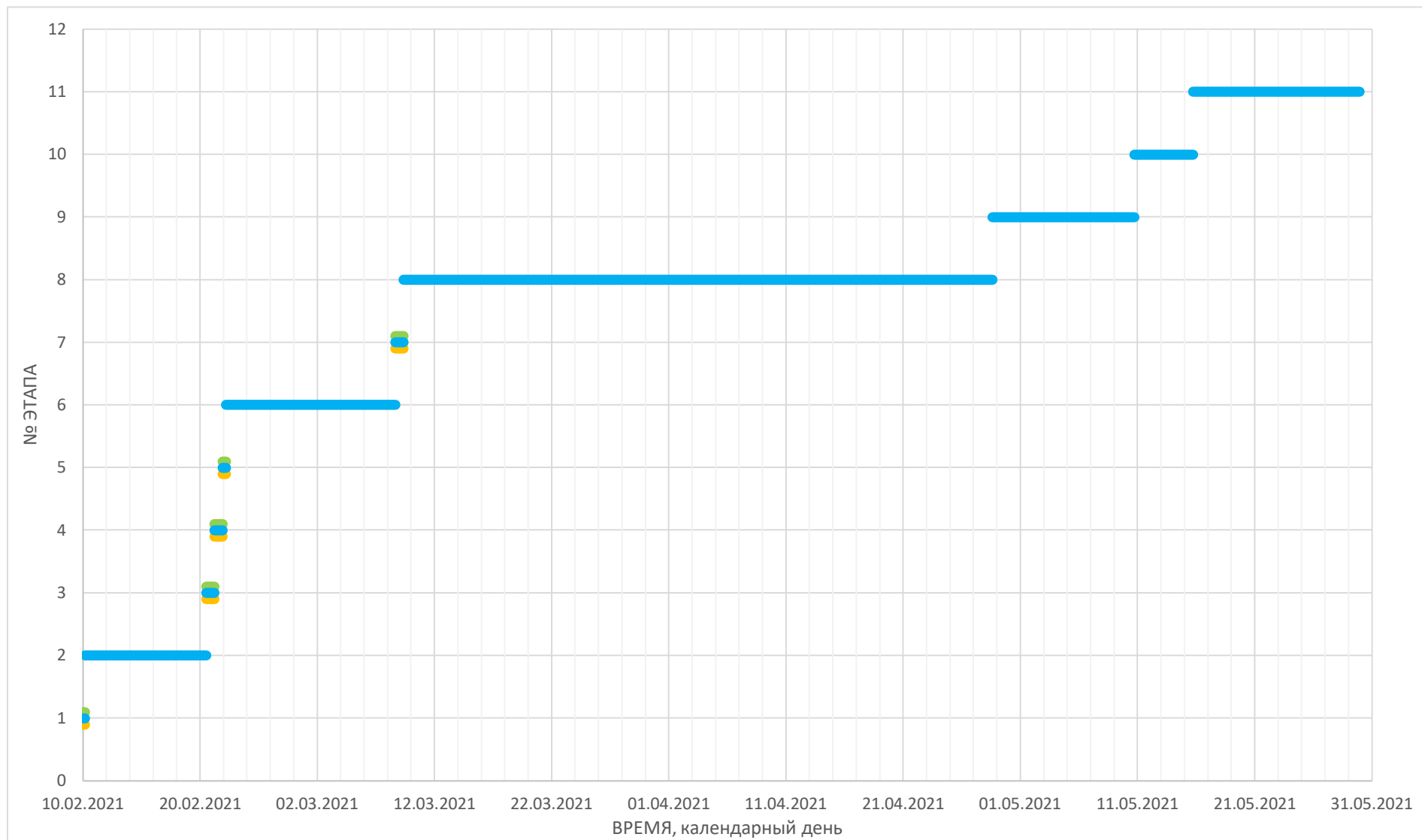


Рисунок 5.1 – Календарный план-график проведения НИОКР. Синим цветом показан бакалавр, оранжевым – научный руководитель, зеленым – консультант

5.6 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)

В процессе формирования бюджета НТИ используется следующая группировка затрат по статьям:

- материальные затраты НТИ;
- затраты на основное оборудование для научно-экспериментальных работ;
- основная заработная плата исполнителей темы;
- дополнительная заработная плата исполнителей темы;
- отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления);
- накладные расходы.

5.6.1 Расчет материальных затрат НТИ

Для выполнения данной ВКР требуются затраты на:

- приобретаемую со стороны продукцию, необходимую для обработки результатов;
- оплаты соединения с высокопроизводительным сервером через Интернет.

Данные затраты не подходят под определение материальных затрат, поэтому их учет не требуется. В рамках данной работы отсутствуют такие материальные затраты, как:

- приобретение материальных запасов, сырья, комплектующих и составных частей для основных средств производственных подразделений;
- покупка топлива и горюче-смазочных материалов, электроэнергии, тепловой энергии, воды для выполнения технологического процесса;
- закупка работ, товаров и услуг, необходимых для осуществления производственного цикла;
- убытки и недостачи продукции в пределах установленных норм естественной убыли;
- прочие суммы расходов.

5.6.2 Расчет затрат на оборудование для научно-экспериментальных работ

Для оборудования нужно рассчитать величину годовой амортизации по следующей формуле (5.6):

$$A_{год} = \frac{C_{перв}}{T_{пн}} \quad (5.6)$$

Здесь $C_{перв}$ – первоначальная стоимость, руб;

$T_{пн}$ – время полезного использования, год.

Данная работа не предполагает покупку оборудования, превышающего по стоимости 100 000 рублей. Работа на высокопроизводительном сервере НРС-РНТД не предполагает получение прибыли со стороны пользователя. Учет амортизации этого оборудования заложен в расчет бюджета владельца – Томского Политехнического университета.

5.6.3 Основная заработная плата исполнителей темы

Статья включает основную заработную плату работников, непосредственно занятых выполнением НИИ, (включая премии и доплаты) и дополнительную заработную плату. Также включается премия, выплачиваемая ежемесячно из фонда заработной платы в размере 20–30 % от тарифа или оклада:

$$Z_{зн} = Z_{осн} + Z_{доп} \quad (5.7)$$

Здесь $Z_{осн}$ – основная заработная плата;

$Z_{доп}$ – дополнительная заработная плата (12-20 % от $Z_{осн}$).

Основная заработная плата ($Z_{осн}$) руководителя (лаборанта, инженера) от предприятия (при наличии руководителя от предприятия) рассчитывается по следующей формуле:

$$Z_{осн} = Z_{дн} \cdot T_p \quad (5.8)$$

Здесь T_p – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб. дн. (таблица 5.10);

$Z_{дн}$ – среднедневная заработная плата работника, руб.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_{\text{м}} \cdot M}{F_{\text{д}}} \quad (5.9)$$

Здесь $Z_{\text{м}}$ – месячный должностной оклад работника, руб.;

M – количество месяцев работы без отпуска в течение года:

при отпуске в 24 раб. дня $M=11,2$ месяца, 5-дневная неделя;

при отпуске в 48 раб. дней $M=10,4$ месяца, 6-дневная неделя;

$F_{\text{д}}$ – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн. (таблица 5.11).

В таблице 5.11 приведен баланс рабочего времени каждого работника НТИ.

Таблица 5.11 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Бакалавр	Консультант
Календарное число дней	365	365	365
Количество нерабочих дней			
– выходные дни	52	52	52
– праздничные дни	14	14	14
Потери рабочего времени			
– отпуск	48	48	48
– невыходы по болезни	7	7	7
Действительный годовой фонд рабочего времени	245	245	245

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_{\text{м}} = Z_{\text{тс}} \cdot (1 + k_{\text{пр}} + k_{\text{д}}) \cdot k_{\text{р}} \quad (5.10)$$

Здесь $Z_{\text{тс}}$ – заработная плата по тарифной ставке, руб.;

$k_{\text{пр}}$ – премиальный коэффициент, равный 0,3 (т.е. 30% от $Z_{\text{тс}}$);

$k_{\text{д}}$ – коэффициент доплат и надбавок составляет 50%;

$k_{\text{р}}$ – районный коэффициент, равный 1,3 (для Томска).

Расчёт основной заработной платы приведён в таблице 5.12.

Таблица 5.12 – Расчет основной заработной платы

Исполнитель	$Z_{мс}$, руб	$k_{нр}$	$k_{д}$	$k_{р}$	$Z_{м}$, руб	$Z_{д}$, руб	$T_{р}$, день	$Z_{осн}$, руб
Бакалавр	8 600	0,3	0,5	1,3	20 124	854	109	93 044
Научный руководитель	12 070				28 244	1 199	3	3 028
Консультант	12 070				28 244	1 199	3	3 028
ИТОГО								99101

Расчет дополнительной заработной платы ведется по следующей формуле:

$$Z_{доп} = k_{доп} \cdot Z_{осн} \quad (5.11)$$

Здесь $k_{доп}$ – коэффициент дополнительной заработной платы, равный 0,15.

Общая заработная исполнителей работы представлена в таблице 5.13.

Таблица 5.13 – Общая заработная плата исполнителей

Исполнитель	$Z_{осн}$, руб	$Z_{доп}$, руб	$Z_{зп}$, руб
Бакалавр	93 044	13 957	107 001
Научный руководитель	3 028	454	3 483
Консультант	3 028	454	3 483
ИТОГО	99 101	14 865	113 966

5.6.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется исходя из следующей формулы:

$$Z_{внеб} = k_{внеб} \cdot (Z_{осн} + Z_{доп}) \quad (5.12)$$

Здесь $k_{внеб}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.).

В соответствии с положениями подпункта 7 пункта 1 и подпункта 3 пункта 2 статьи 427 Налогового кодекса Российской Федерации для некоммерческих организаций (за исключением государственных (муниципальных) учреждений), зарегистрированных в установленном законодательством Российской Федерации порядке, применяющих упрощенную систему налогообложения и осуществляющих в соответствии с учредительными

документами деятельность в области социального обслуживания граждан, научных исследований и разработок, образования, здравоохранения, культуры и искусства (деятельность театров, библиотек, музеев и архивов) и массового спорта (за исключением профессионального) применяются пониженные тарифы страховых взносов в совокупном размере 20% в течение 2017-2024 годов

Отчисления во внебюджетные фонды представлены в таблице 5.14.

Таблица 5.14 – Отчисления во внебюджетные фонды

Исполнитель	З _{осн} , руб	З _{доп} , руб	З _{внеб} , руб
Бакалавр	93 044	13 957	21 400
Научный руководитель	3 028	454	697
Консультант	3 028	454	697
ИТОГО			22 793

5.6.5 Накладные расходы

Величина накладных расходов определяется по следующей формуле:

$$Z_{накл} = k_{нр} \cdot (Z_{осн} + Z_{доп} + Z_{внеб}) \quad (5.13)$$

Здесь $k_{нр}$ – коэффициент, учитывающий накладные расходы.

Величину коэффициента накладных расходов можно взять в размере 16 %. Накладные расходы представлены в таблице 5.15.

Таблица 5.15 – Накладные расходы

	Исп. 1	Исп. 2
Основная заработная плата	99 101	99 101
Дополнительная заработная плата	14 865	14 865
Отчисления во внебюджетные фонды	22 793	22 793
Накладные расходы	21 882	21 882

5.6.6. Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

Рассчитанная величина затрат научно-исследовательской работы является основой для формирования бюджета затрат проекта, который при формировании договора с заказчиком защищается научной организацией в качестве нижнего предела затрат на разработку научно-технической продукции.

Определение бюджета затрат на научно-исследовательский проект по каждому варианту исполнения приведен в таблице 5.16.

Таблица 5.16 – Расчет бюджета затрат НТИ

Наименование статьи	Сумма		Примечание
	Исп. 1	Исп. 2	
1. Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	99 101	99 101	Таблица 4.12
2. Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	14 865	14 865	Таблица 4.13
3. Отчисления во внебюджетные фонды	22 793	22 793	Таблица 4.14
4. Накладные расходы	21 882	21 882	16 % от суммы ст. 1-3
5. Бюджет затрат НТИ	158 641	158 641	Сумма ст. 1-4

Как видно из таблицы 5.16 основные затраты НТИ приходятся на основную заработную плату исполнителей.

5.7 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования

Определение эффективности происходит на основе расчета интегрального показателя эффективности научного исследования. Его нахождение связано с определением двух средневзвешенных величин: финансовой эффективности и ресурсоэффективности.

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп } i} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\text{max}}} \quad (5.14)$$

Здесь $I_{\text{финр}}^{\text{исп } i}$ – интегральный финансовый показатель разработки;

Φ_{pi} – стоимость i -го варианта исполнения;

Φ_{max} – максимальная стоимость исполнения научно-исследовательского проекта (в т.ч. аналоги).

Интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов исполнения объекта исследования можно определить следующим образом:

$$I_{pi} = \sum a_i b_i \quad (5.15)$$

Здесь I_{pi} – интегральный показатель ресурсоэффективности для i -го варианта исполнения разработки;

a_i – весовой коэффициент i -го варианта исполнения разработки;

b_i – бальная оценка i -го варианта исполнения разработки; устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания;

n – число параметров сравнения.

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности приведен в форме таблице 5.17.

Таблица 5.17 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Критерий	Весовой коэффициент параметра	Исп. 1	Исп. 2
1 Простота выполнения исследований	0,30	5	3
2 Удобство в эксплуатации	0,15	4	4
3 Энергосбережение	0,15	3	3
4 Надежность	0,20	4	5
5 Воспроизводимость результатов	0,20	4	4
ИТОГО	1	4,15	3,75

Сравнив значения интегральных показателей ресурсоэффективности, можно сделать вывод, что реализация технологии в первом исполнении является более эффективным вариантом для выполнения работы.

Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения разработки ($I_{исн.i}$) определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле:

$$I_{исн.1} = \frac{I_{p-исн.1}}{I_{финр.1}}, I_{исн.2} = \frac{I_{p-исн.2}}{I_{финр.2}}, \dots \quad (5.16)$$

Сравнение интегрального показателя эффективности вариантов исполнения разработки позволит определить сравнительную эффективность проекта (см. таблицу 5.18) и выбрать наиболее целесообразный вариант из предложенных. Сравнительная эффективность проекта (\mathcal{E}_{cp}):

$$\mathcal{E}_{cp} = \frac{I_{исн.1}}{I_{исн.2}} \quad (5.17)$$

Таблица 5.18 – Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Исп. 1	Исп. 2
1	Интегральный финансовый показатель разработки	1	1
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,15	3,75
3	Интегральный показатель эффективности	4,15	3,75
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1	0,9

6 Социальная ответственность

В рамках выполнения выпускной квалификационной работы проводилось моделирование расчетов кристаллических решеток металлов: циркония и ниобия; составленной многослойной структуры $Zr_{63}Nb_{40}$ с использованием высокопроизводительного сервера НРС-РНТД, находящимся в распоряжении НИ ТПУ. Доступ к суперкомпьютеру осуществлялся с компьютера, находящегося в аудитории № 205 учебного корпуса № 3.

Работа предполагала проведение моделирования многослойных структур: совмещения решеток ниобия и циркония, релаксация и оптимизация структур, расчет энергии внедрения атома гелия и образования вакансии и гелий-вакансионного комплекса, находящегося вблизи границы раздела со стороны ниобия и циркония, диффузия атома водорода в цирконии вблизи границы раздела и в области объема, вычисление коэффициентов диффузии атома водорода в области объема металла циркония.

6.1 Оценка вредных и опасных факторов

В данном пункте приведен анализ всех вредных и опасных факторов, которые могут возникать при работе в аудитории. Все вредные и опасные факторы, характерные для аудиторной среды представлены в таблице 6.1.

Таблица 6.1 – Возможные вредные и опасные факторы

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015 [67])	Нормативные документы
1. Микроклимат	ГОСТ 30494-96. Здания жилые и общественные. Параметры микроклимата в помещениях [68]
2. Шум	ГОСТ 12.1.003-83. Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Шум. Общие требования безопасности (с Изменением N 1) [69]
3. Освещенность рабочей зоны	СНиП 23-05-95*. Естественное и искусственное освещение (с Изменением N 1) [70]

Продолжение таблицы 6.1

4. Пожароопасность	СП 12.13130.2009. Определение категорий помещений, зданий и наружных установок по взрывопожарной и пожарной опасности (в ред. изм. № 1, утв. приказом МЧС России от 09.12.2010 № 643) [71] ГОСТ 12.1.004-91 Система стандартов безопасности труда. Пожарная безопасность. Общие требования [72]
5. Электробезопасность	ГОСТ 12.1.009-76 Система стандартов безопасности труда (ССБТ) [73] ГОСТ Р12.1.019-2017 ССБТ Электробезопасность [74] ГОСТ Р МЭК 61140-2000 Защита от поражения электрическим током. Общие положения по безопасности, обеспечиваемой электрооборудованием и электроустановками в их взаимосвязи [75]
6. Радиационная безопасность	СанПиН 2.6.1.2523-09 Нормы радиационной безопасности НРБ-99/2009 [76]

6.1.1 Микроклимат

Основными факторами, характеризующими микроклимат производственной среды, являются: температура, подвижность и влажность воздуха. Отклонение этих параметров от нормы приводит к ухудшению самочувствия работника, снижению производительности его труда и к возникновению различных заболеваний.

Работа в условиях высокой температуры сопровождается интенсивным потоотделением, что приводит к обезвоживанию организма, потере минеральных солей и водорастворимых витаминов, серьезным изменениям в деятельности сердечно-сосудистой системы, увеличению частоты дыхания, а также оказывает влияние на функционирование других органов и систем (ослабление внимания, ухудшение координации движений, замедление реакции тела и т.д.).

Высокая относительная влажность при высокой температуре воздуха способствует перегреву организма, при низкой же температуре увеличивается теплоотдача с поверхности кожи, что ведет к переохлаждению организма. Низкая влажность вызывает неприятные ощущения в виде сухости слизистых оболочек дыхательных путей работающего.

При нормировании метеорологических условий в производственных помещениях учитывают время года, физическую тяжесть выполняемых работ, а

также количество избыточного тепла в помещении. Оптимальные и допустимые метеорологические условия температуры и влажности устанавливаются согласно [77] и приведены в таблице 6.2.

Таблица 6.2 – Оптимальные показатели микроклимата на рабочих местах производственных помещений

Период года	Категория работ по уровню энергозатрат, Вт	Температура воздуха, °С	Температура поверхностей, °С	Относительная влажность воздуха, %	Скорость движения воздуха, м/с
Холодный	Ia (до 139)	22-24	21-25	60-40	Не более 0,1
Теплый	Ia (до 139)	23-25	22-26	60-40	Не более 0,1

Для удобства работы в помещении необходимо нормирование параметров микроклимата, то есть необходимо проведение мероприятий по контролю способов и средств защиты от высоких и низких температур, системы отопления, вентиляции и кондиционированию воздуха, искусственное освещение и т.п.

Для поддержания данных санитарных норм достаточно иметь естественную неорганизованную вентиляцию помещения и местный кондиционер установки полного кондиционирования воздуха, обеспечивающий постоянство температуры, относительной влажности, скорости движения и чистоты воздуха.

Для расчёта кратности воздухообмена вентилятора в лаборатории объёмом $V = 70 \text{ м}^3$ ($S = 20 \text{ м}^2$, $h = 3,5 \text{ м}$), который будет обеспечивать циркуляцию воздушных масс в помещении, воспользуемся формулой [78]:

$$W = V \cdot k, \quad (6.1)$$

где k – нормированная кратность воздухообмена (для лабораторий $k = 3$).

Подставляя данные в формулу (6.1), получим характеристику кратности

воздухообмена вентилятора: $W = 70 \cdot 3 = 210 \frac{\text{м}^3}{\text{ч}}$

Таким образом, в аудиторию необходимо поставить вентилятор VARP Alpha 210×270 с производительностью 210 м³/ч.

Также необходима система центрального отопления, обеспечивающая заданный уровень температуры в зимний период по [79]. В зимний период в аудитории для поддержания необходимой температуры используется система водяного отопления. Эта система надежна в эксплуатации и обеспечивает возможность регулирования температуры в широких пределах. При устройстве системы вентиляции и кондиционирования воздуха в помещении аудитории необходимо соблюдать определенные требования пожарной безопасности. В зимнее время в помещении необходимо предусмотреть систему отопления. Она должна обеспечивать достаточное, постоянное и равномерное нагревание воздуха. В помещениях с повышенными требованиями к чистоте воздуха должно использоваться водяное отопление.

По защите исследователя от действия вредного фактора отклонения показателей микроклимата создаются микроклиматические условия отоплением, обменной вентиляцией и кондиционированием воздуха согласно [77–79].

6.1.2 Шум

Превышение уровня шума. возникает при работе механических и электромеханических изделий.

Для оценивания шумовой обстановки допускается использовать числовую характеристику, называемую уровнем звука (измеряется в дБ). В соответствии с [80] допустимый уровень шума при работе, требующей сосредоточенности, работе с повышенными требованиями к процессам наблюдения и дистанционного управления производственными циклами на рабочих местах в помещениях с шумным оборудованием, составляет 75 дБ. Зоны с уровнем звука 80 дБ должны быть обозначены знаками безопасности согласно [81].

В аудитории № 205 основными источниками шума являются кондиционер, компьютеры (охлаждение внутри системного блока, оптические приводы DVD-ROM).

В соответствии со спецификацией на компьютер DNS Office XL, уровень шума блока питания компьютера составляет 5-10 дБ, уровень шума охлаждающего устройства процессора 15-20 дБ, остальные элементы охлаждения являются пассивными и их уровень шума не учитывается. Шум, вызываемый работой оптических приводов, также не учитывается, так как они используются в работе незначительно малое время.

В соответствии со спецификацией на кондиционер LG S09AWU, максимальный уровень шума, производимого внутренним его блоком, составляет 28 дБ сверх фонового шума.

В рассматриваемой аудитории дополнительная звукоизоляция не требуется, так как предельное значение уровня шума не достигается.

Для доведения уровня шума до санитарных норм следует придерживаться следующих правил при организации труда в помещении:

- внутренний блок кондиционера следует располагать вдали от людей, занимающихся творческой деятельностью (программисты), и не использовать на полную мощность, если позволяют климатические условия;
- своевременно осуществлять профилактику системных блоков компьютеров (очистка от пыли и смазывание движущихся частей охлаждающих установок, замена излишне шумных комплектующих).

Защита от повышенных уровней шума осуществляется методами его снижения в источнике образования и на пути распространения, устройством экранов и звукопоглощающих облицовок, средствами индивидуальной защиты согласно [80, 81].

6.1.3 Освещение

Недостаточная освещенность рабочей зоны также считается одним из факторов, влияющих на работоспособность человека. Для промышленных предприятий оптимальная освещенность территории и помещений является важной и непростой технической задачей, решение которой обеспечивает нормальные гигиенические условия для работающего персонала. Правильно подобранные источники света и их проектирование создают условия для производственного труда, корректности выполнения технологических операций, соблюдения правил и техники безопасности.

Главной задачей светотехнических расчётов для искусственного освещения является определение требуемой мощности электрической осветительной установки для создания заданной освещённости.

Внутри помещений по способу размещения светильников и распределению освещенности различают следующие системы искусственного освещения: общее и комбинированное.

Общим называется освещение, светильники которого освещают всю площадь помещения, как занятую оборудованием или рабочими местами, так и вспомогательную. В зависимости от расположения светильников различают равномерное и локализованное общее освещение. При общем равномерном освещении светильники располагаются в верхней зоне помещения равномерно, обеспечивая тем самым одинаковую освещенность всего помещения. Оно применяется, как правило, когда расположение рабочих зон при проектировании неизвестно либо при гибкой планировке. При общем локализованном освещении светильники размещают с учетом расположения технологического оборудования, создавая на отдельных поверхностях требуемый уровень освещения.

Комбинированная система освещения состоит из общего и местного освещения. Общее освещение предназначено для освещения проходов и участков, где работы не производятся, а также для выравнивания яркости в поле зрения работающих. Местное освещение обеспечивается светильниками,

располагаемыми непосредственно на рабочих местах. Ему следует отдавать предпочтение, если в нескольких рабочих зонах помещения должны решаться различные зрительные задачи и поэтому для них требуются различные уровни освещенности. Оно также необходимо, когда рабочие места территориально отдалены друг от друга. При этом следует иметь в виду, что устройство только местного освещения недопустимо, так как оно создает большую разность освещенности рабочих поверхностей и окружающего пространства, что неблагоприятно сказывается на зрении [70].

При учете особенностей процесса работ на компьютере допускается применение системы общего равномерно освещения.

Для общего освещения применяются газоразрядные лампы: дневной (ЛД), холодно-белой (ЛХБ), тепло-белой (ЛТБ) и белой цветности (ЛБ).

Помещение с компьютером имеет следующие параметры:

- высота помещения: $H = 350$ см;
- расстояние светильников от перекрытия: $h_c = 35$ см;
- рассчитаем высоту светильника над полом, высоту подвеса:

$$h_p = H - h_c = 350 - 35 = 315 \text{ см} \quad (6.2)$$

- высота рабочей поверхности над полом: $h_{pn} = 75$ см;
- рассчитаем высоту светильника над рабочей поверхностью:

$$h = h_p - h_{pn} = 315 - 75 = 260 \text{ см} \quad (6.3)$$

При освещении рабочего помещения двухламповыми светильниками ОД при одиночной установке или при непрерывных рядах из одиночных светильников в соответствии с требованиями наименьшая допустимая высота подвеса над полом составляет 3,5 м. Рассчитанная величина $h = 2,6$ м не соответствует требованиям.

- расстояние между соседними светильниками: $L = 3,75$ см;
- расстояние от крайних светильников до стены: $l = 0,9$ см.

Данное расстояние от крайних светильников до стены является подходящим, так как необходимая величина равна:

$$\frac{L}{3} = \frac{3,75}{3} = 1,25 \text{ см} \quad (6.4)$$

– интегральным критерием оптимальности расположения светильников является величина, равная:

$$\lambda = L / h \quad (6.5)$$

Данная величина должна составлять 1,4 при лучшем и качественном расположении светильников.

– Рассчитаем оптимальное расстояние между светильниками:

$$L = \lambda \cdot h = 1,4 \cdot 2,6 = 3,64 \text{ см} \quad (6.6)$$

Данная величина полностью соответствует настоящему расположению светильников.

Расчет общего равномерного искусственного освещения горизонтальной рабочей поверхности выполняется методом коэффициента светового потока:

$$\varphi = \frac{E_k \cdot S \cdot K_s \cdot Z}{N \cdot n} = \frac{200 \cdot 20 \cdot 1,5 \cdot 1,1}{5 \cdot 0,49} = 2793 \text{ Лм} \quad (6.7)$$

Нормируемая минимальная освещенность, согласно [5:3]: $E_{н} = 200 \text{ Лм}$ (разряд зрительной работы VI: очень малой точности);

- площадь освещаемого помещения: $S = 20 \text{ м}^2$;
- коэффициент запаса, учитывающий загрязнение светильника, наличие в атмосфере дыма, пыли: $K_z = 1,5$ (помещение с малым выделением пыли);
- коэффициент неравномерности освещения: $Z = 1,1$ (для люминесцентных ламп);
- число ламп в помещении: $N = 5$;
- коэффициент использования светового потока: $n = 0,49$;
- индекс помещения:

$$i = \frac{S}{h \cdot (A + B)} = \frac{20}{2,6 \cdot 10} = 0,78 \quad (6.8)$$

- коэффициент отражения стен (свежепобеленное состояние стен с окнами без штор): $\rho_c = 50 \%$;
- коэффициент отражения потолка (свежепобеленное состояние потолка):

$$\rho_n = 70 \%$$

В соответствии со значением рассчитанного светового потока $\varphi = 2793$ Лк, ближайшей световой люминесцентной лампой является лампа типа ЛХБ с электрической мощностью осветительной системы 65 Вт.

Для защиты от недостаточной освещенности рабочей зоны естественное освещение по своему спектру является наиболее приемлемым, но не всегда его оказывается достаточно. Это связано во многом с режимом работы. Обычно рекомендуется применять общее и комбинированное освещение. Нормы освещенности рабочего места соответствуют [70].

6.1.4 Электромагнитные поля

Основным вредным фактором при использовании ЭВМ является электромагнитное излучение от составляющих частей компьютера. Нормы вредных допустимых уровней (ВДУ) электромагнитного излучения ЭВМ установлены в документе [82], которые показаны в таблице 6.3.

Таблица 6.3. Временные допустимые уровни ЭМП, создаваемых ПЭВМ

Наименование параметров		Величина допустимого уровня
Напряжённость электрического поля	В диапазоне частот 5 Гц - 2 кГц	25 В/м
	В диапазоне частот 2 кГц - 400 кГц	2,5 В/м
Плотность магнитного потока	В диапазоне частот 5 Гц - 2 кГц	250 нТл
	В диапазоне частот 2 кГц - 400 кГц	25 нТл
Электростатический потенциал экрана видеомонитора		500 В

Распространение электромагнитного поля (ЭМП) происходит с помощью электромагнитных волн, которые в свою очередь излучают заряженные частицы, молекулы и атомы. Вред электромагнитного излучения официально доказан и подтвержден соответствующими исследованиями ученых, поэтому по мере возможности нужно ограничивать его влияние на организм человека.

Экран и системные блоки ЭВМ также производят электромагнитное излучение. Основная его часть происходит от системного блока и видеокабеля.

Напряженность электромагнитного поля на расстоянии 50 см вокруг экрана по электрической составляющей должна соответствовать [83].

Повышенный уровень электромагнитного излучения может негативно влиять на организм человека, а именно приводить к нервным расстройствам, нарушению сна, значительному ухудшению зрительной активности, ослаблению иммунной системы, расстройствам сердечно-сосудистой системы.

Существуют следующие способы защиты от ЭМП:

- увеличение расстояния от источника (экран должен находиться на расстоянии не менее 50 см от пользователя);
- применение приэкранных фильтров, специальных экранов и других средств индивидуальной защиты.

В указанной аудитории излучение соответствует нормам [82, 83].

6.1.5 Пожаробезопасность

В зависимости от характеристик веществ и материалов, находящихся в помещении, по взрывопожарной и пожарной опасности помещения подразделяются на категории А, Б, В, Г и Д в соответствии с [71]. Рассматриваемое помещение относится к категории В, так как в нем содержатся твердые горючие вещества в холодном состоянии. Возможные причины возгорания:

- работа с открытой электроаппаратурой;
- короткие замыкания в блоках питания;
- несоблюдение правил пожарной безопасности.

В целях снижения риска возникновения пожара и минимизации возможного ущерба производятся профилактические мероприятия, которые подразделяются на организационно-технические, эксплуатационные и режимные. Организационно-технические мероприятия заключаются в проведении регулярных инструктажей сотрудников ответственным за пожарную безопасность, обучении сотрудников надлежащей эксплуатации оборудования и необходимым действиям в случае возникновения пожара, паспортизацию

веществ, материалов и изделий в части обеспечения пожарной безопасности, изготовление и применение средств наглядной агитации по обеспечению пожарной безопасности [72]. К эксплуатационным мероприятиям относят профилактические осмотры оборудования. Мероприятия режимного характера включают установление правил организации работ и соблюдение противопожарных мер. Для предупреждения возникновения пожара необходимо соблюдение следующих правил пожарной безопасности:

- содержание помещений в соответствии с требованиями пожарной безопасности;
- надлежащая эксплуатация оборудования (правильное включение оборудования в сеть электропитания, контроль нагрева оборудования);
- обучение производственного персонала правилам пожарной безопасности;
- наличие, правильное размещение и использование средств пожаротушения.

В помещении с электрооборудованием, во избежание поражения электрическим током, целесообразно использовать углекислотные или порошковые огнетушители. Данные огнетушители предназначены для тушения загораний различных веществ и материалов, электроустановок под напряжением до 1000 В, горючих жидкостей. Химические и пенные огнетушители не допустимы. Огнетушители следует располагать на защищаемом объекте в соответствии с требованиями таким образом, чтобы они были защищены от воздействия прямых солнечных лучей, тепловых потоков, механических воздействий и других неблагоприятных факторов (вибрация, агрессивная среда, повышенная влажность и т. д.). Они должны быть хорошо видны и легкодоступны в случае пожара. Предпочтительно размещать огнетушители вблизи мест наиболее вероятного возникновения пожара, вдоль путей прохода, а также около выхода из помещения. Огнетушители не должны препятствовать эвакуации людей во время пожара. Согласно требованиям пожарной безопасности [71, 72], на этаже находится 2 огнетушителя ОПЗ огнетушители

переносные порошковые, лестничные пролеты оборудованы гидрантами, имеется кнопка пожарной сигнализации.

6.1.6 Электробезопасность

Электробезопасность – система организационных и технических мероприятий и средств, обеспечивающих защиту людей от вредного и опасного воздействия электрического тока, электродуги, электромагнитного поля и статического электричества согласно [73]. Электрический ток, проходя через тело человека, производит тепловое, химическое и биологическое воздействие, тем самым нарушая нормальную жизнедеятельность. Работники, принимаемые для выполнения работ в электроустановках, должны иметь профессиональную подготовку, соответствующую характеру работы.

Поражение электрическим током возникает при соприкосновении с электрической цепью, в которой присутствуют источники напряжения и/или источники тока, способные вызвать протекание тока по попавшей под напряжение части тела. Обычно чувствительным для человека является пропускание тока силой более 1 мА. Кроме того, на установках высокого напряжения возможен удар электрическим током без прикосновения к токоведущим элементам, в результате утечки тока или пробоя воздушного промежутка с образованием электродуги.

В рамках текущей работы не производились контакты с открытыми источниками электрического тока. Ток, протекающий в компьютерной периферии (компьютерная мышь, клавиатура), не представляет существенной опасности для здоровья человека. Согласно классификации, данная аудитория подходит под помещения 1 класса, в котором рабочие напряжения не превышают 1 000 В [73, 74].

6.1.7 Радиационная безопасность

Повышенный уровень ионизирующих излучений в рабочей зоне. К опасным и вредным производственным факторам, связанным с повышенным уровнем ионизирующих излучений, относят следующие виды излучений [75]:

а) коротковолновое электромагнитное излучение (потоки фотонов высоких энергий) - рентгеновское излучением и гамма-излучение;

б) потоки частиц:

- бета-частиц (электронов и позитронов);
- альфа-частиц (ядер атома гелия-4);
- нейтронов;
- протонов, других ионов, мюонов и др.;
- осколков деления (тяжелых ионов, возникающих при делении ядер);

в) излучение, вызванное радиоактивным загрязнением (выше природного фона), в том числе загрязнением техногенными радионуклидами:

- радиоактивное загрязнение воздуха рабочей зоны (из-за наличия радиоактивных газов радона, торона, актинона, продуктов их радиоактивного распада, аэрозолей, содержащих радионуклиды);
- радиоактивное загрязнение поверхностей и материалов производственной среды, включая средства защиты работающих и их кожные покровы.

В результате воздействия ионизирующих излучений на организм человека нарушается нормальное течение биохимических процессов и обмен веществ. В зависимости от величины поглощенной дозы излучения и от индивидуальных особенностей организма. Вызванные изменения могут быть обратимыми или необратимыми. Любой вид ионизирующего излучения вызывает биологические изменения в организме как при внешнем облучении, когда источник облучения находится вне организма, так и при внутреннем облучении, когда радиоактивные вещества попадают внутрь организма.

В ходе выполнения научного исследования, предполагающего теоретические расчеты с использованием суперкомпьютера и не более, работы с источниками ионизирующего излучения не осуществлялись [75].

6.2 Аварийные ситуации

Чрезвычайная ситуация (ЧС) – обстановка на определенной территории, сложившаяся в результате аварии, опасного природного явления, катастрофы, стихийного или иного бедствия, которые могут повлечь или повлекли за собой человеческие жертвы, ущерб здоровью людей или окружающей природной среде, значительные материальные потери и нарушение условий жизнедеятельности людей [84]. Есть два вида чрезвычайных ситуаций:

- техногенная;
- природная.

К техногенным ЧС можно отнести пожары, взрывы, диверсии, выбросы ядовитых веществ. К природным ЧС относятся природные катаклизмы. Наиболее вероятной техногенной ЧС являются пожары.

К опасностям несчастного случая относится внезапный и неуправляемый источник энергии: двигающийся предмет, неуправляемое движение или энергия.

Рассмотрим возможные аварийные ситуации в аудитории № 205 учебного корпуса № 3 ТПУ, а именно:

- возникновение пожара;
- удар электрическим током;
- падение с высоты собственного роста;
- падение с лестницы.

Мероприятия по предотвращению и ликвидации последствий вышеуказанных аварийных ситуаций представлены в таблице 6.4.

Таблица 6.4. Аварийные ситуации

№	Аварийная ситуация	Мероприятия по предотвращению	Мероприятия по ликвидации последствий аварийной ситуации
1	Падение с высоты соответственного роста	<ol style="list-style-type: none"> 1. Содержание помещения в надлежащем порядке. 2. Ограничение рабочего пространства. 3. Своевременное проведение инструктажа. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Осмотреть или опросить пострадавшего; 2. если необходимо – вызвать скорую помощь; 3. остановить кровотечение, если оно имеется; 4. если есть подозрение, что у пострадавшего сломан позвоночник (резкая боль в позвоночнике при малейшем движении), необходимо обеспечить пострадавшему полный покой в положении лежа на спине до оказания квалифицированной медицинской помощи.
2	Падение с лестницы	<ol style="list-style-type: none"> 1. Установка поручней на лестницу. 2. Покрытие ступенек лестницы антискользящим покрытием. 3. Своевременное проведение инструктажа. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Вызвать скорую помощь; 2. остановить кровотечение, если оно имеется; 3. если есть подозрение, что у пострадавшего сломан позвоночник (резкая боль в позвоночнике при малейшем движении), необходимо обеспечить пострадавшему полный покой в положении лежа на спине до оказания квалифицированной медицинской помощи.
3	Удар электрическим током	<ol style="list-style-type: none"> 1. Заземление всех электроустановок. 2. Ограничение рабочего пространства. 3. Обеспечение недоступности токоведущих частей аппаратуры. 4. Своевременное проведение инструктажа. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Быстро освободить пострадавшего от действия электрического тока [75]; 2. вызвать скорую помощь; 3. если пострадавший потерял сознание, но дыхание сохранилось, его следует удобно уложить, расстегнуть стесняющую одежду, создать приток свежего воздуха и обеспечить полный покой; 4. пострадавшему надо дать понюхать нашатырный спирт, сбрызнуть лицо водой, растереть и согреть тело; 5. при отсутствии дыхания нужно немедленно делать искусственное дыхание и массаж сердца.

Продолжение таблицы 6.4

4	Пожар	<ol style="list-style-type: none"> 1. Своевременное проведение инструктажа. 2. Установление средств автоматического пожаротушения в помещениях. 3. Установка датчиков дыма и огня. 4. Обеспечение путей эвакуации и поддержание их в надлежащем состоянии. 4. Контроль работы электроприборов. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Обесточить помещение, прекратить поступление воздуха; 2. немедленно сообщить о пожаре дежурному или на пост охраны; 3. по возможности принять меры по эвакуации людей, тушению пожара и спасению материальных ценностей.
---	-------	---	---

В данном разделе рассмотрены потенциальные аварийные ситуации, которые могут возникнуть при работе в аудитории № 205 учебного корпуса № 3. Рассмотрены мероприятия по предотвращению и ликвидации этих ситуаций, согласно [75, 84].

Заключение

В настоящей работе были проведены теоретические расчеты в рамках теории функционала электронной плотности методом присоединенных плоских волн, реализованных в пакете программ ABINIT. Рассмотрено современное состояние вопроса об особенностях взаимодействия гелия и гелий-вакансионного комплекса с цирконием и рядом других металлов. Представлено краткое описание методов и приближений, используемых при изучении из первых принципов атомной и электронной структур твердых тел. Проведена процедура оптимизации значений параметров решетки и релаксации положений атомов чистых циркония и ниобия, твердого раствора Zr–He при концентрации гелия и вакансий ~ 3 и 6 ат.% и вблизи границы раздела между металлическими слоями пленки $Zr_{63}Nb_{40}$. Рассчитаны энергии внедрения гелия и образования гелий-вакансионного комплекса в цирконии и ниобии при концентрации гелия и вакансий ~ 3 и 6 ат.% и вблизи границы раздела между металлическими слоями пленки $Zr_{63}Nb_{40}$. Изучена плотность электронных состояний и распределение валентной электронной плотности чистого циркония и системы Zr–He при концентрациях атомов гелия и вакансий в решетке циркония ~ 3 и 6 ат.%.

Выявлено, что энергетически наиболее выгодным расположением атома гелия является междоузлие в базальной плоскости решетки циркония. При наличии в решетке циркония вакансии, атому гелия энергетически наиболее выгодно находиться в вакансии в положении, смещенном относительно ее центра на $0,8 \text{ \AA}$ вдоль гексагональной оси. Отмечено, что в этом смещенном положении в окрестностях атома гелия наблюдается область с пониженной электронной плотностью. Анализ плотность электронных состояний показал, что $1s$ состояние He сдвигается с ~ 13 до ~ 14 эВ ниже уровня Ферми при смещении атома гелия из вакансии в положение, смещенное от вакансии вдоль гексагональной оси. Выявлено, что $2s$ состояния гелия образуют гибридные антисвязывающие состояния с $4d$ состояниями циркония. Если атом гелия находится в центре вакансии, то антисвязывающее взаимодействие атома He одинаково со всеми ближайшими к нему атомами Zr. Смещение атома

гелия из центра вакансии на $0,8 \text{ \AA}$ вдоль гексагональной оси, приводит к усилению антисвязывающего взаимодействия с тремя ближайшими атомами Zr и значительному ослаблению антисвязывающего взаимодействия с девятью другими соседними атомами Zr, лежащими в базальной плоскости вакансии и соседней с ней базальной плоскости.

В работе были рассмотрены различные варианты положения атома гелия в тетраэдрических и октаэдрических междуузлиях решеток ниобия и циркония и на границе раздела между металлическими слоями пленки $Zr_{63}Nb_{40}$. Установлено, что атому гелия энергетически наиболее выгодно располагаться в тетраэдрических междуузлиях как в цирконии, так и в ниобии. При отдалении от границы раздела в пленке $Zr_{63}Nb_{40}$ энергия внедрения гелия в атомные слои циркония и ниобия повышается. Выявлено, что вакансии и гелий-вакансионному комплексу энергетически наиболее выгодно образовываться в двух атомных слоях циркония и ниобия, ближайших к границе раздела в пленке $Zr_{63}Nb_{40}$. При отдалении от границы раздела величина этих энергий в ниобии растет заметно быстрее, чем в цирконии, что может свидетельствовать о том, что вакансии и гелий-вакансионные комплексы будут скапливаться преимущественно в слоях циркония.

Выводы по разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:

- проведен сравнительный анализ интегральных показателей эффективности показывает, что предпочтительным для выполнения расчетов является первый вариант исполнения, так как данный вариант является наиболее экономичным и ресурсоэффективным, по сравнению со вторым;
- в рамках данного раздела ВКР была проведена оценка конкурентоспособности выполнения теоретических расчетов по многослойному покрытию цирконий-ниобий по сравнению с другими расчетами схожих покрытий;

- рассчитан показатель, оценивающий перспективность данной технологии, который определяет уровень перспективности как «выше среднего»;
- был составлен перечень этапов работ и определена их трудоемкость, построен календарный план-график выполнения работ;
- рассчитан ориентировочный бюджет на создание научной разработки, а также проведена оценка эффективности научного исследования с позиции ресурсосбережения и сравнительная эффективность разработки.

Выводы по разделу «Социальная ответственность»:

В главе рассмотрены вредные и опасные факторы:

- микроклимат [77, 78];
- шум [77, 79];
- освещенность [70];
- пожароопасность [71, 72];
- электробезопасность [73, 74];
- электромагнитное излучение [82, 83];
- радиационная безопасность [76];
- вентиляция [78].

Причины возникновения и средства защиты, рассмотрены чрезвычайные и аварийные ситуации, меры их предупреждения, меры ликвидации их последствий. Отдельно были рассмотрена радиационная безопасность работы и потенциальная опасность со стороны электромагнитного излучения.

Все средства защиты, предотвращения воздействия и методы минимизации факторов различных ситуаций описаны в соответствующих разделах главы.

Данная аудитория учебного корпуса отнесена к классу В по пожароопасности [71, 72] и к 1 категории по электробезопасности [73, 74].

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Yan C. et al. Effects of ion irradiation on microstructure and properties of zirconium alloys – A review // Nuclear Engineering and Technology. – 2015. – Vol. 47. – pp. 323–331.
2. Воеводин В.Н. Конструкционные материалы ядерной энергетики – вызов 21 века // Вопросы атомной науки и техники. – 2007. – №7. – С. 10–22
3. Chae S, Kim Y, Rafique M. Spectroscopic and microstructural characterization of 18 MeV He⁺ ions irradiated pure Al // Optik. – 2016. – Vol. 127. – pp. 9152–9160.
4. Choi S.I, Kim J.H. Radiation-induced dislocation and growth behavior of zirconium and zirconium alloys // Nuclear Engineering and Technology. – 2013. – Vol. 45. – pp. 385–392.
5. Afzal N., Rafique M., Abbasi A., Saleem M., Lee J., Ahmad R. Impact of variable energy hydrogen ions on structural and mechanical properties of Zircaloy-4 // Physica Scripta. – 2018. – 115303.
6. Wang J., Toloczko M., Bailey N., Garner F., Gigax J., Shao L. Modification of SRIM-calculated dose and injected ion profiles due to sputtering, injected ion buildup and void swelling // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B. – 2016. – Vol. 387. – pp. 20-28.
7. Zeng J., Zhang H., Zhou X., Liang J., Sheng L., Peng S. // First-Principles Study of the Structural Stability and Electronic and Elastic Properties of Helium in α -Zirconium, Advances in Condensed Matter Physics. – 2014. – Vol. 2014. – pp. 1–8.
8. Varvenne C., Mackain O., Clouet E. Vacancy clustering in zirconium: An atomic-scale study // Acta Materialia. – 2014. – Vol. 78. – pp. 65–77.
9. Callisti M., Lozano-Perez S., Polcar T. Structural and mechanical properties of γ -irradiated Zr/Nb multilayer nanocomposites // Materials Letters. – 2016. – T. 163. – С. 138-141.
10. Callisti M., Polcar T. Combined size and texture-dependent deformation and strengthening mechanisms in Zr/Nb nano-multilayers // Acta Materialia. – 2017. – T. 124. – С. 247-260.

11. Ham B., Zhang X. High strength Mg/Nb nanolayer composites // *Materials Science and Engineering: A*. – 2011. – T. 528. – №. 4-5. – C. 2028- 2033.G.
12. Yang G. H. et al. Investigation of nanoindentation on Co/Mo multilayers by the continuous stiffness measurement technique // *Surface and Coatings Technology*. – 2005. – T. 191. – №. 1. – C. 127-133.
13. Lu Y. Y. et al. The microstructure and mechanical behavior of Mg/Ti multilayers as a function of individual layer thickness // *Acta Materialia*. – 2014. – T. 63. – C. 216-231.
14. Zhang J. Y. et al. Length scale-dependent deformation behavior of nanolayered Cu/Zr micropillars // *Acta Materialia*. – 2012. – T. 60. – №. 4. – C. 1610-1622.
15. César González, Roberto Iglesias. Migration mechanisms of helium in copper and tungsten // *The Journal of Materials Science*. – 2014. – Vol. 49. – pp. 8127–8139.
16. Cao J.L, Geng W.T. Migration of helium-pair in metals // *The Journal of Nuclear Science*. – 2016. – Vol. 478. – pp. 13–25.
17. Zhang P., Li Y., Zhao J. Materials selection for nuclear applications in view of divacancy energies by comprehensive first-principles calculations // *The Journal of Nuclear Science*. – 2020. – Vol. 538. – P. 152253.
18. Zhu X., Gao X., Song H., Han G., De-Ye Lin. Effect of vacancies on the mechanical properties of zirconium: An ab initio investigation // *Journal of Materials & Design*. – 2017. – Vol. 119. – pp. 30–37.
19. Céline V., Olivier M., Laurent P., Emmanuel C. Hydrogen and vacancy clustering in zirconium // *Acta Materialia*. – 2016. – Vol. 102. – pp. 56–69.
20. N. de Diego, Osetsky Yu. N., Bacon D.J. Structure and properties of vacancy and interstitial clusters in a-zirconium // *Journal of Nuclear Materials*. – 2008. – Vol. 374. – pp. 87–94.
21. Ullmaier H. The influence of helium on the bulk properties of fusion reactor structural materials // *Nuclear Fusion*. – 1984. – Vol. 24. – pp. 1039–1083.

22. Lewis M.B., Farrell K. Migration behavior of helium under displacive irradiation in stainless steel, nickel, iron and zirconium // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. –1986. – Vol. 16. – pp. 163–170.
23. Barnes, R. S., Embrittlement of Stainless Steels and Nickel-Based Alloys at High Temperatures Induced by Neutron Irradiation // Nature. – 1965. – Vol. 206. – p. 1307.
24. Ishizaki T., Xu Q., Yoshiie T., Nagata S. and Troev T., The effect of hydrogen and helium on microvoid formation in iron and nickel // J. Nucl. Mater. – 2002. Vol. 307–311. – P. 961 – 965.
25. Yamauchi T., Yamanaka S., Miyake M. Thermal release behavior of helium implanted into nickel // Journal of Nuclear Materials. – 1991. – pp. 308–311.
26. Kawano S., Fukuya K., Kano F. et.al. Effect of weld cycle and restraint stress on helium bubble formation in stainless steels // Journal of Nuclear Materials. – 2000. – Vol. 283–287. – pp. 1220 – 1223.
27. Ishiyama Y., Kodama M., Yokota N., Asano K., Kato T., Fukuya K. Post-irradiation annealing effects on microstructure and helium bubbles in neutron irradiated type 304 stainless steel // Journal of Nuclear Materials. –1996. –Vol. 239. – pp. 90 – 94.
28. Roth J., Picroux S.T., Eckstein W. et. al. Temperature dependence of He trapping in niobium // Journal of Nuclear Materials. –1976. –Vol. 63. – pp. 120 – 125.
29. Chu–Chun Fu, Willaime F. Ab initio study of helium in Fe: Dissolution, migration, and clustering with vacancies // Phys. Rev. B –2005. –Vol. 72 –pp. 064117 – 064122.
30. Lewis M.B., Farrell K. Migration behavior of helium under displacive irradiation in stainless steel, nickel, iron and zirconium // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. –1986. –Vol. 16. – pp. 163 – 170.
31. Максимкин О.П., Цай К.В., Тиванова О.В., Сильнягина Н.С. Влияние старения на мартенситное превращение при деформации стали 12Х18Н10Т, облученной альфа–частицами // Вопросы атомной науки и техники –2009. – №2. – С. 114–123.

32. Rajaraman R., Amaraddra G., Vismanathan B., Sundar C.S., Gopinathan K.P. Suppression of helium bubble growth in palladium by prior cold working // *J. Nucl. Mater.* –1996. –Vol. 231. pp. 55–62.
33. X. T. Zu, L. Yang, F. Gao, S. M. Peng, H. L. Heinisch, X. G. Long, R. J. Kurtz. Properties of helium defects in bcc and fcc metals investigated with density functional theory // *Phys. Rev B*– 2009. –Vol. 80 – pp. 054104-1 – 054104-6.
34. Yang L., Peng S M, Long X G, Gao F, Heinisch H.L., Kurtz R. J. , Zu X. T. Ab initio study of stability and migration of H and He in hcp–Sc // *J. Phys.: Cond. Matter* – 2011. –Vol. 23 – pp. 035701.
35. И.М. Неклюдов, Г.Д. Толстолицкая. Гелий и водород в конструкционных материалах // *Вопросы атомной науки и техники.* – 2003. – №3. – С. 3–15.
36. Xian-Ming Bai, A. F. Voter, R. G. Hoagland, M. Nastasi, B. P. Uberuaga. Efficient Annealing of Radiation Damage Near Grain Boundaries via Interstitial Emission // *Science.* – 2018. – Vol. 327. – pp. 1631–1634.
37. Li R., Zhang P., Zhang C., Huang X., Zhao J. Vacancy trapping mechanism for multiple helium in monovacancy and small void of vanadium solid // *Journal of Nuclear Materials.* – 2013. – Vol. 440. – pp. 557–561.
38. Liu Y., Shi W. Trapping and diffusion behaviors of helium at vacancy in iron from first principles // *Physics, Mechanics & Astronomy.* – 2013. – pp. 110–1106.
39. Hu-Chun Fu, Willaime F. Ab initio study of helium in α -Fe: Dissolution, migration, and clustering with vacancies // *Physical review. B, Condensed matter.* – 2005. – Vol. 72. – pp. 064117.
40. Bai X. M. et al. Efficient annealing of radiation damage near grain boundaries via interstitial emission // *Science.* – 2010. – V. 327. – №. 5973. – pp. 1631-1634.
41. Yu K., Sun C., Chen Y., Liu Y., Wang H., Kirk M., Li M., Zhang X., Superior tolerance of Ag/Ni multilayers against Kr ion irradiation: an in situ study // *Philosophical Magazine.* – 2013. – V. 93. – pp. 3547-3562.

42. Demkowicz M., Hoagland R., Uberuaga B., Misra A., Influence of interface sink strength on the reduction of radiation-induced defect 99 concentrations and fluxes in materials with large interface area per unit volume // *Physical Review B*. – 2011. – V. 84. – P. 104102
43. Misra A. et al. The radiation damage tolerance of ultra-high strength nanolayered composites // *JOM Journal of the Minerals, Metals and Materials Society*. – 2007. – V. 59. – №. 9. – pp. 62-65.
44. Y. Chen, N. Li, D. Bufford, J. Li, K. Hattar, H. Wang, X. Zhang, In situ study of heavy ion irradiation response of immiscible Cu/Fe multilayers // *Journal of nuclear materials*. – 2016. – V. 475. – pp. 274-279.
45. Frutos E. et al. Length-scale-dependent mechanical behaviour of Zr/Nb multilayers as a function of individual layer thickness // *Materials Science and Engineering*. – 2015. – V. 632. – pp. 137-146.
46. Callisti M., Karlik M., Polcar T. Competing mechanisms on the strength of ion-irradiated Zr/Nb nanoscale multilayers: Interface strength versus radiation hardening // *Scripta Materialia*. – 2018. – V. 152. – pp. 31-35.
47. Monclús M. A. et al. Selective oxidation-induced strengthening of Zr/Nb nanoscale multilayers // *Acta Materialia*. – 2017. – V. 122. – pp. 1-10.
48. Sen H. S., Polcar T. Vacancy-interface-helium interaction in Zr-Nb multilayer system: A first-principles study // *Journal of Nuclear Materials*. – 2019. – V. 518. – pp. 11-20
49. Немошкаленко, В.В. Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Электронные состояния в неидеальных кристаллах / В.В. Немошкаленко, Ю.Н. Кучеренко. – Киев.: Наук. думка, 1986. – 296 с.
50. Bloch F. Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern // *Zeitschrift für Physik*. – 1928. – Vol. 52. – P. 555–600.
51. Jones, R.O. The density functional formalism, its applications and prospects / R.O. Jones, O. Gunnarsson. // *Reviews of Modern Physics*. – 1989. – Vol. 61, № 3. – P. 689–746.

52. Dirac. P. A. M. The Quantum Theory of the Electron // Proc. R. Soc. Lond. A. – 1928. – V. 117. – P. 610–624.
53. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous Electron Gas // Phys. Rev. – 1964. – Vol. 136. – № 3B. – P. 864–871.
54. Kohn W., Sham L. J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects // Physical Review. – 1965 – Vol. 140. – № 4A. – P. A1133–A1138.
55. Кон В. Электронная структура вещества: волновые функции и функционалы плотности // Успехи физических наук. – 2002. – Т. 172. – № 3. – С. 336-348.
56. Арбузников А.В. Гибридные обменно-корреляционные функционалы и потенциалы: развитие концепции // Журнал структурной химии. – 2007. – Т. 48. – С. S5-38
57. Blügel S., Bihlmayer G. Full-Potential Linearized Augmented PlaneWave Method // Computational Nanoscience: Do It Yourself, John von Neumann Institute for Computing, – Jülich, NIC Series. – 2006. – Vol. 31. – pp. 85-129.
58. Бассани Ф., Парравичини Дж.П. Электронные состояния и оптические переходы в твердых телах. / Пер. с англ., под ред. В. Л. Бонч-Бруевича. – М.: «Наука», 1982. – 392 с.
59. Steinberg S., Dronskowski R. The Crystal Orbital Hamilton Population (COHP) Method as a Tool to Visualize and Analyze Chemical Bonding in Intermetallic Compounds // Crystals. – 2018. – Vol. 8. – p. 225.
60. Volker L., Tchougréeff A., Dronskowski R. Crystal Orbital Hamilton Population (COHP) Analysis As Projected from Plane-Wave Basis Sets // The Journal of Physical Chemistry. – 2011. – Vol. 115. – pp. 5461–5467.
61. ABINIT – abinit [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.abinit.org> (дата обращения: 31.08.20).
62. Gonze X., Amadon B., Antonius G., Arnardi F., Baguet L., Beuken J.M., Bieder J., Bottin F., Bouchet J., Bousquet E., et al. The ABINIT project: Impact, environment and recent developments // Comput. Phys. Commun. – 2020. – Vol. 248. – p. 107042.

63. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple // *Phys. Rev. Lett.* – 1996. – Vol. 77. – pp. 3865–3868.
64. Dronskowski R., Bloechl P. Crystal orbital Hamilton populations (COHP): energy-resolved visualization of chemical bonding in solids based on density-functional calculations // *J. Phys. Chem.* – 1993. – Vol. 97. – pp. 8617–8624.
65. Wimmer E., Christensen M., Wolf W., Howland W.H., Kammenzind B., Smith R.W. Hydrogen in zirconium: Atomistic simulations of diffusion and interaction with defects using a new embedded atom method potential // *Journal of Nuclear Materials.* – 2020. – Vol. 532. – p. 152055.
66. Zhao Y., Li H., Huang Y. The structure, mechanical, electronic and thermodynamic properties of bcc Zr-Nb alloy: A first principles study // *Journal of Alloys and Compounds.* – 2020. – Vol. 862. – p. 158029.
67. ГОСТ 12.0.003-2015 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Опасные и вредные производственные факторы. Классификация. Режим доступа: <https://docs.cntd.ru/document/1200136071/> (дата обращения: 14.02.21).
68. ГОСТ 30494-96 Здания жилые и общественные. Параметры микроклимата в помещениях. Режим доступа: <http://docs.cntd.ru/document/1200003003> (дата обращения: 15.02.21).
69. ГОСТ 12.1.003-83 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Шум. Общие требования безопасности (с Изменением N 1) Режим доступа: <http://docs.cntd.ru/document/5200291> (дата обращения: 15.02.21).
70. СНиП 23-05-95* Естественное и искусственное освещение (с Изменением N 1) Режим доступа: <http://docs.cntd.ru/document/871001026> (дата обращения: 15.02.21).
71. СП 12.13130.2009. Определение категорий помещений, зданий и наружных установок по взрывопожарной и пожарной опасности (в ред. изм. № 1, утв. приказом МЧС России от 09.12.2010 № 643). [Электронный ресурс]. Доступ из сборника НСИС ПБ. – 2011. – № 2 (45).

72. ГОСТ 12.1.004-91 Система стандартов безопасности труда. Пожарная безопасность. Общие требования. Режим доступа: <https://docs.cntd.ru/document/9051953> (дата обращения: 03.03.2021).

73. ГОСТ 12.1.009-76 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Электробезопасность. Термины и определения. Режим доступа: <http://docs.cntd.ru/document/5200278> (дата обращения: 18.02.21).

74. ГОСТ Р 12.1.019-2017 ССБТ Электробезопасность. Режим доступа: <https://beta.docs.cntd.ru/document/1200161238> (дата обращения: 19.02.21).

75. ГОСТ Р МЭК 61140-2000 Защита от поражения электрическим током. Общие положения по безопасности, обеспечиваемой электрооборудованием и электроустановками в их взаимосвязи. Режим доступа: <https://docs.cntd.ru/document/1200017996> (дата обращения: 05.03.2021).

76. СанПиН 2.6.1.2523-09 Нормы радиационной безопасности НРБ-99/2009. Режим доступа: <https://base.garant.ru/4188851/53f89421bbdaf741eb2d1ecc4ddb4c33/> (дата обращения: 21.02.21).

77. СанПиН 2.2.4.548-96 Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений. Режим доступа: <http://docs.cntd.ru/document/901704046> (дата обращения: 15.02.21).

78. ГОСТ 32548-2013 Вентиляция зданий. Воздухораспределительные устройства. Общие технические условия. Режим доступа: <https://docs.cntd.ru/document/1200110084> (дата обращения: 11.05.21).

79. СНиП 41-01-2003 Отопление, вентиляция и кондиционирование. Режим доступа: <http://docs.cntd.ru/document/1200035579> (дата обращения: 15.02.21).

80. ГОСТ 12.1.029-80 Средства и методы защиты от шума. Режим доступа: <http://docs.cntd.ru/document/5200292> (дата обращения: 15.02.21).

81. ГОСТ 12.4.026-76* Система стандартов безопасности труда. Цвета сигнальные и знаки безопасности. Режим доступа: <http://docs.cntd.ru/document/1200003391> (дата обращения: 15.02.21).

82. СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 О введении в действие санитарно-эпидемиологических правил и нормативов Режим доступа: <http://docs.cntd.ru/document/901865498> (дата обращения: 16.02.21).

83. ГОСТ 12.1.006-84 Электромагнитные поля радиочастот. Допустимые уровни на рабочих местах и требования к проведению контроля Режим доступа: <http://docs.cntd.ru/document/5200272> (дата обращения: 16.02.21).

84. ГОСТ Р 22.0.02-2016 Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Термины и определения. Режим доступа: <https://docs.cntd.ru/document/1200139176> (дата обращения: 11.03.2021).