

Школа Инженерная школа ядерных технологий
 Направление подготовки 03.03.02 «Физика»
 Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
ОСОБЕННОСТИ ПОВЕДЕНИЯ ВОДОРОДА НА ПОВЕРХНОСТИ ЦИРКОНИЯ: РАСЧЕТЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

УДК 669.296:669.788.001.24

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б51	Чжан Цзыхань		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Руководитель ОЭФ	Лидер А.М.	д.т.н., доцент		

Консультант

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

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Конотопский В. Ю.	к.э.н., доцент		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель	Скачкова Л. А.			

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Руководитель ОЭФ	Лидер А.М.	д.т.н., доцент		

Томск – 2019 г.

Запланированные результаты обучения по программе

Код результата	Результат обучения (выпускник способен)	Требования ФГОС, критериев и/или заинтересованных сторон
<i>Общекультурные компетенции</i>		
Р1	Использовать основные этапы и закономерности исторического развития общества, основы философских, экономических, правовых знаний для формирования мировоззренческой, гражданской позиций и использования в различных сферах жизнедеятельности	Требования ФГОСЗ+ (ОК-1, ОК-2, ОК-3, ОК-4)
Р2	К самоорганизации и самообразованию, работать в коллективе, к коммуникации в устной и письменной формах, в том числе на иностранном языке, толерантно воспринимать социальные, этические и культурные различия, использовать методы и средства физической культуры, приёмы первой помощи и методы защиты в условиях ЧС.	Требования ФГОСЗ+ (ОК-5, ОК-6, ОК-7, ОК-8, ОК-9)
<i>Общепрофессиональные компетенции</i>		
Р3	Использовать в профессиональной деятельности базовые естественнонаучные знания, современные концепции и ограничения естественных наук, использовать фундаментальные знания разделов общей и теоретической физики, математики для создания моделей и решения типовых профессиональных задач, в том числе с использованием знаний профессионального иностранного языка.	Требования ФГОСЗ+ (ОПК-1, ОПК-2, ОПК-3, ОПК-7)
Р4	Понимать сущность и значение информации, соблюдать основные требования информационной безопасности, использовать методы, способы, средства получения и хранения информации, решать стандартные задачи на основе информационной и библиографической культуры.	Требования ФГОСЗ+ (ОПК-4, ОПК-5, ОПК-6)
Р5	Получить организационно-управленческие навыки при работе в научных группах, критически переосмысливать накопленный опыт, изменять при необходимости профиль своей профессиональной деятельности, нести ответственность за последствия своей инженерной деятельности.	Требования ФГОСЗ+ (ОПК-8, ОПК-9)
<i>Профессиональные компетенции</i>		

Р6	<p><u>Научно-исследовательская деятельность</u></p> <p>Проводить научные теоретические и экспериментальные исследования в областях: материаловедения, атомной и ядерной физики, водородной энергетики, физики плазмы с помощью современной приборной базы с использованием специализированных знаний физики и освоенных профильных дисциплин.</p>	<p>Требования ФГОСЗ+ (ПК-1, ПК-2)</p>
Р7	<p><u>Научно-инновационная деятельность</u></p> <p>Применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований, а также профессиональные знания и умения в результате освоения профильных дисциплин для проведения физических исследований в инновационных областях науки, используя современные методы обработки, анализа и синтеза информации.</p>	<p>Требования ФГОСЗ+ (ПК-3, ПК-4, ПК-5)</p>
Р8	<p><u>Организационно-управленческая</u></p> <p>Использовать на практике теоретические основы организации и планирования физических исследований, участвовать в подготовке и составлении научной документации по установленной форме, понимать и применять на практике методы управления в сфере природопользования</p>	<p>Требования ФГОСЗ+ (ПК-6, ПК-7, ПК-8)</p>
Р9	<p><u>Педагогически-просветительская</u></p> <p>Проектировать, организовывать, анализировать педагогическую деятельность, владеть последовательностью изложения материала с использованием междисциплинарных связей физики с другими дисциплинами, участвовать в информационно-образовательных мероприятиях по пропаганде и распространению научных знаний</p>	<p>Требования ФГОСЗ+ (ПК-9)</p>

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

Школа Инженерная школа ядерных технологий
 Направление подготовки (специальность) 03.03.02 «Физика»
 Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

УТВЕРЖДАЮ:
 Руководитель ООП
 _____ 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
150Б51	Чжан Цзыхань

Тема работы:

Особенности поведения водорода на поверхности циркония: расчеты из первых принципов	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	

Срок сдачи студентом выполненной работы:

--	--

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p>Исходные данные к работе</p> <p><i>(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.).</i></p>	<p style="text-align: center;">Атомарный и молекулярный водород на поверхности α-циркония.</p>
---	--

<p>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов <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>	<ul style="list-style-type: none"> – Обзор литературных источников; – Релаксация поверхности циркония; – Исследование взаимодействие водорода с цирконием; – Расчет из первых принципов профилей диффузионных барьеров для атома водорода на поверхности циркония; – Анализ полученных результатов; – Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение; – Социальная ответственность; – Заключение.
--	--

<p>Перечень графического материала <i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i></p>	<ul style="list-style-type: none"> – Типы адсорбционных участков на поверхности циркония; – Зависимость энергии системы от расстояния от молекулы водорода до поверхности циркония; – Профили диффузионных барьеров для атома водорода на поверхности циркония; – Распределение электронной плотности в поверхностных слоях циркония; – Зависимость энергии системы от положения атома водорода относительно поверхности циркония.
--	---

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы
(с указанием разделов)

Раздел	Консультант
Социальная ответственность	Скачкова Лариса Александровна
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Конотопский Владимир Юрьевич

Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:

1. Взаимодействие водорода с поверхностью металлов
2. Методика расчета
3. Результаты расчетов
4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение
5. Социальная ответственность

<p>Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику</p>	
--	--

Задание выдал руководитель / консультант (при наличии):

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Руководитель ОЭФ	Лидер А.М.	д.т.н., доцент		
Ассистент	Святкин Л. А.	к.ф.-м.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б51	Чжан Цзыхань		

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

Студенту:

Группа 150Б51	ФИО Чжан Цзыхань		
Школа	Инженерная школа ядерных технологий	Отделение (НОЦ)	Отделение экспериментальной 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>Принять по действующим ценам.</i>
2. <i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	_____
3. <i>Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	<i>Ставки НДС (20%) и социального калого (30%).</i>

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. <i>Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения</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>Выполнить.</i>

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. <i>Оценка конкурентоспособности технических решений</i>
2. <i>Альтернативы проведения НИ</i>
3. <i>График проведения и бюджет НИ</i>
4. <i>Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИ</i>

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Конотопский В. Ю.	к.э.н., доцент		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б51	Чжан Цзыхань		

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»**

Студенту:

Группа		ФИО	
150Б51		Чжан Цзыхань	
Школа	Инженерная школа ядерных технологий	Отделение (НОЦ)	Отделение экспериментальной физики
Уровень образования	Бакалавр	Направление/специальность	03.03.02 Физика

Тема ВКР:

Особенности поведения водорода на поверхности циркония: расчеты из первых принципов	
Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
<p>1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения</p>	<p>— Техническим средством является персональная электронно-вычислительная машина (ПЭВМ). Методы технологии компьютерного моделирования имеют высокую безопасность для исследователей, но при выполнении работ с помощью ПЭВМ также возможно взаимодействуют с некоторыми вредными факторами:</p> <ul style="list-style-type: none"> Микроклимат Электромагнитное излучение Недостаточная освещенность Недостаточное освещение Поражение электрическим током Возникновения пожара; Работа компьютера осуществляется за счет питания от сети переменного тока напряжением 220 В.
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
<p>1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:</p> <ul style="list-style-type: none"> — специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; — организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны. 	<ul style="list-style-type: none"> — СанПиН 2.2.4.548-96 Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений. — СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы. — ГОСТ 12.0.003-2015 Система стандартов безопасности труда. Опасные и вредные производственные факторы.

	<p>Классификация.</p> <ul style="list-style-type: none"> – СП 52.13330.2011 Естественное и искусственное освещение. Актуализированная редакция СНиП 23-05-95*. – ГОСТ 12.1.009-76 Система стандартов в безопасности труда (ССБТ). Электробезопасность. Термины и определения. – ГОСТ Р 22.0.02-2016 Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Термины и определения.
<p>2. Производственная безопасность:</p> <p>2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов</p> <p>2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия</p>	<p>2. Характеристика факторов изучаемой производственной среды, описывающих процесс взаимодействия человека с окружающей производственной средой:</p> <p>Микроклимат</p> <p>Электромагнитное излучение</p> <p>Недостаточная освещенность</p> <p>Недостаточное освещение</p> <p>Поражение электрическим током</p> <p>Возникновения пожара;</p>
<p>3. Экологическая безопасность:</p>	<p>3. Факторы рабочего места, влияющие на окружающую среду:</p> <p>Выброс в атмосферу рабочего газа;</p> <p>Выброс в атмосферу химических веществ;</p>
<p>4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:</p>	<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. указать наиболее типичную ЧС.

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель ООД ШБИП	Скачкова Лариса Александровна			

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б51	Чжан Цзыхань		



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

Уровень образования бакалавриатНаправление подготовки 03.03.02 «Физика»Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

Период выполнения _____

Форма представления работы:

бакалаврская работа

(бакалаврская работа, дипломный проект/работа, магистерская диссертация)

КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН выполнения выпускной квалификационной работы

Срок сдачи студентом выполненной работы:

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
01.03.2018	Аналитический обзор литературы.	15
09.04.2018	Исследование релаксации поверхности циркония.	10
03.09.2018	Расчет энергии адсорбции и диссоциации молекулы водорода на поверхности циркония.	15
25.02.2019	Расчет барьеров диффузии для атома водорода на поверхности циркония.	10
29.04.2019	Анализ результатов.	15
25.05.2019	Социальная ответственность.	15
25.05.2019	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение.	15
25.05.2019	Заключение.	5

Составил преподаватель:

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

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Руководитель ОЭФ	Лидер А.М.	д.т.н., доцент		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа содержит 60 страниц, 16 рисунков, 12 таблиц, 21 литературный источник, 0 приложений.

Ключевые слова: поверхность циркония, водород, адсорбция, диффузионные барьеры, расчеты из первых принципов.

Объектом исследования является процессы адсорбции и диссоциации молекулы водорода и диффузия атомов водорода на поверхности циркония.

Цель работы – изучение из первых принципов особенностей процессов адсорбции и диссоциации молекулы водорода и диффузии атомов водорода на поверхности (0001) циркония. Расчеты выполнялись в рамках теории функционала электронной плотности с использованием метода псевдопотенциала.

В процессе исследования проводились: релаксация поверхности (0001) циркония; расчеты энергии адсорбции и диссоциации молекулы водорода на поверхности циркония; вычисление профилей барьеров диффузии для атома водорода на поверхности циркония.

В результате исследования установлено, что на расстояниях менее 4,5 Å молекулам водорода энергетически наиболее выгодно ориентироваться перпендикулярно поверхности чистого циркония, а на расстояниях более 4,5 Å – параллельно поверхности. Рассчитаны барьеры диффузии для атомов водорода на поверхности α -циркония.

Основные конструктивные, технологические и технико-эксплуатационные характеристики: Поверхность α -циркония моделировалась с использованием в расчетах пленки из шести атомных слоев. Энергия активации диффузии атома водорода по поверхности циркония составляет $\sim 0,3$ эВ. Энергия активации диффузии атома водорода во второй слой атомов поверхности составляют $\sim 0,9$ эВ.

Степень внедрения: результаты работы представлены на международной научной конференции «Перспективы развития фундаментальных наук».

Область применения: результаты исследований могут быть использованы для разработки методов контроля диффузионных процессов в изделиях из циркониевых сплавов.

Экономическая эффективность/значимость работы заключается в изучении особенностей процесса проникновения водорода в цирконий на микроскопическом уровне, что может быть использовано в дальнейшем для предсказания скорости проникновения водорода в объем металла.

В будущем планируется проведение расчетов из первых принципов профилей диффузионных барьеров для атомов водорода на поверхности циркония в присутствии примеси ниобия.

Оглавление

Введение.....	15
Глава I Взаимодействие водорода с поверхностью металлов.....	17
1.1 Диффузия атомов примеси на поверхности металлов.....	17
1.2 Адсорбция молекулы водорода на поверхности металла.....	21
Глава II Методика расчета.....	26
2.1 Адиабатическое приближение.....	26
2.2 Одноэлектронное приближение.....	28
2.3 Теория функционала электронной плотности.....	28
2.4 Обменно-корреляционная энергия.....	29
2.5 Метод псевдопотенциала.....	30
2.6 Метод упругой ленты.....	30
Глава III Результаты расчетов.....	32
3.1 Детали расчета.....	32
3.2 Адсорбция и диссоциация молекулы водорода.....	33
3.3 Диффузия водорода.....	36
Глава IV Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение.....	41
4.1 Организация и планирование работ.....	41
4.1.1 Продолжительность этапов работ.....	42
4.2 Расчет сметы затрат на выполнение проекта.....	46
4.2.1 Расчет затрат на материалы.....	46
4.2.2 Расчет заработной платы.....	47
4.2.3 Расчет затрат на социальный налог.....	47
4.2.4 Расчет затрат на электроэнергию.....	48
4.2.5 Расчет амортизационных расходов.....	48
4.2.6 Расчет прочих расходов.....	49
4.2.7 Полная стоимость исследования.....	49
Вывод.....	50
Глава V Социальная ответственность.....	51

5.1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности.....	51
5.2. Производственная безопасность.....	52
5.2.1 Микроклимат.....	52
5.2.2 Электромагнитное излучение.....	53
5.2.3 Недостаточная освещенность.....	54
5.2.4 Статическое электричество.....	55
5.2.5 Возникновения пожара.....	55
5.3 Экологическая безопасность.....	56
5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....	56
Заключение.....	58
Список литературы.....	59

Введение

Сплавы на основе циркония широко используются в промышленности. Цирконий имеет две кристаллические формы: α -Zr и β -Zr. Из-за низких значений сечения захвата нейтронов, сплавы на основе циркония широко используются в качестве конструкционного материала активной зоны реактора [1]. Когда оболочка из циркониевого сплава работает при высокой температуре, водород, образующийся в результате реакции ядерного реактора, образуется в виде гидрида. Осаждение гидрида разрушает целостность зерен α -Zr, вызывает микротрещины или увеличивает их объем, ухудшает рабочие характеристики и, в частности, приводит к снижению вязкости и прочности материала, что делает материал хрупким. Водородное охрупчивание циркониевых сплавов являются скрытой опасностью для безопасности компонентов топлива ядерного реактора. Поэтому крайне желательно провести тщательное исследование процессов адсорбции и диссоциации молекулы H_2 на поверхности Zr и выявить механизмы гидрирования металла на начальном этапе.

В последние несколько лет, в связи с совершенствованием теории и развитием компьютеров расчеты из первых принципов стали одним из важных методов исследования в области физики твердого тела и квантовой химии. Благодаря компьютерному моделированию возможно создание теоретических моделей и выполнение соответствующих расчетов для разработки новых материалов и прогнозирования их структуры и производительности без использования экспериментальных данных.

Целью настоящей работы является изучение из первых принципов особенностей процессов адсорбции и диссоциации молекулы водорода и диффузии атомов водорода на поверхности (0001) циркония. Расчеты выполнялись в рамках функционала электронной плотности методом псевдопотенциала.

Для достижения этой цели были поставлены следующие задачи:

1. Ознакомиться с процессами, происходящими на поверхности металла при адсорбции на нем водорода.
2. Изучить метод псевдопотенциала и особенности его применения.
3. Провести релаксацию поверхности (0001) циркония.
4. Рассчитать энергии адсорбции и диссоциации молекулы водорода на поверхности циркония.
5. Вычислить профили барьеров диффузии для атома водорода на поверхности циркония.
6. Выявить особенности поведения водорода на поверхности циркония

Глава I Взаимодействие водорода с поверхностью металлов

1.1 Диффузия атомов примеси на поверхности металлов

Поверхностная диффузия – это процесс, включающий движение адатомов, молекул и атомных кластеров на поверхностях твердого материала. Этот процесс обычно можно рассматривать как перепрыгивание частицы между соседними участками адсорбции на поверхности. Как и при объемной диффузии, это движение обычно является термически стимулируемым процессом, скорость которого увеличивается с ростом температуры. Многие системы демонстрируют диффузионное поведение, которое отличается от обычной модели прыжков ближайшего соседа. Туннельная диффузия является особенно интересным примером нетрадиционного механизма, в котором, как было показано, водород диффундирует на чистые металлические поверхности посредством эффекта квантового туннелирования.

В атомном масштабе поверхность представляет собой периодическую матрицу поглощения, соответствующую расположению с минимальной энергией [2]. Атомы примеси могут перескакивать из одного адсорбционного положения в другое. Движение атома примеси по поверхности может быть представлено как процесс случайных перескоков (рисунок 1), для которого среднеквадратичное смещение за время t равно

$$\langle \Delta r^2 \rangle = \gamma a^2 t \quad (1.1)$$

где a – длина перескока (то есть расстояние между адсорбционными местами), а γ – частота скачков [2].

Согласно разделу термодинамики частота скачков может быть представлена в виде [2]:

$$\gamma = \gamma_0 \exp(-E_{diff} / k_B T) \quad (1.2)$$

где k_B – постоянная Больцмана, а T – температура, E_{diff} – энергия активации диффузии, γ_0 – частота колебаний атома в потенциальной яме.

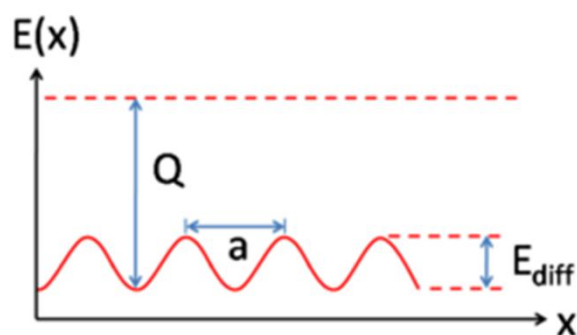


Рисунок 1 – Схематическая диаграмма потенциальной энергии при движении атома примеси вдоль поверхности. x – смещение; $E(x)$ – энергия; Q – теплота адсорбции или энергия связи; a – расстояние между соседними междоузлиями; E_{diff} – высота диффузионного барьера

Ориентационная анизотропия поверхности материала приводит к различиям, как в скоростях диффузии, так и в ее механизмах. Для конкретного кристаллического материала каждая плоскость индекса Миллера может отображать уникальные диффузионные явления. Близко упакованные поверхности, такие как ГЦК (111), имеют тенденцию иметь более высокие скорости диффузии, чем соответственно более «открытые» поверхности того же материала, такие, например, как ГЦК (100) [3].

Направленная анизотропия приводит к разнице в механизме диффузии или скорости в конкретном направлении на данной кристаллографической плоскости. Эти различия могут быть результатом либо анизотропии в поверхностной решетке (например, прямоугольной решетки), либо наличия ступеней на поверхности. Одним из наиболее ярких примеров направленной анизотропии является диффузия адатомов на канализированных поверхностях, таких как ГЦК (110), где диффузия по каналу намного быстрее, чем диффузия перпендикулярно каналу.

Диффузия адатомов может происходить по разным механизмам. Способ, которым они распространяются, важен, поскольку он определяет кинетику движения, температурную зависимость и общую подвижность поверхностных частиц. Ниже приводится краткое изложение наиболее важных из этих механизмов:

1. Прыжки или скачки являются концептуально самым основным механизмом распространения адатомов. В этой модели адатомы находятся в междоузлиях на поверхности металла. Движение происходит за счет последовательных прыжков в соседние узлы, количество которых зависит от кристаллической структуры поверхности. Исследования показали наличие метастабильных переходных состояний между междоузлиями, в которых адатомы могут временно находиться.

2. Атомный обмен заключается в обмене местоположениями между адатомом и соседним атомом на поверхности. Как показано на рисунке 4, после атомного обмена адатом занял место поверхностного атома, а поверхностный атом сместился и теперь стал адатомом. Этот процесс может происходить как при гетеродиффузии, так и при самодиффузии. С теоретической точки зрения до сих пор неясно, почему механизм атомного обмена в одних системах преобладает сильнее, чем в других. Современная теория указывает на многочисленные возможности, включая растягивающие поверхностные напряжения, поверхностную релаксацию вокруг адатома и повышенную стабильность промежуточного соединения из-за того факта, что оба вовлеченных атома поддерживают высокие уровни координации в течение всего процесса [4].

3. Туннельная диффузия является физическим проявлением эффекта квантового туннелирования, включающего туннелирование частиц через диффузионные барьеры. Это может происходить в случае низкой массы диффундирующих частиц и низких диффузионных барьеров и наблюдалось в случае диффузии водорода на поверхностях вольфрама и меди. Явление уникально тем, что в режиме, где доминирует туннельный механизм, скорость диффузии практически не зависит от температуры [5].

4. Диффузия вакансий может происходить при высоких концентрациях адатомов. При низких концентрациях адатомов вероятность вакансионного механизма диффузии очень мала из-за высоких скоростей прыжковых механизмов диффузии [6].

Недавние теоретические работы, а также экспериментальные работы, выполненные с конца 1970-х годов, выявили удивительное разнообразие явлений поверхностной диффузии как в отношении кинетики, так и в отношении механизмов. Ниже приводится краткое изложение некоторых наиболее заметных явлений:

Длинные диффузионные прыжки заключаются в смещении атомов из одного междоузлия в другое, но не ближайшее. Они могут быть двойными, тройными и более длинными в том же направлении, что и прыжки в ближайшее междоузлие, или они могут быть в совершенно разных направлениях (атомы (1) и (6) на рисунке 2). Теоретически предсказано, что такие прыжки существуют во многих различных системах, и было показано в эксперименте, что они имеют место при температурах до 0,1 температуры плавления металлов. В некоторых случаях данные указывают на длинные прыжки, доминирующие в диффузионном процессе над одиночными прыжками при повышенных температурах. Явления переменной длины прыжка выражаются в различных характерных распределениях атомного смещения во времени.

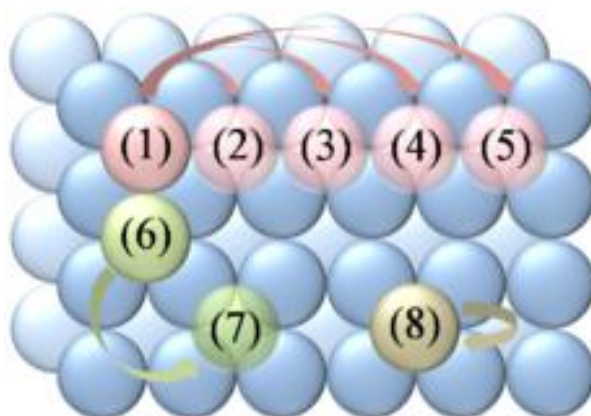


Рисунок 2 – Диаграмма различных диффузионных скачков, которые могут иметь место на плоскости (100) ГЦК решетки.

Скачки отскока были показаны экспериментом и моделированием в определенных системах (атом (8) на рисунке 2). Поскольку движение не приводит к чистому смещению задействованного атома,

экспериментальные доказательства существования такого типа скачков получены из статистической интерпретации распределений атомов [7].

Межканальная диффузия может иметь место в случае каналированных поверхностей. Обычно диффузия в канале доминирует из-за более низкого энергетического барьера для диффузионного процесса [8].

Дальний атомный обмен – это процесс, включающий вставку адатома в поверхность, как в обычном механизме атомного обмена, но вместо ближайшего атома, это адатом заменяет атом на некотором расстоянии от себя. Несмотря на этот дальний атомный обмен, а также целый ряд других экзотических механизмов диффузии, ожидается, что они внесут существенный вклад только при температурах, которые в настоящее время слишком высоки для непосредственного наблюдения [9].

Поверхностная диффузия может быть изучена различными методами, включая прямые и косвенные наблюдения. Двумя экспериментальными методами, которые оказались очень полезными в этой области исследований, являются полевая ионная микроскопия и сканирующая туннельная микроскопия. Визуализируя смещение атомов или кластеров с течением времени, можно извлечь полезную информацию, касающуюся того, каким образом происходит диффузия адатомов. Для изучения поверхностной диффузии в атомистическом масштабе, к сожалению, необходимо проводить исследования на строго чистых поверхностях и в условиях сверхвысокого вакуума или в присутствии небольшого количества инертных газов He или Ne в качестве визуализирующих в экспериментах по полевой ионной микроскопии.

1.2 Адсорбция молекулы водорода на поверхности металла

На поверхности Zr (0001) имеется четыре типа междоузлий с высокой вероятностью адсорбции молекул водорода [10]: верхнее (top), мостовое (bri), ГПУ (hcp) и ГЦК (fcc) пустоты, которые изображены на рисунке 3. В работе [10] проведено исследование энергетики взаимодействия молекулы H₂ с

поверхностью циркония в зависимости от ориентации молекулы вдоль направлений X $[1\bar{1}20]$, Y $[\bar{1}100]$ и Z $[0001]$.

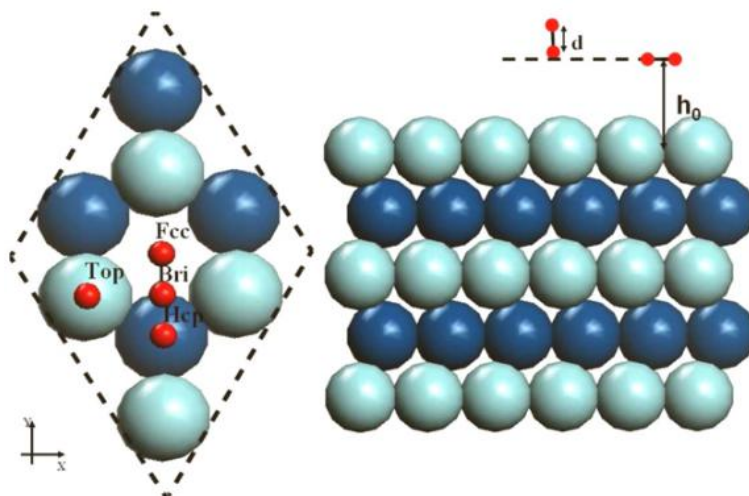


Рисунок 3 – Поверхностная ячейка Zr (0001) и четыре поверхности адсорбции на поверхности.

В результате было рассмотрено 12 различных каналов адсорбции молекулы H_2 на поверхности Zr (0001). Используя обозначения на рисунке 3, изученные ориентации молекулы H_2 были обозначены как *top-x, y, z*; *bri-x, y, z*; *hcp-x, y, z*; и *fcc-x, y, z*. Во всех исходных конфигурациях для исследования адсорбции молекулы H_2 устанавливались на высоте $h = 4 \text{ \AA}$. Энергия адсорбции рассчитывалась как

$$E_{ad} = -\frac{1}{N_H} \left[E_{H_2/Zr(0001)} - E_{Zr(0001)} - N_H \frac{1}{2} E_{H_2} \right] \quad (1.3)$$

где N_H – общее количество атомов H, представленных в адсорбционной системе, $E_{H_2/Zr(0001)}$, $E_{Zr(0001)}$ и E_{H_2} – полные энергии оптимизированного слоя Zr (0001), содержащего водород, слоя чистого Zr(0001) и изолированной молекулы H_2 , соответственно. Согласно этому определению положительное значение E_{ad} указывает на то, что адсорбция является экзотермической (стабильной) по отношению к одиночной изолированной молекуле H_2 , а отрицательное значение указывает на эндотермическую (нестабильную) реакцию. Полученные после оптимизации геометрии для вышеупомянутых междоузлий энергия молекулярной адсорбции, высота адсорбции и длина

связи Н-Н приведены в таблице 1. Из таблицы ясно видно, что когда молекула Н₂ установлена на высоте 4 Å, энергия адсорбции относительно низкая, что свидетельствует о очень слабом взаимодействии Н₂ с подложкой Zr. Отметим, что вертикальная конфигурация адсорбционного состояния более устойчива, чем параллельная, в соответствующем междоузлии. Кроме того, еще одна дополнительная серия расчетов была проведена при более низкой начальной высоте адсорбции, результаты также приведены в таблице 1.1. Отрицательная энергия адсорбции молекулы Н₂ свидетельствует о неустойчивости ее положения в междоузлиях *bri*, *hcp*, *fcc*, как при параллельном, так и при вертикальном положении молекулы Н₂ относительно поверхности Zr.

Таблица 1.1 — Вычисленная энергия адсорбции на атом (E_{ad}), высота адсорбции (h) и длина связи Н-Н (d) вдоль разных каналов от начальной высоты как 4 Å, так и 2 Å, соответственно [10].

Типы адсорбционных участков	E_{ad} , эВ		h , Å		d , Å	
	$h_0 = 4\text{Å}$	$h_0 = 2\text{Å}$	$h_0 = 4\text{Å}$	$h_0 = 2\text{Å}$	$h_0 = 4\text{Å}$	$h_0 = 2\text{Å}$
<i>top-x</i>	3,181	57,922	3,995	2,116	0,752	0,821
<i>top-y</i>	3,208	59,348	3,994	2,127	0,752	0,821
<i>top-z</i>	5,513	-4,949	3,999	3,120	0,752	0,754
<i>bri-x</i>	-0,911	-88,530	4,000	2,473	0,751	0,763
<i>bri-y</i>	-0,961	-87,911	3,999	2,200	0,752	0,808
<i>bri-z</i>	6,380	-41,120	3,998	2,537	0,752	0,764
<i>hcp-x</i>	-0,388	-75,732	4,000	2,306	0,751	0,781
<i>hcp-y</i>	-0,379	-63,142	4,000	2,224	0,751	0,788
<i>hcp-z</i>	6,420	-65,530	3,998	2,498	0,752	0,769
<i>fcc-x</i>	-0,753	-121,005	4,000	2,244	0,751	0,778
<i>fcc-y</i>	-0,736	-109,654	4,000	2,228	0,751	0,785
<i>fcc-z</i>	6,532	-62,181	3,998	3,250	0,752	0,756

После расчета равновесных адсорбционных свойств была проведена серия расчетов двумерных (2D) поверхностей энергии взаимодействия молекулы H_2 с релаксированной поверхностью (0001) Zr (рисунок 4). Расчет поверхности энергии взаимодействия интерполируется на 121 точку с разной длиной связи и высотой положения молекулы H_2 на каждом участке поверхности.

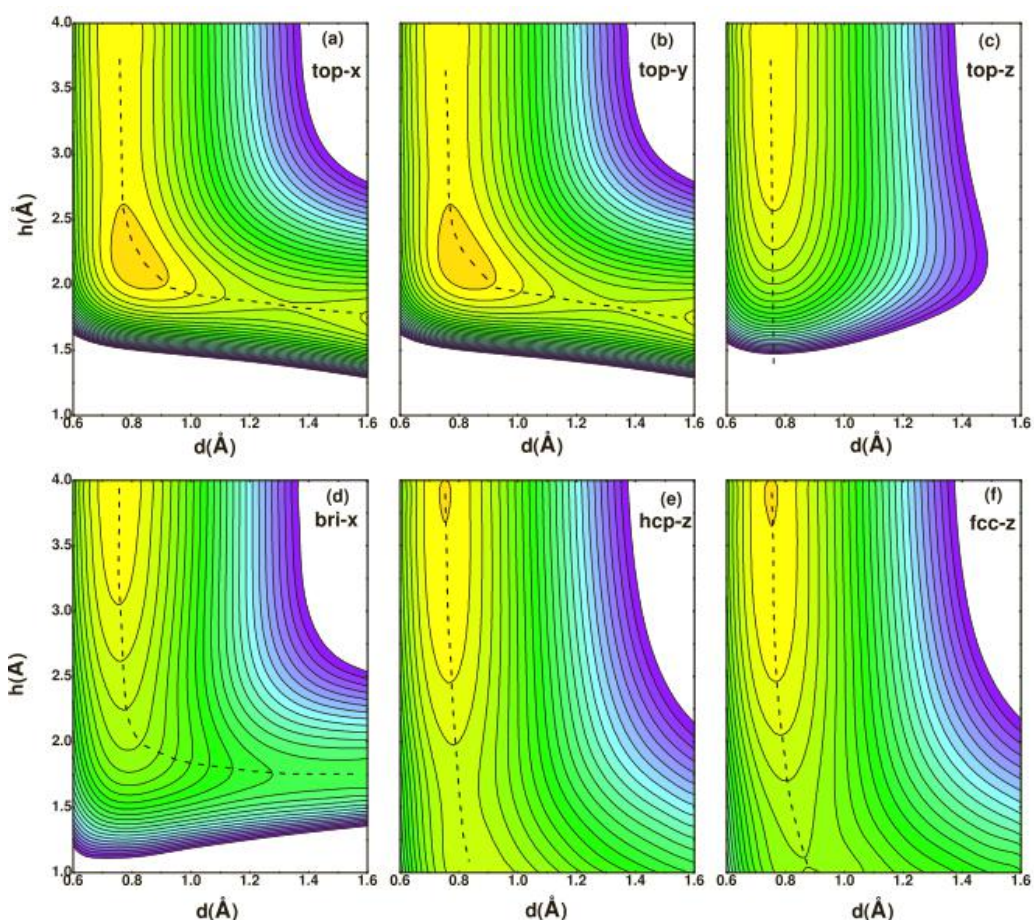


Рисунок 4 – 2D поверхность потенциальной энергии адсорбции молекулы H_2 вдоль (a) *top-x*, (b) *top-y*, (c) *top-z*, (d) *bri-x*, (e) *hcp-z* и (f) *fcc-z*. Здесь пунктирными линиями обозначены пути минимума энергии, а энергетические интервалы между изолиниями – 0,10 эВ [10].

Установлено, что адсорбция молекулы H_2 на поверхности происходит только тогда, когда она параллельна поверхности металла (ориентации x и y) в междоузлии *top*. Для остальных рассмотренных ориентаций молекулы водорода наблюдается значительный энергетических барьер, препятствующий адсорбции водорода на поверхность циркония. В

междуузлии *top* никаких явных энергетических барьеров для адсорбции молекулы не возникает. Рассчитанные энергии адсорбции составляют 57,9 мэВ и 59,3 мэВ для состояний *top-x* и *top-y*, соответственно, и можно видеть, что эти состояния почти вырождены.

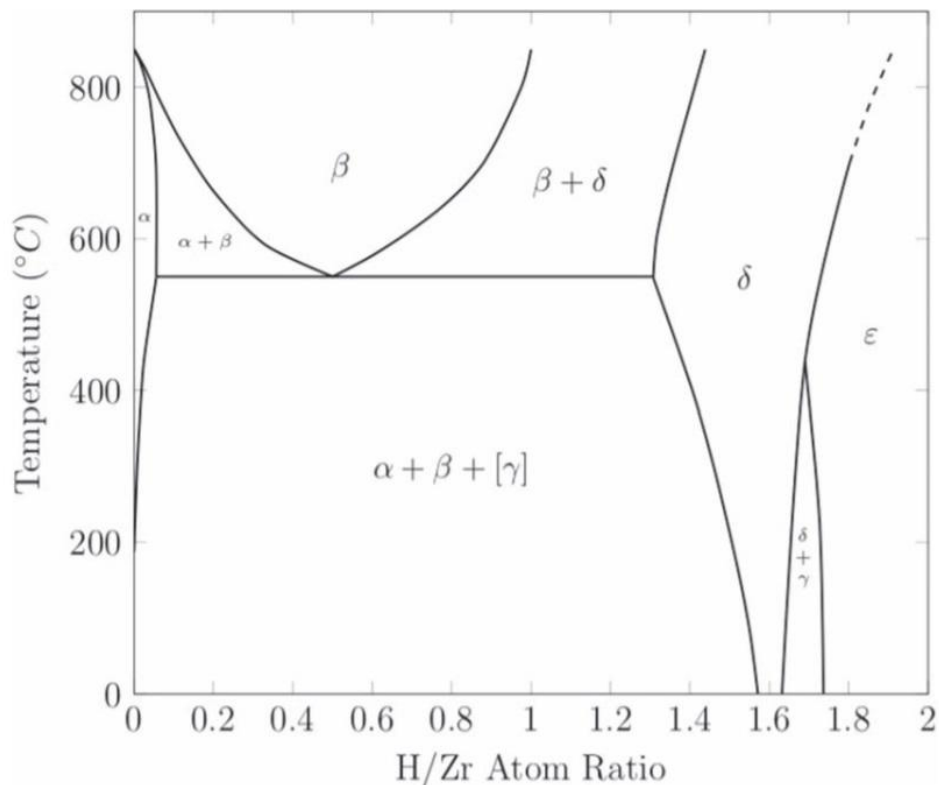


Рисунок 5 – Фазовая диаграмма системы цирконий–водород

Поскольку интерес представляет исследование процессов адсорбции водорода на поверхности циркония при температурах работы водо-водяных ядерных реакторов, то из фазовой диаграммы известно, что кристаллическая структура циркония является гексагональной с плотно упаковкой (рисунок 5).

Глава II Методика расчета

Одним из эффективных методов получения приближенного решения уравнения Шредингера для системы является теория функционала электронной плотности. Теория функционала электронной плотности – метод квантовой механики для изучения электронной структуры многоэлектронных систем. Эта теория имеет широкий спектр применений в области физики и химии. В частности, изучение природы молекул и конденсированных состояний является одним из наиболее часто используемых методов в области физики конденсированных сред и вычислительной химии.

2.1 Адиабатическое приближение

Уравнение Шредингера, описывающее закон движения микроскопических многочастичных систем (включая электроны и ядра) [14]:

$$\hat{H}_t \Psi (\{ \vec{R} \}, \{ \vec{r} \}) = E \Psi (\{ \vec{R} \}, \{ \vec{r} \}) \quad (2.1)$$

где H_t – гамильтониан, Ψ – волновая функция, E – полная энергия, $\{r\}$ – совокупность координат электронов, $\{R\}$ – совокупность координат ядер.

Для данной системы ее полный гамильтониан записывается как:

$$\hat{H}_t = \hat{T}_e + \hat{T}_L + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{eL} + \hat{V}_{LL} \quad (2.2)$$

$$\hat{V}_{ee} = \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad \hat{T}_e = -\sum_i \frac{h^2}{2m} \nabla_i^2 \quad \hat{T}_L = -\sum_I \frac{h^2}{2M} \nabla_I^2$$
$$\hat{V}_{LL} = \sum_{I \neq J} \frac{Z_I Z_J e^2}{|\vec{R}_I - \vec{R}_J|} \quad \hat{V}_{eL} = \sum_{i,I} \frac{Z_I e^2}{|\vec{R}_I - \vec{r}_i|} \quad (2.3)$$

где m – масса электрона, M – масса ядра, а R_i и r_j обозначают координаты i -го ядра и j -го электрона, соответственно. Первое слагаемое представляет собой кинетическую энергию электронов \hat{T}_e , второе представляет собой потенциал кулоновского взаимодействия \hat{V}_{ee} между электронами, третий представляет собой атомную кинетическую энергию \hat{T}_L , четвертый представляет собой

потенциал кулоновского взаимодействия \hat{V}_{LL} между ядрами, а пятый представляет собой кулоновское взаимодействие \hat{V}_{eL} между электронами и ядрами.

Хотя точный вид полного гамильтониана системы уже хорошо понят, связь электронных степеней свободы с атомными степенями свободы не позволяет точно решить уравнения. Поскольку фактическая масса иона примерно в тысячу раз больше массы электрона, фактическая скорость и амплитуда иона намного меньше скорости и величины движения электрона. То есть можно рассматривать движение ядра отдельно от движения электронов. При рассмотрении фактического движения ионов электроны считаются движущимися очень быстро и не отстают от мгновенных изменений положения ионов. Т.е., можно считать, что ион находится в неподвижном положении решетки, а электроны движутся в поле ионов. Это приближение называется приближением Борна-Оппенгеймера [11], также известное как «адиабатическое» приближение.

Ключевым моментом приближения Борна-Оппенгеймера является аппроксимация произведения ионных и электронных волновых функций:

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

Функция χ представляет собой волновую функцию иона, а функция ψ – волновую функцию электрона, при этом:

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

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

Координаты ядра не меняются при расчете электронной подсистемы. При расчете колебаний атомов воздействие электронов учитывается в выражении для потенциальной энергии.

2.2 Одноэлектронное приближение

Хартри выдвинул гипотезу о том, что действие со стороны всех электронов на какой-либо электрон может быть заменено одночастичным средним потенциалом, близким к реальному физическому состоянию, так что каждый электрон в системе будет находиться в эквивалентном потенциальном поле. Таким образом, многоэлектронная волновая функция может быть выражена как простое произведение нескольких независимых волновых функций [12].

$$\psi_n(\{\vec{R}\}, \{\vec{r}\}) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(\{\vec{R}\}, \vec{r}_1) & \varphi_2(\{\vec{R}\}, \vec{r}_1) & \dots & \varphi_N(\{\vec{R}\}, \vec{r}_1) \\ \varphi_1(\{\vec{R}\}, \vec{r}_2) & \varphi_2(\{\vec{R}\}, \vec{r}_2) & \dots & \varphi_N(\{\vec{R}\}, \vec{r}_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_1(\{\vec{R}\}, \vec{r}_N) & \varphi_2(\{\vec{R}\}, \vec{r}_N) & \dots & \varphi_N(\{\vec{R}\}, \vec{r}_N) \end{vmatrix} \quad (2.7)$$

$$\Psi(\{\vec{R}\}, \{\vec{r}\}) = \chi_{n,v}(\{\vec{R}\}) \psi_n(\{\vec{R}\}, \{\vec{r}\}) \quad (2.8)$$

Здесь введено N волновых функций, ортогональных друг другу, чтобы получить уравнение одночастичного приближения Шредингера [13]:

$$\hat{H}_{HF} \varphi_i(\vec{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{V}_{ext}(\{\vec{R}\}, \vec{r}) + \hat{W}_H(\vec{r}) - \hat{W}_x(\vec{r}) \right) \varphi_i(\vec{r}) = E_i \varphi_i(\vec{r}) \quad (2.9)$$

$$\hat{W}_H(\vec{r}) = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \int \frac{e^2 \rho_i^{HF}(\vec{r}, \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 \vec{r}' \quad (2.10)$$

$$\rho_i^{HF}(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_{j=1}^N \frac{\varphi_j^*(\vec{r}') \cdot \varphi_i(\vec{r}') \cdot \varphi_i^*(\vec{r}) \cdot \varphi_j(\vec{r})}{\varphi_i^*(\vec{r}) \cdot \varphi_i(\vec{r})} \delta_{S_i, S_j}, \quad \delta_{S_i, S_j} = \begin{cases} 1, \text{ при } S_i = S_j \\ 0, \text{ при } S_i \neq S_j \end{cases} \quad (2.11)$$

Таким образом, уравнение Шредингера сводится к одноэлектронному уравнению, но поскольку эти уравнения нелинейны, их можно решить только итерационным методом.

2.3 Теория функционала электронной плотности

Классические методы теории электронной структуры, особенно метод Хартри-Фока, основаны на сложных многоэлектронных волновых функциях. Основной целью теории функционала электронной плотности является

использование электронной плотности вместо волновой функции в качестве основного объекта исследований. Поскольку многоэлектронная волновая функция имеет $3N$ переменных (N – число электронов, каждый электрон содержит три пространственные переменные, независимо от спина), а электронная плотность – это только функция трех переменных.

После того, как была предложена теорема Хоэнберга и Кона, появилась прочная теоретическая основа для описания многоэлектронных систем:

1. Независимо от спина, энергия основного состояния фермиона является единственной функцией $\rho(r)$, где $\rho(r)$ – функция плотности числа частиц [14].

2. При условии, что общее число частиц постоянное, функционал энергии $E[\rho]$ принимает минимальное значение при $\rho(r)$, соответствующем энергии основного состояния.

Согласно теореме Хоэнберга и Кона:

$$\hat{H}_{KSH}\psi_n(\vec{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}_{\text{eff}}(\{\vec{R}\}, \vec{r}) \right) \psi_n(\vec{r}) = \varepsilon_n \psi_n(\vec{r}) \quad (2.12)$$

$$\hat{V}_{\text{eff}}(\{\vec{R}\}, \vec{r}) = \hat{V}_{\text{ext}}(\{\vec{R}\}, \vec{r}) + \hat{V}_H(\vec{r}) + \hat{V}_{xc}(\vec{r}) \quad (2.13)$$

В уравнении Кона-Шема третье слагаемое – обменно-корреляционная энергия, которая является единственной переменной в теории функционала плотности, которая не может быть точно определена.

2.4 Обменно-корреляционная энергия

Чтобы решить уравнение Кона-Шэма, мы должны найти подходящую обменно-корреляционную энергию. В настоящее время более широко используемая обменная корреляция может иметь следующие две формы:

1) Приближение локальной плотности (ПЛП) [15]

$$E_{xc} = \int \rho(\mathbf{r}) \varepsilon_{xc}[\rho(\mathbf{r})] d\mathbf{r} \quad (2.14)$$

2) Обобщенно градиентное приближение (ОГП) [16]

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

Для систем с неравномерно распределенной плотностью заряда необходимо учитывать влияние градиента плотности на энергию обменной корреляции.

2.5 Метод псевдопотенциала

Существует две основные причины использования псевдопотенциала [17]:

1. Мы интересуемся валентными электронами.
2. Электроны, которые находятся в остове атома, обладают истинными и сложными волновыми функциями. Нужно много сложных основных функций для разложения этой волновой функции в базис, поэтому расчет плотности электронов истинными потенциалами очень трудоемкий.

Из-за ограниченной способности в расчетах, для описания волновой функции электронов используют метод псевдопотенциала. Волновая псевдо-функция и истинная волновая функция обладают одинаковыми значениями вне остова атомов (электроны в этой области определяют большинство свойств материалов), а в остове атомоподобная волновая функция гладкая и у неё мало нулевых точек [18].

2.6 Метод упругой ленты

Метод упругой ленты (Nudged Elastic Band, NEB) – это метод поиска минимального энергетического пути. В методе используется набор изображений вдоль исходного пути между двумя локальными минимумами [19].

Вычислительные методы расчета минимальных энергетических путей широко используются в областях теоретической химии, физики и материаловедения. Метод упругой ленты позволяет описывать механизмы реакции, поскольку знание энергетического барьера вдоль пути реакции может быть использован для расчета скорости реакции [20].

Метод динамических рядов используется для нахождения минимального энергетического пути между парой устойчивых состояний. В контексте

скоростей реакции эта пара имеет начальное и конечное состояние, оба из которых являются локальными минимумами на поверхности потенциальной энергии. Минимальный энергетический путь обладает тем свойством, что любая точка этого пути находится на минимуме энергии во всех направлениях, перпендикулярных траектории этого пути. Этот путь проходит, по крайней мере, через одну седловую точку.

Практически, метод динамических рядов очень похож на метод упругой ленты, поскольку путь представлен набором изображений, связанных линейными сегментами. Восходящее изображение также можно использовать для точного определения седловой точки. Единственное отличие между методом динамических рядов и методом упругой ленты заключается в том, что между изображениями в методе упругой ленты вдоль пути реакции вводятся упругие силы, а оптимизация этих сил обеспечивает равное расстояние между изображениями, сводя к минимуму эти силы. В методе динамических рядов нет упругих сил, вместо этого изображения сохраняются путем разнесения их вдоль пути реакции после каждой итерации. Несмотря на эти различные подходы к распределению изображений вдоль пути, существенной разницы в результатах поиска конечного пути или скорости в этих методах нет.

Глава III Результаты расчетов

Изучение адсорбции и диссоциации двухатомной молекулы H_2 на металлических поверхностях всегда представлял большой интерес и научное значение. Чтобы понять многие явления, такие как гетерогенный катализ и химическая коррозия, необходимо как экспериментальное, так и теоретическое исследование взаимодействия атомарного и молекулярного водорода с металлическими поверхностями. Поэтому для выявления механизма насыщения циркония водородом в данной работе проведено исследование поведения (адсорбции и диссоциации) молекулы H_2 на поверхности (0001) Zr.

3.1 Детали расчета

Самосогласование полной энергии кристалла выполнялось в рамках теории функционала электронной плотности (ТФП) методом оптимизированного сохраняющего норму псевдопотенциала Вандербильта, реализованным в пакете программ ABINIT [21]. Энергия обрезания при разложении по базису плоских волн составляла 30 Хартри (810 эВ). Обменно-корреляционные эффекты рассматривались с использованием обобщенного градиентного приближения в форме Пердью–Бурке–Эрнцерхофа. В работе самосогласование электронной плотности считалось достигнутым, когда сходимость полной энергии кристалла составляла $\sim 0,03$ мэВ.

Поверхность (0001) циркония моделировалась повторением пленок, состоящих из шести атомных слоев, разделенных вакуумной областью толщиной 26 Å, которая проверена на достаточную сходимость. Водород адсорбируется с одной стороны пленки. Концентрация водорода на поверхности металла составляла 1 молекула (или 1 атом в случае диффузии) на 4 атома Zr (использовалась суперячейка пленки размером $2 \times 2 \times 3$ элементарных ячеек ГПУ Zr). Положения атомов Zr в верхних трех слоях были отрелаксированы (силы, действующие на атомы Zr в этих слоях

составляли менее 3 мэВ/Å). Метод динамических рядов в работе использовался для того, чтобы найти минимальный энергетический путь диссоциации молекулы H_2 . Метод упругой ленты применялся для нахождения профилей диффузионных барьеров для атома водорода на поверхности циркония.

3.2 Адсорбция и диссоциация молекулы водорода

Для изучения процесса адсорбции молекулы водорода в соответствии с симметрией решетки рассмотрено 4 типа точек высокой симметрии на поверхности циркония (0001) (рисунок 6) [10]. Рассчитаны и проанализированы различия в энергиях взаимодействия поверхности циркония с молекулой водорода в процессе ее адсорбции.

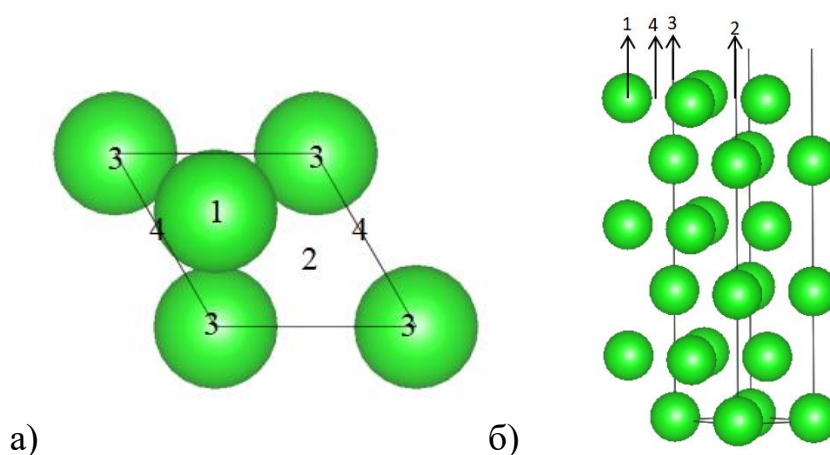


Рисунок 6 – а) Четыре типа адсорбционных участков (вид сверху). 1 – Над атомом Zr в верхнем слое (междуузлие Т); 2 – ГЦК пустота; 3 – ГПУ пустота; 4 – Между 2-мя соседними атомами Zr в верхнем слое (междуузлие М).

б) Расчетная ячейка $1 \times 1 \times 3$. Зеленые шары – атомы Zr.

Чтобы изучить влияние положения молекулярного водорода на энергию системы, для каждого типа междуузлий мы рассчитали энергию системы Zr– H_2 при ориентации молекулы водорода как перпендикулярно, так и параллельно поверхности циркония (рисунок 7). Далее для обозначения рассмотренных состояний использованы обозначения: \parallel – при ориентации молекулы водорода параллельно поверхности; \perp – при ориентации молекулы водорода перпендикулярно поверхности.

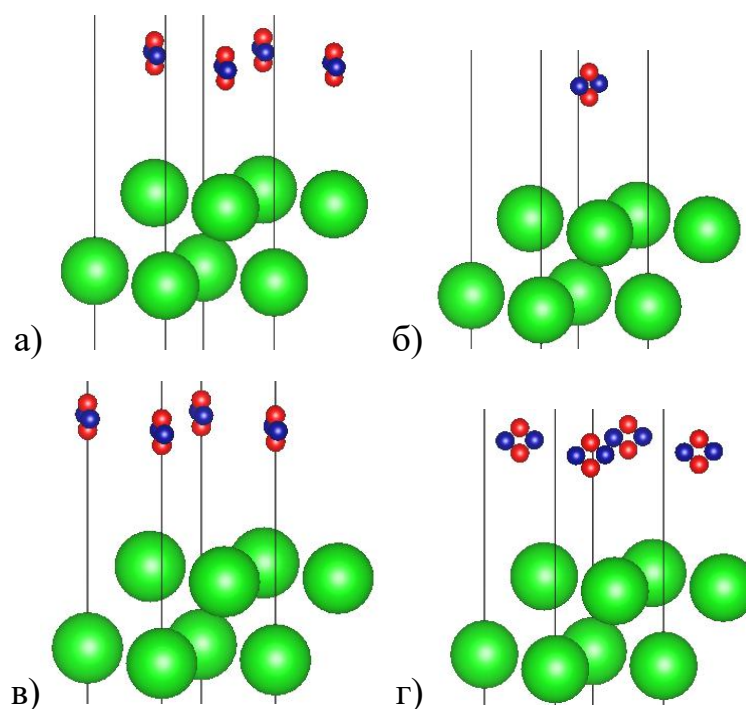


Рисунок 7 – Верхние два слоя поверхности Zr (0001) и рассмотренные в работе состояния молекул водорода вблизи него: а) молекула находится над междуузлем Т; б) молекула находится над ГЦК пустотой; в) молекула находится над ГПУ пустотой; г) молекула находится над междуузлем М. Зеленые шары – атомы Zr, красные и синие шары представляют собой атомы водорода в разных состояниях.

1. В работе рассчитана энергия системы поверхность– H_2 в зависимости от расстояния между центром молекулы водорода и поверхностью циркония (рисунок 8). Из анализа результатов расчета следует, что, если молекулы водорода имеют одинаковую ориентацию относительно поверхности циркония, то зависимости полной энергии системы поверхность– H_2 от расстояния между центром молекулы водорода и поверхностью циркония имеют одинаковую тенденцию. Из рисунка 8 видно, что на расстояниях менее $4,5 \text{ \AA}$ полная энергия системы Zr– H_2 при любом положении молекулы водорода, ориентированной перпендикулярно поверхности циркония, меньше чем у молекул, ориентированных параллельно поверхности. На расстояниях более $4,5 \text{ \AA}$ энергетически наиболее выгодной является ориентация молекулы водорода параллельно поверхности циркония. При

приближении молекулы H_2 параллельно поверхности металла на расстояние меньше, чем $4,5 \text{ \AA}$ энергия системы поверхность– H_2 резко возрастает.

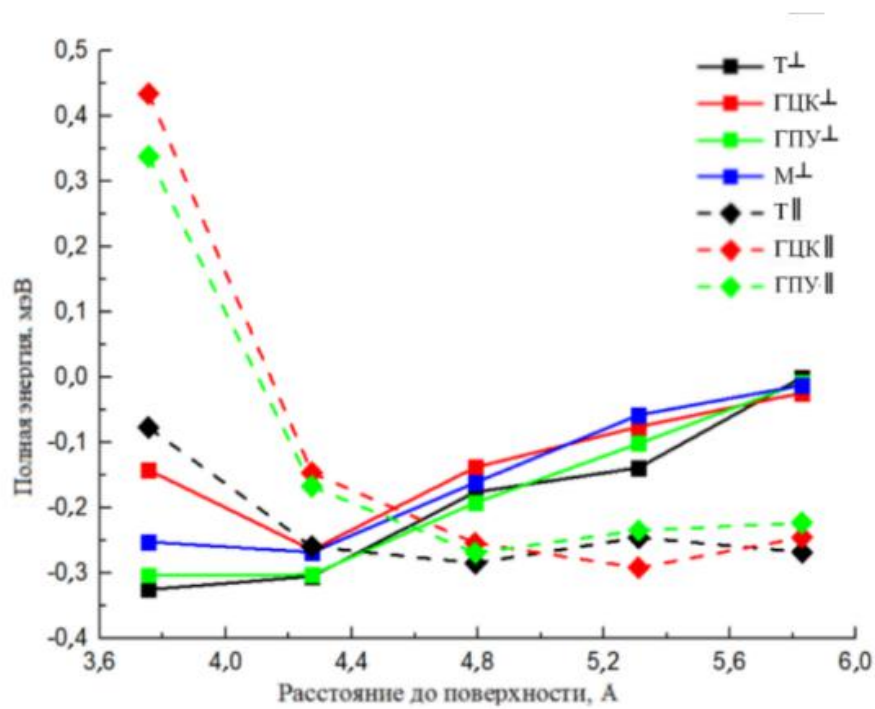


Рисунок 8 – Зависимость полной энергии системы поверхность– H_2 от расстояния между центром молекулы водорода и поверхностью циркония.

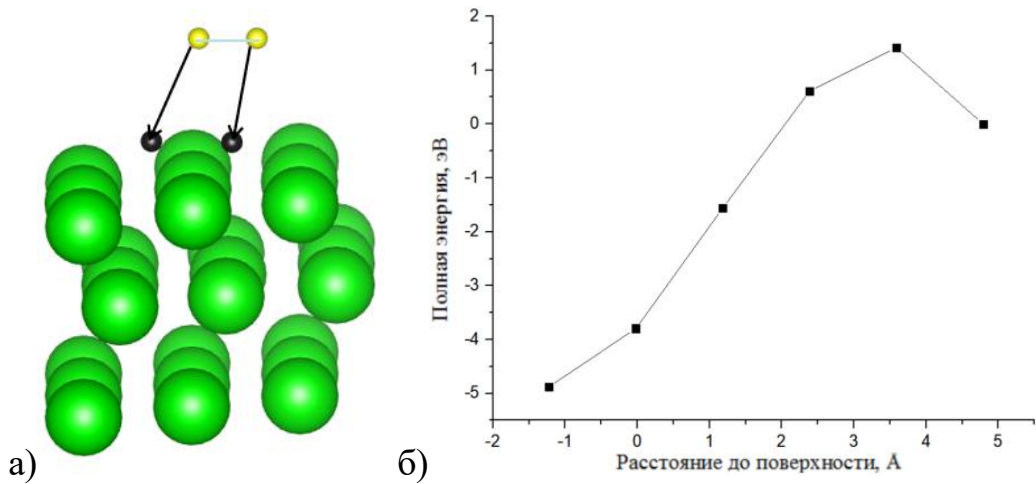


Рисунок 9 – а) Рассмотренный путь диссоциации молекулы водорода на поверхности циркония б) Зависимость полной энергии системы поверхность– H_2 от расстояния между атомами водорода и поверхностью циркония.

Используя метод динамических рядов, мы рассчитали энергию процесса диссоциации молекулы водорода расположенной параллельно поверхности

циркония. Величина этой энергии составила 1,48 эВ. Обнаружено, что энергия молекул водорода на поверхности циркония значительно меньше энергии в вакууме. Энергия активации десорбции молекулы водорода составляет 6,42 эВ.

3.3 Диффузия водорода

В работе рассмотрено два случая диффузии: диффузия атома водорода вблизи другого атома водорода и диффузия отдельно стоящего атома водорода. Для нахождения параметров диффузионных скачков (высота барьера E_b и длина скачка d) мы использовали метод упругой ленты, смещая атом водорода в направлении диффузионного скачка из исходного междоузлия в конечное. Рассмотренные в работе диффузионные скачки атома водорода вблизи другого атома водорода и их энергетические профили представлены на рисунках 10-12.

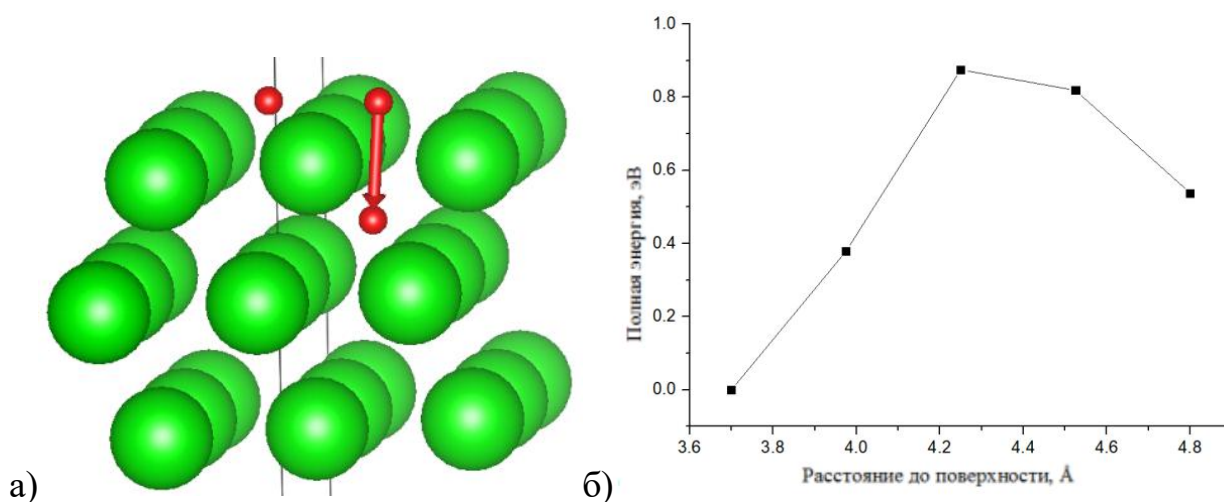


Рисунок 10 – а) Иллюстрация диффузионного скачка водорода из ГЦК пустоты в октаэдрическое междоузлие при его входе в первый слой металла. Зеленые шары – атомы Zr, красные шары – атомы H. б) Зависимость полной энергии системы Zr-H от положения атома водорода относительно поверхности циркония при его входе в первый слой металла.

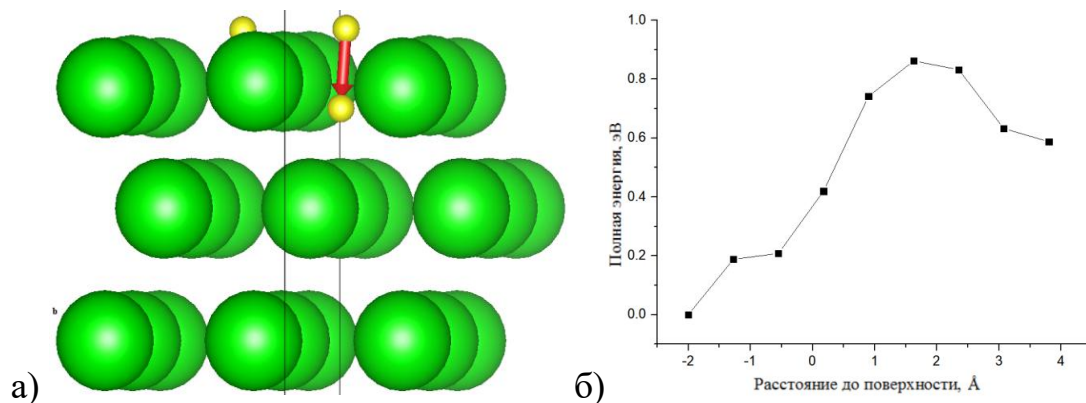


Рисунок 11 – а) Иллюстрация диффузионного скачка водорода из ГПУ пустоты в тетраэдрическое междуузлие при его входе в первый слой металла. Зеленые шары – атомы Zr, красные шары – атомы Н. б) Зависимость полной энергии системы Zr-H от положения атома водорода относительно поверхности циркония при его входе в первый слой металла.

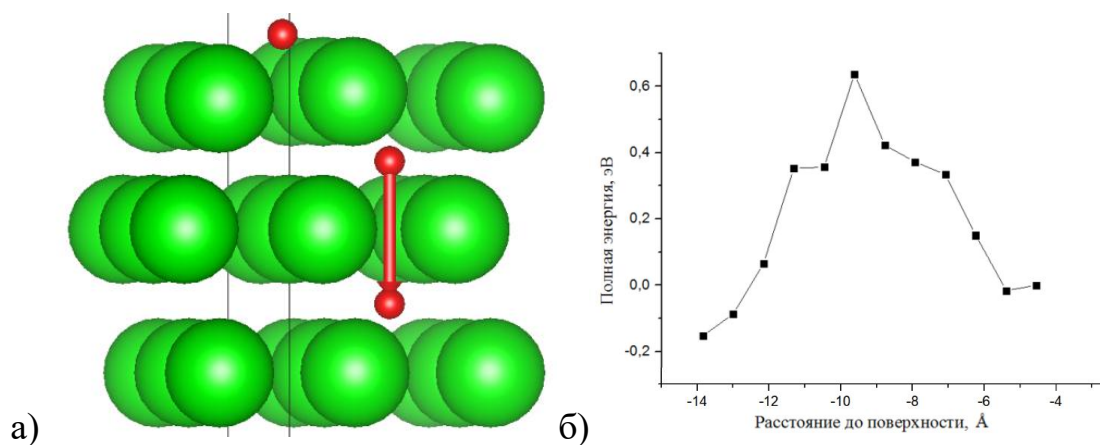


Рисунок 12 – Иллюстрация диффузионного скачка водорода между октаэдрическими междуузлиями при его входе во второй слой металла. Зеленые шары – атомы Zr, красные шары – атомы Н. б) Зависимость полной энергии системы Zr-H от положения атома водорода относительно поверхности циркония при его входе во второй слой металла

Две энергии активации, которые мы рассчитали для атома Н, входящего в первый слой атомов Zr, составили 0,9 эВ и 0,85 эВ при диффузионном скачке из ГПУ и ГЦК пустот, соответственно. Рассчитанная энергии диффузионного барьера для атома Н, входящего во второй слой атомов Zr, составляет 0,65 эВ/атом. ГЦК-пустота оказалась наиболее устойчивым

равновесным междоузлием для адсорбции атома водорода на поверхности (0001) Zr после диссоциации молекулы H₂.

В работе рассчитано распределение валентной электронной плотности в плоскости (11 $\bar{2}$ 0) циркония в процессе проникновения атомов водорода в решетку металла (рисунок 13). Из анализа рисунков 13а и 13б следует, что если два атома водорода расположены в соседних междоузлиях на поверхности циркония, то они формируют химические связи Zr-H вместо связей H-H. Об этом свидетельствует тот факт, что количество изолиний распределения электронной плотности, охватывающих атомы циркония и водорода, больше чем количество изолиний, охватывающих атомы водорода.

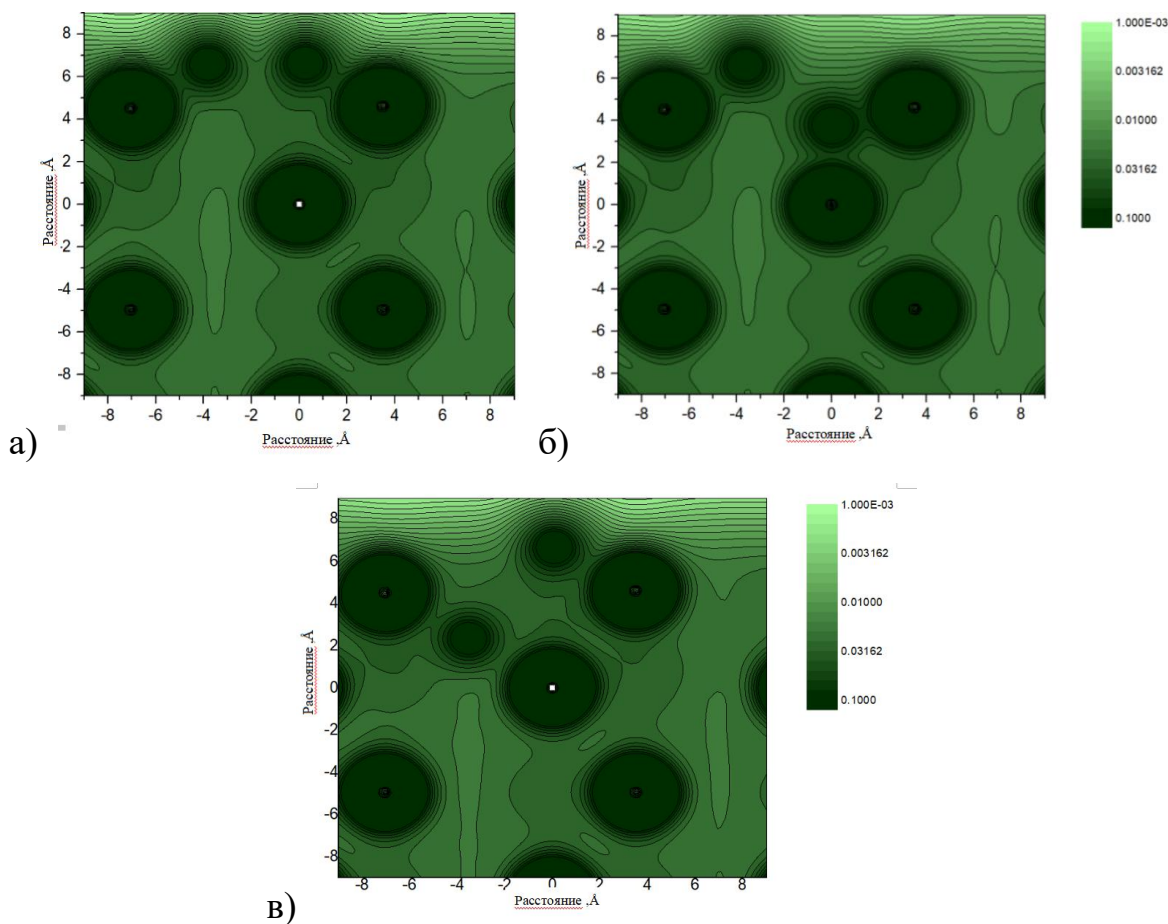


Рисунок 13 – Распределение электронной плотности в плоскости (11 $\bar{2}$ 0) в процессе проникновения водорода в цирконий: а) атомы водорода находятся в ГЦК и ГПУ пустотах на поверхности циркония; б) атом водорода переместился из ГПУ пустоты в тетраэдрическое междоузлие; в) атом водорода переместился из ГЦК пустоты в октаэдрическое междоузлие.

В работе рассмотрены диффузионные скачков атома водорода между ГЦК в ГПУ пустотами поверхности циркония как напрямую, так и через промежуточное междоузлие М (рисунок 14). Результаты расчетов профилей диффузионных барьеров представлены на рисунке 15. Высота диффузионных барьеров приведена в таблице 3.1.

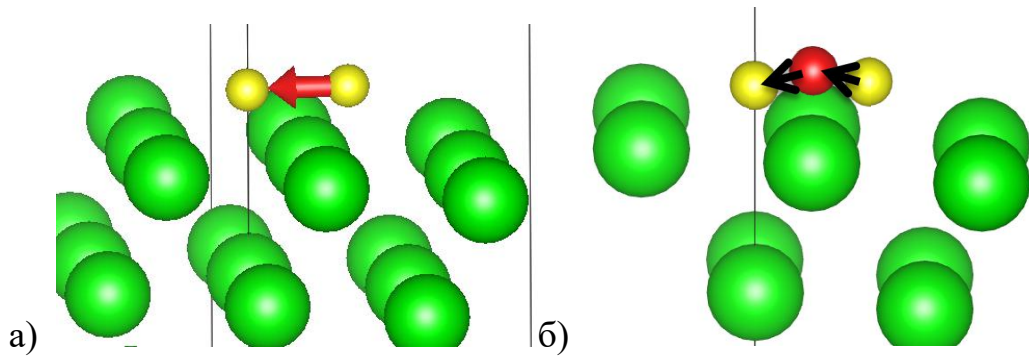


Рисунок 14 – Два способа диффузии атомов водорода на поверхности циркония: а) из ГЦК в ГПУ пустоту; б) из ГЦК пустоты в междоузлие М.

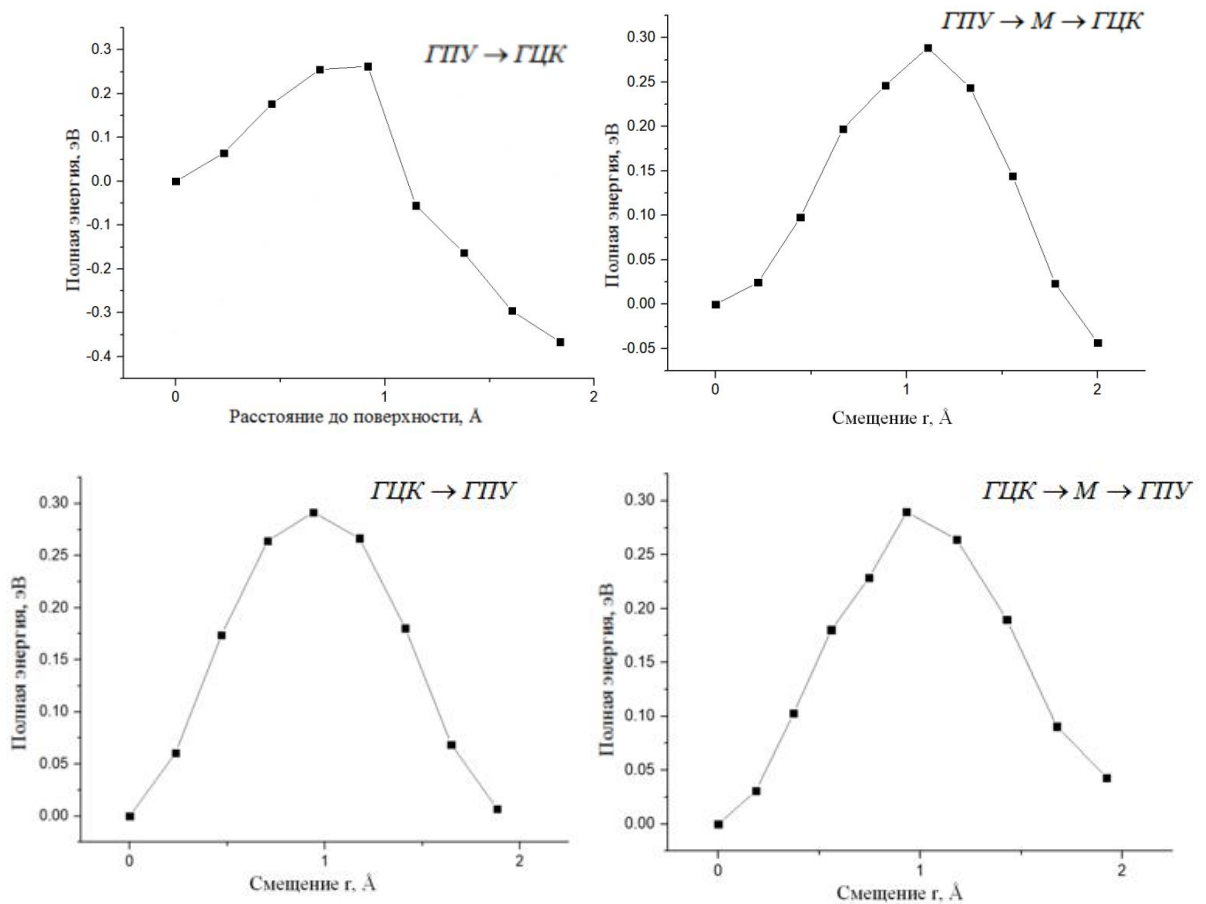


Рисунок 15 – Профили диффузионных барьеров для атома водорода на поверхности Zr.

Таблица 3.1 – Высота барьеров для разных типов диффузионных скачков.

Путь	Энергия активации, эВ
ГПУ→ГЦК	0,354
ГПУ→М→ГЦК	0,332
ГЦК→ГПУ	0,294
ГЦК→М→ГПУ	0,290

Из результатов расчета следует, что высота диффузионного барьера при переходе атома водорода из ГЦК в ГПУ пустоту ниже на 60 мэВ, чем обратно. Отметим, что, если атомы водорода движутся через промежуточное междоузлие М, то высота диффузионного барьера ниже. Возможно, это связано с тем, что, когда атом водорода движется через междоузлие М, находящиеся на поверхности атомы циркония ближайшие к атому водорода смещаются сильнее, что приводит к незначительному уменьшению высоты диффузионных барьеров.

Глава IV Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

4.1 Организация и планирование работ

В процессе поиска источников финансирования для проведения научного исследования и коммерциализации его результатов, оценка коммерческой ценности работы является необходимым условием. При этом разработчики должны представить настоящее состояние и перспективы проводимых ими научных исследований. Помимо превышения технических параметров над предыдущими разработками необходимо понимать коммерческую привлекательность научного исследования.

Целью раздела «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» является проектирование и создание конкурента способных разработок, технологий, отвечающих современным требованиям в области ресурсоэффективности и ресурсосбережения.

В следующей таблице 4.1 перечислены люди и имена, вовлеченные в работу.

При проведении исследований в выпускной работе необходимо строить рабочие группы для того, что достигнуть и выполнить конкретную цель. Для разных видов работ установите соответствующую должность исполнителя.

Таблица 4.1 – Перечень работ и продолжительность их выполнения

Этапы работы	Исполнители	Загрузка исполнителей
Постановка целей и задач, получение исходных данных	НР	НР – 100%
Составление и утверждение ТЗ	НР	НР – 100%
Подбор и изучение материалов по тематике	НР, И	НР – 50% И – 100%
Разработка календарного плана	НР, И	НР – 100% И – 30%
Обсуждение литературы	НР, И	НР – 30% И – 100%
Выбор структурной схемы устройства	НР, И	НР – 100% И – 50%
Выбор принципиальной схемы устройства	НР, И	НР – 100% И – 80%
Обработка данных первопринципных расчетов	НР	НР – 80% И – 80%
Анализ данных расчета первых принципов	НР, И	НР – 20% И – 100%
Оформление расчетно-пояснительной записки	НР, И	НР – 40% И – 80%

4.1.1 Продолжительность этапов работ

Существует два способа расчета продолжительности этапа работы. Первый метод – это технология и экономика: этот метод применим к полностью разработанной нормативно-правовой базе для трудоемкости процесса планирования, что, в свою очередь, обусловлено их высокой воспроизводимостью в стабильной среде. Поскольку подрядчики часто не имеют соответствующих стандартов, мы отказываемся от использования этого метода.

Второй метод – опытно-статистический метод, который может быть реализован двумя способами: 1) аналоговый, 2) экспертный. Аналоговый метод возможен только при наличии устаревшего симулятора в поле зрения исполнителя. В большинстве случаев его можно применять только локально - для отдельных элементов (этап работы). Так что выбирайте экспертный метод для оценки. Экспертные методы пригодны для использования при

отсутствии информационных ресурсов, а эксперты в конкретных предметных областях проводят необходимые количественные оценки на основе своего профессионального опыта.

Рассчитайте время, необходимое для каждого шага работы, по следующей формуле:

$$t_{ож} = \frac{t_{min} + 4t_{prob} + t_{max}}{6} \quad (4.1)$$

где t_{min} – минимальная продолжительность работы, дн.;

t_{max} – максимальная продолжительность работы, дн.;

t_{prob} – наиболее вероятная продолжительность работы, дн.

$$T_{рд} = \frac{t_{ож}}{K_{вн}} \cdot K_{д} \quad (4.2)$$

где $t_{ож}$ – продолжительность работы, дн.;

$K_{вн}$ – коэффициент выполнения работ, $K_{вн} = 1,2$;

$K_{д}$ – коэффициент, учитывающий дополнительное время на компенсацию непредвиденных задержек и согласование работ, $K_{д} = 1,1$.

Расчет продолжительности этапа в календарных днях ведется по формуле:

$$T_{кд} = T_{рд} \cdot T_{к} \quad (4.3)$$

где $T_{кд}$ – продолжительность выполнения этапа в календарных днях;

$T_{к}$ – коэффициент календарности, решение по формуле:

$$T_{к} = \frac{T_{кал}}{T_{кал} - T_{вд} - T_{пд}} = \frac{365}{365 - 52 - 10} = 1,205 \quad (4,4)$$

где $T_{кал}$ – календарные дни ($T_{кал} = 365$);

$T_{вд}$ – выходные дни по кадровым вопросам.

$T_{пд}$ – праздничные дни по кадровым вопросам.

Рассчитаем время, необходимое для работы на каждом этапе из таблицы 4.2, и сделаем выводы:

Таблица 4.2

Этап	Исполнители	Продолжительность работ, дни			Трудоемкость работ по исполнителям чел.- дн.			
		t_{min}	t_{max}	$t_{ож}$	$T_{РД}$		$T_{КД}$	
					НР	И	НР	И
1	2	3	4	5	6	7	8	9
Постановка целей и задач, получение исходных данных	НР	2	4	2,8	2,566	0,256	3,131	0,313
Составление и утверждение ТЗ	НР	3	6	4,2	1,155	3,85	1,4091	4,697
Подбор и изучение материалов по тематике	НР, И	7	10	8,2	2,255	7,516	2,751	9,170
Разработка календарного плана	НР, И	3	4	3,4	3,116	-	3,802	-
Обсуждение литературы	НР, И	2	3	2,4	2,2	-	2,684	-
Выбор структурной схемы устройства	НР, И	7	14	9,8	8,983	4,491	10,959	5,479
Выбор принципиальной схемы устройства	НР, И	4	10	6,4	5,866	4,693	7,157	5,725
Обработка данных первопринципных расчетов	НР	30	36	32,4	11,88	23,76	28,55	30,41
Анализ данных расчета первых принципов	НР, И	10	15	12	11	8,8	13,42	10,736
Оформление расчетно-пояснительной записки	НР, И	5	6	5,4	1,98	3,96	2,4156	4,8312
Оформление графического материала	НР, И	15	20	17	3,116	12,46	3,802	15,209
Подведение итогов	НР, И	3	4	3,4	3,116	-	3,802	4,487
Итого:				108,6	74,44	73,34	92,77	91,94

Таблица 4.3 – Трудозатраты на выполнение проекта

Этап	НР	И	Март			Апрель			Май			Июнь		
			10	20	30	40	50	60	70	80	90	100	110	120
1	3,802	-	■											
2	2,684	-		■										
3	2,751	9,170			■	■								
4	3,131	0,313				■	■							
5	1,41	4,697					■	■						
6	10,96	5,479						■	■					
7	7,157	5,725							■	■				
8	38,02	30,41								■	■			
9	3,802	15,21									■	■		
10	2,415	4,831										■	■	
11	13,42	10,73											■	■
12	3,221	5,368												■

НР – ■ ; И – ■

4.2 Расчет сметы затрат на выполнение проекта

Стоимость создания проекта включает в себя все затраты, необходимые для реализации каждой из задач, которые составляют эту разработку. Расчет сметной стоимости ее выполнения производится по следующим статьям затрат: материалы и покупные изделия; заработная плата; социальный налог; расходы на электроэнергию (без освещения); амортизационные отчисления; командировочные расходы; оплата услуг связи.

4.2.1 Расчет затрат на материалы

Во-первых, расходы включают материальные затраты, приобретенные продукты, полуфабрикаты и другие материальные ценности, которые непосредственно потребляются при работе объекта проектирования. Для покупки большого количества предметов, например цены листа сплава Э110, мы используем метод взвешивания. Цена за единицу товара принимается за среднюю рыночную цену. Хотя цена на оптовую торговлю будет намного ниже, чем средняя рыночная цена, мало влияет на небольшое количество протестированных образцов.

Таблицы 4.4 – Расчет затрат на материалы

Наименование	Единица измерения	Количество	Цена за ед., руб.	Затраты на материалы,(Зм), руб.
Zr Сплавы	Шт.	20	100	2000
Бумага	Лис.	150	2	300
Интернет	М/бит	6	350	2100
Ручка	Шт.	3	20	60
Тетрадь	Шт.	5	20	100
Диск USB	Шт.	3	380	1140
Итого			902	5700

С фешом транспортно-загошовительных расходов(0,5) эти зашрашы равны $5700 * 1,05 = 5985$ руб.

4.2.2 Расчет заработной платы

$$ЗП_{дн - т} = \frac{МО}{\frac{298}{12}} = \frac{МО}{24,83}$$

Расчеты затрат на полную заработную плату приведены в таблице 4.5. Затраты времени по каждому исполнителю в рабочих днях с округлением до целого взяты из таблицы 4.2. Для учета в ее составе премий, дополнительной зарплаты и районной надбавки используется следующий ряд коэффициентов: $K_{ПР} = 1,1$; $K_{доп.ЗП} = 1,188$; $K_p = 1,3$. Таким образом, для перехода от тарифной (базовой) суммы заработка исполнителя, связанной с участием в проекте, к соответствующему полному заработку (зарплатной части сметы) необходимо первую умножить на интегральный коэффициент $K_{и} = 1,1 * 1,188 * 1,3 = 1,699$. Вышеуказанное значение $K_{доп.ЗП}$ применяется при шестидневной рабочей неделе, при пятидневной оно равно 1,113, соответственно в этом случае $K_{и} = 1,62$.

Таблица 4.5 – Затраты на заработную плату

Исполнитель	Оклад, руб./мес	Среднедневная ставка, руб./раб.день	Затраты времени, раб.дни	Коэффициент	Фонд з/платы, руб.
НР	26624	1210,8	74	1,699	152229,0
И	15 470	703,2	73	1,62	83160,4
Итого:					235389,4

4.2.3 Расчет затрат на социальный налог

Затраты на единый социальный налог (ЕСН), включающий в себя отчисления в пенсионный фонд, на социальное и медицинское страхование, составляют 30 % от полной заработной платы по проекту, т.е. $C_{соц.} = C_{зп} * 0,3$. Итак, в нашем случае $C_{соц.} = 235389,4 * 0,3 = 70616,8$ руб.

4.2.4 Расчет затрат на электроэнергию

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. В нашем случае подсчитаем затраты электроэнер. Одноставочный тариф на электроэнергию 5,748 руб./кВт.час (в ТПУ).

Результаты расчета нормы амортизации в таблице 4.6

Таблицы 4.6 – Затраты на электроэнергию

№	Наименование оборудования	Мощность, кВт/час	Время эксплуатации, час	Расход электроэнергии, руб.
11.	Компьютер	7	80	3218,88
	Итого			3218,88

4.2.5 Расчет амортизационных расходов

В учете затрат учитывается не только счет за электроэнергию оборудования, но и амортизация оборудования. Используется формула.

$$C_{AM} = \frac{N_A * C_{OB} * t_{pf} * n}{F_d} = 304,54 \text{рубс}$$

где N_A – годовая норма амортизации; ($N_A=12,5\%$ по приложению 1)

C_{OB} – балансовая стоимость единицы оборудования с учетом ТЗР, =220000руб.

F_d – действительный годовой фонд времени работы соответствующего оборудования.($301*24=7224$ ч)

t_{pf} – фактическое время работы оборудования в ходе выполнения проекта, задается исполнителем проекта=80 час;

n – число задействованных однотипных единиц оборудования = 1.

4.2.6 Расчет прочих расходов

Пункт «Прочие расходы» отражает стоимость выполненного проекта, которые не учтены в предыдущих статьях. Они должны равняться 10% всех предыдущих затрат, т.е.

$$\text{Спроч.} = (\text{Смат} + \text{Сзп} + \text{Ссоц} + \text{Сэл.} + \text{Сам} + \text{Спр}) \cdot 0,1$$

$$\begin{aligned} \text{Спроч.} &= (4560 + 228311,1 + 68493,3 + 3218,88 + 304,54 + 2140) \cdot 0,1 \\ &= 30702,8 \text{руб.} \end{aligned}$$

4.2.7 Полная стоимость исследования

Консолидировать и суммировать расходы по вышеуказанным разделам. Все затраты на этот эксперимент представлены в таблице 4.7 ниже.

Таблицы 4.7 – Смета затрат на разработку проекта

Статья затрат	Условное обозначение	Сумма, руб.
Материалы и покупные изделия	$C_{\text{мат}}$	4560
Основная заработная плата	$C_{\text{зп}}$	235389,4
Отчисления в социальные фонды	$C_{\text{соц}}$	70616,8
Расходы на электроэнергию	$C_{\text{эл.}}$	3218,88
Амортизационные отчисления	$C_{\text{ам}}$	304,54
Прочие расходы	$C_{\text{проч}}$	30702,8
Итого:		344792,42

Исследование стоило всего 344792,42 рублей. Этот эксперимент не имеет рыночного значения, только для изучения защиты материалов из сплава циркония в ядерных реакторах. Следовательно, оценка его экономической эффективности невозможно.

Вывод

Полученные в ходе исследования результаты, при затрате 344792,42 рублей, 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 научных задач. Так как полученные результаты не могут быть непосредственно использованы в производстве товарной продукции, то оценка их экономической эффективности невозможна.

Глава V Социальная ответственность

5.1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности.

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.

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.

5.2. Производственная безопасность.

Данная работа посвящена расчетами из первых-принципов влияния водорода на удельное электрическое сопротивление циркония. Сегодня, технологии компьютерного моделирования становится популярном и эффективным метода для исследования свойств материалов. Эти методы имеют высокую безопасность для исследователей, но при выполнении работ с помощью персональной электронно-вычислительной машины (ПЭВМ) также возможно взаимодействуют с некоторыми вредными факторами:

- Микроклимат;
- Электромагнитное излучение;
- Недостаточная освещенность,

и с следующими опасными факторами:

- Поражение электрическим током;
- Возникновения пожара.

5.2.1 Микроклимат

Типичные показатели микроклимат заключаются в температуре,

влажности и скорости движения воздуха. При планировании условий труда нужно стремиться к созданию в производственных помещениях оптимальных микроклиматических условий. В таблице 5.1 представлены оптимальные значения этих показателей микроклимата согласно СанПин 2.2.4.548-96.

Таблица 5.1 – Оптимальные значения показателей микроклимата

Период года	Температура, °С	Относительная влажность воздуха, %	Скорость движения воздуха, м/сы
Холодный	22-24	40-60	0,1
Теплый	23-25	40-60	0,1

5.2.2 Электромагнитное излучение

Основной вредный фактор при использовании ЭВМ заключается в электромагнитном излучении. Нормы вредных допустимых уровней (ВДУ) электромагнитного излучения ПЭВМ установлены в документе СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03, как показаны в таблице 2.

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

Таблица 5.2 – Временные допустимые уровни ЭМП, создаваемых ПЭВМ

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

5.2.3 Недостаточная освещенность

Согласно ГОСТ 12.0.003.-86 недостаточная освещенность рабочей зоны является вредным производственным фактором, который может вызвать ослепленность или привести к быстрому утомлению и снижению работоспособности. Свет влияет на физиологическое состояние человека, правильно организованное освещение стимулирует протекание процессов высшей нервной деятельности и повышает работоспособность. При недостаточном освещении человек работает менее продуктивно, быстро устает, растет вероятность ошибочных действий, что может привести к травматизму. В зависимости от длины волны, свет может оказывать возбуждающее (оранжево-красный) или успокаивающее (желто-зеленый) действие.

Согласно СП 52.13330.2011, требования к освещению помещений промышленных предприятий (КЕО, нормируемая освещенность, допустимые сочетания показателей ослепленности и коэффициента пульсации освещенности) следует принимать по таблице 3

Таблица 5.3 – Требования к освещению помещений промышленных предприятий

Характеристика зрительной работы	Наименьший или эквивалентный размер объекта различения, мм	Разряд зрительной работы	Подразряд зрительной работы	Контраст объекта с фоном	Характеристика фона	Искусственное освещение		
						Освещенность, лк		
						При системе комбинированного освещения		При системе общего освещения
						Всего	В том числе от общего	
Высокой точности	0,3-0,5	III	г	Средний, большой	Светлый, средний	400	200	200

5.2.4 Статическое электричество

Электробезопасность – система организационных и технических мероприятий и средств, обеспечивающих защиту людей от вредного и опасного воздействия электрического тока, электродуги, электромагнитного поля и статического электричества (согласно ГОСТ 12.1.009-76). Электрический ток, проходя через тело человека, производит тепловое, химическое и биологическое воздействие, тем самым нарушая нормальную жизнедеятельность. Работники, принимаемые для выполнения работ в электроустановках, должны иметь профессиональную подготовку, соответствующую характеру работы.

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

5.2.5 Возникновения пожара

Пожарная безопасность обеспечивается системой предотвращения пожара и системой пожарной защиты. Во всех служебных помещениях обязательно должен быть “План эвакуации людей при пожаре”, регламентирующий действия персонала в случае возникновения очага возгорания и указывающий места расположения пожарной техники.



Рисунок 16 – План эвакуации при пожаре и других чрезвычайных ситуациях

5.3 Экологическая безопасность

Данная работа реализовалась с применением ПЭВМ, такие операции относятся к предприятиям пятого класса, и не является экологически опасной работой.

5.4 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.

Заключение

В работе был проведен анализ результатов ряда работ, посвященных описанию взаимодействия водорода с поверхностью металлов. Также были рассмотрены основы теории функционала электронной плотности и метода псевдопотенциалов. В работе была изучена из первых принципов процесс адсорбции и диссоциации молекулы водорода на поверхность (0001) α -циркония. Также были получены профили диффузионных барьеров для атома водорода на поверхности (0001) α -циркония.

Установлено, что если молекулы водорода имеют одинаковую ориентацию относительно поверхности циркония, то зависимости полной энергии системы $Zr-H_2$ от расстояния между центром молекулы водорода и поверхностью циркония имеют одинаковую тенденцию вне зависимости от места ее адсорбции. Также получено, что на расстояниях менее 4,5 Å независимо от места ее адсорбции полная энергия системы поверхность– H_2 с молекулами водорода, ориентированными перпендикулярно поверхности циркония, меньше чем в случае с молекулами, ориентированными параллельно поверхности. На расстояниях более 4,5 Å энергетически наиболее выгодной является ориентация молекулы водорода параллельно поверхности циркония.

В работе получено, что при ориентации молекулы водорода параллельно поверхности циркония энергия ее диссоциации составляет 1,48 эВ, а энергия активации десорбции – 6,42 эВ. При диссоциации молекулы атомам водорода энергетически наиболее выгодно занимать ГЦК пустоты на поверхности (0001) циркония. Высота барьеров диффузии по поверхности циркония составляет 0,29–0,35 эВ. Энергия активации диффузии вглубь решетки металла составляет ~ 0,9 эВ.

Список литературы

1. Матысина З.А. Водород и твердофазные превращения в металлах, сплавах и фуллеритах // Наука и образование Днепропетровск, 2002. С. 11–14.
2. E W.; Ren W., Eijnden E. V. Simplified and improved string method for computing the minimum energy paths in barrier-crossing events // The Journal of Chemical Physics. – 2007. – 126, 164103 – P. 1–8.
3. Oura, K., Lifshits, V.G., Saranin, A. Surface Science // Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2003. P. 333.
4. Antczak G. Jump processes in surface diffusion // Surface Science Reports. – 2007. – Vol. 62, Issue 2. – P. 39-61.
5. Schommers W., Blanckenhagen P. V. Structure and Dynamics of Surfaces II // Topics in Current Physics, 1986. Chapter 3.2, P. 75
6. Kuhlbeck H. Metal-Surface Reaction Energetics: Theory and Applications to Heterogeneous Catalysis, Chemisorption, and Surface Diffusion // VCH Publishers, New York/VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim, 1993. P. 101
7. А. М. Прохоров. Поверхностная диффузия // Физическая энциклопедия / М.: Советская энциклопедия, 1988. С. 644.
8. Seebauer E. G. Surface diffusion on metals, semiconductors, and insulators // Physics of covered solid surfaces. Berlin: Springer, 2001. P. 311.
9. Harald I. Physics of Surfaces and Interfaces // Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006. P. 51
10. Peng Z., Wang S., Zhao J. First-principles study of H₂ adsorption and dissociation on Zr(0001) // Journal of Nuclear Materials. – 2010. – P. 159–164.
11. Born M., Oppenheimer R. Zur Quanten theorie der Molekeln // Annalen der Physik. – 1927. – Vol. 84. – P. 457–484.
12. Хартри Д. Расчёты атомных структур. – М.: ИИЛ, 1960. – 256 с.
13. Rogers, B.A. and Atkins, D.F. Zirconium-Columbium Diagram // Phys. Rev. – 1955 – Vol. 7. – P. 1034–1048.
14. J.P. Abriata and J.C. Bolcich. The Nb-Zr (Niobium- Zirconium) system. // Bulletin of Alloy Phase Diagrams. – 1982 – Vol.3 – No.1– P. 88–97.

15. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous Electron Gas // *Phys. Rev.* – 1964. – Vol. 136., № 3B. – P. 864–871.
16. Perdew J. P., Chevary, J. A. Atoms, molecules, solids, and surfaces: Applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation // *Physical Review B.* – 1992. – Vol. 46., No.11– P. 6671–6687.
17. 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.
18. Kieron B.; Wagner L. O. (2013). DFT in a nutshell// *International Journal of Quantum Chemistry.* – 2013. – Vol. 113., № 2. – P. 96–101.
19. Sheppard D., Terrell R., Henkelman G. Optimization methods for finding minimum energy paths // *The Journal of Chemical Physics* – 2008. – Vol. 128, № 134106. – P. 1–11.
20. Henkelman G., Uberuaga B. P., Jónsson H. (2000). A climbing image nudged elastic band method for finding saddle points and minimum energy paths // *The Journal of Chemical Physics* – 2000. – Vol. 113, № 22 – P. 9901–9904.
21. ABINIT – abinit [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.abinit.org> – 21.12.18.