

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Инженерная школа новых производственных технологий
Направление подготовки 13.04.02 «Электроэнергетика и электротехника»
Отделение материаловедения

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
Исследование генерации радиационных дефектов в металлах при облучении мощным ионным пучком

УДК 669:620.192.4:539.188

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4ТМ71	Зырянова Раксана Владимировна		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор отделения материаловедения ИШНПТ	Пушкарев А.И.	д.ф.-м.н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент отделения социально- гуманитарных наук ШБИП	Кащук И.В.	к.т.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель отделения общетехнических дисциплин ШБИП	Романова С.В.			

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
13.04.02 Электроэнергетика и электротехника	Жгун Д.В.	к.т.н.		

ЗАПЛАНИРОВАННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ПРОГРАММЕ

Код	Результат обучения
Общие по направлению подготовки «Электроэнергетика и электротехника»	
P1	Понимать и применять в профессиональной деятельности <i>основные принципы и методы</i> научно-технической деятельности, специфику научного мировоззрения, способы взаимодействия достижений науки и техники с другими областями духовной деятельности человека. Использовать методологические основы <i>научного познания и творчества</i> , синтезировать и критически резюмировать информацию.
P2	Использовать способы и принципы поиска, сбора, обработки научной и технической информации в развитии отрасли с использованием <i>современных информационных технологий</i> .
P3	<i>Применять иностранный язык</i> для академического и профессионального взаимодействия.
P4	<i>Выполнять функции преподавателя</i> в образовательных учреждениях среднего профессионального и высшего профессионального образования.
P5	<i>Совершенствовать</i> и развивать свой <i>интеллектуальный и общекультурный уровень</i> , добиваться <i>нравственного и физического совершенствования</i> своей личности, реализовывать приоритеты собственной профессиональной деятельности.
P6	Использовать <i>углубленные теоретические и практические знания</i> , применять новые технологии для <i>решения инженерных задач</i> в области электроэнергетики и высоковольтной электротехники; понимать основные научные принципы проблем в своей предметной области.
P7	<i>Формулировать цели и задачи научных исследований</i> в соответствии с тенденциями и перспективами развития <i>высоковольтной электротехники</i> , а также смежных областей науки и техники; Планировать, выполнять фундаментальные и прикладные работы поискового, теоретического и экспериментального характера; внедрять результаты исследований в производство; Уметь работать в научном коллективе в качестве члена команды, а также руководить командой.
P8	<i>Проектировать конкурентоспособную наукоемкую продукцию в сфере высоковольтной электротехники</i> , а также смежных областях науки и техники; <i>Проводить технико-экономическое обоснование</i> проектных решений; Применять на практике навыки и умения в <i>организации опытно-конструкторских работ</i> , использовать знания правовых и этических норм при оценке последствий своей профессиональной деятельности.
Профиль «Техника и физика высоких напряжений»	
P9	<i>Применять знания физических и технологических основ генерирования</i> высоких напряжений и сильных токов для <i>получения электрических и магнитных полей, электрических разрядов в диэлектриках</i> для решения научных и инженерных задач наукоемкого производства на мировом уровне.
P10	<i>Применять знания физико-химических и технологических основ генерирования мощных электронных, ионных пучков и потоков плазмы</i> для <i>модификации поверхности материалов, синтеза нанопорошков, обработки жидкостей и газов</i> для решения научных и инженерных задач наукоемкого производства на мировом уровне.

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
 федеральное государственное автономное
 образовательное учреждение высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
 ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Инженерная школа новых производственных технологий
 Направление подготовки 13.04.02 «Электроэнергетика и электротехника»
 Отделение материаловедения

УТВЕРЖДАЮ:
 Руководитель ООП
 _____ Жгун Д.В.

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Магистерской диссертации

Студенту:

Группа	ФИО
4ТМ71	Зыряновой Раксане Владимировне

Тема работы:

Исследование генерации радиационных дефектов в металлах при облучении мощным ионным пучком
Утверждена приказом директора (дата, номер)

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе	Объектом исследования является процесс генерации радиационных дефектов в металлах при облучении мощным ионным пучком. Исходными данными являются литературные данные, результаты при проведении НИР и прохождении практик.
Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов	<ol style="list-style-type: none"> 1. Обзор исследований по моделированию генерации радиационных дефектов в металлах 2. Моделирование генерации радиационных дефектов в металлической мишени при облучении мощным ионным пучком 3. Экспериментальное исследование генерации радиационных дефектов в металлической мишени при облучении мощным ионным пучком 4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение 5. Социальная ответственность Заключение

Перечень графического материала	Презентация в Microsoft PowerPoint
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы	
Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Кашук Ирина Вадимовна
Социальная ответственность	Романова Светлана Владимировна
Разделы, выполненные на иностранном языке	Ажель Юлия Петровна
Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках: Моделирование генерации радиационных дефектов в металлической мишени при облучении мощным ионным пучком	

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

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор отделения материаловедения ИШНПТ	Пушкарев Александр Иванович	д.ф.-м.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4ТМ71	Зырянова Раксана Владимировна		

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

Студенту:

Группа	ФИО
4ТМ71	Зыряновой Раксане Владимировне

Школа	ИШНПТ	Отделение школы (НОЦ)	Материаловедения
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	13.04.02 «Электроэнергетика и электротехника»

Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:

1. <i>Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	При проведении исследований используется материально-техническая база НИ ТПУ, в исследовании задействованы 2 человека: научный руководитель и младший научный сотрудник
2. <i>Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования</i>	Отчисления во внебюджетные фонды составляют 30 %

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. <i>Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения НИ</i>	- Потенциальные потребители результатов исследования; - Анализ конкурентных технических решений; - Технология QuaD; - SWOT – анализ
2. <i>Формирование плана и графика разработки научного исследования</i>	Формирование плана и графика разработки: - определение структуры работ; - определение трудоемкости работ; - разработка графика проведения НИ.
3. <i>Составление бюджета научных исследований</i>	Формирование бюджета затрат на научное исследование: - материальные затраты; - затраты на спецоборудование; - заработная плата (основная и дополнительная); - страховые отчисления; - накладные расходы.
4. <i>Оценка ресурсной, финансовой эффективности исследования</i>	- Определение интегральных показателей эффективности

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. *Оценка конкурентоспособности НИ*
2. *Матрица SWOT*
3. *График разработки и внедрения НИ*
4. *Основные показатели эффективности НИ*

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент отделения социально-гуманитарных наук	Кашук Ирина Вадимовна	К.Т.Н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4ТМ71	Зырянова Раксана Владимировна		

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»**

Студенту:

Группа	ФИО
4ТМ71	Зыряновой Раксане Владимировне

Школа	ИШНПТ	Отделение (НОЦ)	Материаловедения
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	13.04.02 Электроэнергетика и электротехника

Тема ВКР:

Исследование генерации радиационных дефектов в металлах при облучении мощным ионным пучком

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

<p>1. Характеристика объекта исследования и области его применения.</p>	<p>Объект исследования – численное моделирование генерации радиационных дефектов в металлах при облучении мощным ионным пучком. Рабочая зона – аудитория 227-1, расположенная в 11 корпусе НИ ТПУ. Область применения – математическое моделирование радиационных процессов применяется в научных институтах и исследовательских лабораториях и позволяет исследовать радиационную стойкость конструкционных материалов (металлов), которые в дальнейшем могут быть использованы в космической и атомной промышленности.</p>
---	--

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

<p>1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:</p> <ul style="list-style-type: none"> – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны. 	<p>1. Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 № 197-ФЗ (ред. от 01.04.2019) 2. ГОСТ 12.2.032-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования. 3. СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03. Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы (ред. от 21.06.2016)</p>
<p>2. Производственная безопасность: 2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов: 2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия</p>	<p>Основные вредные и опасные факторы на рабочем месте: отклонение показателей микроклимата, повышенный уровень шума, недостаточная освещенность рабочей зоны, повышенный уровень электромагнитных излучений, повышенное значение напряжения в электрической цепи</p>
<p>3. Экологическая безопасность:</p>	<p>Утилизация ПК и бумаги оказывает воздействие на атмосферу, гидросферу и литосферу</p>
<p>3. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:</p>	<p>Возможные ЧС на объекте: короткое замыкание электропроводки, возгорание оборудования. В качестве типичной чрезвычайной ситуации рассматривается пожар.</p>

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель ООТ ШБИП	Романова Светлана Владимировна			

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4ТМ71	Зырянова Раксана Владимировна		

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
 федеральное государственное автономное
 образовательное учреждение высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
 ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Инженерная школа новых производственных технологий
 Направление подготовки: 13.04.02 «Электроэнергетика и электротехника»
 Уровень образования: магистр
 Отделение материаловедения
 Период выполнения: 2018/2019 учебный год

Форма представления работы:

Магистерская диссертация

КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН
выполнения выпускной квалификационной работы

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
18.02.19	Литературный обзор	20
18.03.19	Моделирование генерации радиационных дефектов в металлической мишени при облучении мощным ионным пучком	25
1.04.19	Экспериментальное исследование генерации радиационных дефектов в металлической мишени при облучении мощным ионным пучком	25
15.04.19	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	10
29.04.19	Социальная ответственность	10
13.05.19	Разделы, выполненные на иностранном языке	10
		<i>Сумма: 100 баллов</i>

Составил руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор отделения материаловедения ИШНПТ	Пушкарев Александр Иванович	д.ф.-м.н.		

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
13.04.02 Электроэнергетика и электротехника	Жгун Дмитрий Владимирович	к.т.н.		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 120 с., 28 рис., 33 табл., 74 источника, 1 прил.

Ключевые слова: РАДИАЦИОННЫЕ ДЕФЕКТЫ, ВАКАНСИИ, МЕЖДОУЗЕЛЬНЫЕ АТОМЫ, МОЩНЫЙ ИОННЫЙ ПУЧОК, МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА.

Объектом исследования является процесс генерации радиационных дефектов в металлах при облучении мощным ионным пучком.

Цель работы – моделирование и экспериментальное исследование генерации радиационных дефектов в металлах при облучении мощным ионным пучком. Разработка научных основ нового (имитационного) метода исследования радиационной стойкости конструкционных материалов, используемых в ядерном реакторе на быстрых нейтронах.

В процессе исследования проводился выбор метода моделирования, выбор программ для моделирования, оценка ресурсоэффективности проекта, выявление вредных и опасных производственных факторов и средств защиты от них.

Представлены результаты экспериментального исследования и моделирования формирования радиационных дефектов в мишенях из меди, титана и железа при облучении импульсным пучком.

В результате исследования были получены данные, отображающие количество дефектов в каскаде смещений, потери энергии, траектории дефектов в мишенях из разных металлов. Выполнено сравнение результатов моделирования и экспериментальных данных.

С экономической точки зрения проект эффективен, за счет использования наиболее оптимального и конкурентоспособного метода, и в него целесообразно инвестировать средства.

ABSTRACT

Final qualifying work 120 pages, 28 figures, 33 tables, 74 references, 1 applications

Keywords: RADIATION DEFECTS, VACANCIES, INTERSTITIAL ATOMS, INTENSE PULSED ION BEAMS, MOLECULAR DYNAMICS.

The object of the research is the process of generation of radiation defects in metals when irradiated with intense pulsed ion beam.

The purpose of this work is to simulate and experimentally study the generation of radiation defects in metals when irradiated with intense pulsed ion beam. Development of a scientific basis for a new (imitation) method for studying the radiation resistance of construction materials used in a fast-neutron nuclear reactor.

In the process of the study, the choice of modeling method, the choice of programs for modeling, the assessment of the resource efficiency of the project, the identification of harmful and dangerous production factors and means of protection against them were carried out.

Are presented the results of an experimental study and modeling of the formation of radiation defects in targets made of copper, titanium and iron upon irradiation with a pulsed beam.

As a result of the research, were obtained data showing the number of defects in the cascade of displacements, energy losses, and the trajectories of defects in targets from different metals. Performed comparison of simulation results and experimental data.

From an economic point of view, the project is effective, due to the use of the most optimal and competitive method, and it is advisable to invest funds in it.

ОПРЕДЕЛЕНИЯ, ОБОЗНАЧЕНИЯ, СОКРАЩЕНИЯ

В данной работе применены следующие термины с соответствующими определениями и сокращения:

Радиационные дефекты – дефекты кристаллической структуры, образующиеся при их облучении потоками заряженных частиц или квантов электромагнитного излучения;

Ионный пучок – направленный поток положительных или отрицательных ионов, имеющих обычно малые поперечные размеры по сравнению с длиной и движущихся со скоростью, значительно превышающей хаотические тепловые скорости составляющих частиц;

Математическое моделирование - это средство изучения реального объекта, процесса или системы путем их замены математической моделью, более удобной для экспериментального исследования с помощью ЭВМ.

МИП – мощный ионный пучок;

РД – радиационные дефекты;

МД – молекулярная динамика;

КММК – кинетический метод Монте-Карло;

ПВА – первично выбитый атом.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение.....	15
1 Обзор исследований по моделированию генерации радиационных дефектов в металлах.....	20
1.1 Радиационно-пучковое модифицирование материалов.....	20
1.2 Методы моделирования генерации радиационных дефектов.....	21
1.2.1 Метод молекулярной динамики.....	24
1.2.1.1 Этапы моделирования.....	28
1.2.1.2 Межатомные потенциалы взаимодействия.....	31
1.2.2 Кинетический метод Монте-Карло.....	33
2 Моделирование генерации радиационных дефектов в металлической мишени при облучении мощным ионным пучком.....	36
2.1 Моделирование по NRT модели.....	36
2.2 Моделирование в программе SRIM.....	37
2.3 Моделирование в программе LAMMPS.....	40
2.3.1 Исходный код.....	41
2.3.2 Визуализация результатов моделирования	43
2.3.3 Результаты моделирования.....	45
3 Экспериментальное исследование генерации радиационных дефектов в металлической мишени при облучении мощным ионным пучком.....	49
3.1 Экспериментальный стенд.....	49
3.2 Исследование охлаждения мишени.....	50
3.3 Экспериментальное определение количества радиационных дефектов.....	53
3.3.1 Количество радиационных дефектов в мишени.....	53
3.3.2 Количество радиационных дефектов в каскаде смещений.....	56
3.4 Расчет среднего расстояния между каскадами смещений в мишени..	58
4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение.....	60

4.1 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований.....	60
4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования.....	61
4.1.2 Анализ конкурентных технических решений.....	62
4.1.3 Технология QuaD.....	63
4.1.4 SWOT-анализ.....	65
4.2 Планирование научно-исследовательских работ.....	67
4.2.1 Структура работ в рамках научного исследования.....	67
4.2.2 Определение трудоемкости выполнения работ.....	68
4.2.3 Разработка графика проведения научного исследования.....	68
4.2.4 Бюджет научно-технического исследования (НТИ).....	71
4.2.4.1 Расчет материальных затрат НТИ.....	72
4.2.4.2 Расчет затрат на специальное оборудование.....	73
4.2.4.3 Основная заработная плата.....	73
4.2.4.4 Дополнительная заработная плата исполнителей темы.....	75
4.2.4.5 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления).....	75
4.2.4.6 Накладные расходы.....	76
4.2.4.7 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта.....	76
4.3 Определение ресурсосберегающей, финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования.....	77
5 Социальная ответственность.....	82
5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности.....	82
5.2 Производственная безопасность.....	84
5.2.1 Анализ вредных и опасных факторов производственной среды...	85
5.2.2 Обоснование мероприятий по снижению уровней воздействия вредных и опасных факторов на исследователя.....	91

5.3 Экологическая безопасность.....	92
5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....	93
Заключение.....	96
Список публикаций студента.....	98
Список использованных источников.....	99
Приложение A Simulation of generation of radiation defects in a metal target during the irradiation by a powerful ion beam.....	107

ВВЕДЕНИЕ

При освоении космического пространства, развитии атомной промышленности, исследованиях термоядерного синтеза должны применяться материалы, имеющие высокую радиационную стойкость. При реакции деления ^{235}U в ядерном реакторе рождаются вторичные нейтроны, энергия которых колеблется от 0,1 до 17 МэВ (рисунок 1).

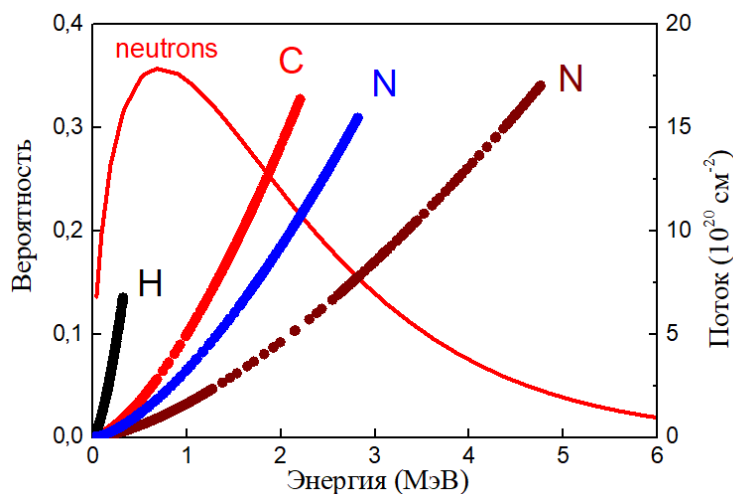


Рисунок 1 – Функция плотности вероятности энергетического спектра нейтронов деления ^{235}U [1] и имитационный спектр разных ионов, генерируемых ускорителем ТЕМП-6

Наиболее вероятная энергия, соответствующая максимуму спектра нейтронов деления – 0,71 МэВ [1]. Реакторы, в которых основная доля делений вызывается нейтронами, имеющими такую высокую энергию, называются быстрыми реакторами.

Облучение конструкционных материалов быстрыми нейтронами (прямое облучение в ядерном реакторе) и тяжелыми ионами (имитационное облучение) развивает аналогичные процессы структурных изменений (набухание, образование сегрегаций и вторичных фаз) [2]. Однако облучение образцов в ядерном реакторе в реальных условиях эксплуатации является длительным из-за необходимости набора необходимой радиационной дозы нейтронов. Например, одним из наиболее важных изменений свойств образцов, вызванных облучением, является разбухание (свеллинг). При

облучении нейтронами в реакторе деления требуется около года для достижения линейного режима увеличения свеллинга. Процесс свеллинга в нержавеющей стали ускоряется более чем в 1000 раз при облучении ионами Ni^+ с энергией 2,8 МэВ без изменения общего поведения процесса набухания [2]. Поэтому в последние годы активно развиваются имитационные методы генерации радиационных дефектов.

Использование генератора мощных ионных пучков с энергией ионов, не превышающей 300 кэВ, обеспечивает возможность имитационного облучения конструкционных материалов, используемых в тепловыделяющих элементах ядерного реактора и других элементах горячей зоны. При энергии иона менее 500 кэВ реализуется упругий (ядерный) механизм его торможения в металлической мишени с передачей энергии на тепловые колебания атомов кристаллической решетки (фононы) и образованием первичных радиационных дефектов решетки (пары Френкеля) [3, 4].

Процесс торможения иона в твердом теле достаточно корректно описывается в модели последовательных двухчастичных столкновений с атомами мишени [3, 4]. При этом в процессе упругого столкновения воздействие внешних сил на частицы не учитывают. В этом случае импульс и энергия системы взаимодействующих частиц остаются неизменными. Закон сохранения импульса приводит к равенству импульсов системы до и после столкновения:

$$m \cdot v_{ion} + M \cdot v_a = m \cdot v_{ion}^1 + M \cdot v_a^1 = const \quad (1)$$

где m — масса иона;

M — масса атома мишени,

v_{ion}, v_a — скорости иона и атома соответственно.

Закон сохранения энергии позволяет определить изменение в процессе столкновения суммарной кинетической энергии системы:

$$\frac{m \cdot v_{ion}^2}{2} + \frac{M \cdot v_a^2}{2} = \frac{m \cdot (v_{ion}^1)^2}{2} + \frac{M \cdot (v_a^1)^2}{2} = const \quad (2)$$

Из соотношений (1) и (2) получим, что при упругом столкновении энергия, передаваемая ионом атому мишени (E_a), пропорциональна отношению массы иона к массе этого атома:

$$E_a = E_{ion} \frac{4mM}{(m+M)^2} \quad (3)$$

Это соотношение описывает передачу энергии при лобовом столкновении иона с атомом. В общем случае, учитывая кулоновское взаимодействие иона с электронами атома мишени [5]:

$$E_a = E_{ion} \frac{mM}{(m+M)^2} (1 + f^2 - 2f \cos \varphi) \quad (4)$$

где φ – общий угол рассеяния иона,

f^2 – относительная доля кинетической энергии иона, которая расходуется на упругое столкновение с атомом.

Масса нейтрона чуть больше массы протона и равна $1,67 \cdot 10^{-27}$ кг. Масса иона углерода в 12 раз больше и равна $2 \cdot 10^{-26}$ кг. Для передачи энергии при упругом столкновении иона углерода с атомом мишени (Fe) (и том же радиационном воздействии), равной энергии при упругом столкновении нейтрона с атомом мишени, энергия иона углерода должна быть в 8,5 раз меньше. Имитационный (нейтронный) спектр ионов, приведенный на рисунке 1, рассчитан в модели двухчастичного упругого столкновения иона и атома Fe . Поэтому формирование радиационных дефектов при облучении тяжелыми ионами (имитационное облучение) аналогично формированию дефектов высокоэнергичными нейтронами и радиационное воздействие на мишень ионов углерода C^+ с энергией 200-300 кэВ аналогично воздействию быстрых нейтронов с энергией 1,7-2,6 МэВ.

Основная часть кинетической энергии иона при торможении в металлической мишени расходуется на возбуждение электронной подсистемы (электронное возбуждение), в соотношении (4) $f < 0.3$. Количество радиационных дефектов в каскаде иона C^+ с энергией 250 кэВ в 2-5 раз меньше, чем в каскаде атома углерода с такой же энергией. Поэтому

модельное облучение конструкционных материалов ускоренными атомами является более эффективным, чем ионами. При этом в соотношении (4) $f = 1$ и $\cos \varphi \approx -1$.

В ионном диоде с магнитной самоизоляции электронов при работе в двухимпульсном режиме происходит эффективная перезарядка ионов при взаимодействии с остаточными молекулами газа в диодной камере и формирование пучка ускоренных атомов. Энергия ускоренного атома при этом равна энергии иона, концентрация ускоренных атомов в комбинированном пучке (ионы+быстрые атомы) достигает 95% [6].

В последние годы активно развиваются методы численного моделирования образования, миграции, агрегации и аннигиляции радиационно-индуцированных дефектов в металлах (молекулярно-динамическое моделирование [7, 8], кинетическая теория Монте-Карло [9], нелинейная кинетическая дискретная модель [10] и другие). Компьютерное моделирование как инструмент исследования обладает целым рядом преимуществ по сравнению с реальным экспериментом, в частности, компьютерный эксперимент может быть выполнен в таких условиях, когда проведение натурального эксперимента затруднено или даже невозможно [11]. Численное моделирование образования радиационных дефектов в металлах позволяет значительно ускорить процесс разработки материалов с высокой радиационной стойкостью, однако результаты моделирования должны быть проверены экспериментально.

Цель данной работы: используя метод численного моделирования определить параметры радиационных дефектов, формируемых в металлах мощным ионным пучком и сравнить полученные результаты моделирования с результатами тепловизионной диагностики радиационных дефектов.

Для достижения поставленной цели, необходимо решить следующие задачи: произвести выбор и обоснование метода и программы для моделирования; выполнить моделирование воздействия мощного ионного пучка на металлические мишени; провести анализ полученных результатов и

сравнение полученных результатов с имеющимися экспериментальными данными.

1 ОБЗОР ИССЛЕДОВАНИЙ ПО МОДЕЛИРОВАНИЮ ГЕНЕРАЦИИ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В МЕТАЛЛАХ

1.1 Радиационно-пучковое модифицирование материалов

При освоении космического пространства, развитии атомной промышленности, исследованиях термоядерного синтеза должны применяться материалы, имеющие высокую радиационную стойкость. Радиационная стойкость материалов – способность материалов сохранять свойства при воздействии радиации. По своей радиационной стойкости вещества и материалы значительно отличаются. Это обусловлено различиями их физико-химических характеристик: элементного состава, фазового состояния, химического и электронного состояния молекул, дефектности структуры. Радиационная стойкость существенно зависит от радиационной обстановки, вида излучений, мощности дозы, температуры окружающей среды, условий эксплуатации.

Модифицирование поверхности представляет собой технологию формирования поверхностного защитного покрытия, способствующего повышению механических, трибологических, коррозионных свойств изделий из металлической основы благодаря созданию слоя сильно неравновесной структуры, а также в результате поверхностного легирования. Радиационно-пучковые технологии модифицирования поверхности материалов, интенсивно развивающиеся в последние годы, основаны на результатах исследования взаимодействия ионов, электронов, атомов, плазмы, лазерного и гамма-излучения с твердым телом [12].

Модификация импульсными энергетическими потоками является перспективным направлением улучшения эксплуатационных свойств различных металлических изделий, так как позволяет повысить ресурс и надежность материалов находящихся в самых жестких условиях эксплуатации [13]. Все большее применение пучковых методов модификации свойств твердых тел связано с тем, что с помощью ионных или плазменных пучков в поверхностных слоях материалов можно создавать новые

соединения, изменять их физические и химические свойства, что очень важно для изделий современной техники [14].

Мощный ионный пучок характеризуется энергией ионов $0,1 \div 1$ МэВ, длительностью импульса $\sim 10^{-8} \div 10^{-7}$ с, плотностью тока $1 \div 300$ А/см². Воздействие мощным ионным пучком (МИП) на материалы обеспечивает высокие скорости нагрева и последующего охлаждения их приповерхностного слоя. После облучения МИП многие материалы показывают увеличение износостойкости, усталостной прочности и твердости [14].

Однако при воздействии мощных электронных и ионных пучков формируется большое количество радиационных дефектов. При облучении налетающая частица смещает атом в том случае, если передаёт ему в упругих соударениях энергию, превышающую некоторую пороговую $E_{пор}$. Типичные значения пороговой энергии $E_{пор}$, необходимой для образования радиационных дефектов, составляют 10-90 эВ. Энергия, переданная твёрдому телу (мишени), может привести к разрыву межатомных связей и смещению атомов с образованием первичного радиационного дефекта типа пары Френкеля (вакансия и межузельный атом) [15].

В течение последних десятилетий радиационные повреждения, вызванные взаимодействием ионов с твердым веществом, были предметом интенсивных исследований [16]. Количество работ, посвященных применению ионных пучков, неуклонно растет [17].

1.2 Методы моделирования генерации радиационных дефектов

Во многих случаях практическое применение ионного воздействия сдерживается достаточно высокой стоимостью процесса. Также важно отметить, что большинство методов исследования процессов ионного воздействия являются деструктивными по отношению к мишени, так как для исследования получившихся слоев с примесью и дефектами структуры необходимо мишень послойно разрушить. Компьютерное моделирование позволит избежать разрушения [17].

Математическое моделирование – это средство изучения реального объекта, процесса или системы путем их замены математической моделью, более удобной для экспериментального исследования с помощью ЭВМ.

Численное моделирование подразумевает создание математической модели движения изучаемой системы и дальнейшее её исследование с использованием численных методов, которые реализуются на компьютере [18].

В работе необходимо, используя один из методов численного моделирования, определить параметры радиационных дефектов, формируемых в металлах мощным ионным пучком (концентрация РД, пороговая энергия миграции радиационных дефектов, вид РД, степень и продолжительность термического отжига и др.); сравнить полученные результаты моделирования с экспериментальными данными, чтобы убедиться в достоверности исследований/расчетов.

Модели удобно разделить на масштабном уровне:

Первопринципные расчеты – считают распределение электронной плотности в атомах. Можно оценить энергию различных структур из атомов.

Недостатки – для моделирования процессов в твердом теле требуется высокая производительность компьютера. На обычном компьютере можно выполнить моделирование процессов, которые происходят в течение малого времени (порядка пикосекунд) с участием малого количества атомов (10^5 - 10^6). В связи с этим результаты трудно сопоставить с экспериментом.

Метод молекулярной динамики (МД) – в этом методе эволюция системы атомов рассчитывается посредством решения системы уравнений динамики, которые записываются для каждого атома. В качестве уравнения динамики в классической МД используется уравнение второго закона Ньютона. Существует также квантовая МД, в ней учитываются волновые свойства частиц с помощью уравнения Шредингера.

Преимущества – Эволюция системы происходит естественным образом, без привлечения предположений о механизмах процессов.

Недостатки – малое время расчета и размеры атомных систем (до млрд. атомов). Необходимо вводить "подгоночный" потенциал взаимодействия.

Имитационное моделирование. Здесь есть различные варианты – это метод Монте-Карло, решеточные модели, случайные блуждания и т.п. Здесь необходимо задавать набор возможных реакций и их вероятности. Моделируется в основном кинетика реакции.

Преимущества – учет процессов на атомном уровне. Достаточно большие времена расчета и размеры атомных систем.

Недостатки – Много «подгоночных» параметров.

В настоящее время набирает популярность многомасштабный подход. Когда результаты расчетов на нижнем уровне применяются для расчетов уровнем выше и далее. Как, например, в работе [19], где при использовании комбинации SRIM, молекулярной динамики и кинетического метода Монте-Карло, вычисляется доля атомов гелия, которые попадают в места замещения вскоре после имплантации, то есть до того, как они вносят вклад в эволюцию неправильной структуры.

Статья [20] посвящена исследованию процесса ионной имплантации сверхнизкой энергии с использованием метода МД для описания динамического отжига для перераспределения легирующей примеси и рекомбинации дефектов в каскаде. В этой работе молекулярная динамика (МД) внедрена для моделирования процесса ионной имплантации с образованием сверхвысоких переходов. После этого диффузионный процесс моделируется с использованием кинетического Монте-Карло метода (КММК) с распределением повреждений и примесей из профиля ионной имплантации в МД. Для рассмотрения динамического отжига при ионной имплантации и точной модели диффузии внутренних точечных дефектов и примесей в ионно-имплантированном кремнии используется подход, основанный на связанном вычислении МД и КММК.

1.2.1 Метод молекулярной динамики

Суть метода состоит в расчете движения некоторого числа характерных частиц рассматриваемого вещества под действием приложенных сил. Метод основан на численном решении уравнений движения с помощью компьютера.

Молекулярная динамика позволяет моделировать возможные конфигурации точечных дефектов, кинетику их перемещения по кристаллу и взаимодействия между собой. Присущая методу молекулярной динамики ограниченная максимальная длительность отжига, соответствующая в лучшем случае десяткам наносекунд реального времени, делает его непригодным для изучения кластеризации дефектов, происходящей в течение больших промежутков времени.

Для решения этой проблемы в ряде случаев используются различные методы ускоренной молекулярной динамики (accelerated molecular dynamics methods), которые предполагают либо одновременное моделирование эволюции системы, либо изменение потенциала взаимодействия для ускорения переходов в новое состояние или повышение температуры системы с последующим удалением переходов, невозможных при начальной температуре [21].

В статье [17] было проведено компьютерное моделирование процесса ионной имплантации методом молекулярной динамики с помощью пакета программ LAMMPS. Статья посвящена проведению моделирования для комбинации ион-мишень: Cu-Fe. В результате моделирования отмечено, что при увеличении энергии бомбардирующих атомов максимум концентрации примеси смещается вглубь мишени и становится более растянутым. Максимумы концентрации вакансий и включений при увеличении энергии бомбардирующих атомов также смещаются вглубь мишени. Стоит отметить, что они находятся глубже чем, максимумы концентрации примеси в обоих случаях.

Хоть в методе молекулярной динамики требуется чрезмерное время вычислений, но данный метод позволяет рассчитать точное распределение легирующих примесей, ожидаемое во время ионной имплантации, с использованием соответствующих функций для межатомных потенциалов [20].

Метод молекулярной динамики является в настоящее время общепринятым способом моделирования каскадов атомных смещений в конструкционных материалах ядерных и термоядерных установок. К настоящему времени различными группами исследователей по всему миру проведено большое количество таких исследований применительно к различным материалам.

В процессе работы ядерного реактора образуется поток нейтронов, который формирует радиационные дефекты в конструктивных элементах реактора. Предотвратить их образование невозможно, поэтому для уменьшения радиационного повреждения необходимо обеспечить максимальную эффективность отжига (аннигиляции) этих дефектов и восстановление исходной структуры материала элементов ядерного реактора. Экспериментальные исследования и моделирование формирования радиационных дефектов в металлах показали, что более 70% радиационных дефектов аннигилируют в течение 1-2 пс, на стадии формирования каскада первичных дефектов [22]. Другие радиационные дефекты приводят к нарушению структуры мишени и изменению ее свойств. Экспериментальное изучение каскадных процессов встречает существенные трудности, связанные с их малыми пространственными и временными масштабами (нанометры и пикосекунды). Поэтому компьютерное моделирование является эффективным подходом для изучения первичных радиационных повреждений материалов на атомном уровне.

Как правило, изучение динамики структурных изменений в материалах на атомном уровне при радиационном воздействии проводится в рамках метода молекулярной динамики [23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30]. В то же

время уже созданы модели и получены важные результаты о существенном влиянии внутренней структуры металлов на их первичную радиационную повреждаемость, основанные на изучении особенностей развития каскадов атомных смещений в таких структурах [28, 29, 30]. В работах [31, 32] приведены результаты моделирования методом молекулярной динамики каскадов атомных смещений и особенностей их взаимодействия с дефектами внутренней кристаллической структуры металлов (точечными дефектами, порами, дислокациями, границами зёрен, свободными поверхностями). Показано, что дефекты оказывают существенное влияние на эволюцию каскадов атомных смещений и формирование первичных радиационных повреждений металлов. А именно, при взаимодействии с порами каскады атомных смещений могут приводить к частичному залечиванию пор. Количество сформированных дефектов в образце с порой незначительно превышает их количество в идеальном кристаллите.

В работе [33] исследуется как примеси и повреждения, вызванные каскадами смещений, влияют на создание повреждений в ОЦК железе. Результаты показывают, что влияние ранее существовавших вакансий на производство каскадных дефектов было значительным. Тип, а также концентрация ранее существовавших вакансий оказали значительное влияние на количество производимых дефектов. По мере увеличения концентрации уже существующих вакансий количество произведенных пар Френкеля уменьшалось. Наличие случайно распределенных вакансий также приводило к увеличению доли междоузлий в кластерах.

В [34] производилось моделирование методом молекулярной динамики (МД) с использованием LAMMPS (крупномасштабный атомно-молекулярный массивно-параллельный симулятор). Исследуются каскадные взаимодействия повреждений, вызванные двумя атомами Si с энергией 2 кэВ, одновременно бомбардирующими кристаллическую подложку Si. Было обнаружено, что создание усиленного смещения появляется в основном на стадии теплового всплеска со всеми атомами при энергиях, меньших порога

смещения. Исследования привели к выводу, что каскадные взаимодействия усиливают локальное плавление за счет увеличения плотности осаждения энергии, способствуя тем самым созданию дефектов.

В [35] говорится о радиационном воздействии на наноструктуры. На основании результатов компьютерного моделирования в [36] был сделан вывод о том, что при сравнительно низких энергиях (до 1 МэВ) налетающих ионов основным механизмом радиационного воздействия на углеродные наноструктуры (графен, УНТ) является удаление атома из гексагональной решетки вследствие передачи ему части кинетической энергии налетающей частицы.

Методы компьютерного моделирования позволяют с помощью визуализации наблюдать за развитием процессов внутри образцов, чего не могут обеспечить экспериментальные методы [37].

Существует несколько видов потенциалов взаимодействия, которые используются при моделировании молекулярной динамики, таких как Lennard Jones (LJ), Embedded Atom Method (EAM), Modified Embedded Atom Method (MEAM), Tersoff, Embedded Ion Method (EIM) которые используются в разных системах в зависимости от задачи. Выбор потенциала играет важную роль в моделировании методом молекулярной динамики.

Например, в работе [38] производится моделирование алюминия. Существует множество алюминиевых сплавов с различным химическим составом и различной микроструктурой, которые используются в промышленности. Важной частью исследований и разработок являются инновации новых алюминиевых сплавов. В последнее время метод МД широко используется для оценки механических свойств алюминиевых сплавов с различным химическим составом. В статье [38] произведено молекулярно-динамическое моделирование и сравнение результатов расчета для двух различных потенциалов (LJ, EAM).

Моделирование позволяет исследовать широкий спектр свойств и может учитывать условия, которые трудно наблюдать непосредственно в эксперименте, что дает ценное дополнение к практическому исследованию.

Радиационное повреждение в материалах может привести к потенциально катастрофическим последствиям. Чтобы предотвратить такие сбои, обязательно, чтобы этот ущерб был понят и количественно оценен [39]. Было обнаружено, что с увеличением количества радиационного облучения средняя энергия, связанная с отдельными дефектами, остается постоянной, но кластеризация дефектов и образование дислокаций увеличивается. Затем были выполнены симуляции для имитации процесса калориметрического нагрева. В этом проекте была проанализирована энергия, запасенная в каждом дефекте атомного уровня, для имитации облучения в алюминии и вольфраме. Получено, что при увеличении энергии облучения или времени воздействия облучения величина повреждения материала увеличивается [39].

1.2.1.1 Этапы моделирования

Основными этапами в реализации метода молекулярной динамики являются:

1. Построение атомной структуры образца (построение кристаллита)

Должен быть построен кристаллит, то есть задан массив атомов (или других частиц, участвующих в движении) с указанием их координат. Координаты задаются исходя из структуры изучаемого вещества, в соответствии с типом кристаллической решетки.

Выбор размера и формы кристаллита зависит от нескольких противоречивых факторов:

- с одной стороны, требуется большой объем, чтобы удержать сильное возмущение, причиной которого является смещенный атом;
- с другой стороны, с увеличением числа атомов возрастает время вычислений.

2. Задание потенциала взаимодействия (задание сил межатомного взаимодействия)

Так как не существует потенциалов межатомного взаимодействия, которые удовлетворительно описывали бы взаимодействие в достаточно широком диапазоне расстояний между атомами, то используется комбинация потенциальных функций, то есть расчеты разделяются по различным потенциальным функциям в зависимости от расстояния между частицами.

3. Задание граничных и начальных условий

Для устранения влияния поверхности на результат моделирования используются граничные условия, которые лимитируют движение приповерхностных атомов расчетного кристаллита.

В машинном моделировании можно выделить три типа граничных условий: жесткие, гибкие и периодические граничные условия.

1) “Жесткие” граничные условия.

Координаты граничных частиц зафиксированы и предполагается, что достаточно большое количество подвижных атомных слоев компенсирует влияние неподвижности внешних атомов.

2) «Гибкие» или подвижные граничные условия

К каждому поверхностному атому прикладывается упругая сила, пропорциональная смещению, и вязкая сила, пропорциональная скорости смещения. Эти граничные условия позволяют несколько сократить размер кристаллита по сравнению со случаем применения жестких условий, но существенно усложняют моделирующую программу.

3) Периодические граничные условия.

Применяются, когда в некотором из направлений по характеру задачи имеется период полной идентичности.

4. Решение системы уравнений движения

Движение частиц происходит в соответствии со вторым законом Ньютона [18]:

$$\frac{d\bar{R}_i}{dt} = \bar{V}_i, \quad m_a \frac{d\bar{V}_i}{dt} = \bar{F}_i \quad (5)$$

где \bar{R}_i и \bar{V}_i – положение и скорость i -го атома; m_a – масса частицы;
 \bar{F}_i – сила, действующая на атом со стороны других атомов кристаллита.

Сила, действующая на атом со стороны других атомов кристаллита, задается выбранным потенциалом межатомного взаимодействия:

$$F_i^j(t) = - \sum_{k, k \neq i} \partial \varphi \left(\left| \bar{R}_i(t) - \bar{R}_k(t) \right| \right) / \partial x^j \quad (6)$$

где $\varphi(r)$ – потенциал взаимодействия;

$F_i^j(t)$ – j -тая компонента силы, действующая на i -й атом кристаллита ($j=1,2,3, i=1, N$ – количество атомов в кристаллите).

5. Задание начальных условий для решения уравнений движения

Начальное состояние системы частиц должно удовлетворять следующим условиям:

- наличие термодинамического равновесия;
- внутренняя энергия системы частиц должна иметь кинетическую и потенциальную составляющие.

Задание термодинамического равновесия в системе. Нужно приписать атомам кристаллита начальные скорости. Скорость каждой частицы в кристаллите – случайная величина, но в целом распределение скоростей должно соответствовать распределению Максвелла для заданной температуры:

$$f(V) = \left(\frac{m_a}{2\pi kT} \right)^{3/2} 4\pi V^2 \exp\left(-\frac{mV^2}{2kT}\right) \quad (7)$$

Приписанные скорости при этом должны удовлетворять следующим условиям:

- 1) не должно быть гидродинамического течения, то есть важно, чтобы

$$\sum_i \bar{V} = 0$$

2) внутренняя энергия системы, которая для твердого тела равна $3kT$ на одну частицу, есть суммарная кинетическая энергия всех частиц кристаллита: $m_a \frac{\langle V^2 \rangle}{2} = 3kT$

6. Задание внешних сил или возмущений

7. Анализ результатов [18].

1.2.1.2 Межатомные потенциалы взаимодействия

Важнейшим элементом компьютерной модели является потенциал межмолекулярного взаимодействия, так как посредством потенциала и массы частицы осуществляется связь модели с конкретной моделируемой системой или веществом.

Силы, действующие на атомы, определяются с помощью потенциала взаимодействия. Потенциал задает энергию взаимодействия между атомами в зависимости от расстояния между ними.

Потенциал Леннарда-Джонса (LJ)

Потенциал Леннарда-Джонса имеет вид:

$$U(r_{ij}) = \varepsilon \left[\left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^6 \right] = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (8)$$

где r_0 – равновесное расстояние (расстояние между частицами, при котором сила взаимодействия обращается в ноль);

σ – расстояние между частицами, при котором энергия взаимодействия обращается в ноль;

ε – глубина потенциальной ямы.

Первое слагаемое в выражении (8) в данном случае отвечает за взаимное отталкивание между атомами на достаточно близких расстояниях. Второе слагаемое определяет энергию так называемого ван-дер-ваальсова взаимодействия, и отвечает за притяжение между атомами. В реальных металлах характер взаимодействия чаще всего усложняется наличием

металлической и ковалентной составляющих, поэтому применять данный вид потенциала не рекомендуется.

Основное достоинство парных потенциалов заключается в том, что они просты и требуют меньше затрат машинного времени. Но на сегодняшний день предпочитают использовать многочастичные потенциалы, которые, являясь более сложными, но физически более обоснованными [40]. Ниже приведено краткое описание этих потенциалов.

Метод погруженного атома (EAM)

Метод погруженного атома (EAM – embedded atom method) основан на применении теории функционала электронной плотности.

Здесь каждый атом в системе рассматривается в качестве примеси, которая погружена в электронный газ, создаваемый остальными атомами системы, а энергия, необходимая для погружения, зависит от электронной плотности в точке погружения. В рамках данного метода энергия системы имеет вид [41]:

$$U = \sum_i F_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \varphi_{ij}(r_{ij}) \quad (9)$$

где φ_{ij} – парный потенциал взаимодействия,

F_i – функция погружения, зависящая от электронной плотности ρ_i в области расположения (погружения) i -го атома, которая, в свою очередь, определяется формулой:

$$\rho_i = \sum_{j \neq i} \rho_j(r_{ij}) \quad (10)$$

то есть электронная плотность в области погружения атома i определяется как линейная суперпозиция электронных плотностей остальных атомов системы. Смысл функции погружения может быть определен как энергия, необходимая для внедрения атома в электронный газ.

Следует отметить, что в EAM используются некоторые приближения, которые, с одной стороны, позволяют упрощать расчеты, а с другой стороны, являются недостатками и ограничивают область применения метода.

Метод погруженного иона (EIM)

Метод погруженного иона (EIM – embedded ion method) имитирует межмолекулярные и межионные взаимодействия, испытываемые молекулой или кластером субъекта в данном кристалле в расчетах квантово-механического экранирования с большим конечным, периодическим и самосогласованным массивом точечных зарядов.

Энергия системы E определяется выражением:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=i_1}^{i_N} \varphi_{ij}(r_{ij}) + \sum_{i=1}^N E_i(q_i, \sigma_i) \quad (11)$$

где $\varphi_{ij}(r_{ij})$ – парный потенциал взаимодействия.

Все параметры EIM перечислены в потенциальном файле, который указан командой `pair_coeff`. Это текстовый файл «`ffield.eim`», включенный в каталог «потенциалов» LAMMPS, в настоящее время содержит девять элементов Li, Na, K, Rb, Cs, F, Cl, Br и I. Система с любой комбинацией этих элементов может быть смоделирована.

К достоинствам метода погруженного иона можно отнести точность, с которой EIM воспроизводит экспериментальные значения и чувствительность EIM к параметрам, определяющим массивы точечных зарядов.

1.2.2 Кинетический метод Монте-Карло

Метод Монте-Карло выделяется среди прочих своей простотой и общностью. Основная идея кинетического метода – использование переходных уровней, которые зависят от энергетического барьера между состояниями, временные шаги выбраны таким образом, что они относятся к микроскопическим системам [42].

Применяется для моделирования эволюции возникших дефектов, их взаимодействия на длительных промежутках времени.

Метод Монте-Карло, дает возможность рассчитывать кинетику не только образования малых кластеров дефектов, но и роста кластеров на масштабах времен от микро – до миллисекунд [43].

Разработка модели осуществляется в соответствии со следующим порядком: □

- определение решетки и размещение на ней объектов (атомов, вакансий, смещенных атомов и т.д.);
- определение процессов, за счет которых происходит переход системы из одного состояния в другое;
- задание скоростей выбранных процессов (или их вероятностей) [44].

Алгоритм кинетического метода Монте-Карло

Построение решетки. Из всех точек прямоугольного параллелепипеда, имеющих целочисленные координаты (x,y,z) , выбираем подмножество, обладающее заданной симметрией. Для построения решетки разработана эффективная процедура расчета узлов решетки с использованием побитовых операций над целыми числами и найденных закономерностей для координат узлов решетки. Строится также дополнительная решетка, состоящая из позиций тетраэдрических междоузлий.

На некоторые узлы решетки помещаем дефекты. Дефект связан с узлом решетки и может быть точечным либо составным. Точечный дефект имеет тип и может иметь ориентацию. Составной дефект состоит из нескольких точечных дефектов одного типа (мономеров) и может занимать один или несколько узлов основной и/или дополнительной решетки.

Дефект также имеет набор кинетических параметров: карту переходов (вектора перехода, определяющие на какие другие узлы решетки он может перейти), карту реакций (показывающую, как дефект взаимодействует с другим дефектом, если они оказываются в пределах радиуса захвата), карту

превращений: дефекты могут спонтанно изменять свой тип путем эмиссии или трансформации.

Первый этап работы алгоритма – инициализация – генерация дефектов в соответствии с их распределением по пространству и типам. В результате 0,01-1% узлов решетки оказываются занятыми дефектами. После инициализации ставим счетчик времени моделирования на 0 ($t=0$).

На каждом шаге по времени выполняем следующие операции. Вычисляем скорости всех возможных переходов и превращений для каждого дефекта r_{ij} (i – номер дефекта, j – номер перехода или превращения), находим общую сумму $r = \sum r_{ij}$. Генерируем случайное число из интервала $(0, r)$. Выбираем один из дефектов и соответствующее событие по правилу пропорциональности. Увеличиваем время моделирования на величину $\Delta t=1/r$.

Далее перемещаем выбранный дефект в новый узел решетки в соответствии с картой переходов или осуществляем его преобразование в соответствии с картой трансформаций. Если в карте переходов или трансформаций есть несколько возможных путей, выбираем один из них по правилу пропорциональности. Проверяем, попал ли перемещенный дефект в область взаимодействия с каким-нибудь другим дефектом.

Если да, смотрим карту реакций и выполняем реакцию; при этом пара дефектов превращается в дефект другого типа. Если дефект вышел за границу ячейки, применяем периодические граничные условия. Затем переходим к следующему шагу по времени.

Через определенные достаточно большие промежутки времени координаты всех дефектов помещаем в файлы специального формата для последующей визуализации [43].

2 МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕНЕРАЦИИ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ МИШЕНИ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ МИП

Моделирование генерации радиационных дефектов было выполнено тремя способами: моделирование по NRT модели [22, 45], моделирование с помощью программ LAMMPS [46] и SRIM [47, 48].

2.1 Моделирование по NRT модели

Моделирование NRT (Norgett–Robinson–Torrens) позволяет произвести расчет количества пар Френкеля, образующихся при торможении ускоренных атомов [22, 45].

$$N_{NRT} = \frac{E_{an1} + E_{an2}}{2E_d} \quad (12)$$

где E_{an} – энергия аннигиляции радиационных дефектов в мишени после облучения,

E_d – пороговая энергия смещения атома.

В расчете NRT не учитывали возможность баллистических процессов рекомбинации дефектов в течение формирования каскада смещений. При расчете количества дефектов в каскаде была учтена потеря энергии фононов, найденная с помощью программы SRIM.

На рисунке 2 приведен результат моделирования по NRT модели количества РД для пороговой энергии смещения $E_d = 30$ эВ для мишеней из Cu, Ti и Zn, $E_d = 40$ эВ для мишени из Fe.

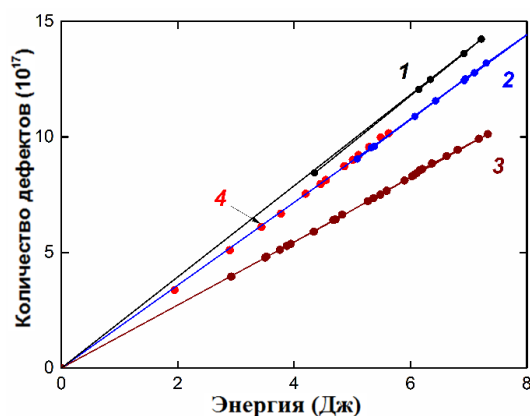


Рисунок 2 – Зависимость суммарного количества радиационных дефектов в мишени из Ti (1), Cu (2), нержавеющей стали (3) и латуни (4) от поглощенной энергии в металлических мишенях (точками обозначены экспериментальные данные, линиями – расчет по модели NRT)

Результаты, полученные с помощью моделирования NRT, близки к экспериментальным. Это связано с тем, что расчет производится по экспериментальным значениям энергии, поглощенной в мишени при облучении.

Недостатком NRT модели является то, что без экспериментальных данных, рассчитать количество радиационных дефектов в мишени не получится.

2.2 Моделирование в программе SRIM

Пакет программ TRIM (SRIM) предназначен для моделирования физических процессов возникновения каскадов радиационных дефектов при облучении слоистых твердотельных композиций заряженными частицами. Пакет свободно распространяется через Интернет [47].

Пакет программ доступен в двух версиях: TRIM для операционной системы DOS (также может работать под Windows в режиме эмуляции DOS) и SRIM для Windows. TRIM (SRIM) использует графический пользовательский многооконный интерфейс.

Состав пакета программ TRIM (SRIM): а) блок ввода исходных данных; б) блок моделирования; в) блок статистического анализа результатов расчета; г) блок вывода результатов расчета [49].

В SRIM используется квантово-механическая обработка ион-атомных столкновений (предполагая, что движущийся атом является «ионом», а все атомы мишени «атомами»). Этот расчет является эффективным благодаря использованию статистических алгоритмов, которые позволяют иону совершать скачки между вычисленными столкновениями, а затем усреднять результаты столкновений.

С помощью программы SRIM можно рассчитать количество первичных радиационных дефектов в каскаде иона, которое зависит от энергии иона.

На рисунке 3 представлена зависимость количества радиационных дефектов от энергии иона углерода для мишеней из разных металлов.

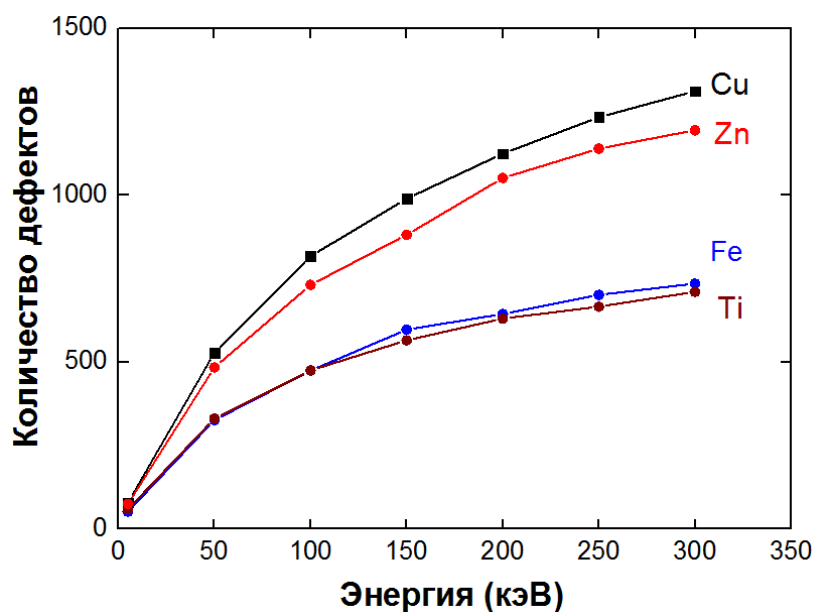


Рисунок 3 – Зависимость количества первичных радиационных дефектов в каскаде от энергии иона C^+ для мишеней из разных металлов

В таблице 1 приведены данные о количестве дефектов в каскаде, при средней энергии иона C^+ , равной 235 кэВ.

Таблица 1 – Количество дефектов, образующихся на один налетающий ион

Материал мишени	Потери энергии		Количество дефектов в каскаде		
	Возбуждение электронной подсистемы	Фононы	N_{SRIM}	$N_{ПВА}$	N_{cor}
Ti	84%	12%	657	2050	4600
Fe	81%	16%	684	2110	3462
Zn	77%	19%	1111	3090	4500
Латунь	77%	19%		3346	4768
Cu	78%	19%	1198	3490	4918

Количество дефектов рассчитывали при энергии связи решетки, равной 3 эВ, для пороговой энергии $E_d = 30$ эВ для мишеней из Cu, Ti, Zn и $E_d = 40$ эВ для мишени из Fe. Для латуни количество радиационных дефектов в каскаде рассчитывали как для суммы атомов меди и цинка в соответствующей пропорции.

По данным, приведенным в таблице 1 видим, что основная часть потерь кинетической энергии иона при торможении связана с возбуждением электронной подсистемы. Помимо потерь энергии на возбуждение электронной подсистемы, происходит передача энергии на тепловые колебания атомов кристаллической решетки (фононы).

Для расчета количества РД в каскаде атома также был использован метод первично выбитого атома (ПВА). При этом количество дефектов в медной мишени рассчитывали при торможении медного иона с энергией 250 кэВ, а энергию связи решетки брали равной пороговой энергии образования радиационного дефекта. Результаты расчетов приведены в таблице 1. Количество дефектов, полученное при моделировании методом ПВА, близко к количеству дефектов, которое получено экспериментально.

Результаты моделирования по программе SRIM можно использовать для оценки количества радиационных дефектов в каскаде атома углерода. При этом энергию, которую теряет ион при возбуждении электронной

подсистемы, будем учитывать на формирование дефектов. Тогда количество дефектов равно:

$$N_{cor} = N_{SRIM} \frac{E_{electron}}{E_{phonon}} \quad (13)$$

где $E_{electron}$ – потери на возбуждение электронной подсистемы,
 E_{phonon} – потери энергии на тепловые колебания фононов.

Выполненные расчеты по соотношению (13) показали завышенные данные для всех мишеней на 25-46%.

Также в программе SRIM для мишеней из титана, меди, железа и цинка были получены данные по пробегу и траектории ионов. Результаты представлены на рисунке 4.

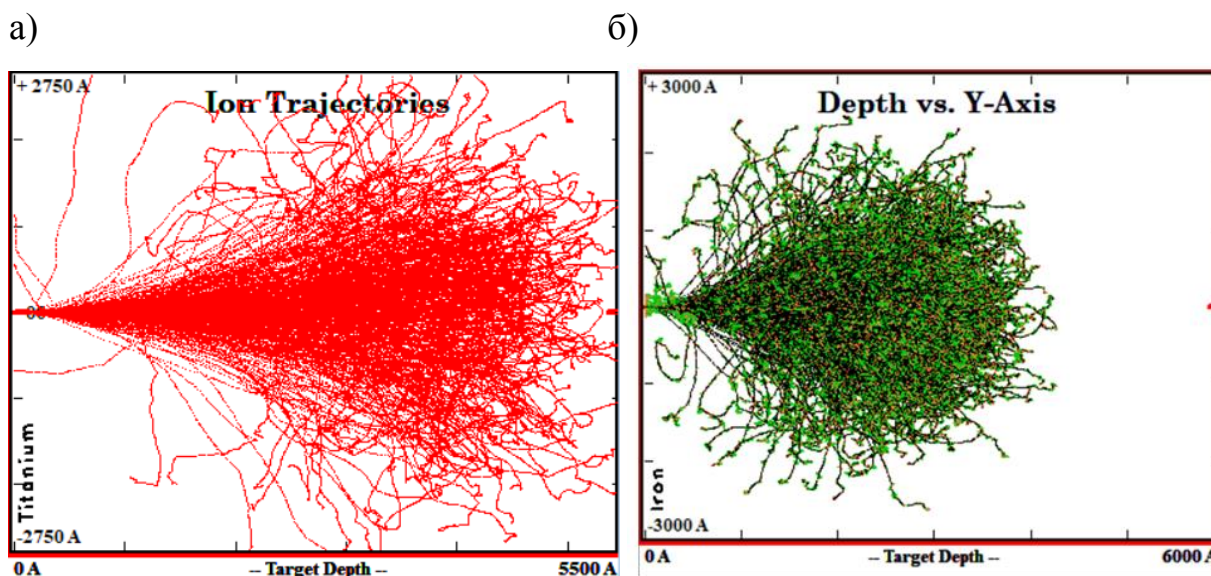


Рисунок 4 – Траектории движения иона C^+ с энергией 250 кэВ в титановой (а) и железной (б) мишенях при облучении из точечного источника

При энергии иона 250 кэВ радиус области дефектообразования составляет $\approx 2000 \text{ \AA}$.

2.3 Моделирование в программе LAMMPS

Для моделирования использовали программу LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator), которая считается одной из наиболее известных и мощных программ для классической молекулярной динамики. Данная программа является свободной и используется для

расчетов взаимодействий до десятков миллионов атомов. Программа не имеет графического интерфейса (только командный режим). Возможна компиляция исходных кодов под различные операционные системы (Linux, OS X, Windows) [46].

Для тестирования мы воспользовались последней 64-битной Windows-версией LAMMPS 64-bit 20160516 (версия от 16.05.2016). Данная версия программы может запускаться как в однопоточном режиме, так и в многопоточном (в случае многоядерных процессоров и многопроцессорных систем), для этого служат разные команды.

Дополнительные программы, которые необходимы для моделирования методом молекулярной динамики:

Far – программа управления файлами и архивами в Windows;

Ovito – пакет визуализации для перевода необработанных атомарных координат в графическое представление.

2.3.1 Исходный код

Процесс моделирования заключается в следующем:

- выбор платформы для проведения моделирования;
- установка программного обеспечения;
- сборка программного пакета;
- создание файла с входными данными;
- запуск моделирования;
- анализ результатов выгрузки.

Программа для LAMMPS содержит пять основных частей:

1. Инициализация – установка параметров, которые должны быть определены до создания атомов и структуры. Основные команды:

units – задается стиль, который определяет в каких единицах измерения будут входные параметры и результаты расчета. В наших расчетах в основном используется стиль 'metal', который использует единицы Ангстрем и эВ.

dimension – определяет размерность пространства (2d или 3d). Команда '*dimension 3*' указывает, что будет использоваться трехмерная ячейка моделирования.

boundary – команда определяет граничные условия для моделирования (p – периодические, f – непериодические и фиксированные, s – непериодические, m – непериодические). Команда '*boundary f f f*' – непериодические, фиксированные границы в направлениях x, y и z.

2. Определение структуры и типов атомов. Команды:

lattice – задается тип решетки (ГЦК, ОЦК, ГПУ, либо задать произвольную решетку самостоятельно); '*lattice hcp 2.95*' – команда для моделирования из титана, ГПУ – тип решетки, а число, следующее за этим, указывает константу решетки.

region – задается область пространства. Область может иметь различную форму: куб, сфера, цилиндр и т.п.; команда '*region beam block*' – задает область моделирования пучка.

create_box – команда создающая область моделирования, то есть создается расчетная ячейка, которая имеет форму и размеры, определенные командой *region*;

create_atoms – команда создания атомов в области моделирования.

3. Задание потенциала взаимодействия

В LAMMPS можно задавать разные потенциалы. Они определяются с помощью команд:

pair_style – тип потенциала;

pair_coeff – коэффициенты.

Команда '*pair_style*' указывает, какой межатомный потенциал будет использоваться. Команда '*pair_coeff*' указывает файл, в котором хранятся коэффициенты потенциала.

4. Установка условий для моделирования и вывода данных

В этом разделе задаются команды, которые определяют условия, при которых ведется расчет. Помимо этого, устанавливается тип вывода данных – переменные, картинки, видео

fix – команда определяет условия моделирования;

thermo – устанавливает параметры вывода данных в процессе моделирования;

dump – команда определяет вывод данных в файл: цифры, картинки, видео. Мы создаем файлы dump через временной шаг для дальнейшей визуализации в программе Ovito.

5. Запуск моделирования

minimize – команда запускает молекулярно-динамический расчет с целью минимизации энергии решетки;

run – команда запускает молекулярно-динамический расчет.

2.3.2 Визуализация результатов моделирования

Для визуализации результатов моделирования, полученных с помощью программы LAMMPS, использовалась программа Ovito (Open Visualization Tool). Это свободно доступное программное обеспечение для визуализации и анализа атомистических наборов данных, получаемых в результате моделирования молекулярной динамики/статики и моделирования по методу Монте-Карло. Ovito – программное обеспечение, написанное на C++, которое работает во всех основных операционных системах.

Анализ дефектов Вигнера-Зейтца

Анализ дефектов Вигнера-Зейтца (Wigner-Seitz defect analysis) это модификатор, который идентифицирует точечные дефекты в кристаллических структурах, используя так называемый метод ячейки Вигнера-Зейтца. Его можно использовать, например, для подсчета вакансий и междоузлий или для отслеживания их движения через решетку.

Предполагается, что существуют две конфигурации атомистической системы: эталонное состояние, которое не имеет дефектов (как правило,

совершенная кристаллическая решетка), и смещенная конфигурация, которая представляет собой дефектное состояние кристалла. В последнем случае некоторые атомы либо смещены, либо полностью удалены со своих первоначальных мест.

Положение каждого атома в эталонной конфигурации определяет центр ячейки Вигнера-Зейтца (также называемой ячейкой Вороного), которая является пространственной областью, принадлежащей этому положению. Алгоритм анализа Вигнера-Зейтца подсчитывает количество атомов (из смещенной конфигурации), которые занимают каждое положение (эталонной конфигурации). Как правило, каждое место занято ровно одним атомом, потому что большая часть кристалла остается неповрежденной, и атомы не покидают свои исходные позиции. Однако некоторые места могут быть заняты нулевыми атомами (вакансии) или более чем одним атомом (междоузлия) [50].

Параметр центросимметрии

Этот модификатор вычисляет параметр центросимметрии каждой частицы. Параметр центросимметрии (centrosymmetry parameter – CSP) – это показатель, используемый для категоризации пространственного расположения атомов. Параметр центросимметрии количественно определяет, насколько далека от идеала структура, окружающая отдельный атом; для атома, имеющего N ближайших соседей, CSP определяется как в уравнении (14), которое приведено ниже.

$$CSP = \sum_{i=1}^{N/2} |r_i + r_i + N / 2|^2 \quad (14)$$

где r_i и $r_i + N/2$ – векторы от центрального атома к паре противоположных соседей [50].

Для гранецентрированных кубических (ГЦК) решеток, $N = 12$ а для объемно-центрированных кубических (ОЦК) решеток, $N = 8$.

Для атомов, представляющих идеальную кристаллическую структуру, параметр CSP близок к нулю, и он становится ненулевым для атомов,

представляющих дефектные структуры. Преимущество параметра CSP заключается в том, что на него относительно не влияет упругая деформация в кристалле, хотя он все еще чувствителен к случайным тепловым смещениям атомов.

Самый большой недостаток CSP заключается в том, что некоторые кристаллические структуры, такие как гексагональная плотная упаковка (hcp), не попадают в центросимметричный класс (то есть мы не можем использовать CSP для выявления дефектов), и что пользователь должен ввести пороговое значение для различения совершенных атомов от дефектов.

2.3.3 Результаты моделирования

На рисунке 5 показана 3D модель, построенная с помощью приведенного выше кода в программе LAMMPS. 3D модель построена для медной мишени с размерами 100×100 Ангстрем, ион C^+

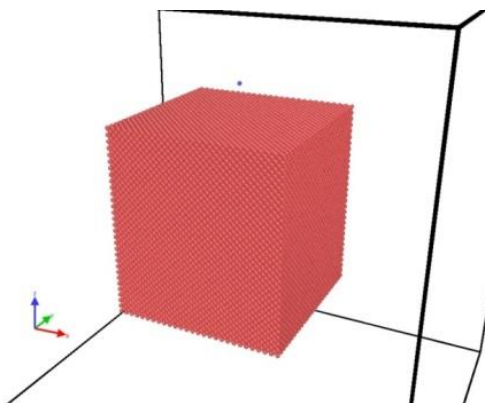


Рисунок 5 – 3D модель медной мишени (красным цветом обозначены атомы меди, синим цветом обозначен атом углерода)

Также с помощью программ LAMMPS и OVITO удалось получить визуализацию каскада дефектов в медной мишени при энергии атома углерода, равной 5 кэВ.

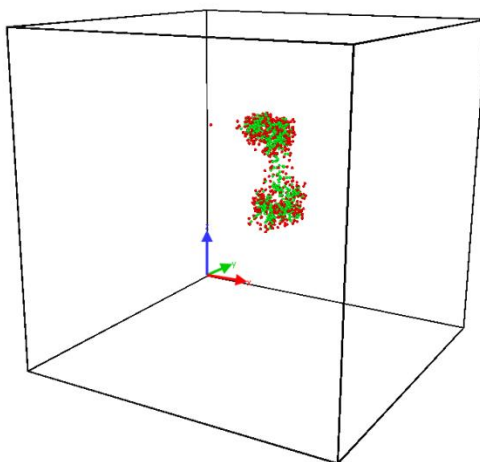


Рисунок 6 – Каскад дефектов в медной мишени при энергии атома углерода 5 кэВ (красным цветом обозначены междоузельные атомы, зеленым цветом обозначены вакансии)

Расчет количества дефектов.

Программа LAMMPS считается одной из наиболее известных и мощных программ для классической молекулярной динамики [46].

Моделирование проводилось для атома C^+ с энергией от 1 до 5 кэВ. В качестве образцов для моделирования были выбраны конструкционные материалы: медь, железо, титан.

В таблице 2 и на рисунке 7 показаны результаты моделирования количества радиационных дефектов в каскаде атома углерода для разных мишеней.

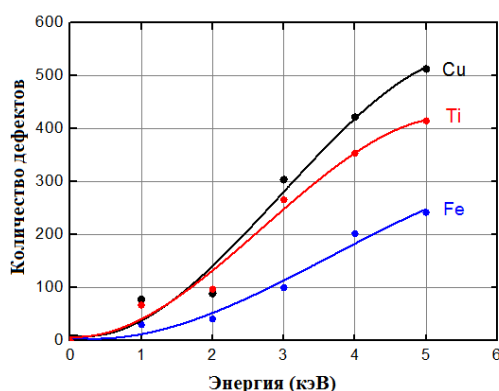


Рисунок 7 – Зависимость количества радиационных дефектов в каскаде от энергии атома C^+ для мишеней из разных металлов

В таблице 2 приведены данные о количестве дефектов, образующихся в мишенях из титана, меди и железа, полученные с помощью программы LAMMPS.

Таблица 2 – Количество дефектов образующихся на один налетающий атом

Материал	Количество дефектов на один атом углерода				
	1 кэВ	2 кэВ	3 кэВ	4 кэВ	5 кэВ
Титан	67	97	266	354	415
Медь	78	89	304	422	513
Железо	30	41	100	202	242

Видим, что с увеличением энергии увеличивается и число образующихся дефектов.

На рисунке 8 представлена зависимость концентрации дефектов от плотности энергии МИП.

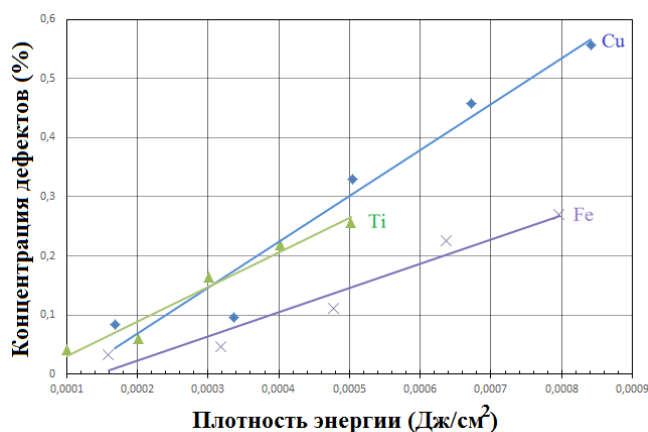


Рисунок 8 – Зависимость концентрации радиационных дефектов от плотности энергии иона C^+ для мишеней из разных металлов

Расчет глубины пробега иона.

Зависимость глубины пробега иона от энергии приведена на рисунке 9.

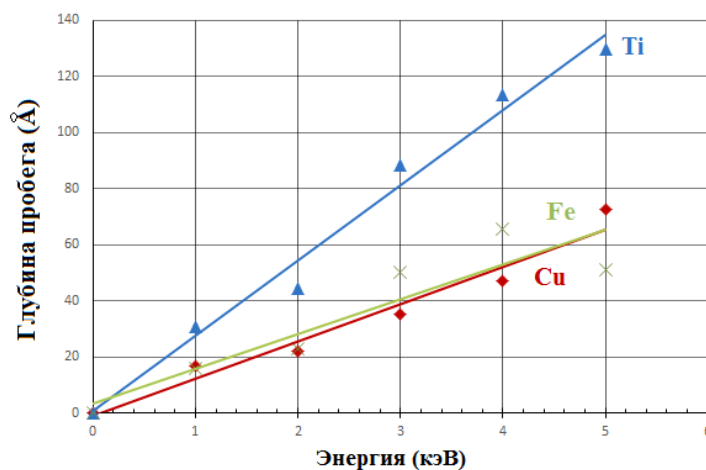


Рисунок 9 – Зависимость глубины пробега иона C^+ от энергии для мишеней из разных металлов

В таблице 3 приведены данные о глубине пробега иона, в мишенях из титана, меди и железа, полученные с помощью программы LAMMPS.

Таблица 3 – Глубина пробега иона C^+

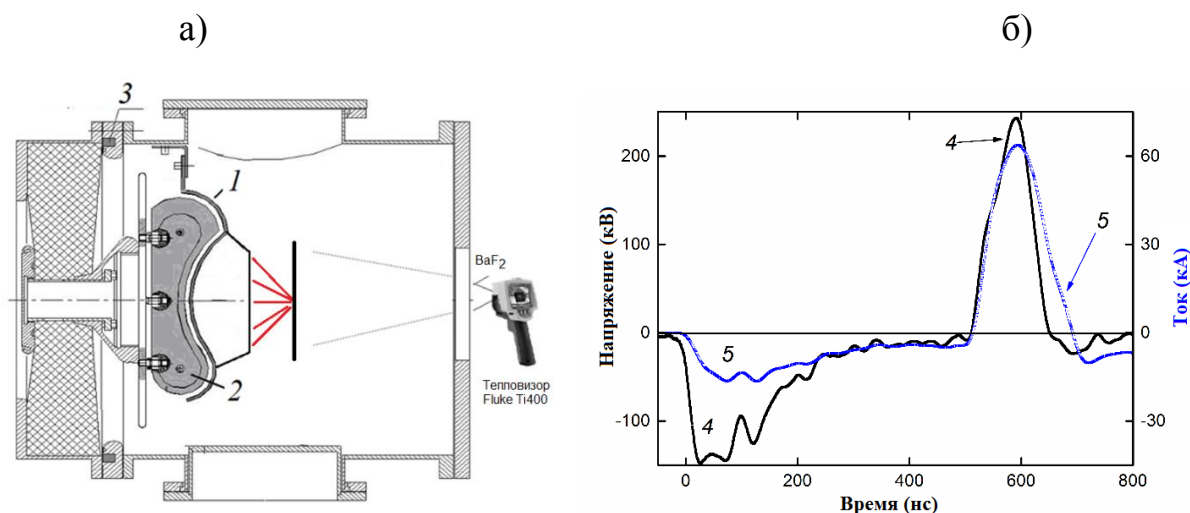
Материал	Глубина пробега, Å				
	1 кэВ	2 кэВ	3 кэВ	4 кэВ	5 кэВ
Титан	31	45	88	113	130
Медь	17	22	35	47	72
Железо	16	23	50	66	51

С увеличением энергии во всех материалах глубина пробега увеличивается. Наибольшая глубина пробега в мишени из титана.

3 ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕНЕРАЦИИ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ МИШЕНИ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ МОЩНЫМ ИОННЫМ ПУЧКОМ

3.1 Экспериментальный стенд

Исследования проведены на ускорителе ТЕМП-6 [51] в режиме формирования двух импульсов: первый (плазмообразующий) – отрицательный (450–500 нс, 100–200 кВ) и второй (генерирующий) – положительный (120 нс, 200–250 кВ). Полосковый фокусирующий диод размером 22×4,5 см с фокусным расстоянием 14 см работал в режиме магнитной самоизоляции электронов. Анод-катодный зазор составлял 9 мм и был выбран из условия согласования импеданса диода с волновым сопротивлением двойной формирующей линии (4,9 Ом). Анод изготовлен из графита, катод – из нержавеющей стали с прорезями 2×0,5 см, прозрачность 70%. Схема диодного узла и характерные осциллограммы приведены на рисунке 10.



1 – катод, 2 – анод; 3 – пояс Роговского, 4 – осциллограмма ускоряющего напряжения, 5 – осциллограмма полного тока в диоде

Рисунок 10 – Схема диодного узла (а) и осциллограммы ускоряющего напряжения и полного тока в диоде (б)

Фокусирующий ионный диод полуцилиндрической геометрии формировал пучок, содержащий ионы углерода C^+ (80-90%) и протоны [52]. Плотность энергии МИП 1–5 Дж/см², частота следования импульсов 5–10 имп./мин. Стандартная девиация полной энергии МИП и его плотности энергии в фокусе не превышала 10% [53].

Диагностику параметров МИП проводили по тепловому отпечатку на мишени с использованием тепловизора Fluke Ti400 (спектральный диапазон 7-14 мкм). Ресурс мишени составляет 10³ импульсов МИП. Тепловой отпечаток пучка регистрировали через выходное окно, расположенное на фланце диодной камеры (рисунок 10). В качестве окна использовали плоскопараллельную пластину из фторида бария. Фторид бария имеет неполное пропускание в рабочем спектральном диапазоне тепловизора, поэтому перед исследованиями была выполнена калибровка диагностического оборудования [13].

После нагрева ионным пучком лицевой стороны мишени мы регистрируем тепловизором тепловое поле на ее тыльной поверхности (см. рисунок 10). Для мишени из нержавеющей стали толщиной 0,1 мм время однородного прогрева по толщине не превышает 1 мс [54]. Тепловизор Fluke Ti400 регистрировал тепловой отпечаток МИП на мишени только через 0,1 с после облучения, поэтому процесс прогрева мишени по толщине не вносил большой погрешности в тепловизионную диагностику МИП.

3.2 Исследование охлаждения мишени

При облучении металлической мишени импульсным ионным пучком в ней формируется значительное количество радиационных дефектов, которые влияют на процесс охлаждения мишени после облучения. Эксперименты были выполнены на мишени, размеры которой значительно меньше поперечных размеров МИП. Это обеспечивало ее однородное облучение ионным пучком и предотвращало потери тепловой энергии из нагретой области за счет теплопроводности. Диск из нержавеющей стали (или других металлов) диаметром 10 мм и толщиной 0,1 мм был установлен в

центральном отверстии большой мишени из нержавеющей стали той же толщины и закреплен тонкими проволоками из нержавеющей стали диаметром 0,1 мм. Фотография мишени и распределение температуры в области ее нагрева через 0,1 с после облучения показаны на рисунке 11.

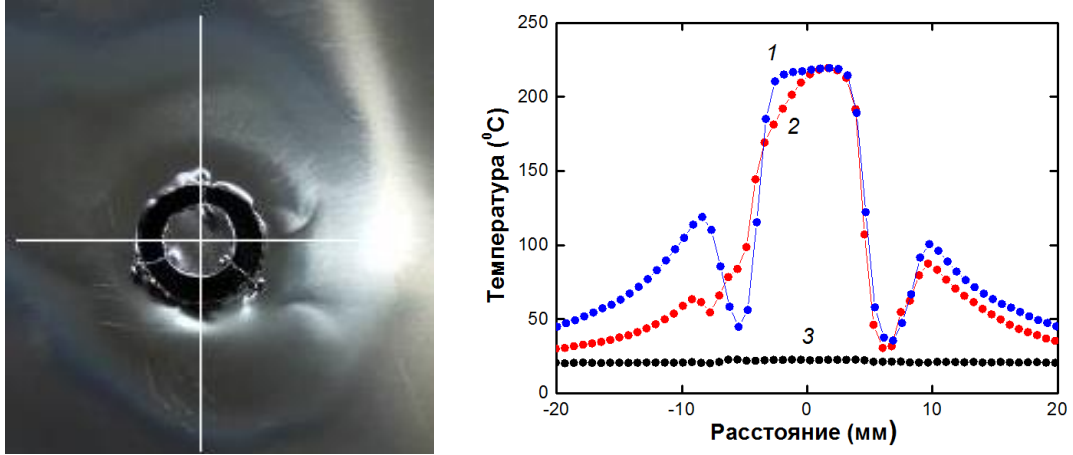


Рисунок 11 – Фотография мишени с центральным диском и распределение температуры мишени в вертикальном (1) и горизонтальном (2) сечениях, начальная температура мишени (3)

При однородной температуре по глубине мишени объемная плотность тепловой энергии равна:

$$J_{\text{exp}}(x, y, t) = c_v \cdot \rho \cdot [T(x, y, t) - T_0], \quad \text{Дж} / \text{см}^3 \quad (15)$$

где $T(x, y, t)$ – температура мишени.

Мощность потерь тепловой энергии в мишени при ее охлаждении равна:

$$W_{\text{exp}}(t) = \left| \frac{d[S \cdot \Delta \cdot J_{\text{exp}}(t)]}{dt} \right| = S \cdot c_v \cdot \Delta \cdot \rho \left| \frac{dT_m(t)}{dt} \right|, \quad \text{Вт} \quad (16)$$

где S – площадь мишени,

$T_m(t)$ – средняя температура мишени.

Для повышения точности расчета мощности потерь энергии в мишени экспериментальные значения ее температуры аппроксимировали полиномом шестой степени, погрешность аппроксимации не превышала 1%.

При расчете мощности теплового излучения учитывался тепловой поток с лицевой и тыльной (по отношению к ионному пучку) сторон мишени, а также встречный тепловой поток со стенок камеры. Расчет выполнен по соотношению Стефана-Больцмана:

$$W_{ir}(t) = S[(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) \cdot \sigma [T_m^4(t) - T_0^4]], \quad Вт \quad (17)$$

где ε_1 и ε_2 – степень черноты лицевой и тыльной сторон мишени, $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-12}$ Вт/(см²·К⁴) – постоянная Стефана-Больцмана.

Площадь мишени значительно меньше площади стенок диодной камеры, поэтому переотражение теплового излучения мишени незначительно [55]. Степень черноты лицевой стороны мишени (облучаемой ионным пучком) при расчетах брали равной 0,7 (неполированная нержавеющая сталь), степень черноты тыльной стороны мишени 0,95, так как перед экспериментами она была покрыта тонким слоем черной матовой краски.

Результаты расчетов показаны на рисунке 12.

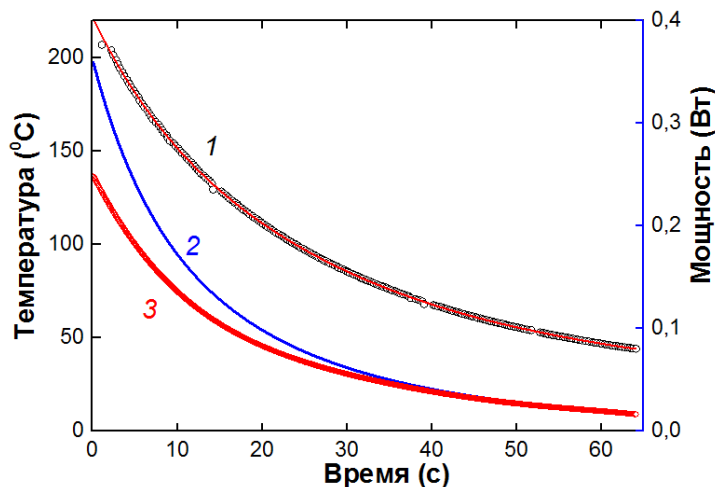


Рисунок 12 – Изменение температуры мишени (1), мощности теплового излучения мишени (2) и модуля мощности потерь тепловой энергии в мишени (3) при охлаждении

Начальная температура мишени была 22°C, теплоемкость нержавеющей стали при расчетах брали равной 0,46 Дж/(г·К).

Выполненные исследования показали, что в течение начальных 35-40 с после облучения МИП (длительность импульса 120 нс) мощность теплового излучения мишени превышает мощность потерь тепловой энергии в ней. Это указывает на дополнительное выделение энергии в мишени. В дальнейшем мощность потерь энергии и мощность теплового излучения совпадают с точностью 10% для всех исследованных мишеней из разных металлов, что подтверждает корректность выполненных расчетов.

3.3 Экспериментальное определение количества радиационных дефектов

В условиях эксперимента происходит эффективная перезарядка ионов в области транспортировки. Часть энергии ускоренных атомов в полной энергии пучка превышает 98%. В связи с этим нагрев мишени связан по большей части не с поглощением кинетической энергии ионов, а с поглощением кинетической энергии ускоренных атомов.

3.3.1 Количество радиационных дефектов в мишени

Проведенные исследования показали, что РД можно разделить на быстрые и медленные дефекты. Быстрые дефекты аннигилируют в течение 0,1 с после облучения. Медленные дефекты мигрируют в мишени и далее аннигилируют в течение десятков секунд или формируют кластеры. Радиационные дефекты в металлах мигрируют при небольшой энергии активации, благодаря этому они достаточно подвижны и аннигилируют при комнатной температуре. Число пар Френкеля, образующихся в мишени, рассчитывается по формуле:

$$N_d = \frac{E_{an}}{2E_d} \quad (18)$$

где E_{an} – энергия аннигиляции радиационных дефектов в мишени после облучения;

E_d – пороговая энергия смещения атома.

Количество быстрых радиационных дефектов рассчитывали по формуле (19), по дополнительной тепловой энергии в мишени через 0,1 с после облучения:

$$E_{an1} = (1-H) \cdot c_v \cdot \rho \cdot \Delta \cdot S \cdot (T_1 - T_0), \text{ Дж} \quad (19)$$

где T_1 – средняя температура мишени через 0,1 с после облучения,

H – доля потерь энергии фононов в дополнительной тепловой энергии в мишени после облучения.

При определении количества быстрых радиационных дефектов в мишени мы не учитываем их рекомбинацию в процессе формирования каскада смещений [22], так как эти процессы дают вклад в нагрев мишени.

Было рассчитано количество радиационных дефектов для пороговой энергии $E_d = 30$ эВ для мишеней из Cu, Ti и Zn [22, 56, 49, 57], а также $E_d = 40$ эВ для железной мишени [22, 58].

Значения H были получены с помощью программы SRIM (см. раздел 2.2). Для медной и латунной мишеней брали $H = 0,19$ для мишени из нержавеющей стали $H = 0,17$ и $H = 0,13$ для титановой мишени.

Количество медленных радиационных дефектов из соотношения (18) рассчитывали по энергии их аннигиляции, которая получается при интегрировании мощности отжига радиационных дефектов.

$$E_{an2} = \int_0^{\tau} (W_{ir} - W_{exp}) dt, \text{ Дж} \quad (20)$$

где τ – продолжительность измерения охлаждения мишени, равная в экспериментах 60-70 с для мишеней из разных металлов (см. рисунок 12).

На рисунках 13-15 приведены результаты расчета количества быстрых и медленных ионов в мишени. Представлены зависимости количества дефектов от энергии, переданной ионным пучком в мишень. Энергия, переданная пучком в мишень, была рассчитана как сумма тепловой энергии в мишени через 0,1 с после облучения пучком (E_{an1}) и энергии аннигиляции медленных радиационных дефектов в мишени (E_{an2}).

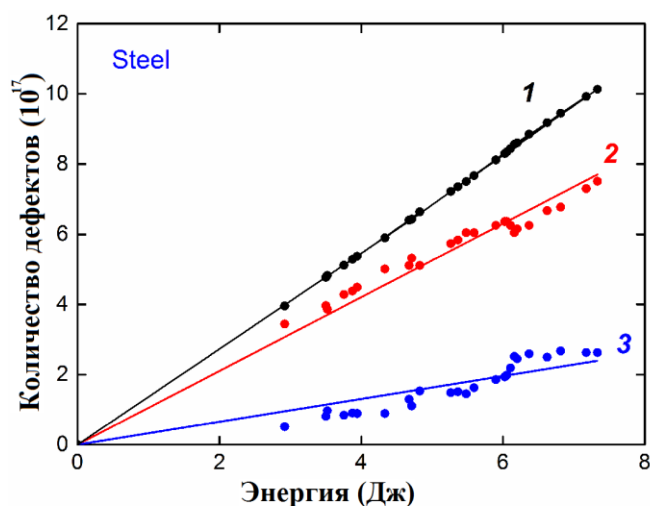


Рисунок 13 – Зависимость количества радиационных дефектов от поглощенной энергии в мишени из нержавеющей стали (точками обозначены экспериментальные данные, линиями – расчет по модели NRT):
 1 – сумма быстрых и медленных дефектов, 2 – количество быстрых дефектов,
 3 – количество медленных дефектов

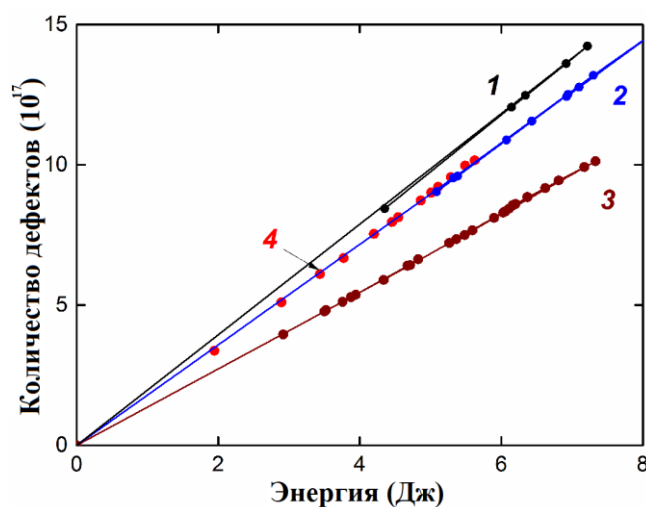


Рисунок 14 – Зависимость суммарного количества радиационных дефектов в мишени из Ti (1), Cu (2), нержавеющей стали (3) и латуни (4) от поглощенной энергии в металлических мишенях (точками обозначены экспериментальные данные, линиями – расчет по модели NRT)

Наши эксперименты показали, что в мишени из нержавеющей стали количество радиационных дефектов наименьшее, что объясняется тем, что пороговая энергия смещения атомов в железе больше, чем в других исследованных материалах.

Аналогичные зависимости, полученные для быстрых и медленных радиационных дефектов, формируемых в мишенях из разных металлов, имеют видимые различия (рисунок 15).

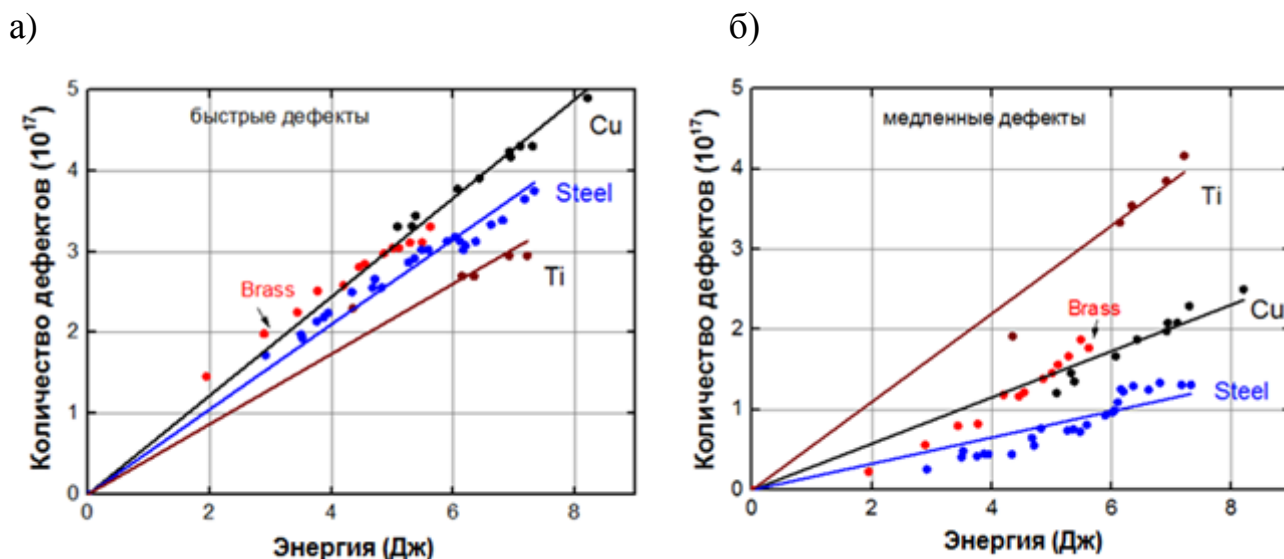


Рисунок 15 – Зависимость количества быстрых (а) и медленных (б) радиационных дефектов в металлических мишенях от поглощенной энергии в мишени

Из рисунка 15 видно, что меньшее количество быстрых дефектов образуется в мишени из титана, а меньшее количество медленных дефектов образуется в мишени из нержавеющей стали.

3.3.2 Количество радиационных дефектов в каскаде смещений

Одним из основных параметров, который рассчитывают при моделировании формирования радиационных дефектов в мишени, является количество дефектов, которые образуются в каскаде одного быстрого атома и их зависимость от энергии атома и материала мишени. Зависимость количества радиационных дефектов в мишени от плотности энергии МИП описывается линейной функцией (рисунки 13-15) $N_d = K_d \cdot E_{sum}$. Тогда усредненное количество радиационных дефектов в каскаде смещений можно рассчитать по формуле:

$$n_d = K_d \cdot E_{ion} \quad (21)$$

где E_{ion} – средняя энергия быстрого атома в пучке.

K_d – коэффициент, равный количеству радиационных дефектов, формируемых в мишени ионным пучком с энергией 1 Дж.

Зная плотность энергии и плотность ионного тока в фокусе МИП для режима без перезарядки ионов, можно рассчитать среднюю энергию ионов и быстрых атомов в пучке, который формируется ускорителем ТЕМП-6. На рисунке 16 представлены результаты измерения плотности энергии МИП.

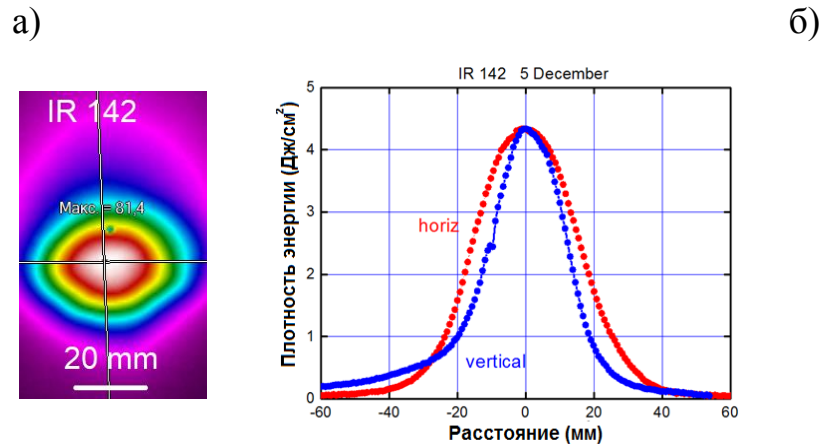


Рисунок 16 – Термограмма (а) и распределение плотности энергии в фокусе МИП (б)

На рисунке 17 представлены осциллограммы ускоряющего напряжения, плотности ионного тока и результаты времяпролетной диагностики состава МИП [59].

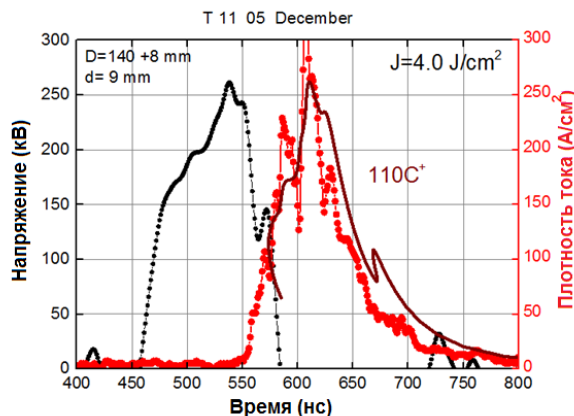


Рисунок 17 – Формирующие волны ускоряющего напряжения (второй импульс) и плотности ионного тока. Точками обозначена экспериментальная, а линиями расчетная плотность ионного тока ионов C^+

Для рисунка 17 плотность заряда МИП (интеграл плотности ионного тока) в фокусе составляет $1,9 \cdot 10^{-5}$ Кл/см², что соответствует флюенсу ионов $1,2 \cdot 10^{14}$ см⁻². При этом плотность энергии в фокусе равна $4,5$ Дж/см² ± 8%, (рисунок 16). Это соответствует средней энергии иона $3,75 \cdot 10^{-14}$ Дж (235 кэВ).

Результаты расчета по соотношению (21) представлены в таблице 4.

Таблица 4 – Экспериментальные значения количества дефектов в каскаде атома C⁺

Материал мишени	Фононы	K ₁ , ×10 ¹⁶	K ₂ , ×10 ¹⁶	Быстрые дефекты	Медленные дефекты	Сумма
Титан	12%	4,3	5,5	1636	2068	3704
Нерж. сталь	15%	5,3	1,6	1974	620	2594
Латунь	19%	6,1	2,8	2290	1070	3360
Медь	19%	6,1	2,9	2290	1090	3380

3.4 Расчет среднего расстояния между каскадами смещений в мишени

Моделирование генерации радиационных дефектов по NRT модели и с помощью программ LAMMPS и SRIM было выполнено при условии отсутствия коллективных эффектов в мишени при облучении МИП, отсутствия влияния соседних каскадов смещения друг на друга.

Данные по пробегу и траекториям ионов в меди, железе, титане и цинке были получены с помощью моделирования в программе SRIM. Траектории иона показаны на рисунке 18, где горизонтальный и вертикальный масштабы одинаковы.

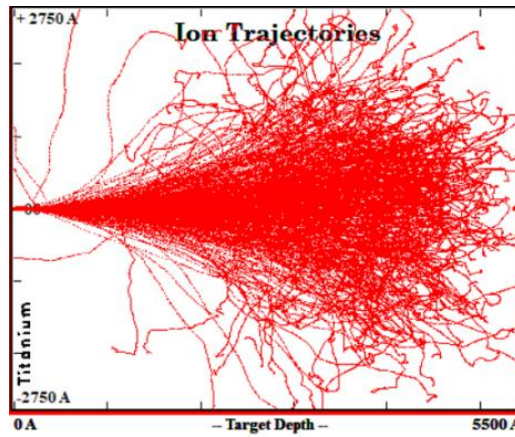


Рисунок 18 – Траектории движения иона C^+ с энергией 250 кэВ в титановой мишени при облучении из точечного источника

Когда энергия ионов составляет 250 кэВ, радиус области образования дефектов $\approx 2000 \text{ \AA}$. Плотность заряда МИП (интеграл от плотности ионного тока, см. рисунок 19) в фокусе составляет $1,9 \cdot 10^{-5} \text{ Кл/см}^2$, что соответствует флюенсу ионов $1,2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$. Среднее расстояние между ионными треками в мишени составляет 9 \AA ; это расстояние значительно меньше площади образования радиационных дефектов ионом с энергией 200–300 кэВ в металлической мишени (рисунок 18). Однако длительность плавления и рекристаллизации материала мишени в области каскада смещений, образованного одним ионом, не превышает 2 пс [22], и при плотности ионного тока 300 А/см^2 , среднее расстояние между ионными треками в мишени за это время превышает 5000 \AA . Поэтому при облучении мишени образование радиационных дефектов не зависит друг от друга. При моделировании можно рассматривать один ион на ячейку размером 100×100 ангстрем.

4 ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ

Цель раздела «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» – определение экономической целесообразности исследования радиационной стойкости конструкционных материалов методом численного моделирования, а также оценка ресурсоэффективности и конкурентоспособности проекта.

Для достижения цели необходимо решить следующие задачи:

- Оценить коммерческий потенциал и перспективность проведения научного исследования;
- Произвести планирование научно-исследовательских работ;
- Определить ресурсную и финансовую эффективность исследования.

4.1 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований

При освоении космического пространства, развитии атомной промышленности, исследованиях термоядерного синтеза должны применяться материалы, имеющие высокую радиационную стойкость.

В связи с этим необходимо найти оперативный метод исследования радиационной стойкости материалов, подверженных интенсивной радиационной нагрузке. Этот метод не должен требовать дорогостоящего оборудования, должен обеспечивать возможность оперативного анализа образцов из наиболее распространенных конструкционных материалов и быть доступным для большого круга исследователей.

Цель исследования – моделирование генерации радиационных дефектов в металлах при облучении мощным ионным пучком. Разработка научных основ нового (имитационного) метода исследования радиационной стойкости конструкционных материалов, используемых в ядерном реакторе на быстрых нейтронах.

4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Чтобы определить потенциальных потребителей данной разработки, необходимо рассмотреть целевой рынок и провести его сегментирование.

Научный проект осуществляется для исследования радиационной стойкости металлов. Выпускная квалификационная работа посвящена исследованию радиационной стойкости металлов с помощью математического моделирования быстрых радиационных процессов в металлах при их облучении МИП.

Потенциальными потребителями данного научно-технического исследования являются сотрудники научно-исследовательских институтов, заводы, изготавливающие конструкции для аппаратов, используемых в космическом пространстве, научно-исследовательские лаборатории, занимающиеся исследованием термоядерного синтеза и компании, занимающиеся атомной промышленностью.

Таблица 5 – Карта сегментирования рынка

Сегмент	Продукт	
	Тепловизионная диагностика	Численное моделирование
1. Научно-исследовательские лаборатории		
2. Заводы-изготовители космических аппаратов; Компании, занимающиеся атомной промышленностью		

Из анализа карты, можно сделать вывод, что основным сегментом являются научные институты и научно-исследовательские лаборатории, которые выполняют почти весь цикл работ, связанных с радиационными процессами в металлах. Для того чтобы сделать процесс исследования более простым, быстрым и менее дорогостоящим, мы хотим применить методы численного моделирования, что в дальнейшем позволит сотрудничать с заводами и компаниями работающими в космической и атомной промышленности.

4.1.2 Анализ конкурентных технических решений

С помощью данного анализа в научный проект вносятся коррективы, которые помогают успешно противостоять конкурентам. В ходе проведения анализа необходимо оценить сильные и слабые стороны разработок конкурентов. Для этой цели используется вся имеющаяся информация о конкурентных разработках.

Анализ проводится с помощью оценочной карты. Оценочная карта приведена в таблице 6. Для формирования оценочной карты отбираем два метода, с помощью которых можно исследовать радиационную стойкость металлов и используем всю имеющуюся о них информацию.

Оценку будем производить по 5 бальной шкале, где за наиболее слабую позицию принимается – 1, а за наиболее сильную – 5. Суммарный вес показателей должен быть равен 1.

Экспертная оценка включает сравнение конкурентных разработок по техническим и экономическим критериям.

Сравнение будем делать на основе данных о двух методах, используемых в научных лабораториях при исследовании радиационной стойкости металлов. Рассматриваемые методы: тепловизионная диагностика (ТД) и численное моделирование (ЧМ).

Таблица 6 – Оценочная карта конкурентных технических решений

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы		Конкурентоспособность	
		Бтд	Бчм	Ктд	Кчм
1	2	3	4	5	6
Технические критерии оценки ресурсоэффективности					
1. Удобство в эксплуатации	0,12	3	5	0,36	0,6
2. Энергоэкономичность	0,05	3	5	0,15	0,25
3. Надежность	0,05	5	4	0,25	0,2
4. Простота эксплуатации	0,11	3	5	0,33	0,55
5. Безопасность	0,11	3	5	0,33	0,55

Продолжение таблицы 6

Критерии оценки	Вес критерия В_і	Баллы		Конкурентоспособность	
		Б_{тд}	Б_{чм}	К_{тд}	К_{чм}
1	2	3	4	5	6
Экономические критерии оценки эффективности					
1. Повышение производительности труда	0,2	4	5	0,8	1
2. Конкурентоспособность продукта	0,11	5	3	0,55	0,33
3. Уровень проникновения на рынок	0,06	4	4	0,24	0,24
4. Цена	0,05	3	5	0,15	0,25
5. Предполагаемый срок эксплуатации	0,14	5	5	0,7	0,7
Итого	1	38	46	3,86	4,67

Выражение для расчета анализа конкурентных технических решений:

$$K = \sum V_i \cdot B_i, \quad (22)$$

где K – конкурентоспособность конкурента;

V_i – вес показателя;

B_i – балл i -го показателя.

Более высокие показатели численного моделирования в сравнении с тепловизионной диагностикой, обеспечиваются тем, что тепловизионная диагностика требует использования сложного оборудования, требует участия высококвалифицированных сотрудников, больших временных и материальных затрат, в сравнении с численным моделированием процессов. Но, безусловно, результаты численного моделирования по своей точности и полноте, пока не могут приблизиться к результатам тепловизионной диагностики. Самым оптимальным вариантом на данном этапе является объединение результатов, полученных с помощью двух представленных методов.

4.1.3 Технология QuaD

Технология QuaD представляет собой гибкий инструмент измерения характеристик, которые описывают качество новой разработки и ее

перспективность на рынке, и позволяют принимать решение целесообразности вложения денежных средств в разрабатываемый проект.

В основе технологии QuaD лежит нахождение средневзвешенной величины групп показателей: оценки коммерческого потенциала разработки и оценки качества разработки.

Таблица 7 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок)

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы	Максимальный балл	Относительное значение (3/4)	Средневзвешенное значение (5×2)
1	2	3	4	5	6
Показатели оценки качества разработки					
1. Удобство в эксплуатации	0,12	90	100	0,90	0,11
2. Энергоэкономичность	0,05	90	100	0,90	0,05
3. Надежность	0,05	70	100	0,70	0,04
4. Простота эксплуатации	0,11	95	100	0,95	0,10
5. Безопасность	0,11	95	100	0,95	0,10
Показатели оценки коммерческого потенциала разработки					
6. Повышение производительности труда у пользователя	0,2	90	100	0,90	0,18
7. Конкурентоспособность продукта	0,11	70	100	0,70	0,08
8. Уровень проникновения на рынок	0,06	70	100	0,70	0,04
9. Цена	0,05	90	100	0,90	0,05
10. Предполагаемый срок эксплуатации	0,14	90	100	0,90	0,13
Итого	1				0,88

Оценка качества и перспективности по технологии QuaD определяется по формуле:

$$P_{cp} = \sum B_i \cdot V_i \quad (23)$$

где P_{cp} – средневзвешенное значение показателя качества и перспективности научной разработки;

B_i – вес показателя (в долях единицы);

B_i – средневзвешенное значение i -го показателя.

Значение P_{cp} позволяет говорить о перспективах разработки и качестве проведенного исследования. Если значение показателя P_{cp} получилось от 100 до 80, то такая разработка считается перспективной. Таким образом, в результате расчетов получено $P_{cp} = 88 \%$, следовательно, разработка перспективна.

4.1.4 SWOT- анализ

SWOT – анализ проводят для того, что бы исследовать внешнюю и внутреннюю среды проекта.

Проведение анализа осуществляется в несколько этапов:

- Описание сильных (**Strengths**) и слабых (**Weaknesses**) сторон проекта, выявление возможностей (**Opportunities**) и угроз (**Threats**), которые могут появиться во внешней среде проекта;

- Выявление соответствия внешним условиям среды сильных и слабых сторон исследовательского проекта;

- Составление итоговой матрицы SWOT-анализа.

SWOT-анализ проводим для исследования внешней и внутренней среды численного моделирования генерации радиационных дефектов в металлах при облучении МИП.

Результаты SWOT-анализа представлены в таблице 8.

Таблица 8 – Матрица SWOT

	Сильные стороны (S) С1. Простота и удобство в эксплуатации; С2. Безопасность; С3. Низкие расходы; С4. Время исследования	Слабые стороны (W) Сл1. Результаты требуют экспериментального подтверждения; Сл2. Недостаточно информации о методе; Сл3. Не достаточная точность результатов на данном этапе исследования
Возможности (O) В1. Исследование образцов из разных материалов без затрат; В2. Отсутствие разрушения образца; В3. Государственная поддержка исследования; В4. Проведение исследований на любом компьютере	В1С3С4. Благодаря низким материальным и временным затратам можно исследовать большой теоретический пласт информации для подбора наиболее подходящих характеристик и условий эксперимента; В3С1С2С3С4. Удобство в эксплуатации, безопасность, низкие материальные и временные затраты на исследование способствуют получению государственной поддержки; В4С1. За счет простоты и удобства в эксплуатации, исследования можно проводить на любом компьютере, без специального оборудования.	В1Сл1. Благодаря возможности проводить исследования для различных материалов, расширяется круг имеющихся экспериментальных данных, с которыми можно произвести сравнение; В1В4Сл2. За счет того, что исследования можно проводить для большого количества материалов и на любом компьютере, а информации о методе не достаточно, есть возможность публикации актуальных статей в научных журналах.
Угрозы (Т) У1. Активность конкурентов; У2. Технические сбои, которые могут повлечь за собой потерю наработанной информации	У1С3С4. За счет сокращения материальных и временных затрат на исследование, обеспечивается преимущество перед конкурентными разработками; У2С1. Простая технология позволит достаточно быстро воссоздать утерянные результаты.	У1Сл1Сл3. Недостаточная точность результатов, достигнутая на данном этапе исследования, может привести к опережающим активным исследованиям со стороны конкурентов, но простота и доступность данного метода, помогут уменьшить риски.

Численное моделирование генерации радиационных дефектов в металлах при облучении МИП целесообразно. Достоинства превосходят недостатки, к тому же имеются возможности по улучшению проекта.

4.2 Планирование научно-исследовательских работ

4.2.1 Структура работ в рамках научного исследования

Планирование необходимых для осуществления проекта работ производится в следующей последовательности:

- определение структуры работ в рамках научного исследования;
- определение участников каждой работы;
- установление продолжительности работ;
- построение графика проведения научных исследований.

Для исполнения проекта формируется рабочая группа, состоящая из научного руководителя (НР) и младшего научного сотрудника (МНС).

Составим список этапов и работ, производимых в проекте. Распределим этапы работ в соответствии с должностями исполнителей.

Результаты формирования структуры работ отражены в таблице 9.

Таблица 9 – Основные этапы работ

Основные этапы	№ работы	Содержание работ	Исполнитель
Разработка технического задания	1	Составление и утверждение технического задания	НР
Выбор направления исследований	2	Подбор и изучение материала по теме	МНС
	3	Выбор направления исследований	НР, МНС
	4	Календарное планирование работ по теме	НР
Теоретические и экспериментальные исследования	5	Обзор литературы	НР, МНС
	6	Моделирование генерации РД	НР, МНС
	7	Описание экспериментальных исследований	НР, МНС
Обобщение и оценка результатов	8	Обработка и анализ полученных результатов	НР, МНС
Оформление отчета	9	Составление пояснительной записки	НР, МНС

4.2.2 Определение трудоемкости выполнения работ

Трудоемкость исследуемого проекта имеет вероятностный характер, из-за зависимости от большого количества тяжело учитываемых факторов. Оценивается трудоемкость экспертным путем.

Ожидаемое (среднее) значение трудоемкости $t_{ожі}$ находится по приведенной формуле:

$$t_{ожі} = \frac{3t_{mini} + 2t_{maxi}}{5} \quad (24)$$

где $t_{ожі}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения i -ой работы, чел.-дн.;

t_{mini} – минимально возможная трудоемкость выполнения i -ой работы, чел.-дн.;

t_{maxi} – максимально возможная трудоемкость выполнения i -ой работы, чел.-дн.;

Продолжительность каждой работы в рабочих днях T_p , определяем учитывая ожидаемую трудоемкость. T_p учитывает параллельное выполнение работ несколькими исполнителями (руководитель и инженер).

$$T_{p_i} = \frac{t_{ожі}}{Ч_i} \quad (25)$$

где T_{p_i} – продолжительность одной работы, раб.-дн.;

$t_{ожі}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения одной работы, чел.-дн.;

$Ч_i$ – количество исполнителей, которые выполняют одновременно одну и ту же работу на определенном этапе, чел.

4.2.3 Разработка графика проведения научного исследования

График проведения научного исследования (диаграмма Ганта) – график, выполненный в виде протяженных по времени отрезков, представляющих выполняемые в проекте работы.

Такой способ построения является наиболее удобным и наглядным.

Отрезки откладываются на временной шкале, в соответствии со сроком, отведенным по проекту каждой задаче.

Для того чтобы построение графика было более удобным, длительность каждой выполняемой работы из рабочих дней переводится в календарные дни.

Чтобы перевести рабочие дни в календарные, необходимо использовать следующую формулу:

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k_{\text{кал}}, \quad (26)$$

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

T_{pi} – длительность выполнения i -й работы в рабочих днях;

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

Расчет коэффициента календарности на 2019 год осуществляется с помощью следующего выражения:

$$k_{\text{кал}} = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}}} = \frac{365}{365 - 66} = 1,22 \quad (27)$$

где $T_{\text{кал}}$ – календарные дни за год;

$T_{\text{вых}}$ – выходные дни за год;

$T_{\text{пр}}$ – праздничные дни за год.

В таблицу 10 вносим все рассчитанные по данным формулам значения.

Таблица 10 – Временные показатели проведения научного исследования

№ работ	Название работы	Трудоемкость работ						Длительность работ в рабочих днях T_{pi}		Длительность работ в календарных днях T_{ki}	
		t_{min} , чел.дн.		t_{max} , чел.-дн		$t_{\text{ож}}$, чел.-дн.					
		НР	МНС	НР	МНС	НР	МНС	НР	МНС	НР	МНС
1	Составление и утверждение технического задания	1	0	3	0	1,8	0	1,8	0	2	0
2	Подбор и изучение материалов по теме	0	12	0	14	0	12,8	0	12,8	0	16

Продолжение таблицы 10

№ работ	Название работы	Трудоемкость работ						Длительность работ в рабочих днях T_{pi}		Длительность работ в календарных днях T_{ki}	
		t_{min} , чел.дн.		t_{max} , чел.-дн		$t_{ож}$, чел.-дн.					
		НР	МНС	НР	МНС	НР	МНС	НР	МНС	НР	МНС
3	Выбор направления исследований	3	3	3	3	3	3	1,5	1,5	2	2
4	Календарное планирование работ по теме	3	0	4	0	3,4	0	3,4	0	4	0
5	Обзор литературы	1	15	2	17	1,4	15,8	0,7	7,9	1	10
6	Моделирование генерации РД	1	40	1	42	1	40,8	0,5	20,4	1	25
7	Описание экспериментальных исследований	13	10	15	13	13,8	11,2	6,9	5,6	9	7
8	Обработка и анализ полученных результатов	2	10	3	12	2,4	10,8	1,2	5,4	2	7
9	Составление пояснительной записки	2	10	3	12	2,4	10,8	1,2	5,4	2	7

Таблица 11 – Итоговая таблица

	Кол-во дней
Общее количество календарных дней для выполнения работы	82
Общее количество календарных дней, в течение которых работал младший научный сотрудник	74
Общее количество календарных дней, в течение которых работал руководитель	23

В соответствии с таблицей 10, построим график Ганта (таблица 12)

Таблица 12 – Календарный план-график проведения исследования

№ работы	Вид работы	Исполнители	Т _{кi} , кал. дн.	Продолжительность выполнения работ												
				февр		март			апрель			май				
				2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3		
1	Составление ТЗ	НР	2	■												
2	Изучение литературы	МНС	16	▨												
3	Выбор напр. исследований	НР	2													
		МНС	2		▨											
4	Календарное планирование	НР	4			■										
5	Обзор литературы	МНС	10			▨										
		НР	1			■										
6	Моделирование генерации РД	МНС	25				▨									
		НР	1				■									
7	Описание экспериментов	МНС	7							▨						
		НР	9							■						
8	Анализ результатов	МНС	7								▨					
		НР	2								■					
9	Составление пояснительной записки	МНС	7									▨				
		НР	2									■				

■ научный руководитель, ▨ младший научный сотрудник

Выполнение проекта нужно начать во второй декаде февраля и закончить в первой декаде мая 2019 года. Общее количество календарных дней, требующихся на выполнение работы, равно 82.

4.2.4 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)

Бюджет НТИ включает следующие статьи затрат:

- материальные затраты НТИ
- затраты на специальное оборудование;
- основная заработная плата исполнителей проекта;
- дополнительная заработная плата исполнителей проекта;
- отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления);
- накладные расходы.

4.2.4.1 Расчет материальных затрат НТИ

Данная статья включает стоимость всех материалов, используемых при разработке проекта.

Расчет материальных затрат осуществляется по следующей формуле:

$$Z_m = (1 + k_T) \cdot \sum_{i=1}^m C_i \cdot N_{расх\ i} \quad (28)$$

где m – количество видов материальных ресурсов, используемых при выполнении научного исследования;

k_T – коэффициент, учитывающий транспортно-заготовительные расходы;

C_i – цена приобретения единицы i -го вида приобретаемого материального ресурса;

$N_{расх\ i}$ – количество материального ресурса i -го вида, которое планируется для использования при выполнении научного исследования.

Результаты расчетов материальных затрат на моделирование генерации радиационных дефектов в металлах при облучении МИП представлены в таблице 13.

В ходе научно-технического исследования у приобретенных видов продукции не было остатков, следовательно, не нужно исключать стоимость возвратных отходов.

Таблица 13 – Материальные затраты

Наименование	Ед. измерения	Количество	Цена за ед., руб.	Затраты на материалы, (Зм), руб.
Листы бумаги формата А4	Упаковка, 200 листов	3	260	780
Ручка	шт	18	15	270
Прочие канцелярские принадлежности	-	-	-	2000
Итого				3238

Материальные расходы на выполнение НТИ составили 3238 рублей.

4.2.4.2 Расчет затрат на специальное оборудование

Данная статья включает затраты, связанные с приобретением оборудования, необходимого для проведения работ по теме. При приобретении спецоборудования необходимо учесть затраты по его доставке и монтажу в размере 15% от его цены.

Таблица 14 – Расчет затрат на приобретение спецоборудования

Наименование	Кол-во единиц оборудования	Цена единицы оборудования, тыс. руб.	Общая стоимость оборудования, тыс. руб.
Персональный компьютер	1	45	51,75

4.2.4.3 Основная заработная плата

Данный раздел посвящен расчету заработной платы младшего научного сотрудника и заработной платы научного руководителя.

Основная заработная плата состоит из оклада и премии, которая ежемесячно выплачивается в размере 20-30 % от оклада или тарифа.

Для руководителя и младшего научного сотрудника, непосредственно выполняющих проект, расчет основной заработной платы осуществляется по выражению:

$$Z_{зп} = Z_{осн} + Z_{доп}, \quad (29)$$

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

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

Для руководителя проекта производится расчет основной заработной платы по формуле:

$$Z_{осн} = Z_{дн} \cdot T_p \quad (30)$$

где $Z_{осн}$ – основная заработная плата одного работника;

T_p – продолжительность работ, которые выполняются работником, раб. дн. (таблица 11);

$Z_{дн}$ – средняя за день заработная плата работника, руб.

Расчет среднедневной заработной платы осуществляется следующим образом:

Для младшего научного сотрудника, работающего по шестидневной рабочей неделе:

$$Z_{\text{он}} = \frac{Z_m \cdot M}{F_{\text{д}}} = \frac{29004 \cdot 10,4}{299} = 1008,8 \text{ руб.}, \quad (31)$$

Для руководителя, работающего по шестидневной рабочей неделе:

$$Z_{\text{он}} = \frac{Z_m \cdot M}{F_{\text{д}}} = \frac{71760 \cdot 10,4}{299} = 2496 \text{ руб.},$$

где Z_m – должностной оклад работника за месяц, руб.:

Для руководителя:

$$Z_m = Z_{\text{мс}} \cdot (1 + k_{\text{пр}} + k_{\text{д}}) \cdot k_p = 36800 \cdot (1 + 0,3 + 0,2) \cdot 1,3 = 71760 \text{ руб.} \quad (32)$$

Для младшего научного сотрудника:

$$Z_m = Z_{\text{мс}} \cdot (1 + k_{\text{пр}} + k_{\text{д}}) \cdot k_p = 14874 \cdot (1 + 0,3 + 0,2) \cdot 1,3 = 29004 \text{ руб.}$$

где $Z_{\text{мс}}$ – заработная плата по тарифной ставке/оклад, руб.;

$k_{\text{пр}}$ – коэффициент на премии (0,3);

$k_{\text{д}}$ – коэффициент, учитывающий доплаты и надбавки (0,2);

k_p – районный коэффициент (для г. Томск принимается 1,3);

M – число рабочих месяцев (без отпуска) за год: для 6-дневной недели, при отпуске в 48 раб. дней – $M = 10,4$ месяца.

$F_{\text{д}}$ – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технических работников, раб. дн. (таблица 15).

$Z_{\text{мс}}$ определили в соответствии с должностными окладами ППС и НС, НИ ТПУ.

Таблица 15 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	МНС
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней - выходные дни - праздничные дни	66	66
Потери рабочего времени - отпуск - невыходы по болезни	0	0
Действительный годовой фонд рабочего времени	299	299

Таблица 16 – Расчет основной заработной платы

Исполнители	$Z_{тс},$ руб.	$k_{пр}$	$k_{д}$	$k_{р}$	$Z_{м},$ руб.	$Z_{дн},$ руб.	$T_{р},$ раб.дн.	$Z_{осн},$ руб.
Руководитель	36800	0,3	0,2	1,3	71760	2496	23	57408
Младший научный сотрудник	14874	0,3	0,2	1,3	29004	1008,8	74	74651
Итого								132059

4.2.4.4 Дополнительная заработная плата исполнительской темы

Дополнительная заработная плата исполнителей проекта учитывает величину доплат (в соответствии с Трудовым кодексом РФ) за отклонение условий труда от нормальных и величину выплат, обеспечивающих гарантии и компенсации.

Рассчитываем дополнительную заработную плату:

$$\text{Руководитель: } Z_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} \cdot Z_{\text{осн}} = 0,12 \cdot 57408 = 6889 (\text{руб.}), \quad (33)$$

$$\text{Младший научный сотрудник: } Z_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} \cdot Z_{\text{осн}} = 0,12 \cdot 74651 = 8958 (\text{руб.}),$$

где $k_{\text{доп}}$ – коэффициент, учитывающий дополнительную заработную плату (равен 0,12).

4.2.4.5 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

В данной статье расходов отражаются обязательные отчисления по установленным законодательством Российской Федерации нормам органам

государственного социального страхования (ФСС), пенсионного фонда (ПФ) и медицинского страхования (ФФОМС) от затрат на оплату труда работников.

Расчет отчислений производится по формуле:

$$Z_{внеб} = k_{внеб} \cdot (Z_{осн} + Z_{доп}) \quad (34)$$

где $k_{внеб}$ – коэффициент, учитывающий отчисления для уплаты в внебюджетные фонды.

Общая ставка взносов принимается равной 30 %, основываясь на ст.425, 426 НК РФ.

Таблица 17 – Отчисления во внебюджетные фонды

Исполнитель	$Z_{осн}$, руб.	$Z_{доп}$, руб.	$k_{внеб}$	$Z_{внеб}$
Руководитель	57408	6889	0,30	19289,1
МНС	74651	8958	0,30	25082,7
Итого	132059	15847	0,30	44372

4.2.4.6 Накладные расходы

В накладные расходы должны быть включены те затраты организации, которые не попали в предыдущие статьи расходов: оплата электроэнергии, услуг связи, размножение материалов, печать и ксерокопирование материалов и т.д.

Расчет накладных расходов производится по формуле:

$$Z_{накл} = (Z_{м} + Z_{осн} + Z_{доп} + Z_{внеб} + Z_{а}) \cdot k_{нр} \quad (35)$$

$$Z_{накл} = (Z_{м} + Z_{об} + Z_{осн} + Z_{доп} + Z_{внеб}) \cdot k_{нр} = (3238 + 51750 + 132059 + 15847 + 44372) \cdot 0,16 = 39563 \text{ (руб)}$$

где $k_{нр}$ – коэффициент для учета накладных расходов (значение $k_{нр}$ принимаем равным 16%).

4.2.4.7 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

Основой при формировании бюджета затрат проекта является значение ранее вычисленных затрат научно-исследовательской работы.

Таблица 18 – Бюджет затрат НТИ

Наименование статьи	Сумма, руб.	Доля, %	Примечание
1. Материальные затраты НТИ	3238	1,1	4.2.4.1
2. Затраты на спецоборудование	51750	18	4.2.4.2
3. Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	132059	46,1	4.2.4.3
4. Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	15847	5,5	4.2.4.4
5. Отчисления во внебюджетные фонды	44372	15,5	4.2.4.5
6. Накладные расходы	39563	13,8	4.2.4.6
Бюджет затрат НТИ	286829	100	4.2.4.7

Из данных таблицы видим, итоговый расход на проектирование равен 287 тыс. руб. Большой процент затрат (46,1%) пришелся на затраты по основной заработной плате исполнителей проекта, следующими по величине стали затраты на спецоборудование (18%), далее отчисления во внебюджетные фонды (15,5%) и накладные расходы (13,8%). Дополнительная заработная плата исполнителей проекта составляет (5,5%) от общего количества затрат. Минимальное количество затрат пришлось на материальные затраты (1,1%).

4.3 Определение ресурсосберегающей и финансовой 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 по формуле:

$$\Gamma_{\text{финр}}^{\text{исп } i} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\text{max}}}, \quad (36)$$

где $\Gamma_{\text{финр}}^{\text{исп } i}$ – интегральный финансовый показатель разработки;

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

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

Интегральные показатели будем рассчитывать для двух методов исследования радиационной стойкости металлов: численное моделирование и тепловизионная диагностика.

За Φ_{\max} принимаем стоимость исследования радиационной стойкости металлов с помощью тепловизионной диагностики. За Φ_{pi} принимаем стоимость численного моделирования.

Рассчитанные интегральные финансовые показатели для различных исполнений:

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп 1}} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\max}} = \frac{286829}{329055} = 0,87$$

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп 2}} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\max}} = \frac{329055}{329055} = 1$$

Полученная величина интегрального финансового показателя проекта отражает численное удешевление стоимости разработки в разгах (значение меньше единицы, но больше нуля).

То есть можно сделать вывод, что исследовать радиационную стойкость металлов методом численного моделирования более выгодно с точки зрения финансовой составляющей, чем проводить подобные исследования с помощью тепловизионной диагностики.

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

$$I_{pi} = \sum a_i \cdot b_i, \quad (37)$$

где I_{pi} – интегральный показатель ресурсоэффективности;

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.

В таблице 19 представлен расчет интегрального показателя ресурсоэффективности.

Таблица 19 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения

Критерии оценки	Весовой коэффициент параметра	Исп. 1 (ЧМ)	Исп. 2 (ТД)
1. Удобство в эксплуатации	0,25	5	3
2. Энергоэкономичность	0,25	5	4
3. Надежность работы	0,20	4	5
4. Временные затраты	0,30	5	3
Итого:	1	4,8	3,65

Для разрабатываемого проекта, значение интегрального показателя ресурсоэффективности равно:

$$I_{p-исп1} = 0,25 \cdot 5 + 0,25 \cdot 5 + 0,2 \cdot 4 + 0,3 \cdot 5 = 4,8$$

$$I_{p-исп2} = 0,25 \cdot 3 + 0,25 \cdot 4 + 0,2 \cdot 5 + 0,3 \cdot 3 = 3,65$$

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

$$I_{исп1} = \frac{I_{p-исп1}}{I_{финр}^{исп1}} = \frac{4,8}{0,87} = 5,52 \quad (38)$$

$$I_{исп2} = \frac{I_{p-исп2}}{I_{финр}^{исп2}} = \frac{3,65}{1} = 3,65$$

Сравнение интегрального показателя эффективности вариантов исполнения разработки позволит определить сравнительную эффективность проекта (таблица 20) и выбрать наиболее целесообразный вариант из предложенных.

Сравнительная эффективность проекта (\mathcal{E}_{cp}):

$$\mathcal{E}_{cp} = \frac{I_{исп1}}{I_{исп2}} = \frac{5,52}{3,65} = 1,5 \quad (39)$$

Таблица 20 – Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Исп. 1	Исп. 2
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,87	1
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,8	3,65
3	Интегральный показатель эффективности	5,52	3,65
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1,5	

По результатам оценки ресурсоэффективности разрабатываемого проекта было получено значение показателя сравнительной эффективности проекта 1,5, которое говорит о том, что реализация научного исследования целесообразна.

По результатам раздела можно сделать вывод, что цель раздела была достигнута с помощью поэтапного решения задач:

1) Проведен анализ конкурентных технических решений. Итогом анализа стал выбор моделирования для исследования радиационной стойкости конструкционных материалов; Более высокие показатели численного моделирования в сравнении с тепловизионной диагностикой, обеспечиваются тем, что тепловизионная диагностика требует использования сложного оборудования, требует участия высококвалифицированных сотрудников, больших временных и материальных затрат, в сравнении с численным моделированием процессов;

2) Следующим этапом было проведение QuaD-технологии и SWOT-анализа для исследования внешней и внутренней среды проекта. Оценив факторы, влияющие на проект, был сделан вывод о целесообразности осуществления проекта;

3) На этапе планирования был построен план-график выполнения этапов работ для руководителя и младшего научного сотрудника. С помощью графика, в календарных днях, было определено: общее количество дней необходимых для выполнения работы – 82 дня, количество рабочих дней младшего научного сотрудника – 74 и количество рабочих дней руководителя проекта - 23;

4) Был рассчитан бюджет научно-технического исследования. Из расчета видно, что на реализацию проекта необходимы затраты в размере 287 тыс. руб.;

5) Последним этапом было определение и оценка эффективности исследования. Значение показателя сравнительной эффективности проекта больше единицы, что указывает на эффективность реализации данного проекта.

По итогам раздела было установлено, что проект отвечает необходимым требованиям в области ресурсоэффективности. Является конкурентоспособным и привлекательным с экономической точки зрения.

5 СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ

Цель выпускной квалификационной работы моделирование генерации радиационных дефектов в металлах при облучении мощным ионным пучком. Разработка научных основ нового (имитационного) метода исследования радиационной стойкости конструкционных материалов, используемых в ядерном реакторе на быстрых нейтронах.

Численное моделирование быстрых радиационных процессов применяется в научных лабораториях и исследовательских институтах и позволяет получить необходимые теоретические сведения для проведения экспериментов по повышению радиационной стойкости конструкционных материалов (металлов), которые в дальнейшем могут быть использованы в космической и атомной промышленности.

Моделирование осуществлялось на персональном компьютере (ПК). Рабочая зона – аудитория 227-1, 11-го корпуса НИ ТПУ, оборудованная системами отопления, пожарной и охранной сигнализации. В аудитории имеются источники естественного и искусственного освещения. Рабочее место – стационарное, оборудованное ПК.

5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

К нормативным актам, регулирующим вопросы охраны труда, в первую очередь относится Трудовой кодекс Российской Федерации [60].

Обязанности по обеспечению безопасных условий и охраны труда возлагаются на работодателя (статья 212 «Трудового кодекса Российской Федерации» от 30.12.2001 № 197-ФЗ (ред. от 01.04.2019)) [61].

Нормативная продолжительность рабочего времени согласно статье 91 Трудового кодекса РФ [60] не может превышать 40 часов в неделю.

Согласно статье 111 Трудового кодекса РФ [60] работникам необходимо предоставить один выходной день при шестидневном рабочем графике.

В соответствии с Приложением 7, СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 [62] виды трудовой деятельности разделяются на 3 группы: группа А - работа по считыванию информации с экрана ВДТ (видеодисплейный терминал) с предварительным запросом; группа Б - работа по вводу информации; группа В - творческая работа в режиме диалога с ПЭВМ.

При выполнении в течение рабочей смены работ, относящихся к разным видам трудовой деятельности, за основную работу с ПЭВМ следует принимать такую, которая занимает не менее 50% времени в течение рабочей смены или рабочего дня.

Таблица 21 – Суммарное время регламентированных перерывов в зависимости от продолжительности работы, вида и категории трудовой деятельности с ПЭВМ [62]

Категория работы с ПЭВМ	Уровень нагрузки за рабочую смену при видах работ с ПЭВМ			Суммарное время регламентированных перерывов, мин	
	группа А, количество знаков	группа Б, количество знаков	группа В, ч	при 8-часовой смене	при 12-часовой смене
I	до 20 000	до 15 000	до 2	50	80
II	до 40 000	до 30 000	до 4	70	110
III	до 60 000	до 40 000	до 6	90	140

Согласно ГОСТ 12.2.032-78 [63] конструкция рабочего места и взаимное расположение всех его элементов (сиденье, органы управления, средства отображения информации и т.д.) должны соответствовать антропометрическим, физиологическим и психологическим требованиям, а также характеру работы.

Общие требования к организации рабочих мест пользователей ПЭВМ приведены в СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 [62].

Экран видеомонитора должен находиться от глаз пользователя на расстоянии 600-700 мм, но не ближе 500 мм с учетом размеров алфавитно-цифровых знаков и символов.

Клавиатуру следует располагать на поверхности стола на расстоянии 100-300 мм от края, обращенного к пользователю, или на специальной, регулируемой по высоте рабочей поверхности, отделенной от основной столешницы.

Поверхность рабочего стола должна иметь коэффициент отражения 0,5-0,7. Высота рабочей поверхности стола для взрослых пользователей должна регулироваться в пределах 680-800 мм.

Конструкция рабочего стула (кресла) должна обеспечивать поддержание рациональной рабочей позы при работе на ПЭВМ. Поверхность сиденья, спинки и других элементов стула (кресла) должна быть полумягкой, с нескользящим, слабо электризующимся и воздухопроницаемым покрытием, обеспечивающим легкую очистку от загрязнений.

5.2 Производственная безопасность

В данном разделе рассматривается рабочая зона – аудитория 227-1, находящаяся в 11 корпусе ТПУ.

В аудитории расположено: 6 ПК, система охраны и сигнализации, маршрутизатор локальной сети (LAN), розетки и проводка сети АС 220 В, освещение.

Составим обобщающую таблицу «Возможные опасные и вредные факторы» (таблица 22), которая необходима для целостного представления обо всех характерных для рабочего места вредных и опасных факторах, связи их с запроектированными видами работ.

Для идентификации потенциальных опасных и вредных факторов используем ГОСТ 12.0.003-2015 «Опасные и вредные производственные факторы. Классификация» [64].

Таблица 22 – Возможные опасные и вредные факторы [64]

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015)	Этапы работ			Нормативные документы
	Разработка модели	Изготовление	Эксплуатация	
1. Отклонение показателей микроклимата	+	+	+	СанПиН 2.2.4.548–96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений [65]
2. Повышенный уровень шума на рабочем месте	+	+	+	ГОСТ 12.1.003–2014 ССБТ. Шум. Общие требования безопасности [67] ГОСТ 12.1.029-80 ССБТ. Средства и методы защиты от шума. Классификация[69]
3. Недостаточная освещенность рабочей зоны	+	+	+	СП 52.13330.2016 Естественное и искусственное освещение. Актуализированная редакция СНиП 23-05-95* [70]
4. Повышенный уровень электромагнитных излучений	+	+	+	ГОСТ 12.1.006-84 ССБТ. Электромагнитные поля радиочастот. Общие требования безопасности.
5. Повышенное значение напряжения в электрической цепи, замыкание которой может произойти через тело человека	+	+	+	Правила устройств электроустановок - 7-е изд. - М.: Энергоатомиздат, 2001-640с. [71]

5.2.1 Анализ вредных и опасных факторов производственной среды

Отклонение показателей микроклимата

Высокая температура воздуха способствует быстрой утомляемости работающего, может привести к перегреву организма, тепловому удару. Низкая температура воздуха может вызвать местное или общее охлаждение организма, стать причиной простудного заболевания либо обморожения. Высокая относительная влажность при высокой температуре воздуха способствует перегреванию организма, при низкой же температуре увеличивается теплоотдача с поверхности кожи, что ведет к переохлаждению.

Санитарные нормы устанавливают оптимальные и допустимые метеорологические условия в рабочей зоне помещения, в соответствии с

«СанПиН 2.2.4.548–96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений» [65].

Таблица 23 – Оптимальные величины показателей микроклимата [65]

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

* К категории Ia относятся работы с интенсивностью энергозатрат до 120 ккал/ч (до 139 Вт), производимые сидя и сопровождающиеся незначительным физическим напряжением

Таблица 24 – Допустимые величины показателей микроклимата [65]

Период года	Категория работ по уровню энергозатрат, Вт	Температура воздуха, °С	Относительная влажность воздуха, %	Скорость движения воздуха, м/с
Холодный	Ia (до 139)	20,0-25,0	15-75	0,1
Теплый	Ia (до 139)	21,0-28,0	15-75	0,1-0,2

Таблица 25 – Допустимые величины интенсивности теплового облучения поверхности тел работающих от производственных источников [65]

Облучаемая поверхность тела, %	Интенсивность теплового облучения, Вт/м ² , не более
50 и более	35
25-50	70
Не более 25	100

При наличии теплового облучения работающих температура воздуха на рабочих местах не должна превышать 25°С - при категории работ Ia [65].

В целях профилактики неблагоприятного воздействия микроклимата используется: механизация и автоматизация технологических процессов; устройство систем вентиляции, системы местного кондиционирования воздуха и отопления; установка регламента времени работы [66].

Повышенный уровень шума на рабочем месте

Источником возникновения шума в аудитории 227-1 являются 6 ПК (процессор, охлаждение внутри системного блока, оптические приводы, DVD-ROM).

Длительное воздействие повышенного шума на рабочем месте способно привести к развитию у работника потери слуха, увеличению риска артериальной гипертензии, болезней сердечно-сосудистой, нервной системы и др. [67].

Таблица 26 – Допустимые значения уровней звукового давления в октавных полосах частот и уровня звука, создаваемого ПЭВМ [68]

Вид трудовой деятельности, рабочие места	Уровни звукового давления, дБ, в октавных полосах со среднегеометрическими частотами, Гц									Уровни звука и эквивалентные уровни звука, дБ
	31,5	63	125	250	500	1000	2000	4000	8000	
Творческая деятельность, руководящая работа с повышенными требованиями, научная деятельность, конструирование и программирование	86	71	61	54	49	45	42	40	38	50

Уровень шума блока питания компьютера составляет примерно 5–10 дБА, уровень шума охлаждающего устройства процессора 15–20 дБА, а остальные элементы охлаждения имеют незначительный уровень шума, поэтому их можно не учитывать.

Для защиты от шума согласно «ГОСТ 12.1.029-80 ССБТ. Средства и методы защиты от шума. Классификация» [69] применяется рациональное размещение оборудования.

Недостаточная освещенность рабочей зоны

В аудитории 227-1 предусматривается естественное (окно) и искусственное освещение.

Неудовлетворительное в количественном или качественном отношении освещение не только утомляет зрение, но и вызывает утомление организма в целом. Нерационально организованное освещение может, кроме того явиться причиной травматизма. Вредной для человека является как недостаточная освещенность, так и чрезмерная.

Общее освещение при использовании люминесцентных светильников следует выполнять в виде сплошных или прерывистых линий светильников, расположенных сбоку от рабочих мест, параллельно линии зрения пользователя при рядном расположении видеодисплейных терминалов [62].

СП 52.13330.2016 Естественное и искусственное освещение. Актуализированная редакция СНиП 23-05-95* [70] – определяет нормы освещенности.

Таблица 27 – Нормативные показатели освещения основных помещений общественных, жилых и вспомогательных зданий [70]

Плоскость (Г-горизонтальная, В-вертикальная) нормирования освещенности и КЕО	Разряд и подразряд зрительно й работы	Искусственное освещение		Естественное освещение		Совмещенное освещение	
		Освещенность, лк		КЕО* e_n , %			
		при системе комбинированного освещения	при системе общего освещения	при верхнем или комбинированном освещении	при боковом освещении	при верхнем или комбинированном освещении	при боковом освещении
В-1,2 – на экране дисплея	Б-2	-	200	-	-	-	-
Г-0,8 – на рабочих столах	А-2	500/300	400	3,5	1,2	2,1	0,7

Таблица 28 – Требования к освещению на рабочих местах, оборудованных ПЭВМ [62]

Освещенность на рабочем столе:	300-500 лк
Освещенность на экране ПЭВМ:	не выше 300лк
Блики на экране:	не выше 40 кд/м ²
Прямая блескость источника света:	200 кд/м ²
Показатель ослепленности:	не более 20
Показатель дискомфорта:	не более 15
Отношение яркости	
- между рабочими поверхностями:	3:1-5:1
- между поверхностями стен и оборудования:	10:1
Коэффициент пульсации:	не более 5%.

Рабочее место соответствует нормам, кратко обозначенным в таблице 6.

Для обеспечения нормируемых значений освещенности в помещениях с ПЭВМ следует проводить чистку стекол оконных рам и светильников не реже двух раз в год и проводить своевременную замену перегоревших ламп.

Повышенный уровень электромагнитных излучений

В аудитории 227-1 расположено: 6 ПК, система охраны и сигнализации, маршрутизатор локальной сети (LAN), розетки и проводка сети АС 220 В, освещение

Источники ЭМ полей (излучения): 1. Монитор персонального компьютера; 2. Системный блок ПК; 3. Электрооборудование (сетевые фильтры, люминесцентные лампы, проводка, розетки, выключатели, система охраны и сигнализации); 4. Различные периферийные устройства (клавиатура, мышь); 5. Соседние ПК.

Мероприятия по снижению электромагнитного излучения:

1. Заземление аппаратуры;
2. Оптимальная расстановка рабочих мест;
3. Удаленность расположения электрооборудования;
4. Использование ЖК-экранов, на которых не образуется статического потенциала;
5. Экранирование электроники корпусом. Для снижения влияния внешних излучений и для снижения выхода собственных излучений во внешнюю среду;
6. Использование сетевых фильтров, для снижения влияния кондуктивных помех (которые передаются по проводам);
7. Гальваническая развязка (система питания компонентов соединена звездой).

Система охраны получает питание постоянным током 10-25 В. Световая и звуковая сигнализация 12 В. Как источником помех ими можно пренебречь.

Временные допустимые уровни ЭМП, создаваемых ПЭВМ приведены в таблице 29.

Таблица 29 – Временные допустимые уровни ЭМП, создаваемых ЭВМ [62]

Наименование параметров		ВДУ ЭМП
Напряженность 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

Организационные мероприятия: выбор рациональных режимов работы оборудования, соблюдение правил безопасной эксплуатации источников ЭМП, ограничение места и времени нахождения персонала в зоне воздействия ЭМП.

Повышенное значение напряжения в электрической цепи, замыкание которой может произойти через тело человека

Основными причинами воздействия тока на человека являются: появление напряжения на металлических частях оборудования в результате повреждения изоляции, ошибочно поданное напряжение на рабочее место; отсутствие заземления, замыкание в результате аварии.

Электрический ток, протекая через тело человека, производит термическое, электролитическое, биологическое, механическое действие. Термическое действие характеризуется нагревом кожи, тканей вплоть до ожогов. Электролитическое действие заключается в разложении жидкостей, в изменении их состава и свойств. Биологическое действие проявляется в нарушении биологических процессов, протекающих в организме человека. Механическое действие приводит к разрыву тканей в результате электродинамического эффекта [66].

Электрические установки, к которым относятся ЭВМ, представляют для человека большую потенциальную опасность. В процессе эксплуатации или при проведении профилактических работ человек может коснуться частей, находящихся под напряжением.

Согласно классификации помещений по опасности поражения электрическим током ВКР разрабатывался в помещении без повышенной

опасности (ПУЭ) [71], характеризующимся наличием следующих условий: напряжение питающей сети 220 В, частота 50 Гц; относительная влажность воздуха не более 75 %; средняя температура не более 35 °С.

При нормальном режиме работы оборудования опасность электропоражения невелика, однако, возможны режимы, называемые аварийными, когда происходит случайное электрическое соединение частей оборудования, находящихся под напряжением с заземленными конструкциями.

Основными техническими способами и средствами защиты от поражения электрическим током являются: защитное зануление; выравнивание потенциалов; защитное заземление; электрическое разделение сети; изоляция токоведущих частей; оградительные устройства и другое.

К средствам защиты от повышенного уровня статического электричества относятся: заземляющие устройства; нейтрализаторы; увлажняющие устройства; антиэлектростатические вещества.

5.2.2 Обоснование мероприятий по снижению уровней воздействия вредных и опасных факторов на исследователя

Рабочая зона – аудитория 227-1, 11-го корпуса ОМ ИШНПТ ТПУ, оборудованная системами отопления, пожарной и охранной сигнализации. В аудитории имеются источники естественного и искусственного освещения. Рабочее место – стационарное, оборудованное ПК.

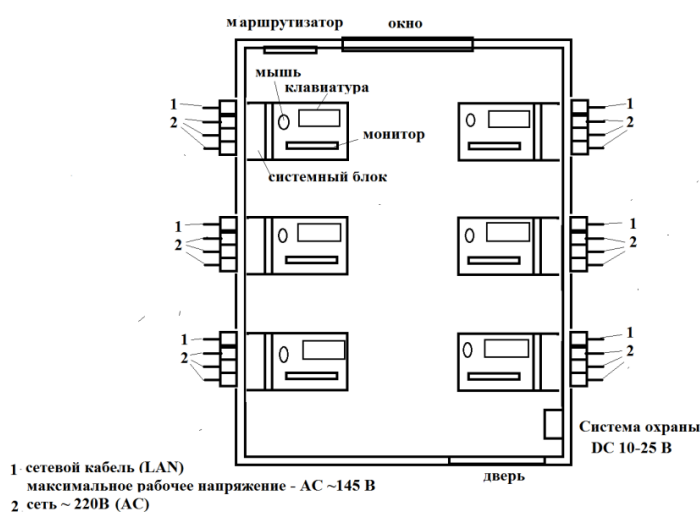


Рисунок 19 – План аудитории 227-1

Для поддержания нормальных параметров микроклимата в рабочей зоне применяются следующие основные мероприятия: устройство систем вентиляции; кондиционирование воздуха и отопление. Кроме того, большое значение имеет правильная организация труда и отдыха работников.

Нормируемые уровни шума обеспечиваются путем использования малошумного оборудования, применением звукопоглощающих материалов (например, пластмассы), рациональным размещением оборудования, проведением периодического контроля шума на рабочих местах.

Для обеспечения нормируемых значений освещенности в помещениях с ПЭВМ проводится чистка стекол, оконных рам и светильников не реже двух раз в год и проводится своевременная замена перегоревших ламп. Рабочий стол рекомендуется устанавливать таким образом, чтобы световой поток был направлен слева от работника.

5.3 Экологическая безопасность

Влияние объекта исследования на окружающую среду

Каждый ПК содержит не только ценные цветные металлы, но и целый набор опасных для окружающей среды веществ. Это производные газов, тяжелые металлы, среди которых кадмий, ртуть и свинец. Попадая на свалку, все эти вещества под воздействием внешней среды постепенно проникают в почву, отравляют воздух и воду.

Также в процессе утилизации из техники извлекаются и материалы, которые могут быть использованы для вторичной переработки.

Техника, подвергающаяся процессу утилизации, проходит специальную процедуру: непосредственный процесс переработки; отправку некоторых частей оргтехники на аффинаж (это металлургический процесс изъятия высокочистых благородных металлов при отделении от них загрязняющих примесей, один из видов извлечения металлов). Полную процедуру утилизации офисной техники могут осуществлять только специализированные зарегистрированные предприятия.

Отходы, содержащие в себе части цветных металлов, относятся к категории металлолома и попадают под соответствующий регламент ГОСТ Р 54565-2011 [72].

ЖК-экраны один из источников парниковых газов, которые намного вреднее диоксида углерода.

К воздействию на литосферу можно отнести и образование отходов в виде использованной бумаги. Бумага используется в процессе проведения всей научной работы и требуется в больших количествах. После использования, бумага выносится в специальные контейнеры, предназначенные для сбора макулатуры на переработку для вторичного использования. Вторсырье, находящееся в специальных контейнерах отвозится на склад компании, на складе весь собранный материал преобразовывается: сортируется по типу и цвету, измельчается и превращается в полуфабрикат. Утилизируется бумага на специальных предприятиях, которые занимаются переработкой макулатуры.

Методы обеспечения экологической безопасности: совершенствование технологических процессов и разработка новой техники с меньшим уровнем негативного воздействия на окружающую среду; вовлечение образовавшихся отходов во вторичное производство.

5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

Наиболее вероятная ЧС: пожар.

Вопросы обеспечения пожарной безопасности производственных зданий и сооружений имеют большое значение и регламентируются специальными государственными постановлениями и указами ГОСТ 12.1.004-91 Система стандартов безопасности труда «Пожарная безопасность. Общие требования» (ред. от 12.09.2018) [73].

В соответствии с «НПБ 105-03. Определение категорий помещений, зданий и наружных установок по взрывопожарной и пожарной опасности» аудитория 227-1, 11го корпуса ТПУ относится к категории «В4», так как в

аудитории находятся твердые горючие и трудногорючие вещества и материалы [74].

Источниками возникновения пожара могут быть электрические схемы от ЭВМ, устройства электропитания, кондиционирования воздуха. В данных объектах по некоторым причинам (снижение сопротивления изоляции, ослабление контактов, перегрузка сетей, короткое замыкание) возникает перегрев элементов, что приводит к появлению искр и возгоранию.

Горючие компоненты в помещении – строительные материалы для акустической и эстетической отделки помещений, перегородки, двери, полы, перфокарты и перфоленты, изоляция кабелей и др.

Пожарная безопасность обеспечивается системой предотвращения пожара и системой пожарной защиты. В рабочей зоне размещены таблички с указанием номера телефона вызова пожарной охраны, кроме того, размещен схематичный план эвакуации людей при пожаре; дополнительно разработана инструкция, определяющая действия персонала в случае возникновения очага возгорания.

На рисунке 20 приведен план эвакуации людей в случае возникновения ЧС. Работы проводятся в аудитории 227.



Рисунок 20 – План эвакуации для 2 этажа 11 корпуса ТПУ

В аудитории находится памятка о соблюдении правил пожарной безопасности.

В целях обеспечения пожарной безопасности ЗАПРЕЩЕНО: курить; пользоваться неисправными электронагревательными приборами; использовать временную электропроводку и/или удлинители для питания электроприборов; перегружать электрическую сеть; скручивать, завязывать электрические провода; накрывать горючими материалами включенные электрические лампы; закрывать датчики пожарной сигнализации посторонними предметами. Нельзя загромождать пути эвакуации.

Необходимо знать: порядок эвакуации; место нахождения первичных средств пожаротушения.

Помещение оснащено первичными средствами пожаротушения: огнетушители и системой пожарной сигнализации.

В случае пожара звонить по телефону 01, 101, 112: назвать точный адрес; оповестить всех о случившемся; организовать эвакуацию граждан, документов и материальных ценностей; принять меры к ликвидации пожара.

В случае возникновения пожара, необходимо предпринять следующие меры: обесточить помещение, вызвать службу пожарной охраны. Если горит электроприбор (ПК) – накрыть его асбестовым одеялом или другим плотным материалом и дождаться прекращения горения из-за отсутствия доступа кислорода. Затем воспользоваться порошковым огнетушителем.

Вывод по разделу

Проанализировав условия труда на рабочем месте, где была разработана магистерская диссертация, можно сделать вывод, что компьютерный класс удовлетворяет необходимым нормам и в случае соблюдения техники безопасности и правил пользования компьютером работа в данном помещении не приведет к ухудшению здоровья работника.

Само помещение и рабочее место в нем удовлетворяет всем нормативным требованиям. Кроме того, действие вредных и опасных факторов сведено к минимуму. Деятельность, осуществляемая в помещении, не представляет опасности окружающей среде.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Было произведено моделирование генерации радиационных дефектов в металлах с помощью программ NRT, LAMMPS и SRIM для энергий 10-300 кэВ.

Таблица 30 – Количество дефектов, образующихся на один налетающий ион

Материал мишени	Потери энергии		Количество дефектов в каскаде			
	Возбуждение электронной подсистемы	Фононы	N_{SRIM}	$N_{ПВА}$	N_{cor}	N_{exp}
Ti	84%	12%	657	2050 (-80%)	4600 (+24%)	3704
Fe	81%	16%	684	2110 (-23%)	3462 (+33%)	2594
Zn	77%	19%	1111	3090	4500	
Латунь	77%	19%		3346 (-0,5%)	4768 (+42%)	3360
Cu	78%	19%	1198	3490 (+3%)	4918 (+46%)	3380

В таблице 30 в скобках указано отклонение расчетных значений количества дефектов в каскаде от экспериментальных значений.

Результаты, полученные в программе NRT, оказались приближены к экспериментальным данным, так как расчет был выполнен по экспериментальным значениям энергии, поглощенной в мишени при облучении.

Количество дефектов, рассчитанное с помощью программы SRIM в 2,5-5 раз меньше, чем количество дефектов полученное экспериментально. Это свидетельствует о высокой концентрации ускоренных нейтралов в МИП, формируемом фокусирующим диодом с металлической сеткой на катоде.

Количество дефектов, полученное при моделировании методом первично выбитого атома, приближено к количеству дефектов, которое получено экспериментально. Для мишеней из меди и латуни расчетные и экспериментальные значения оказались очень близки, а для мишеней из других металлов данные оказались занижены.

Результаты моделирования по программе SRIM можно использовать для оценки количества радиационных дефектов в каскаде атома углерода. При этом энергию, которую теряет ион при возбуждении электронной подсистемы, необходимо учитывать на формирование дефектов. Выполненные расчеты показали завышенные данные для всех мишеней на 25-46%.

При моделировании в программах LAMMPS и SRIM получилось, что количество радиационных дефектов в мишени из нержавеющей стали меньше, чем количество дефектов в латунной и медной мишенях. Это соответствует экспериментальным данным. Но в случае с мишенью из титана получается расхождение с экспериментом. Так, по результатам моделирования количество дефектов в титановой мишени значительно больше, чем количество дефектов в мишенях из других металлов. Такое расхождение отмечено в ряде статей [22, 57] и может быть связано с высокой подвижностью дефектов.

Проведенные исследования показали, что радиационные дефекты можно разделить на быстрые и медленные дефекты. Быстрые дефекты аннигилируют в течение 0,1 с после облучения. Медленные дефекты мигрируют в мишени и далее аннигилируют в течение десятков секунд или формируют кластеры.

Моделирование в программе SRIM показало, что наибольшее количество радиационных дефектов в каскаде иона C^+ образуется в медной мишени, а наименьшее в титановой. Это соответствует данным эксперимента для быстрых радиационных дефектов.

А по результатам моделирования в LAMMPS было получено что наибольшее количество радиационных дефектов в каскаде иона C^+ образуется в медной мишени, а наименьшее в мишени из железа. Количество дефектов в каскаде для титановой мишени превышает количество дефектов в железной мишени, это соответствует данным эксперимента для медленных радиационных дефектов.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ СТУДЕНТА

1. A. Prima, R. Zyryanova, L. Ding, Q. Zhang, Q.L. Han, C.C. Zhang. Influence of radiation defects on the error of thermal imaging diagnostics of high-power ion beams // 6th International Congress on Energy Fluxes and Radiation Effects (EFRE 2018): Abstracts. — Tomsk: Publishing House of IAO SB RAS, 2018.

2. Прима А.И., Р.В. Зырянова, Ф.Т. Бакиев. Моделирование формирования радиационных дефектов в металлах при облучении ионами углерода // XVI Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Перспективы развития фундаментальных наук» 23 – 26 апреля 2019 г.

3. А. Прима, Р. Зырянова, Н. Передей, В. Медведский Определение количества радиационных дефектов в конструкционных материалах при облучении тяжелыми ионами углерода // 24th International Conference on Ion-Surface Interactions (Москва) 19-23 августа 2019 г.

4. Прима А., Пушкарев А., Зырянова Р., Передей Н., Медведский В. Исследование концентрации радиационных дефектов, формируемых ионным пучком в металлах // II Международный научный форум «Ядерная наука и технологии». Алматы, Казахстан 24-27 июня 2019 года

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. M. Aziz, M.O. Shaker, A. Aboanber, E. Massoud, and M. Slama. Probability density function of the energy spectrum of fission neutrons // Journal of Nuclear and Radiation Physics. Vol. 6. No. 1&2. pp. 31-41
2. C. Abromeit Aspects of simulation of neutron damage by ion irradiation // Journal of Nuclear Materials 216 (1994) 78-96.
3. Грибков В.А., Григорьев Ф.И., Калинин Б.А., Якушин В.И. Перспективные радиационно-пучковые технологии обработки материалов. М.: Круглый год, 2001. 528 с.
4. Трушин Ю. В. Физическое материаловедение. — СПб.: Наука, 2000. —286 с.
5. R. Smith, M. Jakas, D. Ashworth, B. Owen, M. Bowyer, I. Chakarov, R. Webb. Atomic and ion collisions in solids and surfaces. Theory, simulation and application. Cambridge University Press, 2005. 309 p.
6. Pushkarev A.I., Isakova Y.I., Khaylov I.P. Experimental evidence of energetic neutrals production in an ion diode // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms (2015) Vol. 343 p. 138–145.
7. C. Freysoldt, B. Grabowski, T. Hickel, J. Neugebauer, G. Kresse, A. Janotti, C. Van de Walle. First-principles calculations for point defects in solids // Reviews of modern physics, 2014, Vol. 86, p. 253-305.
8. J. Marian, B.D. Wirth, J.M. Perlado, G.R. Odette, T. Diaz de la Rubia. Dynamics of self-interstitial migration in Fe-Cu alloys // Physical Review B, 2001, Vol. 64, 094303
9. C. J. Ortiz and M. J. Caturla Simulation of defect evolution in irradiated materials: Role of intracascade clustering and correlated recombination // Physical Review B 75, 184101 (2007)
10. B. S. Cao, M. K. Lei. Nonlinear diffusion of interstitial atoms // Physical Review B 76, 212301 (2007).

11. Тупицына А.И. Методы компьютерного моделирования физических процессов и сложных систем. Учебное пособие– СПб: Университет ИТМО, 2014. – 48 с.
12. Радиационно-пучковые технологии модифицирования [электронный ресурс] – Режим доступа: <http://metal-archive.ru/tehnologiya-bystrozakalennyh-splavov/2787-radiacionno-puchkovye-tehnologii-modificirovaniya.html>, свободный (10.11.2018).
13. Пушкарев А.И., Исакова Ю.И. Диагностика мощных ионных пучков: – Монография. – Новосибирск: Издательство «Ассоциация научных сотрудников СибАК», 2016. – 126 с. ISBN 978-5-4379-0477-0
14. Анищик В.М. Модификация инструментальных материалов ионными и плазменными пучками / В.М. Анищик, В.В. Углов; под ред. Т.К. Раманович, 2003. – 176 с.
15. Радиационное материаловедение [электронный ресурс] – Режим доступа: [http://net.knigi-x.ru/24ekonomika/88798-1-6-radiacionnoe-materialovedenie-razdel-fiziki-zanimayuschisya-issledovaniem-povedeniya-tverdih-tel-pod-oblucheniem-poluch.php], свободный (10.12.2017).
16. G.S. Was, Fundamentals of Materials Science: Metals and Alloys, Springer, New York, 2007.
17. Сундукова О.А., Белова И.М. Методика проведения компьютерного моделирования процесса ионной имплантации методом молекулярной динамики с помощью пакета программ для классической молекулярной динамики LAMMPS // Иннов: электронный научный журнал, 2017. №3 (32). URL: <http://www.innov.ru/science/tech/metodika-provedeniya-kompyuternogo-/>
18. Э.Р. Жданов, Р.Ф. Маликов, Р.К. Хисматуллин. Компьютерное моделирование физических явлений и процессов методом Монте-Карло: Учебно-методическое пособие. – Уфа: Изд-во БГПУ, 2005. – 124с.

19. P. Erhart, J. Marian Calculation of the substitutional fraction of ion-implanted He in an Fe target // Journal of Nuclear Materials. – December 21, 2010.

20. Oh Seob Kwon, Ji Hyun Seo, Ki Dong Kim and Tae Young Won Modeling of Low-Energy Ion Implantation Process by Molecular Dynamics (MD) Approach // Journal of the Korean Physical Society, Vol. 45, December 2004, pp. S791-S794

21. Uberuaga B.P., Montalenti F., Germann T.C., Voter A.F. Accelerated molecular dynamics methods. In: Handbook of Material Modeling. Ed. Yip S. – Springer, 2005, pp. 629–648.

22. K. Nordlund, S.J. Zinkle, A.E. Sand, F. Granberg, R.S. Averback, R.E. Stoller, T. Suzudo, L. Malerba, F. Banhart, W.J. Weber, F. Willaime, S.L. Dudarev, D. Simeone, Primary radiation damage: A review of current understanding and models // Journal of Nuclear Materials (2018) Vol. 512, Pages 450-479.

23. Korchuganov A.V., Zolnikov K.P., Kryzhevich D.S., Chernov V.M., Psakhie S.G. Generation of shock waves in iron under irradiation. Nucl. Instr. Meth. B, 2015, v. 352, p. 39 – 42.

24. Корчуганов А.В., Зольников К.П., Крыжевич Д.С., Чернов В.М., Псахье С.Г. Моделирование зарождения пластической деформации в механически нагруженных кристаллитах при радиационном воздействии. ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез, 2015, т. 38, с. 42 – 48.

25. Крыжевич Д.С., Корчуганов А.В., Зольников К.П., Псахье С.Г. Влияние границ раздела на формирование радиационных повреждений в железе. Известия высших учебных заведений. Физика, 2013, т. 56, № 12/2, с. 143 – 146.

26. Starikov S.V., Insepov Z., Rest J., Kuksin A.Yu., Norman G.E., Stegailov V.V., Yanilkin A.V Radiationinduced damage and evolution of defects in Mo. Phys. Rev. B, 2011, v. 84, p. 104109.

27. Tikhonchev M., Svetukhin V., Gaganidze E. MD simulation of atomic displacement cascades near chromium-rich clusters in FeCr alloy. *J. Nucl. Mater.*, 2013, v. 442, p. S618 – S623.

28. Stoller R.E. Primary radiation damage formation. *Comprehensive nuclear materials*. Ed. R.J. Konings. Oxford: Elsevier, 2012, p. 293 – 332.

29. Malerba L. Molecular dynamics simulation of displacement cascades in α -Fe: A critical review. *J. Nucl. Mater.*, 2006, v. 351, p. 28 – 38.

30. Bacon D.J., Osetsky Yu.N. Multiscale modelling of radiation damage in metals: from defect generation to material properties. *Materials Science and Engineering*, 2004, v. A365, p. 46 – 56.

31. А. В. Корчуганов, В. М. Чернов, К. П. Зольников, Д. С. Крыжевич, С. Г. Псахье Молекулярно-динамическое моделирование первичной радиационной повреждаемости металлов с внутренней структурой // Перспективные материалы. – 2016. – №3 – С. 5 – 19

32. Тихончев, М. Ю. Моделирование процессов первичной радиационной повреждаемости сплава Fe–1.8ат.%Ni методом молекулярной динамики / М. Ю. Тихончев, В. В. Светухин, Д. В. Козлов, В. Н. Голованов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2010. – № 3 (15). – С. 143–155.

33. Nathan Allen Capps Molecular Dynamics Simulations of Cascade Evolution near Pre-Existing Defects. – December 2013. – 43 pages

34. DI CHEN Molecular Dynamics Simulation of Damage Cascade Formation in Ion Bombarded Solids. – August 2011. – 79 pages

35. Л.С. Новиков, Е.Н. Воронина. Особенности моделирования радиационных воздействий на наноструктуры.// Труды XIII Межвузовской научной школы молодых специалистов "Концентрированные потоки энергии в космической технике, электронике, экологии и медицине", Москва 19-20 ноября 2012 / Под ред. Б. С. Ишханов, Л. С. Новиков. — НИИЯФ МГУ Москва, 2012. — С. 133–141.

36. Kotakoski J., Krasheninnikov A.V., Nordlung K. Atomistic simulations of irradiation effects in carbon nanotubes: an overview. *Radiation Effects & Defects in Solids*, 2007, v. 162, No. 3–4, pp. 157–169.

37. Joan Adler, Amihai Silverman, Niv Ierushalmi, Anastassia Sorkin and Rafi Kalish Simulation and visualization of ion-implantation in diamond // *Journal of Physics Conference Series* 487(1)

38. H. Chabba, M. Lemaalem, A. Derouiche, D. Dafir Modeling aluminum using molecular dynamics simulation // *Journal of Materials and Environmental Sciences*. – 2018. – Volume 9, Issue 1. – Page 93-99

39. Sean Lowder Using Molecular Dynamics Simulations to Quantify the Energy Stored in Irradiation Defects in Tungsten and Aluminum. – 2017. – 67 pages

40. Назаров А.А., Мулюков Р.Р. Атомистическое моделирование материалов, наноструктур и процессов нанотехнологии. Учебное пособие для студентов-физиков. Уфа, РИО БашГУ, 2010.- 156 с.

41. Цзи Вэньян Расчет упругих параметров системы «палладий-водород» методом молекулярной динамики: бакалаврская работа/ Цзи Вэньян. – 2017. – 86 с.

42. Т.Ю. Бурганов. Транспортные свойства металлических сплавов $Al_{(1-x)}Me_x$ [$Me=(Ni, Cu)$]: Выпускная квалификационная работа: 050203.65 – Физика с дополнительной специальностью информатика – Казань, 2015 – 50 с.

43. В.И. Белько, В.Е. Гусаков, Н.Н. Дорожкин. Моделирование формирования кластеров собственных дефектов в облученном кремнии: Кинетический метод Монте-Карло / Секция 4. Пучковые методы формирования наноматериалов и наноструктур // *Материалы 8-й международной конференции «Взаимодействие излучений с твердым телом»*, – Минск – 23-25 сентября 2009 г. – 212-214 с.

44. Е.В. Воронина, Л.С. Новиков. Методы многомасштабного моделирования в исследованиях воздействия космических излучений на наноматериалы // Региональная Конференция (Семинар (workshop)): XIV Межвузовская научная школа молодых специалистов «Концентрированные потоки энергии в космической технике, электронике, экологии и медицине» - НИИЯФ МГУ –27 ноября 2013 – 47 с.

45. Standard E521, ASTM Annual Book of Standards (1989).

46. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator [электронный ресурс] – Режим доступа: [<https://lammmps.sandia.gov/>], свободный (10.09.2018).

47. James Ziegler - SRIM & TRIM. URL: <http://www.srim.org/>

48. Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U. The stopping and range of ions in solids. New York: Pergamon, 1985. 372 p.

49. Волкова Е.В., Оболенский С.В. Метод Монте-Карло в задачах моделирования структуры кластеров радиационных дефектов. Применение технологии высокопроизводительных вычислений. Учебное пособие. – Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2014. – 82.

50. OVITO Open Visualization Tool [электронный ресурс] – Режим доступа: [<https://ovito.org/>], свободный (11.12.2018)

51. X.P. Zhu, Z.C. Zhang, A.I. Pushkarev, M.K. Lei. Ion beam enhancement in magnetically insulated ion diodes for high-intensity pulsed ion beam generation in non-relativistic mode // Phys. Plasmas 23, 013112 (2016)

52. Yu. Isakova, A. Prima, X.P. Zhu, L. Ding, Q. Zhang, A. Pushkarev, M.K. Lei. Overheat of a metal target at high-intensity pulsed ion beam irradiation // Review of Scientific Instruments

53. Pushkarev A.I., Isakova Y.I., Xailov I.P. Stabilization of ion beam generation in a diode with self-magnetic insulation in double-pulse mode // Laser and Particle Beams, 2015, volume 33, issue 02, pp. 283-291.

54. Xiao Yu, Jie Shen, Miao Qu, Haowen Zhong, Jie Zhang, Yanyan Zhang, Sha Yan, Gaolong Zhang, Xiaofu Zhang, Xiaoyun Le. Distribution and

evolution of thermal field formed by intense pulsed ion beam on thin metal target // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 365 (2015) P. 225–229.

55. Incropera F.P. and Dewitt D.P. Fundamentals of heat and mass transfer, Wiley, 1990.

56. M.J. Caturla, T.D. de la Rubia, M.V.R.K. Corzine, M.R. James, G.A. Greene. Multiscale modeling of radiation damage: applications to damage production by GeV proton irradiation of Cu and W, and pulsed irradiation effects in Cu and Fe // Journal of Nuclear Materials 296 (2001) pp. 90-100.

57. C.H.M. Broeders, A.Yu. Konobeyev. Defect production efficiency in metals under neutron irradiation // Journal of Nuclear Materials 328 (2004) 197–214

58. M.I. Norgett, M.T. Robinson and I.M. Torrens. Proposed method of calculation displacement dose rates // Nuclear engineering and design 33 (1975), p. 50-34.

59. Pushkarev A.I., Isakova Yu.I., Khailov I.P. Intense ion beam generation in a diode with explosive emission cathode in self-magnetically insulated mode // The European Physical Journal D section Plasma Physics (2015) vol. 69, article number 40 DOI: 10.1140/epjd/e2014-50319-8

60. Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 № 197-ФЗ (ред. от 01.04.2019)

61. Статья 212 «Трудового кодекса Российской Федерации» от 30.12.2001 № 197-ФЗ (ред. от 01.04.2019)

62. СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03. Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы (ред. от 21.06.2016)

63. ГОСТ 12.2.032-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования.

64. ГОСТ 12.0.003-2015. ССБТ. Опасные и вредные производственные факторы. Классификация

65. СанПиН 2.2.4.548–96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений

66. Безопасность жизнедеятельности: учебное пособие/ О.Б. Назаренко, Ю.А. Амелькович; Томский политехнический университет. – 3-е изд., перераб. и доп. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2013. – 178 с.

67. ГОСТ 12.1.003–2014 ССБТ. Шум. Общие требования безопасности.

68. СН 2.2.4/2.1.8.562–96. Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории застройки.

69. ГОСТ 12.1.029-80 ССБТ. Средства и методы защиты от шума. Классификация.

70. СП 52.13330.2016 Естественное и искусственное освещение. Актуализированная редакция СНиП 23-05-95*

71. Правила устройств электроустановок - 7-е изд. - М.: Энергоатомиздат, 2001-640с.

72. ГОСТ Р 54565-2011 Лом и отходы цветных металлов и сплавов. Термины и определения

73. ГОСТ 12.1.004-91 Система стандартов безопасности труда «Пожарная безопасность. Общие требования» (ред. от 12.09.2018)

74. НПБ 105-03. Определение категорий помещений, зданий и наружных установок по взрывопожарной и пожарной опасности

Приложение А
(обязательное)

Simulation of generation of radiation defects in a metal target during the irradiation by a powerful ion beam

Студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4ТМ71	Зырянова Раксана Владимировна		

Руководитель ВКР:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор отделения материаловедения ИШНПТ	Пушкарев Александр Иванович	д.ф.-м.н.		

Консультант – лингвист отделения иностранных языков:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель отделения иностранных языков ШБИП	Ажель Юлия Петровна			

A.1 Simulation of generation of radiation defects in a metal target during the irradiation by a powerful ion beam

Simulation of generating radiation defects was performed in three ways: simulation by using NRT model [22, 45], simulation using the LAMMPS [46] and SRIM [47, 48] programs.

A.1.1 Simulation using the NRT model

NRT simulation (Norgett–Robinson–Torrens) allows calculating the number of Frenkel pairs produced during the deceleration of the accelerated levels [22, 45].

$$N_{NRT} = \frac{E_{an1} + E_{an2}}{2E_d} \quad (\text{A.1})$$

where E_{an} – is the energy of annihilation of the radiation defects in the target after irradiation,

E_d – is the threshold energy of atom displacement.

In the calculation of NRT, the possibility of the ballistic processes recombining the defect during the formation of a displacement cascade was not considered. When calculating the number of defects in the cascade, the phonons energy loss found using the SRIM program was considered.

Figure A1 shows the result of NRT model simulation of the amount of RD for the threshold energy of displacement $E_d = 30$ eV for the targets from Cu, Ti and Zn, $E_d = 40$ eV for a target from Fe.

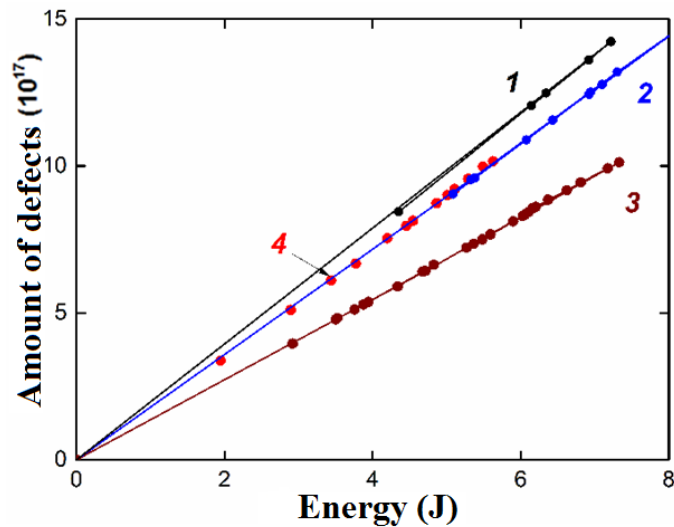


Figure A.1 – Dependence of the total number of radiation defects in Ti (1), Cu (2), stainless steel (3) and brass (4) targets on the absorbed energy in metal targets (experimental data are indicated by dots, NRT model is shown by lines)

The results obtained using the NRT model simulation, are close to experimental. This is due to the fact that the calculation is performed using the experimental values of the absorbed energy in the target during the irradiation.

The disadvantage of the NRT model is that without experimental data, it is impossible to calculate the number of radiation defects in the target.

A.1.2 Simulation in SRIM program

The TRIM (SRIM) software package is designed to simulate the physical processes of radiation defect cascades under the irradiated layered solid-state compositions with charged particles. The package is freely distributed via the Internet [47].

The software package is available in two versions: TRIM for the DOS operating system (it can also work under Windows in DOS emulation mode) and SRIM for Windows. TRIM (SRIM) uses a graphical user interface with multi-window.

Composition of the package software TRIM (SRIM): a) input data input block; b) a simulation block; c) a block of statistical analysis of the calculation results; d) block output results calculation [49].

SRIM uses the quantum-mechanical processing of the ion-atom collisions (assuming that a moving atom is an “ion” and all the target atoms are “atoms”). This calculation is effective owing to the use of statistical algorithms that allow the ion to jump between computed collisions and then average the collision results. Using the SRIM program, it is possible to calculate the number of primary radiation defects in the ion cascade, which depends on the ion energy.

Figure A2 shows the dependence of the number of radiation defects on the energy of the ion carbon for targets made of different metals

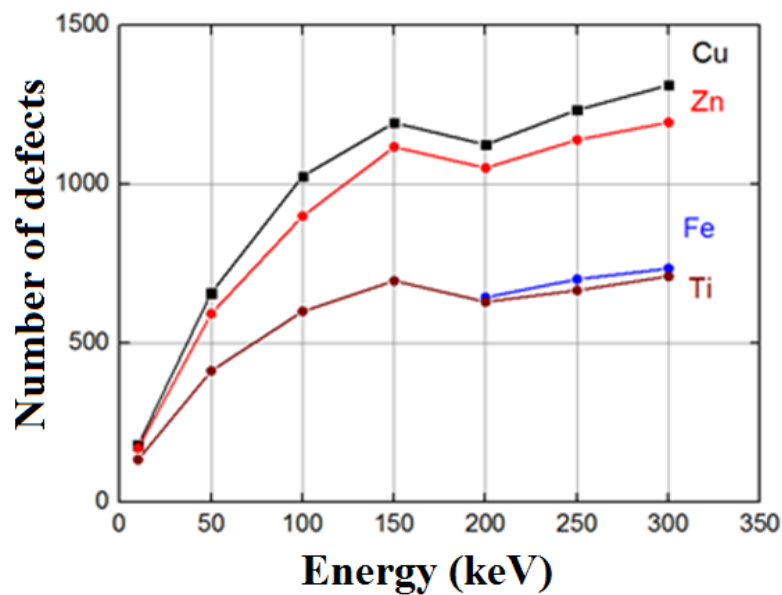


Figure A.2 – Dependence of the number of primary radiation defects in the cascade on the energy of the C^+ ion for targets from different metals

Table A.1 shows the data on the number of defects in the cascade with an average C^+ ion energy equal to 235 keV.

Table A.1 - The number of defects formed on one incident ion

Target material	Energy loss		The number of defects in the cascade		
	Electronic stopping	Phonons	N_{SRIM}	N_{IIBA}	N_{cor}
Ti	84%	12%	657	2050	4600
Fe	81%	16%	684	2110	3462
Zn	77%	19%	1111	3090	4500
Brass	77%	19%		3346	4768
Cu	78%	19%	1198	3490	4918

The number of defects was calculated at a lattice binding energy of 3 eV for the threshold energy $E_d = 30$ eV for targets from Cu, Ti, Zn and $E_d = 40$ eV for a target from Fe.

For brass, the number of radiation defects in the cascade was calculated as for the sum of copper and zinc atoms in the corresponding proportion.

According to the data in Table A1, it can be seen that the main part of the kinetic energy loss of the ion during the deceleration is associated with the electronic stopping. In addition to the energy loss because of the electronic stopping, energy is transferred to the thermal vibrations of the crystal lattice atoms (phonons).

To calculate the number of RD in the cascade of the atom, the method for the primary knocked-on atom (PKA) was also used. The number of defects in the copper target was calculated when stopping the copper ion with the energy of 250 keV, and the binding energy of the lattice was taken to be equal to the threshold energy of formation of the radiation defect. The number of defects obtained by simulation using the PKA method is close to the number of defects that had been obtained experimentally.

The SRIM simulation results can be used to estimate the number of radiation defects in the carbon atom cascade. In this case, the energy that the ion loses during the electronic stopping, the formation of the defects will be taken into account. Then the number of defects is as follows:

$$N_{cor} = N_{SRIM} \frac{E_{electron}}{E_{phonon}} \quad (A.2)$$

где $E_{electron}$ – electronic stopping energy loss,

E_{phonon} – phonon stopping energy loss.

The calculations performed using the relation (A.2) showed the overestimated data for all the targets by 25–46%.

Also, the SRIM program made it possible to obtain the data on the range and trajectory of the ions for the targets made of titanium, copper, iron, and zinc, were. The results are shown in Figure A3.

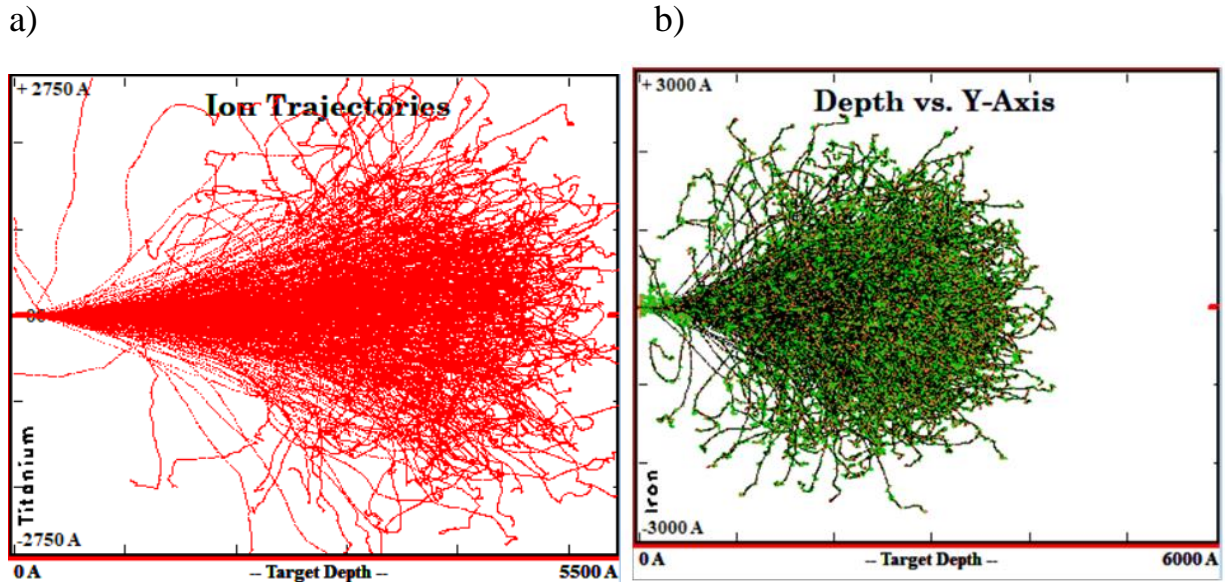


Figure A.3 – The trajectories of the movement of a ion C^+ with an energy of 250 keV in a titanium (a) and iron (b) targets when irradiated from a point source
 At the ion energy of 250 keV, the radius of the defect formation region is $\approx 2000 \text{ \AA}$.

A.1.3 Simulation in LAMMPS program

For simulating LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) program, considered one of the most well-known and powerful programs for classical molecular dynamics, was used. This program is free and is used to calculate the interactions up to tens of millions of atoms. The program does not have a graphical interface (command mode only). It is possible to compile source codes for various operating systems (Linux, OS X, Windows) [46].

For testing, the latest 64-bit Windows version of LAMMPS 64-bit 20160516 (version dated 05.16.2016) was used. This version of the program can be launched both a single-threaded mode and in a multi-threaded mode (in the case of multi-core processors and multiprocessor systems), for this purpose various commands can be used.

Additional programs needed for simulation of the molecular dynamics method are:

Far – file and archive management program for Windows;

Ovito – visualization package for converting raw atomic coordinates to a graphical representation.

A.1.3.1 Input code

The simulation process is as follows:

- choice of simulation platform;
- software installation;
- building the software package;
- create file with input data;
- simulation start;
- analysis of unloading results.

The program for LAMMPS contains five main parts:

1. Initialization - setting parameters that must be defined before creating atoms and structures. Basic commands:

The program for LAMMPS contains five main parts:

1. Initialization - setting parameters that must be defined before creating atoms and structures. Basic commands are:

units – defines a style that determining the units of measurement for input parameters and calculation results. In our calculations, the style *the metal* is mainly used;

dimension – determines the dimension of the space (2d or 3d). Command '*dimension 3*' indicates that a three-dimensional simulation cell will be used.

boundary – the command determines the boundary conditions for the simulation (p - periodic, f - non-periodic and fixed, s - non-periodic, m - non-periodic).

2. Determination of the structure and types of atoms. Commands are:

lattice – the lattice type is set (fcc, bcc, hcp, or to set an arbitrary lattice independently); 'lattice hcp 2.95' – a command for the titanium target, hcp is the lattice type, and the number following the lattice type indicates the lattice constant.

region – set the region of space. The region may have a different shape: a cube, a sphere, a cylinder, etc; command 'region beam block' sets the area of beam simulation.

create_box – a command creating a simulation region; that is, a calculation cell having the shape and dimensions defined by the region command is created;

create_atoms – a command for atom creation in the field of simulation.

3. Setting interaction potential

In LAMMPS different potentials can be set. They are defined using the commands:

pair_style – type of potential;

pair_coeff – coefficients.

Command '*pair_style*' indicates which interatomic potential will be used. Command '*pair_coeff*' specifies the file in which the potential factors are stored.

4. Setting the conditions for simulation and data output

This section sets the commands defining the conditions for calculating. In addition, it sets the type of data output - variables, images, video.

fix – a command that determines the simulation conditions;

thermo – a command that sets data output parameters during the simulation;

dump – a command that determines the output of the data to the file: numbers, pictures, video. We create dump files through a time step for further visualization in Ovito.

5. Run simulation

minimize – a command that starts up the molecular dynamics calculation for minimize lattice energy;

run – a command that starts up the molecular dynamics calculation.

A.1.3.2 Visualization of simulation results

For visualization, the program Ovito (Open Visualization Tool) was used. It is freely available software for visualizing and analyzing atomistic datasets obtained from molecular dynamics / statics and Monte Carlo simulations. Ovito is the software written in C++ that runs on all major operating systems.

Wigner-Seitz defect analysis

Wigner-Seitz defect analysis is a modifier that identifies the point defects in crystalline structures using the so-called Wigner-Seitz cell method. It can be used to count vacancies and interstitials, for example, or track their motion through the lattice.

It is presumed that two configurations of the atomistic system exist: the reference state, which is defect-free (typically the perfect crystal lattice), and the displaced configuration, which represents the defective state of the crystal to be analyzed. In the latter, some atoms have been displaced or completely removed from their original sites.

Each atomic site in the reference configuration defines the center of a Wigner-Seitz cell (also called a *Voronoi cell*), which is the spatial region belonging to that site. The WS analysis algorithm simply counts the number of atoms (from the displaced configuration) that occupy each site (of the reference configuration). Typically, sites are occupied by exactly one atom each, because most of the crystal remains intact and atoms do not leave their original positions. However, some sites may be occupied by zero atoms (we call these sites vacancies) or by more than one atom (then we call the excess atoms interstitials) [50].

Centrosymmetry parameter

This modifier calculates the centro-symmetry parameter of each particle. The centrosymmetry parameter (CSP) is an indicator used to categorize the spatial arrangement of atoms. The centrosymmetry parameter quantifies how far from an

ideal the structure surrounding a single atom is; for an atom having N nearest neighbors, CSP is defined as an equation (A.3), which is given below.

$$CSP = \sum_{i=1}^{N/2} |r_i + r_{i+N/2}|^2 \quad (A.3)$$

where r_i and $r_{i+N/2}$ – are vectors pointing from the central atom to a pair of opposite neighbors [49].

For face-centered cubic (fcc) lattices, $N = 12$ and for body-centered cubic (bcc) lattices, $N = 8$.

The modifier needs to know the number of neighbors that should be taken into account for the computation of the centrosymmetry value.

For atoms representing an ideal crystal structure, the CSP parameter is close to zero, and it becomes non-zero for atoms representing the defective structures. The advantage of the CSP parameter is that it is relatively unaffected by an elastic deformation in the crystal, although it is still sensitive to random thermal atomic displacements.

The biggest disadvantage of CSP is that some crystal structures, such as hexagonal close packaging (hcp), do not fall into the centrosymmetric class (that is, we cannot use CSP to detect defects), and the user must enter a threshold value to distinguish between atoms from defects.

A.1.3.3 Simulation results

Figure A5 shows the 3D model built using the above code in the LAMMPS program. The 3D model was built for a copper target with dimensions $100 \times 100 \text{ \AA}$, ion C^+

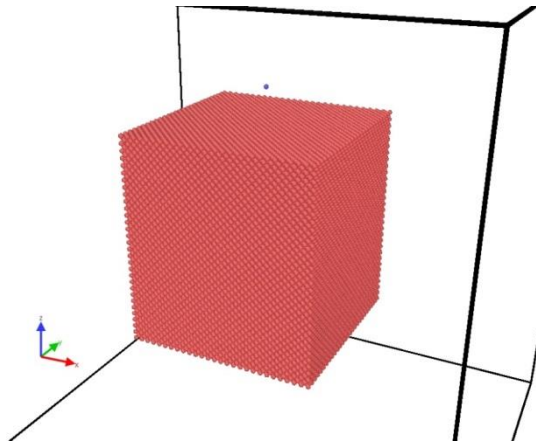


Figure A.5 – 3D model of a copper target (copper atoms in red, carbon atom in blue)

Also, using the LAMMPS and OVITO programs, we were able to visualize a cascade of defects in a copper target with the carbon atom energy of 5 keV.

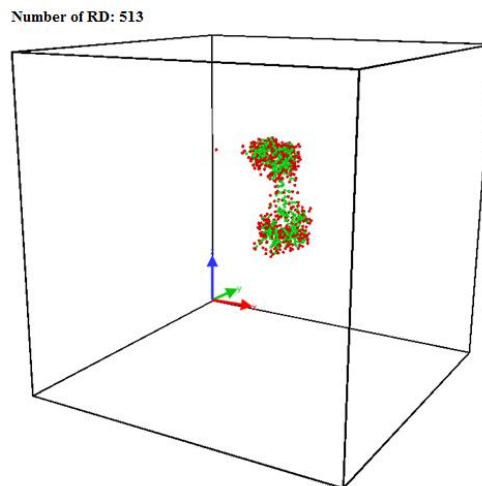


Figure A.6 – A cascade of the defects in a copper target at a carbon atom energy of 5 keV (interstitial atoms are marked with red, vacancies are marked with green)

Calculation of the number of defects

The LAMMPS program is considered as one of the most well-known and powerful programs for classical molecular dynamics [46].

Simulations were performed for a C^+ atom with the energy of 1 to 5 keV. Such construction materials as copper, iron, titanium were chosen as the models for simulation.

Table A.2 and Figure A.7 present the results of simulating the number of radiation defects in the carbon cascade for different targets.

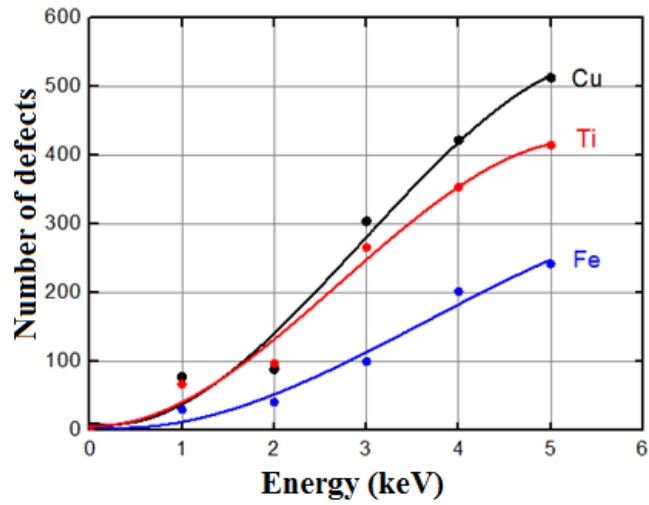


Figure A.7 – Dependence of the number of radiation defects in the cascade on the energy of the C^+ atom for targets made of different metals

Table A.2 shows the data on the number of defects formed in the targets made of titanium, copper and iron obtained using the LAMMPS program.

Table A.2 – The number of defects formed on one incident atom

Material	The number of defects per carbon atom				
	1 keV	2 keV	3 keV	4 keV	5 keV
Titanium	67	97	266	354	415
Copper	78	89	304	422	513
Iron	30	41	100	202	242

It is obvious that with an increase in energy, the number of formed defects also increases.

Figure A8 presents the dependence of the defects concentration on the energy density of the HIPIB.

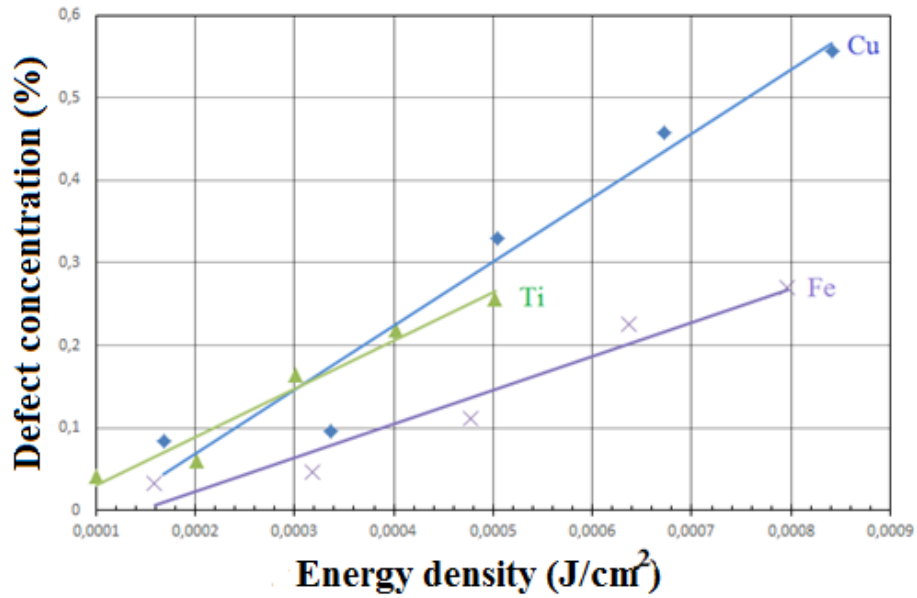


Figure A.8 – Dependence of the concentration of radiation defects on the energy density of the ion C^+ for targets made of different metals

Calculation of the run depth of the ion

The dependence of the depth of the ion on the energy is shown in Figure A.9.

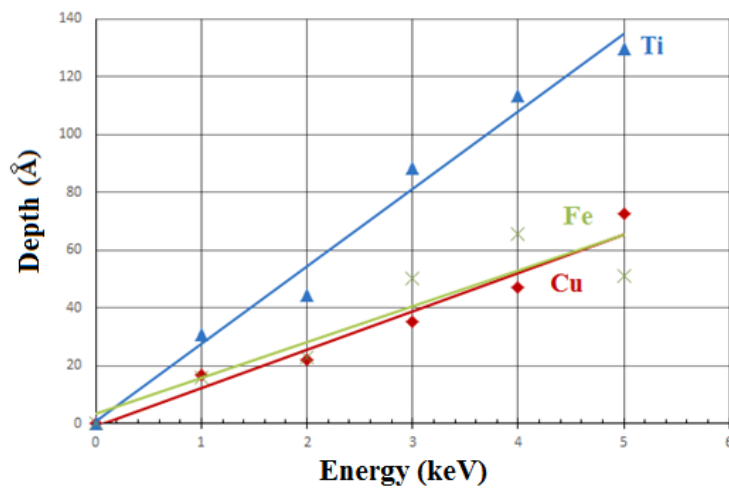


Figure A.9 – The dependence of the depth of the C^+ ion on the energy for targets made of different metals

Table A.3 presents the data on the depth of run ion in the targets made of titanium, copper and iron, obtained using the LAMMPS program.

Table A.3 – Depth of the ion C^+

Material	Depth of run, Å				
	1 keV	2 keV	3 keV	4 keV	5 keV
Titanium	31	45	88	113	130
Copper	17	22	35	47	72
Iron	16	23	50	66	51

With increasing energy in all the materials, the depth of run increases. The greatest depth of run is in the target made of titanium.