1. Вступление. Описать проблему ядерной энергетики, проблему хранения топлива, иные возможные проблемы. Сказать про реакторы нового поколения, про их безопасность, про замкнутый цикл. Отметить проблему взаимодействия конструкционных материалов с жидкометаллическими теплоносителями. Наконец, поговорить про компьютерное моделирование.
2. Литературный обзор.
   1. Описать реактора БРЕСТ, его тех. характеристик и особенностей.
   2. Дать теорию по окислению сталей при взаимодействии с кислородом.
      1. Объяснить, откуда берется кислород в свинце и что с ним делать.
   3. Рассказать про ферритно-мартенситные стали, их состав, особенности.
      1. Перейти к стали ЭП-823. Рассказать про легирование данной стали различными элементами, как и на что эти элементы влияют.
   4. Показать исследования взаимодействия стали ЭП-823 с кислородом и/или свинцом.
   5. Написать про облучение потоками нейтронов. Объяснить, почему они высокоэнергетические.
   6. Дать данные по исследованию облученных образцов стали ЭП-823.
3. Методология
   1. Компьютерное моделирование. Его особенности и недостатки.
      1. Почему не ab-initio.
      2. Молекулярная статика (теория вкратце).
      3. Молекулярная динамика (теория вкратце).
   2. LAMMPS. В чем плюсы и минусы данного пакета.
      1. Потенциалы. Сказать почему нельзя промоделировать все типы атомов вместе. Почему так много времени тратится на поиск и выбор нужного потенциала.
      2. Термостаты. Какие бывают. Почему выбран термостат Берендсена. Как правильно греть и поддерживать температуру в системе. Что происходит с температурой и термостатом, когда мы работаем с каскадами столкновений.
   3. Обработка и визуализация выходных данных (Ovito и Origin).
4. Эксперимент
   1. Молекулярная статика.
      1. Свободная поверхность чистого железа, к которой подтягивается молекула кислорода при различных ориентациях. Разрыв такой молекулы.
      2. Движение кислорода после разрыва по кристаллической решетке.
   2. Молекулярная динамика.
      1. Рост оксидной пленки на поверхности чистого железа.
      2. Рост оксидной пленки на поверхности железо+12%хрома.
      3. Рост оксидной пленки на поверхности железо+30%хрома.
      4. Рост оксидной пленки на поверхности железо+хром+алюминий.
   3. Каскады столкновений.
      1. Каскад в окисленном железе.
      2. Каскад в окисленном железе+12%хром.
      3. Каскад в окисленном железе+30%хром.
      4. Каскад в окисленном железе+хром+алюминий.
5. Обсуждение результатов.
6. Выводы.
7. Список использованных литературных источников.