

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

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
Особенности взаимодействия водорода с наноразмерными многослойными покрытиями цирконий/ниобий

УДК 669.788:621.793-022.532:669.29

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0А7Б	Огнев Сергей Олегович		

Руководитель ВКР

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

Консультант

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

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

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

По разделу «Социальная ответственность»

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

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

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

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОСВОЕНИЯ ООП

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

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

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

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

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

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

бакалаврской работы

Студенту:

Группа	ФИО
0А7Б	Огнев Сергей Олегович

Тема работы:

Особенности взаимодействия водорода с наноразмерными многослойными покрытиями цирконий/ниобий	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	29.01.2021 г, 29–47/с

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

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе	– Водород и наноразмерное многослойное покрытие из чередующихся слоев циркония и ниобия.
---------------------------------	--

Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов	<ul style="list-style-type: none"> – Обзор литературных источников; – Проведение релаксации решеток циркония и ниобия вблизи границы раздела многослойного покрытия; – Расчет энергии связи водорода с цирконием и ниобием вблизи границы раздела многослойного покрытия; – Вычисление профилей диффузионных барьеров для атома водорода в цирконии многослойной структуры; – Анализ полученных результатов; – Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение; – Социальная ответственность; – Заключение по работе
Перечень графического материала	Презентация
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы	
Раздел	Консультант
Социальная ответственность	Передерин Юрий Владимирович
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Гасанов Магеррам Али оглы
Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:	

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

Задание выдал руководитель / консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ОЯТЦ	Яковлева Валентина Станиславовна	д.т.н.		
Доцент ОЭФ	Святкин Леонид Александрович	к.ф.-м.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0А7Б	Огнев Сергей Олегович		

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

Студенту:

Группа	ФИО
0А7Б	Огневу Сергею Олеговичу

Школа	ИШПР	Отделение	ОХИ
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	Ядерная физика и технологии

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

1. <i>Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	Работа с информацией, представленной в российских и иностранных научных публикациях, аналитических материалах, статических бюллетенях и изданиях, нормативно-правовых документах; анкетирование; опрос.
2. <i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	
3. <i>Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. <i>Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения</i>	Проведение предпроектного анализа. Определение целевого рынка и проведение его сегментирования. Выполнение SWOT-анализа проекта
2. <i>Определение возможных альтернатив проведения научных исследований</i>	Определение целей и ожиданий, требований проекта. Определение заинтересованных сторон и их ожиданий.
3. <i>Планирование процесса управления НИИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок</i>	Составление календарного плана проекта. Определение бюджета НИИ
4. <i>Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности</i>	Проведение оценки экономической эффективности использования ПО Abinit для выполнения исследований многослойного покрытия

Перечень графического материала(с точным указанием обязательных чертежей):

<p>1. Оценка конкурентоспособности технических решений</p> <p>2. Матрица SWOT</p> <p>3. График проведения НИИ</p> <p>4. Определение бюджета НИИ</p> <p>5. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИИ</p>
--

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

Задание выдал консультант:

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

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0А7Б	Огнев Сергей Олегович		

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»**

Студенту:

Группа	ФИО
0А7Б	Огнев С.О.

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

Тема ВКР:

Особенности взаимодействия водорода с наноразмерными многослойными покрытиями цирконий/ниобий

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	Атом водорода на границе раздела наноразмерного многослойного покрытия цирконий/ниобий.
--	---

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. 	<ul style="list-style-type: none"> – ГОСТ 12.0.003-2015 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Опасные и вредные производственные факторы. Классификация. – ГОСТ 30494-96 Здания жилые и общественные. Параметры микроклимата в помещениях. – ГОСТ 12.1.003-83 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Шум. Общие требования безопасности (с Изменением N 1) – СНиП 23-05-95* Естественное и искусственное освещение (с Изменением N 1) – СП 12.13130.2009. Определение категорий помещений, зданий и наружных установок по взрывопожарной и пожарной опасности (в ред. изм. № 1, утв. приказом МЧС России от 09.12.2010 № 643). – ГОСТ 12.1.004-91 Система стандартов безопасности труда. Пожарная безопасность. Общие требования. – ГОСТ 12.1.009-76 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Электробезопасность. Термины и определения – ГОСТ Р 12.1.019-2017 ССБТ Электробезопасность – ГОСТ Р МЭК 61140-2000 Защита от поражения электрическим током. Общие положения по
--	---

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

3. Экологическая безопасность:	– Данное исследование не наносит вреда окружающей среде, но может быть нанесен вред в процессе создания вычислительного оборудования.
4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:	– Возникновение пожара – Удар электрическим током – Падение с высоты собственного роста – Падение с лестницы Наиболее типичная ЧС: падение с высоты собственного роста

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

Задание выдал консультант:

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

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0А7Б	Огнев С.О.		

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

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

Форма представления работы:

бакалаврская работа

**КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН
выполнения выпускной квалификационной работы**

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

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
12.02.2021	Обзор литературных источников	10
26.02.2021	Изучение основных приближений и методов расчета	10
19.03.2021	Проведение релаксации решеток циркония и ниобия вблизи границы раздела многослойного покрытия	10
26.03.2021	Расчет энергии связи водорода с цирконием и ниобием вблизи границы раздела многослойного покрытия	10
12.05.2021	Вычисление профилей диффузионных барьеров для атома водорода в цирконии многослойной структуры	10
19.05.2021	Анализ полученных результатов	10
25.05.2021	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	15
25.05.2021	Социальная ответственность	15
25.05.2021	Заключение по работе	10

СОСТАВИЛ:

Руководитель ВКР

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

Консультант

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

СОГЛАСОВАНО:**Руководитель ООП**

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

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 117 с., 22 рис., 29 табл., 93 источника.

Ключевые слова: цирконий, ниобий, многослойное покрытие, водород, диффузионный барьер, расчеты из первых принципов.

Объектом исследования являются атома водорода на границе раздела наноразмерного многослойного покрытия цирконий/ниобий

Цель работы – исследовать влияние границы раздела между наноразмерными металлическими слоями циркония и ниобия в многослойном покрытии на профили диффузионных барьеров и энергию связи атома водорода.

В процессе исследования проводились релаксация решеток циркония и ниобия вблизи границы раздела многослойного покрытия; расчеты энергий связи атома водорода в слоях циркония и ниобия многослойного покрытия; расчеты профилей диффузионных барьеров для атома водорода в цирконии многослойного покрытия цирконий/ниобий.

В результате исследования установлено увеличение энергии связи атома водорода в слоях циркония и ниобия при приближении к границе раздела между двумя металлами, выявлено уменьшение величины диффузионных барьеров для атома водорода в слое циркония многослойного покрытия по сравнению с чистым цирконием.

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

Степень внедрения: результаты работы представлены на международной научной конференции «Перспективы развития фундаментальных наук» и международной Тулиновской конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами.

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

Экономическая эффективность/значимость работы заключается в изучении особенностей процесса диффузии водорода в цирконии многослойной структуры на микроскопическом уровне, что может быть использовано в дальнейшем для предсказания процесса накопления водорода в многослойном покрытии.

В будущем планируется проведение расчетов их первых принципов профилей диффузионных барьеров для атомов водорода в ниобии многослойного покрытия.

Содержание

Введение.....	17
1 Водород в металлах и покрытиях.....	19
1.1 Влияние водорода на металлы.....	19
1.2 Влияние водорода на структуру циркония	20
1.3 Водород в сплавах циркония	26
1.4 Легирование циркония ниобием	27
1.5 Многослойные покрытия	28
2 Основные приближения и методы расчета	31
2.1 Приближения.....	31
2.1.1 Адиабатическое приближение.....	31
2.1.2 Одноэлектронное приближение	32
2.1.3 Уравнения Кона-Шема	34
2.1.4 Зонное приближение	36
2.2 Метод псевдопотенциала	37
2.3 Методология расчета профилей диффузионных барьеров.....	40
2.4 Метод упругой ленты	44
3 Водород на границе раздела многослойного покрытия Zr/Nb.....	46
3.1 Релаксация решеток циркония и ниобия вблизи границы раздела	46
3.2 Энергия связи атома водорода.....	49
3.3 Диффузия атома водорода в цирконии.....	57
3.4 Диффузия атома водорода в цирконии вблизи границы раздела ..	61
4 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.....	63
4.1 Потенциальные потребители результатов исследования	63

4.2 Анализ конкурентных технических решений.....	64
4.3 SWOT-анализ.....	67
4.4 Определение возможных альтернатив проведения научных исследований	71
4.5 Планирование научно-исследовательских работ	71
4.5.1 Структура работ в рамках научного исследования.....	71
4.5.2 Определение трудоемкости выполнения работ.....	72
4.5.3. Разработка графика проведения научного исследования.....	73
4.6 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)	78
4.6.1 Расчет материальных затрат НТИ.....	78
4.6.2 Расчет затрат на оборудование для научно-экспериментальных работ.....	79
4.6.3 Основная заработная плата исполнителей темы	79
4.6.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)	82
4.6.5 Накладные расходы	83
4.6.6. Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта	83
4.7 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования .	84
5 Социальная ответственность	88
5.1 Оценка вредных и опасных факторов.....	88
5.1.1 Микроклимат.....	89
5.1.2 Шум	92
5.1.3 Освещение	93
5.1.4 Электромагнитные поля.....	96

5.1.5 Пожаробезопасность	98
5.1.6 Электробезопасность.....	99
5.1.7 Радиационная безопасность.....	100
5.2 Аварийные ситуации	101
5.3 Выводы по главе	104
Заключение	105
Список использованных источников	107

Введение

Использование циркония в водо-водяных реакторах на тепловых нейтронах в качестве конструкционного материала оболочек тепловыделяющих элементов обусловлено в первую очередь его очень малым сечением захвата тепловых нейтронов и высокой коррозионной стойкостью. Для увеличения продолжительности сохранения конструкционных свойств изделий из циркония в него добавляют иные металлы в качестве примеси и/или наносят на поверхность различные защитные покрытия.

Одними из перспективных среди таких покрытий являются многослойные структуры из чередующихся слоев циркония и металлов с кубической структурой, например, ниобия. Такая структура, в первую очередь, интересна способностью к саморегенерации, проявляющейся в миграции дефектов в область границы раздела между слоями. Согласно последним исследованиям, в результате работы ядерного реактора возникают радиационные дефекты, которые мигрируют и накапливаются в свободной области между слоями циркония и ниобия, называемой интерфейсом или границей раздела.

Целью данной работы является исследование влияния границы раздела между наноразмерными металлическими слоями циркония и ниобия в многослойном покрытии на профили диффузионных барьеров и энергию связи атома водорода.

Для достижения данной цели были поставлены следующие задачи:

1. Изучить современное состояние вопроса об особенностях взаимодействия и миграции водорода в цирконии и ниобии.
2. Ознакомиться с теорией функционала электронной плотности и метода псевдопотенциала.
3. Провести оптимизацию значений параметров кристаллической решетки и релаксацию положений атомов чистых циркония и ниобия, твердых

растворов Zr–H и Nb–H при концентрации водорода ~ 3 ат.% и вблизи границы раздела между наноразмерными металлическими слоями Zr/Nb.

4. Рассчитать энергию связи атома водорода в цирконии и ниобии при концентрации водорода ~ 3 ат.% и вблизи границы раздела между металлическими слоями Zr/Nb.

5. Вычислить профили диффузионных барьеров для атома водорода в цирконии вблизи и вдали от границы раздела между металлическими слоями Zr/Nb.

6. Провести анализ результатов и выявить влияние границы раздела между наноразмерными металлическими слоями Zr/Nb на энергию связи и профили диффузионных барьеров атомов водорода в ниобии и цирконии.

1 Водород в металлах и покрытиях

1.1 Влияние водорода на металлы

Водород в металлах и структурах может находиться в форме гидридов, либо в растворенном состоянии. При это велика вероятность захвата атома водорода дефектами решетки. Накопление водорода в металле приводит к его водородному охрупчиванию – ухудшению пластических свойств металла. Закономерность развития данного процесса зависит от следующих параметров: состояние металла, содержание и тип примесей в металле, деформация металла, концентрация водорода. Наличие данных закономерность позволяет рассматривать водородное охрупчивание в виде собирательного понятия, отражающего совокупность этих параметров, в итоге приводящее к разрушению материала. Это является причиной незавершенности классификации видов водородного охрупчивания и ее сложности [1].

В общем случае водородное охрупчивание рассматривается в виде I и II родов.

Необратимое водородное охрупчивание I рода развивается в перенасыщенных водородом материалах, содержащих некоторые центры разрушения ещё до приложения нагрузки. Причины развития данного вида охрупчивания:

- взаимодействие растворенного водорода с дислокациями, способствующими разрушению металла;
- взаимодействие водорода с компонентами сплавов, приводящее к образованию газообразных продуктов (H_2O , CH_4 , и т.д.), за счет которых образуются при отсутствии и развиваются при наличии дефекты;
- формирование включений: гидриды, карбогидриды, карбонитриды и др.
- сегрегация молекулярного водорода в макродефектах.

Водородное охрупчивание II рода присутствует как в обратимом, так в и необратимых видах. Его развитие характеризуется формированием источников путем пластической деформации металла, который уже перенасыщен водородом. Зависимость форм охрупчивания II рода обуславливается такими параметрами, как:

- растрескивание металла под действием коррозии;
- скопление атомов водорода в областях преобладания дефектов решетки, в частности, различного рода дислокаций;
- скопление атомов водорода в выгодных с точки зрения внешне действующих на систему полей: упругих, тепловых, электрических;
- выделение водорода в виде газа или частиц гидридов металла, происходящее в результате деформации и последующего распада системы металл-водород.

Стоит отметить пропорциональную зависимость между водородным охрупчиванием и концентрацией водорода в металле: рост концентрации водорода приводит к существенному понижению пластичности. Зачастую охрупчивающее влияние водорода начинает проявляться спустя некоторый инкубационный период, продолжительность которого зависит от диффузионной подвижности водорода [2].

1.2 Влияние водорода на структуру циркония

Цирконий интересен по причине активного (более 90 %) использования как чистого, так и в составе сплавов / покрытий в атомной энергетике. Из циркония и сплавов на его основе изготавливаются оболочки, чехлы и некоторые другие детали тепловыделяющих сборок; канальные трубы для реакторов на тепловых нейтронах [3]. Покрытия, в состав которых входит цирконий, зачастую напыляются на вышеуказанные изделия.

Использование циркония в ядерной энергетике обусловлено такими его параметрами, как:

температуре 600°C и 5% концентрации атомов водорода по отношению к атомам циркония. Определение положения атомов водорода в β -фазе циркония представляет сложность по причине наличия в элементарной ячейке суммарно 18 междоузлий: 12 тетраэдрических и 6 октаэдрических. В работе [6] проведены расчеты энергий напряжений, на основании которых утверждается, что атомы водорода располагаются в октаэдрических междоузлиях с эффективным радиусом 24 Å вместо тетраэдрических междоузлий с радиусом 45 Å.

В работе [7] проводился анализ δ -фазы системы Zr-H при комнатной температуре. Результаты показали схожесть структуры системы данной фазы с кристаллом типа CaF₂, при этом атомы водорода, также, как и в α -фазе, чаще наблюдались в тетраэдрических междоузлиях, чем в октаэдрических.

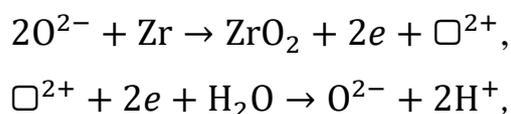
Особенностью ε -фаза (отношение $c/a < 1$) является ГЦТ структура решетки при расположении атомов водорода в тетраэдрических междоузлиях. Авторами работы [8] была установлена закономерность, согласно которой рост концентрации атомов водорода в решетке ε -фазы системы Zr-H приводит к увеличению тетрагональности решетки с уменьшением отношения c/a до значения 0,8929.

В работе [7] был проведен эксперимент уже с дейтерием по нейтронной и рентгеновской дифракции, результаты которого позволяют идентифицировать метастабильную ГЦТ кристаллическую структуру системы Zr-H (γ -фаза) с отношением $c/a = 1,081$. Атомы дейтерия располагались в тетраэдрических междоузлиях в плоскостях (110), что приводит к образованию системы Zr-H с равным количеством атомов водорода и атомов циркония. γ -фаза гидроксида циркония проявляется в случае охлаждения области $[\alpha+\delta]$ до низких температур.

В сплаве циркония происходит перераспределение водорода за счет наличия градиента температуры: из областей с большей температурой в области с меньшей. При наличии градиента напряжений – из областей сжимающих напряжений в области растягивающих напряжений. [3]

Образование гидридов γ -ZrH и δ -ZrH₂ происходит в случае превышения водородом концентрации растворимости. В таком случае δ -фаза является равновесной фазой. Ускоренному охлаждению системы сопутствует образование метастабильных γ -гидридов. Причиной образования различных фаз является выделение δ -гидрида с большим расширением решетки металла в месте гидрирования (~17 %), чем при выделении γ -гидрида (~12), т.е. уровень возникающих внутренних напряжений для δ -фазы выше, чем для γ -фазы. [3]

Водород в α -фазе системы Zr-H растворяется незначительно в результате реакции окисления циркония [4]



где \square – анионная (кислородная) вакансия,

e – электрон, образующий гидриды в приповерхностном слое [4].

Присутствие атомов водорода в решетке циркония приводит к искажениям параметров решетки циркония. В таблицах 1.1 и 1.2 представлены данные о параметрах решетки для систем Zr и Zr_xH_y при расположении атомов водорода в тетраэдрических (Т) и октаэдрических (О) междоузлиях различных фаз циркония для малых и больших концентраций водорода соответственно. Из таблиц видна прямая зависимость между концентрацией водорода в решетке циркония и искажением параметров решетки. При этом рассматривался изначально чистый цирконий, в который помещался атом водорода.

Таблица 1.1 – Теоретические параметры решеток чистого Zr и твердого раствора Zr_xH_y для малых концентраций водорода

Система	Междоузлие	α -фаза		β -фаза	δ -фаза
		a , Å	c , Å	a , Å	a , Å
Чистый Zr	-	3,228 [9]	5,195 [9]	4,532 [10]	3,575 [10]
		3,213 [10]	5,157 [10]	4,52 [12]	3,574 [13]
		3,23 [11]	5,145 [11]		
Zr ₃₆ H	O	3,228 [9]	5,199 [9]	-	-
	T	3,229 [9]	5,203 [9]	-	-
Zr ₃₂ H	O	3,240 [10]	5,203 [10]	4,533 [10]	3,584 [10]
		3,245 [10]	5,218 [10]	4,541 [10]	3,582 [10]
		3,242 [14]	5,174 [14]		
Zr ₁₆ H	O	3,244 [10]	5,203 [10]	4,54 [10]	3,594 [10]
	T	3,246 [10]	5,233 [10]	4,553 [10]	3,59 [10]
Zr ₈ H	O	3,243 [10]	5,221 [10]	4,545 [10]	3,609 [10]
	T	3,257 [10]	5,28 [10]	4,574 [10]	3,603 [10]
Zr ₄ H	O	3,255 [10]	5,195 [10]	4,555 [10]	3,64 [10]
	T	3,288 [10]	5,281 [10]	4,612 [10] 4,61 [15]	3,627 [10]
Zr ₂ H	O	3,267 [10]	5,361 [10]	4,575 [10]	3,681 [10] 3,68 [16]
	T	3,313 [10]	5,549 [10]	4,676 [10] 4,66 [15]	3,672 [10]
ZrH	O	3,293 [10]	5,483 [10]	4,604 [10]	3,749 [10]
	T	3,358 [10]	5,816 [10]	4,735 [10] 4,76 [17] 4,72 [18] 4,75 [19]	3,731 [10]

Таблица 1.2 – Теоретические параметры решеток чистого Zr и твердого раствора Zr_xH_y для высоких концентраций водорода

Система	Междоузлие	β -фаза	ε -фаза		γ -фаза	
		a , Å	a , Å	c , Å	a , Å	c , Å
ZrH	T		4,96 [17]	4,21 [17]	4,61 [17]	5,04 [17]
					4,60 [20]	4,97 [20]
					4,58 [19]	5,04 [19]
					4,56 [21]	5,02 [21]
					4,586 [22]	4,98 [22]
ZrH _{1,25}	T	4,78 [17]			4,79 [17]	5,20 [17]
		4,78 [20]				
ZrH _{1,5}	T	4,80 [17]	5,03 [17]	4,28 [17]	4,62 [17]	4,83 [17]
		4,79 [23]	5,04 [19]	4,25 [19]	4,65 [25]	4,96 [25]
		4,67 [22]			4,61 [19]	5,14 [19]
		4,77 [21]				
		4,82 [24]				
ZrH _{1,75}	T	4,81 [17]	4,97 [17]	4,47 [17]		
			4,91 [23]	4,52 [23]		
ZrH ₂	T	4,82 [17]	5,00 [17]	4,43 [17]		
		4,82 [19]	4,98 [23]	4,43 [23]		
			5,00 [26]	4,45 [26]		
			5,02 [24]	4,43 [24]		
			5,01 [19]	4,44 [19]		
			4,99 [21]	4,41 [18]		
			4,724 [22]	4,207 [22]		

1.3 Водород в сплавах циркония

Одним из способов снижения отрицательного влияния примесей на металл является легирование. Явление синергизма, проявляющееся при наличии нескольких примесей в решетке циркония и характеризующееся взаимоусилением влияния на металл, ограничивает применение чистого циркония по причине больших затрат на получение требуемой чистоты металла.

Выбор легирующего элемента основывается на комплексе свойств, предъявляемых к сплаву [3]:

- высокая коррозионная стойкость;
- низкое сечение захвата тепловых нейтронов;
- отсутствие долгоживущих радиоактивных изотопов, излучающих жесткое гамма-излучение;
- высокие прочностные свойства при высоком уровне пластичности.

На практике используются следующие легирующие элементы: ниобий, олово, железо, хром, медь, молибден, никель. При использовании любого, за исключением железа, из указанных элементов в чистом цирконии происходит ухудшение его коррозионных свойств, что показано на рисунке 1.2. Влияние элемента на поглощение водорода сплавом является индивидуальным.

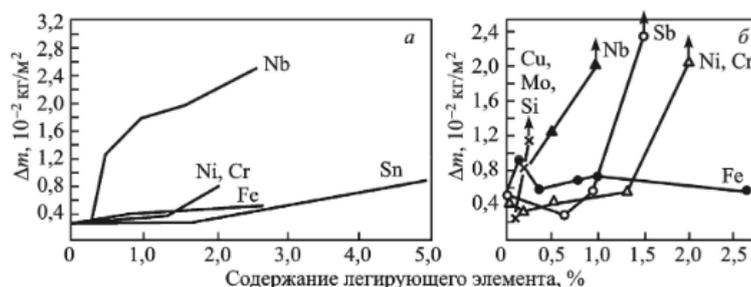


Рисунок 1.2 – Влияние легирующего элемента на коррозию Zr:

а – в воде (350 °C, 3000 ч); *б* – в паре (400 °C, 3000 ч) [3]

На рисунке 1.3 представлены отношения количества поглощения водорода сплавом к поглощению чистым цирконием для металлов, используемых при легировании циркония.

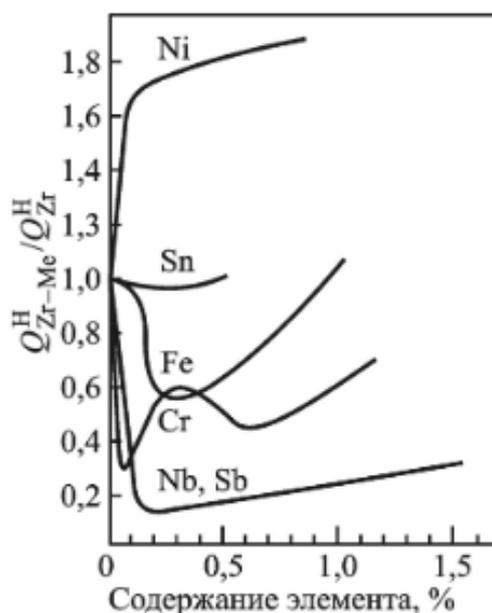


Рисунок 1.3 – Отношение количества поглощенного водорода сплавом Zr-Me к поглощенному чистым цирконием. [4]

В качестве легирующего элемента зарубежная промышленность использует олово (сплавы циркалой-2, циркалой-4). Выбор этого легирующего элемента обусловлен использованием циркония с примесью азота. Советская и российская промышленности используют иодидный чистый цирконий, что позволяет легировать ниобием.

1.4 Легирование циркония ниобием

Легирование ниобием обусловлено не только использованием чистого циркония, но и свойствами самого ниобия [3, 4]:

- высокая температура плавления (2477 °С),
- невысокая плотность,
- хорошая пластичность,
- технологичность,
- низкое сечение захвата нейтронов.

Эти свойства позволяют обрабатывать сплавы на его основе при комнатной температуре и использовать его в качестве конструкционного материала оболочки тепловыделяющего элемента. [4]

Использование ниобия в качестве легирующего элемента приводит к повышению прочностных характеристик и коррозионной стойкости циркониевых сплавов в воде за счет нейтрализации вредных примесей. Ниобий в сплаве циркония нивелирует негативное влияние со стороны кремния, никеля и железа, но практически не влияет на воздействие со стороны азота, алюминия и углерода.

Предположительно, в основе положительного влияния ниобия лежит процесс окисления в пленке ZrO_2 в присутствии ниобия в виде Nb_2O_5 или $6ZrO_2 \cdot Nb_2O_5$ [4], которые способствуют регенерации металла, путем «залечивания» дефектов пленки за счет расположения вышеуказанных систем на границах кристаллитов ZrO_2 .

Ниобий и его сплавы не подвержены высокотемпературному радиационному охрупчиванию [3]. Низкотемпературное охрупчивание замечено у ниобия технической чистоты при температуре жидкого азота и облучении нейтронами ($T_{обл} = 100\text{ }^\circ\text{C}$, $\Phi_n = 2,9 \cdot 10^{24}\text{ м}^{-2}$). Облучение при комнатной температуре выявило снижение в 6 раз относительного удлинения. Наличие примесей внедрения приводит к снижению пластичности сплавов ниобия.

1.5 Многослойные покрытия

В последнее время для защиты конструкционных материалов на основе циркония предлагается использовать многослойные защитные покрытия [27, 28]. Данные покрытия с различными кристаллическими структурами используются в качестве материалов с повышенной стойкостью к радиационным дефектам, поскольку может происходить рекомбинация вакансий и междоузлий [27–30]. Для изготовления многослойных покрытий с

повышенной толерантностью к радиационному повреждению, на практике являющихся пленочными структурами, используются металлы с различными кристаллическими структурами (ГПУ, ГЦК и ОЦК):

- системы ГЦК/ОЦК: Cu/Nb [31–37], Ag/V [38, 39], Cu/W [40], Cu/Fe [41, 42], Ni/Fe [43], Cu/V [44];
- системы ГПУ/ГПУ: Mg/Ti [45];
- системы ГПУ/ГЦК: Cu/Zr [46];
- системы ГПУ/ОЦК: Ta/Ti [47], Co/W [48], Zr/Nb [49–56].

Система ГПУ/ОЦК Zr/Nb в последние десятилетия [49–51] представляет наибольший интерес как со стороны практической направленности [52–56], так и теоретического обоснования [57] некоторых явлений, речь о которых пойдет в дальнейшем. Стоит отметить преобладание экспериментальных данных по сравнению с теоретическими расчетами, в особенности данные, полученные из первых принципов, по данной системе в совокупности с наличием в системе водорода и позитронов одновременно отсутствуют по причине сложности расчетов, проведение которых стало возможным только несколько лет назад. Несмотря на отсутствие теоретических расчетов, на основании экспериментов и накопленных данных в результате эксплуатации были установлены следующие преимущества:

- Zr и Nb используются в качестве конструкционных материалов для ядерных реакторов: сплавы Э110 и Э125, из которых изготавливаются конструкционные материалы активных зон ядерных реакторов, имеют состав Zr-1%Nb и Zr-2,5%Nb соответственно;
- Zr обладает низким сечением захвата тепловых нейтронов;
- Zr и Nb имеют высокую температуру плавления, коррозионную стойкость и прочность.

В работе [58] проводилось исследование из первых принципов механических и электронных свойств шестислойного покрытия Zr/Nb при наличии и отсутствии вакансий и атомов гелия. На рисунке 1.4 представлена расчетная суперячейка, используемая в работе [58].

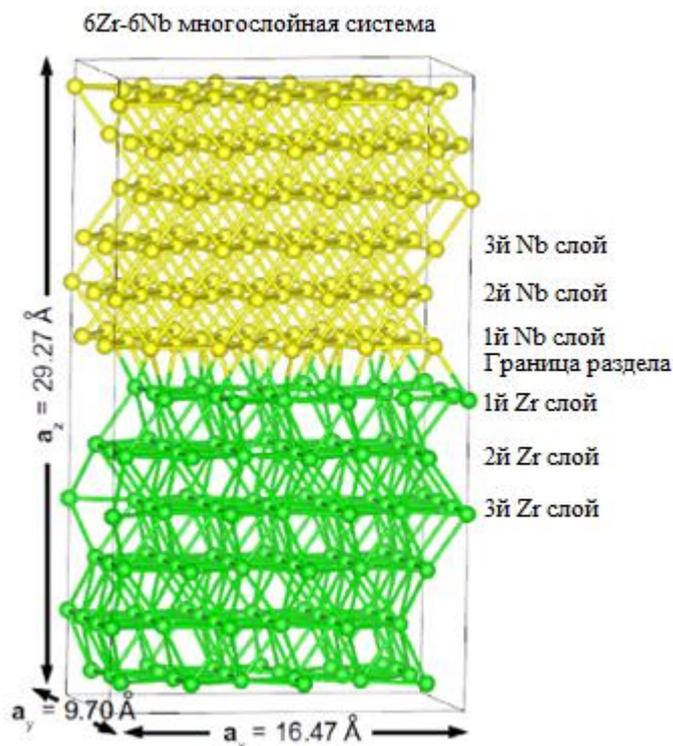


Рисунок 1.4 – Многослойная структура с шестью слоями циркония и шестью слоями ниобия.

Авторами [58] были получены следующие выводы:

- Данная слоистая структура более хрупка к изгибу за счет относительно слабой связи на границе раздела;
- Наблюдается перенос электронного заряда от слоя циркония к слою ниобия. За счет этого переноса заряда и при наличии достаточной температуры к области границы раздела движется как вакансия, так и атом гелия, причем атом гелия стремится занять положение в вакансии;
- В случае наличия в системе нескольких атомов гелия только один из них займет вакансию, остальные атомы гелия расположатся в ближайших к вакансии междоузлиях.

На данный момент активно ведутся исследования слоистых структур Zr/Nb. При этом работа ведется с вакансиями и гелием в решетке структуры, поэтому достаточно новыми являются расчеты из первых принципов, связанные с поведением водорода в данной многослойной структуре.

2 Основные приближения и методы расчета

В данной работе производились расчеты из первых принципов в пакете программ ABINIT с использованием приближений: адиабатического, одноэлектронного, зонного, решалось уравнение Кона-Шема, для описания кристаллического потенциала использовалась модель псевдопотенциала.

2.1 Приближения

Любое твердое тело является системой из $\sim 10^{23}$ частиц на кубический сантиметр, которые непрерывно взаимодействуют между собой. Этот факт делает расчет энергетических уровней и волновых функций твердого тела без использования упрощающих предположений практически невозможным при современном развитии вычислительной техники [59]. Использование приближений позволяет частично нивелировать данную проблему. Остановимся на каждом приближении подробнее.

2.1.1 Адиабатическое приближение

Адиабатическое приближение или приближение Борна-Оппенгеймера [60] осуществляется через разделение системы на ядра, имеющие большую массу и положительный заряд, и электроны с малой массой и отрицательным зарядом. Существенная массовая разница приводит к значимым различиям между скоростями ядра и электронов, что позволяет с хорошей точностью рассматривать ядра атомов в состоянии покоя относительно движущихся вокруг них электронов. В результате такого приближения задача нахождения волновой функции системы разделяется на две взаимосвязанные подзадачи поиска собственных значений отдельно для ядер и для электронов с учетом их взаимодействия между собой. Первая подзадача состоит в определении энергии электронной подсистемы E_n при фиксированных в положениях покоя ядрах. В уравнении Шредингера эти энергии будут использоваться в виде потенциальной энергии для ядер.

В случае, если собственные функции полного гамильтониана \hat{H}_t задаются в виде

$$\Psi(\{\vec{R}\}, \{\vec{r}\}) = \chi_{n,\nu}(\{\vec{R}\}) \Psi_n(\{\vec{R}\}, \{\vec{r}\}), \quad (2.1)$$

то в итоге получим два уравнения:

$$\hat{H}_e \Psi_n(\{\vec{R}\}, \{\vec{r}\}) = (\hat{T}_e + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{eL}) \Psi_n(\{\vec{R}\}, \{\vec{r}\}) = E_n \Psi_n(\{\vec{R}\}, \{\vec{r}\}), \quad (2.2)$$

$$\hat{H}_L \chi_{n,\nu}(\{\vec{R}\}) = (\hat{T}_L + \hat{V}_{LL}) \chi_{n,\nu}(\{\vec{R}\}) = E_{n,\nu} \chi_{n,\nu}(\{\vec{R}\}), \quad (2.3)$$

где индекс n – квантовые числа для описания состояний электронов,

индекс ν – квантовые числа для описания состояния системы ядер.

Использование адиабатического приближения позволяет разделить решение для электронов отдельно от ядер, что по-прежнему представляет собой достаточно сложную задачу.

2.1.2 Одноэлектронное приближение

Для упрощения задачи расчетов была разработана теория функционала электронной плотности (ФЭП), которая заменяет многоэлектронную волновую функцию, зависящую от 3 пространственных координат на каждый электрон, на электронную плотность, являющуюся функцией только трёх пространственных координат.

Метод ФЭП используется совместно с формализмом Кона–Шэма: в рамках которого решается задача о независимых электронах в некотором эффективном потенциале, включающего статический потенциал атомных ядер и учет кулоновских эффектов (обменное взаимодействие и электронную корреляцию), представляющих собой наибольшую сложность в методе.

Одним из способов упрощения является приближение локальной плотности (ПЛП): расчёт обменной энергии для пространственно-однородного электронного газа в рамках модели Томаса–Ферми. Результатом расчета будет энергия корреляции электронного газа.

Другим способом является обобщенное градиентное приближение (ОГП, Generalized Gradient Approximation), в рамках которого рассматривается

обменно-корреляционный функционал, зависящий как от электронной плотности, так и от ее первой пространственной производной.

В теории функционала плотности полная энергия $E[\{\mathbf{R}\}, \{\psi_i\}]$ системы взаимодействующих атомов и электронов является функционалом от атомных положений $\{\mathbf{R}\}$ и электронной плотности $n(\mathbf{r})$.

Плотность электронов можно выразить через занятые одночастичные орбитали $\psi_i(\mathbf{r})$:

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{i(occ)}^M |\psi_i(\mathbf{r})|^2 \quad (2.4)$$

где i – индекс состояний. Если функционал полной энергии $E[\{\mathbf{R}\}, \{\psi_i\}]$ минимизирован с учетом электронных степеней свободы $\{\psi_i\}$, мы восстанавливаем поверхность Борна-Оппенгеймера $\Phi[\{\mathbf{R}\}]$:

$$\Phi[\{\mathbf{R}\}] = \min_{\{\psi_i\}} E[\{\mathbf{R}\}, \{\psi_i\}], \quad (2.5)$$

на которой находятся атомы. Производная $\Phi[\{\mathbf{R}\}]$ по атомному положению \mathbf{R}^μ дает силу \mathbf{F}^μ ,

$$\mathbf{F}^\mu = -\nabla_{\mathbf{R}^\mu} \Phi[\{\mathbf{R}\}], \quad (2.6)$$

которая воздействует на атом μ , связывающий электронную структуру со структурной оптимизацией и расчетами молекулярной динамики. Энергетический функционал делится на несколько слагаемых:

$$E[\{\mathbf{R}\}, \{\psi_i\}] = E_{kin}[\{\psi_i\}] + E_H[\{\psi_i\}] + E_{xc}[\{\psi_i\}] + E_{ext}[\{\mathbf{R}\}, \{\psi_i\}] + E_{ion}[\{\mathbf{R}\}], \quad (2.7)$$

где E_{kin} – кинетическая энергия невзаимодействующих электронов,

E_H – энергия Хартри, то есть классическая кулоновская энергия электронов,

E_{xc} – энергия обменной корреляции, которая содержит члены, вытекающие из принципа Паули, которая обусловлена отталкивающим кулоновским электрон – электронным взаимодействием и вкладом в кинетическую энергию взаимодействующих электронов. Например, в приближении локальной плотности $E_{xc}[n]$ записывается в виде $\int d\mathbf{r} n(\mathbf{r}) \varepsilon_{xc}(n(\mathbf{r}))$. E_{ext} – энергия взаимодействия электронов с ионами, которая описывается потенциалом $1/r$

как в полностью электронных методах, так и в псевдопотенциалах, E_{ion} – классическая кулоновская энергия ионов. [61]

Описание обменно-корреляционных эффектов в ПЛП и в ОГП абсолютно непригодно для тех систем и подсистем, где начальное приближение невзаимодействующего электронного газа с медленно меняющейся плотностью принципиально некорректно. Примерами таких систем являются: электронный вигнеровский кристалл [62]; системы с преобладанием ван-дер-ваальсовых (т.е. поляризационных) взаимодействий неперекрывающихся подсистем; системы, имеющие границы, где хвосты электронных плотностей стремятся к нулю в вакууме вблизи поверхностей [63].

2.1.3 Уравнения Кона-Шема

Для получения одночастичных волновых функций $\psi_i(\mathbf{r})$ проводится минимизация полной энергии с учетом нормировки

$$\int d\mathbf{r} |\psi_i(\mathbf{r})|^2 = 1, \quad (2.8)$$

что приводит к уравнениям Кона-Шема и нахождению собственных значений ε_i для собственных функций $\psi_i(\mathbf{r})$:

$$\hat{H}[n]\psi_i[n] = \varepsilon_i[n]\psi_i[n], \quad (2.9)$$

где все величины зависят от электронной плотности n .

В уравнении (2.7) гамильтониан \hat{H} можно представить в виде суммы соответствующих членов. Это позволяет искать собственное значение в виде:

$$(\hat{T}_0 + \hat{V}_{ext} + \hat{V}_H + \hat{V}_{xc})\psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i\psi_i(\mathbf{r}), \quad (2.10)$$

В представлении реального пространства члены по отдельности представляют собой:

– кинетическую энергию: $\hat{T}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\mathbf{r}}$ (2.11)

– внешний потенциал: $V_{ext}(\{\mathbf{R}\}, \mathbf{r}) = \sum_{\mu} \frac{e^2 Z^{\mu}}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}^{\mu}|}$ (2.12)

– потенциал Хатри: $\Delta_{\mathbf{r}} V_H(\mathbf{r}) = 4\pi e^2 n(\mathbf{r})$ (2.13)

– обменно-корреляционный–потенциал (ПЛП):

$$V_{xc}(\mathbf{r}) = \frac{\delta}{\delta n(\mathbf{r})} \int d\mathbf{r} n(\mathbf{r}) \varepsilon_{xc}(n(\mathbf{r})) \quad (2.14)$$

Метод псевдопотенциала, о котором речь пойдет в дальнейшем, позволяет заменить \hat{V}_{ext} на \hat{V}_{ps} для каждого атома μ .

Внешний потенциал $\hat{V}_{ext}[\{\mathbf{R}\}]$, а следовательно гамильтониан $\hat{H}[\{\mathbf{R}\}]$ и волновые функции $\psi_i(\{\mathbf{R}\}, \mathbf{r})$ явно зависят от положения $\{\mathbf{R}\}$ всех атомов, которые меняются на определенных шагах для оптимизации структуры атома или каждого временного шага алгоритма молекулярной динамики. После того, как условие самосогласованности для электронной плотности выполнено, положения атомов перемещаются с помощью временного шага молекулярной статики или молекулярной динамики, $\{\mathbf{R}(t)\} \rightarrow \{\mathbf{R}(t + \Delta t)\}$. Таким образом, для N_{MD} шагов времени молекулы проблема собственных значений должна быть решена $N_{MD}N_{iter}$ раз. Эти аргументы предполагают конкретную структуру цикла типичного метода первых принципов и конкретную последовательность вычисления различных элементов. Схема показана на рисунке 2.1.

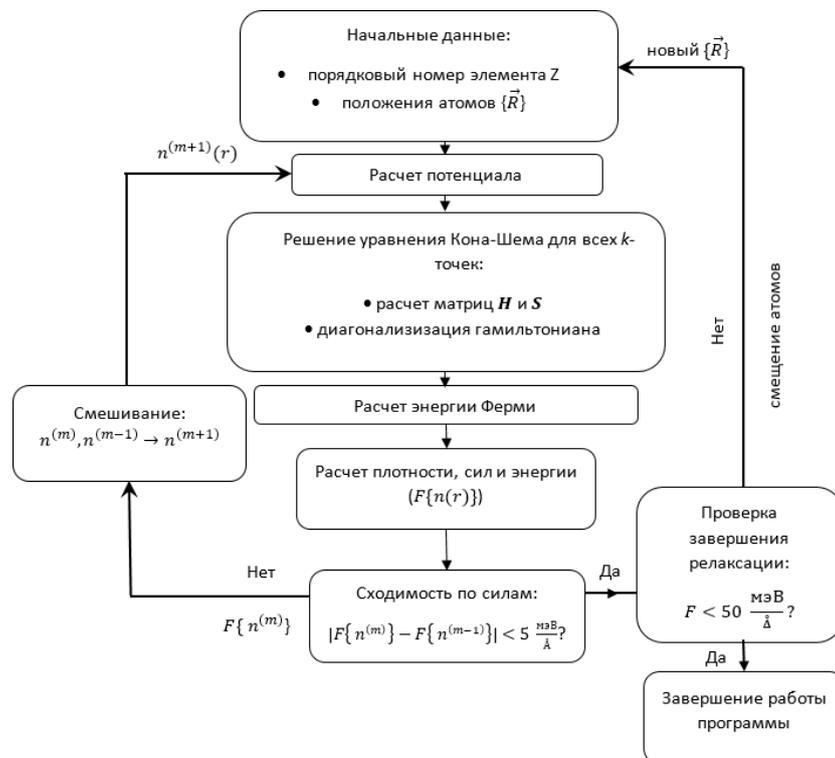


Рисунок 2.1 – Блок-схема для самосогласованного расчёта функционала электронной плотности.

Типичные коды используют ППП обменные корреляционные потенциалы и потенциалы Хедин и Лундквист или Воско, Вилк, и Насейр, или ОГП функционалы Перью–Бурке–Ернцерхофа, в качестве аналитических выражений плотности и их производных в случае ОГП.

2.1.4 Зонное приближение

Помимо адиабатического и одноэлектронного приближений зачастую используют зонное, которое заключается в выделении некоторой элементарной ячейки. Для этой ячейки составляется и решается уравнение Шредингера с использованием кристаллического потенциала. В рамках зонного приближения был разработаны на текущее время только два подхода для вычисления волновых функций электронов. Данные подходы эквивалентны, но способны выдавать несколько отличающиеся результаты.

Первый подход; искомые волновые функции раскладываются по полной системе блоховских функций; ищутся коэффициенты разложения исходя из условия удовлетворения искомым функциям соответствующего им уравнения Шредингера [64]. На основании теоремы Блоха строится волновая функция $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, которая при рассмотрении периодического потенциального поля имеет следующий вид:

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.15)$$

где $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ – периодическая функция, изменяющаяся согласно заданному периоду кристаллического потенциала, индекс \mathbf{k} помогает классифицировать состояния, соответствуя волновому вектору \mathbf{k} электронов в кристалле.

На основании первого подхода были разработаны методы расчета зонной структуры: метод псевдопотенциала, метод сильно связанных электронов и метод ортогонализированных плоских волн.

Второй подход: разложение волновых функций электронов в решетке по полной системе функций, которые удовлетворяют соответствующему уравнению Шредингера для выделенной элементарной ячейки. Затем устанавливают требование о соответствии искомым функциям граничным

условиям, на основании чего ищутся коэффициенты разложения. К этому подходу относятся метод ячеек и метод присоединенных плоских волн.

Выбор метода зависит в первую очередь от мощности вычислительных машин и условий симметрии: следует использовать системы базисных функций, которой соответствует наименьшее число членов разложения, описывающих исследуемую функцию.

2.2 Метод псевдопотенциала

Псевдопотенциал – это слабый, по сравнению с истинным, эффективный потенциал твердого тела, дающий в интервале энергии валентных электронов правильный электронный спектр. Речь может идти о любом нужном участке спектра. Наибольший практический интерес представляет область энергий валентных состояний.

Псевдопотенциал можно получить либо в результате аналитического преобразования из первых принципов (аналитические псевдопотенциалы), либо с помощью одного или нескольких подгоночных параметров, воспроизводимых на основе экспериментальных данных (модельные псевдопотенциалы). В случае металлов интерес представляет узкий участок спектра вблизи уровня Ферми. Только такие состояния определяют термодинамику металлов, их кинетические свойства на низких частотах, фононные спектры и т.д [65].

Псевдоволновое уравнение получается в результате специального преобразования уравнения Шредингера: собственные значения энергии неизменны, собственные волновые функции изменяются.

Таким образом, идея модельного псевдопотенциала заключается в замене потенциала внутри сферы радиуса R_M модельным, обладающим теми же свойствами, что и истинный потенциал по характеру воздействия на внешнюю частицу с заданной энергией (рисунок 2.2).

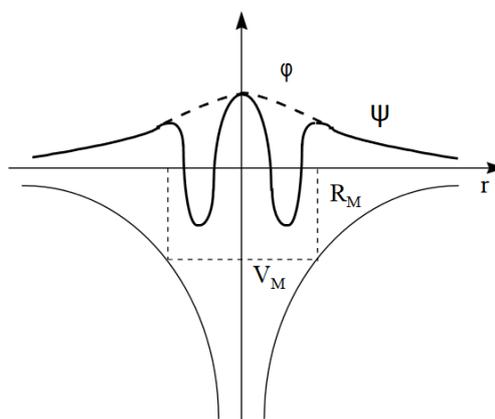


Рисунок 2.2 – Модельный псевдопотенциал V_M и модельная псевдоволновая функция ϕ в сравнении с «истинным» потенциалом V и «истинной» волновой функцией ψ

В теории модельных псевдопотенциалов всегда строят псевдопотенциалы изолированных ионов. Но, т.к. ортогонализация к остовным функциям нарушает самосогласованное распределение заряда, то после ортогонализации надо строить экранирующий потенциал твердого тела, т.е. потенциал, создаваемый электронами свободного электронного газа после помещения в этот газ решетки атомов или ионов [65].

Построенный псевдопотенциал должен воспроизводить как собственные значения энергии, так и волновую функцию во внешней / неостовой области. Для проверки этого требования необходимо знание истинной волновой функции, которую можно получить задав электронную конфигурацию атома и вычислив путем численного интегрирования с использованием подходящего программного обеспечения соответствующее ей уравнение Шредингера. Эволюция метода псевдопотенциала привела к появлению возможности вычисления полной энергии металлов и полупроводниковых материалов, что послужило определяющим направлением в теории псевдопотенциала [65].

В данном случае сначала строятся не псевдопотенциалы, а псевдоволновые функции со следующими характеристиками:

- отсутствие осцилляций в остовной области,

- гладкие,
- большая точность в совпадении с истинными волновыми функциями во внешней области.

При этом проводить ортогонализацию по схеме Филлипса-Клейнмана в случае использования псевдоволновых функций не требуется. Итогом расчетов являются псевдопотенциалы, не зависящие от энергии. Это обстоятельство делает первопринципные псевдопотенциалы удобными в самосогласованных расчетах.

Теория псевдопотенциала в настоящее время – вполне самостоятельный раздел физики твердого тела. Псевдопотенциалы широко применяются для расчетов электронных и фононных спектров металлов и полупроводников, для анализа фазовых превращений в сплавах, для предсказания стабильности кристаллических структур [65].

Для того, чтобы воспользоваться преимуществами псевдопотенциального подхода, необходимо иметь информацию об «истинных» потенциалах и волновых функций твердых тел, являющихся предметом исследования. При этом следует учитывать, что отдельные факторы, определяющие в комплексе взаимодействий окончательный потенциал изолированного атома, в твердом теле действуют иначе и дают в результате, так называемый, «кристаллический» потенциал. Таким образом, во-первых, «кристаллический» потенциал не является простой суперпозицией потенциалов изолированных атомов. Во-вторых, сам «кристаллический» потенциал может быть получен только в результате самосогласованного решения уравнения Шредингера попутно с нахождением «истинных» волновых функций твердого тела. Но, если такая задача разрешима для кристаллов, где эффективно используется их симметрия, то для неупорядоченных твердых тел ситуация выглядит безнадежной.

2.3 Методология расчета профилей диффузионных барьеров

В текущей работе рассматривался термически активируемый механизм диффузии водорода. Чтобы рассчитать энергии, которыми должны обладать атомы водорода для совершения диффузионного скачка между двумя междоузлиями, было сделано предположение о прямолинейности скачка. Высоты барьеров диффузии E_{dif} определялись как разница между полными энергиями элементарной ячейки с атомом водорода, расположенным на линии смещения E_i и с атомом водорода в исходном междоузлии E_0 :

$$E_{dif} = E_i - E_0. \quad (2.16)$$

Во время диффузионного скачка атомы циркония фиксировались в положениях случая расположения атома водорода в начальном междоузлии. Это исходит от предположения преобладания времени скачка над временем релаксации решетки при рассматриваемых температурах.

В твердом растворе $Zr_{16}H$ можно выделить пять возможных неэквивалентных друг другу диффузионных барьеров, представленных на рисунке 2.3. В текущей работе переходы O_1-O_3 и T_1-T_3 не рассматривались, так как согласно работе [66] эти переходы имеют наибольшую длину скачка и наибольшую энергию диффузионного барьера, из чего следует вывод о малом влиянии данных барьеров на расчетные коэффициенты диффузии.

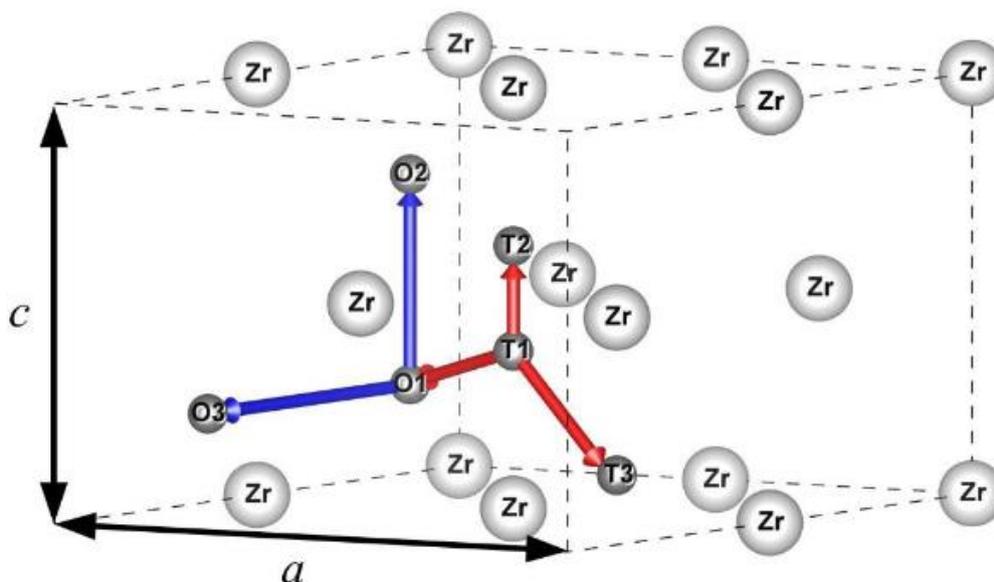


Рисунок 2.3 – Неэквивалентные направления диффузионных скачков: атом циркония – светлый кружок, атом водорода – черный кружок; О и Т – окта- и тетраэдрические междуузлия, соответственно.

a и c – параметры расчетной ячейки.

Согласно [67] коэффициент диффузии зависит от параметров диффузионных скачков и температуры T как

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E_a}{k_B T}\right), \quad (2.17)$$

где E_a – высота диффузионного барьера;

k_B – постоянная Больцмана;

D_0 – предэкспоненциальный множитель, определяемый по формуле

$$D_0 = \frac{n}{6} d^2 \frac{\prod_{i=1}^{3N} \nu_i}{\prod_{i=1}^{3N-1} \nu_i^*}, \quad (2.18)$$

где $n/6$ – геометрический фактор, учитывающий количество n возможных однотипных переходов из рассматриваемого междуузлия;

d – длина диффузионного скачка;

ν_i и ν_i^* – частоты осцилляций атомов в рассматриваемой ячейки, состоящей из N атомов, при размещении диффундирующего атома в междуузлии и седловой точке, соответственно.

Расчеты частот осцилляций атома водорода в междоузлии при температурах 300-800 К показали сопоставимость между энергией нулевых колебаний $h\nu/2$ с величиной kT . Это позволяет, согласно [68], рассчитывать коэффициент диффузии водорода в решетке металла как

$$D = \frac{n}{6} d^2 \frac{k_B T}{h} \exp\left(-\frac{E_a - \frac{h\nu}{2}}{k_B T}\right). \quad (2.19)$$

В работе [66] рассмотрен ситуация скачка, состоящего из двух параллельных друг другу скачков. Коэффициент диффузии в таком случае считается как

$$D = D_1 + D_2. \quad (2.20)$$

В случае осуществления скачка за счет последовательных скачков используется формула

$$\frac{1}{D} = \frac{1}{D_1} + \frac{1}{D_2}. \quad (2.21)$$

Суммарный коэффициент диффузии можно рассчитать, если в качестве элементарного перемещения атома водорода в решетке циркония рассматривать перемещение на величину постоянной решетки в результате диффузии аналогичное начальному междоузлию, находящегося в соседней элементарной ячейке. Миграции атомов водорода через окта- и тетраэдрические междоузлия независимы друг от друга и осуществляются параллельно, поэтому суммарный коэффициент диффузии определяется формулой

$$D = D^{O-O} + D^{T-T}, \quad (2.22)$$

где D^{O-O} (D^{T-T}) – коэффициент диффузии, характеризующий перемещение из одного октаэдрического (тетраэдрического) междоузлия в соответствующее другое междоузлие в соседней элементарной ячейке (рисунок 2.4). Коэффициенты диффузии будут различны в базальной плоскости и вдоль гексагональной оси c . На основании рисунка 2.4 коэффициенты диффузии как в базальной плоскости (D^{O-O}_{xy} и D^{T-T}_{xy}), так и вдоль гексагональной оси c (D^{O-O}_z и D^{T-T}_z) могут быть рассчитаны по формулам:

$$D^{O-O}_z = \frac{1}{2} \left(D_{O_1O_2} + \frac{3 \cdot D_{T_1T_2} \cdot D_{T_1O_1} \cdot D_{O_1T_1}}{D_{T_1O_1} \cdot D_{O_1T_1} + D_{T_1T_2} \cdot D_{O_1T_1} + D_{T_1T_2} \cdot D_{T_1O_1}} \right) \quad (2.23)$$

$$D^{T-T}_z = \left[\frac{1}{D_{T_1T_2}} + \left(\frac{3 \cdot D_{O_1O_2} \cdot D_{T_1O_1} \cdot D_{O_1T_1}}{D_{T_1O_1} \cdot D_{O_1T_1} + D_{O_1O_2} \cdot D_{O_1T_1} + D_{O_1O_2} \cdot D_{T_1O_1}} \right)^{-1} \right]^{-1} \quad (2.24)$$

$$D^{O-O}_{xy} = 2 \frac{D_{T_1O_1} \cdot D_{O_1T_1}}{D_{T_1O_1} + D_{O_1T_1}} \quad (2.25)$$

$$D^{T-T}_{xy} = \frac{D_{T_1O_1} \cdot D_{O_1T_1}}{D_{T_1O_1} + D_{O_1T_1}} \quad (2.26)$$

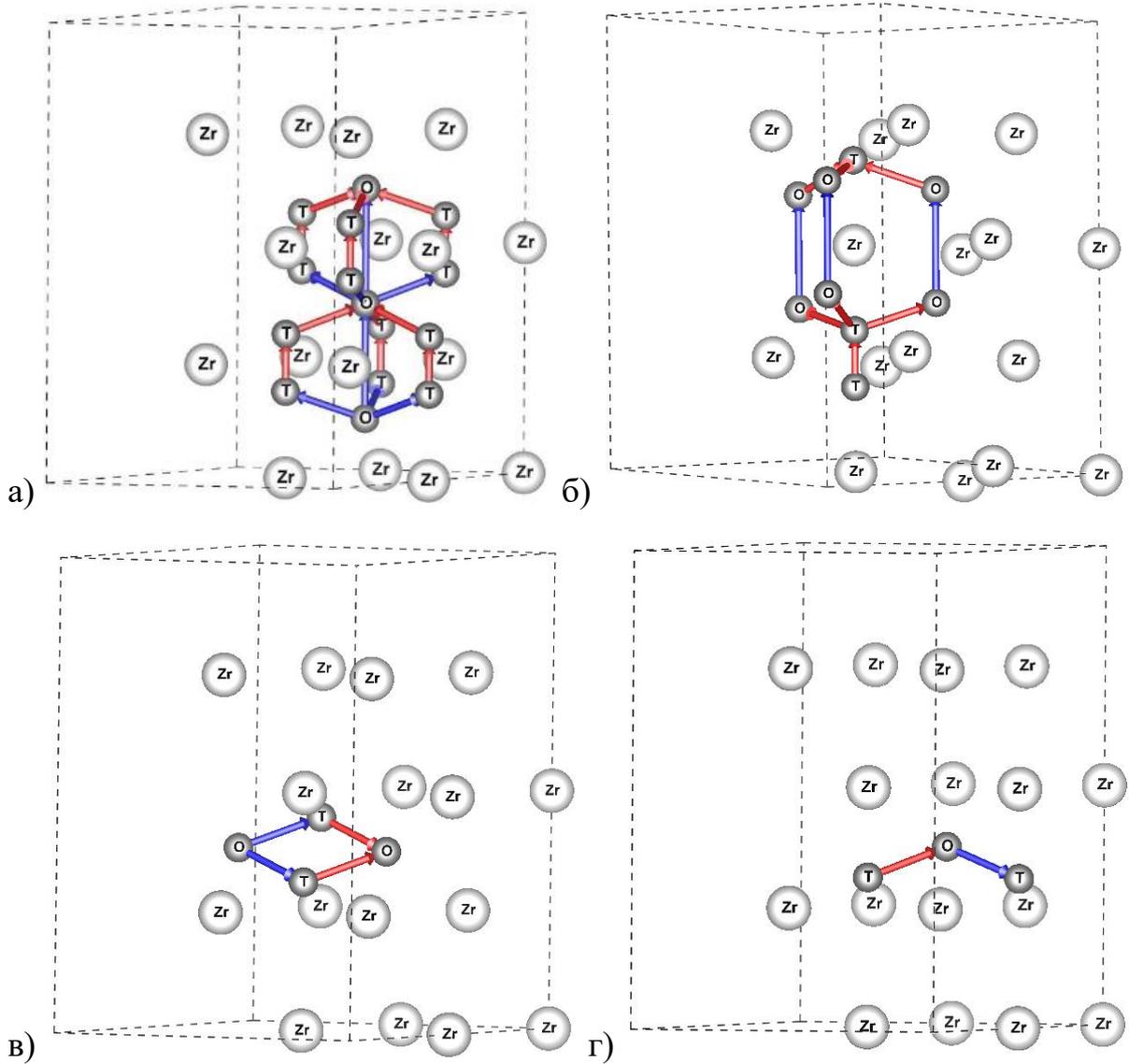


Рисунок 2.4 – Комбинации диффузионных скачков атома водорода в ГПУ решетке циркония, рассмотренные в работе для расчета коэффициентов диффузии D^{O-O}_z (а), D^{T-T}_z (б), D^{O-O}_{xy} (в), D^{T-T}_{xy} (г).

2.4 Метод упругой ленты

Одной из важнейших характеристик, определяющих эволюцию системы, является значение диффузионных барьеров перехода между квазиравновесными состояниями. Предполагается, что при таком переходе система следует по диффузионному пути с наименьшей энергией и для перехода в конечное состояние ей необходимо преодолеть энергетический барьер, равный разности между энергией в седловой точке и энергией в начальном состоянии. В данной работе для поиска энергетических барьеров использовался метод упругой ленты (МУЛ). Важным преимуществом данного метода является то, что рассматривается одновременно весь путь движения системы из начального положения в конечное. При этом система не может сильно отклониться от пути с наименьшей энергией.

Для поиска пути с наименьшей энергией в рамках МУЛ применяется следующая процедура. В первую очередь находятся начальное и конечное состояние системы с помощью метода молекулярной статики. После этого каждый из отрезков, соединяющих начальное и конечное положение одного и того же атома, разбиваются на N частей. В результате получается $N+1$ состояние каждого атома: начальное, $N-1$ промежуточных и конечное. Совокупность атомов в каждом из $N+1$ состояний называют изображениями системы. Соседние изображения каждого атома соединяют воображаемыми пружинами. После этого производится структурная релаксация синхронно всех копий системы, причем начальное и конечное положение больше не изменяются. Если вычислять диффузионный барьер таким образом, то копии будут преимущественно располагаться в областях с меньшей энергией. В результате плохо аппроксимируется седловая точка и точность вычисления диффузионного барьера падает. Чтобы избежать этого, силы, действующие на атомы, проецируются на траекторию следующим образом. Рассмотрим копию системы с номером k . Каждый атом связан воображаемыми пружинками с двумя своими состояниями в соседних копиях системы. Соединим атом в $k-1$

и $k+1$ изображениях вектором \mathbf{AB} (Рисунок 2.5). На частицу действует равнодействующая сила \mathbf{F} межатомных сил взаимодействия с другими атомами данной копии системы и сил упругости со стороны пружин.

Для того, чтобы избежать скопления копий системы в областях с меньшей энергией, проекцию равнодействующей силы на направление \mathbf{AB} (\mathbf{F}_{\parallel}) приравняем к нулю. В результате атом движется под действием только перпендикулярной к \mathbf{AB} компоненте силы \mathbf{F} (на рисунке 2.5 это сила \mathbf{F}_{\perp}). После окончания процесса структурной релаксации всех изображений системы строится зависимость её потенциальной энергии без учета упругой энергии воображаемых пружин от номера изображения или от координаты движущегося атома, находится энергия системы в седловой точке и вычисляется величина диффузионного барьера.

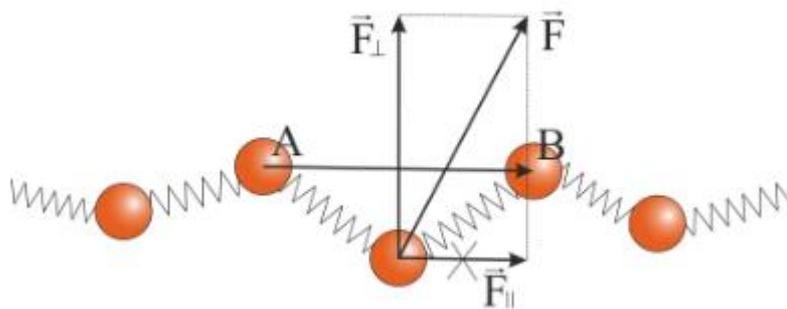


Рисунок 2.5 – Положения одного и того же атома в пяти соседних копиях системы, связывающие их воображаемые пружины и действующие на атом в копии k силы.

3 Водород на границе раздела многослойного покрытия Zr/Nb

3.1 Релаксация решеток циркония и ниобия вблизи границы раздела

Все расчеты в работе выполнялись в рамках теории функционала электронной плотности с использованием оптимизированного сохраняющего норму псевдопотенциала Вандербиля в пакете программ ABINIT [69, 70]. Для описания обменных и корреляционных эффектов использовалось приближение обобщенного градиента в форме Пердью-Бурке-Эрнцерхофа [71]. Проведена оптимизация значений параметров кристаллической решетки и релаксация положений атомов чистых циркония и ниобия, а также твердых растворов Zr–H и Nb–H при концентрации водорода ~ 3 ат.% (рисунок 3.1). На каждой итерации самосогласования собственные значения гамильтониана рассчитывались в сетке k -точек $3 \times 3 \times 1$ всей зоны Бриллюэна для гексагональных структур и $3 \times 3 \times 3$ для кубических структур. Энергия обрезания при разложении волновой функции по базису плоских волн, составила 820 эВ. Расчетные параметры решеток чистых Zr и Nb составили $a_{\text{Zr}} = 3,228 \text{ \AA}$, $c_{\text{Zr}} = 5,195 \text{ \AA}$ и $a_{\text{Nb}} = 3,292 \text{ \AA}$, что хорошо согласуется с результатами эксперимента [11, 13, 14, 16, 20, 23, 25, 26] и других теоретических работ [12, 15, 17-19, 21, 22, 24].

В дальнейшем были рассмотрены наноразмерные металлические структуры Zr/Nb с полукогерентной границей раздела между металлическими слоями ГПУ циркония и ОЦК ниобия, образованная наложением поверхностей Zr (002) и Nb (111). Расчетная суперячейка для многослойной структуры $\text{Zr}_{36}\text{Nb}_{36}$ состоит из 4 атомных слоев циркония и 9 атомных слоев ниобия (рисунок 3.2a). Чтобы сформировать суперячейку пленки $\text{Zr}_{36}\text{Nb}_{36}$, теоретический параметр решетки a_{Nb} чистого Nb был уменьшен, а параметры решетки a_{Zr} и c_{Zr} чистого Zr были увеличены так, чтобы полная энергия суперячейки стала минимальной. В результате в суперячейке слой Zr имеет параметры решетки $a = 3,165 \text{ \AA}$ и $c = 5,160 \text{ \AA}$, а слой ниобия имеет параметр

$a = 3,341 \text{ \AA}$. Релаксация атомов металлов проводилась в ближайших к границе раздела 2 атомных слоя циркония и 4 атомных слоя ниобия. Смещение атомов металлов из идеальных положений под действием сил и напряжений со стороны других атомов в результате процедуры релаксации проводилось до достижения значений сил, действующих на атомы, менее 50 мэВ/\AA . Остальные атомные слои были зафиксированы. Результаты процедуры релаксации представлены на рисунке 3.2б.

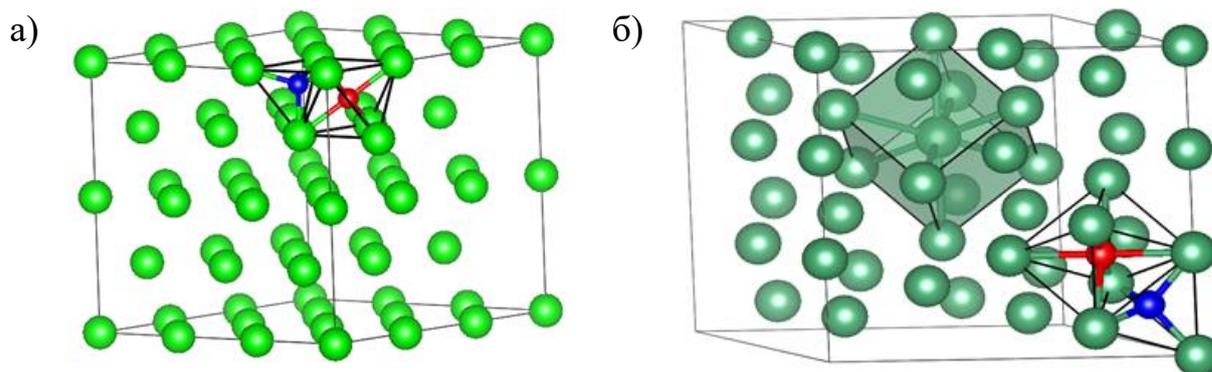


Рисунок 3.1 – Расчетные суперячейки ГПУ циркония (а) и ниобия (б). Синими кружками показаны тетраэдрические, красным – октаэдрические междоузлия. На панели б) также показана классическая ОЦК ячейка.

В дальнейшем на основании полученных результатов была составлена суперячейка для многослойной пленки $\text{Zr}_{63}\text{Nb}_{40}$ с 7 атомными слоями циркония и 10 атомными слоями ниобия (рисунок 3.2в). Увеличение количества атомных слоев металлов в суперячейке позволило провести релаксацию уже в 3 атомных слоях циркония и 5 атомных слоях ниобия вблизи границы раздела и установить влияние толщины слоя циркония на энергию связи водорода в пленке.

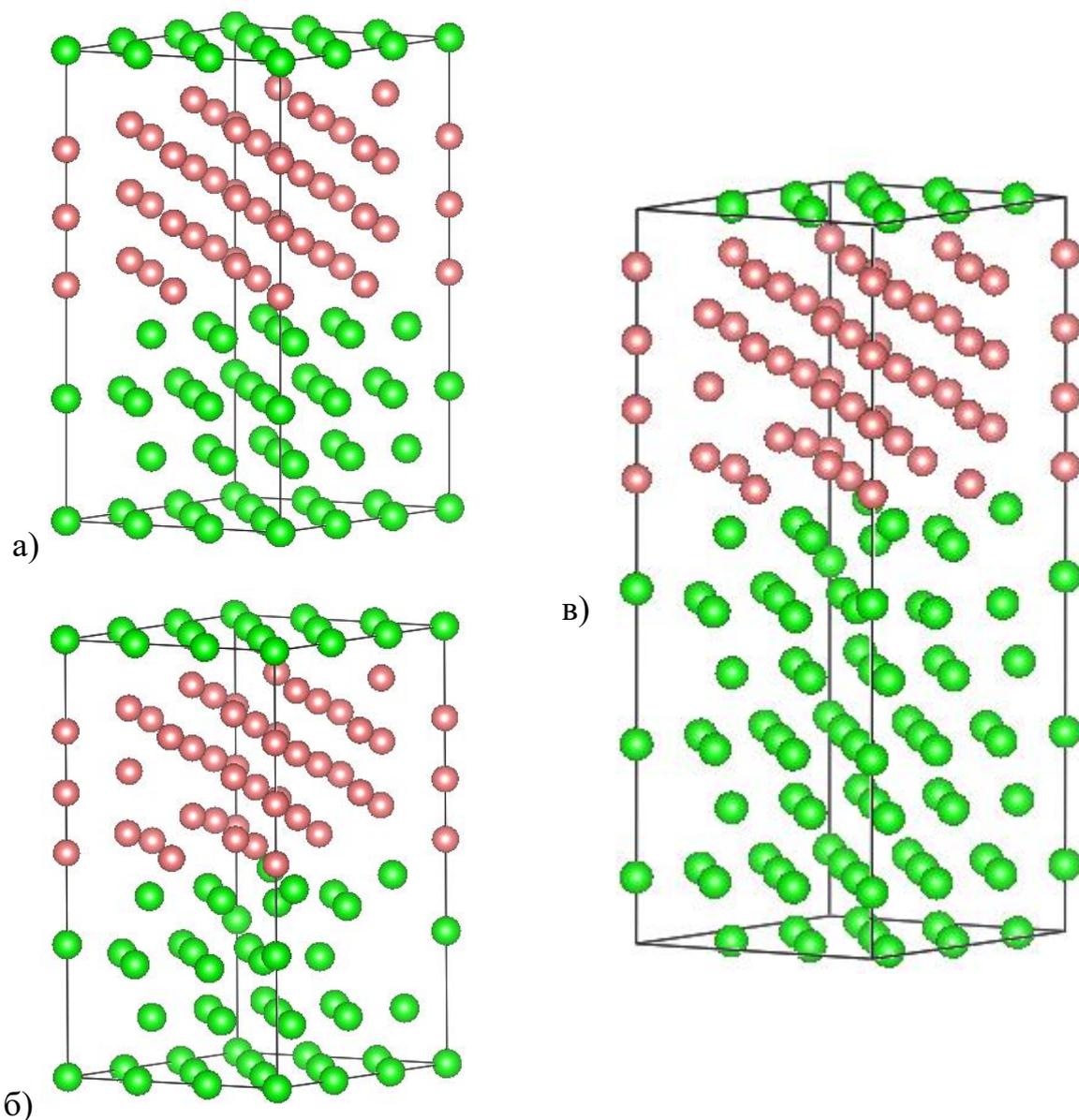


Рисунок 3.2 – Расчетные суперячейки пленки: а) $Zr_{36}Nb_{36}$, с положениями атомов металлов в узлах их идеальных решеток; б) $Zr_{36}Nb_{36}$ с отрелаксированными положениями атомов металлов вблизи границы раздела; в) $Zr_{63}Nb_{40}$ с отрелаксированными положениями атомов металлов вблизи границы раздела.

Зеленым показаны атомы циркония, розовым – ниобия.

Следующей задачей стал расчёт толщины границы раздела для обеих структур. На основании серии расчетов установлено, что в структуре $Zr_{36}Nb_{36}$ энергетически выгодным будет толщина границы раздела в $2,209 \text{ \AA}$ (Рисунок 3.3а). В работе [72] было получено значение в $2,482 \text{ \AA}$, что неплохо

согласуется с результатами нашего расчета при условии, что в текущей работе рассматривается полукогерентная граница раздела, вместо некогерентной. Для определения толщины границы раздела в структуре $Zr_{63}Nb_{40}$ было решено в качестве нулевого значения энергии взять значение при толщине границы раздела, рассчитанной для структуры $Zr_{36}Nb_{36}$. Наиболее энергетически выгодной оказалась толщина в 2,215 Å (Рисунок 3.3б). Данная толщина использовалась в дальнейших расчётах.

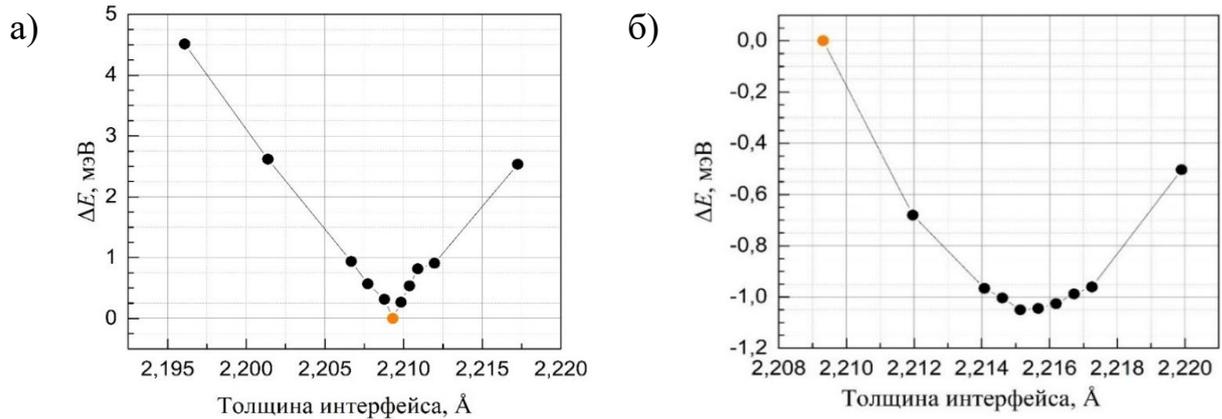


Рисунок 3.3 – Зависимость полной энергии системы от толщины интерфейса:

а) для структуры $Zr_{36}Nb_{36}$; б) для структуры $Zr_{63}Nb_{40}$.

3.2 Энергия связи атома водорода

Следующим шагом является расчет энергии связи атома водорода в чистых металлах. На рисунке 3.4 представлены положения водорода в решетках чистого циркония и ниобия, соответственно. Значения энергии были рассчитаны по формулам 3.1-3.3 в зависимости от рассматриваемой системы.

$$E_{\text{связи}} = E(Zr_{36}) + \frac{E(H_2)}{2} - E(Zr_{36}H) \quad (3.1)$$

$$E_{\text{связи}} = E(Nb_{36}) + \frac{E(H_2)}{2} - E(Nb_{36}H) \quad (3.2)$$

$$E_{\text{связи}} = E(Zr_xNb_y) + \frac{E(H_2)}{2} - E(Zr_xNb_yH) \quad (3.3)$$

где $E(Zr_{36})$ и $E(Nb_{36})$ – полная энергия чистых циркония и ниобия, соответственно,

$E(H_2)$ – полная энергия молекулы водорода,

$E(Zr_{36}H)$, $E(Nb_{36}H)$ – полная энергия систем $Zr_{36}H$ и $Nb_{36}H$, соответственно,

$E(Zr_xNb_y)$ и $E(Zr_xNb_yH)$ – полная энергия системы Zr_xNb_y и Zr_xNb_yH , соответственно,

x и y – количество атомов циркония и ниобия, соответственно.

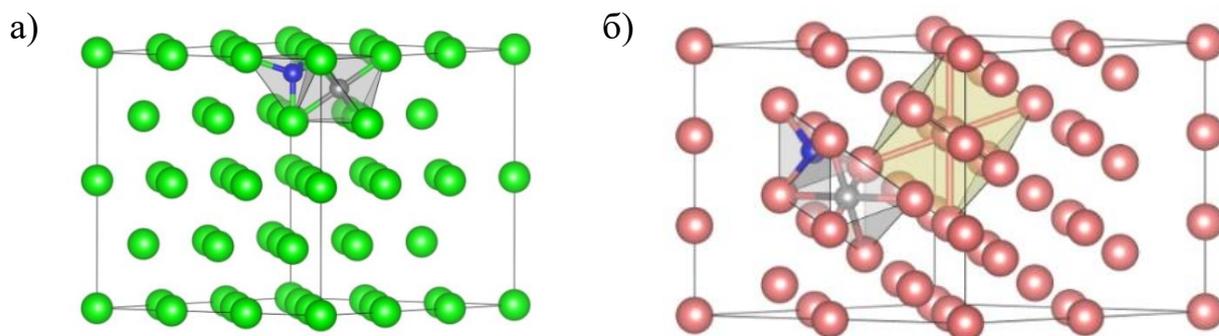


Рисунок 3.4 – Междоузлия в решетках а) циркония и б) ниобия. Синим цветом показаны тетраэдрические, серым – октаэдрические междоузлия.

В таблице 3.1 представлены результаты расчетов энергии связи водорода в каждом из рассмотренных междоузлий. Также приведены значения параметров решетки для данных систем. Из таблицы 3.1 можно сделать вывод о большей энергии связи водорода в решетке циркония, чем в решетке ниобия. Следует отметить, что в случае расположения атома водорода в октаэдрическом междоузлии решетки ниобия, даже небольшие его смещения из центра этого междоузлия приводят к появлению силы, смещающей атом H в ближайшее тетраэдрическое междоузлие. Это указывает на нестабильность положения водорода в ниобии. Таким образом, тетраэдрические междоузлия более выгодны, чем октаэдрические в решетках обоих металлах.

Таблица 3.1 – Энергия связи водорода в металлах. Параметры решеток

Система	Энергия связи, эВ		Параметры решетки, Å	
	Текущая работа	Другие работы	Текущая работа	Другие работы
Nb	-	-	$a = 3.292$	$a = 3.320$ [10]
Zr	-	-	$a = 3,228$ $c = 5,195$	$a = 3,213$ [10] $c = 5,157$ [10] $a = 3,23$ [11] $c = 5,145$ [11]
$Nb_{36}H^O$	0,160	-	$a = 3.294$	-
$Nb_{36}H^T$	0,380	-	$a = 3.294$	-
$Zr_{36}H^O$	0,409	0,392 [66] 0,35 [10]	$a = 3,228$ $c = 5,199$	$a = 3,240$ [10] $c = 5,203$ [10]
$Zr_{36}H^T$	0,459	0,426 [66] 0,45 [10]	$a = 3,229$ $c = 5,203$	$a = 3,245$ [10] $c = 5,218$ [10] $a = 3,242$ [14] $c = 5,174$ [14]

На рисунках 3.5 и 3.6 представлены рассмотренные в работе положения атома водорода в междоузлиях ближайших к границе раздела атомных слоев циркония и ниобия в пленке $Zr_{63}Nb_{40}$. Для выявления влияния количества атомных слоев металлов в пленке на энергию связи водорода были также рассмотрены положения водорода в первом атомном слое циркония относительно границы раздела в пленке $Zr_{36}Nb_{36}$. Рассмотренные в работе междоузлия в пленке $Zr_{36}Nb_{36}$ совпадают с представленными на рисунке 3.6 для пленки $Zr_{63}Nb_{40}$.

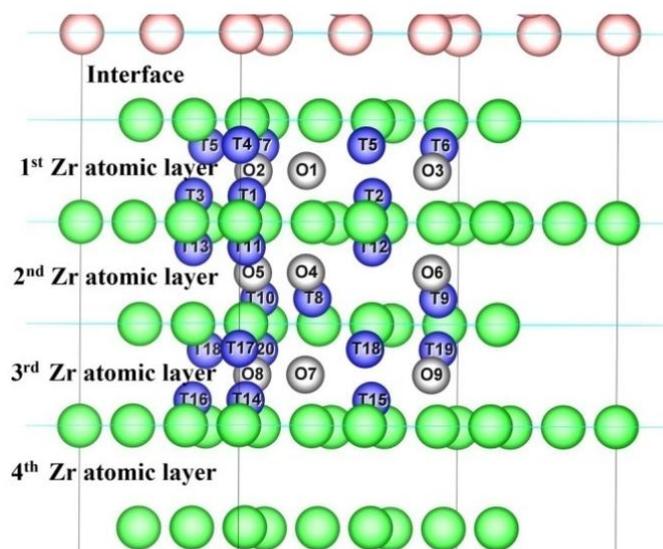


Рисунок 3.5 – Положения рассмотренных в работе междоузлий в атомных слоях циркония, ближайших к границе раздела в пленке $Zr_{63}Nb_{40}$. Зелёным цветом показаны атомы циркония, розовым – ниобия, серым – октаэдрические междоузлия, синим – тетраэдрические.

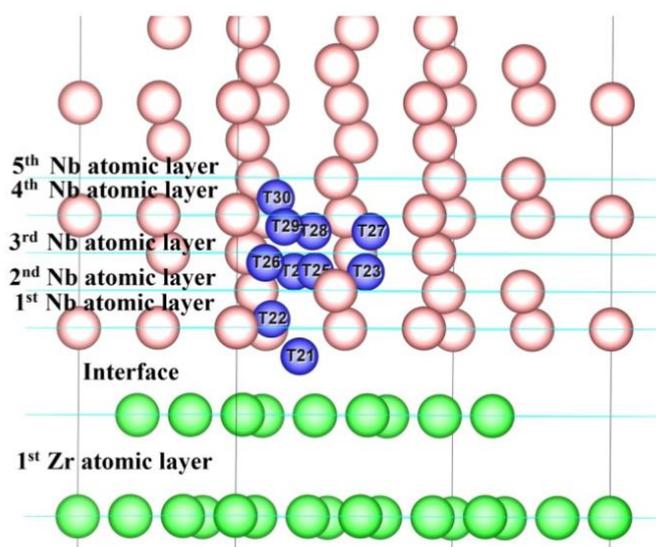


Рисунок 3.6 – Положения рассмотренных в работе междоузлий в атомных слоях ниобия, ближайших к границе раздела в пленке $Zr_{63}Nb_{40}$.

Использованы те же обозначения, что и на рис. 3.6.

Результаты расчетов энергии связи водорода в пленке $Zr_{36}Nb_{36}$ представлены в таблице 3.2. Согласно данным таблиц 3.1 и 3.2 максимальное увеличение энергии связи водорода в пленке $Zr_{36}Nb_{36}$ для октаэдрического

междоузлия составило 52%, для тетраэдрического – 75%. Наибольшее уменьшение для тетраэдрического составило 33%. Исходя из этих данных можно утверждать, что в пленке некоторые октаэдрические междоузлия являются энергетически более выгодными, чем некоторые из тетраэдрических.

Результаты аналогичных расчетов энергии связи водорода в междоузлиях циркония и ниобия в пленке $Zr_{63}Nb_{40}$ представлены в таблице 3.2. Поскольку положение водорода в октаэдрическом междоузлии в решетке ниобия, как уже говорилось выше, нестабильно, то в структуре $Zr_{63}Nb_{40}H$ было рассмотрено расположение атома водорода в тетра- и октаэдрических междоузлиях циркония и тетраэдрических междоузлиях ниобия. Максимальное значение энергии связи водорода наблюдается в позиции Т6 в первых атомных слоях Zr. Следует отметить, что значения энергии связи варьируются в широком диапазоне для каждого атомного слоя металла. В первых атомных слоях Zr этот диапазон составляет от 0,653 до 1,035 эВ для тетраэдрической координации и от 0,758 до 0,970 эВ для октаэдрической координации атомов водорода. Однако среднее значение энергии связи водорода на атомный слой металла уменьшается с увеличением расстояния между атомным слоем и границей раздела, что показано на рисунке 3.8. В слоях Zr это уменьшение происходит медленнее, чем в слоях Nb.

Таблица 3.2 – Энергия связи E_b водорода в цирконии и ниобии в пленках $Zr_{36}Nb_{36}$ и $Zr_{63}Nb_{40}$

$Zr_{36}Nb_{36}$		$Zr_{63}Nb_{40}$							
Междо- узлие	E_b , эВ	Междо- узлие	E_b , эВ	Междо- узлие	E_b , эВ	Междо- узлие	E_b , эВ	Междо- узлие	E_b , эВ
O1	0,661	O1	0,970	O4	0,765	O7	0,731	T21	0,768
O2	0,483	O2	0,758	O5	0,769	O8	0,748	T22	0,713
O3	0,563	O3	0,800	O6	0,762	O9	0,672	T23	0,511
T1	0,770	T1	1,007	T8	0,786	T14	0,760	T24	0,554
T2	0,550	T2	0,822	T9	0,809	T15	0,697	T25	0,498
T3	0,355	T3	0,656	T10	0,551	T16	0,649	T26	0,349
T4	0,530	T4	0,816	T11	0,963	T17	0,513	T27	0,517
T5	0,463	T5	0,788	T12	0,832	T18	0,752	T28	0,477
T6	0,802	T6	1,035	T13	0,655	T19	0,644	T29	0,486
T7	0,306	T7	0,653	-	-	T20	0,618	T30	0,488

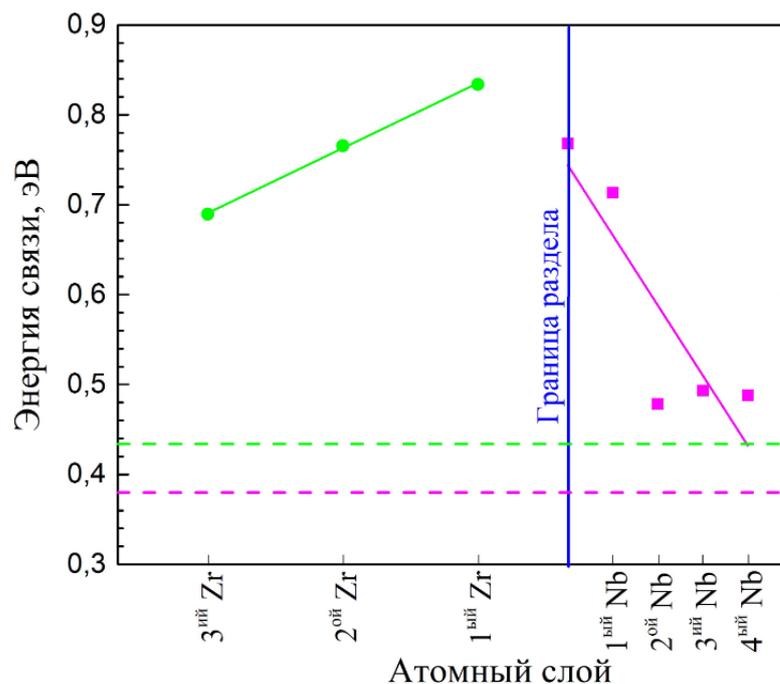


Рисунок 3.7 – Расчетная зависимость среднего значения энергии связи атома водорода от номера атомного слоя. Розовая пунктирная линия указывает энергию связи водорода в тетраэдрических междоузлиях чистого Nb, а зеленая пунктирная линия указывает среднее значение энергии связи атома водорода в чистом Zr.

Посчитанные ранее энергии связи атома водорода в первом атомном слое циркония для структуры $Zr_{36}Nb_{36}$ позволяет провести сравнительный анализ об изменении энергии связи при увеличении количества атомных слоев Zr и Nb (таблица 3.2). На основании этих данных можно судить об изменении энергии связи водорода в эквивалентных междоузлиях двух структур. Изменение энергии связи водорода с цирконием при увеличении количества атомных слоев в структуре Zr/Nb представлена на рисунке 3.8. Большое количество атомных слоев в структуре позволяет в результате релаксации добиться меньших напряжений, возникающих в решетках обоих металлов и, как следствие, большей энергии связи атома водорода с цирконием.

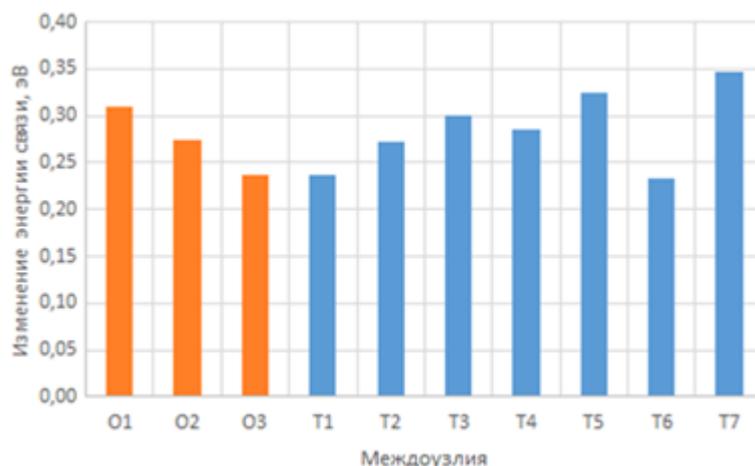


Рисунок 3.8 – Изменение энергии связи водорода в октаэдрических междоузлиях – показаны оранжевым цветом, а тетраэдрических – синим.

Таким образом, анализ результатов, представленных в таблице 3.2 показал, что:

- Максимальное увеличение энергии связи атома водорода: в цирконии для тетраэдрических междоузлий составило 0,576 эВ, для октаэдрических – 0,561 эВ; в ниобии для тетраэдрических междоузлий – 0,388 эВ.
- Минимальное увеличение энергии связи атома водорода: в цирконии для тетраэдрических междоузлий составило 0,054 эВ, для октаэдрических – 0,263 эВ; в ниобии для тетраэдрических междоузлий – 0,097 эВ.
- В ниобии для междоузлия T26 установлено понижение энергии связи на 0,031 эВ.
- Увеличении количества атомных слоев с 4 до 7 для циркония и с 9 до 10 для ниобия приводит к увеличению энергии связи водорода вблизи границы раздела на 0,23 – 0,35 эВ.

3.3 Диффузия атома водорода в цирконии

Как следует из результатов расчетов, представленных выше: энергия связи водорода выше в цирконии, чем в ниобии, поэтому наиболее вероятным является нахождение атомов водорода в цирконии. Исходя из этого было решено провести расчет диффузионных барьеров для атома водорода в решетке циркония. Результаты этих расчетов будут соответствовать ситуации, когда водород диффундирует вдали от границы раздела между металлическими слоями Zr/Nb.

Из 5 доступных неэквивалентных скачков атома водорода в цирконии между междоузлиями были выбраны 4, исключая 2 с наибольшей энергией активации и наибольшей длиной скачка: T_1-T_3 и O_1-O_3 . Результаты расчетов представлены в таблице 3.3. Помимо текущего расчета приведены данные работы [66]. Стоит отметить сопоставимость результатов по длинам скачка и различия между энергиями активации в промежутке 0,005 – 0,127 эВ, что объясняется отличиями в методах расчета.

Таблица 3.3 – Геометрические и энергетические параметры диффузионных скачков

Диффузионный скачок	Параметры текущей работы			Параметры работы [66]		
	Энергия активации E_a , эВ	Длина скачка d , Å	Частота осцилляций ν , ТГц	Энергия активации E_a , эВ	Длина скачка d , Å	Частота осцилляций ν , ТГц
T_1-T_2	0,292	1,257	25,759	0,270	1,296	31,490
T_1-T_3	-	-	-	1,445	2,270	34,948
T_1-O_1	0,471	1,964	27,119	0,466	1,978	30,762
O_1-T_1	0,446	1,974	18,829	0,463	1,972	20,004
O_1-O_2	0,436	2,588	20,588	0,563	2,590	22,647
O_1-O_3	-	-	-	1,670	3,227	20,618

Минимальный барьер соответствует переходу T_1-T_2 , максимальный из рассчитанных – T_1-O_1 . Из рисунка 2.3 видно, что переход T_1-T_2 не позволяет атому водорода перемещаться по всему объему кристалла. Основным же

путем миграции считается переход T_1-O_1 и O_1-T_1 . На рисунке 3.9 показаны рассчитанные профили барьеров диффузии для атома водорода в цирконии.

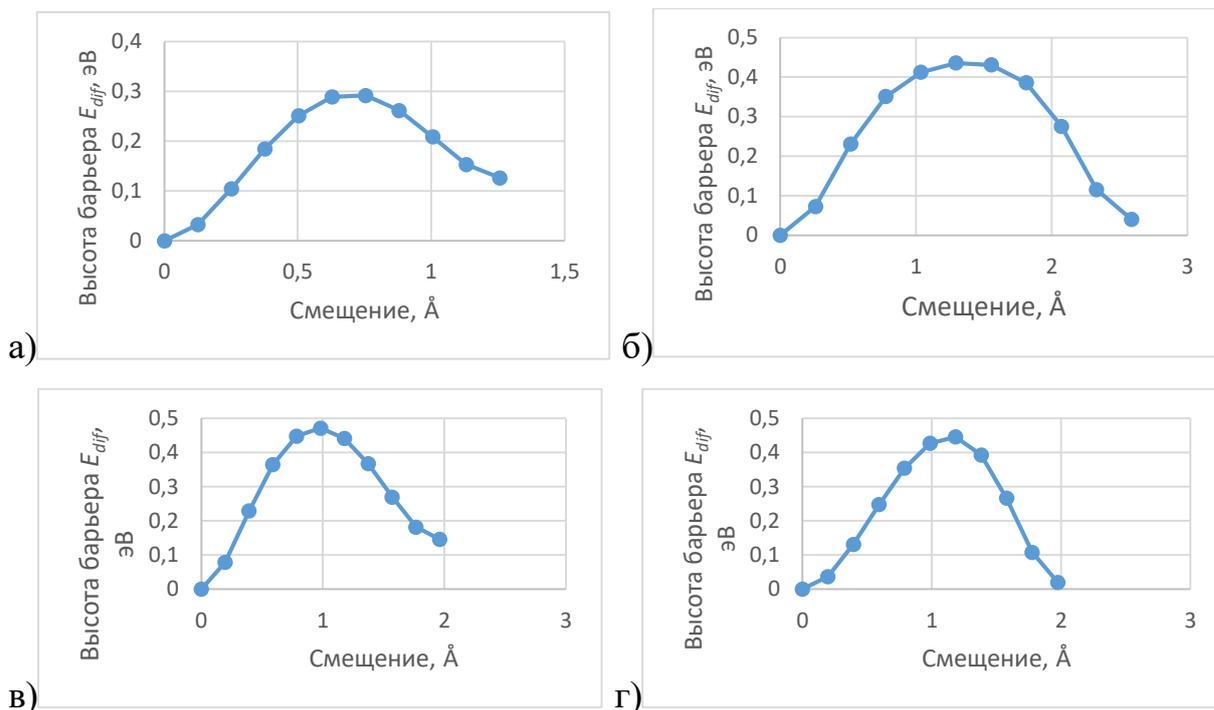


Рисунок 3.9 – Профили барьеров диффузии для атома водорода в цирконии:

- а) барьер T_1T_2 вдоль гексагональной оси;
- б) барьер O_1O_2 вдоль гексагональной оси;
- в) барьер T_1O_1 ;
- г) барьер O_1T_1 .

Следующим шагом являлся расчет коэффициентов диффузии атома водорода в цирконии для посчитанных диффузионных скачков. Результаты расчетов температурной зависимости коэффициента диффузии водорода в цирконии представлены на рисунках 3.10 и 3.11. Отличия между расчетами заключается в учете в использующейся при расчетах формуле (2.19) энергии нулевых колебаний $h\nu/2$ атома водорода в междоузлиях решетки циркония. Стоит отметить хорошее соответствие между коэффициентами диффузии вдоль гексагональной плоскости без учета энергии нулевых колебаний и экспериментом работы [73]. На рисунке 3.12 представлена зависимость отношения коэффициентов диффузии от температуры.

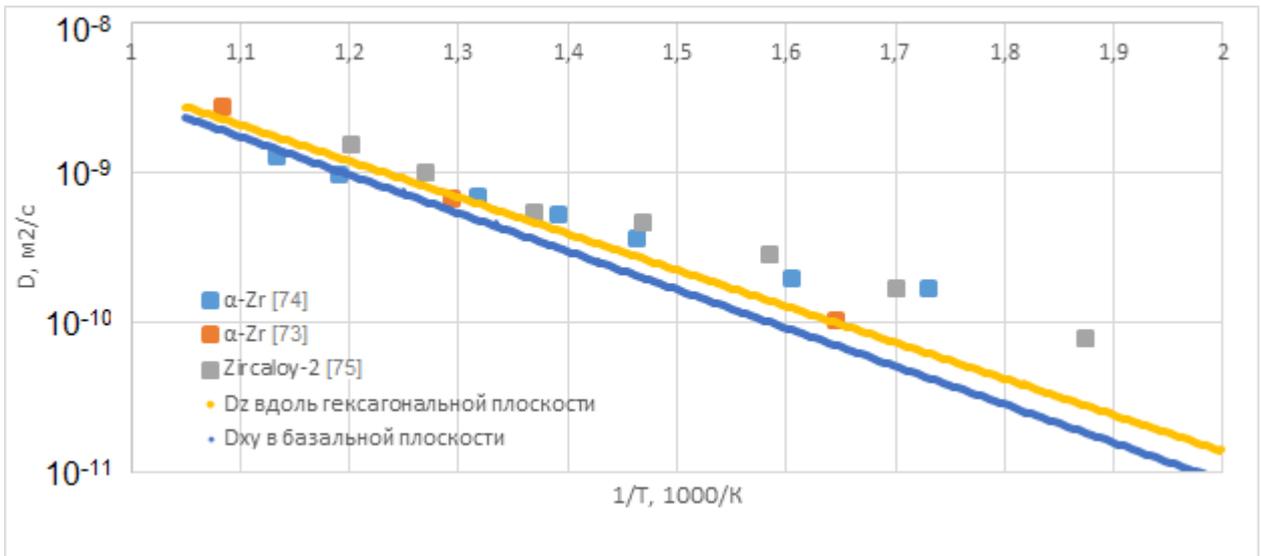


Рисунок 3.10 – Зависимость коэффициента диффузии от величины обратной температуры без учета энергии нулевых колебаний

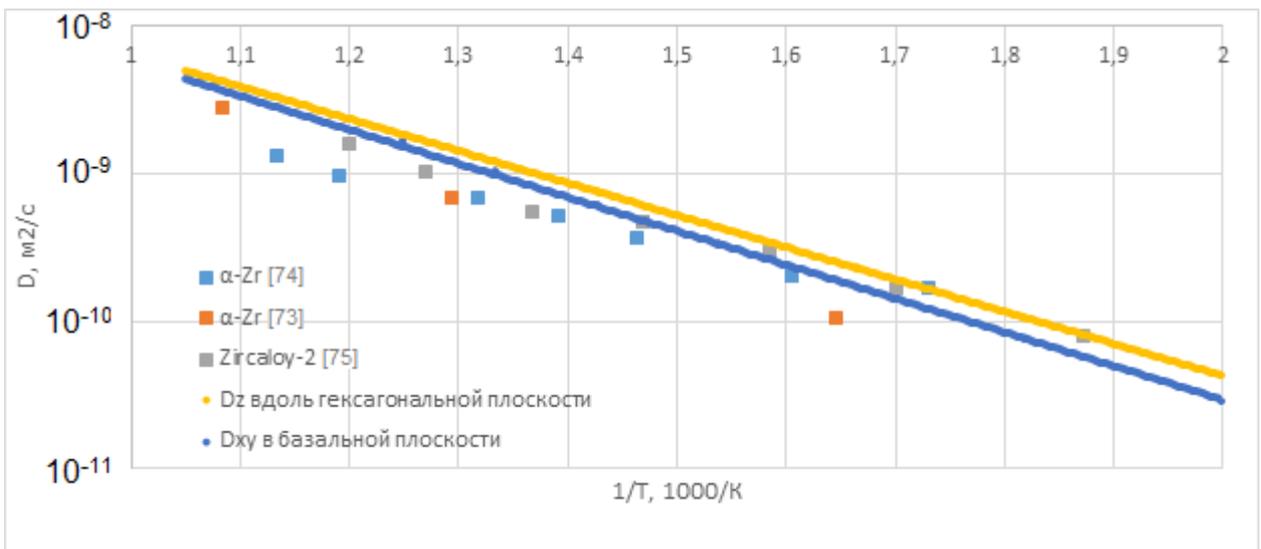


Рисунок 3.11 – Зависимость коэффициента диффузии от величины обратной температуры с учетом энергии нулевых колебаний

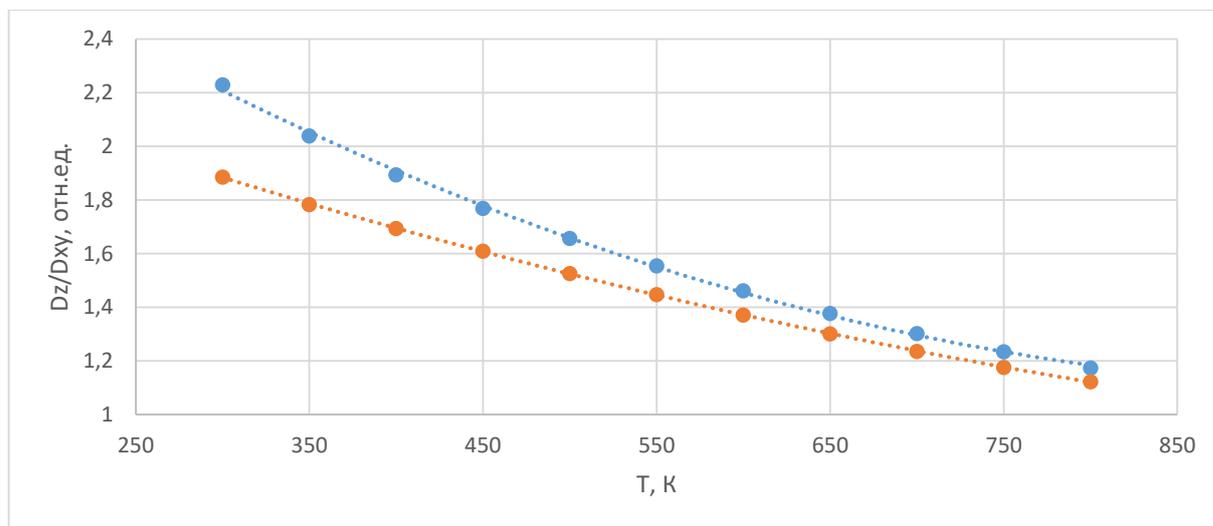


Рисунок 3.12 – Зависимость отношения коэффициентов диффузии вдоль гексагональной оси (D_z) и в базальной плоскости (D_{xy}) от температуры. Синей линией показано отношение без учета энергии нулевых колебаний, оранжевой – с учетом.

Для лучшего сравнения полученных данных была составлена таблица 3.4, где приведены данные расчетной работы [66] и экспериментальных данных [73, 74, 75]. Анализ этой таблицы показал, что рассчитанные значения энергии активации диффузии Q хорошо согласуются с результатами экспериментов [73, 74] и превышают на 66% (57%) без учета энергии нулевых колебаний и 48% (41%) с учетом энергии нулевых колебаний значение, полученное в работе [75]. Значения предэкспоненциального множителя D_0 , рассчитанные в данной работе, превышают в некоторых случаях на порядок соответствующие экспериментальные значения, что объясняется отсутствием учета в текущей работе: теплового расширения решетки, смещения атомов циркония в процессе диффузионного скачка атома водорода.

Таблица 3.4 – Параметры в уравнении Аррениуса $D^{tot} = D_0 e^{\left(-\frac{Q}{kT}\right)}$

Параметры		$D_0, 10^{-3} \text{ см}^2/\text{с}$	$Q, \text{ эВ}$
Настоящий расчет без учета энергии нулевых колебаний	Вдоль гексагональной оси z	11,31	0,507
	В базальной плоскости xy	9,65	0,480
Настоящий расчет с учетом энергии нулевых колебаний	Вдоль гексагональной оси z	10,96	0,454
	В базальной плоскости xy	9,66	0,432
Работа [66]	Вдоль гексагональной оси z	7,74	0,421
	В базальной плоскости xy	16,14	0,473
$\alpha\text{-Zr}$, эксп. [74]		1,09	0,495
$\alpha\text{-Zr}$, эксп. [73]		7,00	0,460
Zircaloy-2, эксп. [75]		0,71	0,306

3.4 Диффузия атома водорода в цирконии вблизи границы раздела

Заключительным шагом текущей работы являлся расчет диффузионных барьеров в слое циркония вблизи границы раздела многослойной структуры Zr/Nb и сравнение результатов с диффузией в решетке циркония. Рассмотренные диффузионные скачки атома водорода в пленке $\text{Zr}_{36}\text{Nb}_{36}$ представлены на рисунке 3.13. Результаты расчетов профилей диффузионных барьеров вблизи границы раздела пленки $\text{Zr}_{36}\text{Nb}_{36}$ приведены на рисунке 3.14.

Анализ полученных результатов показал, что длина диффузионных скачков для большинства рассмотренных случаев в слое циркония пленки $\text{Zr}_{36}\text{Nb}_{36}$ меньше на величину не более 6%, чем в чистом цирконии. Исключением являются диффузионный скачок между O_1 и T_1 междоузлиями, длина скачка которого в слое циркония пленки $\text{Zr}_{36}\text{Nb}_{36}$ на 35% больше, чем в чистом цирконии. Это обусловлено сильным искажением решётки циркония в результате релаксации вблизи границы раздела, что приводит к ситуации, когда тетраэдрическое междоузлие перестает быть таковым и становится одним из энергетически выгодных положений для атома водорода на границе раздела между цирконием и ниобием. Выявлено уменьшение высоты диффузионных барьеров на 25% для диффузионного скачка $\text{O}_1\text{-T}_1$, 4% для $\text{O}_2\text{-}$

T₂, 44 % для O₁-T₃ и 34% для T₃-O₃. Это обусловлено значительным смещением атомов циркония к границе раздела в слоистой структуре Zr/Nb.

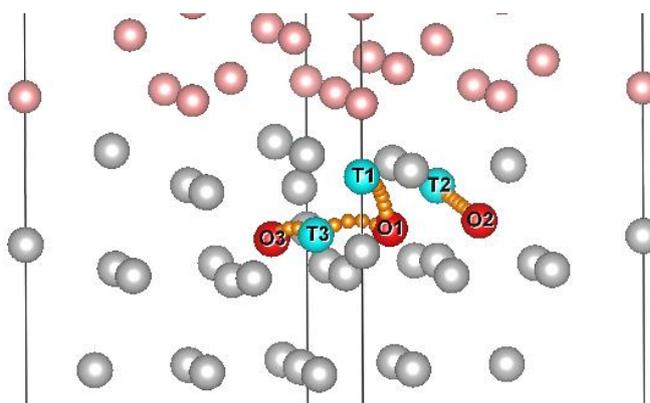


Рисунок 3.13 – Направления диффузионных скачков водорода в пленке Zr₃₆Nb₃₆. Серым и розовым показаны атомы циркония и ниобия, соответственно, красным и голубым показаны, соответственно, окта- и тетраэдрические междуузлия, оранжевым показаны промежуточные позиции атома водорода

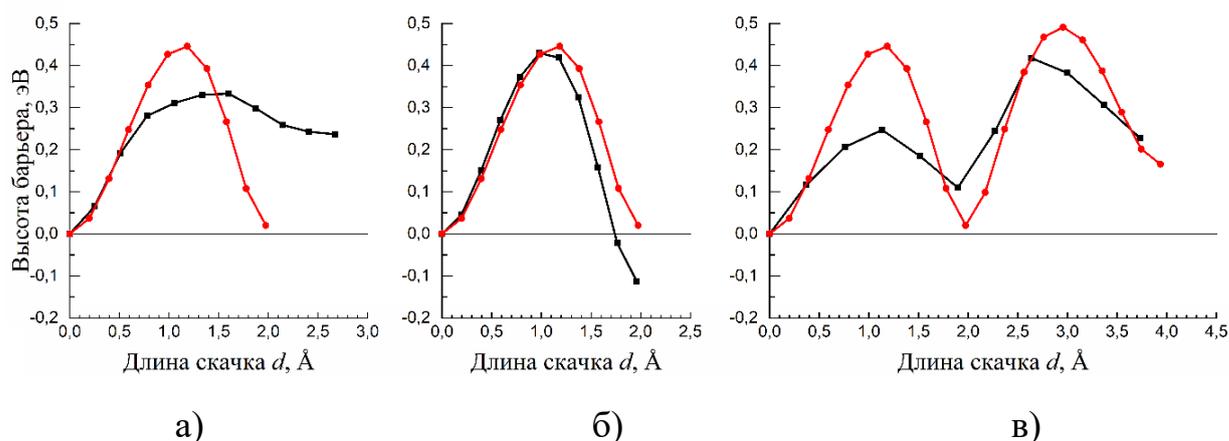


Рисунок 3.14 – Профили диффузионных барьеров в слое циркония в пленке Zr₃₆Nb₃₆ показаны черным цветом, в чистом цирконии – красным:
 а) скачок из O₁ в T₁ междуузлия; б) скачок из O₂ в T₂ междуузлия;
 в) скачок из O₁ в O₃ междуузлия через промежуточное T₃ междуузлие

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

В рамках текущей работы проводится моделирование в пакете программ Abinit на высокопроизводительном сервере HPC-PHTD, принадлежащем Томскому Политехническому университету многослойного покрытия цирконий/ниобий. В частности, рассматриваются особенности взаимодействия атомов водорода в данном покрытием.

Многослойное покрытие цирконий/ниобий в последние десятилетия получило широкое распространение в отечественной промышленности. Это связано с использованием йодидно чистого циркония. Данное покрытие увеличивает срок службы тепловыделяющего элемента за счет описанных выше свойств.

4.1 Потенциальные потребители результатов исследования

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

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

4.2 Анализ конкурентных технических решений

При ведении собственного производства необходим систематический анализ конкурирующих разработок во избежание потери занимаемой ниши рынка. Периодический анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности позволяет оценить эффективность научной разработки по сравнению с конкурирующими предприятиями.

Позиция разработки и конкурентов оценивается по каждому показателю экспертным путем по пятибалльной шкале, где 1 – наиболее слабая позиция, а 5 – наиболее сильная. Веса показателей, определяемые экспертным путем, в сумме должны составлять 1.

Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле:

$$K = \sum V_i * B_i, \quad (4.1)$$

где K – конкурентоспособность научной разработки или конкурента;

V_i – вес показателя (в долях единицы);

B_i – балл i -го показателя.

В таблице 4.1 приведена оценочная карта, включающая конкурентные технические разработки в области производства оболочек тепловыделяющих элементов. Были рассмотрены следующие покрытия: Zr/Nb, Cu/Nb и Cu/W.

Таблица 4.1 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических разработок

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

Б_ф – рассматриваемое Zr/Nb покрытие;

Б_{к1} – покрытие Cu/Nb;

Б_{к2} – покрытие Cu/W.

Для лучшего понимания приведем разбор каждого критерия из таблицы:

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

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

4.3 SWOT-анализ

Результаты первого этапа SWOT-анализа представлены в таблице 4.2.

Таблица 4.2 – Первый этап SWOT-анализа

	Сильные стороны научно исследовательского проекта:	Слабые стороны научно исследовательского проекта:
	<p>C1. Заявленная экономичность и энергоэффективность метода расчета.</p> <p>C2. Сопоставимая стоимость производства по сравнению с другими покрытиями.</p> <p>C3. Легкий интерфейс управления</p> <p>C4. Безопасность проведения исследований.</p> <p>C5. Упрощенность подготовки материалов перед исследованием.</p>	<p>Сл1. Недостаточность доказательства пригодности и достоверности.</p> <p>Сл2. Низкий уровень проникающей способности на рынок.</p> <p>Сл3. Отсутствие необходимого оборудования для выполнения расчетов.</p> <p>Сл4. Длительный срок расчетов.</p>
Возможности:		
<p>В1. Решение фундаментальных задач исследования.</p> <p>В2. Хороший спрос на рынке антикоррозионного металлического покрытия.</p> <p>В3. Появление дополнительного спроса на покрытие.</p> <p>В4. Повышение стоимости конкурентных разработок.</p>		
Угрозы:		
<p>У1. Несвоевременное финансирование научного исследования при дальнейшем развитии проекта.</p> <p>У2. Развитая конкуренция из похожих научно-исследовательских проектов.</p> <p>У3. Недостаточность точности расчетов.</p>		

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

В рамках данного этапа необходимо построить интерактивную матрицу проекта. Ее использование помогает разобраться с различными комбинациями взаимосвязей областей матрицы SWOT. Каждый фактор помечается либо знаком «+» (означает сильное соответствие сильных сторон возможностям), либо знаком «-» (что означает слабое соответствие); «0» – если есть сомнения в том, что поставить «+» или «-». Интерактивные матрицы представлены в таблицах 4.3, 4.4, 4.5 и 4.6.

Таблица 4.3 – Интерактивная матрица проекта «Сильные стороны и возможности»

		Сильные стороны				
		С1	С2	С3	С4	С5
Возможности проекта	В1	-	-	-	-	+
	В2	-	-	-	-	-
	В3	-	-	-	-	-
	В4	-	+	-	-	-

Таблица 4.4 – Интерактивная матрица проекта «Слабые стороны и возможности»

		Слабые стороны			
		Сл1	Сл2	Сл3	Сл4
Возможности проекта	В1	+	-	-	+
	В2	-	+	-	-
	В3	-	+	-	-
	В4	-	-	-	-

Таблица 4.5 – Интерактивная матрица проекта «Сильные стороны и угрозы»

		Сильные стороны				
		С1	С2	С3	С4	С5
Угрозы	У1	-	-	-	-	-
	У2	+	-	-	-	-
	У3	+	-	-	-	-

Таблица 4.6 – Интерактивная матрица проекта «Слабые стороны и угрозы»

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

Таким образом, в рамках третьего этапа должна быть составлена итоговая матрица SWOT-анализа (таблица 4.7).

Таблица 4.7 – Итоговая матрица SWOT-анализа

	Сильные стороны научно исследовательского проекта:	Слабые стороны научно исследовательского проекта:
	<p>C1. Заявленная экономичность и энергоэффективность метода расчета.</p> <p>C2. Сопоставимая стоимость производства по сравнению с другими покрытиями.</p> <p>C3. Легкий интерфейс управления</p> <p>C4. Безопасность проведения исследований.</p> <p>C5. Упрощенность подготовки материалов перед исследованием.</p>	<p>Сл1. Недостаточность доказательства пригодности и достоверности.</p> <p>Сл2. Низкий уровень проникающей способности на рынок.</p> <p>Сл3. Отсутствие необходимого оборудования для выполнения расчетов.</p> <p>Сл4. Длительный срок расчетов.</p>
<p>Возможности:</p> <p>V1. Решение фундаментальных задач исследования.</p> <p>V2. Хороший спрос на рынке антикоррозионного металлического покрытия.</p> <p>V3. Появление дополнительного спроса на покрытие.</p> <p>V4. Повышение стоимости конкурентных разработок.</p>	<p>V4C2. Понижение стоимости исследования покрытия по сравнению с аналогами приводит к повышению спроса на данное покрытие.</p> <p>V1C5. Проведение фундаментальных исследований по покрытию не требует серьезной предварительной подготовки, что упрощает эти исследования.</p>	<p>V1Сл1. Правильность решения фундаментальных задач ограничивается отсутствием экспериментальной проверки.</p> <p>V2В3Сл2. Низкий уровень проникновения на рынок и спроса характеризуется ограниченным кругом отечественных потребителей, которые уже используют данное покрытие.</p> <p>V1Сл4. Многие из фундаментальных исследовательских задач требуют больших временных затрат на их реализацию.</p>
<p>Угрозы:</p> <p>У1. Несвоевременное финансирование научного исследования при дальнейшем развитии проекта.</p> <p>У2. Развитая конкуренция из похожих научно-исследовательских проектов.</p> <p>У3. Недостаточность точности расчетов.</p>	<p>У2С1. Схожие научно-исследовательские проекты обладают сопоставимыми характеристиками по экономичности и энергоэффективности метода расчета.</p>	<p>У1У2У3Сл1Сл2Сл3Сл4. Отсутствие финансирования скажется на доступности мощного оборудования, имеющегося у конкурентов, что скажется как на конкурентоспособности, так и на точности и времени расчетов, что может привести к расхождению с экспериментальными результатами. Это в совокупности помешает проникновению на иностранный рынок.</p>

4.4 Определение возможных альтернатив проведения научных исследований

В таблице 4.8 представлена морфологическая матрица для выполнения расчетов, являющихся основной частью работы.

Таблица 4.8 – Морфологическая матрица

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

4.5 Планирование научно-исследовательских работ

4.5.1 Структура работ в рамках научного исследования

Планирование комплекса предполагаемых работ осуществляется в следующем порядке:

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

Для выполнения научных исследований формируется рабочая группа, в состав которой входят: бакалавр, научный руководитель и консультант. Составим перечень этапов и работ в рамках проведения научного

исследования и проведем распределение исполнителей по видам работ (таблица 4.9).

Таблица 4.9 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

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

4.5.2 Определение трудоемкости выполнения работ

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

Трудоемкость выполнения научного исследования оценивается экспертным путем в человеко-днях и носит вероятностный характер, т.к. зависит от множества трудно учитываемых факторов. Для определения ожидаемого (среднего) значения трудоемкости $t_{ожi}$ используется следующая формула (4.2):

$$t_{\text{ож}i} = \frac{3t_{\text{мин}i} + 2t_{\text{макс}i}}{5}, \quad (4.2)$$

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

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

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

Исходя из ожидаемой трудоемкости работ, определяется продолжительность каждой работы в рабочих днях T_p , учитывающая параллельность выполнения работ несколькими исполнителями:

$$T_{pi} = \frac{t_{\text{ож}i}}{Ч_i}, \quad (4.3)$$

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

$t_{\text{ож}i}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения одной работы, чел.-дн.;

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

4.5.3. Разработка графика проведения научного исследования

При выполнении дипломных работ студенты, в основном, становятся участниками сравнительно небольших по объему научных тем. Поэтому наиболее удобным и наглядным является построение ленточного графика проведения научных работ в форме диаграммы Ганта.

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

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k_{\text{кал}}, \quad (4.4)$$

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

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

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

Коэффициент календарности определяется по следующей формуле (4.5):

$$k_{\text{кал}} = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}}}, \quad (4.5)$$

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

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

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

Таким образом:

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

Все рассчитанные значения необходимо свести в таблицу 4.10.

Таблица 4.10 – Временные показатели проведения научного исследования

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

Р – руководитель;

Б – бакалавр;

К – консультант;

На основе таблицы 4.10 строится календарный план-график в виде диаграммы Ганта, представленной на рисунке 4.1.

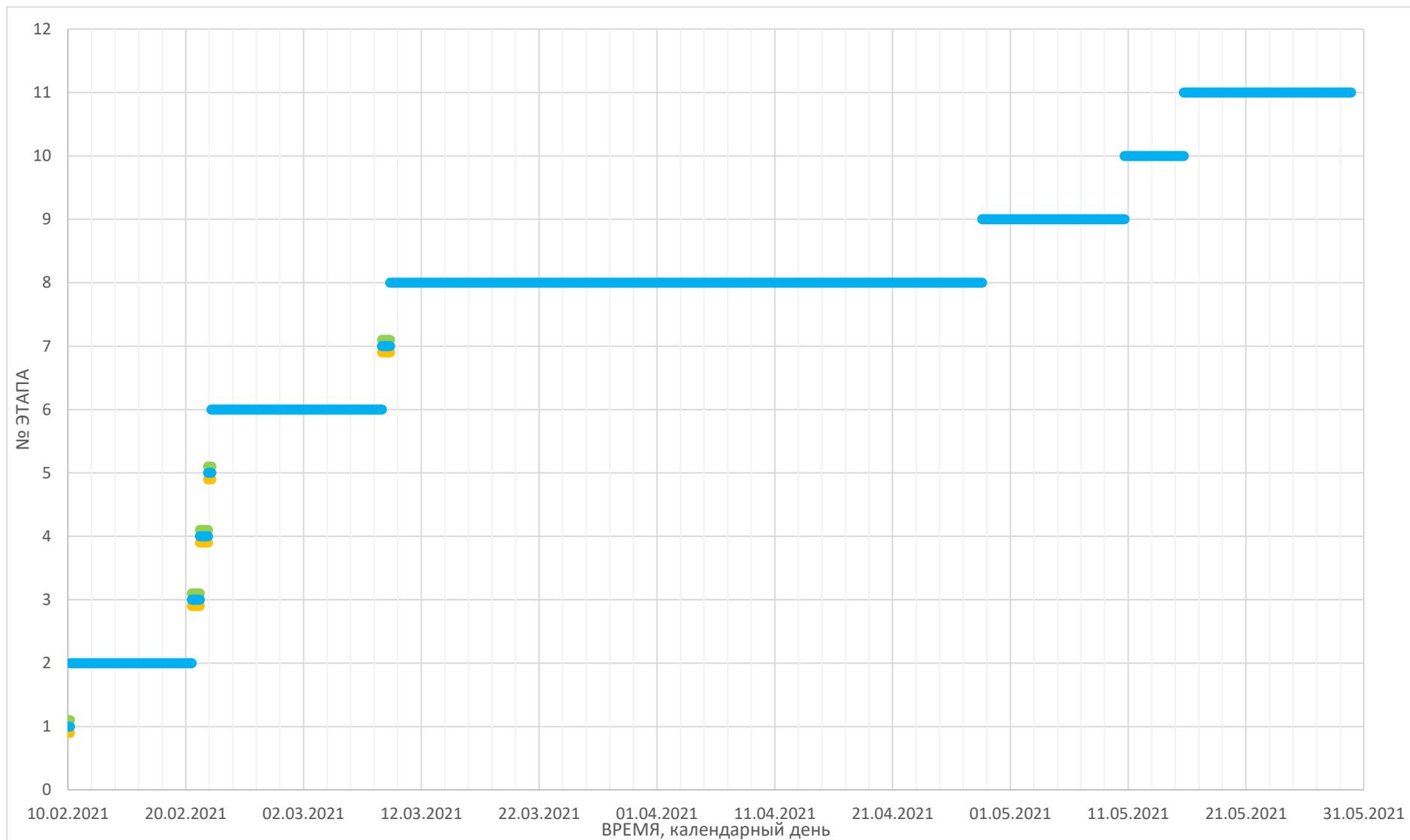


Рисунок 4.1 – Календарный план-график проведения НИОКР. Синим цветом показан бакалавр, оранжевым – научный руководитель, зеленым – консультант.

4.6 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)

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

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

4.6.1 Расчет материальных затрат НТИ

Для выполнения данной ВКР требуются затраты на:

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

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

- приобретение материальных запасов, сырья, комплектующих и составных частей для основных средств производственных подразделений;
- покупка топлива и горюче-смазочных материалов, электроэнергии, тепловой энергии, воды для выполнения технологического процесса;
- закупка работ, товаров и услуг, необходимых для осуществления производственного цикла;

- убытки и недостачи продукции в пределах установленных норм естественной убыли;
- прочие суммы расходов.

4.6.2 Расчет затрат на оборудование для научно-экспериментальных работ

Для оборудования нужно рассчитать величину годовой амортизации по следующей формуле (4.6):

$$A_{\text{год}} = \frac{C_{\text{перв}}}{T_{\text{пи}}}, \quad (4.6)$$

где $C_{\text{перв}}$ – первоначальная стоимость, руб;

$T_{\text{пи}}$ – время полезного использования, год.

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

4.6.3 Основная заработная плата исполнителей темы

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

$$Z_{\text{зп}} = Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}, \quad (4.7)$$

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

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

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

$$Z_{\text{осн}} = Z_{\text{дн}} \cdot T_p, \quad (4.8)$$

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

T_p – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб. дн. (таблица 4.10);

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

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_m \cdot M}{F_d}, \quad (4.9)$$

где Z_m – месячный должностной оклад работника, руб.;

M – количество месяцев работы без отпуска в течение года:

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

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

F_d – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн. (таблица 4.11).

В таблице 4.11 приведен баланс рабочего времени каждого работника НТИ.

Таблица 4.11 – Баланс рабочего времени

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

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_{\text{м}} = Z_{\text{тс}} \cdot (1 + k_{\text{пр}} + k_{\text{д}}) \cdot k_{\text{р}}, \quad (4.10)$$

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

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

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

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

Расчёт основной заработной платы приведён в таблице 4.12.

Таблица 4.12 – Расчет основной заработной платы

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

Расчет дополнительной заработной платы ведется по следующей формуле:

$$Z_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} \cdot Z_{\text{осн}}, \quad (4.11)$$

где $k_{\text{доп}}$ – коэффициент дополнительной заработной платы, равный 0,15.

Общая заработная исполнителей работы представлена в таблице 4.13.

Таблица 4.13 – Общая заработная плата исполнителей

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

4.6.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется исходя из следующей формулы:

$$Z_{\text{внеб}} = k_{\text{внеб}} \cdot (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}), \quad (4.12)$$

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

В соответствии с положениями подпункта 7 пункта 1 и подпункта 3 пункта 2 статьи 427 Налогового кодекса Российской Федерации для некоммерческих организаций (за исключением государственных (муниципальных) учреждений), зарегистрированных в установленном законодательством Российской Федерации порядке, применяющих упрощенную систему налогообложения и осуществляющих в соответствии с учредительными документами деятельность в области социального обслуживания граждан, научных исследований и разработок, образования, здравоохранения, культуры и искусства (деятельность театров, библиотек, музеев и архивов) и массового спорта (за исключением профессионального) применяются пониженные тарифы страховых взносов в совокупном размере 20% в течение 2017-2024 годов

Отчисления во внебюджетные фонды представлены в таблице 4.14.

Таблица 4.14 – Отчисления во внебюджетные фонды

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

4.6.5 Накладные расходы

Величина накладных расходов определяется по следующей формуле:

$$З_{\text{накл}} = k_{\text{нр}} \cdot (З_{\text{осн}} + З_{\text{доп}} + З_{\text{внеб}}), \quad (4.13)$$

где $k_{\text{нр}}$ – коэффициент, учитывающий накладные расходы.

Величину коэффициента накладных расходов можно взять в размере 16 %. Накладные расходы представлены в таблице 4.15.

Таблица 4.15 – Накладные расходы

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

4.6.6. Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

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

Определение бюджета затрат на научно-исследовательский проект по каждому варианту исполнения приведен в таблице 4.16.

Таблица 4.16 – Расчет бюджета затрат НТИ

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

Как видно из таблицы 4.16 основные затраты НТИ приходятся на основную заработную плату исполнителей.

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

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

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп. } i} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\text{max}}}, \quad (4.14)$$

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

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

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

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

$$I_{pi} = \sum a_i b_i, \quad (4.15)$$

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

a_i – весовой коэффициент i -го варианта исполнения разработки;

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

n – число параметров сравнения.

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности приведен в форме таблице 4.17.

Таблица 4.17 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

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

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

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

$$I_{исп.1} = \frac{I_{p-исп1}}{I_{финр}}, \quad I_{исп.2} = \frac{I_{p-исп2}}{I_{финр}} \text{ и т.д.} \quad (4.16)$$

Сравнение интегрального показателя эффективности вариантов исполнения разработки позволит определить сравнительную эффективность проекта (см. таблицу 4.18) и выбрать наиболее целесообразный вариант из предложенных. Сравнительная эффективность проекта (\mathcal{E}_{cp}):

$$\mathcal{E}_{cp} = \frac{I_{исп.1}}{I_{исп.2}}. \quad (4.17)$$

Таблица 4.18 – Сравнительная эффективность разработки

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

Вывод: сравнительный анализ интегральных показателей эффективности показывает, что предпочтительным для выполнения расчетов является первый вариант исполнения, так как данный вариант является наиболее экономичным и ресурсоэффективным, по сравнению со вторым.

В рамках данного раздела ВКР была проведена оценка конкурентоспособности выполнения теоретических расчетов по многослойному покрытию цирконий-ниобий по сравнению с другими расчетами схожих покрытий; рассчитан показатель, оценивающий перспективность данной технологии, который определяет уровень перспективности как «выше среднего». Был составлен перечень этапов работ и определена их трудоемкость, построен календарный план-график выполнения работ. Рассчитан ориентировочный бюджет на создание научной разработки, а также проведена оценка эффективности научного исследования с позиции ресурсосбережения и сравнительная эффективность разработки.

5 Социальная ответственность

В рамках выполнения выпускной квалификационной работы проводилось моделирование расчетов кристаллических решеток металлов: циркония и ниобия; составленных многослойных структур: $Zr_{36}Nb_{36}$ и $Zr_{63}Nb_{40}$ с использованием высокопроизводительного сервера HPC-PHTD, находящимся в распоряжении НИ ТПУ. Доступ к суперкомпьютеру осуществлялся с компьютера, находящегося в аудитории № 205 учебного корпуса № 3.

Работа предполагала проведение моделирования многослойных структур: совмещения решеток ниобия и циркония, релаксация и оптимизация структур, расчет энергии связи атома водорода, находящегося вблизи границы раздела со стороны ниобия и циркония, диффузия атома водорода в цирконии вблизи границы раздела и в области объема, вычисление коэффициентов диффузии атома водорода в области объема металла циркония.

5.1 Оценка вредных и опасных факторов

В данном пункте приведен анализ всех вредных и опасных факторов, которые могут возникать при работе в аудитории. Все вредные и опасные факторы, характерные для аудиторной среды представлены в таблице 5.1.

Таблица 5.1 – Возможные вредные и опасные факторы

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015 [76])	Нормативные документы
1. Микроклимат	ГОСТ 30494-96. Здания жилые и общественные. Параметры микроклимата в помещениях [77]
2. Шум	ГОСТ 12.1.003-83. Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Шум. Общие требования безопасности (с Изменением N 1) [78]

Продолжение таблицы 5.1

3. Освещенность рабочей зоны	СНиП 23-05-95*. Естественное и искусственное освещение (с Изменением N 1) [79]
4. Пожароопасность	СП 12.13.130.2009. Определение категорий помещений, зданий и наружных установок по взрывопожарной и пожарной опасности (в ред. изм. № 1, утв. приказом МЧС России от 09.12.2010 № 643) [80] ГОСТ 12.1.004-91 Система стандартов безопасности труда. Пожарная безопасность. Общие требования [81]
5. Электробезопасность	ГОСТ 12.1.009-76 Система стандартов безопасности труда (ССБТ) [82] ГОСТ Р 12.1.019-2017 ССБТ Электробезопасность [83] ГОСТ Р МЭК 61140-2000 Защита от поражения электрическим током. Общие положения по безопасности, обеспечиваемой электрооборудованием и электроустановками в их взаимосвязи [84]
6. Радиационная безопасность	СанПиН 2.6.1.2523-09 Нормы радиационной безопасности НРБ-99/2009 [85]

5.1.1 Микроклимат

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

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

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

При нормировании метеорологических условий в производственных помещениях учитывают время года, физическую тяжесть выполняемых работ, а также количество избыточного тепла в помещении. Оптимальные и допустимые метеорологические условия температуры и влажности устанавливаются согласно [86] и приведены в таблице 5.2.

Таблица 5.2 – Оптимальные показатели микроклимата на рабочих местах производственных помещений

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

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

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

Для расчёта кратности воздухообмена вентилятора в лаборатории объёмом $V = 70 \text{ м}^3$ ($S = 20 \text{ м}^2$, $h = 3,5 \text{ м}$), который будет обеспечивать циркуляцию воздушных масс в помещении, воспользуемся формулой [87]:

$$W = V * k, \quad (5.1)$$

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

Подставляя данные в формулу (5.1), получим характеристику кратности воздухообмена вентилятора:

$$W = 70 * 3 = 210 \frac{\text{м}^3}{\text{ч}}$$

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

Также необходима система центрального отопления, обеспечивающая заданный уровень температуры в зимний период по [88]. В зимний период в аудитории для поддержания необходимой температуры используется система водяного отопления. Эта система надёжна в эксплуатации и обеспечивает возможность регулирования температуры в широких пределах. При устройстве системы вентиляции и кондиционирования воздуха в помещении аудитории необходимо соблюдать определенные требования пожарной безопасности. В зимнее время в помещении необходимо предусмотреть систему отопления. Она должна обеспечивать достаточное, постоянное и равномерное нагревание воздуха. В помещениях с повышенными требованиями к чистоте воздуха должно использоваться водяное отопление.

По защите исследователя от действия вредного фактора отклонения показателей микроклимата создаются микроклиматические условия отоплением, обменной вентиляцией и кондиционированием воздуха согласно [86-88].

5.1.2 Шум

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

Для оценивания шумовой обстановки допускается использовать числовую характеристику, называемую уровнем звука (измеряется в дБ). В соответствии с [89] допустимый уровень шума при работе, требующей сосредоточенности, работе с повышенными требованиями к процессам наблюдения и дистанционного управления производственными циклами на рабочих местах в помещениях с шумным оборудованием, составляет 75 дБ. Зоны с уровнем звука 80 дБ должны быть обозначены знаками безопасности согласно [90].

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

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

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

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

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

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

Защита от повышенных уровней шума осуществляется методами его снижения в источнике образования и на пути распространения, устройством экранов и звукопоглощающих облицовок, средствами индивидуальной защиты согласно [89, 90].

5.1.3 Освещение

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

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

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

Общим называется освещение, светильники которого освещают всю площадь помещения, как занятую оборудованием или рабочими местами, так и вспомогательную. В зависимости от расположения светильников различают

равномерное и локализованное общее освещение. При общем равномерном освещении светильники располагаются в верхней зоне помещения равномерно, обеспечивая тем самым одинаковую освещенность всего помещения. Оно применяется, как правило, когда расположение рабочих зон при проектировании неизвестно либо при гибкой планировке. При общем локализованном освещении светильники размещают с учетом расположения технологического оборудования, создавая на отдельных поверхностях требуемый уровень освещения.

Комбинированная система освещения состоит из общего и местного освещения. Общее освещение предназначено для освещения проходов и участков, где работы не производятся, а также для выравнивания яркости в поле зрения работающих. Местное освещение обеспечивается светильниками, располагаемыми непосредственно на рабочих местах. Ему следует отдавать предпочтение, если в нескольких рабочих зонах помещения должны решаться различные зрительные задачи и поэтому для них требуются различные уровни освещенности. Оно также необходимо, когда рабочие места территориально отдалены друг от друга. При этом следует иметь в виду, что устройство только местного освещения недопустимо, так как оно создает большую разность освещенности рабочих поверхностей и окружающего пространства, что неблагоприятно сказывается на зрении [79].

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

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

Помещение с компьютером имеет следующие параметры:

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

$$h_n = H - h_c = 350 - 35 = 315 \text{ см}; \quad (5.2)$$

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

$$h = h_n - h_{pn} = 315 - 75 = 260 \text{ см.} \quad (5.3)$$

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

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

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

$$\frac{L}{3} = \frac{3,75}{3} = 1,25 \text{ см.} \quad (5.4)$$

- интегральным критерием оптимальности расположения светильников является величина, равная:

$$\lambda = \frac{L}{h}. \quad (5.5)$$

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

- Рассчитаем оптимальное расстояние между светильниками:

$$L = \lambda * h = 1,4 * 2,6 = 3,64 \text{ м} \quad (5.6)$$

Данная величина полностью соответствует настоящему расположению светильников.

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

$$\varphi = \frac{E_k * S * K_S * Z}{N * n} = \frac{200 * 20 * 1,5 * 1,1}{5 * 0,49} = 2793 \text{ Лм} \quad (5.7)$$

Нормируемая минимальная освещенность, согласно [79]: $E_n = 200$ Лм (разряд зрительной работы VI: очень малой точности);

- площадь освещаемого помещения: $S = 20$ м²;
- коэффициент запаса, учитывающий загрязнение светильника, наличие в атмосфере дыма, пыли: $K_3 = 1,5$ (помещение с малым выделением пыли);
- коэффициент неравномерности освещения: $Z = 1,1$ (для люминесцентных ламп);
- число ламп в помещении: $N = 5$;
- коэффициент использования светового потока: $n = 0,49$;
- индекс помещения:

$$i = \frac{S}{h \cdot (A+B)} = \frac{20}{2,6 \cdot 10} = 0,78; \quad (5.8)$$

- коэффициент отражения стен (свежепобеленное состояние стен с окнами без штор): $\rho_c = 50$ %;
- коэффициент отражения потолка (свежепобеленное состояние потолка): $\rho_n = 70$ %.

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

Для защиты от недостаточной освещенности рабочей зоны естественное освещение по своему спектру является наиболее приемлемым, но не всегда его оказывается достаточно. Это связано во многом с режимом работы. Обычно рекомендуется применять общее и комбинированное освещение. Нормы освещенности рабочего места соответствуют [79].

5.1.4 Электромагнитные поля

Основным вредным фактором при использовании ЭВМ является электромагнитное излучение от составляющих частей компьютера. Нормы

вредных допустимых уровней (ВДУ) электромагнитного излучения ЭВМ установлены в документе [91], которые показаны в таблице 5.3.

Таблица 5.3. Временные допустимые уровни ЭМП, создаваемых ПЭВМ

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

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

Экран и системные блоки ЭВМ также производят электромагнитное излучение. Основная его часть происходит от системного блока и видеокабеля. Напряженность электромагнитного поля на расстоянии 50 см вокруг экрана по электрической составляющей должна соответствовать [92].

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

Существуют следующие способы защиты от ЭМП:

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

В указанной аудотрии излучение соответствуют нормам [91, 92].

5.1.5 Пожаробезопасность

В зависимости от характеристик веществ и материалов, находящихся в помещении, по взрывопожарной и пожарной опасности помещения подразделяются на категории А, Б, В, Г и Д в соответствии с [80]. Рассматриваемое помещение относится к категории В, так как в нем содержатся твердые горючие вещества в холодном состоянии. Возможные причины возгорания:

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

В целях снижения риска возникновения пожара и минимизации возможного ущерба производятся профилактические мероприятия, которые подразделяются на организационно-технические, эксплуатационные и режимные. Организационно-технические мероприятия заключаются в проведении регулярных инструктажей сотрудников ответственным за пожарную безопасность, обучении сотрудников надлежащей эксплуатации оборудования и необходимым действиям в случае возникновения пожара, паспортизацию веществ, материалов и изделий в части обеспечения пожарной безопасности, изготовление и применение средств наглядной агитации по обеспечению пожарной безопасности [81]. К эксплуатационным мероприятиям относят профилактические осмотры оборудования. Мероприятия режимного характера включают установление правил организации работ и соблюдение противопожарных мер. Для предупреждения возникновения пожара необходимо соблюдение следующих правил пожарной безопасности:

- содержание помещений в соответствии с требованиями пожарной безопасности;

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

В помещении с электрооборудованием, во избежание поражения электрическим током, целесообразно использовать углекислотные или порошковые огнетушители. Данные огнетушители предназначены для тушения загораний различных веществ и материалов, электроустановок под напряжением до 1000 В, горючих жидкостей. Химические и пенные огнетушители не допустимы. Огнетушители следует располагать на защищаемом объекте в соответствии с требованиями таким образом, чтобы они были защищены от воздействия прямых солнечных лучей, тепловых потоков, механических воздействий и других неблагоприятных факторов (вибрация, агрессивная среда, повышенная влажность и т. д.). Они должны быть хорошо видны и легкодоступны в случае пожара. Предпочтительно размещать огнетушители вблизи мест наиболее вероятного возникновения пожара, вдоль путей прохода, а также около выхода из помещения. Огнетушители не должны препятствовать эвакуации людей во время пожара. Согласно требованиям пожарной безопасности [80, 81], на этаже находится 2 огнетушителя ОПЗ огнетушители переносные порошковые, лестничные пролеты оборудованы гидрантами, имеется кнопка пожарной сигнализации.

5.1.6 Электробезопасность

Электробезопасность – система организационных и технических мероприятий и средств, обеспечивающих защиту людей от вредного и опасного воздействия электрического тока, электрической дуги, электромагнитного поля и статического электричества согласно [82]. Электрический ток, проходя через

тело человека, производит тепловое, химическое и биологическое воздействие, тем самым нарушая нормальную жизнедеятельность. Работники, принимаемые для выполнения работ в электроустановках, должны иметь профессиональную подготовку, соответствующую характеру работы.

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

В рамках текущей работы не производились контакты с открытыми источниками электрического тока. Ток, протекающий в компьютерной периферии (компьютерная мышь, клавиатура), не представляет существенной опасности для здоровья человека. Согласно классификации, данная аудитория подходит под помещения 1 класса, в котором рабочие напряжения не превышают 1 000 В [82, 83].

5.1.7 Радиационная безопасность

Повышенный уровень ионизирующих излучений в рабочей зоне. К опасным и вредным производственным факторам, связанным с повышенным уровнем ионизирующих излучений, относят следующие виды излучений [85]:

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

б) потоки частиц:

- бета-частиц (электронов и позитронов);
- альфа-частиц (ядер атома гелия-4);
- нейтронов;

- протонов, других ионов, мюонов и др.;
- осколков деления (тяжелых ионов, возникающих при делении ядер);
- в) излучение, вызванное радиоактивным загрязнением (выше природного фона), в том числе загрязнением техногенными радионуклидами:
 - радиоактивное загрязнение воздуха рабочей зоны (из-за наличия радиоактивных газов радона, торона, актинона, продуктов их радиоактивного распада, аэрозолей, содержащих радионуклиды);
 - радиоактивное загрязнение поверхностей и материалов производственной среды, включая средства защиты работающих и их кожные покровы.

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

В ходе выполнения научного исследования, предполагающего теоретические расчеты с использованием суперкомпьютера и не более, работы с источниками ионизирующего излучения не осуществлялись [85].

5.2 Аварийные ситуации

Чрезвычайная ситуация (ЧС) – обстановка на определенной территории, сложившаяся в результате аварии, опасного природного явления, катастрофы, стихийного или иного бедствия, которые могут повлечь или повлекли за собой человеческие жертвы, ущерб здоровью людей или окружающей природной среде, значительные материальные потери и

нарушение условий жизнедеятельности людей [93]. Есть два вида чрезвычайных ситуаций:

- техногенная;
- природная.

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

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

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

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

Мероприятия по предотвращению и ликвидации последствий вышеуказанных аварийных ситуаций представлены в таблице 5.4.

Таблица 5.4. Аварийные ситуации

№	Аварийная ситуация	Мероприятия по предотвращению	Мероприятия по ликвидации последствий аварийной ситуации
1	Падение с высоты соответственного роста	1. Содержание помещения в надлежащем порядке. 2. Ограничение рабочего пространства. 3. Своевременное проведение инструктажа.	1. Осмотреть или опросить пострадавшего; 2. если необходимо – вызвать скорую помощь; 3. остановить кровотечение, если оно имеется; 4. если есть подозрение, что у пострадавшего сломан позвоночник (резкая боль в позвоночнике при малейшем движении), необходимо обеспечить пострадавшему полный покой в положении лежа на спине до оказания квалифицированной медицинской помощи.

Продолжение таблицы 5.4

2	Падение с лестницы	<ol style="list-style-type: none"> 1. Установка поручней на лестницу. 2. Покрытие ступенек лестницы антискользящим покрытием. 3. Своевременное проведение инструктажа. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Вызвать скорую помощь; 2. остановить кровотечение, если оно имеется; 3. если есть подозрение, что у пострадавшего сломан позвоночник (резкая боль в позвоночнике при малейшем движении), необходимо обеспечить пострадавшему полный покой в положении лежа на спине до оказания квалифицированной медицинской помощи.
3	Удар электрическим током	<ol style="list-style-type: none"> 1. Заземление всех электроустановок. 2. Ограничение рабочего пространства. 3. Обеспечение недоступности токоведущих частей аппаратуры. 4. Своевременное проведение инструктажа. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Быстро освободить пострадавшего от действия электрического тока [84]; 2. вызвать скорую помощь; 3. если пострадавший потерял сознание, но дыхание сохранилось, его следует удобно уложить, расстегнуть стесняющую одежду, создать приток свежего воздуха и обеспечить полный покой; 4. пострадавшему надо дать понюхать нашатырный спирт, сбрызнуть лицо водой, растереть и согреть тело; 5. при отсутствии дыхания нужно немедленно делать искусственное дыхание и массаж сердца.
4	Пожар	<ol style="list-style-type: none"> 1. Своевременное проведение инструктажа. 2. Установление средств автоматического пожаротушения в помещениях. 3. Установка датчиков дыма и огня. 4. Обеспечение путей эвакуации и поддержание их в надлежащем состоянии. 4. Контроль работы электроприборов. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Обесточить помещение, прекратить поступление воздуха; 2. немедленно сообщить о пожаре дежурному или на пост охраны; 3. по возможности принять меры по эвакуации людей, тушению пожара и спасению материальных ценностей.

В данном разделе рассмотрены потенциальные аварийные ситуации, которые могут возникнуть при работе в аудитории № 205 учебного корпуса № 3. Рассмотрены мероприятия по предотвращению и ликвидации этих ситуаций, согласно [84, 93].

5.3 Выводы по главе

В главе рассмотрены вредные и опасные факторы:

- микроклимат [87, 88];
- шум [89, 90];
- освещенность [79];
- пожароопасность [80, 81];
- электробезопасность [82, 83];
- электромагнитное излучение [91, 92];
- радиационная безопасность [85];
- вентиляция [87].

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

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

Данная аудитория учебного корпуса отнесена к классу В по пожароопасности [80, 81] и к 1 категории по электробезопасности [82, 83].

Заключение

В работе были проведены исследования особенностей взаимодействия водорода с наноразмерными многослойными покрытиями цирконий/ниобий. Представлен краткий обзор имеющихся в литературе данных об особенностях взаимодействия примеси водорода с цирконием и о свойствах многослойных наноразмерных покрытий. Описаны основные методы и приближения расчетов из первых принципов атомной и электронной структур твердых тел, используемые в настоящей работе. Проведена процедура оптимизации значений параметров кристаллической решетки и релаксации положений атомов чистых циркония и ниобия, твердых растворов Zr–H и Nb–H при концентрации водорода ~ 3 ат.% и вблизи границы раздела между наноразмерными металлическими слоями Zr/Nb в пленках $Zr_{36}Nb_{36}$ и $Zr_{63}Nb_{40}$. Рассчитаны энергии связи водорода в цирконии и ниобии при концентрации водорода ~ 3 ат.% и вблизи границы раздела между металлическими слоями Zr/Nb. Вычислены профили диффузионных барьеров для атома водорода в цирконии вблизи и вдали от границы раздела между металлическими слоями Zr/Nb.

Из анализа результатов выявлено, что:

1. Энергия связи водорода в решетке циркония больше, чем в решетке ниобия. При этом тетраэдрические междоузлия более выгодны, чем октаэдрические в обоих металлах.

2. В пленке $Zr_{36}Nb_{36}$ максимальное увеличение энергии связи водорода для октаэдрического междоузлия составило 52%, для тетраэдрического – 75%. Наибольшее уменьшение для тетраэдрического составило 33%. Часть октаэдрических междоузлий стали энергетически более выгодными по сравнению с рядом тетраэдрических.

3. В пленке $Zr_{63}Nb_{40}$ максимальное значение энергии связи водорода наблюдается в тетраэдрическом междоузлии в первом атомном слое Zr.

Значения энергии связи варьируются в широком диапазоне для каждого атомного слоя металла: в первых атомных слоях Zr этот диапазон составляет от 0,653 до 1,035 эВ для тетраэдрической координации и от 0,758 до 0,970 эВ для октаэдрической координации атомов водорода.

4. Среднее значение энергии связи водорода в атомном слое металла уменьшается с увеличением расстояния между атомным слоем и границей раздела, при этом в слоях Zr это уменьшение происходит медленнее, чем в слоях Nb.

5. Увеличение количества атомных слоев с 4 до 7 для циркония и с 9 до 10 для ниобия в пленке Zr/Nb приводит к увеличению энергии связи водорода вблизи границы раздела на 0,23 – 0,35 эВ.

6. Длина диффузионных скачков для большинства рассмотренных случаев в слое циркония в пленке $Zr_{36}Nb_{36}$ меньше на величину не более 6%, чем в чистом цирконии. Исключением является диффузионный скачок между окта- и тетраэдрическим междоузлиями, длина которого в слое циркония в пленке $Zr_{36}Nb_{36}$ на 35% больше, чем в чистом цирконии. Высота диффузионных барьеров для атома водорода, рассмотренных в настоящей работе, в слое циркония в пленке $Zr_{36}Nb_{36}$ меньше на 4–44 %, чем в объеме циркония.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Неравновесные системы металл-водород. Титан, нержавеющая сталь / Х. Баумбах, М. Кренинг, Ю.И. Тюрин [и др.]. – Томск: Изд-во Томский университет, 2002. – 350 с. – ISBN 978-5-7511-1513-9.
2. McRae, G.A. The first step for delayed hydride cracking in zirconium alloys / G.A. McRae, C.E. Coleman, B.W. Leitch. // Journal of Nuclear Materials. – 2010. – V. 396. – P. 130–143.
3. Физическое материаловедение: Учебник для вузов в 7 т.: Т. 6. Конструкционные материалы ядерной техники / Б.А. Калинин, П.А. Платонов, Ю.В. Тузов, [и др.]. – М.: МИФИ, 2012. – 736 с. – ISBN 978-5-7262-0821-3.
4. Калинин Б.А., Шмаков А.А. Поведение водорода в реакторных сплавах циркония / Б.А. Калинин, А.А. Шмаков // Взаимодействие изотопов водорода с конструкционными материалами. – 2004. – С. 50-56.
5. Khoda-Bakhah, R. Determination of the hydrogen site occupation in the α phase of zirconium hydride and in the α and β phases of titanium hydride by inelastic neutron scattering / R. Khoda-Bakhah, D.I. Ross. // Journal of Physics F: Metal Physics. – 1982. – Vol. 12, № 1. – P. 15-24.
6. Shety, M.N. Strain-energy model for solid solubility limits in Zr-H, Ti-H and Zr-Nb-H systems / M.N. Shety, K.P. Singh. // Proc. Interdiscip. Meet. Hydrogen Met. – 1980. – P. 201-213.
7. Sidhu, S.S. Neutron and X-ray studies of non-stoichiometric metal hydrides / S.S. Sidhu, N.S. Satya Murk, EP. Campos, D.D. Zaubers. // Advances in Chemistry. – 1963. – Vol. 39 – P. 67-98.
8. Bowman, R.C. Effects of thermal treatments on lattice properties and electronic structure of ZrH / R.C. Bowman, Jr. Craft, B.D. Craft. // Physical Review B. – 1985. – Vol. 31. – P. 5604-5615.

9. First-Principles Calculations and Experimental Study of H⁺-Irradiated Zr/Nb Nanoscale Multilayer System/ Laptev R.S., Svyatkin, L.A., Krotkevich D. et al. // *Metals*. – 2021. – Vol. 11. – P. 627-645.
10. Wang, F. First principles study of various Zr–H phases with low H concentrations / F. Wang, H.R. Gong. // *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2012. – Vol. 37. – P. 12393-12401.
11. Smith E. Near threshold delayed hydride crack growth in zirconium Alloys. / Smith E. // *J Mater Sci* – 1995. – Vol. 30. – P. 5910-5914.
12. Aguayo A. Elastic stability and electronic structure of fcc Ti, Zr, and Hf: a first-principles study. / Aguayo A., Murrieta G, de Coss R. // *Phys Rev B* – 2002. – Vol. 65. – P. 92-106.
13. Heiming A. Phonon dispersion of the bcc phase of groupIV metals. II.bcc zirconium, a model case of dynamical precursors of martensitic transitions./ Heiming A, Petry W, Trampenau J, Alba M, Herzig C, Schober HR // *Phys Rev B* – 1991. – Vol. 43 – P. 109-157.
14. Fisher E.S. Single-crystal elastic moduli and the hcp/bcc transformation in Ti, Zr and Hf. / Fisher E.S., Renken C.J. // *Phys Rev* – 1964. – Vol. 135 – P. 482-494.
15. Domain C. Atomic-scale ab-initio study of the ZrH system: I. bulk properties. / Domain C, Besson R, Legris A. // *Acta Mater* – 2002. – Vol. 50 – P. 35-48.
16. Vaughan D.A. High temperature X-ray diffraction investigation of the ZrH System. / Vaughan DA, Bridge JR. // *J Met* – 1956. – Vol. 8 – P. 528-559.
17. Fei Wang. Mechanical and structural stability of zirconium dihydride / Fei Wang, H.R. Gong // *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2012. – Vol. 37. – P. 9688-9695.
18. Udagawa Y. Ab initio study on plane defects in zirconium hydrogen solid solution and zirconium hydride. / Udagawa Y, Yamaguchi M, Abe H et al. // *Acta Mater*. – 2010. – Vol. 58 – P. 39-66.

19. Domain C. Atomic-scale ab-initio study of the ZrH system: II. Bulk properties. / Domain C, Besson R, Legris A // *Acta Mater.* – 2006. – Vol. 37 – P. 42-58.
20. Aladjem A. Zirconium-hydrogen. / Aladjem A. // *Solid State Phenomena.* – 1996. – Vol. 281 – P. 49-50.
21. Udagawa Y. Ab initio study on plane defects in zirconium hydrogen solid solution and zirconium dihydride. / Udagawa Y, Yamaguchi M, Abe H et al. // *Acta Mater.* – 2011. – Vol. 50 – P. 29-48.
22. Zhu W. First-principles study of different polymorphs of crystalline zirconium hydride. / Zhu W, Wang R, Shu G et al. // *J Phys Chem C.* – 2010. – Vol. 114 – P. 223-284.
23. Cantrell JS. X-ray diffraction and nuclear magnetic resonance studies of the relationship between electronic structure and the tetragonal distortion in ZrH_x . / Cantrell JS, Bowman Jr RC, Sullenger DB // *J Phys Chem.* – 1984. – Vol. 88 – P. 91-99.
24. Quijano R. Electronic structure and energetic of the tetragonal distortion for TiH_2 , ZrH_2 , HfH_2 : a first principles study. / Quijano R, de Coss R // *Phys Rev B.* – 2009. – Vol. 80 – P. 181-203.
25. Bowman Jr RC. Electronic structure of zirconium hydride: a proton NMR study. / Bowman Jr RC, Venturini EL, Craft BD et al. // *Phys Rev B.* – 1983. – Vol. 27 – P. 14-74.
26. Ackland GJ. Embrittlement and the bistable crystal structure of zirconium hydride. / Ackland GJ. // *Phys Rev Lett.* – 1998. – Vol. 80 – P. 22-33.
27. Ham B. High strength Mg/Nb nanolayer composites / Ham B., Zhang X. // *Materials Science and Engineering: A.* – 2011. – Vol. 528. – P. 2028-2033.
28. Yang G. H. Investigation of nanoindentation on Co/Mo multilayers by the continuous stiffness measurement technique / Yang G. H. // *Surface and Coatings Technology.* – 2005. – Vol. 191. – P. 127-133.

29. Lu Y. Y. The microstructure and mechanical behavior of Mg/Ti multilayers as a function of individual layer thickness / Lu Y. Y. // *Acta Materialia*. – 2014. – Vol. 63. – P. 216-231.
30. Zhang J. Y. Length scale-dependent deformation behavior of nanolayered Cu/Zr micropillars / Zhang J. Y. // *Acta Materialia*. – 2012. – Vol. 60. – P. 1610-1622.
31. Zhang X. Nanostructured Cu/Nb multilayers subjected to helium ion-irradiation / Zhang X. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. – 2007. – Vol. 261. – P. 1129-1132.
32. Han W. Z. He implantation of bulk Cu–Nb nanocomposites fabricated by accumulated roll bonding / Han W. Z. // *Journal of nuclear materials*. – 2014. – Vol. 452. – P. 57-60.
33. Li N. Defect structures and hardening mechanisms in high dose helium ion implanted Cu and Cu/Nb multilayer thin films / Li N., Nastasi M., Misra A. // *International Journal of Plasticity*. – 2012. – Vol. 32. – P. 1-16.
34. Li N. Compressive flow behavior of Cu thin films and Cu/Nb multilayers containing nanometer-scale helium bubbles / Li N. // *Scripta Materialia*. – 2011. – Vol. 64. – P. 974-977.
35. Mao S. Quantitative comparison of sink efficiency of Cu–Nb, Cu–V and Cu–Ni interfaces for point defects / Mao S. // *Acta Materialia*. – 2015. – Vol. 82. – P. 328-335.
36. Demkowicz M. J. Mechanisms of He escape during implantation in CuNb multilayer composites / Demkowicz M. J. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. – 2007. – Vol. 261. – P. 524-528.
37. Misra A. Length-scale-dependent deformation mechanisms in incoherent metallic multilayered composites / Misra A., Hirth J.P., Hoagland R. G // *Acta materialia*. – 2005. – Vol. 53. – P. 4817-4824.

38. Wei Q. M. Suppression of irradiation hardening in nanoscale V/Ag multilayers / Wei Q. M. // *Acta Materialia*. – 2011. Vol. 59. – P. 6331-6340.
39. Wei Q. Transmission electron microscopy study of the microstructure and crystallographic orientation relationships in V/Ag multilayers / Wei Q., Misra A. // *Acta Materialia*. – 2010. – Vol. 58. – P. 4871-4882.
40. Gao Y. Radiation tolerance of Cu/W multilayered nanocomposites / Gao Y. // *Journal of Nuclear Materials*. – 2011. – Vol. 413. – P. 11-15.
41. Kong-Fang W. Modification of Fe/Cu multilayers under 400 keV Xe²⁰⁺ irradiation / Kong-Fang W. // *Chinese Physics C (HEP & NP)*. – 2008. – Vol. 32. – P. 1225-1230.
42. Chen Y. Microstructure and strengthening mechanisms in Cu/Fe multilayers / Chen Y. // *Acta Materialia*. – 2012. – Vol. 60. – P. 6312-6321.
43. Chen F. Investigation of structural stability and magnetic properties of Fe/Ni multilayers irradiated by 300 keV Fe¹⁰⁺ / Chen F. // *Journal of nuclear materials*. – 2014. – Vol. 452. – P. 31-36.
44. Fu E. G. Mechanical properties of sputtered Cu/V and Al/Nb multilayer films / Fu E. G. // *Materials Science and Engineering: A*. – 2008. – Vol. 493. – P. 283-287.
45. Lu Y. Y. The microstructure and mechanical behavior of Mg/Ti multilayers as a function of individual layer thickness / Lu Y. Y. // *Acta Materialia*. – 2014. – Vol. 63. – P. 216-231.
46. Zhang J. Y. Length scale-dependent deformation behavior of nanolayered Cu/Zr micropillars / Zhang J. Y. // *Acta Materialia*. – 2012. – Vol. 60. – P. 1610-1622.
47. Milosavljević M. Stability of nano-scaled Ta/Ti multilayers upon argon ion irradiation / Milosavljević M. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. – 2011. – Vol. 269. – P. 2090-2097.

48. Bagchi S. Effect of swift heavy ion irradiation in W/Co multilayer structures / Bagchi S., Anwar S., Lalla N. P. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 2010. – Vol. 268. – P. 1601-1606.
49. Callisti M. Structural and mechanical properties of γ -irradiated Zr/Nb multilayer nanocomposites / Callisti M., Lozano-Perez S., Polcar T // Materials Letters. – 2016. – Vol. 163. – P. 138-141.
50. Callisti M. Competing mechanisms on the strength of ion-irradiated Zr/Nb nanoscale multilayers: Interface strength versus radiation hardening / Callisti M., Karlik M., Polcar T. // Scripta Materialia. – 2018. – Vol. 152. – P. 31-35.
51. Callisti M. Combined size and texture-dependent deformation and strengthening mechanisms in Zr/Nb nano-multilayers / Callisti M., Polcar T. // Acta Materialia. – 2017. – Vol. 124. – P. 247-260.
52. Frutos E. Length-scale-dependent mechanical behaviour of Zr/Nb multilayers as a function of individual layer thickness / Frutos E. // Materials Science and Engineering: A. – 2015. – Vol. 632. – P. 137-146.
53. Callisti M. Combined size and texture-dependent deformation and strengthening mechanisms in Zr/Nb nano-multilayers / Callisti M., Polcar T. // Acta Materialia. – 2017. – Vol. 124. – P. 247-260.
54. Monclús M. A. Selective oxidation-induced strengthening of Zr/Nb nanoscale multilayers / Monclús M. A. // Acta Materialia. – 2017. – Vol. 122. – P. 1-10.
55. Callisti M. Competing mechanisms on the strength of ion-irradiated Zr/Nb nanoscale multilayers: Interface strength versus radiation hardening / Callisti M., Karlik M., Polcar T. // Scripta Materialia. – 2018. – Vol. 152. – P. 31-35.
56. Callisti M. Structural and mechanical properties of γ -irradiated Zr/Nb multilayer nanocomposites / Callisti M., Lozano-Perez S., Polcar T. // Materials Letters. – 2016. – Vol. 163. – P. 138-141.

57. Ломыгин А., Послойный анализ наноразмерных металлических слоев Zr/Nb методами позитронной аннигиляционной спектроскопии и оптической эмиссионной спектрометрии тлеющего разряда / Антон Ломыгин; Томский Политехнический университет. – Томск, 2019. – 100 с.

58. Sen H.S. Vacancy-interface-helium interaction in Zr-Nb multi-layer system: A first-principles study / Sen H.S., Polcar T. // Journal of Nuclear Materials. – 2019. – Vol. 518. – P. 11-20.

59. Бассани Ф., Электронные состояния и оптические переходы в твердых телах / Ф. Бассани, Дж.П. Парравичини; пер. с англ., под ред. В. Л. Бонч-Бруевича. – М.: «Наука». – 1982. – 392 с.

60. Минкин, В.И. Теория строения молекул /В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев. — Ростов-на-Дону: "Феникс". – 1997. – 560с.

61. Blugel S., Bihlmayer G. Full-Potential Linearized Augmented Planewave Method // J. Grotendorst, S. Blugel, D. Marx: Computational Nanoscience: Do It Yourself!. – Jülich: John von Neumann Institute for Computing. – 2006. – P. 85-129.

62. Wigner, E. On the Interaction of Electrons in Metals / E. Wigner // . – 1934. – V 46. – P. 1002-1011

63. Моделирование свойств, электронной структуры ряда углеродных и неуглеродных нанокластеров и их взаимодействия с легкими элементами // <http://test.kirensky.ru> URL: http://test.kirensky.ru/master/articles/monogr/Book/Chapter_1_3.htm (дата обращения: 18.02.2020).

64. Bloch F., Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern // Zeitschrift für Physik. – 1928. – P. 555–600.

65. Потенциалы и псевдопотенциалы // www.tsi.lv URL: https://www.tsi.lv/sites/default/files/editor/science/Research_journals/Computer/1908/6_potencialy_i_psevdopotencialy.pdf (дата обращения: 28.03.2020).

66. Святкин Л.А. Особенности взаимодействия водорода с α -Zr в системах Zr–H, Zr–vac–H и Zr–He–H: Расчеты из первых принципов: дис. канд. ф.-м.н. наук / Святкин Леонид Александрович; Томский Политехнический университет. – Томск, 2018. – 117 с.
67. Vineyard G.H. Frequency factors and isotope effects in solid state rate processes / G.H. Vineyard. // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. – 1957. – Vol. 3. – P.121-127.
68. Kehr K.W. Hydrogen in Metals I: Theory of the diffusion of hydrogen in metals // K.W. Kehr; edited by G. Alefeld, J. Vökl. – Berlin: Springer. – 1978 – P. 197-226.
69. Gonze X. The ABINIT project: Impact, environment and recent developments. / Gonze, X., Amadon, B., Antonius, G. et al. // *Comput. Phys. Commun.* – 2020. – Vol. 248. –P. 1070-1112.
70. Romero A.H. ABINIT: Overview and focus on selected capabilities. / Romero, A.H., Allan, D.C., Amadon, B. et al. // *J. Chem. Phys.* – 2020. – Vol. 152. – P. 124-226.
71. Perdew J.P. Generalized gradient approximation made simple. / Perdew, J.P., Burke, K., Ernzerhof, M. // *Phys. Rev. Lett.* – 1996. – Vol. 77. – P. 3865–3868.
72. Sen H.S. Vacancy-interface-helium interaction in Zr-Nb multi-layer system: A first-principles study / Sen H.S., Polcar T. // *Journal of Nuclear Materials*. – 2019. – Vol. 518. – P. 11-20.
73. Kearns, J.J. Diffusion coefficient of hydrogen in alpha zirconium, Zircaloy-2 and Zircaloy-4 / J.J. Kearns. // *Journal of Nuclear Materials*. – 1972. – Vol. 43. – P. 330–338.
74. Gulbransen, E.A. Diffusion of hydrogen and deuterium in high purity zirconium / E.A. Gulbransen, J. Andrew. // *Journal of The Electrochemical Society*. – 1954. – Vol. 101. – P. 560-566.

75. Mallet, M.W. Low-pressure solubility and diffusion of hydrogen in zirconium / M.W. Mallet, W.M. Albrecht. // Journal of the Electrochemical Society. –1957. – Vol. 104. – P. 142-146.

76. ГОСТ 12.0.003-2015 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Опасные и вредные производственные факторы. Классификация: дата введения 2017-03-01. – URL: <https://docs.cntd.ru/document/1200136071> (дата обращения: 14.02.21). – Текст: электронный.

77. ГОСТ 30494-96 Здания жилые и общественные. Параметры микроклимата в помещениях: дата введения 1999-03-01. – URL: <http://docs.cntd.ru/document/1200003003> (дата обращения: 15.02.21). – Текст: электронный.

78. ГОСТ 12.1.003-83 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Шум. Общие требования безопасности (с Изменением N 1): дата введения 1984-07-01. – URL: <http://docs.cntd.ru/document/5200291> (дата обращения: 15.02.21). – Текст: электронный.

79. СНиП 23-05-95* Естественное и искусственное освещение (с Изменением N 1): дата введения 1996-01-01. – URL: <http://docs.cntd.ru/document/871001026> (дата обращения: 15.02.21). – Текст: электронный.

80. СП 12.13130.2009. Определение категорий помещений, зданий и наружных установок по взрывопожарной и пожарной опасности (в ред. изм. № 1, утв. приказом МЧС России от 09.12.2010 № 643). [Электронный ресурс]. Доступ из сборника НСИС ПБ. – 2011. – № 2 (45).

81. ГОСТ 12.1.004-91 Система стандартов безопасности труда. Пожарная безопасность. Общие требования: дата введения 1992-07-01. – URL: <https://docs.cntd.ru/document/9051953> (дата обращения: 03.03.2021). – Текст: электронный.

82. ГОСТ 12.1.009-76 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Электробезопасность. Термины и определения: дата введения 1977-

- 01-01. – URL: <http://docs.cntd.ru/document/5200278> (дата обращения: 18.02.21).
– Текст: электронный.
83. ГОСТ Р 12.1.019-2017 ССБТ Электробезопасность: дата введения 2019-01-01. – URL: <https://beta.docs.cntd.ru/document/1200161238> (дата обращения: 19.02.21). – Текст: электронный.
84. ГОСТ Р МЭК 61140-2000 Защита от поражения электрическим током. Общие положения по безопасности, обеспечиваемой электрооборудованием и электроустановками в их взаимосвязи: дата введения 2002-01-01. – URL: <https://docs.cntd.ru/document/1200017996> (дата обращения: 05.03.2021). – Текст: электронный.
85. СанПиН 2.6.1.2523-09 Нормы радиационной безопасности НРБ-99/2009: дата введения 2009-09-01. – URL: <https://base.garant.ru/4188851/53f89421bbdaf741eb2d1ecc4ddb4c33/> (дата обращения: 21.02.21). – Текст: электронный.
86. СанПиН 2.2.4.548-96 Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений: дата введения 1996-10-01. – URL: <http://docs.cntd.ru/document/901704046> (дата обращения: 15.02.21). – Текст: электронный.
87. ГОСТ 32548-2013 Вентиляция зданий. Воздухораспределительные устройства. Общие технические условия: дата введения 2015-01-01. – URL: <https://docs.cntd.ru/document/1200110084> (дата обращения: 11.05.21). – Текст: электронный.
88. СНиП 41-01-2003 Отопление, вентиляция и кондиционирование: дата введения 2004-01-01. – URL: <http://docs.cntd.ru/document/1200035579> (дата обращения: 15.02.21). – Текст: электронный.
89. ГОСТ 12.1.029-80 Средства и методы защиты от шума: дата введения 1987-07-01. – URL: <http://docs.cntd.ru/document/5200292> (дата обращения: 15.02.21). – Текст: электронный.

90. ГОСТ 12.4.026-76* Система стандартов безопасности труда. Цвета сигнальные и знаки безопасности: дата введения 1978-01-01. – URL: <http://docs.cntd.ru/document/1200003391> (дата обращения: 15.02.21). – Текст: электронный.

91. СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 О введении в действие санитарно-эпидемиологических правил и нормативов: дата введения 2003-06-03. – URL: <http://docs.cntd.ru/document/901865498> (дата обращения: 16.02.21). – Текст: электронный.

92. ГОСТ 12.1.006-84 Электромагнитные поля радиочастот. Допустимые уровни на рабочих местах и требования к проведению контроля: дата введения 1986-01-01. – URL: <http://docs.cntd.ru/document/5200272> (дата обращения: 16.02.21). – Текст: электронный.

93. ГОСТ Р 22.0.02-2016 Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Термины и определения: дата введения 2017-01-01. – URL: <https://docs.cntd.ru/document/1200139176> (дата обращения: 11.03.2021). – Текст: электронный.