

Школа Инженерная школа ядерных технологий

Направление подготовки 03.03.02 «Физика»

Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ВОДОРОДА С АЛЬФА-ТИТАНОМ: РАСЧЕТЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

УДК 669.295.5:669.788.001.24

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б52	Тянь Шучжэн		

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 ОЕН ШБИП	Лопатина О.В.	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.		

По разделу «Социальная ответственность»

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

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

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

Запланированные результаты обучения по программе

Код результата	Результат обучения (выпускник способен)	Требования ФГОС, критериев и/или заинтересованных сторон
<i>Общекультурные компетенции</i>		
P1	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)
P2	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>		
P3	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)
P4	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)
P5	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)

Профессиональные компетенции

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 ФГОС3+ (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 ФГОС3+ (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 ФГОС3+ (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 ФГОС3+ (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 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
150Б52	Тянь Шучжэн

Тема работы:

Взаимодействие водорода с альфа-титаном: 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 титан-водород.

<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; – Обзор литературы по взаимодействию металлов с водородом, его влиянию на атомную и электронную структуру конструкционных материалов. Рассмотрены особенности поведения водорода в титане. – Оптимизация и релаксация атомной структуры системы титан-водород при различной координации и концентрации атомов водорода в решетке титана. – Расчет электронной структуры (зарядовой плотности) системы титан-водород. – Анализ полученных результатов, выявление особенностей взаимодействия водорода с титаном. Анализ полученных результатов; – Заключение.
<p>Перечень графического материала <i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i></p>	<ul style="list-style-type: none"> – Расчетные ячейки и оптимизированные структуры систем Ti-H при различных концентрациях водорода; – Распределение электронной плотности состояний и электронной плотности титан-водородной системы.

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы

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. Основные свойства систем Ti-H
2. Методика расчета
3. Результаты и обсуждение
4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение
5. Социальная ответственность

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

Задание выдал руководитель / консультант (при наличии):

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

Ассистент ОЕН ШБИП	Лопатина О.В.	к.ф.-м.н.		
--------------------	---------------	-----------	--	--

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б52	Тянь Шучжэн		

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

Студенту:

Группа	ФИО
150Б52	Тянь Шучжэн

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. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Принять по действующим ценам.
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	_____
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	Ставки НДС (20%) и социального калого (30%).

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	_____
2. Планирование и формирование бюджета научных исследований	Планирование процесса управления НИТ: структура и график проведения, бюджет.
3. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	Выполнить.

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. Оценка конкурентоспособности технических решений
2. Альтернативы проведения НИ
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	Конотопский Владимир Юрьевич	к.э.н., доцент		
--------	---------------------------------	----------------	--	--

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б52	Тянь Шучжэн		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
150Б52	Тянь Шучжэн

Школа	ИШЯТ	Отделение (НОЦ)	Отделение экспериментальной физики
Уровень образования	Бакалавр	Направление/специальность	03.03.02 физика

Тема ВКР:

Взаимодействие водорода с альфа-титаном: расчеты из первых принципов

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения

Расчет системы титан-водород с помощью компьютера;
Программа Flaw;
В области первопринципных расчетов;
При сфере газофазного наводороживания;
Рабочая зона в лаборатории H₂ (Учебный корпус № 3) .

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:

- специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства;
- организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.

По данной теме рассматриваются законодательный и нормативные документы:

- инструкция № 2-14 по охране труда при работе с электрооборудованием напряжением до 1000 В;

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 работ;

-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.

	<p>Микроклимат:</p> <p>-ГОСТ 30494-96 Здания жилые и общественные помещения. Параметры микроклимата в помещении;</p> <p>-ГОСТ 12.1.005 Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны;</p> <p>СанПиН 2.2.4.548-96 Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.</p>
<p>2. Производственная безопасность:</p> <p>2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов</p> <p>2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия</p>	<ul style="list-style-type: none"> - Микроклимат; - Электромагнитные поля - Статическое электричество - Шум - Недостаточное освещение. - Электрическое напряжение;
<p>3. Экологическая безопасность:</p>	<p>– При работе с суперкомпьютером возможно образование отходов: бумага. Бумагу используют для записи результатов экспериментов.</p>
<p>4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:</p>	<ul style="list-style-type: none"> – Пожар – Затопление

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
150Б52	Тянь Шучжэн		

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

Уровень образования бакалавриат
 Направление 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
01.09.2018	Самосогласованный расчет полной энергии структуры чистого Ti и системы Ti-H. Исследование Ti-H системы в условиях высокой концентрации водорода	15
30.12.2018	Исследование титановой водородной системы в условиях низкой концентрации водорода. Расчет электронной структуры системы Ti-H. Исследование влияния водорода на атомную и электронную структуру Ti	20
30.04.2019	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 ОЕН ШБИП	Лопатина О.В.	к.ф.- м.н.		

СОГЛАСОВАНО:

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

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа содержит 77 страницы, 11 рисунков, 20 таблицы, 20 литературный источник.

Ключевые слова: расчеты из первых принципов, полнопотенциальный метод FLAPW, титан, водород, плотность электронных состояний, распределение валентной зарядовой плотности.

Объектом исследования является система титан-водород.

Объектом исследования является атомная и электронная структура чистого титана и Ti с концентрацией водорода ~33 ат.% и ~6 ат.%.

Целью работы - первопринципное исследование электронной и атомной структуры твердого раствора водорода в титане в зависимости от концентрации примеси. Расчеты основаны на методе полного потенциала линеаризованных присоединенных плоских волн (FLAPW), которые реализованы в пакете программ FLEUR.

В процессе исследования проведены самосогласованные расчеты полной энергии чистого никеля и системы Ti-H; рассчитаны параметры решетки титана, содержащего примесь водорода ~33 ат.% и ~6 ат.%; установлено наиболее выгодное местоположение водорода в ГПУ, ОЦК, ГЦК решетке Ti; рассчитана энергия растворения водорода в Ti для двух концентраций примеси; исследовалось влияние водорода с концентрацией ~33 ат.% и ~6 ат.% на электронную структуру титана.

В результате исследования показано, что растворение водорода ~ 6 ат.% не изменяет ГПУ структуру металла, присутствие ~ 33 ат.% примеси водорода в Ti стабилизирует ГЦК решетку металла, при этом атому водорода энергетически наиболее выгодно располагаться в октаэдрическом междоузлии решетки Ti. Вычисленные величины энергии растворения водорода ~ 6 ат.% в ГПУ решетке Ti и ~ 33 ат.% в ГЦК имеют отрицательные значения, что свидетельствует о его растворимости в металле. Обнаружено, что присутствие

водорода в решетке металла приводит к изменению плотности электронных состояний и перераспределению валентной зарядовой плотности металла.

Основные конструктивные, технологические и технико-эксплуатационные характеристики: расчетные ячейки ГПУ- ОЦК- и ГЦК решеток металла содержали 2 атома титана и один атом водорода в октаэдрическом или тетраэдрическом междоузлиях, таким образом была образована концентрация примеси ~33 ат.%, аналогичным способом реализована концентрация примеси ~6 ат.%, т.е. ГПУ- ОЦК- и ГЦК решетки металла содержали по 16 атомов титана и один атом водорода, в соответствующих междоузлиях.

Степень внедрения: результаты работы представлены на семинарах ОЕН ШБИП и ОЭФ ИШЯТ. XVI Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Перспективы развития фундаментальных наук».

Область применения: результаты расчетов могут быть использованы для построения микро-моделей при анализе и интерпретации экспериментальных результатов.

Экономическая эффективность/значимость работы результаты позволят выявить особенности электронного взаимодействия в системе Ti-H и служат первичной информацией для объяснения физико-механических свойств твердого раствора Ti-H.

В будущем планируется выполнить самосогласованные расчеты атомной и электронной структуры титана с концентрацией примеси выше ~ 33 ат.%.

Оглавление

РЕФЕРАТ.....	11
Введение.....	16
Глава I Краткий обзор литературы.....	19
1.1 Структура и свойства титана.....	19
1.2 Система титан-водород.....	19
Глава II Методика расчета.....	22
2.1 Адиабатическое приближение.....	22
2.1.1 Многочастичные системы уравнения Шредингера.....	22
2.1.2 Электронное движение и разделение ионов.....	23
2.2 Функциональная теория локальной плотности.....	24
2.2.1 Теорема Hohenberg-Kohn.....	25
2.2.2 Уравнение Kohn-Sham.....	26
2.2.3 Приближение локальной плотности.....	28
2.3 Метод FLAPW.....	29
2.3.1 Muffin—tin потенциал.....	29
2.3.2 APW.....	30
2.3.3 LAPW.....	32
2.3.4 FLAPW.....	35
Глава III Результаты и обсуждение.....	36
3.1 Атомная структура чистого Ti (Ti2 и Ti16).....	36
3.2 Параметры решетки в системе Ti–H.....	37

3.3 Атомная структура системы Ti-H, с концентрацией примеси ат.% и 6.25 ат.%.	33
3.4 Энергии растворения водорода в решетке титана.	42
3.5 Избыточный объем.	43
3.6 Электронная плотность состояний.	44
3.7 Зарядовая плотность электронов.	49
Глава IV Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение.	51
4.1 Организация и планирование работ.	51
4.1.1 Продолжительность этапов работ.	52
4.2 Расчет сметы затрат на выполнение проекта.	57
4.2.1 Расчет затрат на материалы.	57
4.2.2 Расчет заработной платы.	58
4.2.3 Расчет затрат на социальный налог.	58
4.2.4 Расчет затрат на электроэнергию.	59
4.2.5 Расчет амортизационных расходов.	59
4.2.6 Непосредственно учитываемые расходы.	60
4.2.7 Расчет прочих расходов.	60
4.2.8 Полная стоимость исследования.	61
Оценка экономической эффективности.	61
Глава V Социальная ответственность.	62
5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности.	62

5.1.1 Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя) правовые нормы трудового законодательства.....	62
5.1.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя.....	63
5.2 Производственная безопасность.....	63
5.2.1 Анализ опасных и вредных производственных факторов...63	
5.2.2 Анализ вредных и опасных факторов, которые могут возникнуть в лаборатории при проведении исследований.....	64
5.3 Экологическая безопасность.....	69
5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....	69
5.4.1 пожар.....	70
5.4.2 Затопление.....	72
Вывод.....	72
Рекомендуемая литература.....	73
Заключение.....	74
Список литературы.....	76

Введение

Титан и его сплавы широко используются в качестве конструкционных материалов аэрокосмической, автомобильной промышленности, ракетостроении, кораблестроении, а также в медицине. Титан имеет наилучшие показатели по соотношению прочности и веса, его прочность примерно равна прочности стали при том, что он на 45 % легче. Титан на 60 % тяжелее алюминия, но прочнее его примерно вдвое [1], титан, также, обладает высокой коррозионной устойчивостью. Титан является физиологически инертным, благодаря чему применяется в медицине (протезы, остеопротезы, зубные имплантаты), в стоматологических и эндодонтических инструментах, украшениях для пирсинга. Сплавы титана, например, алюминиды (AlTi) являются очень стойкими к окислению и жаропрочными, что, в свою очередь, определило их использование в авиации и автомобилестроении в качестве конструкционных материалов.

Водород является наиболее распространенным элементом во вселенной. Водород – очень чувствительный химический элемент, который легко взаимодействует с металлами [2, 3, 4]. Взаимодействие водорода с переходными металлами – это одно из основных научных направлений исследований материалов. Научный интерес, в частности, представляет взаимодействие водорода с титаном.

В течение долгого времени водород всегда считался вредным элементом в титановых сплавах. Накопление водорода в металлах и сплавах, как правило, приводит к охрупчиванию материала. Поэтому большинство исследований поведения водорода в титановых сплавах сосредоточено на водородном охрупчивании [5, 6, 7]. Тем не менее, многие результаты исследований за последние годы показывают, что, используя технологию обработки водородом, добавление подходящего количества водорода к титановому сплаву может улучшить его термопластичность и заметно улучшить обрабатываемость материала [8]. В то же время обработка водородом помогает укрепить

микроструктуру титановых сплавов и улучшить их общие механические свойства.

Титановые сплавы имеют хорошую теплостойкость и коррозионную стойкость, а также высокоэффективные сечения поглощения тепловых нейтронов, которые представляют собой материалы, обычно используемые в активной области ядерных реакторов. Например, титанат диспрозия (DyO_9Ti_3) представляет собой новый экспериментальный материал, который в настоящее время используется. Это хороший поглотитель нейтронов, который имеет более высокую температуру плавления, чем другие сплавы, легче производить, не производит радиоактивных отходов, не реагирует легко с другими материалами и не набухает легко. Этот материал изучается Россией и в основном используется для некоторых графитовых Графитовой кучи и Реактора с водой под давлением. В процессе ядерной реакции в титановом сплаве водород накапливается в материале титанового сплава в результате ядерной реакции под действием тепловых нейтронов [9]. Кроме этого, водород образуется, поступая из теплоносителя, в результате коррозии на границе материал-вода. Таким образом, накапливаясь в конструкционных титансодержащих материалах, Водород может вызвать охрупчивание металла, что снижает прочность и пластичность материала, снижает механические свойства и влияет на безопасность материала. Степень водородного охрупчивания материала зависит от концентрации водорода и состояния водорода в кристаллической структуре материала.

Из-за высокой активности водорода в титане и его сплавах механизм взаимодействия водорода в титане и его сплавах очень сложен. В настоящее время поведение водорода в этом материале по-прежнему не имеет систематического понимания и нуждается в дальнейшем изучении. Используя методы компьютерного моделирования, механизм взаимодействия водорода в титане может быть изучен на микроскопическом уровне.

Целью настоящей работы является исследование из первых принципов атомной ГПУ-, ГЦК-, ОЦК-структуры Ti с концентрацией водорода 33 ат.% и расчет энергии растворения водорода в ГПУ-, ГЦК-, ОЦК-решетке Ti.

Для выполнения поставленной цели в работе были поставлены следующие задачи.

1. Ознакомиться с литературой по изучаемой теме;
2. Познакомиться с первопринципными расчетами электронной структуры металлов;
3. Изучить метод полного потенциала линеаризованных присоединенных плоских волн;
4. Определить параметры решетки чистого Ti, Ti₂N и Ti₁₆N.
5. Исходя из первого принципа, наиболее подходящая атомная структура основного состояния системы Ti-H, имеющей «высокую» (33,3 ат.%) И «низкую» (6,25 ат.%) Концентрацию водорода, определяется с помощью компьютерного расчета.
6. Изучить энергии растворения водорода в ГПУ-, ГЦК-, ОЦК-решетке Ti, избыточного объема вносимого водородом в решетку Ti.

Глава I Краткий обзор литературы

1.1 Структура и свойства титана

Титан представляет собой серебристо-белый переходный металл, который характеризуется малым весом, высокой прочностью, металлическим блеском, хорошей коррозионной стойкостью, хорошей высокой термостойкостью, анти-щелочной и высокой прочностью, низкой плотностью.

Система титан-водород имеет три фазы: ГПУ, ОЦК и ГЦК. Параметр решетки ГПУ титана был определен экспериментально как $a = 0,295 \text{ нм}$, $c = 4,68 \text{ нм}$ [18].

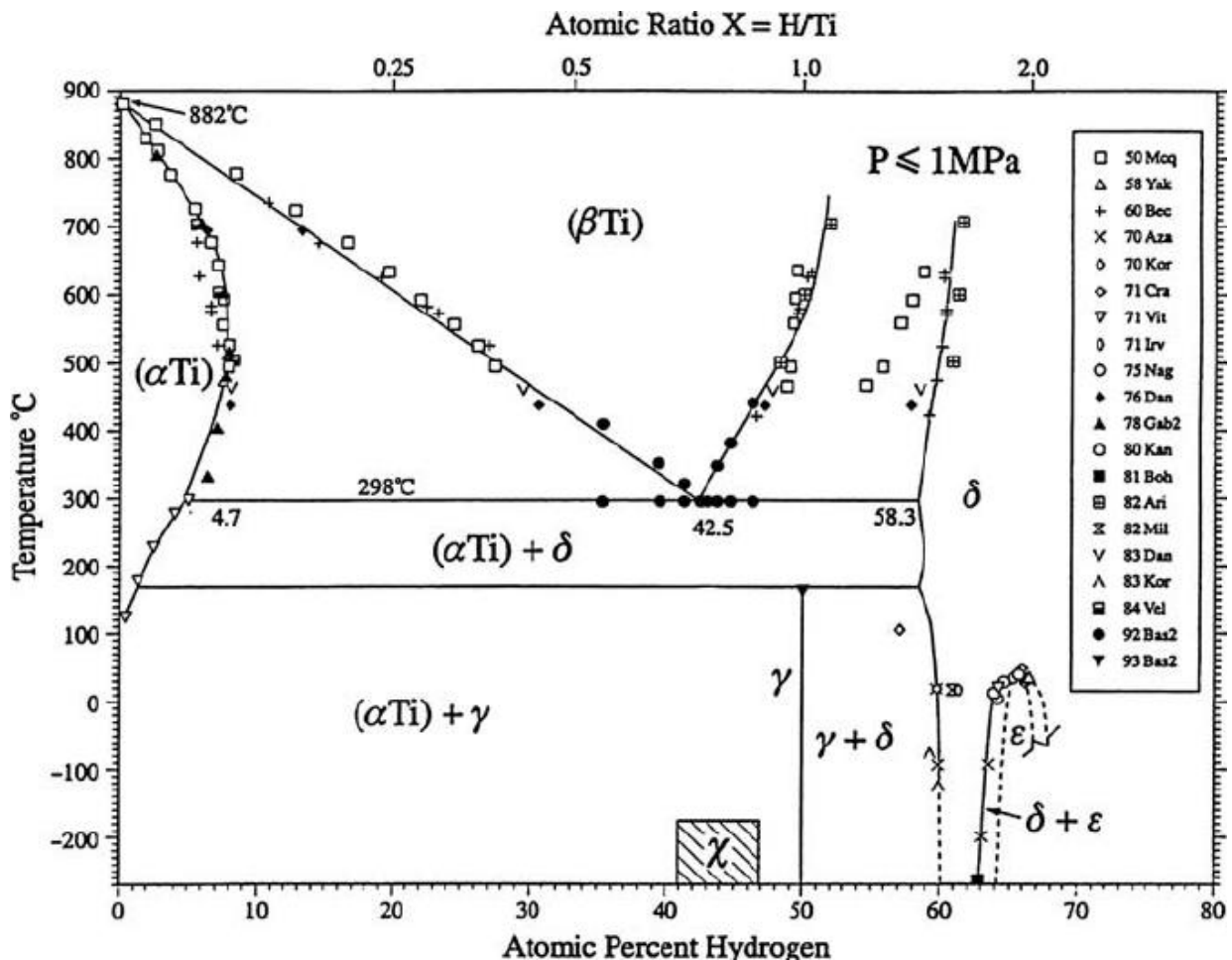


Рисунок 1.1 - Фазовая диаграмма титана водорода

1.2 Система титан-водород

В решетках $\alpha\text{-Ti}$ и $\beta\text{-Ti}$ имеются два типа междоузлий: октаэдрическое (O) и тетраэдрическое (T). Было показано, что атомы водорода в междоузельном

пространстве α -Ti занимают октаэдрические междоузлия и искажают тетраэдрическую решетку.

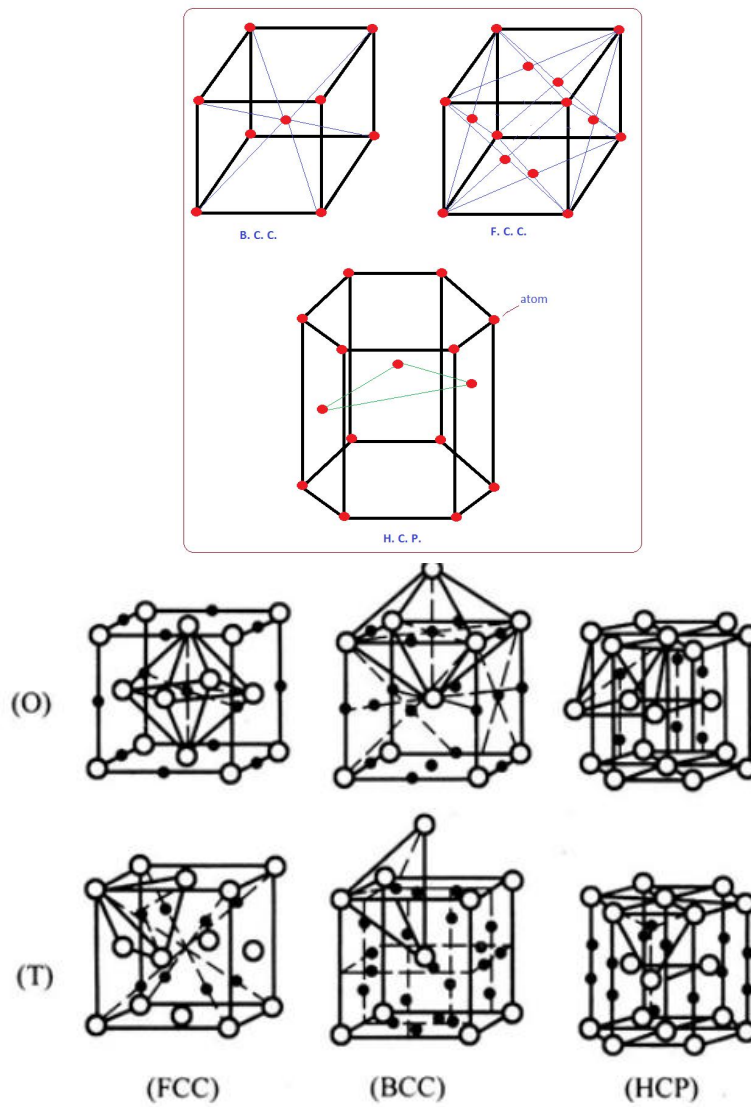


Рисунок 1.2 - ОЦК-ГЦК-ГПУ-Тi

Таблица 1.1. Расчетные ячейки системы Ti–H с ОЦК структурой

Система	Расчетные ячейки системы Ti–H ОЦК	
	О-междоузлия	Т-междоузлия

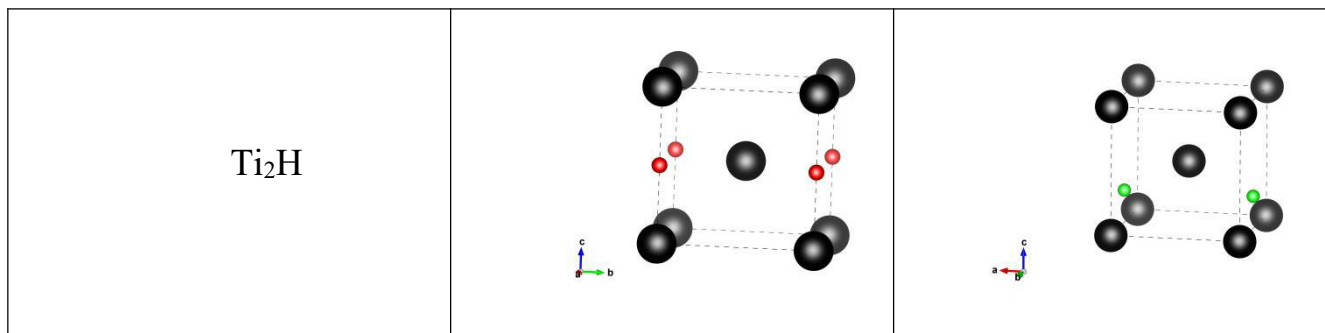


Таблица 1.2. Расчетные ячейки системы Ti-H с ГЦК структурой

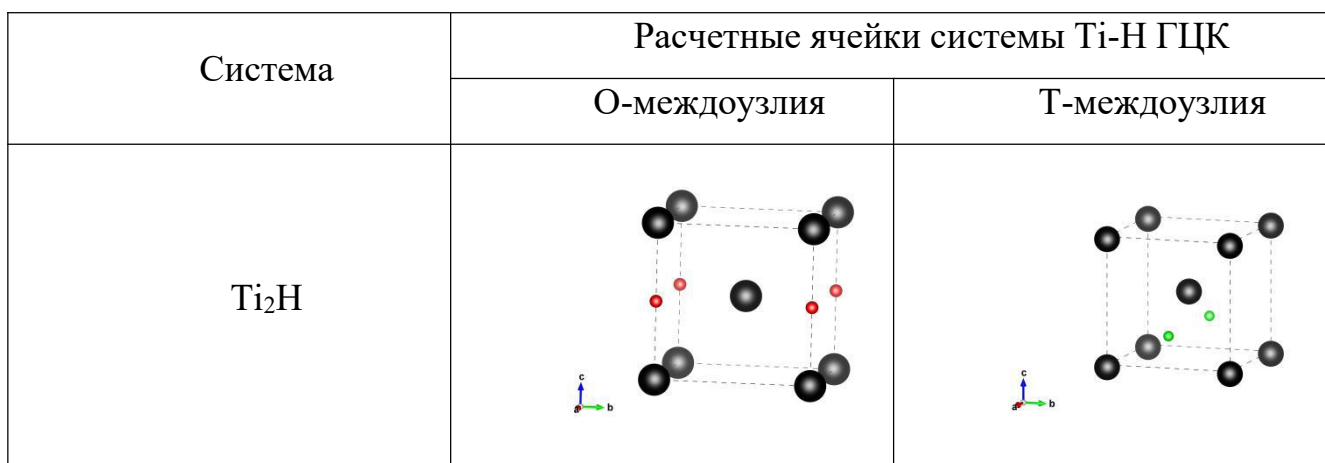
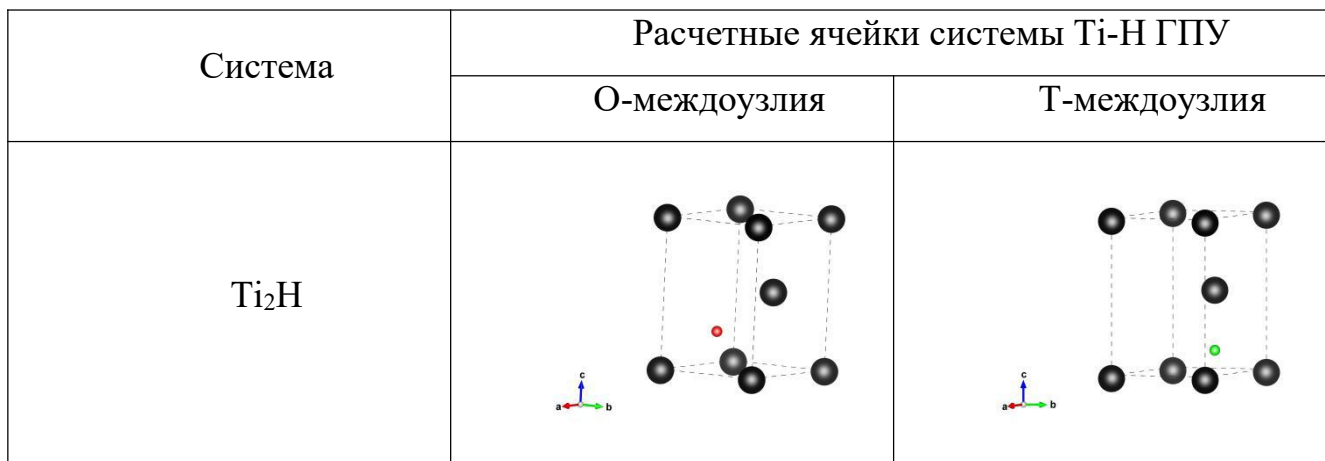


Таблица 1.3. Расчетные ячейки системы Ti-H с ГПУ структурой



Глава II Методика расчета

Зонная теория является основой теорией твердого тела. Определяя энергетический уровень электрона в твердом теле, мы в принципе можем объяснить многие основные физические свойства твердого тела. Поскольку реальное твердое тело является сложным, для фактической обработки необходимы некоторые приближения и упрощения. По адиабатическому приближению движение ядра в твердом теле можно рассматривать отдельно от движения электрона. Однако многоэлектронное движение все еще трудно решить, поэтому развитая для этой цели теория функционала плотности настолько строга, насколько это возможно, чтобы преобразовать многоэлектронную задачу в одноэлектронную задачу. Наконец, Теорема Блоха значительно упрощает расчет поля потенциального кристалла путем абстрагирования сложной атомной структуры в реальном твердом теле в идеальную решетку с трансляционной симметрией.

2.1 Адиабатическое приближение

2.1.1 Многочастичные системы уравнения Шредингера

$$H\Psi(r, R) = E^H\Psi(r, R) \quad (2.1)$$

r представляет собой совокупность всех электронных координат $\{r_i\}$, а R представляет собой совокупность всех ядерных координат $\{R\}$. В отсутствие внешнего поля гамильтониан включает в себя кинетическую энергию всех частиц в системе (ядра и электроны) и энергию взаимодействия между частицами.

Выразите электрон и ядро как:

$$H = H_e + H_N + H_{e\sim N} \quad (2.2)$$

Где H_e и H_n - энергии каждого из электрона и ядра, которые могут состоять из кинетической энергии и кулоновского взаимодействия между ними

$$H_e(r) = T_e(r) + V_e(r) = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{r_i}^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,i'} \frac{e^2}{|r_i - r_{i'}|}$$

$$H_N(R) = T_N(R) + V_N(R) = -\sum_j \frac{\hbar^2}{2M_j} \nabla_{R_j}^2 + \frac{1}{2} \sum_{j,j'} V_N(R_j - R_{j'})$$
(2.3)

Взаимодействие между электронами и ядрами формально дается как

$$H_{e-N} = \sum_{i,j} V_{e-N}(r_i, R_j)$$
(2.4)

До сих пор было установлено описание твердой нерелятивистской квантовой механики. Необходимо отметить, что число частиц в реальной системе слишком велико. Соответствующее приближение должно быть выполнено в соответствии с различными физическими задачами исследования. Во-первых, обсуждается рациональность рассмотрения разделения движения электронов и движения атома.

2.1.2 Электронное движение и разделение ионов

Исходной точкой для рассмотрения движения электронов и ионов (ядер и внутренних оболочек) отдельно является то, что масса ядер намного больше, чем у электронов, и их скорость перемещения, естественно, намного меньше, чем у электронов. Электроны движутся с большой скоростью, а ионы вибрируют в своем положении равновесия. Электроны могут регулировать состояние во времени в соответствии с медленным изменением положения ионов, а ион сталкивается с средней электронной плотностью. Поэтому, принимая во внимание электронное движение, положение иона без изменений, рассматривая ионную вибрацию, не учитывает распределение электронов в пространстве. Это адиабатическое приближение, предложенное Бон(М. Bohn) и Оппенгеймером(J . E . Oppenheimer), или приближение Бонна-Оппенгеймера(Bohn-Oppenheimer).

Найти часть гамильтониана, связанную с электронными переменными

$$H_{e,R} = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{r_i}^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,i'} \frac{e^2}{|r_i - r_{i'}|} + \sum_{i,j} V_{e-N}(r_i, R_j) \quad (2.5)$$

И множество $\Phi_R(r)$ является уравнением Шредингера

$$H_{e,R} \Phi_R(r) = E_{e,R} \Phi_R(r) \quad (2.6)$$

Решение уравнения Шредингера. Тогда собственное значение Φ группы H записывается как форма разделительной переменной $\Psi(r, R) = \chi(R) \Phi_R(r)$

$$\begin{aligned} H\Psi(r, R) &= -\sum_j \frac{\hbar^2}{2M_j} \nabla_{R_j}^2 \chi(R) \Phi_R(r) + V_N \chi(R) \Phi_R(r) + \chi(R) E_{e,R} \Phi_R(r) \\ &= \Phi_R(r) \left\{ -\sum_j \frac{\hbar^2}{2M_j} \nabla_{R_j}^2 + V_N + E_{e,R} \right\} \chi(R) \\ &\quad - \sum_j \frac{\hbar^2}{2M_j} \{ 2\nabla_{R_j} \chi(R) \nabla_{R_j} \Phi_R(r) + \chi(R) \nabla_{R_j}^2 \Phi_R(r) \} \end{aligned} \quad (2.7)$$

Мы можем игнорировать второй член приведенной выше формулы и по предположению этого приближения выбрать $\chi(R)$ для удовлетворения

$$\left\{ -\sum_j \frac{\hbar^2}{2M_j} \nabla_{R_j}^2 + V_N + E_{e,R} \right\} \chi(R) = E_{TOT} \chi(R) \quad (2.8)$$

Поэтому

$$H\Psi(r, R) = \Phi_R(r) E_{TOT} \chi(R) = E_{TOT} \Psi(r, R) \quad (2.9)$$

Как видно из приведенного выше обсуждения, адиабатическое приближение разрушает твердое тело на две части: электроны, движущиеся в неподвижной решетке, ионы, которые вибрируют в пространстве, где заряд равномерно распределен. Это теоретическое упрощение формирует две основные области теории твердых электронов и динамики решетки, соответственно.

2.2 Функциональная теория локальной плотности

После адиабатического приближения движение твердого электрона становится многоэлектронной задачей в применимом поле потенциала решетки,

которое невозможно решить непосредственно. Основываясь на теореме Хоэнберга-Конна (Hohenberg-Kohn), теория функционала плотности (МДФ) решает проблему многоэлектронного корреляционного обмена, эффективно аппроксимируя локальную плотность и трансформируя многоэлектронную задачу в одноэлектронную задачу. Практическое применение локальной теории функционала плотности может дать лучшие результаты расчетов и имеет широкий спектр приложений. Это мощный инструмент для расчета твердых электронных свойств.

2.2.1 Теорема Hohenberg-Kohn

Основываясь на теореме Hohenberg и Kohn о теории гетерогенного электронного газа, теория функционала плотности (МДФ) основана на теореме о том, что полная энергия неравномерной фермионной системы без спина является единственным функционалом плотности числа частиц ρ (Γ)

$$E = E[\rho] \quad (2.10)$$

Кроме того, энергетическая функция принимает экстремальное значение плотности населения основного состояния при условии, что число частиц является постоянным и равно энергии основного состояния. Кроме того, другие физические свойства основного состояния также являются функционалом ρ (Γ), который однозначно определяется.

В приведенной выше теореме указывается, что плотность числа частиц является основной переменной для определения физических свойств основных состояний многочастичных систем. Полная энергия основного состояния может быть определена с помощью функционального изменения энергии плотности частиц. Однако форма энергетического функционала пока неизвестна. Гамильтониан системы состоит из трех частей

$$H = T + U + V \quad (2.11)$$

В тех случаях, когда член кинетической энергии T и межэлектронный член взаимодействия U являются функциональными числами популяции частиц, U имеет обменное взаимодействие E_{xc} между частицами в виде

$$U[\rho] = \frac{1}{2} \iint dr dr' \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} + E_{xc}[\rho] \quad (2.12)$$

V - частица, на которую воздействует внешнее поле $v(r)$. Из трех форм T $[\rho]$ и $E_{xc}[\rho]$ неизвестны. Кроме того, функция плотности ионов $\rho(r)$ является неопределенной. Эти проблемы будут решены в следующих разделах.

2.2.2 Уравнение Kohn-Sham

Функциональное изменение энергии основано на теореме Hohenber-Kohn

$$\int dr \delta\rho \left[\frac{\delta T[\rho(r)]}{\delta\rho(r)} + v(r) + \int dr' \frac{\rho(r')}{|r-r'|} + \frac{\delta E_{xc}[\rho(r)]}{\delta\rho(r)} \right] = 0 \quad (2.13)$$

В сочетании с тем же числом условий частиц

$$\frac{\delta T[\rho(r)]}{\delta\rho(r)} + v(r) + \int dr' \frac{\rho(r')}{|r-r'|} + \frac{\delta E_{xc}[\rho(r)]}{\delta\rho(r)} = \mu \quad (2.14)$$

μ - множитель Лангеланда. Вышеприведенное уравнение представляет собой форму движения частиц в эффективном поле. Если последние три члена рассматриваются как эффективное потенциальное поле

$$V_{eff}(r) = v(r) + \int dr' \frac{\rho(r')}{|r-r'|} + \frac{\delta E_{xc}[\rho(r)]}{\delta\rho(r)} \quad (2.15)$$

$T[\rho]$ пока неизвестно.

Чтобы решить кинетические энергетические члены взаимодействующих частиц, Kohn и Sham утверждают, что можно предположить, что функцию кинетической энергии $T[\rho]$ можно заменить на функцию кинетической энергии $T_s[\rho]$ взаимодействующих частиц вместо $E_{xc}[\rho]$, потому что $E_{xc}[\rho]$ все еще

неизвестен. Функция плотности состоит из всех занятых одночастичных волновых функций состояния $\psi_i(\mathbf{r})$ в основном состоянии

$$\rho(r) = \sum_{occ} |\psi_i(r)|^2 \quad (2.16)$$

Таким образом,

$$T_s[\rho] = \sum_i \int dr \psi_i^*(r) (-\nabla^2) \psi_i(r) \quad (2.17)$$

Теперь изменение ρ можно заменить вариацией $\psi_i(\mathbf{r})$, множителем Лангеланда на E_i , существует

$$\delta \{E[\rho(r)] - \sum_i E_i [\int dr \psi_i^*(r) \psi_i(r) - 1]\} / \delta \psi_i(r) = 0 \quad (2.18)$$

Таким образом,

$$\{-\nabla^2 + V_{KS}[\rho(r)]\} \psi_i(r) = E_i \psi_i(r) \quad (2.19)$$

Здесь

$$V_{KS}[\rho(r)] = v(r) + V_{Coul}[\rho(r)] + V_{xc}[\rho(r)] = v(r) + \int dr' \frac{\rho(r')}{|r-r'|} + \frac{\delta E_{xc}[\rho(r)]}{\delta \rho(r)} \quad (2.20)$$

Уравнения все вместе называются уравнениями Kohn-Sham. Ядром этого уравнения является подстановка модели невзаимодействующих частиц для соответствующего члена во взаимодействующем гамильтониане и присвоение полной сложности взаимодействующих частиц взаимно-обменной корреляции. Поэтому обмен потенциальным выбором уравнения становится ключом к пониманию уравнения.

Поскольку $\psi_i(\mathbf{r})$ принимает волновую функцию заполнения частиц, теперь E_i интерпретируется как энергия в одночастичной форме. Таким образом, можно получить полную энергию твердого тела

$$E_T = \sum_i E_i - \frac{1}{2} \iint dr dr' \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} + \int dr \rho(r) [\varepsilon_{xc}(r) - V_{xc}(r)] + E_{N-N} \quad (2.21)$$

Здесь E_{N-N} - энергия исходного ядерного движения.

2.2.3 Приближение локальной плотности

До сих пор мы успешно трансформировали свойства основного состояния многоэлектронных систем в эффективные одноэлектронные задачи, формально простые и строгие. Однако, чтобы сделать его действительно значимым, мы должны найти точную и легко выражаемую форму для обмена связанными потенциальными энергетическими функциями.

Взаимозависимости нескольких электронных обменов фактически включают две части: обмен и взаимодействие. Обмен возникает из принципа несовместимости Паули (Pauli). Когда i -й электрон входит в r_1 , электроны с таким же направлением спина уже не могут быть распределены вокруг r_1 , поэтому вокруг r_1 образуется дырка с положительным зарядом, называемым отверстием Ферми. Взаимодействие между ферми-дырками и электронами генерирует энергию обмена. В то же время из-за кулоновского (Coulomb) отталкивания i -электрон не позволяет появляться вокруг него другие антипараллельные спиновые электроны, поэтому происходит другое дырочно-кулоновское отверстие, приводящее к связанному взаимодействию.

Из этого видно, что как обмен, так и корреляция - это роли электронов и всех других электронов в системе и являются общей функцией. Из-за эффекта обмена и ассоциации существование вышеуказанных двух видов отверстий привело к неравномерному распределению фактической плотности электронов. Kohn и Sham предложили приближение локальной плотности (LDA), чтобы получить форму обменной корреляции, которая фактически может быть использована при расчете. Основная идея - использовать локальный функционал $E[\rho(r)]$ вместо фактического обмена релевантностью, поэтому

$$E_{xc}[\rho(r)] = \int dr \rho(r) \varepsilon_{xc}[\rho(r)] \quad (2.22)$$

Форма $\varepsilon_{xc}[\rho(\mathbf{r})]$ получается заранее из некоторых более простых систем с плоскими изменениями электронной плотности, таких как общие атомы и

молекулы, где экспериментальные результаты находятся в хорошем согласии.поэтому

$$V_{cx}[\rho(r)] = \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\delta \rho} \approx \frac{d}{d\rho(r)}(\rho(r)\varepsilon_{cx}[\rho(r)]) \quad (2.23)$$

2.3 Метод FLAPW

2.3.1 Muffin—tin потенциал

1937 г. J.C.Slater предложил Muffin-tin потенциальную . Идея состоит в том, чтобы разделить клетки-предшественники на две области, то есть область атомного шара, которая не пересекается с каждым атомом, а область вне шара. Потенциальная энергия в атомной сфере имеет сферическую симметрию, а внесферическая область принимает постоянную.Правильно выбрав нулевую точку потенциальной энергии, потенциальная энергия вне сферы может быть равна нулю. Это базовая идея для Muffin-tin.

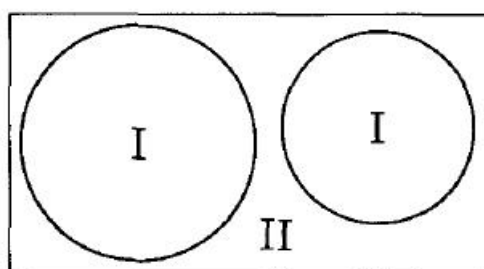


Рисунок 2.1 - Кристалл делится на (I) площадь между атомной сферой и сферой (II)

Поле потенциального Muffin-tin обычно принимает следующий метод. Наибольший вклад в потенциальное поле вокруг атома является атом, плюс потенциальное поле ближайшего соседа в этом пространстве. Влияние соседних атомов и других соседних атомов пренебрежимо мало. В конкретном расчете первый Y_{00} , который является сферической симметрией относительно

начала координат, развивается с использованием потенциальной энергии самого центрального атома и сферической гармонической функции с атомным потенциалом вокруг себя как начала. Функция атома 1 в центре

$$\phi_{lm}(r_1) = f_1(r_1)Y_{lm}(f_1) \quad (2.24)$$

расширяется до всех уровней сферических гармоник с атомом 2 как центр

$$\phi_{lm} = \sum_{l'=0}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{+l'} \alpha(l'm', lm) Y_{l'm'}(f_2) \quad (2.25)$$

Коэффициент расширения

$$\alpha(l'm', lm) = \int dr_2 Y_{l'm'}^*(r_2) \phi_{lm}((r)_1) \quad (2.26)$$

Таким образом, фактический расчет принимает только расширение $l = m = 0$. Потенциальная энергия атома 2 сама по себе включает кулоновские члены и связанные с ними термины. Кулоновские предметы могут быть выражены как

$$V_0(r) = \frac{2Z}{r} - U_0(r) \quad (2.27)$$

Здесь Z - число ядерных зарядов, U_0 - потенциальный вклад электрона, который может быть определен уравнением Пуассона

$$\nabla^2 U_0(r) = -8\pi\rho_0(r) \quad (2.28)$$

$V_{xc}(r)$ в зависимости от обстоятельств выбирают соответствующую форму. В результате, потенциал Muffin-tin в шаре написан

$$V_{MT}(r) = V_0(r) + V_{xc}(r) + \sum_i V_0(a_i | r) \quad (2.29)$$

2.3.2 APW

На основе Muffin-tin можно установить сферически-симметричную форму потенциальной энергии атома расширенной плоской волны (APW) [10, 11]. Решение уравнения KS должно быть следующим:

$$\phi_m(\rho) = Y_{lm}(\rho)R_l(E, \rho) \quad (2.30)$$

Где ρ - угловая часть радиуса шага ρ ; $R_l(E, \rho)$ - радиальная волновая функция, которая удовлетворяет следующему радиальному уравнению

$$-\frac{1}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} \left(\rho^2 \frac{dR_l}{d\rho} \right) + \left[\frac{l(l+1)}{\rho^2} + V_v(\rho) \right] R_l(E^l, \rho) = E^l R_l(E^l, \rho) \quad (2.31)$$

В этой формуле $V_v(\rho)$ является сферическим потенциалом симметрии в v -м шаре, а функция APW в v -м шаре определяется как линейная группа ϕ_{lm}

$$\phi_v(\rho) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} a_{lm} Y_{lm}(\rho) R_l(E^l, \rho) \quad (2.32)$$

Вне сферы потенциальное поле равно нулю, а решение уравнения КС должно иметь форму плоской волны. Функция APW определяется как плоская волна e^{ikr} . Предположим, что вектор вектора v шарового центра r_v , тогда $r = r_v + R$, поэтому в v -шаре вне

$$e^{ik \cdot r} = e^{ik \cdot r_v} e^{ik \cdot \rho} \quad (2.33)$$

Последним фактором будет сферическое гармоническое разложение

$$e^{k \cdot \rho} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} i^l j_l(k\rho) Y_{lm}^*(k) Y_{lm}(\rho) \quad (2.34)$$

Где k и ρ - угловые части k и ρ , а $j_l(k\rho)$ - функция Бесселя уровня l . На поверхности сферы $\rho = \rho_v$ и в соответствии с непрерывным условием волновой функции в разных областях коэффициент a_{lm}

$$a_{lm} = 4\pi e^{ik \cdot r_v} i^l Y_{lm}^*(k) j_l(k\rho) / R_l(E^l, \rho_v) \quad (2.35)$$

Таким образом, функция APW

Выражение функции APW - это неограниченное суммирование,

$$\phi(k, r) = \begin{cases} 4\pi e^{ik \cdot r_v} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} Y_{lm}^*(\hat{k}) Y_{lm}(\hat{\rho}) R_l(E^l, \rho_v) & (\rho \leq \rho_v) \\ e^{ik \cdot r} & (\rho \geq \rho_v) \end{cases} \quad (2.36)$$

фактическая операция в соответствии с точностью фронта для получения достаточного количества предметов. Кроме того, функция APW связана с энергией E' .

Основываясь на потенциале Muffin-tin, кристаллическая волновая функция в уравнении KS (k, r) расширяется с помощью вышеуказанной функции APW.

$$\psi(k, r) = \sum_{i=1}^M c_i \phi_i(k, r) \quad (2.37)$$

$\psi(k, r) = \Phi(k+k_i, r)$ - базисная функция APW, K_i - вектор обратной решетки, c_i - коэффициент расширения, а M - количество базисных функций, выбранных в конкретном расчете. Решить уравнение KS, используя вышеуказанный метод, называется методом APW.

Через процесс выбора функции APW мы видим, что метод APW имеет теоретические трудности. (i) Энергия E' неявна в функции APW, что приводит к повышенной сложности решения, (ii) когда радиальный узел падает в Muffin. Сферическая функция APW будет казаться сингулярной, когда она находится на сферической поверхности; (iii) Производная базисной функции является разрывной на сферической поверхности. Метод LAPW, разработанный на основе этого метода, преодолевает эти трудности и обеспечивает более удобную основу для добавления эффектов асферической симметрии в потенциальные функции.

2.3.3 LAPW

Уже известно выше, что функция APW содержит (E') термы и параметр энергии E в ней не определен. Предполагается, что $E' = E + \delta$, а E - предварительно выбранное значение энергии, поэтому

$$R_l(E') = R_l(E + \delta) = R_l(E) + \delta \dot{R}_l(E) + O(\delta^2) \quad (2.38)$$

В приведенном выше уравнении $R_l(E)$ - значение производной энергии радиальной волновой функции R в точке E . R_l можно получить, решая следующее уравнение.

$$\left\{ -\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} + V(\rho) - E_l \right\} \rho \dot{R}_l = \rho R_l \quad (2.39)$$

Уравнение можно получить, просто найдя производную радиального уравнения.

Сумма производных энергии может быть добавлена к базовой функции APW, так что неопределенный параметр E' становится отклоненным значением энергии E . Это дает форму базовой функции LAPW.

$$\phi(k, r) = \begin{cases} \sum_{lm} [a_{lm} R_l(E) + b_{lm} \dot{R}_l(E)] Y_{lm}(\hat{\rho}) & (\rho \leq \rho_v) \\ \Omega_c^{-1/2} e^{ik \cdot r} & (\rho \geq \rho_v) \end{cases} \quad (2.40)$$

Для разных l E может выбирать разные значения, обычно выбранные вблизи центра полосы со значением. Где Q_c - исходный объем ячейки. Коэффициенты a_{lm} и b_{lm} определяются условием непрерывности базисных функций на сфере и их производных также непрерывны.

$$\begin{aligned} a_{lm} &= 4\pi \Omega_c^{-1/2} \rho_v^2 i^l [j_l'(k\rho_v) \dot{R}_l(E_l, \rho_v) - j_l(k\rho_v) \dot{R}_l(E_l, \rho_v)] Y_{lm}^*(\hat{k}), \\ b_{lm} &= 4\pi \Omega_c^{-1/2} \rho_v^2 i^l [j_l(k\rho_v) \dot{R}_l(E_l, \rho_v) - j_l'(k\rho_v) \dot{R}_l(E_l, \rho_v)] Y_{lm}^*(\hat{k}). \end{aligned} \quad (2.41)$$

Таким образом. Естественно, он удовлетворяет непрерывным и выводимым условиям базисных функций на границах шара, и уже нет никаких факторов, которые могли бы сделать знаменатель нулевым, исключая, таким образом, возможные особенности уравнения продолжительности.

После предыдущей подготовки уравнения KS теперь могут быть решены. Сделать

$$\begin{aligned} K_l &= k + K_i \\ \phi_i &= \phi(k_i, \rho) \end{aligned} \quad (2.42)$$

K_1 - вектор решетки осей. Таким образом, монокристаллическая кристаллическая волновая функция в уравнении KS может быть записана как линейная комбинация базисных функций LAPW

$$\psi = \sum_i c_i \phi_i \quad (2.43)$$

Вариацией уравнения

$$\{-\nabla^2 + V_{KS}[\rho(r)]\}\psi_i(r) = E_i \psi_i(r) \quad (2.44)$$

можно получить уравнение :

$$\det|H_{ij} - ES_{ij}| = 0 \quad (2.45)$$

Здесь

$$\begin{aligned} H_{ij} &= \int d^3r \phi^*(k_i, r) H \phi(k_j, r) \\ S_{ij} &= \int d^3r \phi^*(k_i, r) \phi(k_j, r) \end{aligned} \quad (2.46)$$

Подставляя Φ , которое определяется базисной функцией, в уравнение, мы можем решить уравнение по матричному методу.

По сравнению с методом APW, расчет полосы LAPW, очевидно, намного проще. В настоящее время речь идет о том, как точно выбрать плату параметров энергии и сколько ошибок может быть вызвано. Из

$$R_l(E') = R_l(E + \delta) = R_l(E) + \delta \dot{R}_l(E) + O(\delta^2) \quad (2.47)$$

идно, что погрешность радиальной волновой функции, вызванной выбранной головой, равна $O(\delta^2)$, то полученная энергетическая ошибка должна быть $O(\delta^4)$, которая является бесконечно малой величиной более высокого порядка. Поэтому функция LAPW дает хороший результат вычисления диапазона в большом диапазоне энергий. В реальных расчетах для всех энергетических диапазонов выбирается только один набор E_l [12, 13, 14].

2.3.4 FLAPW

Метод LAPW основан на модели потенциала Muffin—tin. Это потенциальное поле является хорошим приближением к металлу плотноупакованной структуры, но для открытых структур, которые не плотно упакованы, таких как полупроводники, поверхности, тонкие пленки, низкоразмерные материалы, использовать эту модель сомнительно. E. Wimmer др. предложили метод для улучшения ограничения потенциальной формы. Метод вычисления после этой коррекции называется методом Full-potential LAPW (FLAPW). Основная идея заключается в том, что заряды в атомной сфере влияют на потенциальное поле в сфере через его мультипольный момент, поэтому истинный заряд заменяется псевдозарядкой в шаре с тем же самым мультипольным моментом, что и реальный заряд. Полная плотность заряда представлена суммой плотности заряда межсферной области и плотностью псевдозарядки мягкого изменения. Решение уравнения длины волны может получить потенциальное поле на сфере и сфере. Тогда, используя истинную плотность заряда в сфере и потенциальное поле на сфере, полученную в качестве граничного условия, простое гармоническое распространение потенциального поля в сфере может быть получено с использованием метода функции Грина [15, 16, 17].

Метод FLAPW является более вычислительным, чем метод LAPW (обычно около 25%), но он может иметь дело с различными системами в принципе, включая поверхностную, тонкую пленку, низкоразмерную систему и т. Д.

Глава III Результаты и обсуждение

3.1 Атомная структура чистого Ti (Ti2 и Ti16).

Чтобы сравнить с другими системами и проверить рациональность параметров, использованных в расчете, мы сначала рассчитали чистый кристалл Ti. Изменение атомной энергии в кристалле с объемом элементарной ячейки приведено на рисунке 1. В работе были выполнены самосогласованные расчеты полной энергии основного состояния чистого Ti для ГПУ-, ГЦК-, ОЦК-решеток. На рисунке 1 представлена объемная зависимость энергии основного состояния для всех ГПУ, ОЦК, ГЦК-Ti.

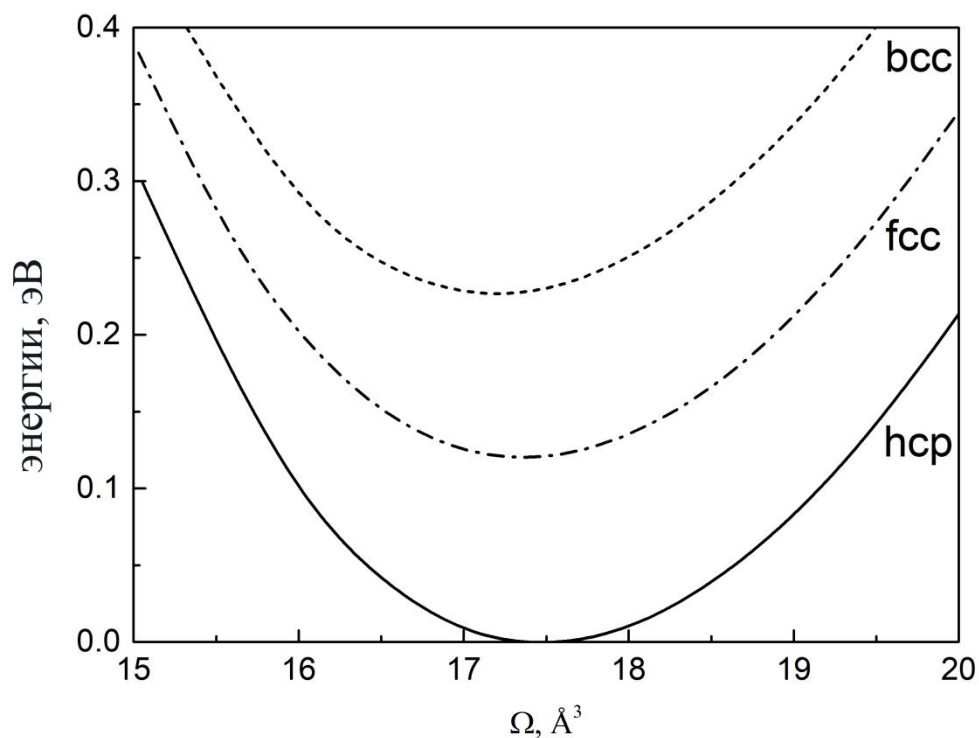


Рисунок 3.1 - Зависимость полной энергии от объема расчетной ячейки ГПУ-, ГЦК-, ОЦК- Ti, точка отсчета принято значение - поной энергии ГПУ структуры титана.

Из рисунка следует, что ГПУ структура титана имеет наименьшее значение полной энергии с равновесным объёмом $\Omega = 17.56 \text{ \AA}^3$. Видно, что

ОЦК структуре титана соответствует меньший равновесный объём равный 17.15 \AA^3 .

В таблице 3.1 представлены параметры решеток ГПУ-, ГЦК-,ОЦК-структур чистого Ti. Из таблицы следует, что результаты наших расчет хорошо согласуется с расчетами других авторов и экспериментальными данными.

Таблица 3.1. Параметры решеток ГПУ-, ГЦК-,ОЦК-структур чистого Ti.

структура				
	Наш расчёт		Расчеты других авторов [18]	Эксп.[19]
	$a, \text{ \AA}$	$c, \text{ \AA}$	$a, \text{ \AA}$	$a, \text{ \AA}$
ГПУ	2.94	4.69	2.94	2.95
ГЦК	4,10	4,10	—	—
ОЦК	3,25	3,25	3.28	3.28

3.2 Параметры решетки в системе Ti–H

Чтобы исследовать влияние водородных примесей на различные структуры титановых водородных систем, мы рассчитали октаэдрическую и тетраэдрическую координацию постоянных решетки ГПУ, ГЦК и ОЦК с атомами водорода, соответственно. Результаты расчетов приведены в таблице 3.1, 3.2 и 3.3 Кроме того, экспериментальные параметры решетки различных фаз Ti–H и другие расчётные параметры решетки также включены в таблице.

Таблица 3.2. Параметр ГПУ(hcp) решетки системы Ti-H

Система	$a, \text{ \AA}$	$c, \text{ \AA}$
Ti-настоящая работа	2,94	4,69
Другие расчеты	2,94[18]	4,64[18]

Эксперимент	2,95[19]		4,68 [19]	
Ti-H система	О-междоузлия		Т-междоузлия	
	<i>a</i> , Å	<i>c</i> , Å	<i>a</i> , Å	<i>c</i> , Å
Ti ₂ H-настоящая работа	2,97	4,76	3,04	4,86
Ti ₁₆ H-настоящая работа	2,93	4,68	2,93	4,66

Таблица 3.3. Параметры ОЦК(bcc) решетки системы Ti-H

Система	<i>a</i> , Å		<i>c</i> , Å	
Ti ₂ -настоящая работа	3,25		3,25	
Другие расчеты	3,28 [18]		3,28 [18]	
Эксперимент	3,28 [20]		3,28 [20]	
Ti-H система	О-междоузлия		Т-междоузлия	
	<i>a</i> , Å	<i>c</i> , Å	<i>a</i> , Å	<i>c</i> , Å
Ti ₂ H-настоящая работа	3,35	3,35	3,35	3,35
Ti ₁₆ H-настоящая работа	3,27	3,27	3,27	3,27

Таблица 3.4. Параметры ГЦК(fcc) решетки системы Ti-H

Система	<i>a</i> , Å	<i>c</i> , Å
Ti ₂ -настоящая работа	4,10	4,10
Ti-H система	О-междоузлия	Т-междоузлия

	$a, \text{Å}$	$c, \text{Å}$	$a, \text{Å}$	$c, \text{Å}$
Ti ₂ H-настоящая работа	4,17	4,17	4,33	4,33
Ti ₁₆ H-настоящая работа	4,10	4,10	4,12	4,12

В таблице 3.2, 3.3 и 3.4 приведены параметры решетки системы титан-водород, видно, что наши расчеты хорошо согласуются с результатами расчетов и экспериментальными данными других авторов. Это свидетельствует об адекватности используемого метода для расчета атомной и электронной структуры Ti с различными концентрациями водорода.

3.3 Атомная структура системы Ti-H, с концентрацией примеси 33

ат.% и 6.25 ат.%

Мы исследовали устойчивость решеток ГЦК, ОЦК, ГПУ Ti при концентрациях водорода ~ бат. %. На рис. 1 показана корреляция между полной энергией решетки системы Ti₁₆H и объемом каждой элементарной ячейки.

Сравнивая результаты расчета кристаллов Ti-H с различным содержанием водорода, было обнаружено, что чем выше содержание водорода, тем больше искажение решетки и тем больше объем кристалла расширяется, что объясняет проблему ограниченной растворимости водорода в Ti.

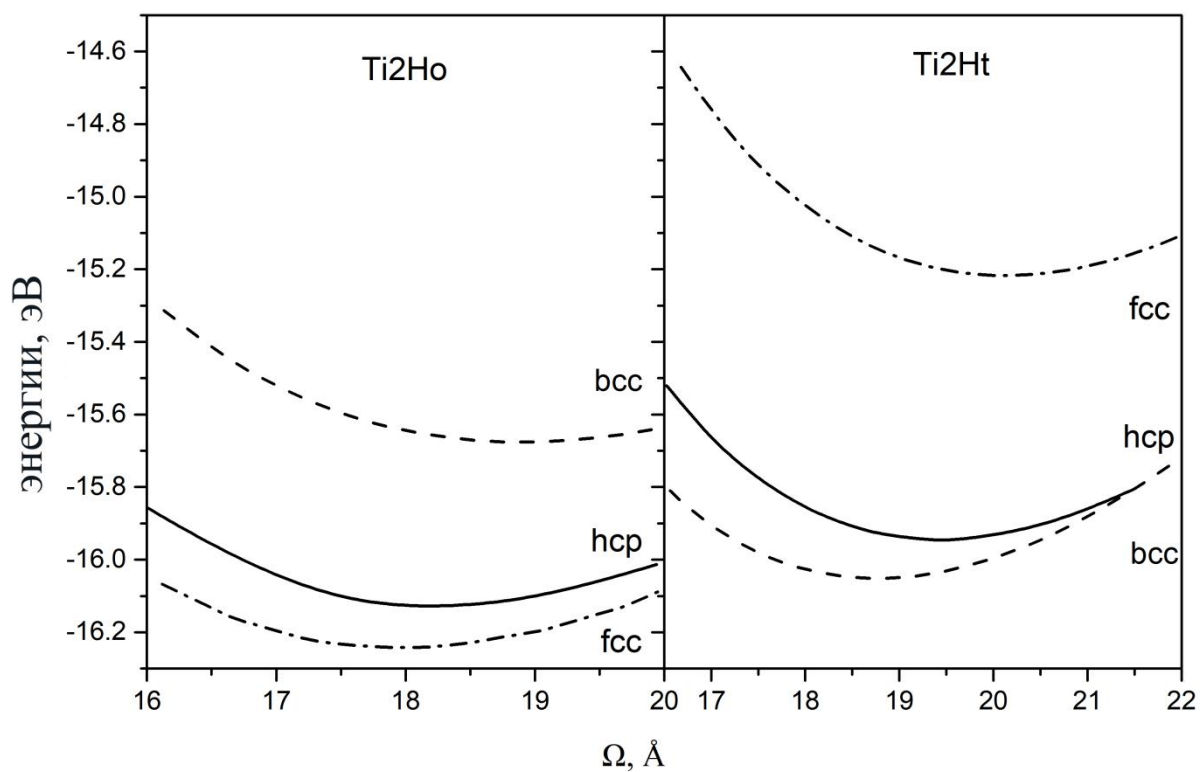


Рисунок 3.2 - Зависимость полной энергии от объема расчетной ячейки ГПУ-, ГЦК-, ОЦК - Ti с ~33ат.% атомом водорода в октаэдрическом и тетраэдрическом междоузлиях, точка отсчета принято значение - поной энергии ГПУ структуры титана.

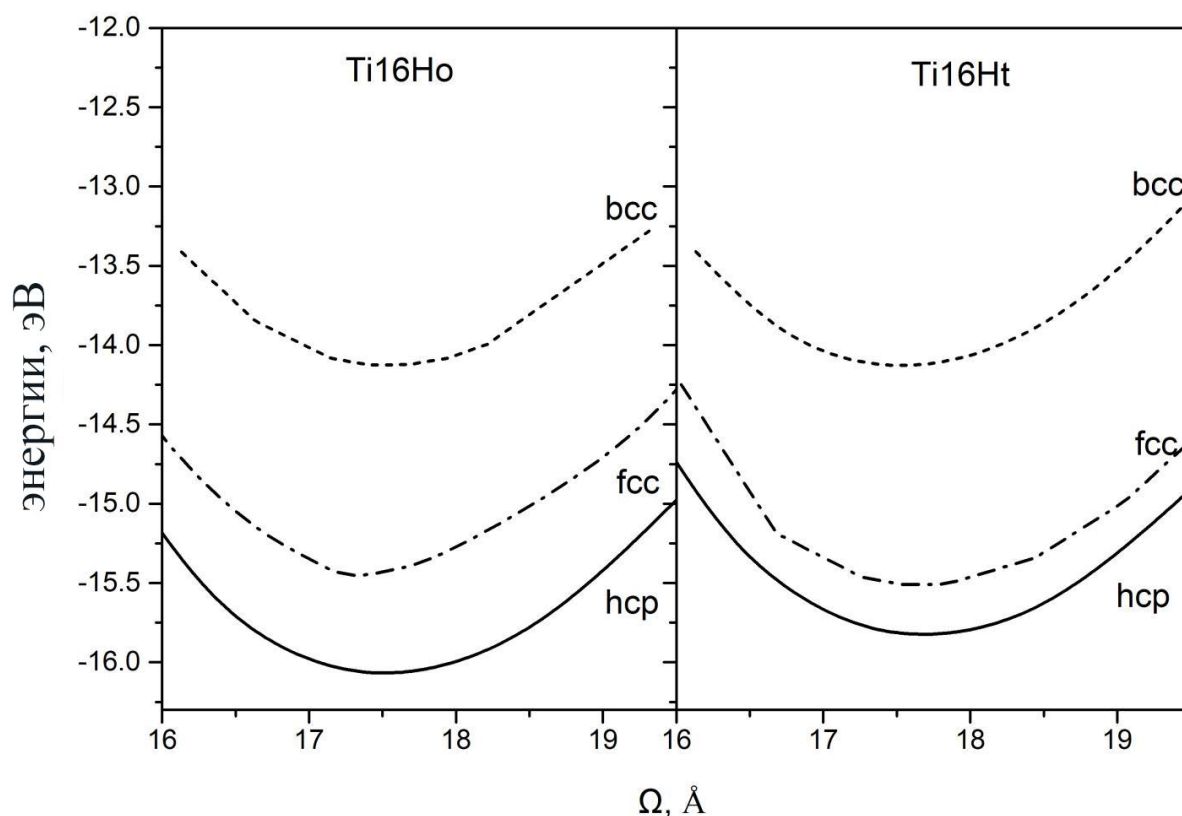


Рисунок 3.3 - Зависимость полной энергии от объема расчетной ячейки ГПУ-, ГЦК-, ОЦК - Ti с ~6ат.% атомом водорода в октаэдрическом и тетраэдрическом междоузлиях, точка отсчета принято значение - поной энергии ГПУ структуры титана.

На рисунках 2 и 3 показана зависимость полной энергии водородной системы титана от объема ОЦК-, ГЦК-, ГПУ- решетки Ti с концентрацией водорода ~33 ат.% и ~6 ат.%, соответственно. Как видно из фиг.2, титана в решетке ГЦК, атом водорода, при стабильных октаэдрических междоузлий, а для ОЦК решетки, атом водорода, устойчивых тетраэдрических. При концентрации водорода ~33 ат.% концентрациях водорода водородная система титана имеет тенденцию превращаться в ГЦК-фазу. ОЦК фаза водородной системы титана нестабильна при нормальной температуре и давлении, поэтому мы не будем это обсуждать. Из рисунка 3 видно, что ГПУ решетка остается стабильной, и водород предпочитает занимать октаэдрическое междоузлие.

3.4 Энергии растворения водорода в решетке титана

В работе была рассчитана энергия растворения водорода в ГПУ, ГЦК и ОЦК решетках титана с тетраэдрическим и октаэдрическим местоположением примеси для двух рассматриваемых концентраций, по формуле:

$$\Delta E = E_{\text{tot}}(\text{Ti}_n\text{H}) - E_{\text{tot}}(\text{Ti}_n) - (1/2) E_{\text{tot}}(\text{H}_2), \quad (3.1)$$

где $E_{\text{tot}}(\text{Ti}_n\text{H})$, $E_{\text{tot}}(\text{Ti}_n)$, $E_{\text{tot}}(\text{H}_2)$ – полные энергии системы Ti_nH , чистого Ti и молекулы водорода, n – число атомов Ti в расчетной ячейке. $E_{\text{tot}}(\text{H}_2) = -31.394$ эВ, полученное из самосогласованного расчета молекулы водорода. Расчитанные значения энергии растворения приведены в таблицах 3.5 и 3.6.

Таблица 3.5. Энергия растворения водорода в Ti_2H

тип решетки	$\Delta E, \text{эВ}$	
	тетраэдрическое междоузлие	Октаэдрическое междоузлие
ГПУ	-0.249	-0.430
ОЦК	-0.581	-0.205
ГЦК	0.361	-0.666

Таблица 3.6. Энергия растворения водорода в Ti_{16}H

тип решетки	$\Delta E, \text{эВ}$	
	тетраэдрическое междоузлие	октаэдрическое междоузлие
ГПУ	-0.126	-0.365
ОЦК	0.186	0.215
ГЦК	1.574	1.573

Из таблиц видно, что величина ΔE имеет как отрицательное, так и положительное значение. Отрицательное значение ΔE означает, что водород может растворяться в решетке Ti при нормальных условиях. Из таблицы видно, что октаэдрическая координационная для ГЦК-структуры (~33 ат.% водорода) титана наименее растворима во всех кристаллических решетках, это свидетельствует о том, что водород стабилизирует ГЦК структуру металла и предпочитает занимать октаэдрическое междоузлие в решетке. Также, из таблицы, следует, что при концентрации водорода ~6 ат.% ГПУ решетка остается стабильной, и водород предпочитает занимать октаэдрическоемеждоузлие. Эти результаты хорошо коррелируют с расчетами полной энергии.

3.5 Избыточный объем

В работе был рассчитан избыточный объем водорода в ГПУ, ГЦК и ОЦК решетках титана по формуле:

$$\Delta\Omega = \Omega (Ti_nH) - \Omega (Ti_n), \quad (3.2)$$

где $\Omega (Ti_nH)$, $\Omega (Ti_n)$ – объем системы Ti_nH и чистого Ti, соответственно, n – число атомов Ti в расчетной ячейке. Расчитанные значения избыточного объема, приходящегося на элементарную ячейку, приведены в таблицах 3.7 и 3.8.

Таблица 3.7. Избыточный объем, вносимый атомом H (~33 ат.%) в решетку Ti

тип решетки	$\Delta\Omega/\text{яч}, \text{\AA}^3$	
	тетраэдрическое междоузлие	октаэдрическое междоузлие
ГПУ	3.81	1.37
ОЦК	3.21	3.21
ГЦК	6.15	1.77

Таблица 3.8. Избыточный объем, вносимый атомом Н (~6 ат.%)
в решетку Ti

тип решетки	$\Delta\Omega/\text{яч}, \text{\AA}^3$	
	тетраэдрическое междоузлие	октаэдрическое междоузлие
ГПУ	0.524	0.00
ОЦК	0.522	0.522
ГЦК	0.584	0.00

Из таблицы 3.7 видно, что водород (~33 ат.%), растворяясь в октаэдрическом междоузлии ГПУ, ГЦК решетках Ti вносит меньший объем, чем в тетраэдрическом междоузлии. Из таблицы 3.8 следует, что водород (~6 ат.%), растворяясь в октаэдрическом междоузлии ГПУ и ГЦК решетках титана, не вносит избыточного объема. Отметим, что величина $\Delta\Omega$, вносимого атомом водорода в ОЦК решетку металла при растворении в окта- и тетра-порах имеет одинаковое значение, для двух рассмотренных концентраций примеси.

3.6 Электронная плотность состояний

Мы изучали влияние водородных примесей на электронную структуру титана.

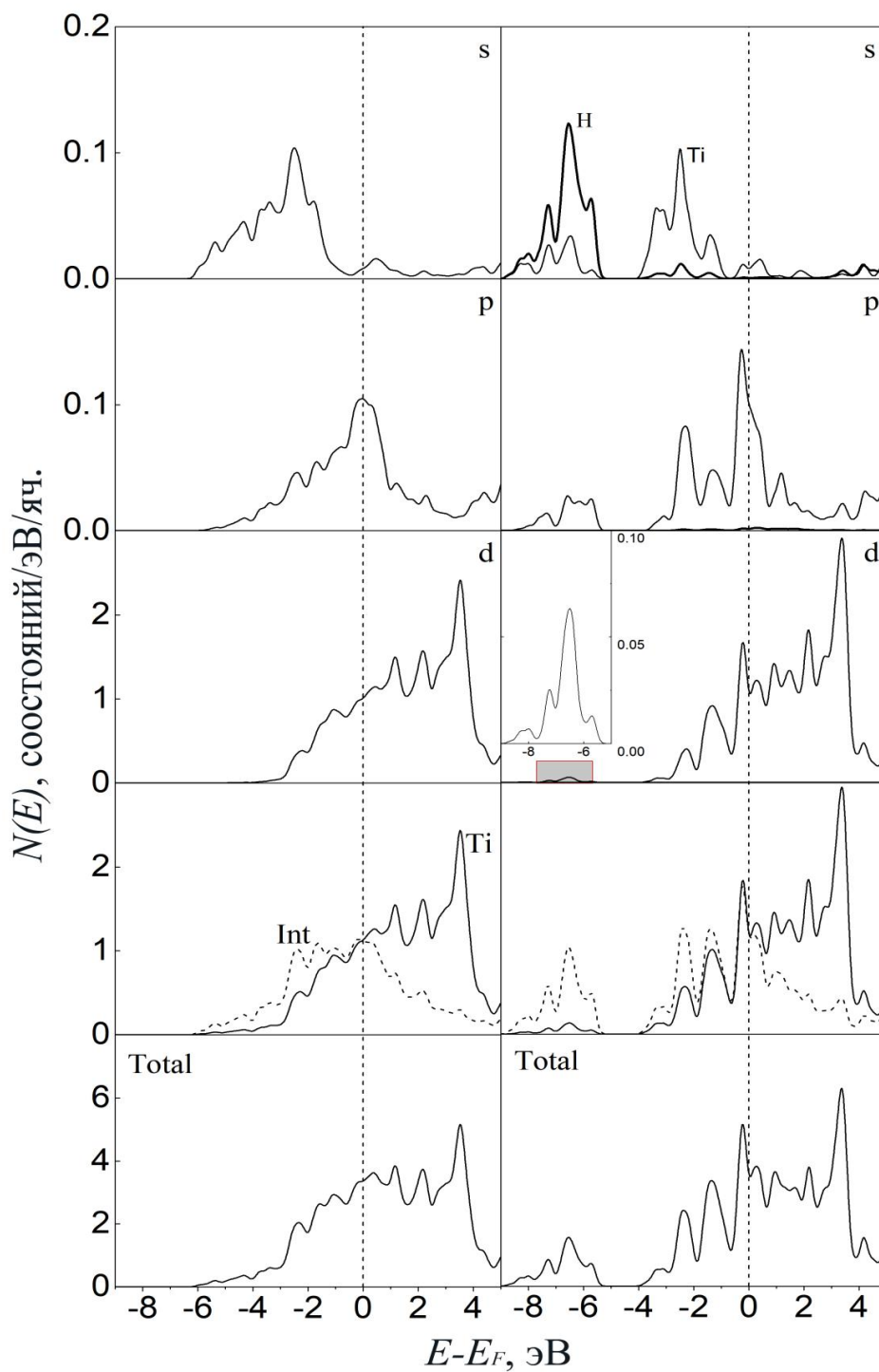


Рисунок 3.6 - Плотность электронных состояний $N(E)$ чистого Ti и системы Ti-H (33 ат.%) с октаэдрической координацией атомов водорода ГЦК структуры.

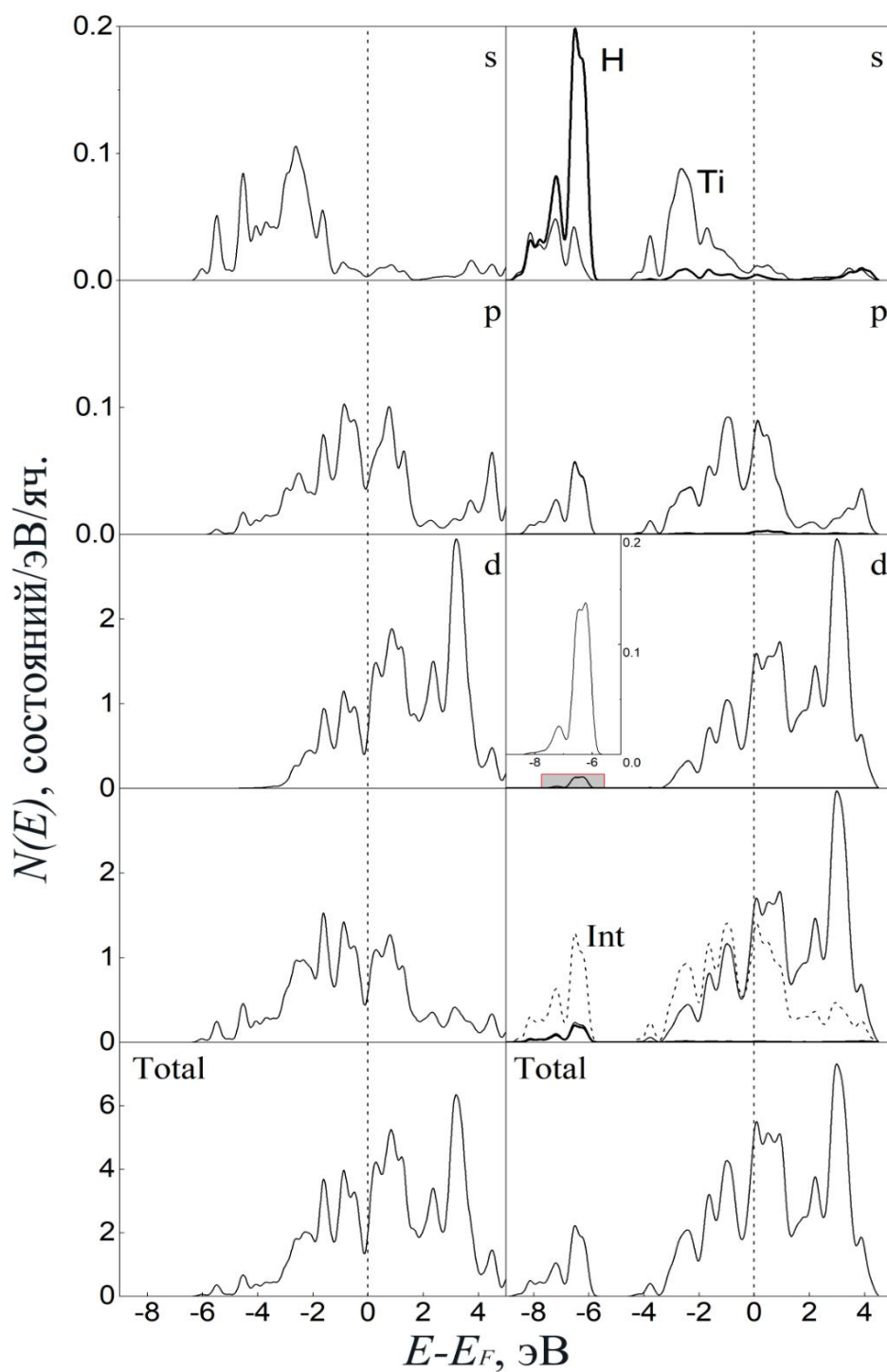


Рисунок 3.7 - Плотность электронных состояний $N(E)$ чистого Ti и системы Ti-H (33 ат.%) с октаэдрической координацией атомов водорода ГПУ структуры.

На рисунках 6 и 7 показана электронная плотность состояний чистого титана (слева) и системы Ti-H (33 ат.%) с октаэдрической координацией атомов водорода (справа) ГЦК и ГПУ структур, соответственно.

Как видно из рисунка 6 и 7, присутствие атомов водорода в титане приводит к увеличению плотности электронных состояний на уровне Ферми. Из анализа ПЭС можно заключить, что растворение водорода ~33 ат % в Ti приводит к увеличению плотности электронных состояний на уровне Ферми на 2,17 и 0,24 состояний/эВ/яч. относительно значения ПЭС для чистого Ti в ГПУ- и ГЦК- решетках, соответственно. Это свидетельствует о более высокой степени металличности системы Ti-H по сравнению с чистым титаном.

Из рисунка также видно, что растворение водорода в ГПУ и ГЦК решетке металла приводит к изменению парциальных ПЭС в МТ-сферах атомов Ti (верхние три панели). Появление электронных состояний s-, d-типа в области энергий (-9,3 — -5,3) и (-9,4 — -4,9) эВ в ГПУ и ГЦК решетках, соответственно, обусловлено проникновением 1s состояния водорода в МТ-сферы титана. Это говорит о том, что в системе Ti-H имеются зоны гибридных состояний $s_H - (s-p-d)_{Ti}$ – типа. Этот факт свидетельствует о появлении химической связи между атомами водорода и металла.

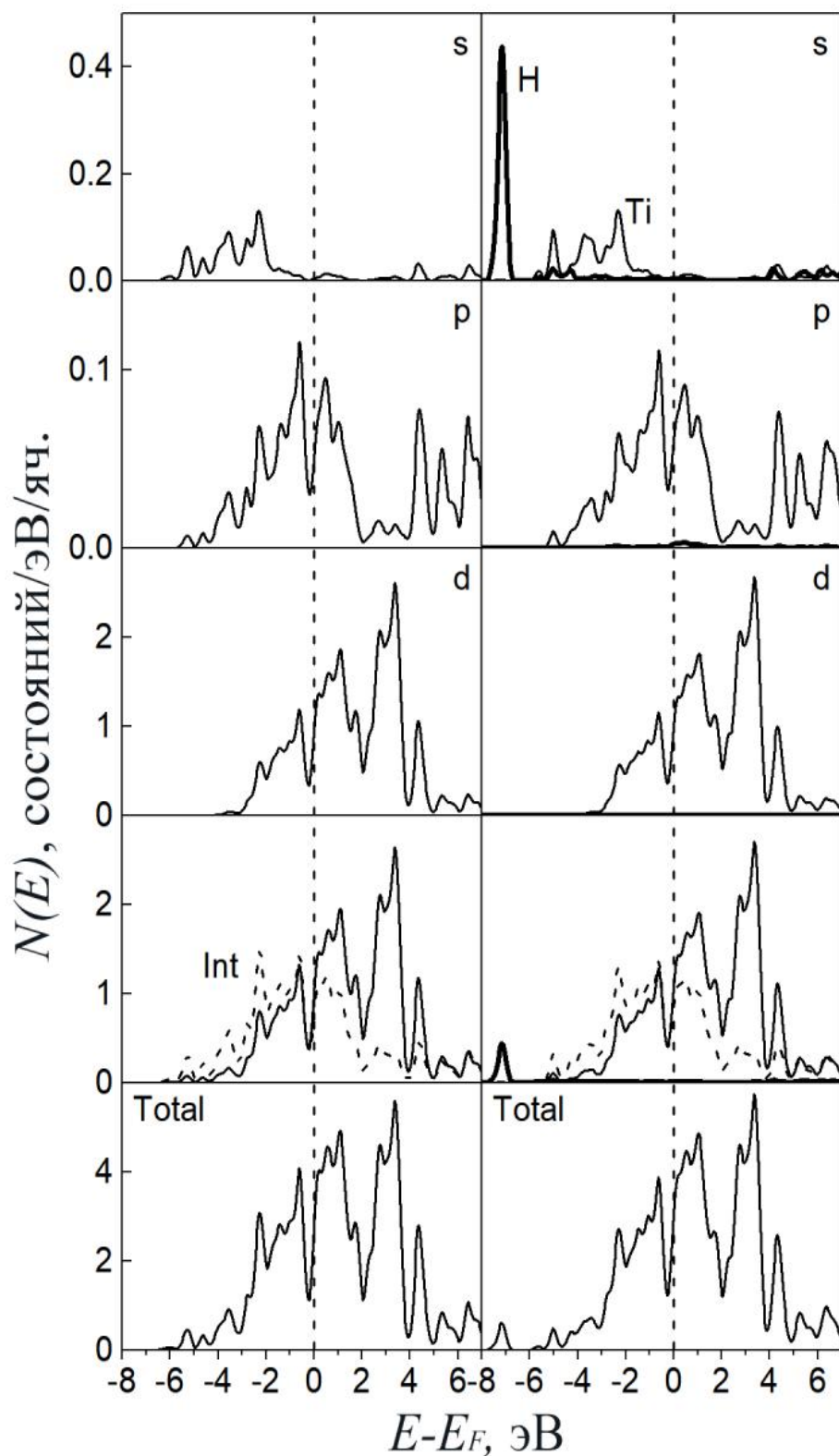


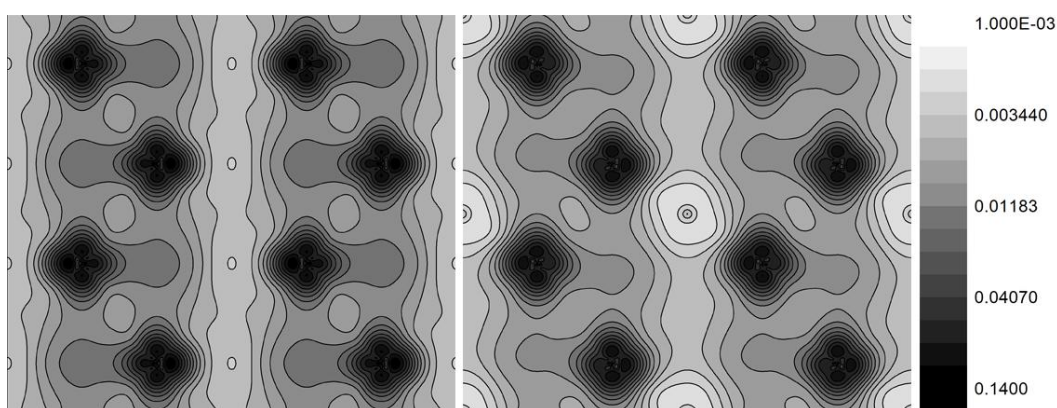
Рисунок 3.8 - Плотность электронных состояний $N(E)$ чистого Ti и системы Ti-H (6 ат.%) с октаэдрической координацией атомов водорода ГЦК структуры.

На рисунках 8 показана электронная плотность состояний чистого титана (слева) и системы Ti-H (6 ат.%) с октаэдрической координацией атомов

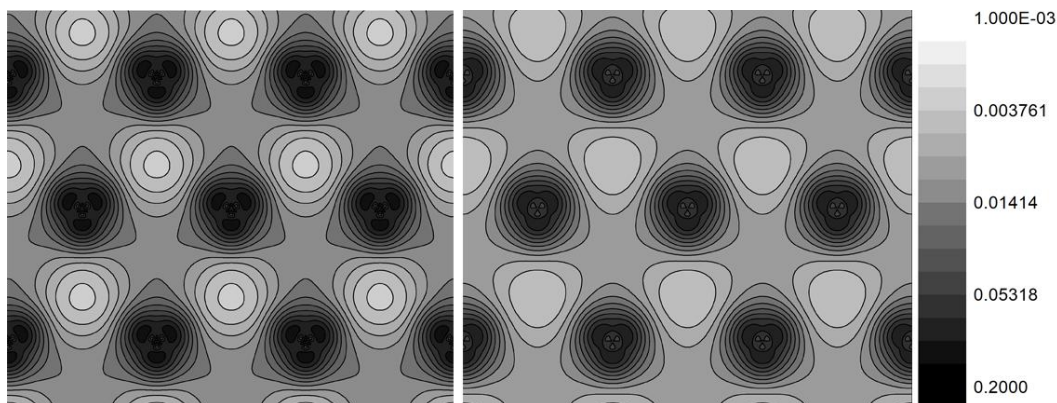
водорода (справа) ГПУ структур. Как видно из рисунка 8, растворение атомов водорода ~ 6 ат % в Ti приводит к увеличению плотности электронных состояний на уровне Ферми на 0,28 состояний/эВ/яч. относительно значения ПЭС для чистого Ti в ГПУ решетке. Из нижней панели видно, что в области энергий $(-8,2 \text{ — } -6,4)$ эВ появляется зона образованная s-состояниями атома водорода. Отметим, что парциальные ПЭС при растворении водорода ~ 6 ат % не содержат пиков p- и d- типов. Это связано с более низким содержанием водорода в решетке металла.

3.7 Зарядовая плотность электронов

Чтобы более точно проанализировать взаимодействие между атомами титана и водорода, мы изучили распределение электронной плотности в ГПУ решетке (плоскости (0001) и $(11\bar{2}0)$ и ГЦК в плоскости (111)).



(a)



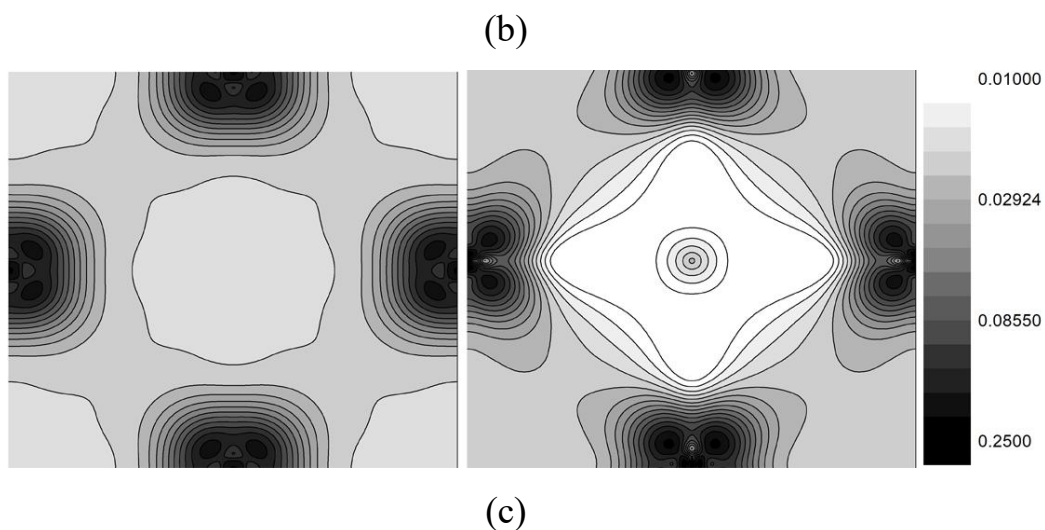


Рисунок 3.9 - Распределение электронной плотности для чистых ГПУ Ti (a) и i-H (b) и для ГЦК систем Ti-H (c) в плоскости (0001), $(11\bar{2}0)$ и (111) проходящей через атомы водорода и титана, для концентрации водорода ~ 33 ат.%. Шкала градации цвета задается в электрон/Бор³.

Анализ рассчитанных распределений зарядовой плотности показал, что попадая в октаэдрическое междоузлия ГПУ решетки Ti, водород вызывает перераспределение электронной плотности металла. Форма изолиний электронной плотности атомов Ti и H на рис. 3.9 указывает на то, что связь Ti-H (~ 33 ат.%) в основном является металлической связью.

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	НР, И	НР – 50%

по тематике		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%
Оформление графического материала	НР, И	НР – 100% И – 80%
Подведение итогов	НР, И	НР – 60% И – 100%

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:

$$T_{к} = \frac{T_{кал}}{T_{кал} - T_{вд} - T_{пд}} = \frac{365}{365 - 52 - 14} = 1,22 \quad (4.4)$$

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

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

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

Рассчитайте время, необходимое для работы на каждом этапе из таблицы 4.2, и сделайте следующие выводы:

Этап	Исполнитель и	Продолжительность работ, дни			Трудоемкость работ по исполнителям чел.- дн.			
					$T_{РД}$		$T_{КД}$	
		t_{min}	t_{max}	$t_{ож}$	НР	И	НР	И
1	2	3	4	5	6	7	8	9
Постановка целей и задач, получение исходных данных	НР	2	4	3	2.75	-	3.34	-
Составление и утверждение ТЗ	НР	3	6	4.2	3.85	-	4.70	-
Подбор и изучение материалов по тематике	НР, И	7	10	4.04	1.85	3.7	2.26	4.5
Разработка календарного плана	НР, И	3	4	3.2	2.93	0.88	3.57	1.07
Обсуждение литературы	НР, И	2	4	3	0.825	2.75	1.01	3.36
Выбор структурной схемы устройства	НР, И	7	14	11.5	10.54	5.27	12.86	6.43
Выбор принципиальной схемы устройства	НР, И	4	10	7	6.42	5.14	7.83	6.27
Обработка данных первопринципных расчетов	НР	30	36	33	24.2	24.2	29.52	29.52

Анализ данных расчета первых принципов	НР, И	10	15	12.2	2.24	11.18	2.73	13.64
Оформление расчетно- пояснительной записки	НР, И	5	7	6	2.2	4.4	2.68	5.37
Оформление графического материала	НР, И	10	15	12.17	11.15	8.9	13.6	10.89
Подведение итогов	НР, И	3	5	4	2.2	3.67	2.68	4.48
Итого:				117.4	71.1	70.1	86.7	85.5

Этап	НР	И	Март			Апрель			Май			Июнь		
			10	20	30	40	50	60	70	80	90	100	110	120
1	3.34	-	■											
2	4.7	-		■										
3	2.26	4.5			■									
4	3.57	1.07				■								
5	1.01	3.36					■							
6	12.86	6.43						■						
7	7.83	6.27							■					
8	29.52	29.52								■				
9	2.73	13.64									■			
10	2.68	5.37										■		
11	13.6	10.89											■	
12	2.68	4.48												■

Таблицы 4.3 Трудозатраты на выполнение проекта

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.
Бумага	Лис.	100	2	200
Интернет	М/бит	6	350	2100
Ручка	Шт.	4	20	80
Тетрадь	Шт.	4	20	80
Итого				2460

С учетом транспортных-заготовительных расходов (5%), эти затраты = $2460 * 1,05 = 2583$ руб.

4.2.2 Расчет заработной платы

$$З_{\text{Пдн}} - \text{т} = \frac{МО}{\frac{298}{12}} = \frac{МО}{24,83}$$

Расчеты затрат на полную заработную плату приведены в таблице 5.6. Затраты времени по каждому исполнителю в рабочих днях с округлением до целого взяты из таблицы 4.3. Для учета в ее составе премий, дополнительной зарплаты и районной надбавки используется следующий ряд коэффициентов:

$$K_{\text{ГР}} = 1,1; K_{\text{доп.ЗП}} = 1,188; K_{\text{р}} = 1,3.$$

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

$$K_{\text{и}} = 1,1 * 1,188 * 1,3 = 1,699.$$

Вышеуказанное значение $K_{\text{доп.ЗП}}$ применяется при шестидневной рабочей неделе, при пятидневной оно равно 1,113, соответственно в этом случае $K_{\text{и}} = 1,62$.

Таблицы 4.3 – Затраты на заработную плату

Исполнитель	Оклад, руб./мес.	Среднедневная ставка, руб./раб.день	Затраты времени, раб.дни	Коэффициент	Фонд з/платы, руб.
НР	26624	887,4	74	1,699	111569.3
И	15470	641,8	74	1,62	76938,9
Итого:					188508.2

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. $C_{\text{соц.}} = C_{\text{зп}} * 0,3$.
Итак, в нашем случае $C_{\text{соц.}} = 183320,5 * 0,3 = 54996,1$ 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 4.4

Таблицы 4.4 - Затраты на электроэнергию

№	Наименование оборудования	Мощность, кВт/час	Время эксплуатации, час	Расход электроэнергии, руб.
11.	Компьютер	0,7	70	281,65
	Итого			281,65

4.2.5 Расчет амортизационных расходов

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

$$C_{\text{ам}} = \frac{N_A * Ц_{\text{об}} * t_{\text{рф}} * n}{F_{\text{д}}}$$

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

$Ц_{\text{об}}$ – балансовая стоимость единицы оборудования с учетом ТЗР.

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

$t_{рф}$ – фактическое время работы оборудования в ходе выполнения проекта, задается исполнителем проекта;

n – число задействованных однотипных единиц оборудования.

Результаты расчета нормы амортизации в таблице 4.5

Таблицы 4.5

Наименование оборудования	Количество (n).	Цена единицы оборудования, руб (Цоб)	Общая стоимость оборудования, руб.	Время работы т _{рф} (ч)	Амортизация руб
Компьютер	2	120000	240000	648	2691
Итого					2691

4.2.6 Непосредственно учитываемые расходы

Стоимость этой части зависит в основном от следующего.

Стоимость посещения научной конференции;

Регистрационный взнос для участия в научной конференции составляет 2000 рублей, а конференция длится 3 дня.

$$C_{HP} = 2000 \text{ руб.}$$

4.2.7 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.

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

$$C_{\text{проч.}} = (2460 + 188508,2 + 54996,1 + 281,65 + 2691 + 2000) \times 0,1 = 25094 \text{ руб.}$$

4.2.8 Полная стоимость исследования

Консолидировать и суммировать расходы по вышеуказанным разделам. Все затраты на этот эксперимент представлены в таблице 4.6 ниже.

Таблицы 4.6 – Смета затрат на разработку проекта

Статья затрат	Условное обозначение	Сумма, руб.
Материалы и покупные изделия	$C_{\text{мат}}$	2460
Основная заработная плата	$C_{\text{зп}}$	188508,2
Отчисления в социальные фонды	$C_{\text{соц}}$	54996,1
Расходы на электроэнергию	$C_{\text{эл.}}$	281,65
Амортизационные отчисления	$C_{\text{ам}}$	2691
Непосредственно учитываемые расходы	$C_{\text{нр}}$	2000
Прочие расходы	$C_{\text{проч}}$	25094
Итого:		276034

Оценка экономической эффективности

Этот эксперимент не имеет промышленного и предназначен значения, только для изучения защиты материалов из сплава титана в ядерных реакторах.

Следовательно, оценка его экономической эффективности невозможна.

Глава V Социальная ответственность

5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

5.1.1 Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя)

правовые нормы трудового законодательства.

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.

5.1.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя.

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.

5.2 Производственная безопасность

5.2.1 Анализ опасных и вредных производственных факторов

Таблица 5.1 - Возможные опасные и вредные факторы

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015)	Этапы работ			Нормативные документы
	Раз работка	Изг отовлен	Экс плуатац	
1.Отклонение показателей микроклимата	+	+	+	Параметры микроклимата устанавливаются СанПиН 2.2.4-548-96[1]. Требования к освещению устанавливаются СП 52.13330.2016 Естественное и искусственное освещение. Актуализированная редакция СНиП 23-05-95*[2]. Повышенное значение напряжения в электрической цепи устанавливаются Оценка условий труда на рабочем месте инженера-электронщика Уфа 2007г[3].
2. Превышение уровня шума		+	+	
3.Отсутствие или недостаток естественного света	+	+	+	
4.Недостаточная освещенность рабочей зоны	+	+	+	
5.Повышенное значение напряжения в электрической цепи, замыкание которой может произойти через тело человека		+		

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;
- Электрическое напряжение;

5.2.2 Анализ вредных и опасных факторов, которые могут возникнуть в лаборатории при проведении исследований.

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. Оптимальные и допустимые метеорологические условия температуры и влажности устанавливаются согласно СанПин 2.2.4.548-96 (Таблица 5.2). 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 кондиционировании воздуха, искусственное освещение и т.п.

Таблица 5.2 – 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 поверхностей, °С	Относительная влажность воздуха, %	Скорость движения воздуха, м/с
Холодный	Ia (до 139)	22-24	21-25	60-40	0,1
Теплый	Ia (до 139)	23-25	22-26	60-40	0,1

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 5.3.

Таблица 5.3 – 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
	2к Гц - 400 кГц	2,5 В/м
Плотность магнитного потока	5 Гц - 2 кГц	250 нТл
	2к Гц - 400 кГц	25 нТл
Напряженность электростатического поля		15 кВ/м

Вредное воздействие ПЭВМ на организм человека проявляется в нагрузке на зрение, заболеваниях 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).

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).

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.

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.

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.

5.3 Экологическая 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.

5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях.

Анализ вероятных ЧС, которые может инициировать объект исследований.

В данном пункте рассмотрены вероятные ЧС, которые могут возникнуть на рабочем месте при проведении исследований, соответствующие мероприятия по их предотвращению и порядка действия в случае их возникновения.

Рассмотрим следующие наиболее вероятные ЧС – пожар и затопления.

5.4.1 пожар

Существуют много возможных факторов, которые могут вызвать пожар, в них включаются перегрев приборов, электрическая утечка и т. д.

По ГОСТ 12.0.003-2015, объекты, пожары на которых могут привести к массовому поражению людей, находящихся на этих объектах, и окружающей территории опасными и вредными производственными факторами, а также опасными факторами пожара и их вторичными проявлениями. [4]

Используемое помещение относится к категории Г согласно пожарной и взрывопожарной опасности, так в данном помещении расположены горючие легко воспламеняемые материалы, также баллоны с газами. Помещение, в котором находится установка, оснащено аварийными выходами, обеспечено средствами пожаротушения, сигнализацией оповещения пожара. План эвакуации представлен на рисунке 5.2.

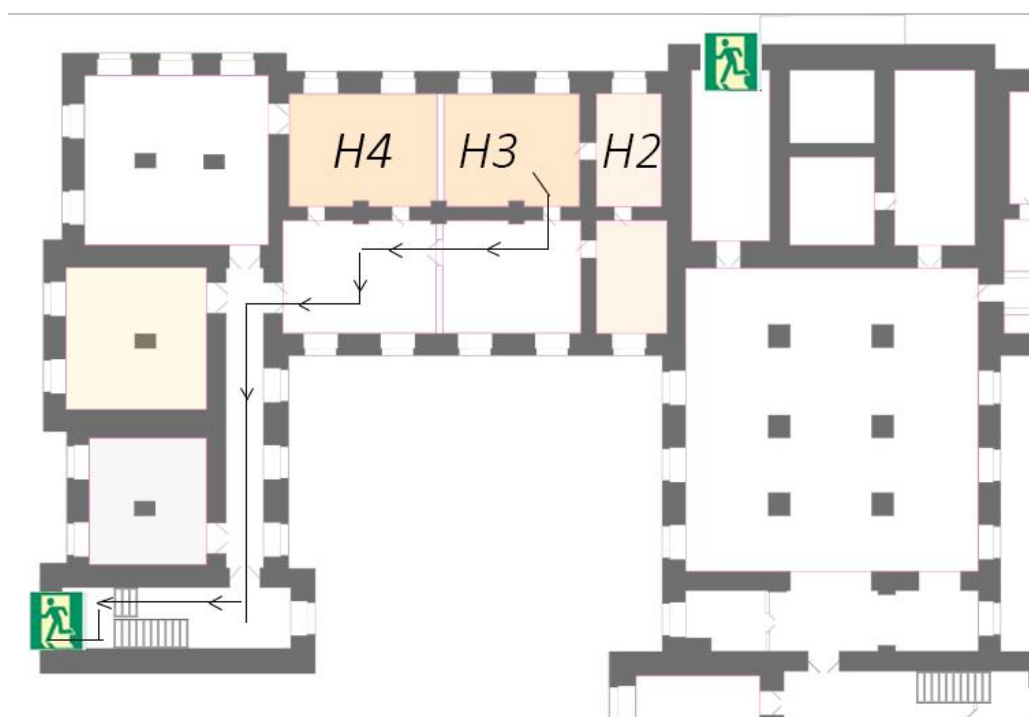


Рисунок 5.1 - План эвакуации рабочих помещений.

Работники допускаются к работе только после прохождения инструктажа о мерах пожарной безопасности, во всех помещениях вывешены таблички с указанием номера телефона вызова пожарной охраны и таблички с направлением пути эвакуации и план эвакуации.

В лаборатории расположены огнетушители порошковые ОП-4(з)- АВСЕ-02 (предназначен для тушения твердых, жидких и газообразных веществ и электроустановок до 1000 вольт).

Причинами возникновения пожара могут быть:

1. Курение в запрещённых местах;
 2. Неправильное хранение возгорающих веществ.
 3. Перегрузка электрических сетей;
 4. Нарушение правил эксплуатации электрического оборудования;
- Нарушение правил пожарной безопасности;

В лаборатории имеются 2 огнетушителя марки ОУ-2 предназначены для тушения загорания различных веществ и материалов, за исключением щелочноземельных элементов, а также электроустановок под напряжением до 1000В. При тушении электроустановок, находящихся под напряжением, не допускается подходить раструб ближе 1 метра до электроустановки и пламени[5].

Эксплуатация электрооборудования без заземления не допускается. Помещения опытно-производственной лаборатории обеспечиваются первичными средствами пожаротушения согласно действующим нормам. Все работники должны уметь пользоваться средствами пожаротушения и уметь оказывать первую помощь при несчастном случае. Не допускается загромождения рабочих мест, проходов, выходов из помещений и здания, доступа к противопожарному оборудованию.

5.4.2 Затопление

Томская область имеет влажный климат с большим количеством осадков. В течение этого возможно возникать наводнения. Лаборатория находится в цокольном этаже, что сильно увеличивает риск затопления[6].

В лаборатории размещено много ценных экспериментальных приборов, образцов и документов. Затопления лаборатории может привести к серьёзному материальному ущербу. Кроме этого, поскольку в лаборатории существует высоковольтное электрическое питание, наводнение может привести к электрической утечке и соответственно привести к жертвам. Более того, утечка химических и радиоактивных веществ из лаборатории может также вызвать серьёзное экологическое загрязнение.

Защитные меры включают в себя размещение прибора на столе на высоте не менее 0,5 м над землёй, строение дренажной системы вокруг лаборатории и добавление водостойких слоёв.

В случае затопления необходимо отключить электричество, правильно размещать опасные химические вещества и радиоактивные материалы, затем эвакуировать от помещения к высокой местности.

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.

Рекомендуемая литература

1. СП 52.13330.2016 Естественное и искусственное освещение. Актуализированная редакция СНиП 23-05-95*
2. Оценка условий труда на рабочем месте инженера-электронщика/Уфа 2007г.
3. Санитарные нормы микроклимата производственных помещений*(утв. Главным государственным санитарным врачом СССР 31 марта 1986 г. № 4088-86)ГОСТ 12.1.004-91 ССБТ. Пожарная безопасность. Общие требования
4. ГОСТ Р 57552-2017 Техника пожарная. Извещатели пожарные мультикритериальные. Общие технические требования и методы испытаний
5. СНиП 2.06.15-85 от 1986-07-01.Инженерная защита территории от затопления и подтопления
6. ГОСТ Р 22.0.03-95 Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Природные чрезвычайные ситуации. Термины и определения

Заключение

Анализ полученных результатов самосогласованного расчета из первых принципов атомной и электронной структуры титана с концентрацией водорода ~ 33 ат.% и ~ 6 ат.% позволяет сделать следующие выводы.

1. Полученные параметры решетки системы Ti-H хорошо согласуются с результатами и экспериментальными данными других авторов, что свидетельствует об адекватности используемого метода для расчета атомной и электронной структуры Ti с различными концентрациями водорода.

2. Показано, что растворение водорода ~ 6 ат.% не изменяет ГПУ структуру металла, характерную при нормальных условиях для чистого материала. Атому водорода в этом случае энергетически наиболее выгодно располагаться в октаэдрическом междоузлии решетки Ti. Присутствие ~ 33 ат.% примеси водорода в Ti стабилизирует ГЦК решетку металла, при этом атомы водорода располагаются в октаэдрических междоузлиях.

3. Вычисленные величины энергии растворения водорода ~ 6 ат.% в ГПУ решетке Ti и ~ 33 ат.% в ГЦК имеют отрицательные значения, что свидетельствует о его растворимости в металле.

4. Установлено, что при растворении примеси ~ 33 ат.% в ГПУ и ГЦК решетках металла, водород, находясь в октаэдрическом междоузлии, вносит избыточный объем $\sim 1.5 \text{ \AA}^3$ на элементарную ячейку. Напротив, растворение водорода ~ 6 ат.% в этих решетках металла не вносит избыточного объема.

5. Установлено, что в системе Ti-H (~ 33 ат.%) в области энергий (-9,3 — -4,9) эВ имеет место перекрытие пиков плотности электронных состояний $1s$ водорода и состояний s -, p - и d - типа Ti, что свидетельствует о их гибридизации, т.е. возникновении связей водорода с титаном. Однако в системе Ti-H (~ 6 ат.%) пиков плотности электронных состояний p - и d - типа Ti в области энергий (-8,2 — -6,4) эВ не наблюдается.

6. Обнаружено, что присутствие водорода в решетке металла приводит к перераспределению валентной зарядовой плотности металла. Характер этого

распределения свидетельствует о наличии, преимущественно, металлической связи между атомами металла и примесью водорода.

Список литературы

1. Desai S . Metallic and ceramic biomaterials: current and future developments[M] / Bidanda B, Bartolo P // Bio-Materials and Prototyping Applications in Medicine – 2008 – P. 1-14.
2. Elias R J, . Fundamental aspects of the Ti – H system: theoretical and experimental behaviour[J] / Corso H L, Gervasoni J L // International Journal of Hydrogen Energy – 2002. – Vol. 27, №1. – P. 91-97.
3. Mueller W.M. Metal hydrides / W. M. Mueller, J. P. Blackledge, G. G. Libowitz // «Elsevier» – 2013. – 790p.
4. Fukai Y. The metal-hydrogen system: basic bulk properties / «Springer Science & Business Media» – 2012. – 359 p.
5. Shih D S. Hydrogen embrittlement of α titanium: in situ TEM studies[J]/Robertson I M, Birnbaum H K// Acta Metallurgica–1988–Vol.36, №1. – P. 111-124.
6. Briant C L. Hydrogen embrittlement of commercial purity titanium[J]/ Wang Z F, Chollocoop N// Corrosion Science – 2002. – Vol.44, №8. – P. 1875-1888.
7. Sakintuna B. Metal hydride materials for solid hydrogen storage: a review / B. Sakintuna, F. Lamari-Darkrim, M. Hirscher // Int. J. Hydrogen Energy – 2007. – Vol. 32, №9. – Pages 1121-1140.
8. Senkov O N. Thermohydrogen processing of titanium alloys[J]/ Froes F H // Int. J. Hydrogen Energy – 1999. – Vol. 24, №6 – P. 565-576.
9. Zielinski A. Hydrogen-enhanced degradation and oxide effects in zirconium alloys for nuclear applications / A. Zielinski, S. Sobieszczyk // Int. J. Hydrogen Energy – 2011. – Vol. 36, №14. – P. 8619-8629.
10. Sjöstedt E. An alternative way of linearizing the augmented plane-wave method[J] / Nordström L, Singh D J. // Solid state communications – 2000. – 114, №1 – P. 15-20.

11. Blaha P. Full-potential, linearized augmented plane wave programs for crystalline systems[J] / Schwarz K, Sorantin P // Computer Physics Communications – 1990. – 59, №2 – P. 399-415.
12. Singh D J, Nordstrom L. Planewaves, Pseudopotentials, and the LAPW method[M]. M.: «Springer Science & Business Media» 2006г.
13. Usuda M. All-electron GW calculation based on the LAPW method: Application to wurtzite ZnO[J] / Hamada N, Kotani T // Phys. Rev. B – 2002. – Vol. 66, №12. – P. 125101.
14. Schwarz K. DFT calculations of solids with LAPW and WIEN2k[J]// Journal of Solid State Chemistry – 2003. – Vol. 176, №2. – P. 319-328.
15. Wimmer E. Full-potential self-consistent linearized-augmented-plane-wave method for calculating the electronic structure of molecules and surfaces: O₂ molecule[J] / Krakauer H, Weinert M // Phys. Rev. B – 1981. – Vol. 24, №2. – P. 864.
16. Weinert M. Total-energy all-electron density functional method for bulk solids and surfaces[J] / Wimmer E, Freeman A J // Phys. Rev. B – 1982. – Vol. 26, №8. – P. 4571.
17. Posternak M. Prediction of electronic interlayer states in graphite and reinterpretation of alkali bands in graphite intercalation compounds[J] / Baldereschi A, Freeman A J // Phys. Rev. L – 1983. – Vol. 50, №10. – P. 761.
18. Xu Q. First-principles investigation of metal-hydride phase stability: The Ti-H system[J] / Van der Ven A // Phys. Rev. B – 1981. – Vol. 2007, №76. – P. 064207.
19. Alberto Gras-Martí. Interaction of Charged Particles and Atoms with Surfaces / Herbert M. Urbassek, Nestor R. Arista, Fernando Flores // M.: «Springer-Verlag Berlin Heidelberg» 1995г.—C.21.
20. Han X. First-principles calculation of crystal structures and energies of Ti-H system[J] / Wang Q, Sun D // CHINESE JOURNAL OF NONFERROUS METALS – 2008. – Vol. 18, №3. – P. 523.