

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

Физико-технический институт
Направление подготовки (специальность) - физика
Кафедра общей физики

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
Атомная и электронная структуры системы никель-водород: расчеты из первых принципов

УДК 66.243:539.1:544.16

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б30	У Мэняо		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент	Святкин Леонид Александрович			

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Меньшикова Екатерина Валентиновна	Кандидат философских наук		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Волков Юрий Викторович	к.т.н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Зав. кафедрой	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Зав. кафедрой общей физики	Лидер Андрей Маркович	к.ф.-м.н.		

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

Физико-технический институт
Направление подготовки (специальность) - физика
Кафедра общей физики

УТВЕРЖДАЮ:
Зав. кафедрой
_____ Лидер А.М.
(Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ

на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Бакалаврской работы

(бакалаврской работы, дипломного проекта/работы, магистерской диссертации)

Студенту:

Группа	ФИО
150Б30	У Мэняо

Тема работы:

Атомная и электронная структуры системы никель-водород: расчеты из первых принципов

Утверждена приказом директора (дата, номер)

Срок сдачи студентом выполненной работы:

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе

*(наименование объекта исследования или проектирования;
производительность или нагрузка; режим работы
(непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид
сырья или материал изделия; требования к продукту,
изделию или процессу; особые требования к особенностям
функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в
плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую
среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).*

Объектами исследования являлись атомная и электронная структуры системы никель-водород.

<p>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</p> <p><i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i></p>	<p>Обзор литературы по взаимодействию металлов с водородом, его влиянию на атомную и электронную структуру конструкционных материалов. Рассмотрены особенности поведения водорода в никеле.</p> <p>Оптимизация и релаксация атомной структуры системы никель-водород при различной координации и концентрации атомов водорода в решетке никеля.</p> <p>Расчет электронной структуры (зарядовой плотности) системы никель-водород.</p> <p>Анализ полученных результатов, выявление особенностей взаимодействия водорода с никелем.</p> <p>Раздел «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»</p> <p>Раздел «Социальная ответственность»</p>
--	--

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы	
Раздел	Консультант
Социальная ответственность	Волков Юрий Викторович, доцент ЭБЖ ИНК
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Меньшикова Екатерина Валентиновна, доцент МЕН ИСГТ
Иностранный язык	

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	03.03.2017
---	------------

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент ОФ ФТИ	Святкин Леонид Александрович			

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б30	У Мэняо		

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

Студенту:

Группа	ФИО
150Б30	У Мэняо

Институт	Физико-технический	Кафедра	Общей физики
Уровень образования	Бакалавр	Направление/специальность	03.03.02 Физика

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

1. <i>Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	<i>Определение стоимости ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых информационных и человеческих. Затрата на реализацию равно 95693.0 рублей.</i>
2. <i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	<i>Знакомство и отбор норм и нормативов расходования ресурсов</i>
3. <i>Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	<i>Знакомство с системой налогообложения, со ставками 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>	<i>Оценка коммерческого и инновационного потенциала НИИ</i>
2. <i>Планирование и формирование бюджета научных исследований</i>	<i>Планирование процесса управления НИИ: структура и график проведения, бюджет.</i>
3. <i>Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования</i>	<i>Определение ресурсной, финансовой, экономической составляющей</i>

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. *Технология QuaD*
2. *Матрица SWOT*
3. *График проведения и бюджет НИ*
4. *Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИ*

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Меньшикова Екатерина Валентиновна	Кандидат философских наук		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б30	У Мэняо		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
150Б30	У Мэняо

Институт	Физико-технический	Кафедра	Общей физики
Уровень образования	Бакалавр	Направление/специальность	03.03.02 Физика

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

<p>1. <i>Описание рабочего места (рабочей зоны, технологического процесса, механического оборудования) на предмет возникновения:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> – <i>вредных проявлений факторов производственной среды (метеоусловия, вредные вещества, освещение, шумы, вибрации, электромагнитные поля, ионизирующие излучения)</i> – <i>опасных проявлений факторов производственной среды (механической природы, термического характера, электрической, пожарной и взрывной природы)</i> – <i>негативного воздействия на окружающую природную среду (атмосферу, гидросферу, литосферу)</i> – <i>чрезвычайных ситуаций (техногенного, стихийного, экологического и социального характера)</i> 	<p>1. При работе на компьютере на работников возможно воздействие следующих вредных факторов:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Микроклимат; - Электромагнитные поля - Статическое электричество - Шум - Недостаточное освещение. <p>А также опасных факторов:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Электрическое напряжение; - Воздействие высокой температуры; <p>2. Работа компьютера осуществляется за счет питания от сети переменного тока напряжением 220 В.</p>
<p>2. <i>Знакомство и отбор законодательных и нормативных документов по теме</i></p>	<p>По данной теме рассматриваются законодательный и нормативные документы:</p> <ul style="list-style-type: none"> - инструкция № 2-14 по охране труда при работе с электрооборудованием напряжением до 1000 В; <p>Документы по воздействию ПЭВМ:</p> <ul style="list-style-type: none"> - инструкция № 2-08 по охране труда при работе с ПЭВМ и ВДТ; - СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03. Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организация работы; - ГОСТ Р 50948-01. Средства отображения информации индивидуального пользования. Общие эргономические требования и требования безопасности; - ГОСТ Р 50949-01. Средства отображения информации

	<p>индивидуального пользования. Методы измерений и оценки эргономических параметров и параметров безопасности;</p> <ul style="list-style-type: none"> - ГОСТ Р 50923-96. Рабочее место оператора. Общие эргономические требования и требования к производственной среде. Методы измерения. <p>Микроклимат:</p> <ul style="list-style-type: none"> - ГОСТ 30494-96 Здания жилые и общественные помещения. Параметры микроклимата в помещении; - ГОСТ 12.1.005 Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны; - СанПиН 2.2.4.548-96 Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
<p><i>1. Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> – физико-химическая природа вредности, её связь с разрабатываемой темой; – действие фактора на организм человека; – приведение допустимых норм с необходимой размерностью (со ссылкой на соответствующий нормативно-технический документ); – предлагаемые средства защиты (сначала коллективной защиты, затем – индивидуальные защитные средства) 	<p>1. Характеристика факторов изучаемой производственной среды, описывающих процесс взаимодействия человека с окружающей производственной средой:</p> <ul style="list-style-type: none"> – Воздействие электрического напряжения на организм человека; – Воздействие высокой температуры на организм человека; – Воздействие химических веществ на дыхательные пути и организм человека в целом; – Микроклимат.
<p><i>2. Анализ выявленных опасных факторов проектируемой произведённой среды в следующей последовательности</i></p> <ul style="list-style-type: none"> – механические опасности (источники, средства защиты); – термические опасности (источники, средства защиты); – электробезопасность (в т.ч. статическое электричество, молниезащита – источники, средства защиты); – пожаровзрывобезопасность (причины, профилактические мероприятия, первичные средства пожаротушения) 	<p>2. Анализ опасных факторов проектируемой производственной среды:</p> <ul style="list-style-type: none"> – электробезопасность (непосредственное питание установки от сети постоянного тока 220 В; средства защиты, предусмотренные конструкцией установки, соблюдение правил и инструкций по электробезопасности при работе); – термическая опасность (печь нагрева образцов; защита специальной конструкцией установки, изолирующие слои, соблюдение правил безопасности и эксплуатации установки); – пожаровзрывобезопасность (соблюдение правил безопасности и

	эксплуатации установки).
<p>3. Охрана окружающей среды:</p> <ul style="list-style-type: none"> – защита селитебной зоны – анализ воздействия объекта на атмосферу (выбросы); – анализ воздействия объекта на гидросферу (сбросы); – анализ воздействия объекта на литосферу (отходы); – разработать решения по обеспечению экологической безопасности со ссылками на НТД по охране окружающей среды. 	<p>3. Факторы рабочего места, влияющие на окружающую среду:</p> <ul style="list-style-type: none"> – Выброс в атмосферу рабочего газа; <p>Выброс в атмосферу химических веществ;</p>
<p>4. Защита в чрезвычайных ситуациях:</p> <ul style="list-style-type: none"> – перечень возможных ЧС на объекте; – выбор наиболее типичной ЧС; – разработка превентивных мер по предупреждению ЧС; – разработка мер по повышению устойчивости объекта к данной ЧС; – разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий 	<p>4. Защита в чрезвычайных ситуациях:</p> <ul style="list-style-type: none"> – Возникновение возгорания; – Поражение оператора установки электрическим током; – разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий.
<p>5. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:</p> <ul style="list-style-type: none"> – специальные (характерные для проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны 	<p>5. Правовые вопросы обеспечения безопасности</p> <ul style="list-style-type: none"> – Организационные мероприятия обеспечения безопасности; – Особенности законодательного регулирования проектных решений.
Перечень графического материала:	
<p>При необходимости представить эскизные графические материалы к расчётному заданию (обязательно для специалистов и магистров)</p>	<p>1.Схема расположения оборудования;</p> <p>2. План размещения светильников на потолке рабочего помещения.</p>

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Волков Юрий Викторович	к.т.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б30	У Мэняо		

Реферат

Выпускная квалификационная работа 107 с., 25 рис., 15 табл., 41 источник, прил. нет

Ключевые слова: никель, водород, первопринципные расчеты, атомная структура, плотность валентного заряда.

Объектом исследования являлась электронная структура системы Ni-H.

Целью данной работы является первопринципное исследование электронной и атомной структуры системы водорода в никеле в зависимости от концентрации примеси. Расчеты выполняются в рамках теории функционала электронной плотности с использованием методов псевдопотенциала и проекционных присоединенных волн, которые реализованы в пакете программ ABINIT [1].

В процессе исследования проводились: выбор метода псевдопотенциала и метода проекционных присоединенных волн, реализованном в пакете программ ABINIT, оптимизация атомной структуры никеля и систем Ni-H, полная релаксация решетки систем Ni-H.

В результате исследования установлено следующее:

1) Выбраны и реализованы метод псевдопотенциала и метод проекционных присоединенных волн, реализованном в пакете программ ABINIT:

- Проводить исследования при температуре 0 К;
- Определить равновесные положения атомов в кристалле;
- Исследовать полную энергию системы никель-водород.
- Исследовать плотность валентных электронов системы никель-водород;

2) На суперкомпьютере ФТИ НИ ТПУ проведено исследование атомной и электронной структуры.

3) Получена электронная структуры (зарядовая плотность) системы никель–водород. Анализ полученных результатов, выявление особенностей взаимодействия никеля с водородом.

Степень внедрения: результаты работы представлены на международных конференциях и семинарах.

Область применения: водородная энергетика, защитные покрытия в химически активных средах, описание особенностей взаимодействия водорода с никелем.

Экономическая эффективность/значимость работы: результаты позволят выявить особенности взаимодействия водорода с никелем и могут быть использованы в дальнейшем для разработки защитных покрытий от коррозии конструкционных материалов в химически активных средах.

В будущем планируется: расчет из первых принципов фононных спектров и упругих свойств системы никель-водород.

Оглавление

Введение.....	14
Глава I Водород в никеле	17
1.1 Растворение водорода в металлах	17
1.2 Растворимость водорода в никеле	18
1.3 Фазовая диаграмма системы Ni-H.....	20
1.4 Атомная и электронная структуры системы Ni-H	22
1.5 Энергия связи водорода в никеле	27
Глава II Основные методы и приближения в расчетах из первых принципов.	30
2.1 Основные приближения	30
2.1.1 Адиабатическое приближение	31
2.1.2 Одноэлектронное приближение.....	32
2.1.3 Зонное приближение.....	35
2.1.4 Приближение локальной плотности	36
2.1.5 Приближение обобщённого градиента	38
2.2 Метод псевдопотенциала.....	39
2.3 Метод проекционных присоединенных волн.....	43
2.4 Уравнение Кона–Шема	45
Глава III Детали и результаты расчета	48
3.1 Схема и детали расчета.....	48
3.2 Результаты и обсуждение	51
3.2.1 Магнитный момент и параметры решетки	51
3.2.2 Энергия растворения водорода в никеле	54

3.2.3	Распределение электронной плотности.....	55
3.2.3.1	Ферромагнитные системы.....	55
3.2.3.2	Парамагнитные системы	62
Глава IV	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение.....	65
	Введение.....	65
4.1	Потенциальные потребители результатов исследования	66
4.1.1	Технология QuaD.....	66
4.2	SWOT-анализ	67
4.3	Структура работ в рамках научного исследования.....	70
4.3.1	Планирование этапов работ	70
4.3.2	Определение трудоемкости выполнения НИОКР	72
4.4	Определение трудоемкости выполнения работ.....	74
4.5	Разработка графика проведения научного исследования.....	75
4.6	Бюджет научно-технического исследования (НТИ)	77
4.6.1	Расчет материальных затрат НТИ	77
4.6.2	Основная и дополнительная заработная плата исполнителей темы.....	78
4.6.3	Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)	80
4.6.4	Накладные расходы.....	81
4.6.5	Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта ..	81
	Выводы	82
Глава V	Социальная ответственность	83
5.1	Техногенная безопасность.....	83

5.1.1 Микроклимат	84
5.1.2 Электромагнитные поля	85
5.1.3 Шум	86
5.1.4 Недостаточное освещение.....	88
5.1.5 Электрическое напряжение	90
5.1.6 Воздействие высокой температуры	90
5.2 Региональная безопасность.....	91
5.3 Организационные мероприятия обеспечения безопасности	91
5.4 Особенности законодательного регулирования проектных решений	92
5.5 Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....	93
5.6 Расчет искусственного освещения	95
Вывод.....	99
Заключение.....	100
Список используемых источников	103

Введение

Никель широко используют в кораблестроении, в электротехнике, при изготовлении различной химической аппаратуры и никель-металлогибридных аккумуляторов и для многих других целей. Он также используется для хранения водорода в водородной энергетике. В своем неизменном виде этот материал находит применение в качестве защитного покрытия, защищающего от коррозии. Такие защитные покрытия на железе и других металлах можно получить с помощью двух способов: гальванопластикой или плакировкой. Повышенной коррозионной стойкостью обладают сплавы из никеля. Особенно соединения этого металла с железом, молибденом, хромом и медью. Катализаторы, содержащие никель, находят широкое применение, в частности в таких реакциях как гидрирование, алкилирование, гидроалкилирование, в процессах крекинга и др. Водород является наиболее распространенным элементом во вселенной. Взаимодействие водорода с переходными металлами – это одно из основных научных направлений исследований материалов. Научный интерес, в частности, представляет взаимодействие водорода с никелем. Насыщение никеля водородом приводит к хрупкому межкристаллитному разрушению: при испытании на растяжение относительное удлинение чистого никеля при 20°C не зависит от скорости деформации, тогда как удлинение наводороженного никеля уменьшается с ее понижением. Относительно высокая стойкость электролитического никеля обусловлена его высокой пассивностью, в то время как никель металлургический более активен. Это различие связывается с

содержанием в никеле водорода. Расчеты из первых принципов позволяют выявить особенности взаимодействия водорода с никелем на микроскопическом уровне. Термин “из первых принципов” (*ab initio* в зарубежной литературе) означает, что никакие экспериментальные параметры не используются при проведении расчётов, нет никаких подгоночных значений и изначальные входные параметры опираются только на общеизвестные фундаментальные физические постоянные [2]. Теория функционала электронной плотности – это наиболее успешный и многообещающий аппарат описания электронной структуры материалов из первых принципов.

Целью данной работы является первопринципное исследование электронной и атомной структуры системы никель-водород в зависимости от концентрации примеси в решетке металла. Расчеты выполняются в рамках теории функционала электронной плотности методами псевдопотенциала и проекционных присоединенных волн, которые реализованы в пакете программ ABINIT.

Для достижения этой цели были поставлены следующие задачи:

1. Ознакомиться с текущим состоянием вопроса о процессах, происходящих в никеле при растворении в нем водорода;
2. Изучить методы псевдопотенциала и проекционных присоединенных волн, особенности их применения;
3. Определить зависимость параметров решетки Ni от концентрации водорода в нем;

4. Рассчитать энергию связи, магнитный момент и распределение зарядовой плотности в системе Ni-H при различном соотношении атомов водорода и никеля;
5. Выявить особенности взаимодействия водорода с никелем.

Глава I Водород в никеле

1.1 Растворение водорода в металлах

Водород в различной степени активно поглощается большинством металлов и сплавов и удерживается в них уже при комнатной температуре при атмосферном давлении. Количество водорода, которое может поглотить тот или иной металл, зависит от его температуры и состояния поверхности. Так, например, медь, железо, золото и платина при нормальных условиях способны поглощать до одного объема водорода на один свой объем. В относительно небольших количествах водород также поглощается такими металлами, как никель, алюминий, магний. Большее количество водорода может растворять в себе металлический палладий: например, палладиевая пластинка на 1 свой объем при 19° поглощает до 376 объемов водорода, при 90° – до 643 объемов, а при 245° до 526 объемов [3]. То есть с увеличением температуры способность палладия поглощать водород растает до некоторого максимума, а затем начинает уменьшаться. Стоит отметить, что, губчатый палладий способен растворять в себе до 655 объемов водорода при 200° [3]. Порошкообразные металлы, обладающие большей площадью поверхности, при высоких температурах способны поглощать водород в еще больших количествах. Растворение водорода в решетке металлов и сплавов приводит к увеличению их объема, так называемому, разбуханию. Так если в опыте с электролитическим разложением воды палладиевый электрод, на котором будет выделяться

водород, покрыть с одной стороны лаком, то при пропускании тока через электролит пластинка будет закручиваться из-за расширения непокрытой лаком поверхности, вызванного интенсивным проникновением водорода в решетку металла. Отметим, что способность металлов растворять в себе водород определяется природой их взаимодействия с атомами примеси, которую позволяют детально изучить современные методы квантовомеханических расчетов, начиная с проникновения водорода в решетку металла и заканчивая формированием устойчивых химических соединений, в частности гидридов.

1.2 Растворимость водорода в никеле

В узком диапазоне концентраций смеси водорода и никеля могут образовываться лишь несколько различных структур, с очень разными свойствами. Описание таких свойств имеет значение для понимания процессов образования гидроксида никеля. При комнатной температуре, наиболее стабильной формой никеля является гранцентрированной кубической (ГЦК) структура α -никель. Это довольно мягкий металлический материал, который может растворить лишь очень небольшую концентрацию водорода, не более 0,002 масс.% при 1455°C, и только 0,00005 масс.% при 25°C. Фазу твердый раствор с растворенным водородом, который поддерживает такую же кристаллическую структуру, что и исходный никель называется альфа-фазой.

При температуре 25°C водород можно растворить в никеле под давлением ~6 кбар, но водород выйдет из металла, если давление упадет ниже 3,4 кбар [4].

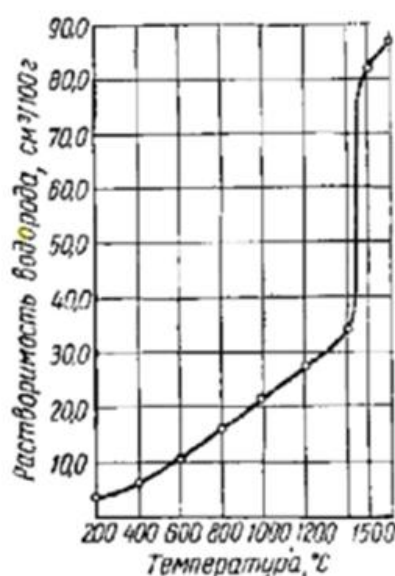


Рисунок 1 – Растворимость водорода в никеле в зависимости от температуры

Растворимость водорода в никеле значительно выше, чем в других металлах подгруппы железа и меди, и резко увеличивается с повышением температуры (рисунок 1). Относительно высокая растворимость водорода в никеле обусловлена малыми размерами атомов Н по сравнению с атомами Ni, что позволяет им легко внедряться в междоузлия кристаллической решетки металла. Проблема высокой растворимости водорода особенно актуальна при сварке изделий из никеля и сплавов с его высоким содержанием, поскольку высокая концентрация водорода (особенно вместе с закисью никеля NiO) в области сварного шва приводит к возникновению так называемого водородного охрупчивания, что в конечном итоге приводит к образованию пор и

микротрещин в изделиях. Для предотвращения водородного охрупчивания обычно стремятся не просто уменьшить концентрацию водорода, связывая его в стойкие летучие соединения, но и хорошо раскислять металл сварочной ванны, поскольку при недостаточном раскислении металла негативное влияние водорода на свойства и характеристики сварного шва усиливается [5].

1.3 Фазовая диаграмма системы Ni-H

Система Ni-H может представлять собой как гидрид, так и твердый раствор (фазовая диаграмма [6] приведена на рисунке 2). Гидриды имеют фиксированную стехиометрию, а твердый раствор нет: водород является примесью и не имеет жестко заданного расположения. Упругое взаимодействие H-H в твердом растворе играет важную роль в никеле и является в значительной степени ответственным за несмешиваемость твердого раствора водорода в металле с гидридом никеля. Гидрид никеля существует в равновесии при высоких давлениях при температурах ниже критической точки. Он состоит из ГЦК решетки атомов Ni с атомами H, расположенными в октаэдрических междоузлиях [7]. Занятие всех октаэдрических междоузлиях атомами H приведет к образованию гидрида с $X = H/Ni = 1,0$; гидрид формируется при концентрациях водорода в диапазоне от $X = 0,6 \div 1,0$, с наибольшей вероятностью при значениях X от 0,8 до 0,9. В ряде исследований [6] обнаружен гидрид с X выше, чем 1,0, однако в ряде случаев возможность такой ситуации не

доказана [8]. При значениях $X > 1,0$ атомы водорода всегда наряду с октаэдрическими междуузлиями будут занимать и тетраэдрические междуузлия. Гидрид NiH с $X \sim 1,0$ в отличие от ферромагнитного никеля является парамагнетиком с положительным коэффициентом температурной зависимости удельного электрического сопротивления [9].

Кристаллографические исследования системы Ni–H были проведены в основном с помощью дифракции рентгеновских лучей (XRD, [10]), хотя нейтронография позволяет выявить расположение атомов водорода в решетке никеля. Большинство измерений рентгеноструктурным анализом были сделаны при комнатной температуре, хотя в некоторых случаях, структура изучалась Ni–H и при более низких температурах.

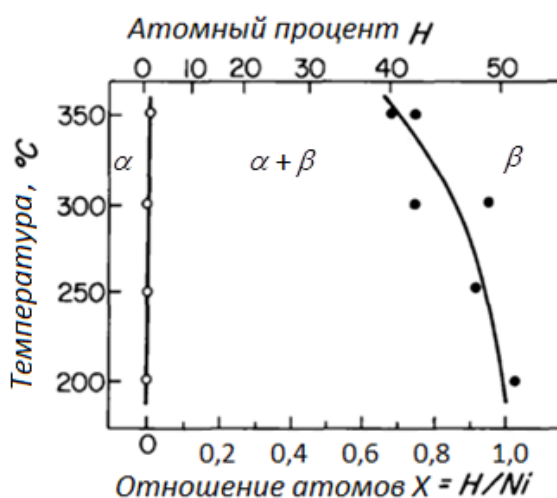


Рисунок 2 – Фазовая диаграмма Ni–H, белые и черные точки изображают границы фазовых переходов

В процессе наводороживания никеля значительных изменений в его структуре не наблюдается, пока содержание водорода не достигает

определенного значения $X_{\max} \sim 0,6$, при котором дифракционная картина начинает значительно изменяться. При дальнейшем наводороживании интенсивность линий, соответствующих чистому Ni уменьшается, а интенсивность линий β -гидрида увеличивается, пока линии Ni полностью не исчезают. Увеличение содержания H в β -гидриде приводит к возрастанию параметра решетки β -гидрида.

Водород действует как отвердитель, предотвращая сдвиги и скольжения атомов никеля относительно друг друга в кристаллической решетке. Варьируя количество растворенного водорода и формы его присутствия в гидриде никеля (выпавшей фазы), можно контролировать такие механические свойства получаемого гидрида никеля, как твердость, пластичность и прочность при растяжении. Гидрид никеля с повышенным содержанием водорода, может быть тяжелее и прочнее, но менее пластичен, чем никель. Потери пластичности происходят из-за трещин, возникающих за счет неупругой деформации под действием водорода, и пустот, образующихся при растяжении вследствие образования гидридов [11]. Водородное охрупчивание может быть проблемой в никеле при использовании в турбинах при высоких температурах [12].

1.4 Атомная и электронная структуры системы Ni-H

Исследованию влияния водорода на различные свойства никеля посвящено достаточно большое количество работ, однако большая часть из них

посвящена изучению макроскопических характеристик системы металл-водород. Ниже мы рассмотрим несколько работ, целью которых явилось теоретическое изучение атомной и электронной структуры чистого никеля и системы Ni-H. Так в работе [13] была оптимизирована постоянная кристаллической решетки Ni. В расчетах использовался кластер, содержащий 43 атома никеля, и такой же кластер, с одним вакантным узлом в центре (то есть содержал 42 атома никеля). На рисунке 3 представлены результаты расчета энергии связи никеля в кластере из 43 атомов в зависимости от постоянной кристаллической решетки a . Из рисунка 3 видно, что минимальному значению энергии связи (4,46 эВ) соответствует параметр решетки $a = 0,358$ нм, что хорошо согласуется с экспериментальными значениями (4,45 эВ и 0,352 нм, соответственно).

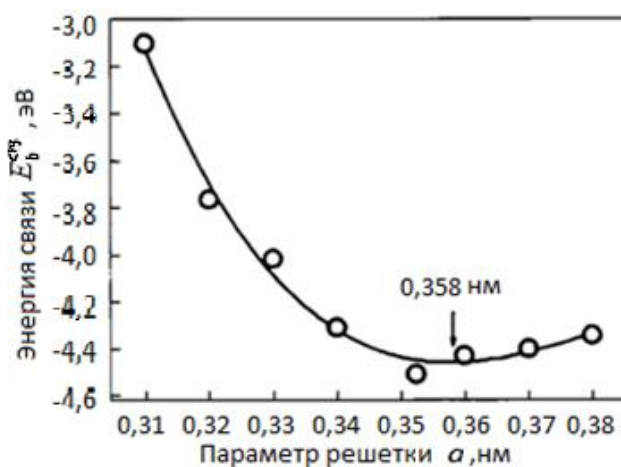


Рисунок 3 – Энергии связи атома водорода в никеле в зависимости от постоянной кристаллической решетки. Круги являются вычисленными точками.

Линия является экстраполяционной кривой

В работе [14] были изучены изменения электронных состояний Ni в зависимости от концентрации H. Расчеты в данной работе проводились методом линеаризованных МТ-орбиталей в приближении атомной сферы ASA

(atomic-sphere approximation) [15] с использованием приближения локальной спиновой плотности для обменно-корреляционного потенциала [16] и приближения замороженного остова, когда ядра водорода, являлись фиксированным положительным зарядом. Однако, эти расчеты не являлись первопринципными и позволили лишь качественно оценить влияние водорода на электронную структуру Ni.

В работе [14] рассматривалась ячейка, в которой находилось четыре атома Ni (рисунок 4), расположенных в узлах 1-4 решетки. Атомы H размещались в октаэдрических междуузлиях (положения 5-8 на рисунке 4). Для вычисления зонной структуры использовались специальные сферы радиусом $S_H=0,1582a$ для водорода и $S_{Ni}=0,382a$ для никеля. При таких радиусах перекрытие сфер для Ni-H и Ni-Ni составляет $0,04a$ и $0,057a$ соответственно.

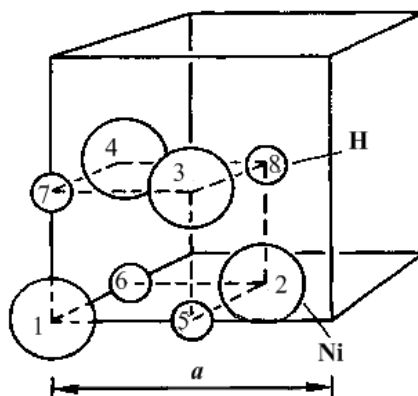


Рисунок 4 – Элементарная ячейка кристалла Ni использованная в работе [14].

a – постоянная решетки

В таблице 1 приведены полученные в работе [14] значения постоянной решетки Ni в зависимости от концентрации H. В работе [14] постоянная решетки

$a_{\text{расч}}$ рассчитывались из зависимости давления P от объема V элементарной ячейки. Равновесный объем V_0 определялся из условия:

$$P(V_0) = 0. \quad (1.1)$$

С другой стороны значения постоянной решетки $a_{\text{эксп}}$ определялись с помощью экспериментальной формулы

$$a_{\text{NiH}_x} = (a_{\text{Ni}}^3 + 4X\Delta V_{\text{H}}), \quad (1.2)$$

где a_{Ni} – постоянная решетки чистого никеля, X – относительная концентрация водорода в никеле, ΔV_{H} – увеличение объема элементарной ячейки в расчете на один добавленный в нее атом водорода (определялась из эксперимента).

Таблица 1 – Постоянные решетки $a_{\text{расч}}$ и $a_{\text{эксп}}$ гидридов NiH_x , полученные в работе [14].

X	$a_{\text{расч}}, \text{Å}$	$a_{\text{эксп}}, \text{Å}$
0	3,49	3,52
0,25	3,56	3,59
0.5	3,61	3,66
0,75	3,67	3,72
1	3,69	3,72

В работе [14] показано, что плотность электронных состояний, соответствующая энергии Ферми сначала увеличивается, достигает максимума при концентрации водорода, соответствующей стехиометрическому составу $\text{NiH}_{0,25}$, а затем падает. Это объясняется тем, что при больших концентрациях водорода $3d$ -зон в никеле полностью заполняются, т.е. уровень Ферми находится

выше $3d$ -зон, а следовательно плотность электронных состояний будет ниже при энергии равной энергии Ферми. Также было отмечено, что при энергии Ферми плотность электронных состояний стехиометрических растворов Ni_4H и Ni_2H выше, чем чистого Ni .

Таблица 2 – Магнитный момент в магнетонах Бора μ_B , рассчитанный в работе [14] в каждой атомной сфере (рисунок 4) в зависимости от концентрации водорода в элементарной ячейке

Сфера	Ni	NiH _{0.25}	NiH _{0.5}	NiH _{0.75}	NiH
1	0,646	0,7440	0,45	0,00	0,00
2	0,646	0,3805	0,45	0,00	0,00
3	0,646	0,3805	0,17	0,00	0,00
4	0,646	0,3805	0,17	0,00	0,00
5	-0,0045	-0,0036	-0,0025	0,00	0,00
6	-0,0045	-0,0036	-0,0025	0,00	0,00
7	-0,0045	-0,0036	-0,0042	0,00	0,00
8	-0,0045	-0,0040	-0,0042	0,00	0,00

В таблице 2 представлены результаты расчетов магнитных моментов в атомных сферах в зависимости от концентрации H. Согласно представленным данным при увеличении концентрации H намагниченность системы металл-водород уменьшается, и при содержании водорода выше $X = 0,75$ система Ni-H становится парамагнитной. Также установлено, что электронная плотность значительно увеличена вблизи ядер водорода в соединениях NiH_x по

сравнению со свободным атомом водорода. Это объясняется переносом заряда от атомов никеля к атомам водорода.

1.5 Энергия связи водорода в никеле

Согласно общепринятому мнению, атом и ион водорода очень малы по сравнению с атомами металла и практически не вызывают сильного искажения его кристаллической решетки. В работе [13] была изучена энергия связи водорода в кластере из атомов никеля в зависимости от его зарядового состояния: положительный ион H^+ , отрицательный ион H^- и нейтральный атом H . Расчет проводился для кластеров двух видов: О–кластер (октаэдрический кластер) и Т–кластер (тетраэдрический кластер) с октаэдрической и тетраэдрической координацией водорода, соответственно. На рисунке 5 представлены результаты вычисления зависимости полной энергии связи кластера никель-водород от расстояния между атомом H и ближайшим к нему атомом Ni . Для О–кластера вне зависимости от состояния водорода низкие значения полной энергии лежат в широком диапазоне длин связи $Ni-H$. Это может быть объяснено следующим образом. Широкий минимум энергии в диапазоне $0,17 \div 0,20$ нм означает, что энергия связи водорода с атомами никеля не чувствительна к длине связи $Ni-H$, поэтому можно считать, что между атомами водорода и никеля нет сильных связей в этой области. Это также означает, что октаэдрическое междоузлие в Ni является достаточно большим, чтобы держать атом водорода или ион.

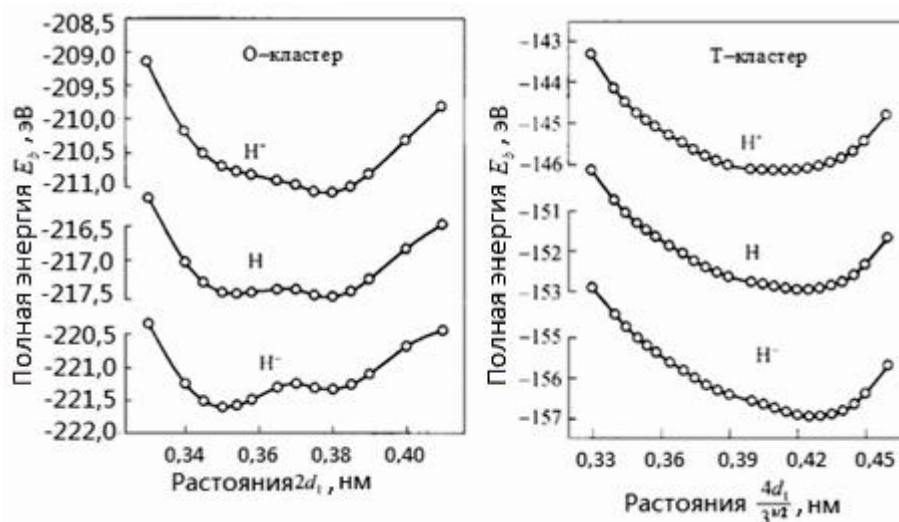


Рисунок 5 – Полная энергия кластера Ni-H в зависимости от длины d связи Ni-H

Для T-кластера три кривые еще более похожи друг на друга, и высокие энергии связи приходятся также на диапазон 0,17–0,20 нм. Энергия связи атома H в никеле составила в O-кластера и T-кластера $-6,0$ эВ и $-5,4$ эВ, соответственно. Это означает, что водород, как и указывалось выше, предпочитает занимать октаэдрические междоузлия. Следует отметить, что ионы H в междоузлиях Ni не должны существовать в виде чистых ионов, и электроны должны быть распределены между H и Ni. В отличие от кластера, легированного нейтральным атомом H, в кластерах с ионами H отсутствуют или добавлены электроны. Это приводит к разнице в кулоновском потенциале кластеров, а, следовательно, к различным значениям. Тем не менее, все три кривые как для O-кластера, так и для T-кластера имеют одинаковую форму, что указывает на отсутствие влияния зарядового состояния водорода в никеле на тип зависимости. Рассчитанный в работе [13] радиус тетраэдрического междоузлия в Ni $r_T = 28.0$ пм, радиус октаэдрического междоузлия в Ni $r_O = 51.6$ пм. В

работе [17] получено, что атом водорода предпочитает заполнять только октаэдрические междоузлия.

Глава II Основные методы и приближения в расчетах из первых принципов

2.1 Основные приближения

Все твердые тела состоят из $\sim 10^{23}$ частиц, взаимодействующих друг с другом. По этой причине, расчет уровней энергии и волновых функций твердого тела не может обойтись без помощи многих упрощающих предположений [18].

Кристалл является ансамблем взаимодействующих друг с другом электронов и атомных ядер, поэтому его полный гамильтониан можно записать в следующем виде:

$$\hat{H}_t = \hat{T}_e + \hat{T}_L + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{eL} + \hat{V}_{LL} \quad (2.1)$$

где через \hat{T}_e и \hat{T}_L обозначены операторы кинетической энергии электронов и атомных ядер, слагаемые \hat{V}_{ee} , \hat{V}_{eL} и \hat{V}_{LL} описывают соответственно взаимодействия электронов друг с другом, электронов с ядрами и ядер между собой. Каждое из этих слагаемых запишем в следующем виде:

$$\hat{T}_e = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2, \quad \hat{T}_L = -\sum_I \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_I^2$$
$$\hat{V}_{ee} = \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}, \quad \hat{V}_{eL} = \sum_{i,I} \frac{Z_I e^2}{|\vec{R}_I - \vec{r}_i|}, \quad \hat{V}_{LL} = \sum_{I \neq J} \frac{Z_I Z_J e^2}{|\vec{R}_I - \vec{R}_J|} \quad (2.2)$$

где индексы i, j и I, J относятся, соответственно, к электронам и ядрам, через Z обозначен заряд ядра; e – заряд электрона. Однако, выражения (2.2) записаны в нерелятивистской форме и не учитывают наличие спина у электрона и связанные с этим взаимодействия.

Рассмотрим уравнение Шрёдингера:

$$\hat{H}_i \Psi(\{\vec{R}\}, \{\vec{r}\}) = E \Psi(\{\vec{R}\}, \{\vec{r}\}) \quad (2.3)$$

где $\{\vec{R}\}$ и $\{\vec{r}\}$ – совокупности пространственных и спиновых координат всех ядер и электронов; \hat{H}_i – гамильтониан (2.1). Поэтому, волновая функция $\Psi(\{\vec{R}\}, \{\vec{r}\})$ зависит от координат всех ядер и электронов, входящих в систему. Именно, поэтому решить проблему (2.3) не представляется возможным при развитии вычислительной техники текущего уровня. Но если использовать приближенную задачу на собственные значения (2.3) можно привести к более простой и удобной для расчета электронных уровней форме.

2.1.1 Адиабатическое приближение

Система состоит из положительно заряженного ядра и отрицательно заряженных электронов. Так как масса электронов значительно меньше массы ядра, то их скорость будет намного выше, чем скорость ядра, т.е. период, в течение которого ядро сделает колебание вокруг своего положения равновесия, электроны совершат достаточно большое число колебаний вокруг ядра. Таким образом, можно считать, что атомные ядра находятся в состоянии покоя по отношению к электронам.

Это приближение называется адиабатическим (приближение Борна – Оппенгеймера, 1927 [19]) и позволяет разделить проблему (2.3) собственные значения двух связанных друг с другом подсистем: электронов и ядер. Так, если представить волновую функцию системы электронов и ядер как:

$$\Psi(\{\vec{R}\}, \{\vec{r}\}) = \chi_{n,v}(\{\vec{R}\}) \psi_n(\{\vec{R}\}, \{\vec{r}\}) \quad (2.4)$$

то в итоге мы можем получить следующие два уравнения [20]:

$$\hat{H}_e \psi_n(\{\vec{R}\}, \{\vec{r}\}) = (\hat{T}_e + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{eL}) \psi_n(\{\vec{R}\}, \{\vec{r}\}) = E_n \psi_n(\{\vec{R}\}, \{\vec{r}\}) \quad (2.5)$$

$$\hat{H}_L \chi_{n,v}(\{\vec{R}\}) = (\hat{T}_L + \hat{V}_{LL}) \chi_{n,v}(\{\vec{R}\}) = E_{n,v} \chi_{n,v}(\{\vec{R}\}) \quad (2.6)$$

где индекс n обозначает набор квантовых чисел, описывающих состояния электронов, а индекс v набор квантовых чисел, описывающих состояния системы ядер. Стоит отметить, что так называемый электронный гамильтониан, используемый в уравнении (2.5) будет параметрически зависеть от координат ядер.

Таким образом, есть две взаимосвязанные задачи на нахождение собственных значений энергий и волновых функций электронов и ядер. Первое из них описывает поведение электронов при фиксированных положениях ядер. Полученные из уравнения (2.5) собственные значения энергий используются для решения уравнения (2.6) для ядер.

2.1.2 Одноэлектронное приближение

Уравнение (2.5) по-прежнему очень сложная задача многих тел. Для упрощения используется одноэлектронное приближение. В настоящее время широко используется два различных подхода для реализации этого приближения: метод Хартри – Фока [21] и теория функционала электронной плотности. В этой работе все расчеты проводились в рамках теории функционала электронной плотности [21, 22]. Основная идея теории функционала плотности – это использование электронной плотности:

$$n(\vec{r}) = \left\langle \psi(\vec{r}) \left| \sum_{i=1}^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \right| \psi(\vec{r}) \right\rangle \quad (2.7)$$

вместо сложной волновой функции N частиц.

Согласно теореме Хоэнберга и Кона: Для любой системы внешнего потенциала $V_{ext}(\vec{r})$ электронного взаимодействия, потенциал однозначно определяется электронной плотностью $n(\vec{r})$ в зависимости от состояния. Так как гамильтониан полностью определяется электронной плотностью (с точностью до константы), то и волновая функция многих тел также определяется электронной плотностью. Таким образом, все свойства системы в основном состоянии полностью определяются электронной плотностью $n_0(\vec{r})$ [23].

Зная функционал для энергии $E[n(\vec{r})]$ от электронной плотности $n(\vec{r})$, для любого заданного внешнего потенциала $V_{ext}(\vec{r})$ можно точно вычислить энергию основного состояния системы. Для этого, сохраняя число частиц в системе: $\int n(\vec{r}) d\vec{r} = N$, необходимо найти глобальный минимум данного функционала, который будет соответствовать электронной плотности основного состояния $n_0(\vec{r})$.

При использовании теории функционала плотности уравнение Шредингера (2.5) для многоэлектронной волновой функции сводится к одноэлектронному уравнению Кона–Шема [24]:

$$\hat{H}_{KSH} \psi_n(\vec{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{V}_{eff}(\{\vec{R}\}, \vec{r}) \right) \psi_n(\vec{r}) = \varepsilon_n \psi_n(\vec{r}), \quad (2.8)$$

$$\hat{V}_{eff}(\{\vec{R}\}, \vec{r}) = \hat{V}_{ext}(\{\vec{R}\}, \vec{r}) + \hat{V}_H(\vec{r}) + \hat{V}_{xc}(\vec{r}), \quad (2.9)$$

где ε_n – собственные значения энергии, $\psi_n(\vec{r})$ – волновая функция описывающая состояние одного электрона.

Это уравнение Шредингера имеет вид отдельных частиц, но потенциал является эффективным потенциалом, состоящим из трех компонентов:

- внешний потенциал (взаимодействие ядер с электронами):

$$\hat{V}_{\text{ext}}(\{\vec{R}\}, \vec{r}) = \hat{V}_{eL} = \sum_{i,I} \frac{Z_I e^2}{|\vec{R}_I - \vec{r}_i|}; \quad (2.10)$$

- потенциал Хартри (кулоновское взаимодействие электронов с электронами):

$$\hat{V}_H(\vec{r}) = 4\pi e^2 \int \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 \vec{r}'; \quad (2.11)$$

- обменно–корреляционный потенциал (обменно–корреляционные эффекты):

$$\hat{V}_{xc}(\vec{r}) = \frac{\partial}{\partial n(\vec{r})} \int n(\vec{r}) \varepsilon_{xc}[n(\vec{r})] d^3 \vec{r}. \quad (2.12)$$

Здесь $\varepsilon_{xc}[n(\vec{r})]$ – плотность обменно–корреляционного потенциала, точная форма такого же неизвестна, но она имеет ряд параметрических интерполяционных формул [25]. Поскольку $\hat{V}_H(\vec{r})$ и $\hat{V}_{xc}(\vec{r})$ зависят от электронной плотности, которую и определяют, то необходимо искать эти потенциалы, решая самосогласованную задачу.

Теория функционала электронной плотности применима к большому классу материалов на основе металлов, соединений переходных металлов, органических и неорганических молекул. Основным недостатком этого метода является то, что результат зависит от конкретного выбора обменно-корреляционного потенциала. Он может быть реализован в виде локализованных базисных функций (например, гауссовым распределением) и

плоской волны. Способ может быть использован для описания зависящих от времени потенциалов и возбужденных магнитных веществ. Следует отметить, нет никакого способа, чтобы систематически улучшать результаты теории функционала плотности (в отличие от Хартри – Фока). Время расчета этого метод пропорционально N^3 , где N – количество базисных функций.

2.1.3 Зонное приближение

Самосогласованное решение уравнения волновой функции электронов Шредингера по-прежнему очень сложная математическая задача. По этой причине, часто используется зонное приближение, т.е. решение уравнения Шредингера с потенциалом, заданным в пределах элементарной ячейки кристалла. Для данного приближения и классификации рассчитанных состояний используется аппарат теории групп.

Существуют два резко различных, но эквивалентных подхода к вычислению волновых функций электронов в рамках зонного приближения. В одном варианте, мы можем разложить искомую волновую функцию по функциям Блоха всей системы и определить коэффициент разложения функции, необходимые для удовлетворения соответствующих требований уравнения Шредингера. Согласно теореме Блоха [26] в периодическом потенциальном поле волновой функции могут быть выражены следующим образом:

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.13)$$

где $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ – периодическая функция (функция Блоха) [24], изменяющаяся

согласно заданному периоду кристаллического потенциала, индекс \vec{k} помогает классифицировать состояния, соответствуя волновому вектору электронов в кристалле. С другой стороны, мы можем разложить электронную волновую функцию в уравнении Шредингера по полной системе базисных функций в пределах элементарной ячейки решетки, а затем найти коэффициенты разложения, требуя удовлетворения искомой функции граничным условиям.

Методы расчета зонной структуры можно разделить на два класса – смотря по тому, какой из двух рассмотренных выше подходов в них используется. Метод сильно связанных электронов, метод ортогонализированных плоских волн (ОПВ), метод псевдопотенциала – все основаны на первом подходе, а метод ячеек и метод присоединенных плоских волн – на втором. Выбирать следует тот метод, в котором используется система базисных функций, позволяющая описать исследуемую функцию при наименьшем числе членов разложения. Использование, с одной стороны, мощных вычислительных машин, а с другой, – условий симметрии (упрощающих вычисления) позволяет в большинстве задач физики твердого тела получать точные результаты в пределах принятых аппроксимаций.

2.1.4 Приближение локальной плотности

В приближении локальной плотности (Local density approximation, LDA) предложенным первоначально Коном и Шефом [24] обменно-корреляционный функционал рассчитывается следующим образом:

$$E_{xc}^{LDA}[\rho(\vec{r})] = \int \rho(\vec{r}) \epsilon_{xc}[\rho(\vec{r})] d\vec{r}, \quad (2.14)$$

где ϵ_{xc} – обменно-корреляционная плотность энергии в однородном электронном газе плотность $\rho(\vec{r})$. Величину ϵ_{xc} обычно определяют путем параметризации, моделируя поведение электронного газа в металлах методами Монте-Карло. В качестве яркого представителя этого приближения можно привести потенциал, представленный в работе [28]. Стоит отметить, что в зависимости от параметризации ϵ_{xc} в конечном расчете можно получить различные результаты.

В случае одноатомных систем использование приближения локальной плотности может приводить к существенным ошибкам, поскольку свойства одноатомных системы существенно отличаются от свойств однородного электронного газа. Так для атомов и молекул приближение локальной плотности обычно занижает величину обменного взаимодействия на 10% и завышает корреляцию на 200–300%. Однако, несмотря на величину этих ошибок, приближение локальной плотности используется с большим успехом на протяжении уже многих лет для большинства систем. Поскольку вклад от обменного взаимодействия в кристаллический потенциал в десятки раз больше вклада от корреляции, то в виду взаимного исключения погрешностей результирующая обменно-корреляционная энергия недооценивается в рамках этого приближения на величину, не превышающую 7% [29].

Использование приближения локальной плотности для твёрдых тел приводит к результатам близким к экспериментальным данным. Исключение составляют полупроводники, запрещённые зоны в которых воспроизводятся в

рамках этого приближения некорректно (в ряде случаев использование приближения приводит даже к исчезновению запрещенных зон). Одна из наиболее известных проблем, связанных с использованием этого приближения, является описание магнитных свойств железа: так в рамках приближения локальной плотности основному состоянию железа соответствует немагнитная гранецентрированная кубическая решётка, в то время как настоящая стабильная структура решетки – ферромагнитная объёмноцентрированная кубическая [30].

2.1.5 Приближение обобщённого градиента

Приближение обобщённого градиента (Generalized gradient approximation, GGA) позволяет разрешить часть проблем, возникающих при использовании приближения локальной плотности, поскольку включает в функционал зависимость от градиента электронной плотности:

$$E_{xc}^{GGA}[\rho(\vec{r})] = \int \rho(\vec{r}) \varepsilon_{xc}^{GGA}[\rho(\vec{r}), |\nabla\rho(\vec{r})|] d\vec{r}, \quad (2.15)$$

Поскольку однозначная форма зависимости обменно-корреляционная плотность энергии ε_{xc}^{GGA} от градиента электронной плотности $\rho(\vec{r})$ отсутствует, то существуют множество различных способов его представления в явном виде (например, яркими представителями этого приближения являются потенциалы, представленные в работах [31-33]) со своими достоинствами и недостатками. В общем случае все формы представления обменно-корреляционного функционала в рамках этого приближения направлены на решение тех или иных проблем, возникающих при

использовании приближения локальной плотности. Однако, необходимо помнить, что универсальной формы записи этого функционала нет, и в ряде случаях учет его зависимости от градиента электронной плотности приводит к дополнительным сложностям при подборе параметров вычислительного эксперимента. Известно, что приближение обобщённого градиента лучше описывает электронную структуру, плотность электронов, зонную структуру, в то время как приближение локальной плотности лучше описывает атомную структуру, энергию системы, положения атомов и силы. Таким образом, в зависимости от задач исследования необходимо предварительно тестировать, оба приближения, определяя, какое из них даёт результаты более близкие к желаемым.

2.2 Метод псевдопотенциала

В основе метода псевдопотенциала лежит метод ортогонализированных плоских волн, в рамках которого волновые функции валентных электронов в межатомном пространстве кристалла аппроксимируется линейной комбинацией малого числа плоских волн, ортогональных волновым функциям электронов ионного остова. Однако в методе псевдопотенциала вводятся два допущения.

Во-первых, электроны ионного остова предполагаются химически инертными, то есть их состояния вне зависимости от окружения атома остаются такими же, как и в свободных атомах. В итоге вещество представляется в виде ионных остовов, состоящих из ядра атома и химически

инертных электронов (электроны «сердцевины»), в узлах решетки и валентных электронов, участвующих в химических связях (рисунок 6). Так, например, в рамках метода псевдопотенциала атом С, имеющий 6 электронов, считается подобным атому Рb с 82 электронами, поскольку у каждого из них четыре валентных электрона. В результате точность расчетов будет зависеть от того, насколько корректно определена волновая функция валентных электронов в пространстве вне области ионных остовов [34]. Во-вторых, многоэлектронная задача решения уравнения Шредингера сводится к задаче о самосогласованном поле, в котором эффекты взаимодействия между электронами (обмен и корреляции) учитываются посредством некоторого самосогласованного потенциала $V(r)$.

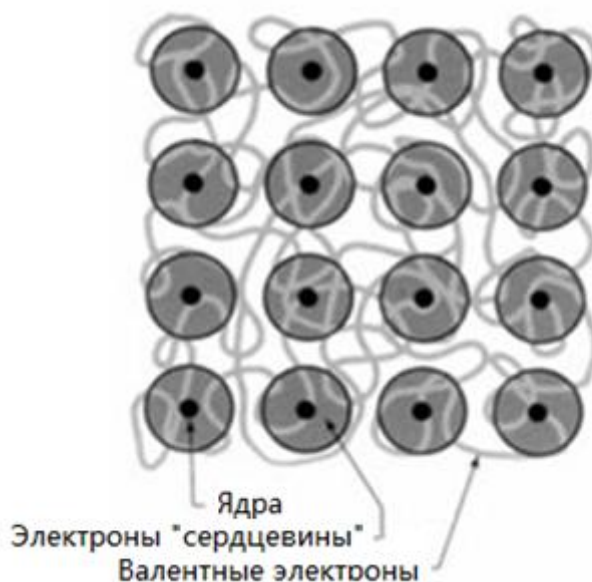


Рисунок 6 – Представление вещества в модели псевдопотенциала.

Ионные остовы состоят из ядер и сильно связанных с ними электронов, считающихся химически инертными. Между ионными остовами находятся валентные электроны, определяющие свойства системы [34]

Одним из самых универсальных наборов базисных функций в разложении искомой волновой функции электронов является набор плоских волн. Главные преимущества такого базиса – это его полнота и ортонормированность. Однако применение этого базиса в разложении волновых функций электронов в молекулах или кристаллах ограничено, поскольку волновая функция электронов вблизи ядер атомов быстро осциллирует, в результате ее разложение по плоским волнам требует огромного количества членов разложения. Для упрощения расчетов необходимо задавать как можно меньше членов в разложении искомой волновой функции электронов по базисным функциям. Для этого при разложении используют набор базисных функций максимально близких по форме к собственным волновым функциям электронов в рассматриваемой молекуле или кристалле [34].

Уравнение псевдопотенциала можно записать в форме:

$$W = V(\vec{r}) + \sum_{nl} (\varepsilon - \varepsilon_{nl}) \left| \phi_{nl}^{AE} \right\rangle \left\langle \phi_{nl}^{AE} \right|, \quad (2.16)$$

где ϕ_{nl}^{AE} – волновая функция остовных электронов, характеризуемая набором квантовых чисел n и l [34], определяемых из уравнения

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right) \left| \phi_{nl}^{AE} \right\rangle \left\langle \phi_{nl}^{AE} \right| = \sum_{nl} \varepsilon_{nl} \left| \phi_{nl}^{AE} \right\rangle \left\langle \phi_{nl}^{AE} \right|. \quad (2.17)$$

Поскольку подразумевается, что волновая функция валентных электронов гладкая, то, соответственно, величина псевдопотенциала W должна быть мала. Поскольку изначально в уравнении Шредингера не допускается никаких аппроксимаций, то его точное решение с использованием псевдопотенциала дает абсолютно правильные собственные значения энергии для частиц в этом

потенциале. Если в дальнейшем ортогонализировать соответствующие этим значениям энергии псевдоволновые функции валентных электронов по отношению к волновым функциям остовных электронов и вычислить нормировочные коэффициенты, то в результате можно получить и правильные волновые функции. Однако необходимо сделать несколько замечаний относительно метода псевдопотенциала [34].

Во-первых, псевдопотенциал W является нелокальным и зависит от энергии, в отличие от локального потенциала $V(\vec{r})$, зависящего только от координат. Это усложняет расчеты, но трудности связанные с нелокальностью псевдопотенциала, в большинстве случаев несравнимы с преимуществами, даваемыми его малостью. Отметим, что в ряде случаев удается в рамках некоторых аппроксимаций сделать псевдопотенциал локальным.

Во-вторых, псевдопотенциала является слабым по сравнению с истинным потенциалом. В псевдопотенциале (2.16) потенциал $V(\vec{r})$ описывает притяжение электронов к ядру и является отрицательным по величине, а второй член содержит разность энергий $(\varepsilon - \varepsilon_{nl})$, которая всегда положительна, и в какой-то мере компенсирует потенциал притяжения $V(\vec{r})$. Это свойство получило название теоремы о компенсации.

Заметим, что единственного «истинного» псевдопотенциала не существует. Выбор псевдопотенциала зависит от конкретных задач и целей исследования. В любом случае, форма псевдопотенциала будет правильной: поскольку точное решение уравнение Шредингера будет давать совершенно правильные собственные значения энергии и волновые функции в рамках

используемых приближений. Метод псевдопотенциала успешно используется для расчетов зонной структуры кристаллов большинства простых металлов и определения вида их поверхности Ферми. В случае переходных и редкоземельных металлов этот метод менее успешен без дополнительных приближений, поскольку достаточно сложно построить псевдопотенциал, корректно описывающий быстро осциллирующие вблизи ядер d - и f - электроны.

2.3 Метод проекционных присоединенных волн

Метод проекционных присоединенных волн (Projected Augmented Wave) представляет собой трансформацию гладкой псевдоволновой функции к полноэлектронной волновой функции. Одно важное преимущество метода псевдопотенциала состоит в том, что, используя для определения параметров псевдопотенциала различные экспериментальные измерения, можно затем описать влияние электронов проводимости на большое число макроскопических свойств металла в терминах псевдопотенциала.

Поскольку реальная полноэлектронная волновая функция в области ионного остова отличается от псевдоволновой, а, следовательно, различны и результирующее распределение электронной плотности реальной системы и псевдоэлектронной, то при использовании метода псевдопотенциала возникает не скомпенсированный мультипольный момент, который может приводить к ошибочным результатам. В рамках метода проекционных присоединенных волн

псевдоволновая функция корректируется по полноэлектронной, обнуляя этот мультипольный момент.

В методе проекционных присоединенных волн искомая волновая функция валентных электронов делится на две части: парциальные волновые функции (атомоподобные) в области ионного остова и внешние волновые функции в межатомной области. Внешние волновые функции чаще всего раскладываются по базису плоских волн (хотя можно оставлять разложение и по какому-либо другому базису). Такое деление возможно, поскольку, в общем случае, псевдопотенциал сферически симметричен в некоторой области близкой к элементарной ячейке Вигнера–Зейтца, и обращается в нуль вне этой области, то есть:

$$W(r) = \begin{cases} W(|r|), & \text{при } r \leq r_b \\ 0, & \text{при } r > r_b \end{cases} \quad (2.18)$$

где r_b – есть граница выбираемой нами области, которая обычно берется меньше радиуса сферы Вигнера–Зейтца. Задавая потенциал в таком виде, мы получаем так называемый «МТ-потенциал (muffin-tin potential)» [35]. В итоге, в области ионных остовов базисные парциальные функции можно найти, разложив их радиальную и угловую компоненты, а вне этой области представить решение, как уже говорилось выше, в виде плоских волн, требуя чтобы на границе областей парциальные и внешние волновые функции и их производные совпадали [36].

2.4 Уравнение Кона–Шема

Итак, как уже говорилось выше, Коном и Шемом было предложено уйти от системы многих тел, описываемой уравнениями (2.5)–(2.6) к некоторой вспомогательной системе, которую описать и разрешить проще. Напомним, что идея этого предложения заключается в замене системы взаимодействующих между собой многих тел на невзаимодействующую систему, у которой будет в точности такая же энергия основного состояния [24, 37, 38]. Используя теорему Хоэнберга–Кона [23], мы можем свести уравнение (2.5) к так называемому уравнению Кона–Шема (2.8), которое является дифференциальным уравнением второго порядка. Для решения этого уравнения искомую волновую функцию раскладывают по полной системе базисных функций. В нашем случае

$$\varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{|\vec{K}| \leq |\vec{K}_{\max}|} C_{n,\vec{k},\vec{G}} \psi_{n,\vec{G}}(\vec{k}, \vec{r}), \quad (2.19)$$

где $\psi_{n,\vec{G}}(\vec{r})$ – волновая функция состояния, характеризуемая набором квантовых чисел n , (вид этих базисных функций задается в рамках методов псевдопотенциала и парциальных плоских волн). Так как $\vec{K} = \vec{G} + \vec{k}$, то суммирование в (2.19) идет по векторам обратной решетки \vec{G} , поскольку уравнение Кона–Шема (2.8) решается для конкретного значения волнового вектора \vec{k} .

Среднее значение энергии системы электронов в кристалле определяется в квантовой механике следующим образом:

$$\bar{E} = \frac{\langle \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) | \hat{H}_{KSH} | \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \rangle}{\langle \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) | \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \rangle} = \frac{\int \psi_{n,\vec{k}}^*(\vec{r}) \hat{H}_{KSH} \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) d^3 r}{\int \psi_{n,\vec{k}}^*(\vec{r}) \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) d^3 r}. \quad (2.20)$$

Дифференцируя данное выражение по коэффициентам разложения $C_{n,\vec{k},\vec{G}}$ и приравнявая нулю полученную производную, мы получим систему линейных уравнений относительно коэффициентов разложения $C_{n,\vec{k},\vec{G}}$, которая будет определять состояние системы с минимальной энергией (то есть минимизируем среднюю энергию системы по коэффициентам разложения $C_{n,\vec{k},\vec{G}}$):

$$[\mathbf{H}(\vec{k}) - \bar{\mathbf{E}}\mathbf{S}(\vec{k})]\mathbf{C}_{n,\vec{k}} = 0, \quad (2.21)$$

где $\mathbf{H}(\vec{k})$ – матрица гамильтониан; $\mathbf{S}(\vec{k})$ – матрица перекрытия; $\mathbf{C}_{n,\vec{k}}$ – матрица–столбец, состоящая из коэффициентов разложения $C_{n,\vec{k},\vec{G}}$. В этом случае возможные значения энергии $\bar{\mathbf{E}}$ при данном волновом векторе \vec{k} будут входить в систему как параметры. Таким образом, мы свели задачу о решении дифференциального уравнения второго порядка к задаче о решении системы линейных уравнений, а, как известно, решать систему линейных уравнений намного проще, чем дифференциальное уравнение второго порядка.

Матричные элементы в уравнении (2.21) определяются как

$$H_{nn'} = \langle \psi_{n,\vec{G}}(\vec{k}, \vec{r}) | \hat{H}_{KSH} | \psi_{n',\vec{G}}(\vec{k}, \vec{r}) \rangle, \quad (2.22)$$

$$S_{nn'} = \langle \psi_{n,\vec{G}}(\vec{k}, \vec{r}) | \psi_{n',\vec{G}}(\vec{k}, \vec{r}) \rangle. \quad (2.23)$$

Таким образом, мы получим задачу о нахождении собственных векторов $\bar{\mathbf{E}}$ матрицы гамильтониан $\mathbf{H}(\vec{k})$:

$$\mathbf{H}(\vec{k})\mathbf{C}_{\vec{k},n} = \bar{\mathbf{E}}\mathbf{C}_{\vec{k},n}, \quad (2.24)$$

$$\bar{\mathbf{E}} = \bar{\mathbf{E}}\mathbf{S}(\vec{k}). \quad (2.25)$$

Диагонализируя матрицу гамильтониана $\mathbf{H}(\vec{k})$, мы получим собственные значения энергии для данного волнового вектора \vec{k} . Зная собственные значения, мы достаточно легко из системы линейных уравнений можем определить

значения коэффициентов разложения $C_{\vec{k},n}$. Таким образом, мы определяем искомую волновую функцию электронов, а, следовательно, и электронную плотность для данного значения волнового вектора \vec{k} .

Глава III Детали и результаты расчета

3.1 Схема и детали расчета

Расчет электронной структуры в пакете программ ABINIT [1] производится согласно выше описанной методике, т. е. в рамках теории функционала плотности методом псевдопотенциала. Блок-схема основного раздела пакета программ, отвечающего за самосогласованный расчет электронной плотности в кристалле, представлена на рисунке 7.

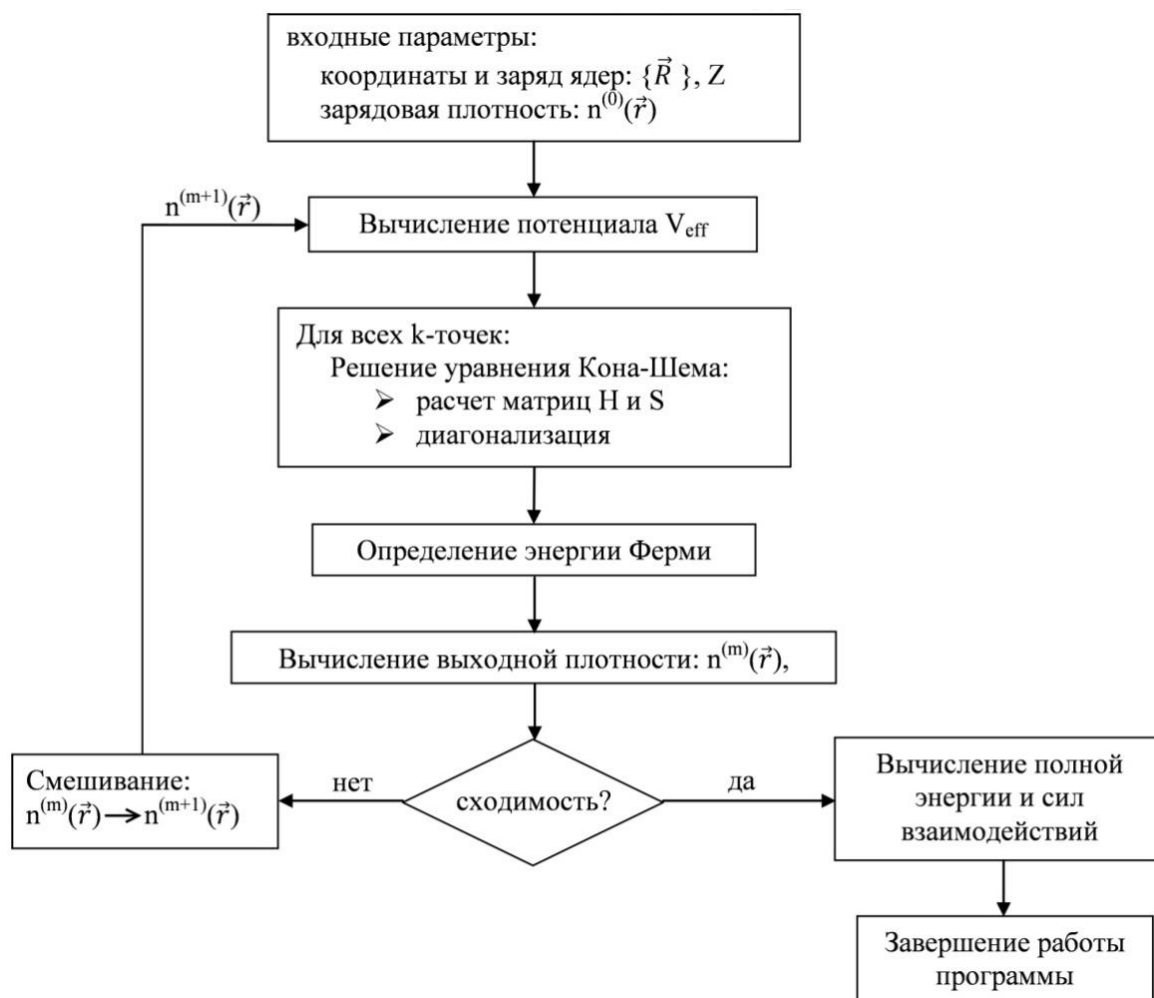


Рисунок 7 – Блок-схема самосогласованных расчетов электронной плотности кристаллов

В работе была рассмотрена только гранецентрированная кубическая (ГЦК) структура системы Ni–H. Кристаллический потенциал строился с помощью атомных зарядовых плотностей для электронных конфигураций Ni $3s^2 3p^6 3d^8 4s^2$ и H $1s^1$. Обменно-корреляционные эффекты рассматривались в приближении обобщенно градиентного потенциала PBE [32].

Зная значения коэффициентов разложения искомой волновой функции, программный код находит новую электронную плотность $n^{(m)}(\vec{r})$, и вычисляет среднеквадратичное отклонение между выходной и входной электронными плотностями. Если разность между ними больше заданной величины, потенциал V_{eff} считается заново с использованием нового значения электронной плотности $n^{(m)}(\vec{r})$ и т.д. Таким образом, с каждой итерацией получается более точное значение электронной плотности. Именно в этом и проявляется процесс самосогласования. В нашей работе самосогласование электронной плотности считалось достигнутым, когда сходимость полной энергии кристалла составляла $\sim 0,03$ мэВ. Набор k-точек составлял $7 \times 7 \times 5$ для системы Ni₁₆H, $7 \times 7 \times 10$ и $14 \times 14 \times 5$ для систем Ni₈H и Ni₄H, соответственно, и $14 \times 14 \times 10$ для систем Ni₂H, NiH и NiH₂.

На рисунке 8 представлены используемые в работе расчетные ячейки систем Ni₁₆H и Ni₈H. На рисунке 9 представлена рассмотренная в работе кристаллическая структура систем Ni₄H и Ni₂H. Атомы водорода во всех этих системах занимали либо октаэдрические (O), либо тетраэдрические (T) междуузлия в решетке металла. В случае системы Ni₂H было рассмотрено две конфигурации атомов H в октаэдрических междуузлиях: с равномерным

распределением по всему объему кристалла ($\text{Ni}_2\text{H}^{\text{O}}$, рисунок 8г) и с формированием тонких слоев с периодичностью в два параметра решетки ($\text{Ni}_2\text{H}^{\text{Облиз}}$, рисунок 8в). На рисунке 10 и 11 представлены рассмотренные в работе кристаллические структуры систем NiH и NiH_2 , соответственно, с различной конфигурацией атомов водорода. Системы $\text{NiH}^{\text{Tдиаг}}$ и NiH^{T} , $\text{NiH}^{\text{OТдиаг}}$ и $\text{NiH}^{\text{OТ}}$ отличаются друг от друга различными положениями атомов водорода в тетраэдрических междуузлиях относительно друг друга. На рисунках 7-10 серые шарики – атомы никеля, синие шарики – атомы водорода в октаэдрических междуузлиях, зеленые шарики – атомы водорода в тетраэдрических междуузлиях.

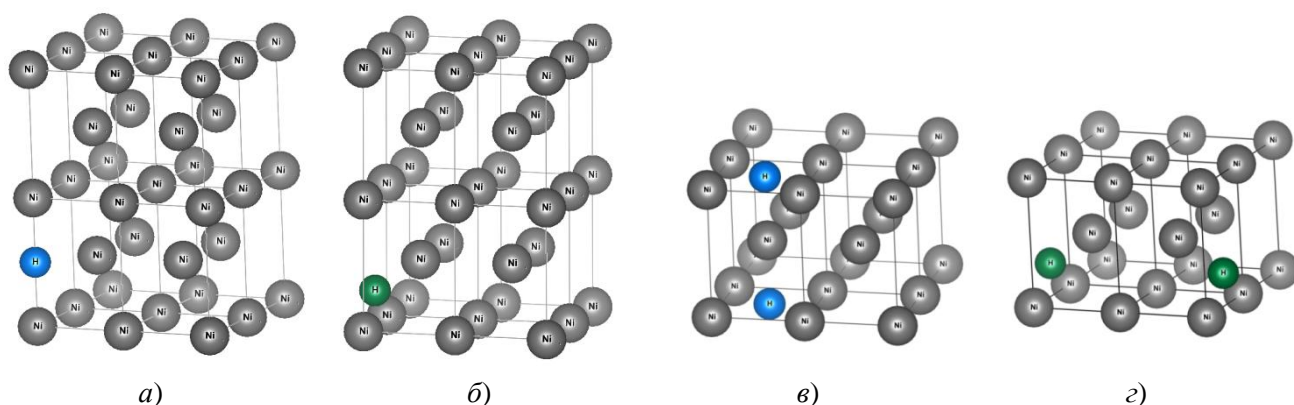


Рисунок 8 – Расчетная ячейка систем $\text{Ni}_{16}\text{H}^{\text{O}}$ (а), $\text{Ni}_{16}\text{H}^{\text{T}}$ (б), $\text{Ni}_8\text{H}^{\text{O}}$ (в) и $\text{Ni}_8\text{H}^{\text{T}}$ (г)

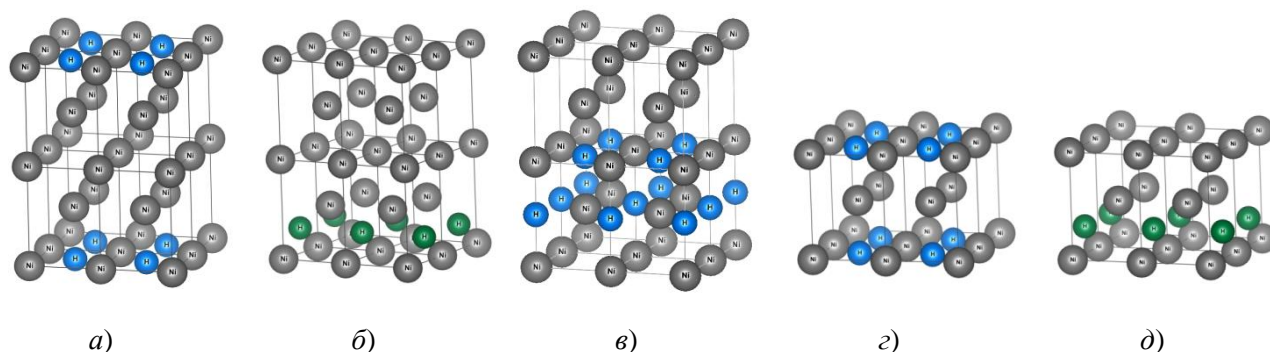


Рисунок 9 – Кристаллическая структура систем $\text{Ni}_4\text{H}^{\text{O}}$ (а), $\text{Ni}_4\text{H}^{\text{T}}$ (б), $\text{Ni}_2\text{H}^{\text{Облиз}}$ (в), $\text{Ni}_2\text{H}^{\text{O}}$ (г) и $\text{Ni}_2\text{H}^{\text{T}}$ (д)

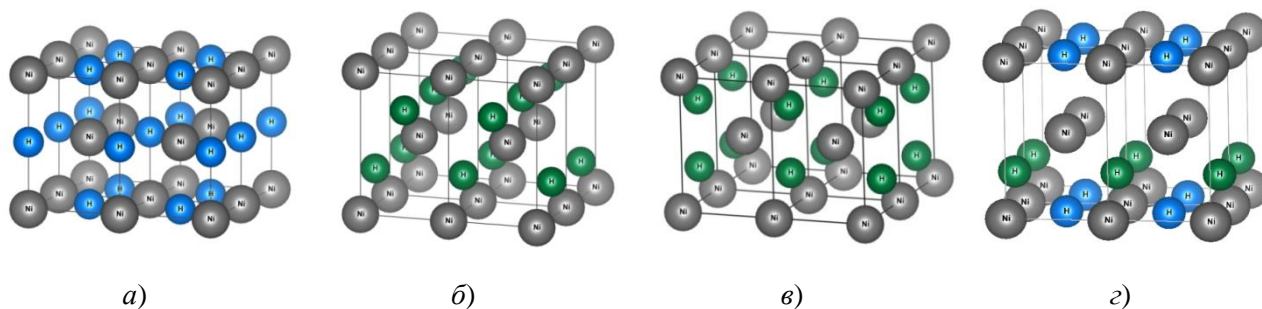


Рисунок 10 – Кристаллическая структура систем

NiH^{O} (а), $\text{NiH}^{\text{T}_{\text{диаг}}}$ (б), NiH^{T} (в) и $\text{Ni}_2\text{H}^{\text{T}}\text{H}^{\text{O}}$ (г)

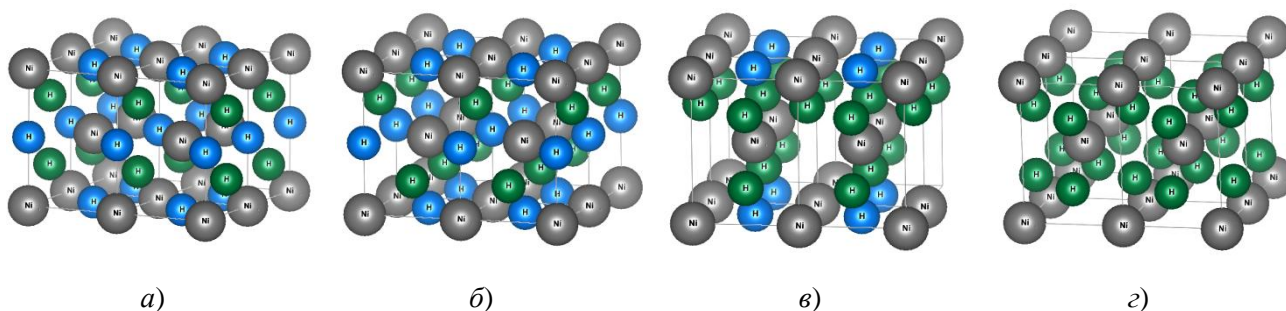


Рисунок 11 – Кристаллическая структура систем

$\text{NiH}^{\text{O}}\text{H}^{\text{T}}$ (а), $\text{NiH}^{\text{O}}\text{H}^{\text{T}_{\text{диаг}}}$ (б), $\text{Ni}_2\text{H}_3^{\text{T}}\text{H}_1^{\text{O}}$ (в) и NiH_2^{T} (г)

3.2 Результаты и обсуждение

3.2.1 Магнитный момент и параметры решетки

Поскольку никель является по природе своей ферромагнитным материалом, то представляет интерес исследование влияния водорода не только на параметры решетки никеля, но и его магнитный момент. Поэтому оптимизация объема и релаксация атомов решетки чистого Ni и системы Ni-H проводилась с использованием спин-поляризованных расчетов. Для чистого Ni также был проведен парамагнитный расчет. Сравнение результатов

спин-поляризованных и парамагнитных расчетов показало, что полная энергия чистого никеля в ферромагнитном состоянии на 126 мэВ меньше, чем в парамагнитном. В таблице 3 приведены параметры решетки и магнитные моменты систем, представленных на рисунках 8-11. Отметим хорошее согласие рассчитанного магнитного момента чистого никеля ($0,655\mu_B$) с результатами других теоретических расчетов [39]. Полученные в результате оптимизации структуры параметры решетки чистого Ni и системы Ni-H также хорошо согласуются с результатами других экспериментальных и теоретических работ [40, 41, 14]. Из таблицы 1 видно, что рост концентрации водорода приводит к уменьшению магнитного момента Ni, а в системах NiH и NiH₂ магнитный момент равен нулю, т.е. эти системы являются парамагнитными. Анализ результатов в таблице 1 показал, что при растворении водорода в никеле с относительной концентрацией $X = 0,0625-0,25$ изменение параметров решетки металла составляет 0,14–2,0%. При растворении водорода в никеле с относительной концентрацией $X = 0,5$, минимальные изменения параметров решетки металла соответствует послойной конфигурации атомов водорода в октаэдрических междоузлиях (система Ni₂H^{Облиз}). При более высокой концентрации ($X \geq 1,0$) изменение параметров решетки более значительны: так, один из параметров решетки NiH^{OH^T} отличается от параметра решетки чистого Ni на 42,7%. Отметим, что в большинстве рассмотренных случаев наблюдается тетрагональное искажение решетки кристалла. Особенно ярко это проявляется в системах Ni₂H, NiH и NiH₂, когда атом водорода находится либо только в тетраэдрических, либо и в тетраэдрических и в октаэдрических междоузлиях.

Таблица 3 – Магнитный момент ячейки и параметры решетки в системе

Ni–H при различном соотношении атомов водорода и никеля

Система	Параметры решетки	Магнитный момент ячейки, $e/\text{Бор}^3/\text{Ni}$	Система	Параметры решетки	Магнитный момент ячейки, $e/\text{Бор}^3/\text{Ni}$
Ni	$a = c = 3,525 \text{ \AA}$ $a = c = 3,522 \text{ \AA}$ [40] $a = c = 3,524 \text{ \AA}$ [41]	0,6550 0,65 [39]	$\text{Ni}_2\text{H}^{\text{T}}$	$a = b = 3,618 \text{ \AA}$ $c = 3,828 \text{ \AA}$	0,1906
$\text{Ni}_{16}\text{H}^{\text{O}}$	$a = b = 3,530 \text{ \AA}$ $c = 3,546 \text{ \AA}$	0,5992	NiH^{O}	$a = c = 3,729 \text{ \AA}$	0
$\text{Ni}_{16}\text{H}^{\text{T}}$	$a = b = 3,538 \text{ \AA}$ $c = 3,550 \text{ \AA}$	0,5956	NiH^{T}	$a = b = 3,709 \text{ \AA}$ $c = 4,128 \text{ \AA}$	0
$\text{Ni}_8\text{H}^{\text{O}}$	$a = b = 3,551 \text{ \AA}$ $c = 3,559 \text{ \AA}$	0,4825	$\text{Ni}_2\text{H}_2^{\text{Tdiag}}$	$a = b = 3,852 \text{ \AA}$ $c = 3,821 \text{ \AA}$	0
$\text{Ni}_8\text{H}^{\text{T}}$	$a = b = 3,570 \text{ \AA}$ $c = 3,560 \text{ \AA}$	0,4741	$\text{Ni}_2\text{H}^{\text{T}}\text{H}^{\text{O}}$	$a = 3,552 \text{ \AA}$ $b = 3,408 \text{ \AA}$ $c = 3,841 \text{ \AA}$	0
$\text{Ni}_4\text{H}^{\text{O}}$	$a = b = 3,597 \text{ \AA}$ $c = 3,555 \text{ \AA}$ $a = c = 3,56 \text{ \AA}$ [14]	0,3930	$\text{Ni}_2\text{H}_2^{\text{O}}\text{H}_2^{\text{T}}$	$a = b = 3,342 \text{ \AA}$ $c = 5,032 \text{ \AA}$	0
$\text{Ni}_4\text{H}^{\text{T}}$	$a = b = 3,588 \text{ \AA}$ $c = 3,645 \text{ \AA}$	0,3626	$\text{Ni}_2\text{H}_2^{\text{O}}\text{H}_2^{\text{Tdiag}}$	$a = b = 3,806 \text{ \AA}$ $c = 3,793 \text{ \AA}$	0
$\text{Ni}_2\text{H}^{\text{Oблиз}}$	$a = b = 3,450 \text{ \AA}$ $c = 3,555 \text{ \AA}$	0,3153	$\text{Ni}_2\text{H}_3^{\text{T}}\text{H}_1^{\text{O}}$	$a = 3,867 \text{ \AA}$ $b = 3,760 \text{ \AA}$ $c = 3,952 \text{ \AA}$	0
$\text{Ni}_2\text{H}^{\text{O}}$	$a = b = c = 3,638 \text{ \AA}$ $a = c = 3,61 \text{ \AA}$ [14]	0,2440	NiH_2^{T}	$a = b = 3,852 \text{ \AA}$ $c = 3,841 \text{ \AA}$	0

3.2.2 Энергия растворения водорода в никеле

Для понимания особенностей взаимодействия водорода с никелем в работе была рассчитана энергия растворения ΔE_H водорода в никеле:

$$\Delta E_H = E(\text{Ni}_N\text{H}_x) - E(\text{Ni}_N) - \frac{x}{2}E(\text{H}_2), \quad (3.1)$$

где $E(\text{Ni}_N)$ и $E(\text{Ni}_N\text{H}_x)$ – полные энергии, соответственно, чистого Ni и системы Ni_NH_x с относительной концентрацией водорода x/N , N – количество атомов никеля в расчетной ячейке, $E(\text{H}_2)$ – полная энергия молекулы водорода.

Результаты расчетов представлены на рисунке 12.

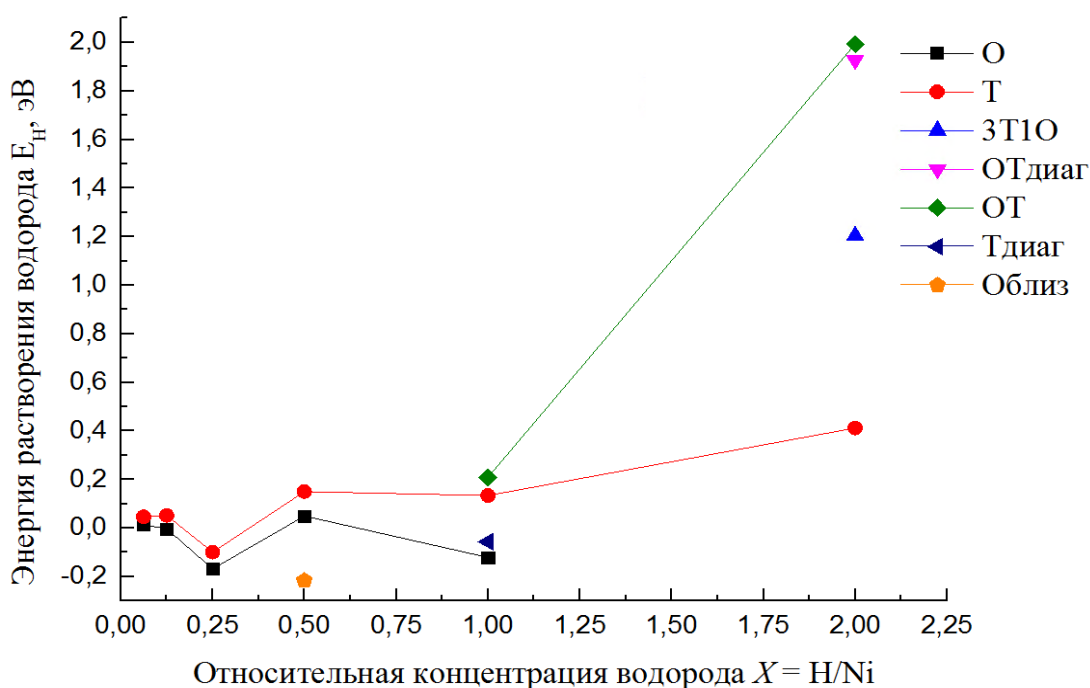


Рисунок 12 – Энергия растворения E_H водорода в никеле в зависимости от его концентрации и координации в решетке металла

Из рисунка 12 видно, что при повышении концентрации водорода до $X = \text{H}/\text{Ni} = 0,125$ энергия его растворения в никеле изменяется незначительно в диапазоне от -20 до 50 мэВ. При концентрациях $X = 0,25$ и $X = 0,5$ наблюдаются

системы ($\text{Ni}_2\text{H}^{\text{Облиз}}$, NiH^{O} и $\text{NiH}^{\text{Tдиаг}}$) с отрицательной энергией растворения. То есть при растворении водорода в никеле до этих концентраций будет наблюдаться выделение энергии, связанное с образованием связей металл-водород. Отметим, что система $\text{Ni}_2\text{H}^{\text{Облиз}}$, характеризуется самым низким значением энергии растворения E_{H} в сравнении со всеми остальными рассмотренными системами, что свидетельствует об устойчивости послойного упорядочивания атомов водорода в решетке металла (рисунок 9в). При концентрации $X = \text{H}/\text{Ni} = 2,0$ величина энергии растворения E_{H} является положительной для всех рассмотренных случаев и при определенных конфигурациях водорода в решетке металла достигает 2 эВ. Из рисунка также видно, что до относительной концентрации $X = 1,0$ октаэдрическая координация атомов водорода характеризуется меньшими энергиями растворения E_{H} по сравнению с тетраэдрическими. То есть атомам водорода при этих концентрациях энергетически более выгодно занимать октаэдрические междоузлия.

3.2.3 Распределение электронной плотности

3.2.3.1 Ферромагнитные системы

Для детального исследования особенностей взаимодействия водорода с никелем было рассчитано распределение валентной электронной плотности в системах чистого Ni, Ni_8H , Ni_4H , Ni_2H , NiH и NiH_2 . На рисунках 13–20

представлены распределение валентной электронной плотности и разности плотностей электронов со спинами вверх и вниз в чистом Ni и в ферромагнитных конфигурациях системы Ni–H в зависимости от концентрации и положения атомов водорода. На всех рисунках наблюдаются общие для атомов никеля и водорода изолинии, что говорит, в свою очередь, об увеличении ковалентной составляющей химической связи между атомами водорода и никеля.

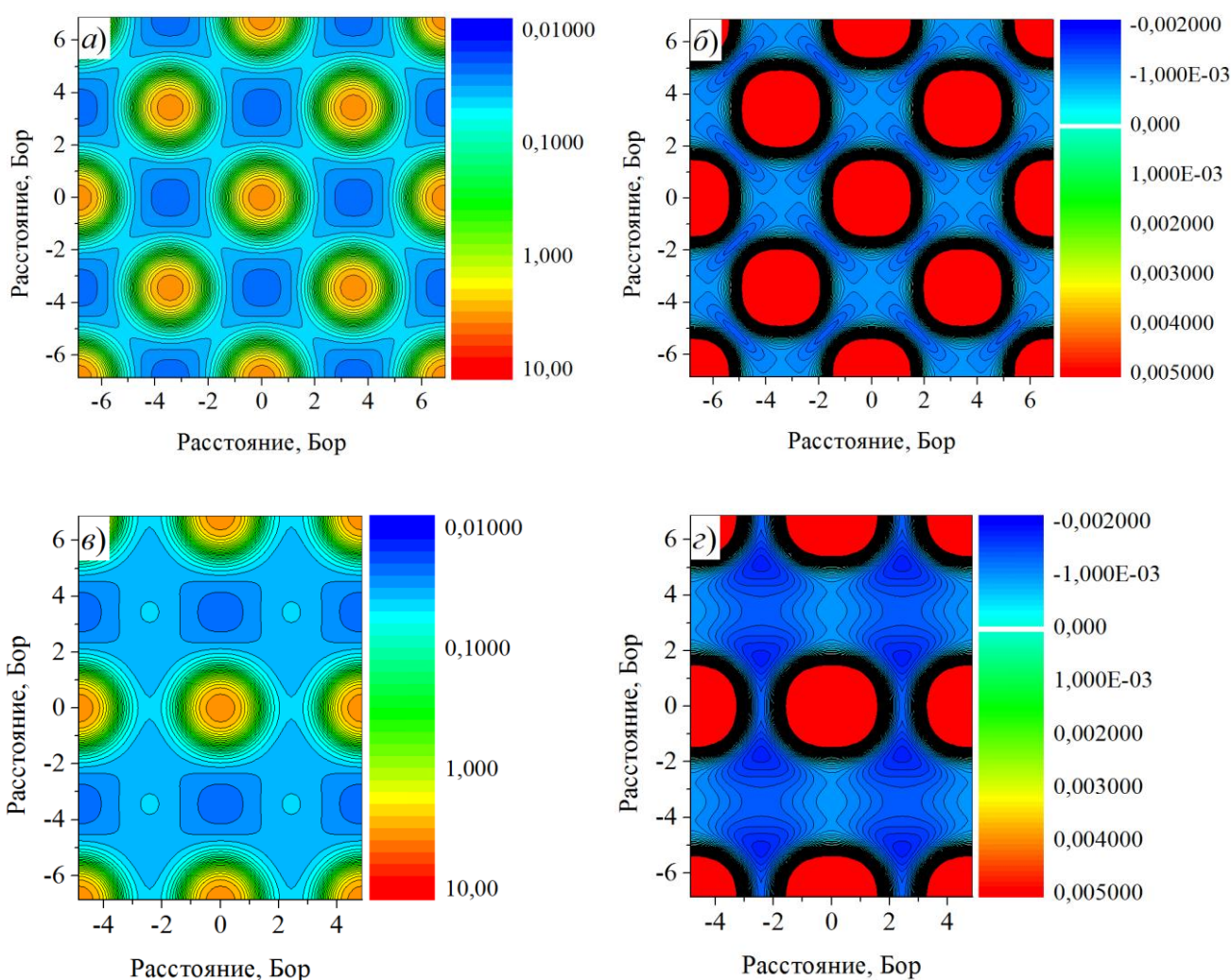


Рисунок 13 – Распределение валентной электронной плотности чистого никеля в плоскостях (200) (а) и (110) (в), а также разности плотностей электронов со спинами вверх и вниз в плоскостях (200) (б) и (110) (г)

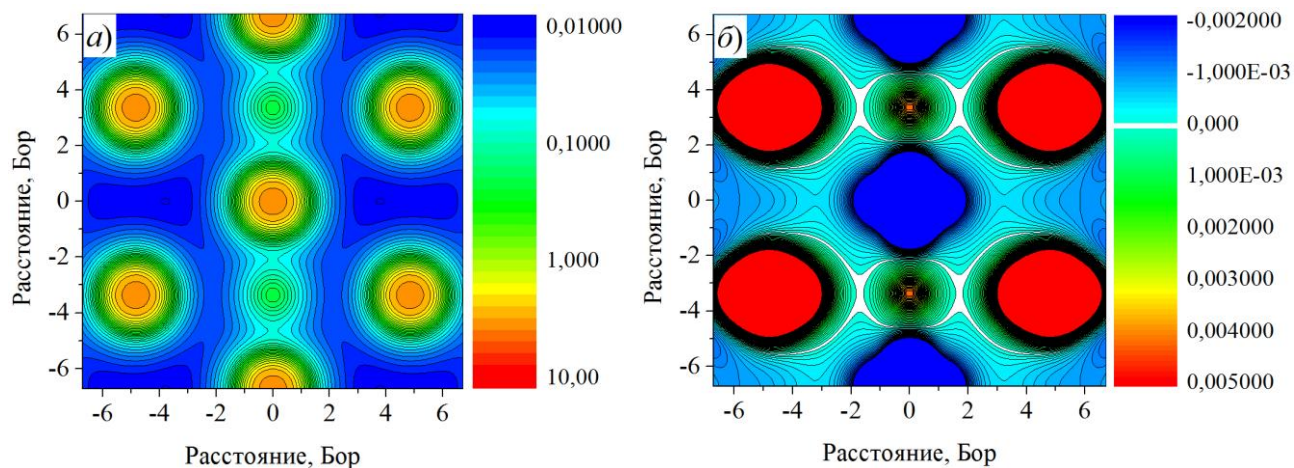


Рисунок 14 – Распределение валентной электронной плотности системы Ni_8H^0 в плоскости (200) (а), а также разность плотностей электронов со спинами вверх и вниз в этой плоскости (б)

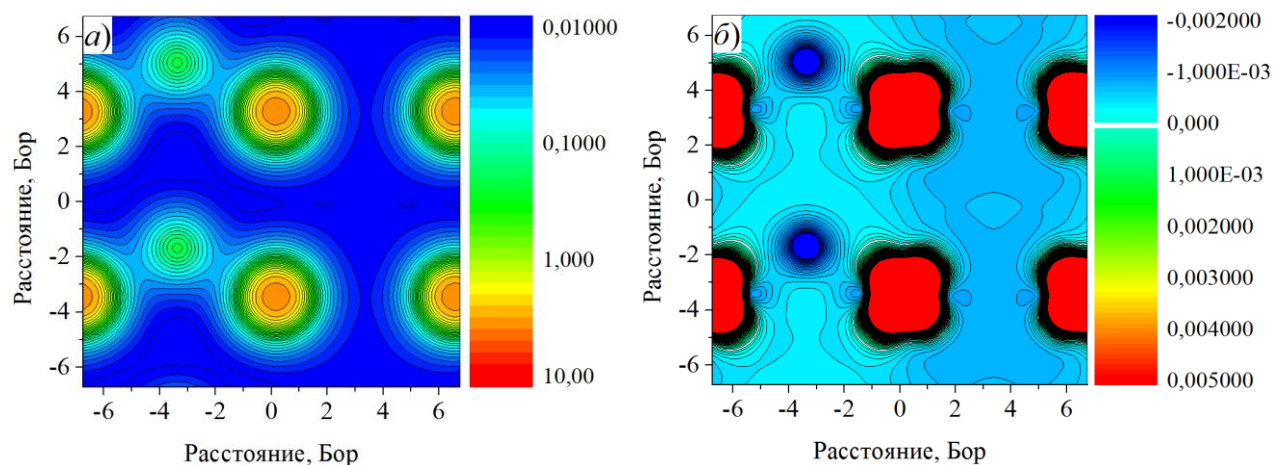


Рисунок 15 – Распределение валентной электронной плотности системы $\text{Ni}_8\text{H}^{\text{T}}$ в плоскости (110) (а), а также разность плотностей электронов со спинами вверх и вниз в этой плоскости (б)

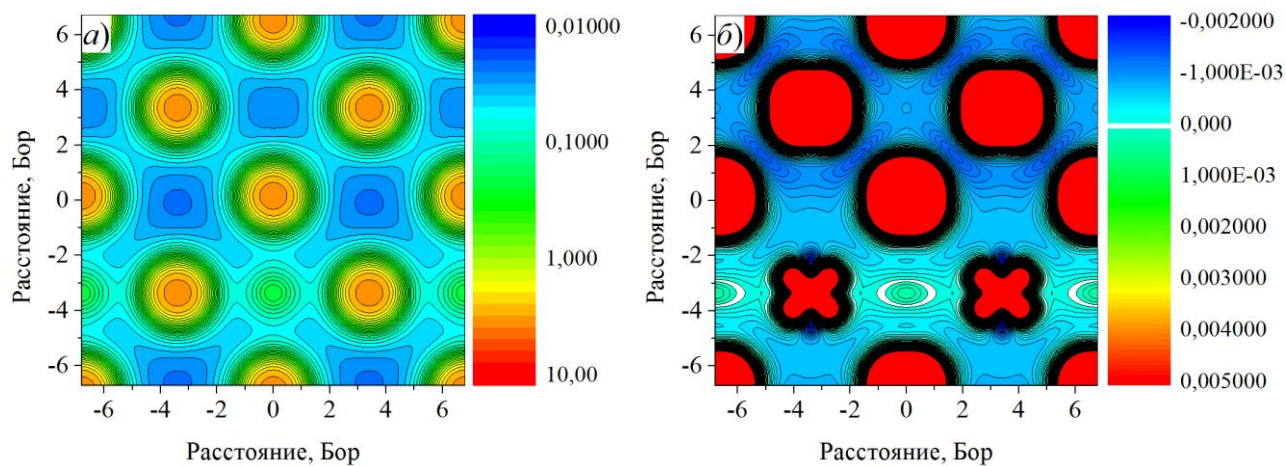


Рисунок 16 – Распределение валентной электронной плотности системы Ni_4H^0 и в плоскости (200) (а), а также разность плотностей электронов со спинами вверх и вниз в этой плоскости (б)

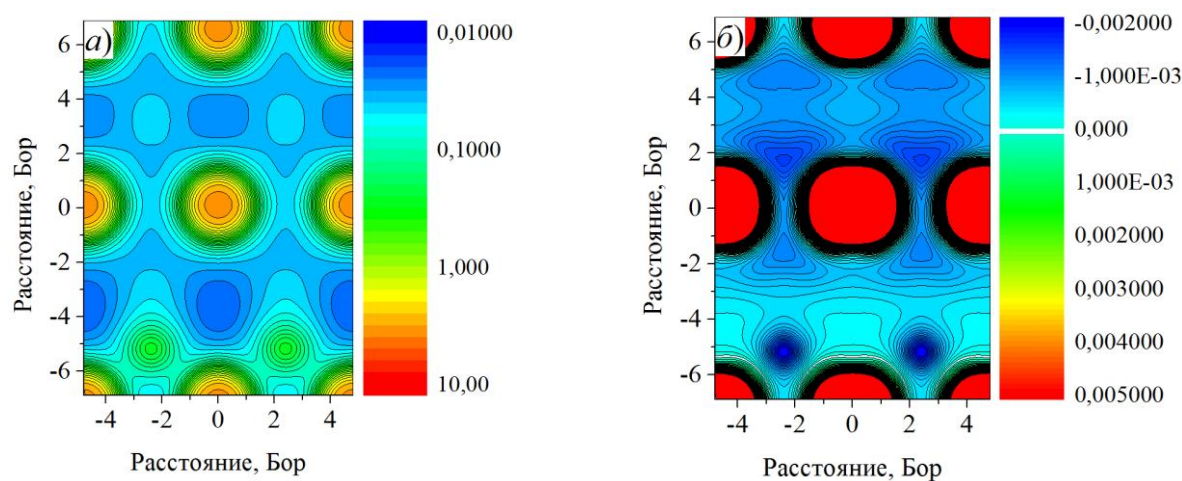


Рисунок 17 – Распределение валентной электронной плотности системы Ni_4H^+ и в плоскости (110) (а), а также разность плотностей электронов со спинами вверх и вниз в этой плоскости (б)

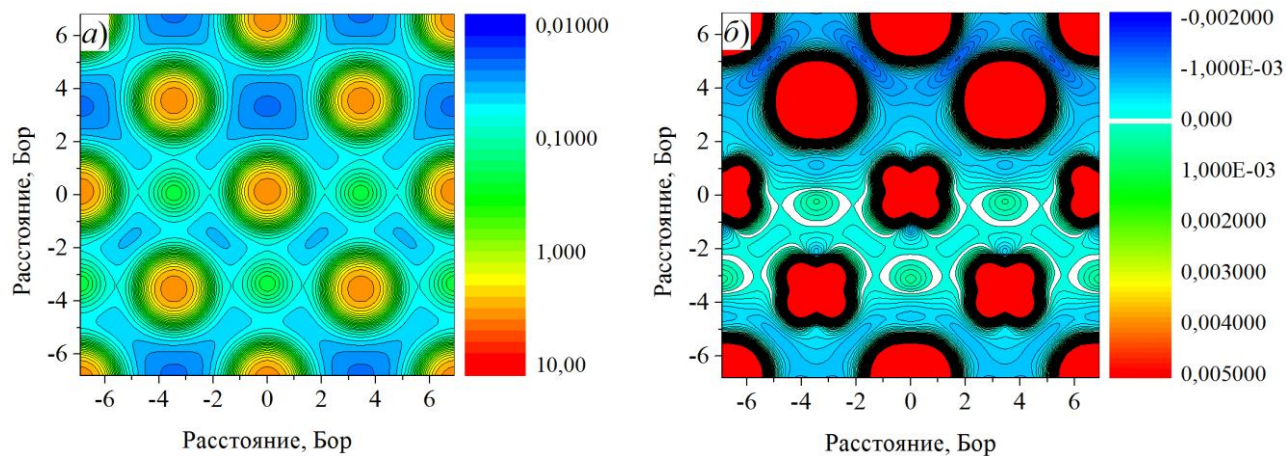


Рисунок 18 – Распределение валентной электронной плотности системы $\text{Ni}_2\text{H}^{\text{Облиз}}$ и в плоскости (200) (a), а также разность плотностей электронов со спинами вверх и вниз в этой плоскости (б)

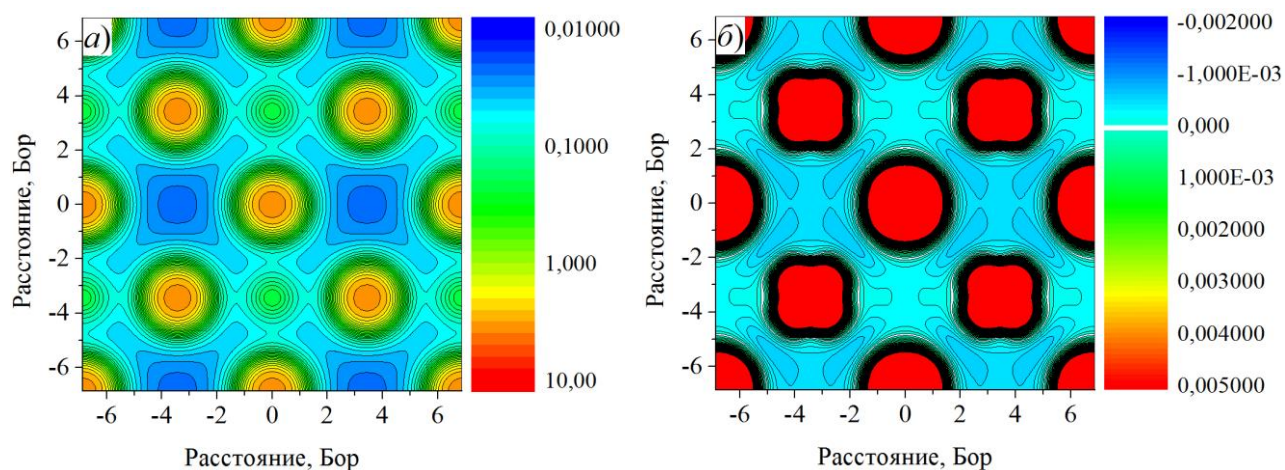


Рисунок 19 – Распределение валентной электронной плотности системы $\text{Ni}_2\text{H}^{\text{O}}$ и в плоскости (200) (a), а также разность плотностей электронов со спинами вверх и вниз в этой плоскости (б)

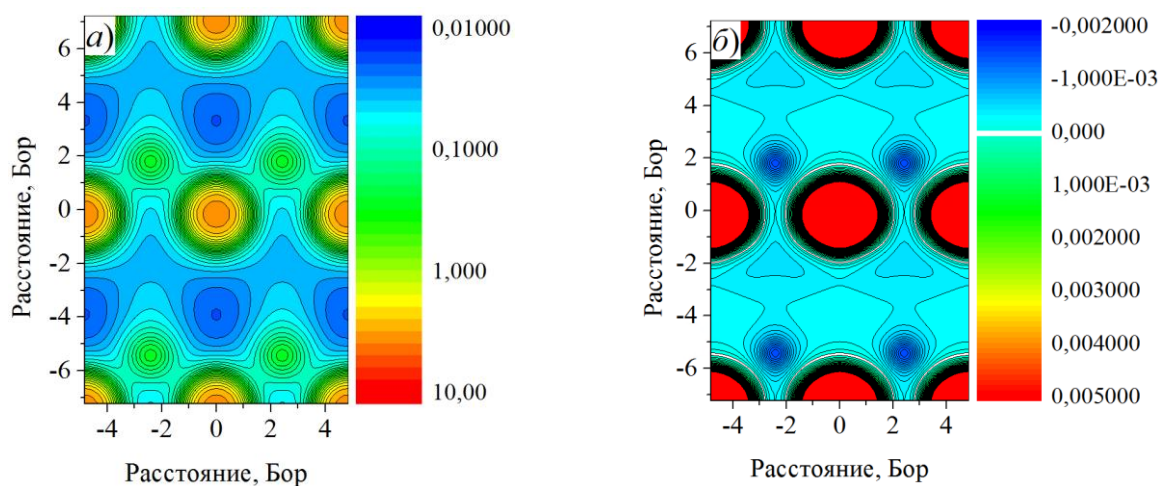


Рисунок 20 – Распределение валентной электронной плотности системы $\text{Ni}_2\text{H}^\Gamma$ и в плоскости (110) (а), а также разность плотностей электронов со спинами вверх и вниз в этой плоскости (б)

Анализ распределения разности плотностей электронов со спином вверх и со спином вниз в системе Ni–H, показал, что с ростом концентрации водорода в никеле разность плотностей электронов со спином вверх и со спином вниз в межатомной области уменьшается. Магнитный момент атома водорода сильно зависит от его расположения в решетке никеля.

Из рисунков 13б и г видно, что в чистом никеле в области каждого атома есть пик разности плотности электронов со спином вверх и со спином вниз (красные пятна), и между атомами никеля разность плотности электронов со спином вверх и со спином вниз всегда имеет отрицательное значение.

При размещении атома водорода в октаэдрических междоузлиях никеля с концентрацией $X = \text{H}/\text{Ni} = 0,125$ (рисунок 14а) наблюдаются общие изолинии распределения электронной плотности, охватывающие атомы Ni и H, что указывает на усиление ковалентной составляющей химической связи. При этом

на этих атомах Ni наблюдаются большие области с отрицательной разностью плотностей электронов со спинами вверх и вниз (рисунок 14б), что говорит о переманчивании этих атомах Ni. Вдали от атомов водорода наблюдается распределение зарядовой плотности разности плотностей электронов со спинами вверх и вниз такое же, как и в чистом Ni. Когда H находится в тетраэдрических междоузлиях при этой же концентрации, общих изолиний, охватывающих атомы Ni и H, меньше (рисунок 15б), что говорит о более слабой связи водорода в этих междоузлиях по сравнению с октаэдрическими. На всех атомах никеля разность плотностей электронов со спином вверх и вниз имеют положительные значения (рисунок 15б) как в чистом никеле, а на атомах водорода эта разность принимает отрицательные значения.

При концентрации водорода $X = H/Ni = 0,25$ как при тетраэдрической, так и октаэдрической координациях атомов H наблюдается несколько общих изолиний, охватывающих атомы Ni и H (рисунок 16а и 17а). Когда водород размещается в октаэдрических междоузлиях, на ближайших к нему атомах Ni наблюдаются крестообразные области положительной разности плотностей электронов с разными спинами (рисунок 13б), что, возможно, свидетельствует об уменьшении магнитного момента этих атомов. На самом водороде в октаэдрическом междоузлии разности плотностей электронов с разными спинами положительна и близка к нулю. При тетраэдрической координации водорода распределение разности плотностей электронов со спином вверх и вниз (рисунок 13б) схоже с тем, что наблюдается в Ni_8H^T .

В случае концентрации водорода $X = H/Ni = 0,5$ также наблюдается

несколько общих изолиний, охватывающих атомы Ni и H (рисунки 18*a*, 19*a* и 20*a*). В области атомов Ni разность плотностей электронов с разными спинами положительна (рисунки 18*б*, 19*б* и 20*б*), а в межатомной области эта разность близка к нулю. На атомах водорода разность плотностей электронов со спинами вверх и вниз распределяется так же, как и в случае концентрации $X = 0,25$.

3.2.3.2 Парамагнитные системы

Детальный анализ результатов расчета распределения валентной электронной плотности в систем NiH и NiH₂ показал, что разность плотностей электронов со спином вверх и со спином вниз плотностей во всем кристалле близка к нулю, что свидетельствует об исчезновении ферромагнитных свойств этих систем. На рисунках 21–24 представлено распределение валентной электронной плотности в этих системах в зависимости от положения атомов водорода в решетке металла. При размещении атомов водорода в октаэдрических междоузлиях решетки никеля с концентрацией $X = 1,0$ (рисунок 21*a*) в межатомной области кристалла наблюдается практически равномерное распределение электронной плотности. Это свидетельствует о преимущественно металлическом характере связи между атомами Ni и H. В остальных случаях при этой же концентрации водорода в никеле (рисунки 21*б* и 22) и в системах NiH^OH^T и NiH^OH^{Tdiag} (рисунок 23) распределение валентной электронной плотности происходит подобно тому, что наблюдается при более низких концентрациях (рисунки 16–20). В системах Ni₂H₃^TH₁^O и NiH₂^T

(рисунок 24) распределение электронной плотности носит такой же характер, как и в случае системы Ni_3H (рисунки 14 и 15). То есть помимо общих контуров изолиний распределения электронной плотности, охватывающих атомы металла и водорода, наблюдаются также обширные области с пониженной по сравнению с чистым никелем электронной плотностью.

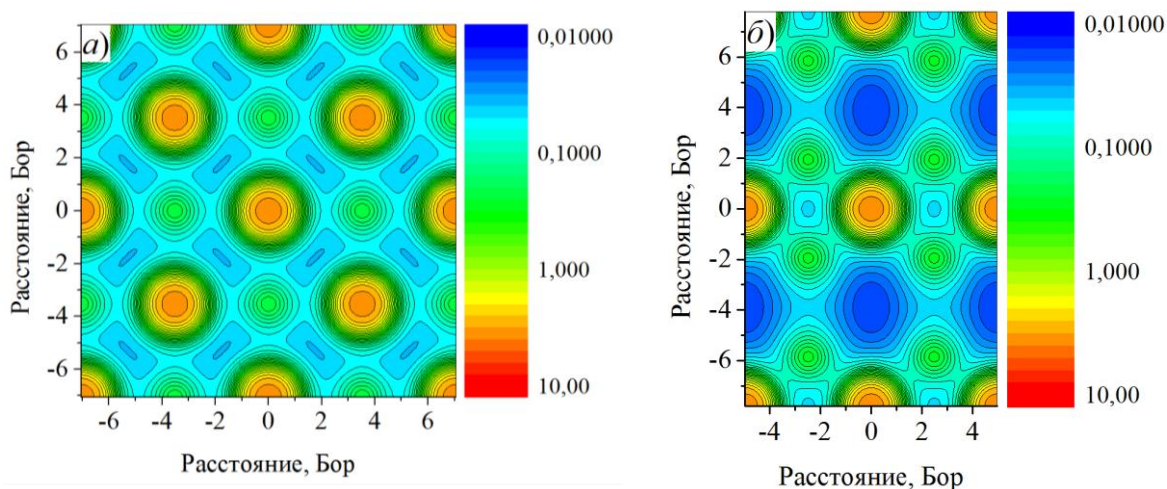


Рисунок 21 – Распределение валентной электронной зарядовой плотности систем NiH^O в плоскости (200) (а) и NiH^T в плоскости (110) (б)

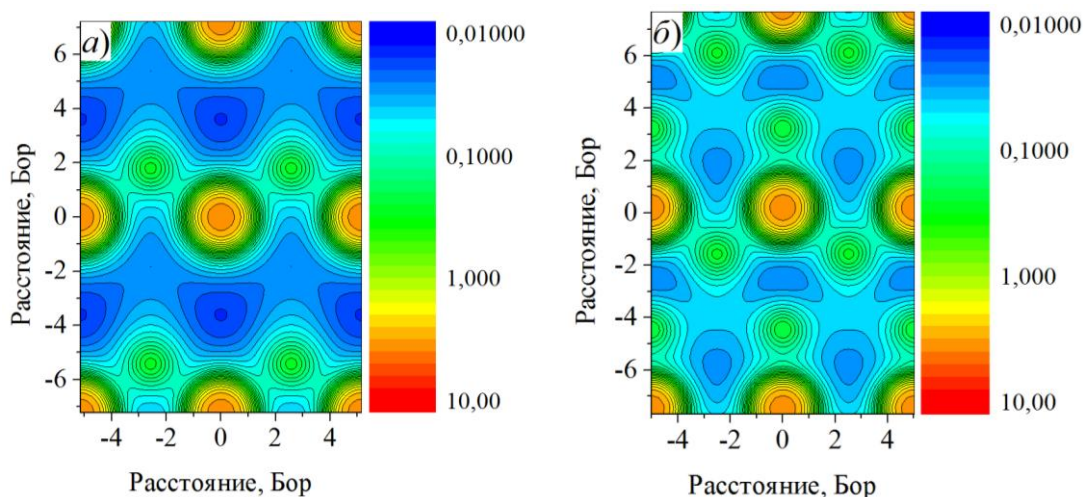


Рисунок 22 – Распределение валентной электронной плотности систем NiH^{Tdiag} в плоскости (110) (а) и $Ni_2H^T H^O$ в плоскости (110) (б)

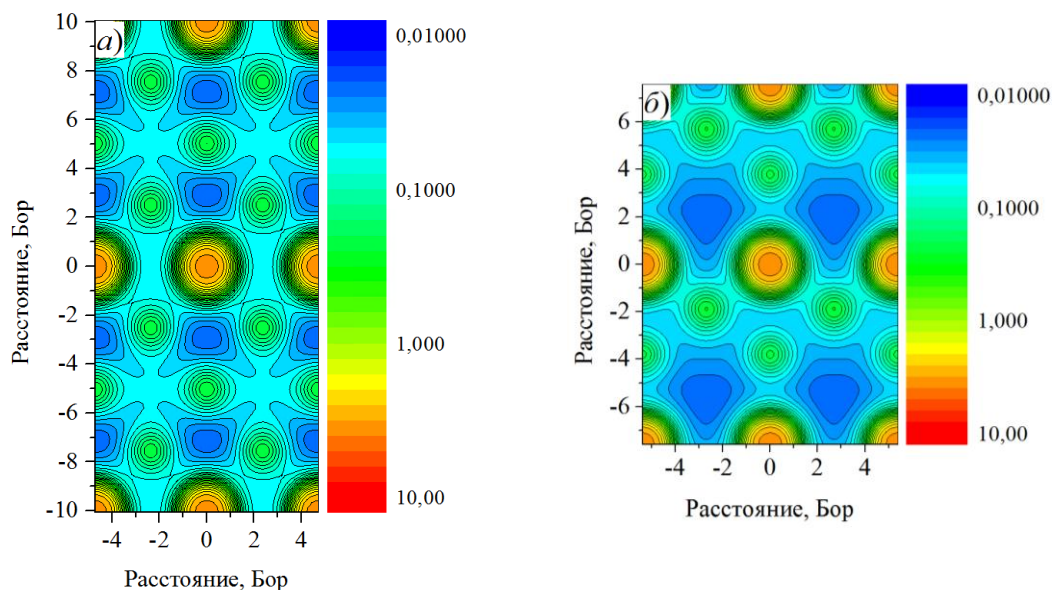


Рисунок 23 – Распределение валентной электронной плотности систем

$\text{NiH}^{\text{O}}\text{N}^{\Gamma}$ в плоскости (110) (a) и $\text{NiH}^{\text{O}}\text{N}^{\text{Tdiag}}$ в плоскости (110) (б)

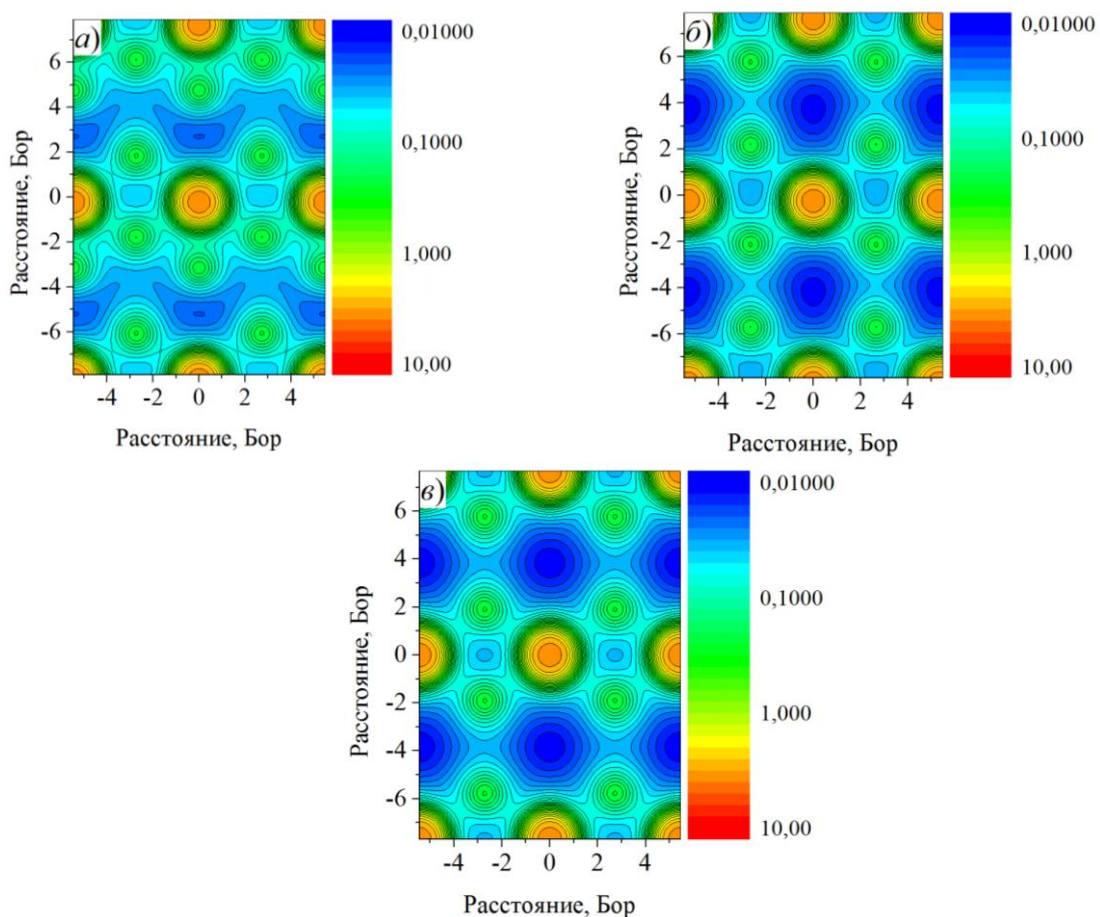


Рисунок 24 – Распределение валентной электронной плотности систем

$\text{Ni}_2\text{H}_3^{\text{T}}\text{N}^{\text{O}}$ в плоскостях (110) (a) и $(\bar{1}10)$ (б) и NiH_2^{T} в плоскости (110) (в)

Глава IV Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

Введение

В настоящее время перспективность научного исследования определяется не столько масштабом открытия, оценить которое на первых этапах жизненного цикла высокотехнологического и ресурсоэффективного продукта бывает достаточно трудно, сколько коммерческой ценностью разработки. Оценка коммерческой ценности разработки является необходимым условием при поиске источников финансирования для проведения научного исследования и коммерциализации его результатов. Это важно для разработчиков, которые должны представлять состояние и перспективы проводимых научных исследований.

Необходимо понимать, что коммерческая привлекательность научного исследования определяется не только превышением технических параметров над предыдущими разработками, но и тем, насколько быстро разработчик сумеет найти ответы на такие вопросы – будет ли продукт востребован рынком, какова будет его цена, каков бюджет научного проекта, какой срок потребуется для выхода на рынок и т.д.

Таким образом, целью раздела «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» является проектирование и создание конкурентоспособных разработок, технологий, отвечающих

современным требованиям в области ресурсоэффективности и ресурсосбережения.

4.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Это исследование представляет интерес для металлургии. Для введения результатов выпускной квалификационной работы на тему «Атомная и электронная структуры системы никель-водород: расчеты из первых принципов» на целевой рынок, необходимо, прежде всего, произвести анализ потребителей результатов исследования и выявить сегмент рынка.

4.1.1 Технология QuaD

Таблица 4 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок)

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы	Максимальный балл	Относительное значение (3/4)	Средневзвешенное значение (3x2)
1	2	3	4	5	
Показатели оценки качества разработки					
1. Доступность (понятность)	0,3	95	100	0,95	28,5
2. Удобство использования	0,3	90	100	0,9	27
3. Простота	0,08	80	100	0,8	6,4
4. Унифицированность	0,02	75	100	0,75	1,5
5. Полнота изложения	0,1	95	100	0,95	9,5
Показатели оценки коммерческого потенциала разработки					
6. Конкурентоспособность продукта	0,06	75	100	0,75	4,5
7. Перспективность рынка	0,06	85	100	0,85	5,1
8. Цена	0,08	95	100	0,95	7,6
Итого	1				90,1

Проведем оценку качества и перспективности по технологии QuaD по формуле:

$$P_{cp} = \sum B_i \cdot B_i = 90,1, \quad (4.1)$$

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

B_i – вес показателя (в долях единицы);

B_i – средневзвешенное значение i -го показателя.

Если значение показателя P_{cp} получилось 90,1, то такая разработка считается перспективной.

4.2 SWOT-анализ

Для исследования внешней и внутренней среды проекта применяют анализ SWOT – комплексный анализ научно-исследовательского проекта. Специфика данного анализа формируется несколькими этапами.

На первом этапе выявляются сильные и слабые стороны реализованного проекта в выпускной работе, которые оказывают свое действие во внешней среде. Далее выявляют возможности, включающие в себя любую предпочтительную ситуацию, возникающую в условиях окружающей среды проекта. Последним этапом является выявление угроз проекта, представляющих собой любую нежелательную ситуацию, тенденцию или изменение в условиях окружающей среды проекта. К конечному счету, производится анализ интерактивной таблицы в форме записи сильно

коррелирующих сильных сторон и возможностей, или слабых сторон и возможностей.

В рамках данного этапа необходимо построить интерактивную матрицу проекта. Ее использование помогает разобраться с различными комбинациями взаимосвязей областей матрицы SWOT. Возможно использование этой матрицы в качестве одной из основ для оценки вариантов стратегического выбора. 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 «-». Пример интерактивной матрицы проекта представлен в таблице 5.

Таблица 5 – Интерактивная матрица проекта

Сильные стороны проекта						
Возможности проекта		C1	C2	C3	C4	C5
	B1	+	+	-	0	+
	B2	-	+	+	-	0
	B3	-	+	+	-	0
	B4	+	-	0	+	0

Анализ интерактивных таблиц представляется в форме записи сильно коррелирующих сильных сторон и возможностей, или слабых сторон и возможностей и т.д. следующего вида: B1C1C2C5; B4C1C4. Каждая из записей представляет собой направление реализации проекта.

В случае, когда две возможности сильно коррелируют с одними и теми же сильными сторонами, с большой вероятностью можно говорить об их единой природе. В этом случае, возможности описываются следующим образом: B2B3C2C3.

Итогом данного анализа является матрица SWOT, в которой приведены все составляющие данного проекта.

Таблица 6 – SWOT-анализ

	Сильные стороны научно исследовательского проекта:	Слабые стороны научно исследовательского проекта:
	<p>C1. Заявленная экономичность и энергоэффективность метода.</p> <p>C2. Быстрый анализ полученных данных.</p> <p>C3. Более низкая стоимость производства по сравнению с другими технологиями.</p> <p>C4. Легкий интерфейс управления.</p> <p>C5. Безопасность проведения исследований.</p>	<p>Сл1. Проведение исследований исключительно при комнатной температуре.</p> <p>Сл2. Предварительная подготовка экспериментальных образцов перед исследованием.</p> <p>Сл3. Низкий уровень проникновения на рынок.</p> <p>Сл4. Отсутствие необходимого оборудования для выполнения расчетов.</p> <p>Сл5. Длительный срок расчетов.</p>
Возможности:	<p>В1. Решение фундаментальных задач исследования.</p> <p>В2. Появление дополнительного спроса на новый продукт.</p> <p>В3. Исследования коррозионных свойств металлов.</p> <p>В4. Повышение стоимости конкурентных разработок.</p>	<p>Проведение исследований исключительно при комнатных температурах способствует повышению стоимости конкурентных разработок.</p>
Угрозы:	<p>У1. Несвоевременное финансирование научного исследования при дальнейшем развитии проекта.</p> <p>У2. Развитая конкуренция технологий производства.</p> <p>У3. Ограничения на экспорт технологии.</p>	<p>Отсутствие необходимого оборудования для проведения испытания опытного образца будет являться неотъемлемым фактором, представляющим собой барьер для экспорта технологии. Также низкий</p>

У4. Введение дополнительных государственных требований к сертификации продукции.	запрещенного типа.	уровень проникновения на рынок способствует несвоевременному финансированию научного исследования при дальнейшем развитии проекта.
--	--------------------	--

Из таблицы, Поле СИВ показывает, необходимо использовать заявленную экономичность и энергоэффективность технологии, чтобы получить отдачу от возможностей во внешней среде. Поле СЛВ показывает, за счет проведения исследований исключительно при комнатных температурах, внешней среды организация сможет преодолеть имеющиеся слабости. Поле СИУ показывает, необходимо использовать более низкую стоимости производства по сравнению с другими технологиями организации для устранения угроз. Поле СЛУ показывает, необходимо избавиться от отсутствия оборудования для проведения испытания опытного образца, чтобы попытаться предотвратить нависшую угрозу.

4.3 Структура работ в рамках научного исследования.

4.3.1 Планирование этапов работ

Для выполнения и планирования данной работы по теме *атомной и электронной структур системы никель-водород: расчеты из первых принципов*, сначала нужно ее разделить на несколько частей, то есть различные этапы:

1. Подготовительный этап. Выбор темы; анализ актуальности темы, анализ информации по выбранной теме. Технико-экономическое обоснование целесообразности проведения исследований по данной теме;

2. Изучение литературы по теме, формирование теоретической части. Выявление возможных направлений исследования, календарное планирование работ;

3. Проведение расчетов по теоретической части;

4. Количественная оценка расчетного исследования, выбор параметров, проведение численного моделирования;

5. Анализ результатов, выводы и предложения по теме, обобщение результатов разработки. Составление технологического отчета;

6. Завершающий этап. Утверждение результатов работы, заключение, подготовка отчетной документации.

Научные исследования выполнили научный руководитель и студент.

Таблица 7 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Основные этапы	№ раб	Содержание работ	Должность исполнителя
Создание темы проекта	1	Составление и утверждение темы НИР	Научный руководитель
	2	Анализ актуальности темы	
Выбор направления исследования	3	Поиск и изучение материала по теме	Студент
	4	Выбор направления исследований	Научный руководитель, студент
	5	Календарное планирование работ	
Теоретические исследования	6	Изучение литературы по теме	Студент
	7	Подбор нормативных документов	
	8	Анализ использующихся средств и методов	
	9	Систематизация и оформление информации	

Оценка полученных результатов	10	Анализ результатов	Научный руководитель, студент
	11	Заключение	Научный руководитель, студент
Оформление отчета по НИР	12	Составление пояснительной записки	Студент
Защита отчета	13	Защита ВКР	Студент

4.3.2 Определение трудоемкости выполнения НИОКР

Трудоемкость выполнения НИОКР оценивается экспертным путем в человеко-днях и носит вероятностный характер, т.к. зависит от множества трудно учитываемых факторов. Расчет трудоемкости осуществляется опытно-статистическим методом, основанным на определении ожидаемого времени выполнения работ в человеко-днях по формуле:

$$t_{oxi} = \frac{3 \cdot t_{mini} + 2 \cdot t_{maxi}}{5}, \quad (4.2)$$

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

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

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

Рассчитаем значение ожидаемой трудоёмкости работы:

Для установления продолжительности работы в рабочих днях используем формулу:

$$T_{pi} = \frac{t_{oxi}}{Ч_i}, \quad (4.3)$$

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

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

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

Для удобства построения календарного план-графика, длительность этапов в рабочих днях переводится в календарные дни и рассчитывается по следующей формуле:

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k, \quad (4.4)$$

где T_{ki} – продолжительность выполнения одной работы, календ. дн.;

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

k – коэффициент календарности, предназначен для перевода рабочего времени в календарное.

Коэффициент календарности рассчитывается по формуле:

$$k = \frac{T_{ке}}{T_{ке} - T_{вд} - T_{пд}}, \quad (4.5)$$

где $T_{кГ}$ – количество календарных дней в году;

$T_{вд}$ – количество выходных дней в году;

$T_{пд}$ – количество праздничных дней в году.

Определим длительность этапов в рабочих днях и коэффициент календарности:

$$k = \frac{T_{ке}}{T_{ке} - T_{вд} - T_{пд}} = \frac{365}{365 - 52 - 14} = 1,22, \quad (4.6)$$

тогда длительность этапов в рабочих днях, следует учесть, что расчетную величину продолжительности работ T_k нужно округлить до целых чисел.

4.4 Определение трудоемкости выполнения работ

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

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

$$t_{ожі} = \frac{3t_{\min i} + 2t_{\max i}}{5}, \quad (4.7)$$

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

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

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

Для выполнения перечисленных в таблице 4 работ требуются специалисты:

- инженер (И);
- научный руководитель (НР).

Исходя из ожидаемой трудоемкости работ, определяется

продолжительность каждой работы в рабочих днях T_p , учитывающая параллельность выполнения работ несколькими исполнителями. Такое вычисление необходимо для обоснованного расчета заработной платы, так как удельный вес зарплаты в общей сметной стоимости научных исследований составляет около 65 %.

$$T_{pi} = \frac{t_{ожi}}{Ч_i}, \quad (4.8)$$

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

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

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

4.5 Разработка графика проведения научного исследования

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

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k_{кал}, \quad (4.9)$$

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

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

$k_{кал}$ – коэффициент календарности.

Коэффициент календарности определяется по следующей формуле:

$$k_{\text{кал}} = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}}}, \quad (4.10)$$

где $T_{\text{КАЛ}}$ – календарные дни ($T_{\text{КАЛ}} = 365$);

$T_{\text{ВД}}$ – выходные дни ($T_{\text{ВД}} = 52$);

$T_{\text{ПД}}$ – праздничные дни ($T_{\text{ПД}} = 14$).

В таблице 8 приведены длительность этапов работ и число исполнителей, занятых на каждом этапе.

Таблица 8 – Длительность этапов работ и число исполнителей, занятых на каждом этапе

Этап	Исполнители	Продолжительность работ, дни						Длительность работ, чел/дн.			
		t_{\min}		t_{\max}		$t_{\text{ож}}$		$T_{\text{Рi}}$		$T_{\text{К}}$	
		НР	И	НР	И	НР	И	НР	И	НР	И
Постановка задачи	НР	3	10	5	13	3,8	11,2	4,56	–	5,53	–
Разработка и утверждение технического задания (ТЗ)	НР, И	2	12	4	15	2,8	13,2	0,34	3,36	0,41	4,07
Подбор и изучение материалов по тематике	НР, И	10	15	13	20	11,2	17	4,03	13,44	4,88	16,28
Разработка календарного плана	НР, И	2	3	4	5	2,8	3,8	0,67	3,36	0,81	4,07
Обсуждение литературы	НР, И	2	6	4	9	2,8	7,2	1,01	3,36	1,22	4,07
Проектирование структуры ПО	НР, И	15	10	20	13	17	11,2	20,4	14,28	24,72	17,3
Разработка ПО	НР, И	12	15	15	20	13,2	17	7,92	15,84	9,60	19,19
Тестирование ПО	И	6	2	10	4	7,6	2,8	–	9,12	–	11,05
Оформление расчетно-пояснительной записки	И	6	15	9	20	7,2	17	–	8,64	–	10,47
Оформление графического материала	И	2	3	5	5	3,2	3,8	–	3,84	–	4,65
Подведение итогов	НР, И	2	2	3	4	2,4	2,8	1,72	2,88	2,08	3,49
Итого:						74	78	40,65	78,12	49,27	94,68

На основе таблицы 8 строится календарный план-график. График строится для максимального по длительности исполнения работ в рамках

научно-исследовательского проекта на основе таблицы 8 с разбивкой по месяцам и декадам (10 дней) за период времени дипломирования. При этом работы на графике следует выделить различной штриховкой в зависимости от исполнителей, ответственных за ту или иную работу.

4.6 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)

При планировании бюджета НТИ должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов расходов, связанных с его выполнением.

4.6.1 Расчет материальных затрат НТИ

Расчет материальных затрат осуществляется по следующей формуле:

$$Z_m = (1 + k_T) \cdot \sum_{i=1}^m C_i \cdot N_{расхи}, \quad (4.11)$$

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

$N_{расхи}$ – количество материальных ресурсов i -го вида, планируемых к использованию при выполнении научного исследования (шт., кг, м, м² и т.д.);

C_i – цена приобретения единицы i -го вида потребляемых материальных ресурсов (руб./шт., руб./кг, руб./м, руб./м² и т.д.);

k_T – коэффициент, учитывающий транспортно-заготовительные расходы.

Транспортные расходы принимаются в пределах 15-25% от стоимости материалов.

Таблица 9 – Материальные затраты

Наименование	Единица измерения	количество		Цена за ед., руб.		Затраты на материалы, (з _м), руб		
		Исп. 1	Исп. 2	Исп. 1	Исп. 2	Исп. 1	Исп. 2	
Бумага	лист	150	100	2	2	345	230	
Картридж для принтера	шт.	1	1	1000	1000	1150	1150	
Интернет	М/бит (пакет)	1	1	350	350	402,5	402,5	
Ручка	шт.	1	1	20	20	23	23	
Дополнительная литература	шт.	2	1	400	350	920	402,5	
Тетрадь	шт.	1	1	10	10	11,5	11,5	
Итого						2852	2219,5	2135,5

4.6.2 Основная и дополнительная заработная плата исполнителей темы

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

$$Z_{зп} = Z_{осн} = Z_{дн} \cdot T_p, \quad (4.12)$$

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

T_p – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб. дн. (таблица 8);

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

Максимальная основная заработная плата руководителя (доктора наук) равна примерно 17000 рублей, а студента 9893 рублей.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле: для руководителя и бакалавра считается отдельно. (Бакалавр берет заработную плату как младший научный сотрудник 1-го уровня)

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_{\text{м}} \cdot M}{F_{\text{д}}}, \quad (4.13)$$

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

M – количество месяцев работы без отпуска в течение года:

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

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

$F_{\text{д}}$ – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн. (таблица 10).

Таблица 10 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Студент
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней		
- выходные дни	52	52
- праздничные дни	14	14
Потери рабочего времени		
- отпуск	48	48
Действительный годовой фонд рабочего времени ($F_{\text{д}}$)	251	251

В состав основной заработной платы включается премия, выплачиваемая ежемесячно из фонда заработной платы в размере 20 –30 % от тарифа или оклада. Расчет основной заработной платы сводится в таблице 11.

Таблица 11 – Расчёт основной заработной платы

Исполнители	k_T	$Z_{тс},$ руб.	$k_{пр}$	k_d	k_p	$Z_m,$ руб	$Z_{дн},$ руб.	$T_p,$ раб. дн.	$Z_{осн},$ руб.
Руководитель	1	17000	0,3	0,2	1,3	33150	1374	41	56315
Студент	1	9893	0,3	0,2	1,3	19291	799	78	62347

Таким образом, заработная плата руководителя равна 58794 рублей, студента – 55068 рублей.

4.6.3 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется исходя из следующей формулы:

$$Z_{внеб} = k_{внеб} \cdot Z_{осн}, \quad (4.14)$$

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

На 2015 г. в соответствии с Федеральным законом от 24.07.2009 №212-ФЗ установлен размер страховых взносов равный 30%. На основании пункта 1 ст.58 закона №212-ФЗ для учреждений осуществляющих образовательную и научную деятельность в 2015 году водится пониженная ставка – 27,1%.

Таблица 12 – Отчисления во внебюджетные фонды

Исполнитель	Основная заработная плата, руб
Руководитель проекта	56315
Студент (Инженер)	62347

Коэффициент отчислений во внебюджетные фонды	0,271
Итого	32157,5 руб

4.6.4 Накладные расходы

Накладные расходы учитывают прочие затраты организации, не попавшие в предыдущие статьи расходов: печать и ксерокопирование материалов исследования, оплата услуг связи, электроэнергии, почтовые и телеграфные расходы, размножение материалов и т.д.

Таким образом, наибольшие накладные расходы при первом исполнении равны: $Z_{\text{накл}} = 0.35 \text{ кВт/час} \cdot 5 \text{ час/дн.} \cdot 125 \text{ дн.} \cdot 0,16 \cdot 5,8 \text{ руб/кВт/час} = 203 \text{ руб.}$

4.6.5 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

Таблица 13 – Расчет бюджета затрат НИИ

Наименование статьи	Сумма, руб.
Материальные затраты НИИ	2852
Затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	36290
Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	32157,5
Отчисления во внебюджетные фонды	24190,5
Накладные расходы	203
Бюджет затрат НИИ	95693,0

Выводы

Для исследования понимание процессов, происходящих в системе никель–водород. Исследование электронной и атомной структуры систем металл–водород позволяют продвинуться в понимании особенностей взаимодействия водорода с никелем. В физике твердого тела существуют различные методы расчета электронной структуры металлов: метод сильной связи, метод псевдопотенциала, метод линеаризованных присоединенных плоских волн.

Бюджет затрат, приведенный в таблице 13 обусловлен необходимостью разработки экспериментальной методики для быстрого и качественного исследования из первых принципов особенностей взаимодействия водорода с металлом-растворителем.

Полученные в ходе исследования результаты, при затрате 95693.0 рублей на реализацию, могут быть использованы для дальнейших исследований систем металл-водород, а также в целях разработки защитных методик подготовки образцов для снижения вероятности водородного охрупчивания металлов и сплавов. Работа имеет большую практическую ценность и в полной мере способствует решению многих фундаментальных задач.

Глава V Социальная ответственность

Никель широко используют при изготовлении различной химической аппаратуры, в кораблестроении, в электротехнике, при изготовлении никеля-металлогибридных аккумуляторов, для многих других целей. Он тоже используется для хранения водорода. Водород является наиболее распространенным элементом во вселенной в настоящее время. Взаимодействие водорода с переходными металлами – это одно из основных научных направлений исследований материалов. Научный интерес, в частности, представляет взаимодействие водорода с никелем. Насыщение никеля водородом приводит к хрупкому межкристаллитному разрушению: при испытании на растяжение относительное удлинение чистого никеля при 20 °С не зависит от скорости деформации, тогда как удлинение наводороженного никеля уменьшается с ее понижением. Относительно высокая стойкость электролитического никеля обусловлена его высокой пассивностью, в то время как никель металлургический более активен. Это различие связывается с содержанием в никеле водорода. Расчеты из первых принципов позволяют выявить особенности взаимодействия водорода с никелем на микроскопическом уровне. Термин “из первых принципов” (*ab initio* в зарубежной литературе) означает, что никакие экспериментальные параметры не используются при проведении расчётов, нет никаких подгоночных значений и изначальные входные параметры опираются только на общеизвестные фундаментальные физические постоянные.

5.1 Техногенная безопасность

Работа компьютера осуществляется за счет питания от сети переменного тока напряжением 220 В. При выполнении работ на компьютере возможно воздействие следующих вредных факторов:

- Микроклимат;

- Электромагнитные поля
- Статическое электричество
- Шум
- Недостаточное освещение

Также возможно воздействие таких опасных производственных факторов как:

- Электрическое напряжение;
- Воздействие высокой температуры;

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.

Так работа в условиях высокой температуры сопровождается интенсивным потоотделением, что приводит к обезвоживанию организма, потере минеральных солей и водорастворимых витаминов, вызывая серьезные и стойкие изменения в деятельности сердечно-сосудистой системы, увеличивая частоту дыхания, а также оказывая 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 перегреванию организма, при низкой же температуре увеличивает теплоотдачу 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 СанПин 2.2.4.548-96 (Таблица 14).

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

Таблица 14 – Оптимальные показатели микроклимата на рабочих местах производственных помещений (СанПиН 2.2.4.548-96)

Период года	Категория работ по уровню энергозатрат, Вт	Температура воздуха, °С	Температура поверхности, °С	Относительная влажность воздуха, %	Скорость движения воздуха, м/с
Холодный	Ia (до139)	22-24	21-25	60-40	0,1
Теплый	Ia (до139)	23-25	22-26	60-40	0,1

5.1.2 Электромагнитные поля

Дипломная работа выполнялась с применением персональных компьютеров (ПЭВМ) типа IBM PC. Основным вредным фактором, воздействию которого подвергается инженер-исследователь при работе за компьютером, является электромагнитное излучение.

Безопасные уровни излучений регламентируются нормами СанПиН 2.2.2/2.4.1340–03 и представлены в таблице 15.

Таблица 15 – Временные допустимые уровни (ВДУ) электромагнитных полей, создаваемых ПЭВМ на рабочих местах

Наименование параметров	Нормы в диапазоне частот	ВДУ
Напряженность электрического поля	5 Гц - 2 кГц	25 В/м
	2 кГц - 400 кГц	2,5 В/м
Плотность магнитного потока	5 Гц - 2 кГц	250 нТл
	2 кГц - 400 кГц	25 нТл
Напряженность электростатического поля		15 кВ/м

Вредное воздействие ПЭВМ на организм человека проявляется в нагрузке на зрение, заболевании кожи лица, нервных и психических заболеваниях и т.д.. Допустимая напряжённость электрического поля: 25 В/м (5Гц-2кГц) и 2,5 В/м (2-400 кГц). Для защиты от электромагнитных полей используются различные фильтры. Ориентация светопроемов должна быть северо-восточной или северной. Источники искусственного освещения: люминесцентные лампы типа ЛБ и ДРЛ. Оптимальные параметры микроклимата. При работе с ПЭВМ уровень звука не должен превышать значений, установленных для данных видов работ. Кроме этого, для ослабления влияния рассеянного рентгеновского излучения от монитора ПК рекомендуется использовать защитные фильтры (экраны).

5.1.3 Шум

Сильный шум вызывает трудности в распознавании цветовых сигналов, снижает быстроту восприятия цвета, остроту зрения, зрительную адаптацию, нарушает восприятие визуальной информации, снижает способность быстро и точно выполнять координированные движения, уменьшает на 5–12 % производительность труда. Длительное воздействие шума с уровнем звукового давления 90 дБ снижает производительность труда на 30–60 %.

В рассматриваемом кабинете основными источниками шума являются кондиционер, три компьютера (охлаждение внутри системного блока, оптические приводы DVD-ROM).

При выполнении основной работы на ПЭВМ в помещениях, где работают программисты, уровень шума не должен превышать 50 дБА.

В соответствии со спецификацией на компьютер DNS Office XL, уровень шума блока питания компьютера составляет 5–10 дБА, уровень шума охлаждающего устройства процессора 15–20 дБА, 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 дБА.

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).

5.1.4 Недостаточное освещение

Рациональное освещение рабочего места позволяет предупредить травматизм и многие профессиональные заболевания. Правильно организованное освещение создает благоприятные условия труда, повышает работоспособность и увеличивает производительность труда. Освещение на рабочем месте должно быть таким, чтобы человек мог без напряжения выполнять свою работу. Существуют три вида освещения: естественное, искусственное, совмещенное.

К системам производственного освещения предъявляются следующие требования:

- соответствие уровня освещенности характеру выполняемой работы;
- достаточно равномерное распределение яркости на рабочих поверхностях и в окружающем пространстве;
- оптимальная направленность излучаемого осветительными приборами светового потока;
- долговечность, экономичность, электро- и пожаробезопасность, эстетичность, удобство и простота эксплуатации.

В соответствии с СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03, искусственное освещение в помещениях осуществляется системой общего равномерного освещения.

В производственных и административно-общественных помещениях, в случаях преимущественной работы с документами, разрешено применение

системы комбинированного освещения (к общему освещению дополнительно устанавливаются светильники местного освещения, предназначенные для освещения зоны расположения документов).

Зрительная работа программиста характеризуется как работа очень высокой степени точности. Что требует освещенности в 300—500 лк. Допускается установка светильников местного освещения для подсветки документов, но с таким условием, чтобы оно не создавало бликов на поверхности экрана и не увеличивало освещенность экрана более чем на 300 лк. Светильники местного освещения должны иметь не просвечивающий отражатель с защитным углом не менее 40 градусов.

В качестве источников света при искусственном освещении должны применяться преимущественно люминесцентные лампы типа ЛБ. Освещение следует выполнять в виде сплошных или прерывистых линий светильников, расположенных сбоку от рабочих мест, параллельно линии зрения пользователя при рядном расположении персональных электронно-вычислительных машин (ПЭВМ). При расположении компьютеров по периметру помещения линии светильников должны располагаться локализовано над рабочим столом, ближе к его переднему краю, обращенному к оператору.

Согласно СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03, естественное освещение осуществляется посредством проемов, ориентированных преимущественно на север и северо-восток и обеспечивающих коэффициент естественной освещенности (КЕО) не менее 1,5 %.

Для обеспечения нормируемых значений освещенности в помещениях

использования ЭВМ следует проводить чистку светильников не реже двух раз в год и проводить своевременную замену перегоревших ламп на аналогичные.

5.1.5 Электрическое напряжение

Воздействие электрического напряжения на человека связано с протеканием через него тока. Прохождение тока может вызывать у человека раздражение и повреждение различных органов. Пороговый неотпускающий ток составляет 50 Гц (6-16 мА). Защита от воздействия электрического тока осуществляется путем проведения организационных, инженерно-технических и лечебной-профилактических мероприятий.

При поражении работника электрическим током необходимо как можно скорее освободить пострадавшего от воздействия электрического тока, проверить состояние пострадавшего и вызвать при необходимости скорую помощь. До приезда скорой помощи оказать пострадавшему необходимую первую помощь или, при необходимости, организовать доставку пострадавшего в ближайшее лечебное учреждение, а о произошедшем несчастном случае поставить в известность руководителя структурного подразделения.

5.1.6 Воздействие высокой температуры

Запрещается открывать крышку нагретой печи, дотрагиваться до камеры, а также необходимо одевать спецодежду, во избежание получения термических ожогов при работе с экспериментальными установками с высокими рабочими температурами.

5.2 Региональная безопасность

Лабораторная работа всегда связана с постоянным образованием различных отходов: отходы инструмента, технологической оснастки, абразивных материалов, отходы бумаги и т.д..

При работе с суперкомпьютером возможно образование отходов: бумага. Бумагу используют для записи результатов экспериментов. Эти отходы могут вызвать загрязнение литосферы. Для охраны поверхностных и подземных вод от загрязнения и истощения, можно использовать бумагу повторно.

5.3 Организационные мероприятия обеспечения безопасности

Также обосновываются организационные мероприятия, обеспечивающие безопасную эксплуатацию компьютера: присутствие людей в рабочей зоне разрешается в течение 8 часов. Для обеспечения безопасности перед началом работы необходимо правильно надеть спецодежду, подготовить для работы необходимый инструмент и приспособления, приготовить рабочий стол. Также необходимо проверить отсутствие внешних повреждений электрооборудования, наличие и исправность контрольных, измерительных и сигнальных приборов, компьютера, тумблеров, переключателей и т.п. При выявлении неисправностей, не допускается проводить ремонт самостоятельно, необходимо доложить руководителю лаборатории. Наладка прибора и его ремонт осуществляется только сервис-инженерами.

Запрещается приступать к работе, если выявлены неисправности любого используемого оборудования, если персонал не прошел в установленном порядке обучение и проверку знаний безопасности труда.

Работа с суперкомпьютером должна производиться в чистом помещении, свободном от пыли, паров, кислот и щелочей, агрессивных газов и других вредных примесей, вызывающих коррозию. Недопустимо наличие открытого

огня около прибора.

5.4 Особенности законодательного регулирования проектных решений

К работе на суперкомпьютере допускаются лица не моложе 18 лет, не имеющие медицинские противопоказания, прошедшие обучение безопасности труда и инструктаж на рабочем месте.

К самостоятельной работе допускаются работники после специального обучения и проверки знаний норма и правил работы с электроустановками, правил безопасности работы с газовыми баллонами, приобретенных навыков и безопасных способов выполнения работы на суперкомпьютере, имеющие не менее II группы по электробезопасности и получившие допуск к работе с газовыми баллонами.

Повторная проверка знаний норм и правил электробезопасности, правил безопасной работы с газовыми баллонами проводится с работниками не реже 1 раза в 12 месяцев, повторный инструктаж на рабочем месте – не реже 1 раза в 3 месяца

Проведение всех видов инструктажа должно оформляться в Журнале регистрации инструктажа установленного образца, с обязательными подписями получившего и проводившего инструктаж, с указанием даты проведения инструктажа, наименования и номеров инструкции на виды работ, по которым проводится инструктаж.

По данной теме рассматриваются законодательный и нормативные документы:

- инструкция № 2-25 по охране труда при выполнении работ на установке Gas Reaction Controller;
- инструкция № 2-14 по охране труда при работе с электрооборудованием напряжением до 1000 В;
- инструкция № 2-07 по охране труда при работе с баллонами,

работающими под давлением.

Документы по воздействию ПЭВМ:

- инструкция № 2-08 по охране труда при работе с ПЭВМ и ВДТ;
- СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03. Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организация работы;
- ГОСТ Р 50948-01. Средства отображения информации индивидуального пользования. Общие эргономические требования и требования безопасности;
- ГОСТ Р 50949-01. Средства отображения информации индивидуального пользования. Методы измерений и оценки эргономических параметров и параметров безопасности;
- ГОСТ Р 50923-96. Рабочее место оператора. Общие эргономические требования и требования к производственной среде. Методы измерения.

Микроклимат:

- ГОСТ 30494-96 Здания жилые и общественные помещения. Параметры микроклимата в помещении;
- ГОСТ 12.1.005 Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны;
- СанПиН 2.2.4.548-96 Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.

5.5 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

При обнаружении неисправной работы суперкомпьютера необходимо прекратить работу, выйти из программы, отключить питание компьютера, отключить насос, суперкомпьютеру от электросети и известить об этом руководителя.

При возникновении возгорания необходимо немедленно прекратить работу, отключить электрооборудование, позвонить в подразделение пожарной охраны по телефону 01 или 010, сообщить о случившемся руководителю

подразделения и приступить к тушению огня первичными средствами пожаротушения.

Чтобы избежать опасности пожара и взрыва, можно принять следующие мероприятия:

1) планирование защиты населения и территорий от пожара и взрыва на уровне предприятия;

2) эвакуация работающих;

3) создание запасов средств индивидуальной защиты и поддержание их в готовности;

4) проектирование, размещение, строительство и эксплуатация объектов инфраструктуры, в том числе и потенциально опасных;

5) инженерное обеспечение защиты населения – строительство защитных сооружений (средств коллективной защиты).

В лаборатории обязательно показан план эвакуации: Заранее разработанный план (схема), в котором указаны пути эвакуации, эвакуационные и аварийные выходы, установлены правила поведения людей, порядок и последовательность действий в условиях чрезвычайной ситуации.



Рисунок 25 – План эвакуации при пожаре и других ЧС

5.6 Расчет искусственного освещения

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, соблюдение 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.

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:

$$h_n = H - h_c = 350 - 35 = 315 \text{ см} . \quad (5.1)$$

Высота рабочей поверхности над полом: $h_{pn} = 75$ см;

Рассчитаем высоту светильника над рабочей поверхностью:

$$h = h_n - h_{pn} = 315 - 75 = 240 \text{ см} . \quad (5.2)$$

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 $h = 2,4$ 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:

$$\frac{L}{3} = \frac{3,75}{3} = 1,25 \text{ м} \quad (5.3)$$

Интегральный критерий оптимальности расположения светильников является величина, равная:

$$\lambda = L / h \quad (5.4)$$

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

Рассчитаем оптимальное расстояние между светильниками:

$$L = \lambda \cdot h = 1,4 \cdot 2,6 = 3,64 \text{ м} \quad (5.5)$$

Данная величина полностью соответствует настоящему расположению светильников.

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

$$\phi = \frac{E_n S K_s Z}{N n} = \frac{200 \cdot 20 \cdot 1,5 \cdot 1,1}{5 \cdot 0,49} = 2793 \text{ Лм} \quad (5.6)$$

Нормируемая минимальная освещенность (по СНиП 23-05-95):
 $E_n = 200 \text{ Лм}$ (разряд зрительной работы VI: очень малой точности);

Площадь освещаемого освещения: $S = 20 \text{ м}^2$;

Коэффициент запаса, учитывающий загрязнение светильника, наличие в атмосфере дыма, пыли: $K_s = 1,5$ (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:

$$i = \frac{S}{h(A + B)} = \frac{20}{2,6 \cdot 10} = 0,78 \quad (5.7)$$

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 $\Phi = 2793$ Лк, ближайшей световой люминесцентной лампой является лампа типа ЛХБ с электрической мощностью осветительной системы 65 Вт.

Вывод

В ходе рассмотрения безопасности и гигиены труда при осуществлении работ с помощью суперкомпьютера, были выявлены вредные и опасные факторы рабочей зоны, причины и средства защиты, рассмотрены чрезвычайные ситуации и поведение в них. Социальная ответственность представляет диалектическую взаимосвязь между лицом (работодателем) и обществом (работником), характеризующаяся взаимными правами и обязанностями по выполнению социальных норм и наложением воздействия в случае ее нарушения. На основе рассмотрения безопасности в процессе выполнения работы, было ясно, что студенты – будущий руководитель должен нести социальную ответственность за принимаемые решения.

Заключение

В настоящей работе были изучены особенности взаимодействия водорода с никелем. Был сделан краткий обзор по фазовой диаграмме и атомной структуре системы никель-водород. Также рассмотрен вопрос об энергии связи водорода в никеле, изученный ранее из первых принципов. Однако в литературе крайне редко встречается информации о влиянии концентрации водорода на атомную и электронную структуры никеля. Таким образом, объектом текущего исследования являлась атомная и электронная структура системы Ni–H при различной концентрацией атомов водорода в ГЦК решетке никеля.

Для изучения и анализа влияния водорода на атомную и электронную структуры никеля, были детально рассмотрены современные методы расчёта электронной структуры твердых тел. В текущей работе спин-поляризованные расчеты выполнялись в рамках теории функционала электронной плотности методами псевдопотенциала и проекционных присоединенных волн, реализованными в пакете программ ABINIT. Также были изучены основные приближения, используемые при исследовании электронной структуры твердых тел: адиабатическое приближение, одноэлектронное приближение, зонное приближение, приближение локальной плотности и приближение обобщённого градиента.

В работе был рассчитан магнитный момент системы никель-водород в зависимости от концентрации водорода в решетке металла. Рассчитанный магнитный момент чистого никеля составляет $0,65\mu_B$. Получено, что с

увеличением концентрации атомов водорода в решетке Ni магнитный момент металла уменьшается и в системах NiH и NiH₂ он обращается в ноль, т.е. системы NiH и NiH₂ являются парамагнитными.

В работе наблюдается хорошее согласие рассчитанных параметров решетки Ni и системы Ni-H с результатами других экспериментальных и теоретических работ. Выявлено, что при растворении водорода в никеле с относительной концентрацией $X = \text{H}/\text{Ni} = 0,0625-0,25$ изменение параметров решетки металла составляет 0,14–2,0%. При более высоких концентрациях водорода ($X \geq 1,0$) изменения параметров решетки никеля более значительны и в случае системы NiH₂ достигают 42,7%. Отметим, что в большинстве рассмотренных случаев растворение водорода в решетке металла приводит к ее тетрагональному искажению. Особенно ярко это проявляется в системах Ni₂H, NiH и NiH₂. В работе также была вычислена зависимость энергии растворения водорода в никеле от его относительной концентрации. Получено что при относительных концентрациях водорода в никеле $X = \text{H}/\text{Ni} = 1,0$ атомам H энергетически более выгодно занимать октаэдрические междоузлия.

В работе было исследовано распределение электронной плотности системы Ni-H. Практически при всех рассмотренных концентрациях наблюдается ковалентная составляющая химической связи между атомами водорода и ближайшими к нему атомами никеля. Исключение составляет система NiH с октаэдрической координацией атомов водорода, в которой прослеживается преимущественно металлический характер связи между атомами примеси и металла. Получено, что магнитные моменты атомов

водорода и окружающих их атомов никеля сильно зависят от концентрации примеси и ее расположения в решетке металла.

Список используемых источников

1. ABINIT – Abinit [Электронный ресурс]. – URL: <http://www.abinit.org>, свободный. – Загл. с экрана. – Яз. англ. Дата обращения: 31.05.17.
2. Мосягин И.Ю. Исследование нелинейных упругих свойств металлов пятой группы в рамках теории функционала плотности: диссертация на соискание учёной степени кандидата физ.-мат. наук. – М.: ФГОУ ВПО Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», 2014. – 118 с.
3. Брокгауза Ф.А. Энциклопедический словарь Брокгауза и Ефрона. / Ф.А. Брокгауза, И.А. Ефрона. – М.: Терра, 2001. – 40726 с.
4. Shan J. The Interaction of Water and Hydrogen with Nickel Surfaces // Leiden: Universiteit Leiden, 2009. – p. 94.
5. Багрянский К.В. Сварка никеля и его сплавов. / К.В. Багрянский, Г.С. Кудьмин – М.: Машгиз, 1963. – 164 с.
6. Антонов В.Е. Фазовые Т-Р диаграммы систем Ni-D и Ni-H при температурах до 375°C и давлениях до 20 кбар / В.Е. Антонов, И.Т. Белаш, Е.Г. Понятовский // Докл. Акад. Наук СССР. – 1977. – Т.233, №6. – С. 1114-1117.
7. Wollan E.O. The Hydrogen Atom Positions in Face Centered Cubic Nickel Hydride / E.O. Wollan, J.W. Cable, W.C. Koehler // J. Phys. Chem. Solids. – 1963. – Vol.24, №9. – P. 1141-1143.
8. Кепка J.B. Analysis of Some Results on Pd-H and Ni-H Systems Studied in High-Pressure-Hydrogen Conditions / J.B. Кепка, E.W. Czaputowicz // Phys. Rev. B. – 1979. – Vol.19. – P. 2414-2416.

9. Понятовский Е.Г. Переходные металлы VI VIII групп при высоком давлении водорода / Е.Г. Понятовский, В.Е. Антонов, И.Т. Белаш // Неорганические материалы. – 1978. – Т.14, №9. – С. 1570-1580.
10. Klug H.P. X-ray diffraction procedures for polycrystalline and amorphous materials / H.P. Klug, L.E. Alexander. 2nd ed. – N-Y.: John Wiley & Sons, 1974. – 992 с.
11. Atomistic process on hydrogen embrittlement of a single crystal of nickel by the embedded atom method / Xu Xuejun, Mao Wen, Zhong Hu, Seiji Fukuyama, Kiyoshi Yokogawa // Computational Materials Science. Elsevier. – 2002. – Vol.23 – P. 131-138.
12. Simulation of Hydrogen Embrittlement at Crack Tip in Nickel Single Crystal by Embedded Atom Method / X. Xu, W. Mao, S. Fukuyama, K. Yokogawa // Materials Transactions – 2001. – Vol.44, №2. – P. 2283-2289.
13. Feng Y. Electronic structures of nickel metal with hydrogen impurity / Y. Feng, Ch. Wang, N. Chen // Science in China (Series E) – 2001. – Vol.44, №2. – P. 201-205.
14. Christensen N.E. Band-structure calculations for Ni, Ni₄H, Ni₄H₂, Ni₄H₃, NiH // Phys. Rev. B – 1987. – Vol. 35, № 4. – P. 1993-2004.
15. Kotani T. Exact exchange-potential for band-structure calculation by the LMTO-ASA method: MgO and CaO // Phys. Rev. B – 1994. – Vol. 50, № 20. – P. 14816-14821.
16. Немошкаленко В.В., Кучеренко Ю.Н. Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Электронные состояния в неидеальных кристаллах. – Киев.: Наук. думка, 1986. – 296 с.
17. Юй Ш. Исследование свойства и кристаллическая структура водородпоглощающего сплава / Ш. Юй, Ю. Чжен // Хэнань Наука. – 1997. –

Vol.15, №2. – P. 149-153.

18. Бассани Ф. Электронные состояния и оптические переходы в твердых телах. / Ф.Бассани, Дж. Паррavicчини / Пер. с англ., под ред. В.Л. Бонч-Бруевича. – М.: «Наука», 1982. – 392 с.

19. Born M. Zur Quanten theorie der Molekeln / M. Born, R. Oppenheimer // Annalen der Physik. – 1927. – Vol.84. – P. 457-484.

20. Tulk E. Study on the effects of matrix yield strength on hydride phase stability in zircaloy-2 and Zr 2.5 wt% Nb / E. Tulk, M. Kerr, M.R. Daymond // Journal of Nuclear Materials. – 2012. – Vol.425, №1–3. – P. 93-104.

21. Hartree D.R. The wave mechanics of an atom with a non-Coulomb central field. Part I. Theory and Methods // Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. – 1928. – Vol.24, №1. – P. 89-110.

22. Parr R.G. Density Functional Theory of Atoms and Molecules / R.G. Parr, W. Yang. – N-Y: Oxford., 1989. – p. 333.

23. Hohenberg P. Inhomogeneous Electron Gas / P. Hohenberg, W. Kohn // Phys. Rev. – 1964. – Vol.136, №3B. – P. 864-871.

24. Kohn W. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects / W. Kohn, L.J. Sham // Physical Review. – 1965 – Vol.140, №4A. – P. A1133-A1138.

25. Dirac P.A.M. The Quantum Theory of the Electron // Proc. R. Soc. Lond. A. – 1928. – Vol.117. – P. 610-624.

26. Bloch F. Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern // Zeitschrift für Physik. – 1928. – Vol.52. – P. 555-600.

27. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. – М.: Альянс, 2013. – 792 с.

28. Goedecker S. Separable dual-space Gaussian pseudopotentials / S. Goedecker, M. Teter, J. Huetter // Phys. Rev. B. – 1996. – Vol.54 – P.1703-1710.
29. Кон В. Электронная структура вещества: волновые функции и функционалы плотности // Успехи физических наук. – 2002. – Vol.172, №3. – P. 336-348.
30. Wang C. Theory of Magnetic and Structural Ordering in Iron / C. Wang, B. Klein, H. Krakauer // Physical Review Letters. 1985 – Т. 54, № 16. – С. 1852-1855.
31. Development and assessment of new exchange-correlation functionals / F.A. Hamprecht, A.J. Cohen, D.J. Tozer, N.C. Handy // J. Chem. Phys. – 1998. – Vol.109, №15. – P.6264-6271.
32. Perdew J.P. Generalized Gradient Approximation Made Simple / J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof // Phys. Rev. Lett. – 1996. – Vol.77, №18. – P. 3865-3868.
33. Perdew J.P. Rationale for mixing exact exchange with density-functional approximations / J.P. Perdew, M. Ernzerhof, K. Burke // J. Chem. Phys. – 1996. – Vol.105. – P. 9982-9985.
34. Пермина В.С. Электронное строение, химическая связь и некоторые физико-химические свойства кристаллов $AlPN_2$ ($Al=H, Li, Na, Ag$). – Кемерово, 2009. – 116 с.
35. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела/ Н. Ашкрофт, Н. Мермин. Том 1 – М.: Мир, 1979. – 458 с.
36. Цысарь К.М. Теоретическое исследование атомной структуры и квантовых свойств металлических наноконтактов и нанопроводов: диссертация на соискание учёной степени кандидата физ.-мат. наук. – М.: Национальный

исследовательский технологический университет «МГУ им. М.В. Ломоносова»,
2011. – 137 с.

37. Martin R.M. *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods*.
– Cambridge: Cambridge University Press, 2004. – p. 624.

38. Kohanoff J. *Electronic Structure Calculations for Solids and Molecules:
Theory and Computational Methods*. – Cambridge: Cambridge University Press,
2006. – p. 348.

39. Singh R. Structural, electronic, and magnetic properties of 13-, 55-, and
147-atom clusters of Fe, Co, and Ni: A spin-polarized density functional study / R.
Singh, P. Kroll // *Phys. Rev. B*. – 2008. – Vol.78. – P. 245404(1)-245404(12).

40. Janko A. Real Structure of nickel due to the $\text{Ni} \leftrightarrow \beta \text{NiH}$ phase
transformation / A. Janko, J. Pielaszek // *Materials science monographs*. – 1991. –
Vol.59, №11. – P. 322-338.

41. Boron influence on wear resistance in nickel-based alloys / J. Diabb, A.
Juárez-Hernandez, R. Colas, A.G. Castillo, E. García-Sánchez, M.A.L.
Hernandez-Rodríguez // *Wear*. – 2009. – Vol.267. – P. 550-555.