ТЕХНИКАЛЫҚ СИПАТТАМА

1265724 сатып алу бойынша
Ашық тендер тәсілімен

Лот № 1 (6 Р, 4566382) Әдістемелік құжаттарды әзірлеу / түзету бойынша жұмыстар

Тапсырыс беруші: "ҚМГ Инжиниринг" жауапкершілігі шектеулі серіктестігі
Ұйымдастырушы: "ҚМГ Инжиниринг" жауапкершілігі шектеулі серіктестігінің Атыраудағы филиалы

1. ТЖҚ қысқаша сипаттамасы

Атауы	**Мәні**
Жол нөмірі	6 Р
Атауы және қысқаша сипаттамасы	Әдістемелік құжаттарды әзірлеу / түзету бойынша жұмыстар, Әдістемелік және соған ұқсас құжаттарды жасау/түзеті жұмыстары
Қосымша сипаттама	Сутекті сақтау үшін TiFe қорытпаларын синтездеу әдістемесін есептік модельдеуді қолдана отырып әзірлеу жұмыстары
Саны	1.000
Өлшем бірлігі	-
Жеткізу орны	ҚАЗАҚСТАН, Атырау облысы, Атырау Қ.Ә., Атырау қ., мкр. Нұрсая, проспект Елорда, ст-е 10
Жеткізу шарттары	-
Жеткізу мерзімі	01.2027 бастап 12.2027 дейін (қоса алғанда)
Төлем шарттары	Алдын ала төлем - 0%, Аралық төлем - 100%, Соңғы төлем - 0%

2. Сипаттамасы және талап етілетін функционалдық, техникалық, сапалық және пайдалану сипаттамалары

2.1 Жұмыстарды көрсету мақсаттары:

2.1.1 Мердігер кванттық-механикалық есептеулерді (DFT - density functional theory/тығыздық функционалы теориясы) қолдана отырып, сутекті сақтауға арналған TiFe (титан-феррум) интерметаллиді негізіндегі қорытпаларды синтездеу және талдау әдістемесін әзірлеуі және жобаның екінші кезеңі үшін басқа да озық есептеуіш модельдеу әдістерінің қолданылу мүмкіндігін зерттеуі тиіс. Әзірленіп жатқан әдістеме бірінші кезеңде анықталған кемшіліктер мен модельдеу нәтижелерін ескеретін жетілдірілген модельді қамтуы тиіс. Бірінші кезең бойынша нәтижелер жұмыстарды екінші кезең бойынша жалғастыру үшін шартқа қол қойылғаннан кейін Мердігерге беріледі. Беру шарттары құпиялылық негізінде жүзеге асырылады.

2.1.2 Мердігер осы техникалық ерекшеліктің талаптарына сәйкес төмендегілерді орындауы/жүргізуі тиіс:

- VASP (Vienna Ab initio Simulation Package / атомдық масштабтағы материалдарды имитациялық кешенді модельдеу) және/немесе DFT (density functional theory / тығыздық функционалы теориясы) есептеулеріне арналған басқа да имитациялық модельдеу әдістерінің көмегімен электрондық құрылымды, сутектің абсорбциясы/десорбциясы термодинамикасын және қорытпаны легирлеу әсерлерін талдау үшін тығыздық функционалы теориясы (DFT – density functional theory / тығыздық функционалы теориясы) әдісі бойынша есептеулер жүргізу;

- Нәтижелер: Түзілу энергиясы, сутектің байланысу энергиясы, TiFe (титан-феррум) негізіндегі қорытпалардың құрылымдық тұрақтылығы.

2.1.3 LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator / ауқымды атомдық-молекулалық жаппай параллельді симулятор) (MD – molecular dynamics / молекулярлық динамика),

меншікті MC коды (Mechanical code / механикалық код), ANSYS/COMSOL және/немесе басқа да FEM (Finite Element Method / шекті элементтер әдісі) және т.б. имитациялық модельдеу әдістерін қолдана отырып, басқа модельдеу әдістерінің қолданылу мүмкіндігін зерттеу:

- Молекулярлық динамика (MD – molecular dynamics / молекулярлық динамика): Сутектің диффузиясы және микроқұрылымның эволюциясы;

- Монте-Карло әдісі (MC - Monte Carlo method): Сутегі сорбциясының/десорбциясының кинетикасы;

- Түпкілікті элементтер әдісі (FEM - Finite Element Method/Түпкілікті элементтер әдісі): Сутегі толтырылған қорытпалардың механикалық қасиеттерін талдау.

- Қорытпалардың құрамы, оларды алу шарттары және сутекті сақтау сипаттамалары туралы қолжетімді деректерді жинау және жүйелеу, кейіннен оларды машиналық оқыту әдістерін қолдана отырып талдау.

2.1.4 Әдіснамалық құжаттаманы әзірлеу үшін рентген фотоэлектрондық аппаратында (РФА) үлгілердің химиялық құрамы мен электрондық жай-күйін анықтау бойынша жұмыстар жүргізу.

2.1.5 Әдіснамалық құжаттаманы әзірлеу үшін сканерлейтін электрондық микроскопта (СЭМ) материалдардың құрамы туралы морфология, құрылымы туралы мәліметтер алу бойынша жұмыстар жүргізу.

2.2 Техникалық талаптар:

2.2.1 Мердігер жұмысқа Тапсырыс берушінің электрондық пошта арқылы жіберген өтінімін алғаннан кейін кіріседі.

2.2.2 Жұмыстарды орындау мерзімі шартқа 6-қосымшаға сәйкес жұмыстарды орындаудың күнтізбелік жоспарына сәйкес көрсетіледі.

2.2.3 Мердігер Тапсырыс берушінің сұрауы бойынша келісілген мерзімдерде анықтамалық материалдарды, презентациялар мен есептерді дайындауды жүзеге асырады.

2.2.4 Шартқа қол қойылғаннан кейін 3 (үш) жұмыс күні ішінде Мердігер Тапсырыс берушінің өтінімдеріне жедел әрекет ететін жауапты тұлғаны (Аты-жөні, байланыс деректерін) ұсынады.

2.3 Орындалатын жұмыстардың сипаттамасы:

2.3.1 Жұмыстар көлеміне DFT-есептеулерін орындау үшін негізгі құрал болып табылатын сертификатталған лицензияланған MedeA VASP (MedeA Vienna Ab initio Simulation Package) бағдарламалық қамтамасыз етуін және/немесе оның баламаларын пайдалана отырып, қорытпа құрамын оңтайландыру үшін тығыздық функционалы теориясы (DFT, density functional theory) әдісімен есептеулер жүргізу, сондай-ақ СЭМ әдісімен материалдардың морфологиясы мен элементтік құрамын зерттеу және РФЭС әдісімен үлгілердің химиялық құрамы мен электрондық күйін зерделеу кіреді. Сутектің материалға енуін, оксид қабаты арқылы тасымалдануын және гидридтердің түзілуін сипаттайтын қолданыстағы редукцияланған модельдерді әрі қарай дамыту және верификациялау.

2.3.2 Молекулалық динамика (MD - molecular dynamics/молекулалық динамика), Монте-Карло (MC - Monte Carlo method) және түпкілікті элементтерді модельдеу (FEM - Finite Element Method/Түпкілікті элементтер әдісі) әдістерінің қолданылуын зерттеу.

2.3.3 Қорытпалардың құрамын жетілдіру және оларды алу тәсілдерін салыстыру бойынша ұсынымдар әзірлеу.

Жұмыстарды орындау/қызмет көрсету тәртібі

Мердігер орындауға міндетті:

1. Әдістемелік құжаттаманы әзірлеу үшін осы техникалық ерекшеліктің талаптарына сәйкес сутекті сақтауға арналған TiFe (титан-феррум) негізіндегі интерметаллидтер үшін есептеуіш модельдеуді қолдана отырып, қорытпалар синтезі әдісін әзірлеу жұмыстары.

2. Орындалған жұмыстар аяқталғаннан кейін Мердігер әдістемелік құжаттама үшін барлық есептеуіш модельдеу нәтижелерін, пайдаланылған әдістер мен негізгі тұжырымдарды, оның ішінде қорытпалардың құрамын жетілдіру және оларды алу тәсілдерін салыстыру бойынша ұсынымдар әзірлеуді, сондай-ақ Scopus тізілімінде Q1-Q2 индикаторы бар жарияланған мақаланы қамтитын егжей-тегжейлі қорытынды есепті ұсынуға тиіс.

3. Есеп электронды форматта (PDF), ал қажет болған жағдайда мөрмен және қолтаңбамен баспа түрінде ұсынылуы керек.

3. Нормативтік-техникалық құжаттар

№ р/с	Атауы
1	Қазақстан Республикасы Энергетика министрінің 2024 жылғы 27 қыркүйектегі № 342 бұйрығы Қазақстан Республикасында сутегі энергетикасын дамытудың 2030 жылға дейінгі тұжырымдамасын бекіту туралы.

Қол қойған	Алтай Әсел
Қол қойылған күні	28.10.2026

ТЕХНИЧЕСКАЯ СПЕЦИФИКАЦИЯ

по закупке 1265724
способом Открытый тендер

Лот № 1 (6 Р, 4566382) Работы по разработке/корректировке методологических документов

Заказчик: Товарищество с ограниченной ответственностью "КМГ Инжиниринг"

Организатор: Атырауский филиал товарищества с ограниченной ответственностью "КМГ Инжиниринг"

1. Краткое описание ТРУ

Наименование	**Значение**
Номер строки	6 Р
Наименование и краткая характеристика	Работы по разработке/корректировке методологических документов, Работы по разработке /корректировке методологических и аналогичных документов
Дополнительная характеристика	Работы по разработке методики синтеза сплавов TiFe для хранения водорода с использованием вычислительного моделирования
Количество	1.000
Единица измерения	-
Место поставки	КАЗАХСТАН, Атырауская область, Атырау Г.А., г.Атырау, мкр. Нұрсая, проспект Елорда, ст-е 10
Условия поставки	-
Срок поставки	с 01.2027 по 12.2027 (включительно)
Условия оплаты	Предоплата - 0%, Промежуточный платеж - 100%, Окончательный платеж - 0%

2. Описание и требуемые функциональные, технические, качественные и эксплуатационные характеристики

2.1 Цели оказании работ:

2.1.1 Подрядчик должен разработать методику синтеза и анализа сплавов на основе интерметаллида TiFe для хранения водорода с использованием квантово-механических расчётов (теория функционала плотности, DFT) и исследовать применимость других передовых методов вычислительного моделирования для второго этапа проекта. Разрабатываемая методика должна предусматривать усовершенствованную модель, учитывающую недостатки и результаты моделирования, выявленные на первом этапе. Результаты по первому этапу будут переданы Подрядчику после подписания договора для продолжения работ по второму этапу. Передача осуществляется на условиях конфиденциальности.

2.1.2 Подрядчик согласно требованиям настоящей технической спецификации, должен выполнить /провести:

Расчёты по методу теории функционала плотности (DFT – density functional theory/теория функционала плотности) для анализа электронной структуры, термодинамики абсорбции/десорбции водорода и эффектов легирования сплава с помощью VASP (Vienna Ab initio Simulation Package/имитационное комплексное моделирование материалов атомного масштаба) и/или других имитационных методов моделирования для DFT (density functional theory/теория функционала плотности) расчетов;

Результаты: Энергия образования, энергия связывания водорода, структурная стабильность сплавов на основе TiFe (титан-феррум).

2.1.3 Исследование применимости других методов моделирования с имитационным методом моделирования LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator/ крупномасштабный

атомно-молекулярный массивно-параллельный симулятор) (MD – molecular dynamics/молекулярная динамика), Собственный код MC (Mechanical code), ANSYS/COMSOL и/или других FEM – Finite Element Method/Методов конечных элементов и др.:

Молекулярная динамика (MD – molecular dynamics/молекулярная динамика): Диффузия водорода и эволюция микроструктуры;

Метод Монте-Карло (MC – Monte Carlo method): Кинетика сорбции/десорбции водорода;

Метод конечных элементов (FEM – Finite Element Method/Метод конечных элементов): Анализ механических свойств сплавов, загруженных водородом;

Сбор и систематизация доступных данных о составе сплавов, условиях их получения и характеристиках хранения водорода для последующего анализа с применением методов машинного обучения.

2.1.4 Проведение работ по определению химического состава и электронного состояния образцов на рентгеновском фотоэлектронном аппарате (РФА) для разработки методологической документации.

2.1.5 Проведение работ по получению сведений о структуре, морфологии о составе материалов на сканирующем электронном микроскопе (СЭМ) для разработки методологической документации.

2.2 Технические требования:

2.2.1 Подрядчик приступает к работе после получения заявки от Заказчика по средству электронной почты.

2.2.2 Срок выполнения работ указывается согласно календарному плану выполнения работ в соответствии с приложением № 6 к договору.

2.2.3 Подрядчик по запросу Заказчика в согласованные сроки, осуществляет подготовку справочных материалов, презентаций и отчетов.

2.2.4 После подписания Договора, в течение 3 (трех) рабочих дней Подрядчик предоставляет (ФИО, контакты) ответственного лица, который будет оперативно реагировать на заявки Заказчика.

2.3 Описание выполняемых работ:

2.3.1 В объём работ входят расчёты методом теории функционала плотности (DFT, density functional theory) для оптимизации состава сплава с использованием сертифицированного лицензионного программного обеспечения MedeA VASP (MedeA Vienna Ab initio Simulation Package) и/или аналогов, которое является основным инструментом для выполнения DFT-расчётов, а также исследование морфологии и элементного состава материалов методом СЭМ и изучение химического состава и электронного состояния образцов методом РФЭС. Дальнейшее развитие и верификация существующих редуцированных моделей, описывающих проникновение водорода в материал, перенос через оксидный слой и образование гидридов.

2.3.2 Исследования применимости методов молекулярной динамики (MD – molecular dynamics /молекулярная динамика), Монте-Карло (MC – Monte Carlo method) и моделирования методом конечных элементов (FEM – Finite Element Method/Метод конечных элементов).

2.3.3 Разработка рекомендаций по совершенствованию состава сплавов и сравнению способов их получения.

Порядок выполнения работ/оказания услуг:

Подрядчик обязан выполнить:

1. Работы по разработке метода синтеза сплавов с использованием вычислительного моделирования для интерметаллидов на основе TiFe (титан-феррум) для хранения водорода согласно требованиям настоящей технической спецификации для разработки методологической документации.

2. По завершению выполненных работ Подрядчик должен предоставить детальный итоговый отчет, содержащий все результаты вычислительного моделирования, использованные методы и ключевые выводы для методологической документации, в том числе разработка рекомендаций по совершенствованию состава сплавов и сравнению способов их получения, а также опубликованную статью с индикатором Q1-Q2 в реестре Scopus.

3. Отчет должен быть предоставлен в электронном формате (PDF), а при необходимости – в печатном виде с печатью и подписью.

3. Нормативно-технические документы

№ п/п	Наименование
1	Приказ Министра энергетики Республики Казахстан от 27 сентября 2024 года № 342 Об утверждении Концепции развития водородной энергетики в Республике Казахстан до 2030 года.

Подписал	Алтай Әсел
Дата подписания	28.10.2026