



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

Инженерная школа ядерных технологий

Направление подготовки 03.03.02 Физика

ООП/ОПОП Физика

Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

**ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА БАКАЛАВРА**

Тема работы
Сверхпроводимость ( $\Lambda$ , $V_a$ ) $H_{10}$ под высоким давлением

УДК \_\_\_ 538.945.42-047.37 \_\_\_\_\_

Обучающийся

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б91	Ван Сяоя		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор Отделение эксперименталь ной физики	Никитенков Николай Николаевич	Доктор физико- математически х наук		

**КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:**

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и  
ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН	Верховская Марина Витальевна	к.э.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ООД ШБИП	Сечин А.И.	д.т.н.		

**ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:**

Руководитель ООП/ОПОП, должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Заведующий кафедрой - руководитель отделения на правах кафедры	Лидер А.М.	д.т.н., профессор		

Томск – 2023 г.



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

## ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОСВОЕНИЯ ООП/ОПОП

<b>Код компетенции</b>	<b>Наименование компетенции</b>
<b>Универсальные компетенции</b>	
<b>УК(У)-1</b>	Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач.
<b>УК(У)-2</b>	Способен определять круг задач в рамках поставленной цели и выбирать оптимальные способы их решения, исходя из действующих правовых норм, имеющихся ресурсов и ограничений.
<b>УК(У)-3</b>	Способен осуществлять социальное взаимодействие и реализовать свою роль в команде.
<b>УК(У)-4</b>	Способен осуществлять деловую коммуникацию в устной и письменной формах на государственном и иностранном (-ых) языке.
<b>УК(У)-5</b>	Способен воспринимать межкультурное разнообразие общества в социально-историческом, этическом и философском контекстах.
<b>УК(У)-6</b>	Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни.
<b>УК(У)-7</b>	Способен поддерживать должный уровень физической подготовленности для обеспечения полноценной социальной и профессиональной деятельности.
<b>УК(У)-8</b>	Способен создавать и поддерживать безопасные условия жизнедеятельности, в том числе при возникновении чрезвычайных ситуаций.
<b>УК(У)-9</b>	Способен проявлять предприимчивость в профессиональной деятельности, в т.ч. в рамках разработки коммерчески перспективного продукта на основе научно-технической идеи.
<b>Общепрофессиональные компетенции</b>	
<b>ОПК(У)-1</b>	Способен применять естественно-научные и общеинженерные знания, методы математического анализа и моделирования в инженерной деятельности, связанной с проектированием и конструированием, технологиями производства оптоэлектроники, оптических и оптико-электронных приборов и комплексов
<b>ОПК(У)-2</b>	Способен осуществлять профессиональную деятельность с учетом экономических, экологических, интеллектуально правовых, социальных и других ограничений на всех этапах жизненного цикла технических объектов и процессов
<b>ОПК(У)-3</b>	Способен использовать базовые теоретические знания фундаментальных разделов общей и теоретической физики для решения профессиональных задач.
<b>ОПК(У)-4</b>	Способен понимать сущность и значение информации в развитии современного общества, осознавать опасность и угрозу, возникающие в этом процессе, соблюдать основные требования информационной безопасности.
<b>ОПК(У)-5</b>	Способен использовать основные методы, способы и средства получения, хранения, переработки информации и навыки работы с компьютером как со средством управления информацией.
<b>ОПК(У)-6</b>	Способен решать стандартные задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением

	информационно-коммуникационных технологий и с учетом основных требований информационной безопасности.
<b>ОПК(У)-7</b>	Способен использовать в своей профессиональной деятельности знание иностранного языка.
<b>ОПК(У)-8</b>	Способен критически переосмысливать накопленный опыт, изменять при необходимости направление своей деятельности.
<b>ОПК(У)-9</b>	Способен получить организационно-управленческие навыки при работе в научных группах и других малых коллективах исполнителей.
<b>Профессиональные компетенции</b>	
<b>ПК(У)-1</b>	Способностью использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин
<b>ПК(У)-2</b>	Способностью проводить научные исследования в избранной области экспериментальных и (или) теоретических физических исследований с помощью современной приборной базы (в том числе сложного физического оборудования) и информационных технологий с учетом отечественного и зарубежного опыта
<b>ПК(У)-3</b>	Готовность применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований
<b>ПК(У)-4</b>	Способность применять на практике профессиональные знания и умения, полученные при освоении профильных физических дисциплин
<b>ПК(У)-5</b>	Способность пользоваться современными методами обработки, анализа и синтеза физической информации в избранной области физических исследований
<b>ПК(У)-6</b>	Способность понимать и использовать на практике теоретические основы организации и планирования физических исследований
<b>ПК(У)-7</b>	Способность участвовать в подготовке и составлении научной документации по установленной форме
<b>ПК(У)-8</b>	Способность понимать и применять на практике методы управления в сфере природопользования

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 (ООП/ОПОП) 03.03.02 Физика

Отделение школы (НОЦ) отделение экспериментальной физики

УТВЕРЖДАЮ:  
 Руководитель ООП/ОПОП  
 \_\_\_\_\_ Лидер А.М.  
 (Подпись) (Дата)

### ЗАДАНИЕ

#### на выполнение выпускной квалификационной работы

Обучающийся:

Группа	ФИО
150Б91	Ван Сяоя

Тема работы:

Сверхпроводимость (La, Ba) N <sub>10</sub> под высоким давлением	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	
Срок сдачи обучающимся выполненной работы:	

#### ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p><b>Исходные данные к работе</b>          (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 функционированию (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.)</p>	<p>– серия неупорядоченных сплавов (La, Y)N<sub>10</sub> на основе структуры -LaN<sub>10</sub> с помощью специального метода квазислучайной структуры (SQS).</p>
--	--

<p><b>Перечень разделов пояснительной записки подлежащих исследованию, проектированию и разработке</b> (аналитический обзор литературных источников 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)</p>	<p>– проведение литературного обзора; – моделирование кристаллическую структуру (La<sub>3</sub>Y<sub>1</sub>)H<sub>40</sub>, используя LaH<sub>10</sub> в качестве структурного прототипа; – оптимизирование кристаллическую структуру и рассчитать электронную структуру энергетических зон и плотности состояний при 300; – расчет параметров электроакустической связи (ЕРС) и свойств сверхпроводимости; – обсуждение результатов; – заключение;</p>
<p><b>Перечень графического материала</b> (с точным указанием обязательных чертежей)</p>	
<p><b>Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы</b> (с указанием разделов)</p>	
<p><b>Раздел</b></p>	<p><b>Консультант</b></p>
<p>Социальная ответственность</p>	<p>Сечин А.И.</p>
<p>Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение</p>	<p>Верховская Марина Витальевна</p>
<p><b>Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику</b></p>	

**Задание выдал руководитель:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
<p>Профессор Отделение экспериментальной физики</p>	<p>Никитенков Николай Николаевич</p>	<p>Доктор физико-математических наук</p>		

**Задание принял к исполнению обучающийся:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
<p>150Б91</p>	<p>Ван Сяоя</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 (ООП/ОПОП) 03.03.02 Физика

Уровень образования бакалавриат

Отделение школы (НОЦ) отделение экспериментальной физики

Период выполнения \_\_\_\_\_ (осенний / весенний семестр 2022/2023 учебного года)

### КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН

#### выполнения выпускной квалификационной работы

Обучающийся:

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>
150Б91	Ван Сяоя

Тема работы:

Сверхпроводимость (La, Ba) N <sub>10</sub> под высоким давлением
Срок сдачи обучающимся выполненной работы:

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
01.11.2022	Литературный обзор по теме ВКР	15
30.04.2023	Методы исследования	5
01.06.2023	Результаты экспериментальных исследований. Обработка результатов.	50
01.06.2023	Финансовый менеджмент, ресурс эффективность и ресурсосбережение	15
01.06.2023	Социальная ответственность	15

**СОСТАВИЛ:**

**Руководитель ВКР**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор Отделение экспериментальной физики	Никитенков Николай Николаевич	Доктор физико-математических наук		

**СОГЛАСОВАНО:**

**Руководитель ООП/ОПОП**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Заведующий кафедрой - руководитель отделения на правах кафедры	Лидер А.М.	д.т.н., профессор		

**Обучающийся**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б91	Ван Сяоя		

## РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа с., 11 рис., 18 табл., 43 источников литературы.

**Ключевые слова:** Специальные квазислучайные структурные методы (SQS), тройные соединения с высоким содержанием водорода, первые принципы, высокотемпературная сверхпроводимость.

**Объектом исследования** является серия неупорядоченных сплавов  $(La_3, Y)H_{10}$  на основе структуры  $-LaH_{10}$  с помощью специального метода квазислучайной структуры (SQS) .

**Цель работы** – Создание серии неупорядоченных сплавов с концентрацией 75% La и 25% Y- $(La_3, Y)H_{40}$  на основе структуры  $-LaH_{10}$  специальным методом квазислучайной структуры (SQS) и исследование их сверхпроводимости с точки зрения теоретического моделирования.

**Для достижения цели были поставлены следующие задачи:**

1. Моделировать кристаллическую структуру  $(La_3Y)H_{40}$ , используя  $LaH_{10}$  в качестве структурного прототипа.
2. Оптимизировать кристаллическую и рассчитать электронную структуру при температуре 300 К.
3. Рассчитать параметры электроакустической (фононной) связи и её влияния на сверхпроводимость.

**В результате исследования** установлено, что фаза  $R\bar{m}\bar{3}m - La_3YH_{40}$  кинетически стабильна при 250 и 300 ГПа. Для альтернативного сплава  $(La_{0,75}Y_{0,25})H_{10}$  предсказана температура сверхпроводящего перехода около 309 К ( $\sim +36$  °С) при 250 ГПа и около 295 К ( $\sim +22$  °С) при 300 ГПа; Кинетика альтернативных сплавов  $(La_2Y_2H_{40}, La_3Y_1H_{40}, La_1Y_3H_{40})$  с соотношением атомных номеров La, Y= 1:1, 3:1, 1:3 стабильна при 300 ГПа, и все эти сплавы имеют температуру сверхпроводящего перехода при 300 ГПа примерно выше комнатной температуры.

Экономическая эффективность/значимость работы заключается в теоретическом прогнозе большей экономии ресурсов.



## ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ .....	12
Глава 1. Обзор научно-технической литературы и постановка задачи....	13
1.1 Открытие сверхпроводимости и общепризнанный физический механизм .....	13
1.1.1 Открытие сверхпроводимости.....	13
1.1.2 Общепризнанный физический механизм .....	15
1.1.2.1 Сверхпроводимость.....	15
1.1.2.2 Полностью диамагнитный.....	16
1.1.2.3 Квантование потока.....	17
1.2. Влияние высокого давления на сверхпроводимость.....	18
1.2.1 Структурные фазовые изменения в материалах при высоких давлениях.....	18
1.2.2. Электронные фазовые переходы в материалах при высоких давлениях.....	19
1.2.3 Сверхпроводимость материалов при высоких давлениях .....	19
1.2.4 Значение науки о высоком давлении для исследования сверхпроводимости.....	20
1.3. Сверхпроводящие гидриды.....	21
1.3.1 Бинарные гидриды.....	22
1.3.1.1 $\text{H}_3\text{S}$ .....	23
1.3.1.2 Системе La-H .....	23
1.3.1.3 Системе Y-H.....	25
1.3.2 Троичные гидриды.....	26
Глава 2 Методы прогнозирования свойств материалов.....	27
2.1 Существующие методы компьютерного моделирования. ....	27
2.1.1 CALYPSO .....	28
2.1.2 USPEX .....	29

2.1.3	Аппроксимация потенциала когерентности.....	30
2.2.	Метод случайные структуры особого класса.....	30
2.2.1	Физика, лежащая в основе метода.....	30
2.2.2	Особенности алгоритма.....	33
Глава 3.	Исследовательская часть.....	35
3.1.	Постановка задачи исследования.....	35
3.2	Полученные результаты и их обсуждение .....	36
	Выводы .....	42
4	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсоснабжение .....	45
4.1	SWOT-анализ .....	45
4.2	Определение возможных альтернатив проведения научных исследований .....	47
4.3	Планирование научно-исследовательских работ.....	47
4.3.1	Структура работ в рамках научного исследования .....	47
4.3.2	Определение трудоемкости выполнения работ .....	49
4.3.3	Разработка графика проведения научного исследования .....	50
4.4	Бюджет научно-технического исследования (НТИ) .....	54
4.4.1	Расчет материальных затрат НТИ.....	54
4.4.2	Расчет затрат на оборудование для научно-экспериментальных работ.....	55
4.4.3	Основная заработная плата исполнителей темы.....	55
4.4.4	Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления) .....	58
4.4.5	Накладные расходы .....	59
4.4.6.	Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта .....	59

4.5	Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования..	60
5	Социальная ответственность .....	66
5.1	Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности .	66
5.1.1	Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя) правовые нормы трудового законодательства.....	66
5.1.2	Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя.....	67
5.2	Производственная безопасность .....	67
5.2.1.1	Анализ показателей шума.....	68
5.2.1.2	Анализ показателей микроклимата.....	70
5.2.1.3	Анализ электробезопасности.....	72
5.2.1.4	Анализ показателей освещенности рабочей зоны.....	73
5.3	Экологическая безопасность.....	74
5.4	Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....	76
	Заключение.....	81
	список использованных источников.....	82

## ВВЕДЕНИЕ

В 2021 году экспериментальные результаты XRD Дмитрия В. Семенка и др. показали, что  $(La_x, Y_{1-x})H_{10}$  является кубической решеткой, но, согласно теоретическим прогнозам, фаза  $R\bar{3}m - LaYH_{20}$  с атомным соотношением 1:1 La, Y является наиболее стабильной в диапазоне температурном диапазоне 0-2000K при 200 ГПа.; фаза  $Cmmm - La_3YH_{40}$  с атомным соотношением 3:1 La, Y является стабильной в диапазоне 0~2000K при 200 ГПа. Поэтому, основываясь на существующих экспериментальных результатах, мы стремимся использовать структуру  $Fm\bar{3}m - LaH_{10}$  в качестве структурного прототипа и с помощью программного обеспечения SQS, разработанного на основе специальной теории квазислучайных структур, создать серию неупорядоченных сплавов с концентрацией металла 75% La и 25% Y- $(La_3, Y)H_{40}$ , а затем смоделировать их сверхпроводимость с точки зрения теоретического моделирования.

Целью данной работы является создание серии неупорядоченных сплавов с концентрацией 75% La и 25% Y- $(La_3, Y)H_{40}$  на основе структуры -  $LaH_{10}$  специальным методом квазислучайной структуры (SQS) и исследование их сверхпроводимости с точки зрения теоретического моделирования. Для достижения цели были поставлены следующие задачи:

1. Моделировать кристаллическую структуру  $(La_3, Y)H_{40}$ , используя  $LaH_{10}$  в качестве структурного прототипа.

2. Оптимизировать кристаллическую структуру и рассчитать электронную структуру энергетических зон и плотности состояний при 300 К

3. Расчет параметров электроакустической связи (ЕРС) и свойств сверхпроводимости.

## **Глава 1. Обзор научно-технической литературы и постановка задачи**

Сверхпроводящие материалы обладают уникальными физическими свойствами, такими как нулевое сопротивление и полный диамагнетизм, а физики давно мечтали поднять критическую температуру сверхпроводников до комнатной. Высокое давление относится ко всем условиям давления, которые выше нормального давления. Научные исследования высокого давления в основном касаются структуры и физико-химических свойств веществ под высоким давлением. Высокое давление считается эффективным средством получения новых материалов. После длительного периода теоретических и экспериментальных исследований, под высоким давлением, богатые водородом гидриды наиболее охотно становятся сверхпроводниками комнатной температуры.

Эта глава в основном знакомит с исследовательской основой, статусом исследований

### **1.1 Открытие сверхпроводимости и общепризнанный физический механизм**

#### **1.1.1 Открытие сверхпроводимости**

В 1911 году голландский физик Оннес обнаружил, что при 4,2 К металлическая ртуть обладает сверхпроводимостью. Это открытие заложило основу для того, чтобы ученые смогли найти материалы для высокотемпературных сверхпроводников. До сих пор было обнаружено более ста сверхпроводящих материалов. Первоначально ученые изучали простые металлические сверхпроводники, такие как Nb, при атмосферном давлении, с критической температурой 9 К, а затем изучали карбиды и нитриды переходных металлов со сверхпроводящими сплавами и структурами NaCl, но критическая температура перехода ( $T_c$ ) не превышала 30 К[5]. Только в 1986 году немецкий физик Й. Г. Беднорц и швейцарский физик К. А. Мюллер обнаружили, что перовскитные структуры  $\text{LaBaCuO}_4$  могут иметь

сверхпроводящие температуры перехода до 35 К [6], что вызвало серию высокотемпературных сверхпроводниковых открытий. Беднорц и Мюллер получили Нобелевскую премию по физике в 1987 году за открытие высокотемпературных сверхпроводников оксида меди [7]. В 1987 году был изготовлен иттрий-бариевый медно-кислородный сверхпроводящий материал со сверхпроводящей температурой перехода около 90 К [8,9], который превысил «температурный барьер» жидкого азота (77 К), что позволило ученым провести исследования в температурной области жидкого азота. Впоследствии критическая температура сверхпроводящего материала продолжает повышаться. В 1994 году такие ученые, как Чжу Цзинву, обнаружили, что критическая температура  $T_c$  сверхпроводящих материалов может повышаться до 164 К [10] в условиях высокого давления, что является самым высоким рекордом для высокотемпературных сверхпроводников оксида меди. Однако медно-кислородные сверхпроводники являются керамическими материалами, с плохой ударной вязкостью и сложными в обработке, что делает высокотемпературные сверхпроводники оксида меди широко не используемыми.

В 2008 году профессор Хидео Нисино из Японии обнаружил, что температура сверхпроводящего перехода материала  $\text{LaO}_{1-x}\text{F}_x\text{FeAs}$  составляет 26 К [11]. Применяя давление,  $T_c$  системы может быть увеличен до 43 К, что вдохновило новую волну исследований высокотемпературной сверхпроводимости на основе железа. Китайские ученые также внесли важный вклад в высокотемпературные сверхпроводники на основе железа: например, заменив  $\text{La}^{3+}$  на  $\text{Sm}^{3+}$  или  $\text{Ce}^{3+}$  с меньшим радиусом ионов, сверхпроводники с  $T_c$  выше 40 К были получены при нормальном давлении [12], нарушив предельную температуру Макмиллана. В начале 21 века J. Akimitsu et al. обнаружили, что простое соединение металла  $\text{MgB}_2$  обладает сверхпроводимостью с  $T_c$  до 39 К [13]. Установлено, что сверхпроводящий механизм  $\text{MgB}_2$  по-прежнему согласуется с механизмом связи электроакустической интенсивности BCS.

С 1994 года, когда давление было применено к высокотемпературным сверхпроводникам оксида меди для достижения температуры сверхпроводящего перехода 164 К, побить этот рекорд не удалось после почти 30 лет исследований. Пока ученые, наконец, не сделали прорывное открытие в богатых водородом материалах, высоковольтный сверхпроводник  $\text{H}_3\text{S}$  имеет сверхпроводимость 203 К [14-16]; Кроме того, критическая температура сверхпроводимости гидрида металла  $\text{LaH}_{10}$  достигает 250-260 К [14-16], что сокращает—величину сверхпроводящей температуры при комнатной температуре примерно до 30 К. На рисунке 1 показана эволюция типичных систем сверхпроводящих материалов и температур перехода с течением времени.

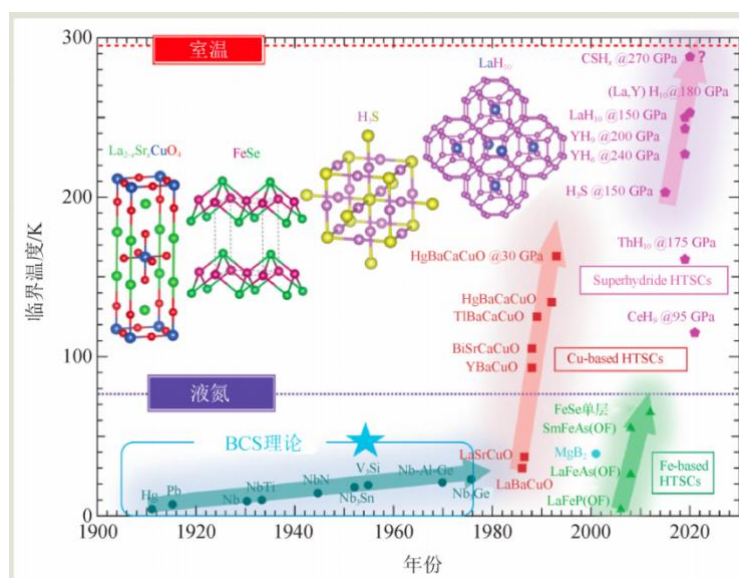


Рисунок 1 — Эволюция типичных систем сверхпроводящих материалов и температур перехода с течением времени

## 1.1.2 Общепризнанный физический механизм

### 1.1.2.1 Сверхпроводимость

Сверхпроводимость — это особый материал с нулевым сопротивлением и совершенным диамагнетизмом при определенной температуре. Сопротивление проводника уменьшается с падением температуры, поэтому ученые догадываются, что при абсолютной температуре, когда чистота

металла тестируемого материала чрезвычайно высока, сопротивление проводника будет стремиться к нулю. Однако из-за технических ограничений только в начале 20-го века Каммерлинг Оннес [1] открыл эру сверхпроводящих материалов после совершенствования технологии жидкого водорода и жидкого гелия. В 1911 году голландский физик Х. К. Оннес обнаружил, что при падении температуры до 4,2 К металлическая ртуть переходит в новое состояние, в котором его сопротивление постоянному току полностью исчезает [1], и он называет это явление внезапным падением сопротивления до нуля при определенной критической температуре ( $T_c$ ) сверхпроводимости, как показано на рисунке 1(a). Оннес получил Нобелевскую премию по физике в 1913 году за исследования сверхпроводимости низкотемпературной материи [2].

### **1.1.2.2 Полностью диамагнитный**

В 1933 году Мейснер обнаружил, что сверхпроводники имеют и другую характеристику, полный диамагнетизм [3] явление, называемое «эффектом Мейснера», то есть, когда материал находится в сверхпроводящем состоянии, он полностью отклоняет магнитное поле, через него не проходят внутренние линии магнитной индукции, а интенсивность внутренней магнитной индукции равна нулю. (как показано на рисунке 2b), «полный» означает, что порядок двух операций может быть изменен путем понижения температуры для достижения сверхпроводящего состояния и применения магнитного поля. Причина полного диамагнетизма заключается в том, что поверхность сверхпроводника может генерировать антимангнитный сверхпроводящий ток без потерь, который генерирует магнитное поле, которое компенсирует магнитное поле внутри сверхпроводника.

Свойство нулевого сопротивления сверхпроводников хорошо известно, но сверхпроводники не эквивалентны идеальным проводникам. Отталкиваясь от электромагнитной теории, можно сделать следующий вывод: если идеальный проводник сначала охладить до низкой температуры, а затем



поместить в магнитное поле, то магнитное поле внутри идеального проводника равно нулю. Однако, если идеальный проводник сначала поместить в магнитное поле, а затем охладить до низкой температуры, магнитное поле внутри идеального проводника не равно нулю. Для сверхпроводников две операции понижения температуры до достижения сверхпроводящего состояния и приложения магнитного поля, независимо от их порядка, магнитное поле внутри сверхпроводника всегда равно нулю, что является ядром полного диамагнетизма и ключом к различению сверхпроводника от идеального проводника.

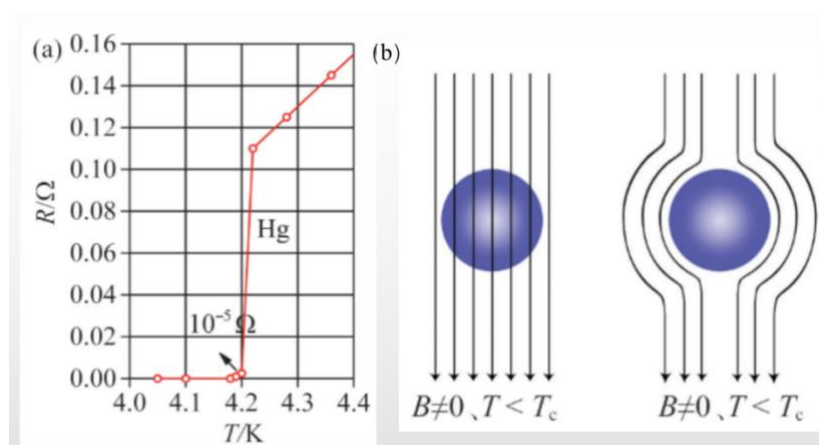


Рисунок 2— Схематическая диаграмма двух основных свойств сверхпроводников (a) явление нулевого сопротивления, примером которого является ртуть; (b) полная устойчивость к магнетизму. Сравнение идеального проводника и сверхпроводника

### 1.1.2.3 Квантование потока

Квантование потока, также известное как эффект Джозефсона, относится к явлению, что, когда изоляционный слой между двумя слоями сверхпроводника тонкий до атомного размера, электронная пара может проходить через изоляционный слой для генерации туннельного тока, то есть структура сверхпроводника (сверхпроводника)-изолятора-сверхпроводника может производить сверхпроводящий ток. Эффект Джозефсона делится на эффект DC Джозефсона и эффект AC Джозефсона. Эффект Джозефсона постоянного тока — это когда пары электронов могут образовывать сверхпроводящий ток через изолирующий слой. Эффект AC Джозефсона

относится к тому, когда приложенное напряжение постоянного тока достигает определенного уровня, помимо наличия постоянного сверхпроводящего тока, существует также переменный ток, сверхпроводник помещается в магнитное поле, магнитное поле проникает в изоляционный слой, и максимальный сверхпроводящий ток сверхпроводящего перехода регулярно изменяется с размером внешнего магнитного поля.

## **1.2. Влияние высокого давления на сверхпроводимость**

Прогнозирование структуры кристаллов при высоком давлении — это исследование отбора и сравнения стабильных структур, существующих в кристаллах в условиях давления, превышающего атмосферное. Высокое давление, как экстремальное условие, может эффективно изменять объем кристалла, а также расстояние между атомами, что, в свою очередь, приводит к изменениям в атомной структуре и вызывает структурные фазовые переходы.

### **1.2.1 Структурные фазовые изменения в материалах при высоких давлениях**

Фазовые превращения веществ под высоким давлением известны как фазовые превращения высокого давления и широко распространены при высоких давлениях. Давление, как важная термодинамическая переменная, может успешно изменять атомы, электроны и структуру продукта без внесения примесей и повреждений, вызывая тем самым фазовое изменение вещества. Суть фазового перехода при высоком давлении заключается в сжатии вещества под внешним давлением, сокращении молекулярного или атомного расстояния, возможном перекрытии и гибридизации электронных орбиталей, что затем вызывает изменение свободной энергии системы и, что в итоге, приводит к изменению кристаллической и электронной структуры вещества, превращая исходную фазу в более стабильную фазовую структуру при высоком давлении. Фазовые переходы при высоком давлении имеют большое значение для разработки перспективных материалов, поэтому

изучение фазовых переходов в материалах при высоких давлениях становится все более важным.

### **1.2.2. Электронные фазовые переходы в материалах при высоких давлениях**

Электронные фазовые переходы при высоком давлении в основном обусловлены индуцированной давлением неустойчивостью электронного состояния. При уменьшении параметров решетки под высоким давлением расстояние между атомами уменьшается, что приводит к непрерывному процессу интеркаляции или деинтеркаляции энергетических полос. В ходе этого процесса происходит непрерывное уменьшение расстояния между верхней частью валентной полосы и нижней частью полосы проводимости. Когда зазор между полосами уменьшается с увеличением давления до полного отсутствия зазора, материал превращается в металл. То есть при увеличении давления материал всегда претерпевает фазовый переход изолятор-металл, полупроводник-металл.

### **1.2.3 Сверхпроводимость материалов при высоких давлениях**

В условиях высокого давления электронная структура материалов изменяется под воздействием давления, что в свою очередь вызывает появление сверхпроводящих фаз. Многие элементы, которые не являются сверхпроводящими при атмосферном давлении, проявляют сверхпроводимость при высоких давлениях.

H		<div style="display: flex; align-items: center; gap: 10px;"> <div style="border: 1px solid black; padding: 2px;"> <math>T_c^M</math> (in K)  <math>L_f^{20.0/45}</math> </div> <div style="border: 1px solid black; padding: 2px;"> <math>P^*</math> (in GPa) for <math>T_c^M</math> </div> <div style="display: flex; gap: 5px;"> <div style="width: 10px; height: 10px; background-color: #cccccc; border: 1px solid black;"></div> SC at ambient pressure           <div style="width: 10px; height: 10px; background-color: #add8e6; border: 1px solid black;"></div> SC only at high pressure         </div> </div>																He													
$Li^{20.0/48}$	$Be^{0.026}$																	$B^{11.0/250}$	C	N	$O^{0.6/300}$	F	Ne								
Na	Mg																	$Al^{1.1}$	$Si^{8.2/15}$	$P^{13.0/30}$	$S^{1.3/190}$	Cl	Ar								
K	$Ca^{29.0/216}$	$Sc^{19.6/106}$	$Ti^{3.4/56}$	$V^{16.5/120}$	Cr	Mn	$Fe^{2.1/21}$	Co	Ni	Cu	$Zn^{0.9}$	$Ga^{7.0}$	$Ge^{5.4/12}$	$As^{2.4/32}$	$Se^{8.0/150}$	$Br^{1.4/100}$	Kr														
Rb	$Sr^{7.0/50}$	$Y^{19.5/115}$	$Zr^{11.0/30}$	$Nb^{5.9/30}$	$Mo^{0.9}$	$Tc^{7.8}$	$Ru^{0.5}$	$Rh^{0.3/10}$	Pd	Ag	$Cd^{0.5}$	$In^{3.4}$	$Sn^{5.3/11}$	$Sb^{3.9/25}$	$Te^{1.5/35}$	$I^{1.2/25}$	Xe														
$Cs^{1.3/12}$	$Ba^{5.0/18}$	$La^{13.0/15}$	$Hf^{8.6/62}$	$Ta^{4.5/41}$	$W^{0.012}$	$Re^{1.4}$	$Os^{0.7}$	$Ir^{0.1}$	Pt	Au	$Hg^{4.2}$	$Tl^{2.4}$	$Pb^{7.2}$	$Bi^{8.5/9}$	Po	At	Rn														
Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn																				
																		$Ce^{1.7/5}$	Pr	Nd	Pm	Sm	$Eu^{2.8/142}$	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	$Yb^{4.6/179}$	$Lu^{1.4/174}$
																		$Th^{1.4}$	$Pa^{1.4}$	$U^{2.4/1.2}$	Np	Pu	$Am^{2.2/6}$	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

Рисунок 3. Периодическая таблица сверхпроводящих элементов, где элементы со сверхпроводящими свойствами при атмосферном давлении выделены серым цветом, а элементы со сверхпроводящими свойствами при высоком давлении - синим.

### 1.2.4 Значение науки о высоком давлении для исследования сверхпроводимости

Экстремальное высокое давление может эффективно регулировать кристаллическую и электронную структуру конденсированного вещества, что делает его важным инструментом для повышения температуры сверхпроводимости ( $T_c$ ) сверхпроводников и для получения новых сверхпроводников. Существует два основных типа сверхпроводников: обычные сверхпроводники и нетрадиционные сверхпроводники. Если при атмосферном давлении существует 30 одноэлементных сверхпроводников, то при высоких давлениях число одноэлементных сверхпроводников увеличивается до 53, то есть почти на 80% [22]. Высокие давления обеспечивают два основных пути стабилизации новых материалов. Во-первых, уменьшение межатомных расстояний при сжатии перераспределяет валентные электроны и изменяет структуру связей, эффективно модулируя относительную энергетическую стабильность возможных структур на поверхностях потенциальной энергии и генерируя новые фазы высокого давления через структурные переходы. Типичным примером является

индуцированный давлением фазовый переход гибридного графита  $sp^2$  в гибридный алмаз  $sp^3$  [23]. Давление также может стабилизировать соединения и фазы путем перестройки энергий внешних атомных орбиталей, вызывая перенос заряда между различными орбиталями, что может изменить химические свойства атомов за счет появления новых состояний окисления и привести к образованию нетрадиционных соединений, недоступных при атмосферном давлении. Например, щелочные металлы Cs при высоких давлениях проявляют состояния окисления +3 и +5, а не состояние +1, наблюдаемое при атмосферном давлении, о чем свидетельствуют нетрадиционные соединения  $CsF_3$  и  $CsF_5$  предсказанные при высоких давлениях, и типичные  $CsF_9$ , известные при атмосферном давлении. Таким образом, давление является эффективным инструментом для разработки новых материалов, недоступных при давлении окружающей среды.

### 1.3. Сверхпроводящие гидриды

О сверхпроводимости при комнатной температуре человечество мечтало с момента открытия сверхпроводимости. Теория BCS - первая микроскопическая теория, успешно объясняющая явление сверхпроводимости, т. е. теория доказывает, что обычная сверхпроводимость возникает в результате электрон-фононной связи. Благодаря высокой температуре Дебая и сильной электрон-фононной связи металлический водород, как ожидается, проявит замечательные сверхпроводящие свойства. Теоретические расчеты показали, что металлизация водорода может происходить только при очень высоких давлениях свыше 450 ГПа, чего трудно достичь экспериментально. Позже Ashcroft сделал дальнейшие теоретические предсказания о высокотемпературной сверхпроводимости металлического водорода, предположив, что богатые водородом соединения могут иметь более высокие критические температуры для сверхпроводимости при более низких давлениях. На сегодняшний день теоретически и экспериментально исследованы бинарные гидриды почти всех элементов периодической таблицы. Среди них, как и ожидал Ashcroft, большое количество богатых

водородом соединений, по прогнозам, покажет высокотемпературную сверхпроводимость выше  $200\text{ }^{\circ}\text{C}$ , таких как  $\text{H}_3\text{S}$ [24],  $\text{YH}_6$ [25],  $\text{LaH}_{10}$ [26] и так далее. Примечательно, что высокая сверхпроводимость  $\text{H}_3\text{S}$ ,  $\text{LaH}_{10}$  и  $\text{YH}_9$  была экспериментально подтверждена. В соответствии с химической связью или конфигурацией водорода гидриды с высоким содержанием  $T_c$  можно разделить на четыре категории: (а) ковалентные гидриды, представленные  $\text{H}_3\text{S}$  (б) клеточными клатратами, представленными  $\text{LaH}_{10}$  (с) сложенным сотовым слоем H, представленным  $\text{SrH}_{10}$  (д) водородными пентаграфеноподобными структурами, представленными  $\text{H}_f\text{H}_{10}$ , и сильной электрон-фононной связью (EPC)[27].

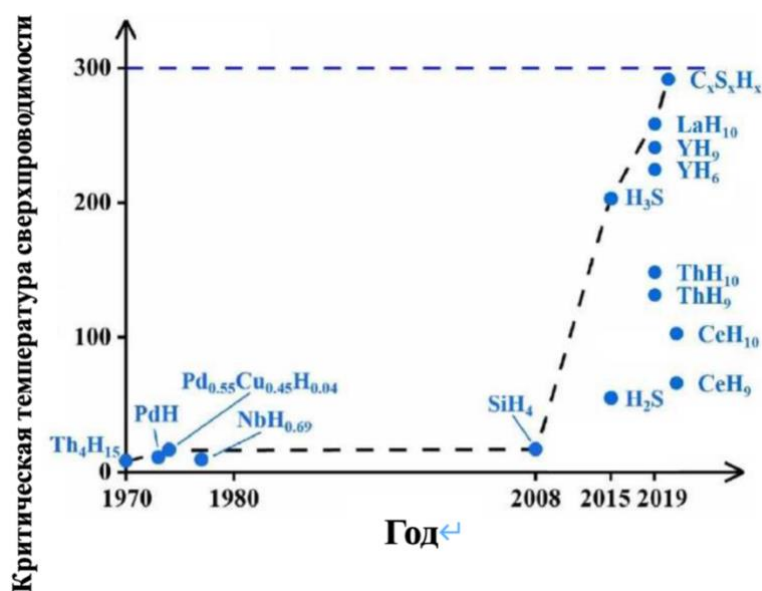


Рисунок 4. Временная шкала критической температуры сверхпроводимости в классических гидридных сверхпроводниках

### 1.3.1 Бинарные гидриды.

Типичными представителями являются ковалентный гидрид  $\text{H}_3\text{S}$  и каркасный гидрид  $\text{LaH}_{10}$ , оба из которых были подтверждены в последующих экспериментах, что дало большой толчок к исследованию высокотемпературных сверхпроводящих гидридов, и в дальнейшем мы сосредоточимся на  $\text{H}_3\text{S}$ , системе La-H, системе Y-H.

### 1.3.1.1 H<sub>3</sub>S

Впервые было предсказано, что сероводород имеет температуру сверхпроводящего перехода 80 К при 100 ГПа, что позже было подтверждено экспериментами высокого давления. В 2014 году область богатых водородом сверхпроводников достигла знакового прогресса в системах H-S. Согласно теории, исследовательская группа Ма Яньмина Цзилиньского университета предположила, что сероводород (H<sub>2</sub>S) более стабилен в условиях высокого давления, чем элементарный водород и элементарная сера, и предсказала, что H<sub>2</sub>S будет преобразован в металл при высоком давлении 160 ГПа [28], а температура его перехода составляет 80 К [28]. Основываясь на этом теоретическом результате, Дроздов и Еремец и др. Макса Планка в Германии провели эксперименты высокого давления на H<sub>2</sub>S, они подтвердили предсказание температуры перехода 80К, а также обнаружили, что при 170 ГПа проводимость увеличивалась на 60К, а также наблюдали температуру сверхпроводящего перехода 203К [28], сверхпроводником которого является не H<sub>2</sub>S, а продукт разложения H<sub>3</sub>S [29]. Позже было обнаружено, что сверхпроводник 203К представляет собой высокосимметричную структуру Im-3m. После открытия высокотемпературных сверхпроводников сульфидных гидридов под высоким давлением ученые вдохновились на открытие других богатых гидридами высокотемпературных сверхпроводящих систем.

### 1.3.1.2 Системе La-H

По сравнению с ковалентными соединениями, богатыми водородом, ионные соединения, богатые водородом, образованные металлическими элементами и водородом, более разнообразны и многочисленны. В 2017 году Пэн Фэн и др. провели исчерпывающий структурный поиск гидридов редкоземельных металлов (Rare Earth Hydrides), включая La-H и Y-H, и предложили гидриды редкоземельных металлов REH<sub>6,9,10</sub> со структурой водородной клетки, показано на рисунке 5 [17]. 2019 год. В 2019 году был

экспериментально открыт класс богатых водородом высокотемпературных сверхпроводников с полностью распыленной водородной клетчатой структурой, представленный  $\text{LaH}_{10}$ , его критическая температура сверхпроводимости составляет 260 К. Водородная клетчатая структура  $\text{LaH}_{10}$  фактически является структурой "хозяин-гость": атомы водорода ковалентно связаны друг с другом, образуя клеткоподобную основную структурную единицу. Атомы лантанида расположены в центре водородной клетки в качестве гостя, и взаимодействие между гостем и хозяином является ионным. Богатые водородом соединения этого типа водородной клетчатой структуры можно рассматривать как индуцированное металлическим допингом образование металлического водорода. Теоретические расчеты показывают, что клетчатые гидриды имеют значительное преимущество в высокотемпературной сверхпроводимости, в основном благодаря доминирующему вкладу водорода с электронной плотностью на энергетическом уровне Ферми и сильной электрон-фононной связи из-за колебаний подрешетки клетки водорода.

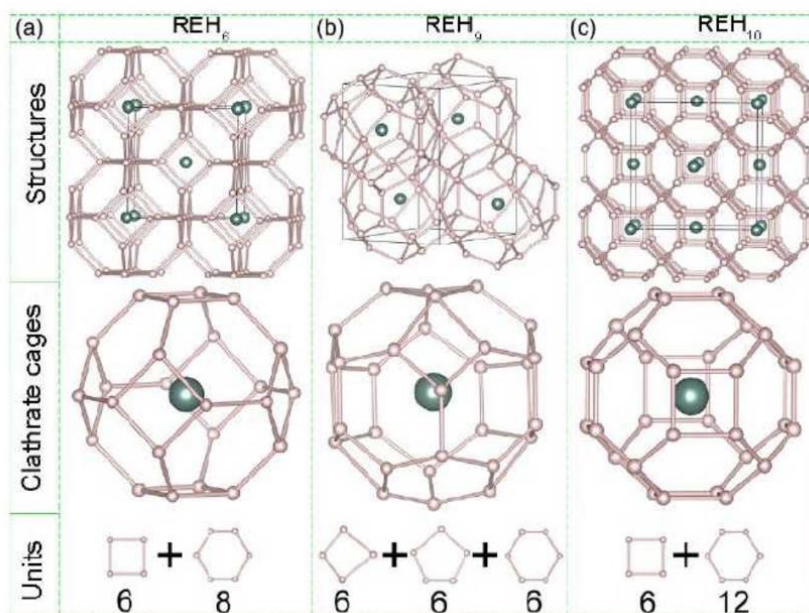


Рисунок 5. Клетчатая кристаллическая структура (a)  $\text{REH}_6$ , (b)  $\text{REH}_9$  (c)  $\text{REH}_{10}$  с зелеными сферами, представляющими атомы редкоземельных металлов, и розовыми сферами, представляющими атомы водорода.



### 1.3.1.3 Системе Y-H

Элемент Y - серый металл с наиболее распространенной химической валентностью +3, что означает, что он может быть разделен тремя атомами водорода. Более того, среди металлических элементов Y является одним из тех, которые обладают сверхпроводимостью и относительно высокой температурой сверхпроводимости [18]. Поэтому сообщения о системе Y-H привлекли внимание многих исследователей. Экспериментально полученные спектры комбинационного рассеяния и видимого поглощения  $YN_3$  при высоких давлениях показывают, что в диапазоне давлений 9-24 ГПа существует промежуточная фаза между гексагональной фазой низкого давления и гранецентрированной кубической фазой высокого давления. При переходе в промежуточную фазу структура Y и положение атомов H изменяются [19]. Большинство сообщений о сверхпроводимости системы Y-H являются теоретическими предсказаниями. В 2009 году Ким и др. исследовали предсказание высокотемпературной сверхпроводимости  $YN_3$  с критической температурой 40 К для сверхпроводимости при давлении 17,7 ГПа [20]. В своем отчете они обнаружили, что гранецентрированная кубическая структура  $YN_3$  демонстрирует сверхпроводимость различного происхождения в двух областях давления, причем температура сверхпроводимости сопровождается изменением давления, соответствующее изменению гибридизации sd-орбиталей между H и Y. Гидриды иттрия демонстрируют лучший исследовательский потенциал и интенсивно изучаются, чтобы показать еще более поразительную сверхпроводимость при более высоких температурах сверхпроводимости. В 2017 году группа использовала зонд системы La-H, чтобы сделать структурные предсказания для более высоких соотношений гидридов иттрия. Результаты показали, что объемно-центрированная кубическая решетка  $YN_{10}$  потенциально может иметь сверхпроводящие температуры выше комнатной температуры, достигая сверхпроводящей

критической температуры 305К-326К при 250 ГПа, что является самым высоким сверхпроводящим гидридом, найденным на сегодняшний день [21].

### 1.3.2 Троичные гидриды

До сих пор было проведено много исследований сверхпроводимости бинарных гидридов, которые также вдохновили на изучение высокотемпературных сверхпроводников тройных гидридов. По мере увеличения числа элементов число потенциально стабильных структур и возможных сверхпроводящих соединений в сложных гидридах быстро увеличивается, что позволяет предположить, что в троичных гидридах может быть больше высокотемпературных сверхпроводников, чем в бинарных гидридах. Троичные гидриды могут обеспечивать более богатые структуры, возникающие в результате различных химических составов и скоординированного переноса заряда, сочетать преимущества различных элементов и индуцировать сильную электронно-фононную связь, что делает их сильными претендентами на сверхпроводники. Недавно команда Ханю Лю и Костшева[31] и другие провели теоретические исследования тройных гидридов La-Y. Используя нейронные сети, элементы из «зоны нестабильности», такие как Mg, Ca, Ba, Sc, Y, La, Th, образовали основные группы сверхпроводников тройных гидридов с высоким  $T_c$  и синтезировали ряд лантан-иттриентных тройных гидридов при высоком давлении: критическая температура  $T_c = 237+5\text{K}$  шестикубического гидрида  $(\text{La}, \text{Y})\text{H}_6$  и максимальная  $T_c \sim 253\text{K}$  гидрида  $(\text{La}, \text{Y})\text{H}_{10}$ . Это первый пример троичного сверхпроводящего гидрида с высоким содержанием  $T_c$  [32].

Недавно были проведены эксперименты, чтобы показать, что изоатомный (La,Ce) сплав  $\text{H}_9$  с максимальной конфигурационной энтропийной стабильностью, полученный путем случайной замены половины Ce в  $\text{CeH}_9$  на La, демонстрирует  $T_c \sim 148-178\text{K}$  в диапазоне давлений 97–172 ГПа, что на 80% выше чистого  $\text{CeH}_9$  [30]. Эта работа показывает, что альтернативное легирование является очень эффективным вспомогательным инструментом, который может значительно улучшить  $T_c$  путем настройки

нетипичных компонентов в правильно выбранном кристалле хозяина. Этот оптимальный альтернативный метод легирования открывает перспективу для синтеза высокоэнтропийных кратных супергидридов, которые могут демонстрировать дальнейшее увеличение  $T_c$  при более низких давлениях.

## **Глава 2 Методы прогнозирования свойств материалов**

### **2.1 Существующие методы компьютерного моделирования.**

При изучении конденсированного состояния сначала необходимо определить его самую основную структурную единицу, то есть кристаллическую структуру, поскольку кристаллическая структура содержит самую основную информацию об изучаемом веществе, и если конкретная кристаллическая структура не может быть определена, изучение всех свойств будет невозможно. Хотя кристаллическая структура может быть определена экспериментально с помощью дифракции XRD, некоторые факторы могут влиять на определение кристаллической структуры. Теоретически в конкретном веществе может быть много кристаллических структур, но только одна структура с наименьшей энергией. Сначала существовало два основных общих метода определения кристаллической структуры в теории, один из которых был альтернативным методом, недостатком этого метода было то, что структура, полученная путем замещения, часто была метастабильной структурой; Другим методом является метод фазового перехода мягкомодной структуры для определения кристаллической структуры, конкретно перемещающей атомы по направлению мягких мод фононов, будет получена новая структура, продолжим вычислять энергию и спектр фононов этой структуры, пока не будет определена структура с наименьшей энергией и стабильной динамикой, недостатком этого метода является то, что он подходит только для некоторых простых систем, таких как некоторые элементарные структуры с меньшим количеством атомов и более высокой симметрией, и этот метод более трудоемкий в использовании. Это также более

хлопотно. На самом деле, еще в 1988 году Джом Мэддокс дал понять, что «определение кристаллической структуры, основанной только на химическом составе, остается одной из проблем в области физики.

В 21 веке, с резким увеличением вычислительной мощности компьютеров, были быстро разработаны и усовершенствованы различные методы предсказания кристаллической структуры, и был достигнут значительный прогресс в теоретическом определении структуры веществ на основе только их химического состава. Методы предсказания структуры можно разделить на две категории в зависимости от того, требуется ли исходная структура или нет. Во-первых, методы, которые полагаются на начальную структуру, такие как Basin Hopping, Minima Hopping, Simulated Annealing и Metadynamics. Второй - алгоритмы глобального поиска, такие как стохастический поиск, оптимизация роя частиц и генетические алгоритмы. На основе этих алгоритмов были разработаны различные пакеты для решения многих проблем в физике и материаловедении. Тремя основными алгоритмами структурного прогнозирования, которые не зависят от исходной структуры, являются стохастический поиск, методы оптимизации роя частиц и генетические алгоритмы.

Далее мы рассмотрим метод предсказания структуры CALYPSO на основе оптимизации роя частиц, метод предсказания структуры SQS, CPA на основе случайного поиска, метод предсказания структуры USPEX на основе генетического алгоритма

### **2.1.1 CALYPSO**

CALYPSO был разработан исследовательской группой во главе с профессором Ма Тан Мином из Цзилиньского университета. Программное обеспечение должно только дать химический состав и внешние условия (например, давление) и не требует каких-либо экспериментальных параметров для получения точной информации о кристаллической структуре. Программное обеспечение способно не только прогнозировать наиболее энергостабильные структуры, но и получать большое количество

метастабильных структур. Программное обеспечение CALYPSO — это программное обеспечение для прогнозирования кристаллической структуры, основанное на алгоритме PSO (из которого PSO является глобальным стохастическим алгоритмом оптимизации), в сочетании с пакетом расчета программного обеспечения VASP [33], оно может находить основное состояние и метастабильную структуру в сложных системах, а также может предсказывать структурные фазовые переходы при высоком напряжении. Прогнозирование кристаллической структуры по коду CALYPSO можно разделить на четыре этапа:

- (1) Сгенерируйте случайную структуру с ограничениями симметрии:
- (2) Оптимизация локальной структуры.
- (3) Исключить сходные кристаллические структуры и определить локальные минимумы.
- (4) Создание новой структуры с помощью PSO. Используя уравнения (1)(2), далее находится глобальная оптимальная структура [34].

$$x_{i,j}^{t+1} = x_{i,j}^t + v_{i,j}^t \quad (1)$$

$$v_{i,j}^{t+1} = \omega v_{i,j}^t + c_1 r^1 (gbest_{i,j}^t - x_{i,j}^t) + c_2 r^2 (gbest_{i,j}^t - x_{i,j}^t) \quad (2)$$

### 2.1.2 USPEX

USPEX [35-37] — это программное обеспечение, специализирующееся на предсказании структур, прогнозировании структур, таких как наночастицы, 2D-кристаллы и т. Д., Которые могут очень эффективно работать с молекулярными кристаллами (в том числе с гибкими и очень сложными молекулами). Он не зависит от экспериментальных эмпирических значений, и до тех пор, пока дано название химического элемента, он может предсказать стабильный химический состав и соответствующую кристаллическую структуру, а также целый ряд метастабильных структур.

Среди них программное обеспечение USPEX определяет, является ли структура энергооптимальной на основе расчета разностного значения соединения, а его формула выглядит следующим образом:

$$\Delta H = H_{ab} - H_a - H_b \quad (3)$$

где  $H_{ab}$  – значение плавления соединения А, состоящего из элементов А и В,  $H_a$  – значение плавления элемента А,  $H_b$  – значение плавления элемента В.

### **2.1.3 Аппроксимация потенциала когерентности**

Основная особенность материалов из многокомпонентных сплавов заключается в том, что атомная занятость является неупорядоченной или полуупорядоченной, и именно потому, что неупорядоченная фаза имеет лучшие характеристики, наша теоретическая разработка и расчет беспорядка атомного присутствия стали особенно важными. Приближение потенциала когерентности (CPA) обладает высокой вычислительной эффективностью. Впервые она была разработана Гойрффи в рамках теории множественного рассеяния. Затем Vitos объединился с методами CPA на основе EMTO, чтобы лучше обрабатывать соответствующие расчеты неупорядоченных сплавов. Метод CPA использует два основных приближения при расчете конкретных материалов сплава: одно заключается в том, что мы игнорируем роль локальной атмосферы того же типа атома и думаем, что локальный потенциал вокруг атома одинаков; во-вторых, одноатомная система может заменить всю систему сплавов, а одноатомная система имеет когерентный потенциал, независимый от окружающей среды.

## **2.2. Метод случайные структуры особого класса**

### **2.2.1 Физика, лежащая в основе метода**

Основная идея этого метода SQS заключается в том, чтобы максимально точно смоделировать наиболее релевантные, ближайшие соседние функции ассоциаций двух тел и многих тел неупорядоченных сплавов путем построения специально разработанной периодической структуры малых ячеек (обычно содержащей 4–48 атомов), и может быть рассчитана с использованием DFT. Для неупорядоченных сплавов многие важные

физические свойства сплава зависят от пространственного расположения атомов в сплаве. Согласно теории моделей SQS, пространственное расположение атомов в конкретном сплаве может быть эффективно охарактеризовано корреляционными функциями двух тел и многих тел [38] этого сплава, которые определяются следующим образом: для бинарных систем неупорядоченных сплавов А-В псевдо спин-переменная  $S_i$  сначала присваивается каждому участку решетки в его единичной ячейке согласно обобщенной модели Визинга [39]. Когда  $S_i = 1$ , это означает, что атом А занимает участок решетки  $i$ , а когда  $S_i = -1$ , это означает, что атом В занимает участок решетки  $i$  (для троичных систем неупорядоченных сплавов А-В-С псевдоспин-переменная сайта решетки также может быть +1, 0, -1 в зависимости от занятости атомов А, В и С). Затем определите некоторую базовую конфигурацию  $f$ , которая представляет собой группировку участков решетки, связанных с симметрией, таких как мономер, ближайший сосед двух тел, трех тел и так далее. Для конкретной конфигурации  $f = (k, m)$ , где  $k$  представляет собой число вершин (число атомов) в конфигурации, обычно берут 2, 3, 4, ...,  $m$  для представления максимального расстояния между двумя вершинами (атомами) в конфигурации, когда  $m$  занимает 1, 2, 3, 4, ..., , соответственно, указывает на ближайшего соседа, второго ближайшего соседа, третьего ближайшего соседа, четвертого ближайшего соседа и так далее. Наконец, умножив все псевдоспин

переменные в каждой конфигурации и усреднив все конфигурации одинаковой симметрии в единичной ячейке, можно получить соответствующие функции ассоциаций двух и многих тел  $\bar{\Pi}_{k,m}$ .

В идеальных неупорядоченных сплавах, поскольку нет прямой корреляции между псевдоспиновыми переменными различных участков решетки, соответствующие корреляционные функции двух тел и многих тел  $\bar{\Pi}_{k,m}$  могут быть получены непосредственно по среднему значению псевдоспиновых переменных участков решетки. Для идеальных бинарных неупорядоченных сплавов А-В отношение между средним значением и

компонентами псевдоспин-переменной на участке решетки может быть записано следующим образом:

$$\langle S_B \rangle = x_A - x_B \quad (4)$$

Где:  $x_A$  и  $x_B$  указывают на содержание компонента А и компонента В в сплаве, соответственно. ( $x_A + x_B = 1$ )

Для идеальных троичных неупорядоченных сплавов А-В-С соотношение между средним и компонентами псевдоспин-переменной на участке решетки может быть записано следующим образом:

$$\langle S_B \rangle = x_A - x_B \quad (5)$$

$$\langle S_C \rangle = x_A - x_C \quad (6)$$

где:  $x_A + x_B + x_C = 1$

Поэтому ассоциативная функция для идеального бинарного неупорядоченного сплава А-В может быть получена непосредственно с помощью следующего уравнения:

$$\langle \bar{\Pi}_{k,m}(S) \rangle = (x_A - x_B)^k \quad (7)$$

Ассоциативная функция для идеального троичного неупорядоченного сплава А-В-С может быть получена непосредственно с помощью следующего уравнения:

$$\langle \bar{\Pi}_{k,m}(S) \rangle = (x_A - x_C)^{n_B} (x_A + x_C)^{n_C} \quad (8)$$

где:  $n_B + n_C = k$

Как видно из вышесказанного, так называемый метод SQS заключается в том, чтобы максимально точно смоделировать наиболее релевантные и ближайšie соседские двухтеловые и многотеловые корреляционные функции в неупорядоченных сплавах путем построения специально разработанной периодической структуры малых ячеек. Поэтому модель суперячейки, построенная с использованием метода SQS, должна соответствовать или, насколько это возможно, следующим условиям:

$$\langle \bar{\Pi}_{k,m}(S) \rangle_{SQS} = \langle \bar{\Pi}_{k,m}(S) \rangle_{disordered} \quad (9)$$

Стоит отметить, что использование этой малой периодической структуры протоклеток для моделирования статистики случайного



распределения атомов в неупорядоченных сплавах должно вводить ошибочную корреляционную функцию после определенного расстояния. Однако, поскольку взаимодействие между ближайшими соседями обычно важнее, чем взаимодействие между соседними атомами, которые находятся на более отдаленном расстоянии[40]. Поэтому структуру SQS можно построить путем точного копирования корреляционной функции между первыми ближайшими соседями в неупорядоченной сплаве, так что погрешность, вызванная периодичностью решетки, может быть отнесена к дальнему непосредственному соседу

### 2.2.2 Особенности алгоритма

При расчете, поскольку метод расчета первых принципов DFT опирается на суперячейки с периодическими граничными условиями, а также ограничен количеством атомов, он пригоден для расчета упорядоченных материалов. Однако в природе все еще существует множество неупорядоченных материалов, поэтому использование метода DFT для расчета сделает расчет громоздким. Теоретически суперячейки могут быть построены напрямую, что позволяет атомам быть случайным образом расположенными в суперячейках, тем самым аппроксимируя неупорядоченные сплавы. Но при этом методе суперячейки должны быть как можно больше (не менее  $10^3$  атомов), чтобы максимально смоделировать случайное распределение атомов в неупорядоченном сплаве. Поэтому расчета DFT недостаточно, чтобы выдержать расчет кристаллической структуры, непосредственно построенной методом суперячейки, поэтому он не принимается в фактическом расчете. Поэтому ученые ищут методы, которые могут быть точно рассчитаны методами DFT и могут моделировать меньшие суперячейки со статистикой атомного распределения неупорядоченных сплавов. В 1990 году Zuger[41] et al. предложили метод SQS. Этот метод основан на построении специально разработанной структуры протоноклеток с меньшей периодической периодичностью для максимального моделирования ближайшего соседа и наиболее релевантных корреляционных функций двух и многих тел в

неупорядоченных сплавах. По сравнению с методом CPA, этот метод SQS не является методом усреднения поля, поэтому он может точно представлять распределение различных локальных сред в неупорядоченных сплавах. Таким образом, метод SQS может точно захватывать зависящие от локальной среды физические свойства неупорядоченных сплавов, такие как средняя длина связи, перенос заряда, энтальпия образования и т. Д. Аналогично, по сравнению с методом CE, упомянутым в предыдущей главе, с помощью метода SQS только один расчет одной ячейки суперъединицы может получить различные физические свойства неупорядоченных сплавов, в то время как применение метода CE опирается на вычисление ряда (обычно 30 ~50) упорядоченной структурной энергии, что не только требует больших вычислительных ресурсов, но и довольно хлопотно для расчета. Кроме того, поскольку метод SQS нацелен на протокилеточки с небольшим количеством атомов, в основном любой метод расчета на основе DFT может быть дополнительно изучен на основе кристаллической структуры, полученной методом SQS, включая метод полнопотенциальных плоских волн, который может точно улавливать эффект атомной релаксации.

После непрерывного развития ученых SQS расширился от бинарного сплава ГЦК [42] до бинарного ОЦК, квазибинарного сплава. В последние годы Шин и Цзян продвигали SQS от бинарных сплавов ОЦК [43] и ГЦК до троичных ОЦК, ГЦК [43] неупорядоченных сплавов. С углублением исследований количество атомов в модели SQS также увеличивается, но по сравнению с соотношением суперячеек, построенным методом прямой суперячейки, вычислительные данные и экспериментальные данные, полученные суперячейкой, построенной SQS, также согласуются. В то же время метод SQS применяется также для изучения кристаллической структуры, магнитной структуры и электронной структуры неупорядоченных сплавов.

## Глава 3. Исследовательская часть

### 3.1. Постановка задачи исследования

В последние годы на основе традиционной теории сверхпроводимости BCS гидриды стали потенциальными высокотемпературными сверхпроводящими материалами благодаря высокочастотным колебаниям атомов водорода при высоких давлениях, которые приводят к сильной электроакустической связи и высоким температурам Дебая. Серия суперводородных водородосодержащих комплексных высокотемпературных сверхпроводников  $\text{LaH}_{10}$ ,  $\text{YH}_6$ ,  $\text{YH}_9$ , которые содержат металлические H подрешетки, были успешно синтезированы после исследования высокотемпературных сверхпроводников водородосодержащих соединений при высоком давлении, что побудило Liu и др. и Дмитрия В. Семенка и др. объединить элементы в тройные La-Y гидриды для повышения критической температуры систем La-H и Y-H. критическая температура. Kostrzewa[31] и др. проанализировали зависимость логарифмической средней частоты  $\omega_{\log}$  от атомной массы и предсказали, что тернарный гидрид La-Y-H может иметь  $T_c$  до 274 К при 190 ГПа. Таким образом, теоретический анализ показывает, что система La-Y-H очень привлекательна для достижения высоких критических температур сверхпроводимости. Также, используя нейронные сети [32], Лю и др. предсказали, что комбинации элементов из "нестабильной полосы", таких как Mg, Ca, Ba, Sc, Y, La и Th, образуют основную группу тройных гидридных сверхпроводников с высокой  $T_c$ , причем La-Y-H является одной из наиболее перспективных систем.

В 2021 году экспериментальные результаты XRD Дмитрия В. Семенка и др. показали, что  $(\text{La}_x\text{Y}_{1-x})\text{H}_{10}$  является кубической решеткой, но, согласно теоретическим прогнозам, фаза  $R\bar{3}m - \text{LaYH}_{20}$  с атомным соотношением 1:1 La,Y является наиболее стабильной в диапазоне температурном диапазоне 0-2000К при 200 ГПа.; фаза  $Cmcm - \text{La}_3\text{YH}_{40}$  с атомным соотношением 3:1 La,Y является стабильной в диапазоне 0~2000К при 200 ГПа.

Поэтому, основываясь на существующих экспериментальных результатах, мы стремимся использовать структуру  $Fm\bar{3}m - LaH_{10}$  в качестве структурного прототипа и с помощью программного обеспечения SQS, разработанного на основе специальной теории квазислучайных структур, создать серию неупорядоченных сплавов с концентрацией металла 75% La и 25% Y  $-(La_3,Y)H_{40}$ , а затем смоделировать их сверхпроводимость с точки зрения теоретического моделирования.

### 3.2 Полученные результаты и их обсуждение

Мы смоделировали  $(La_3,Y_1)H_{40}$  с помощью метода моделирования случайных структур SQS с 44 атомами при 300 ГПа и 88 атомами и обнаружили, что изменения энтальпии находятся в пределах 2 мэВ/атом (рис.6), что указывает на то, что разница в энергии между структурами, полученными методом SQS, не очень велика и что  $(La_3,Y_1)H_{40}$  действительно является замещенным сплавом, в котором La, Y в соотношении 3:1. случайным образом занимают атомную вакансию La в  $LaH_{10}$ . Мы также смоделировали более крупные суперячейки с 132 и 176 атомами с помощью SQS при 300 ГПа и обнаружили, что их общие изменения энтальпии находятся в пределах 4 мэВ/атом, что позволяет предположить, что нет необходимости использовать более крупные суперячейки для моделирования структуры и свойств альтернативного сплава  $(La_3,Y_1)H_{40}$ .

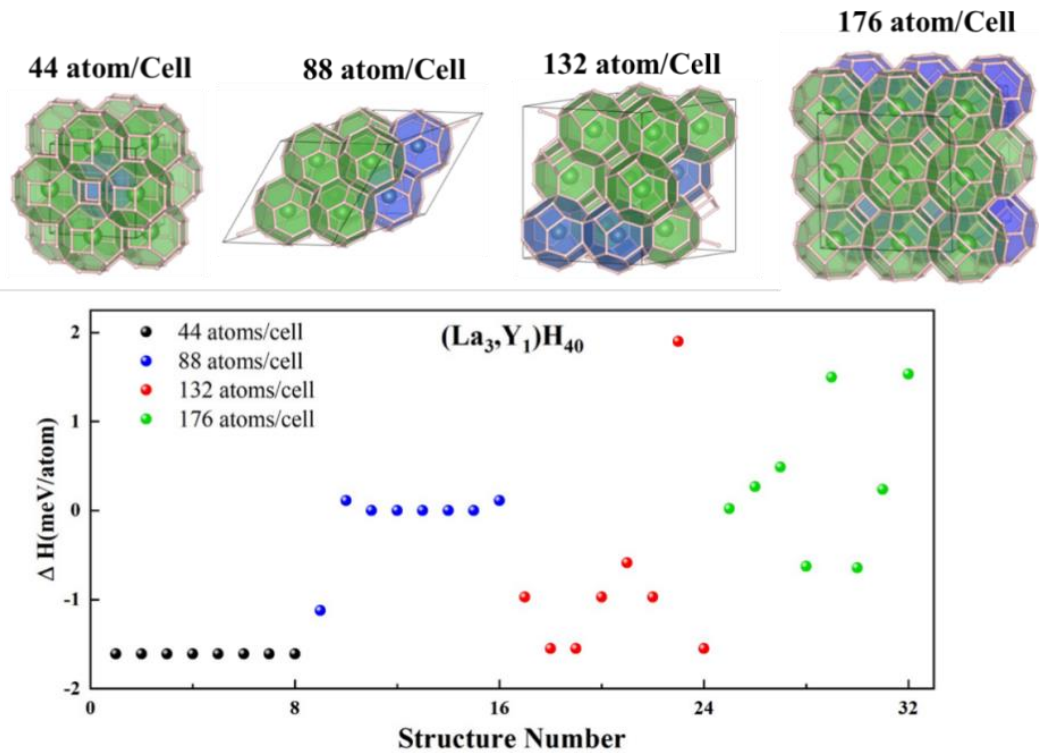


Рисунок 6. Энергетическое моделирование неупорядоченных структур

Расчет структуры электронных полос и плотности состояний  $La_3YH_{40}$  при 250 ГПа показывает, что несколько энергетических полос пересекают плоскость Ферми, что указывает на хорошую металличность  $La_3YH_{40}$ , а расчет проективной электронной плотности состояний показывает, что электроны атома Н дают основной вклад в плоскость Ферми, что благоприятно для его сверхпроводимости, что позволяет предположить, что он может быть потенциальным высокотемпературным сверхпроводником.

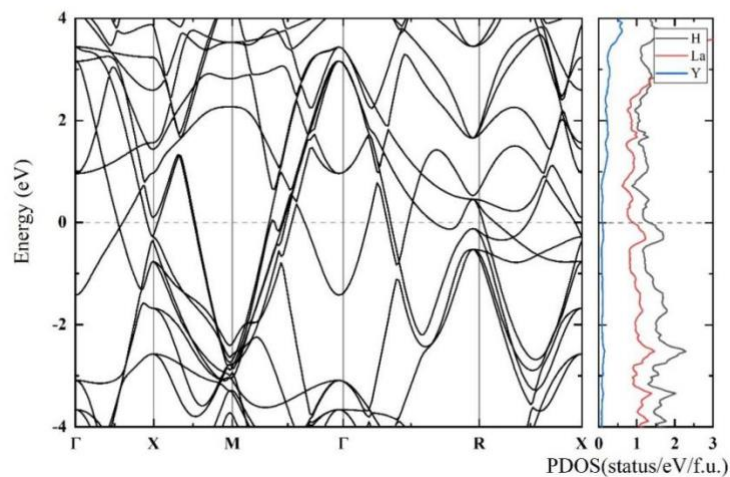


Рисунок 7. Структура энергетических зон электронов (диаграмма) и электронные плотности состояний (правая панель)  $Rm\bar{3}m-La_3YH_{40}$  при 250 ГПа.

Для исследования сверхпроводимости  $Rm\bar{3}m-La_3YH_{40}$ , мы рассчитали его фононный спектр и силу электроакустической связи при 250 ГПа. Отсутствие ложных частот в фононном спектре указывает на стабильные кинетические свойства  $Rm\bar{3}m-La_3YH_{40}$ . Из-за больших различий в атомных массах ( $M_{La}, M_Y \gg M_H$ ) и присутствия H-атомов в форме наблюдается четкое разделение в фононном спектре. Фононный спектр  $Rm\bar{3}m-La_3YH_{40}$  разделен на низкочастотную область, среднечастотную область и высокочастотную область, причем низкочастотная область в основном обусловлена колебаниями La и Y, а среднечастотная и высокочастотная области в основном обусловлены колебаниями атома H. Общая константа силы электроакустической связи 3,44 получена путем интегрирования по всему частотному пространству. Вклад колебательных мод атомов H в  $La_3Y_1H_{40}$  в силу электроакустической связи составляет 52%.

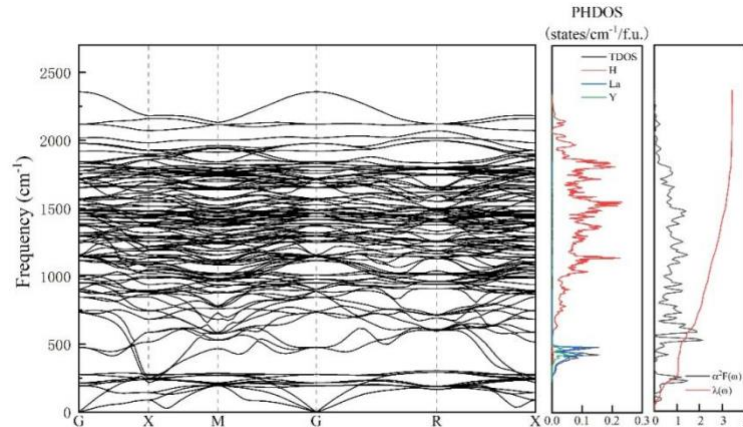


Рисунок 8. Фононный спектр  $Rm\bar{3}m-La_3YH_{40}$  при 250 ГПа (левая панель), фонная плотность состояний (средняя панель), спектральная функция Элиашберга  $\alpha^2F(\omega)$  и сила электроакустической связи  $\lambda(\omega)$  (правая панель).

Сверхпроводящая энергетическая щель, полученная путем численного решения уравнения Элиашберга, представлена на рисунке, который показывает, что температура сверхпроводящего перехода  $Rm\bar{3}m-La_3YH_{40}$

при 250 ГПа колеблется от 292К до 309К с константами кулоновского экранирования 0,1 и 0,13 соответственно.

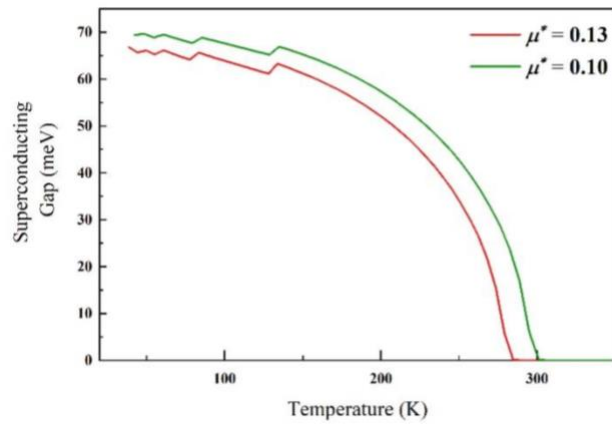
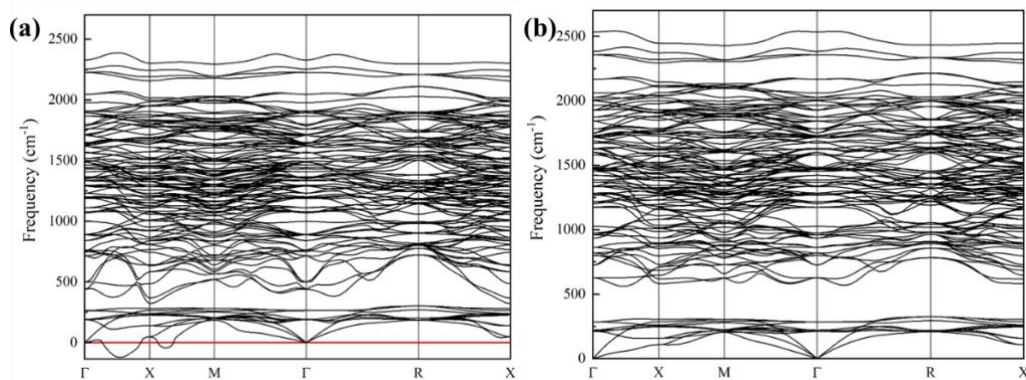


Рисунок 9. Сверхпроводящая энергетическая щель  $Pm\bar{3}m - La_3YN_{40}@250$  ГПа

Мы также попытались заменить соотношение атомов La в  $LaN_{10}$  другими соотношениями. Расчеты показывают, что при давлении 300 ГПа фоннные спектры свободны от ложных частот для атомных соотношений 1:3, 1:1 и 3:1, что указывает на их кинетическую стабильность; однако при снижении давления до 250 ГПа фоннные спектры свободны от ложных частот только для атомных соотношений 3 : 1, а кинетические свойства стабильны. Ожидается, что учет ангармонических эффектов приведет к кинетической стабильности для атомных соотношений La, Y 1: 3 и 1 : 1.





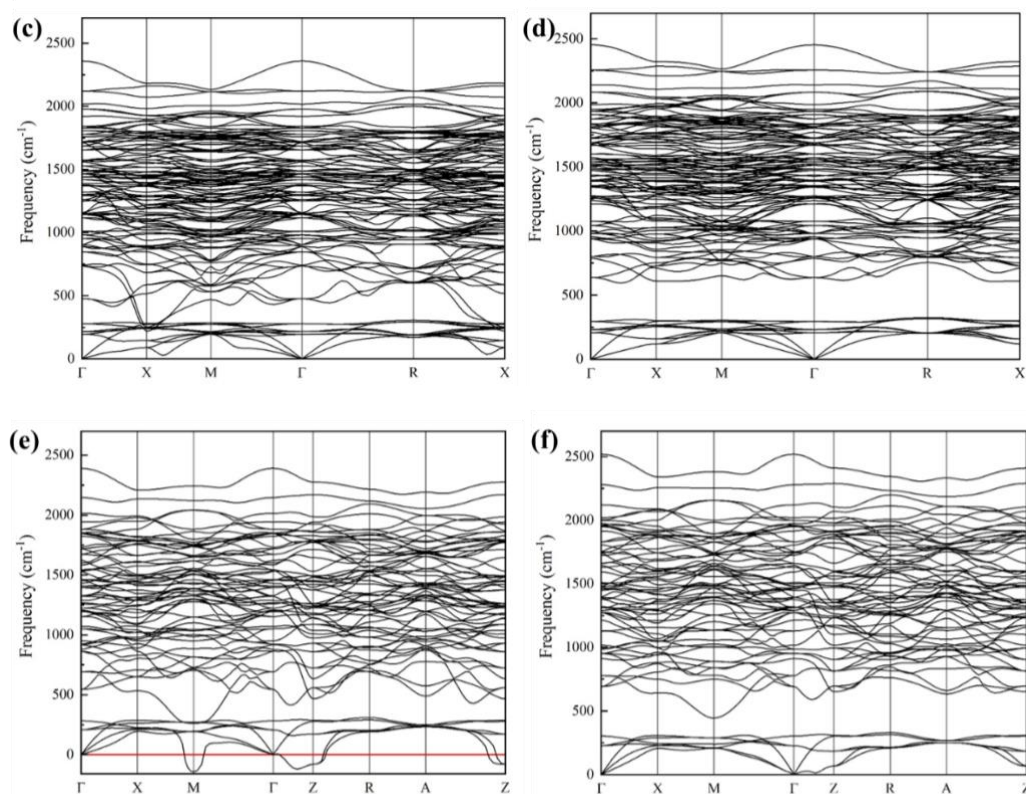


Рисунок 10. (a) и (b) фононные спектры  $\text{LaY}_3\text{H}_{40}$  при 250 ГПа и 300 ГПа, (c) и (d) фононные спектры  $\text{La}_3\text{YH}_{40}$  при 250 ГПа и 300 ГПа, (e) и (f) фононные спектры  $\text{La}_2\text{Y}_2\text{H}_{40}$  при 250 ГПа и 300 ГПа.

Для кинетически стабильных структур в  $\text{La}_1\text{Y}_3\text{H}_{40}$ ,  $\text{La}_3\text{Y}_1\text{H}_4$  и  $\text{La}_2\text{Y}_2\text{H}_{40}$  при различных давлениях были рассчитаны силы электроакустической связи, логарифмические частоты фононов и электронная плотность состояний на поверхности Ферми. Расчеты показывают, что: гидрид сплава, образованный путем частичной замены La на Y, обладает хорошей сверхпроводимостью выше 250 ГПа, в основном потому, что La и Y являются гомологичными элементами с аналогичными атомными радиусами; и электроотрицательность La и Y меньше, чем у водорода, который с большей вероятностью потеряет электроны и получит больше электронов Орбитали антисвязанного состояния водорода заняты, так что молекула водорода диссоциирует из атомарного водорода металлической фазы, а атомарный водород и его электроны взаимодействуют через очень сильную электроакустическую связь, преодолевая кулоновское отталкивание между электронами, так что электроны движутся без рассеяния в кристаллической решетке.



**Таблица 1.** Расчет давления  $P$  (ГПа), силы электроакустической связи  $\lambda$ , частоты фононов  $\omega_{\log}$ (К), электронной плотности состояний  $N(E_f)$  в плоскости Ферми (состояний/эВ/атом) (электронная плотность состояний в плоскости Ферми для водорода) и температуры сверхпроводящего перехода  $T_c$  (К),  $\mu^*=0.10$  ( $\mu^*=0.13$ )

Формулы соединений	$P$ , ГПа	$\lambda$	$\omega_{\log}$ , К	$N(E_f)$ , (состояний/эВ/атом)	$T_c$ , К
$La_1Y_3H_{40}$	250	---	---	2,821(1,319)	---
$La_1Y_3H_{40}$	300	2,33	1127	2,313(1,128)	311(291)
$La_3Y_1H_{40}$	250	3,45	776	3,420(1,344)	309(292)
$La_3Y_1H_{40}$	300	2,13	1260	3,104(1,404)	295(276)
$La_2Y_2H_{40}$	250	---	---	3,012(1,362)	---
$La_2Y_2H_{40}$	300	2,05	1296	2,851(1,321)	286(267)

## Выводы

В данной работе кинетическая стабильность, электронная структура и сверхпроводимость соединений  $(\text{La}, \text{Y})\text{H}_{10}$  были систематически исследованы при 250 и 300 ГПа с использованием специального метода получения квазислучайных структур (метод SQS). Было установлено, что фаза  $\text{Pm}\bar{3}\text{m} - \text{La}_3\text{YH}_{40}$  кинетически стабильна при 250 и 300 ГПа. Для альтернативного сплава  $(\text{La}_{0,75}\text{Y}_{0,25})\text{H}_{10}$  предсказана температура сверхпроводящего перехода около 309 К ( $\sim +36$  °С) при 250 ГПа и около 295 К ( $\sim +22$  °С) при 300 ГПа. Также было обнаружено, что альтернативные сплавы с соотношением атомных номеров La, Y = 1:1, 3:1, 1:3 ( $\text{La}_2\text{Y}_2\text{H}_{40}, \text{La}_3\text{Y}_1\text{H}_{40}, \text{La}_1\text{Y}_3\text{H}_{40}$ ) кинетически стабильны при 300 ГПа, а температура сверхпроводящего перехода всех этих сплавов составляет приблизительно выше комнатной температуры при 300 ГПа.



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

Студенту:

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>
150Б91	Ван Сяоя

<b>Школа</b>	<b>ИШПР</b>	<b>Отделение</b>	<b>ОЭФ</b>
<b>Уровень образования</b>	Бакалавриат	<b>Направление/специальность</b>	03.04.02 Физика

<b>Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:</b>	
1. <i>Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	<i>Затраты на сырьё, материалы, комплектующие изделия, специальное оборудование, основную и дополнительную заработную платы исполнителей, отчисления на социальные нужды, накладные расходы</i>
2. <i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	<i>В соответствии с ГОСТ 14.322-83 «Нормирование расхода материалов» и ГОСТ Р 51541-99 «Энергосбережение. Энергетическая эффективность»</i>
3. <i>Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	<i>1. Налоговый кодекс Российской Федерации 2. ФЗ №212 от 24.07.2009 в ред. от 19.12.2016</i>
<b>Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:</b>	
1. <i>Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения</i>	<i>Проведение предпроектного анализа. Определение целевого рынка и проведение его сегментирования. Выполнение SWOT-анализа проекта</i>
2. <i>Определение возможных альтернатив проведения научных исследований</i>	<i>Определение целей и ожиданий, требований проекта. Определение заинтересованных сторон и их ожиданий.</i>
3. <i>Планирование процесса управления НИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок</i>	<i>Составление календарного плана проекта. Определение бюджета НИ</i>
4. <i>Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности</i>	<i>Расчет уравнений эффективности НИ. Расчет уравнений сравнительной эффективности НИ.</i>
<b>Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):</b>	
<ol style="list-style-type: none"> <li>1. <i>Оценка конкурентоспособности технических решений</i></li> <li>2. <i>Матрица SWOT</i></li> <li>3. <i>График проведения НИ</i></li> <li>4. <i>Определение бюджета НИ</i></li> <li>5. <i>Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИ</i></li> </ol>	

<b>Дата выдачи задания для раздела по линейному графику</b>	
---	--

**Задание выдал консультант:**

<b>Должность</b>	<b>ФИО</b>	<b>Ученая степень, звание</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
Доцент ОСГН	Верховская Марина Витальевна	к.э.н		

**Задание принял к исполнению студент:**

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
150Б91	Ван Сяоя		

## **4 ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСНАБЖЕНИЕ**

В рамках текущей работы проводится моделирование тройного гидрида  $(La,Y)H_{10}$ . В частности, предсказание структуры позволяет стабилизировать температуру сверхпроводимости тройного гидрида при высоких давлениях. Предсказания структуры выполняются в программном пакете VASP на Серверы Tower, принадлежащем Университету Цзилинь.

В последние десятилетия высокотемпературные сверхпроводящие гидриды привлекли большое внимание в Китае. Благодаря вышеупомянутым свойствам, сверхпроводящие материалы могут быть применены в жизни.

### **4.1 SWOT-анализ**

Первый этап заключается в описании сильных и слабых сторон проекта, в выявлении возможностей и угроз.

Результаты SWOT-анализа представлены в таблице 4.1.

Таблица 4.1 – Итоговая матрица SWOT-анализа

	<p><b>Сильные стороны научно-исследовательского проекта:</b></p> <p>С1. Заявленная экономичность и энергоэффективность метода расчета.</p> <p>С2. Легкий интерфейс управления</p> <p>С3. Безопасность проведения исследований.</p> <p>С4. Упрощенность подготовки материалов перед исследованием.</p>	<p><b>Слабые стороны научно-исследовательского проекта:</b></p> <p>Сл1. Недостаточность доказательства пригодности и достоверности.</p> <p>Сл2. Отсутствие необходимого оборудования для выполнения расчетов.</p> <p>Сл3. Длительный срок расчетов.</p>
<p><b>Возможности:</b></p> <p>В1. Решение фундаментальных задач исследования.</p>	<p>В1С4. Проведение фундаментальных исследований не требует серьезной предварительной подготовки, что упрощает эти исследования.</p>	<p>В1Сл1. Правильность решения фундаментальных задач ограничивается отсутствием экспериментальной проверки.</p> <p>В1Сл3. Многие из фундаментальных исследовательских задач требуют больших временных затрат на их реализацию.</p>
<p><b>Угрозы:</b></p> <p>У1. Несвоевременное финансирование научного исследования при дальнейшем развитии проекта.</p>	<p>-</p>	<p>У1Сл1Сл2Сл3. Отсутствие финансирования скажется на доступности мощного оборудования, что скажется точности и времени расчетов.</p>

## 4.2 Определение возможных альтернатив проведения научных исследований

В таблице 4.2 представлена морфологическая матрица для выполнения расчетов, являющихся основной частью работы.

Таблица 4.2 – Морфологическая матрица

	1	2
А. Оборудование для расчетов	ТПУ, Высокопроизводительный сервер HPC-PHTD	Цзилинский университет, Серверы Tower: ICCMS также имеет 10 серверов Tower с процессорами Xeon и картами NVIDIA Tesla, которые используются в исследованиях ML.
Б. Пакет программ для выполнения расчетов	Abinit	VASP
В. Затраты на приобретение лицензии	Бесплатно	Бесплатно (Зависит от наличия лицензии у владельцев сервера)

## 4.3 Планирование научно-исследовательских работ

### 4.3.1 Структура работ в рамках научного исследования

Планирование комплекса предполагаемых работ осуществляется в следующем порядке:

- разработка технического задания
- выбор направления исследования
- теоретические и практические исследования
- обобщение и оценка результатов

– оформление комплекта документации по ВКР

Для выполнения научных исследований формируется рабочая группа, в состав которой входят: магистрант, научный руководитель и консультант. Составим перечень этапов и работ в рамках проведения научного исследования и проведем распределение исполнителей по видам работ (таблица 4.3).

Таблица 4.3 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Основные этапы	№ работ	Содержание работ	Должность исполнителя
Разработка технического задания	1	Составление и утверждение технического задания	НУ, К, С
Выбор направления исследования	2	Подбор и изучение материалов по выбранной теме	С
	3	Выбор направления исследований	НУ, К, С
	4	Календарное планирование работ по теме	НУ, К, С
Теоретические и практические исследования	5	Выбор методики для исследований	НУ, К, С
	6	Ознакомление с методикой исследования и программным обеспечением	С
	7	Определение параметров расчета	НУ, К, С
	8	Проведения расчета на ЭВМ	С
Обобщение и оценка результатов	9	Проверка полученных результатов	С
	10	Оформление заключение	С
Оформление комплекта документации по ВКР	11	Составление пояснительной записки	С

НУ – Научный руководитель;

К – Консультант;

С – Студент.



### 4.3.2 Определение трудоемкости выполнения работ

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

Трудоемкость выполнения научного исследования оценивается экспертным путем в человеко-днях и носит вероятностный характер, т.к. зависит от множества трудно учитываемых факторов. Для определения ожидаемого (среднего) значения трудоемкости  $t_{ожі}$  используется следующая формула (4.1):

$$t_{ожі} = \frac{3t_{\min i} + 2t_{\max i}}{5}, \quad (4.1)$$

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

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

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

Исходя из ожидаемой трудоемкости работ, определяется продолжительность каждой работы в рабочих днях  $T_p$ , учитывающая параллельность выполнения работ несколькими исполнителями:

$$T_{pi} = \frac{t_{ожі}}{Ч_i}, \quad (4.2)$$

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

$t_{ожі}$  – ожидаемая трудоемкость выполнения одной работы, чел.-дн.;  
 $Ч_i$  – численность исполнителей, выполняющих одновременно одну и ту же работу на данном этапе, чел.

### 4.3.3 Разработка графика проведения научного исследования

При выполнении дипломных работ студенты, в основном, становятся участниками сравнительно небольших по объему научных тем. Поэтому наиболее удобным и наглядным является построение ленточного графика проведения научных работ в форме диаграммы Ганта.

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

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k_{\text{кал}}, \quad (4.3)$$

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

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

$k_{\text{кал}}$  – коэффициент календарности.

Коэффициент календарности определяется по следующей формуле (4.4):

$$k_{\text{кал}} = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}}}, \quad (4.4)$$

где  $T_{\text{кал}}$  – количество календарных дней в году;

$T_{\text{вых}}$  – количество выходных дней в году;

$T_{\text{пр}}$  – количество праздничных дней в году.

Таким образом:

$$k_{\text{кал}} = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}}} = \frac{365}{365 - 67} = 1,225.$$

Все рассчитанные значения необходимо свести в таблицу 4.4.

Таблица 4.4 – Временные показатели проведения научного исследования

№	Название	Трудоёмкость						Исполнитель	Т <sub>р</sub> , раб. дн		Т <sub>к</sub> , кал. дн	
		t <sub>min</sub>		t <sub>max</sub>		t <sub>ож</sub>			Исп.1	Исп.2	Исп.1	Исп.2
		Исп.1	Исп.2	Исп.1	Исп.2	Исп.1	Исп.2					
1	Составление и утверждение технического задания	0,3	0,3	1	1	0,58	0,58	Р	0,19	0,19	0,24	0,24
		0,3	0,3	1	1	0,58	0,58	К	0,19	0,19	0,24	0,24
		0,3	0,3	1	1	0,58	0,58	С	0,19	0,19	0,24	0,24
2	Подбор и изучение материалов по выбранной теме	5	5	10	10	7	7	С	7,00	7,00	8,58	8,58
3	Выбор направления исследований	1	1	2	2	1,4	1,4	Р	0,47	0,47	0,58	0,58
		1	1	2	2	1,4	1,4	К	0,47	0,47	0,58	0,58
		1	1	2	2	1,4	1,4	С	0,47	0,47	0,58	0,58
4	Календарное планирование работ по теме	1	1	2	2	1,4	1,4	Р	0,47	0,47	0,58	0,58
		1	1	2	2	1,4	1,4	К	0,47	0,47	0,58	0,58
		1	1	2	2	1,4	1,4	С	0,47	0,47	0,58	0,58
5	Выбор методики для исследований	0,3	0,3	1	1	0,58	0,58	Р	0,19	0,19	0,23	0,23
		0,3	0,3	1	1	0,58	0,58	К	0,19	0,19	0,23	0,23
		0,3	0,3	1	1	0,58	0,58	С	0,19	0,19	0,23	0,23
6	Ознакомление с методикой исследования и программным обеспечением	7	7	14	14	9,8	9,8	С	9,80	9,80	12,01	12,01
7	Определение параметров расчета	1	1	2	2	1,4	1,4	Р	0,47	0,47	0,58	0,58
		1	1	2	2	1,4	1,4	К	0,47	0,47	0,58	0,58
		1	1	2	2	1,4	1,4	С	0,47	0,47	0,58	0,58
8	Проведения расчета на ЭВМ	30	30	40	40	34	34	С	34,00	34,00	41,65	41,65
9	Проверка полученных результатов	12	12	17	17	14	14	С	14,00	14,00	17,15	17,15
10	Оформление заключения	3	3	4	4	3,4	3,4	С	3,40	3,40	4,17	4,17
11	Составление пояснительной записки	8	8	12	12	9,6	9,6	С	9,60	9,60	11,76	11,76

Р – руководитель;

С – студент-инженер;

К – консультант;

На основе таблицы 4.4 строится календарный план-график в виде диаграммы Ганта, представленной на рисунке 4.1.

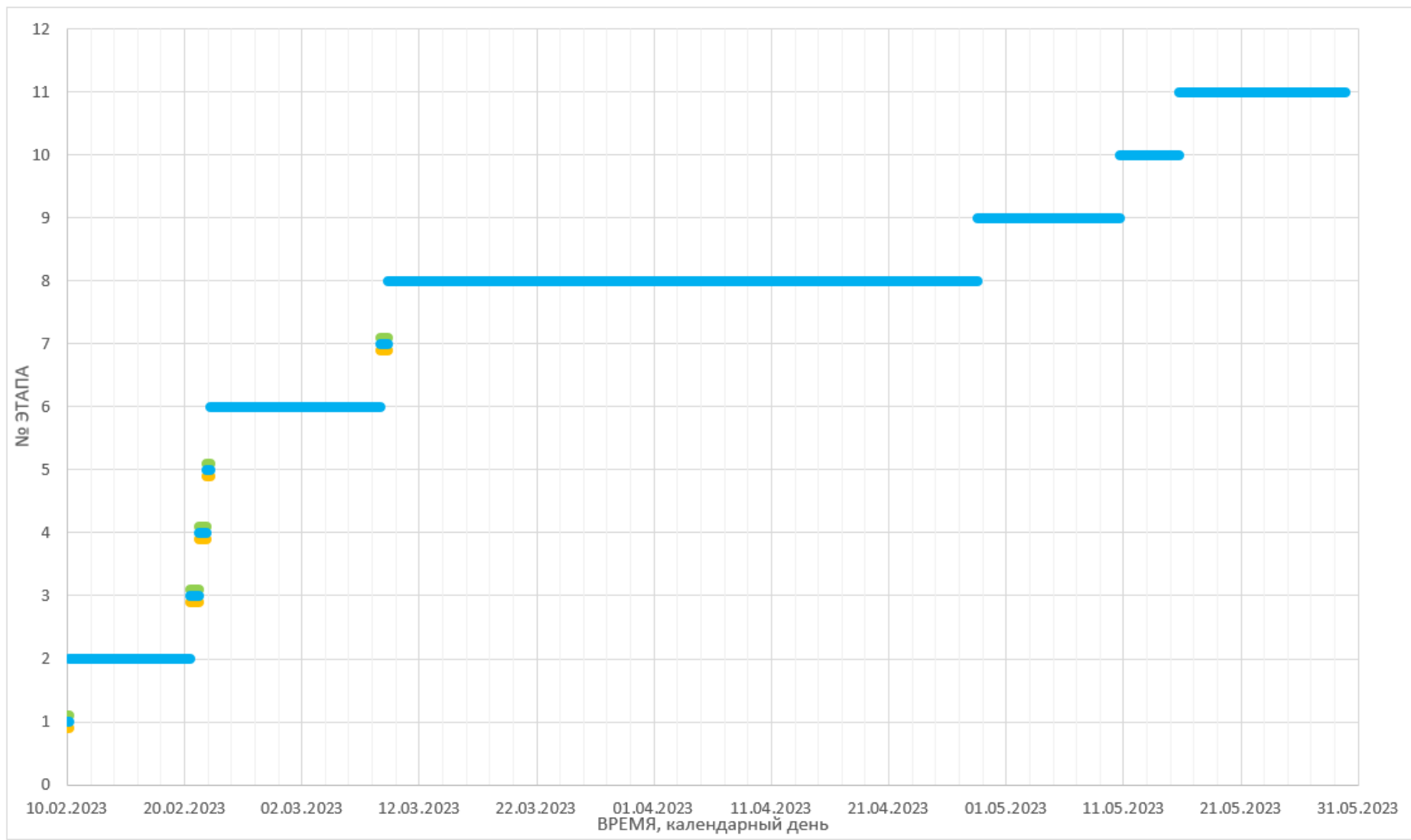


Рисунок 4.1 – Календарный план-график проведения НИОКР. Синим цветом показан студент-инженер, оранжевым – научный руководитель, зеленым – консультант

#### **4.4 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)**

В процессе формирования бюджета НТИ используется следующая группировка затрат по статьям:

- материальные затраты НТИ;
- затраты на основное оборудование для научно-экспериментальных работ;
- основная заработная плата исполнителей темы;
- дополнительная заработная плата исполнителей темы;
- отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления);
- накладные расходы.

##### **4.4.1 Расчет материальных затрат НТИ**

Для выполнения данной ВКР требуются затраты на:

- приобретаемую со стороны продукцию, необходимую для обработки результатов;
- оплаты соединения с высокопроизводительным сервером через Интернет.

Данные затраты не подходят под определение материальных затрат, поэтому их учет не требуется. В рамках данной работы отсутствуют такие материальные затраты, как:

- приобретение материальных запасов, сырья, комплектующих и составных частей для основных средств производственных подразделений;
- покупка топлива и горюче-смазочных материалов, электроэнергии, тепловой энергии, воды для выполнения технологического процесса;
- закупка работ, товаров и услуг, необходимых для осуществления производственного цикла;
- убытки и недостачи продукции в пределах установленных норм естественной убыли;

– прочие суммы расходов.

#### **4.4.2 Расчет затрат на оборудование для научно-экспериментальных работ**

Для оборудования нужно рассчитать величину годовой амортизации по следующей формуле (4.6):

$$A_{\text{год}} = \frac{C_{\text{перв}}}{T_{\text{пи}}} \quad (4.5)$$

Здесь  $C_{\text{перв}}$  – первоначальная стоимость, руб;

$T_{\text{пи}}$  – время полезного использования, год.

Данная работа не предполагает покупку оборудования, превышающего по стоимости 100 000 рублей. Работа на высокопроизводительном сервере НРС-РНТД не предполагает получение прибыли со стороны пользователя. Учет амортизации этого оборудования заложен в расчет бюджета владельца – Томского Политехнического университета.

#### **4.4.3 Основная заработная плата исполнителей темы**

Статья включает основную заработную плату работников, непосредственно занятых выполнением НИИ, (включая премии и доплаты) и дополнительную заработную плату. Также включается премия, выплачиваемая ежемесячно из фонда заработной платы в размере 20–30 % от тарифа или оклада:

$$Z_{\text{зп}} = Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}} \quad (4.6)$$

Здесь  $Z_{\text{осн}}$  – основная заработная плата;

$Z_{\text{доп}}$  – дополнительная заработная плата (12-20 % от  $Z_{\text{осн}}$ ).

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

$$Z_{\text{осн}} = Z_{\text{дн}} \cdot T_p \quad (4.7)$$

Здесь  $Z_{\text{осн}}$  – основная заработная плата одного работника;

$T_p$  – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб. дн. (таблица 4.4);

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

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_m \cdot M}{F_d} \quad (4.8)$$

Здесь  $Z_m$  – месячный должностной оклад работника, руб.;

$M$  – количество месяцев работы без отпуска в течение года:

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

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

$F_d$  – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн. (таблица 4.5).

В таблице 4.5 приведен баланс рабочего времени каждого работника НТИ.

Таблица 4.5 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Студент-инженер	Консультант
Календарное число дней	365	365	365
Количество нерабочих дней	53	104	53
•выходные дни:	14	14	14
•праздничные дни:			
Потери рабочего времени			
•отпуск:	48	24	48
•невыходы по болезни:	7	7	7



Действительный годовой фонд рабочего времени	244	213	244
--	-----	-----	-----

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_m = Z_{тс} \cdot k_p \quad (4.9)$$

Здесь  $Z_{тс}$  – заработная плата по тарифной ставке, руб.;

$k_p$  – районный коэффициент, равный 1,3 (для Томска).

Расчёт основной заработной платы приведён в таблице 4.6.

Таблица 4.6 – Расчет основной заработной платы

Исполнитель	$Z_{тс}$	$k_p$	$Z_m$ , руб	$Z_d$ , руб	$T_p$ , день	$Z_{осн}$ , руб
Студент-инженер	22 000	1,3	51 480	2194	109	239 171
Научный руководитель	37 000		86 580	3690	3	11 071
Консультант	37 000		86 580	3690	3	11 071
ИТОГО						261 313

Расчет дополнительной заработной платы ведется по следующей формуле:

$$Z_{доп} = k_{доп} \cdot Z_{осн} \quad (4.10)$$

Здесь  $k_{доп}$  – коэффициент дополнительной заработной платы, равный 0,15.

Общая заработная исполнителей работы представлена в таблице 4.7.

Таблица 4.7 – Общая заработная плата исполнителей

Исполнитель	$Z_{осн}$ , руб	$Z_{доп}$ , руб	$Z_{зп}$ , руб
Студент-инженер	239 171	35 876	275 047

Научный руководитель	11 071	1 661	12 732
Консультант	11 071	1 661	12 732
ИТОГО	261 313	39 197	300 510

#### 4.4.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется исходя из следующей формулы:

$$Z_{\text{внеб}} = k_{\text{внеб}} \cdot (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}) \quad (4.12)$$

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

В соответствии с положениями подпункта 7 пункта 1 и подпункта 3 пункта 2 статьи 427 Налогового кодекса Российской Федерации для некоммерческих организаций (за исключением государственных (муниципальных) учреждений), зарегистрированных в установленном законодательством Российской Федерации порядке, применяющих упрощенную систему налогообложения и осуществляющих в соответствии с учредительными документами деятельность в области социального обслуживания граждан, научных исследований и разработок, образования, здравоохранения, культуры и искусства (деятельность театров, библиотек, музеев и архивов) и массового спорта (за исключением профессионального) применяются пониженные тарифы страховых взносов в совокупном размере 20% в течение 2017-2024 годов

Отчисления во внебюджетные фонды представлены в таблице 4.8.

Таблица 4.8 – Отчисления во внебюджетные фонды

Исполнитель	$Z_{\text{осн}}$ , руб	$Z_{\text{доп}}$ , руб	$Z_{\text{внеб}}$ , руб
Студент-инженер	93 044	13 957	21 400

Научный руководитель	3 028	454	697
Консультант	3 028	454	697
ИТОГО			22 793

#### 4.4.5 Накладные расходы

Величина накладных расходов определяется по следующей формуле:

$$Z_{\text{накл}} = k_{\text{нр}} \cdot (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}} + Z_{\text{внеб}}) \quad (4.13)$$

Здесь  $k_{\text{нр}}$  – коэффициент, учитывающий накладные расходы.

Величину коэффициента накладных расходов можно взять в размере 16 %. Накладные расходы представлены в таблице 4.9.

Таблица 4.9 – Накладные расходы

	Исп. 1	Исп. 2
Основная заработная плата	99 101	99 101
Дополнительная заработная плата	14 865	14 865
Отчисления во внебюджетные фонды	22 793	22 793
Накладные расходы	21 882	21 882

#### 4.4.6. Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

Расчитанная величина затрат научно-исследовательской работы является основой для формирования бюджета затрат проекта, который при формировании договора с заказчиком защищается научной организацией в качестве нижнего предела затрат на разработку научно-технической продукции.

Определение бюджета затрат на научно-исследовательский проект по каждому варианту исполнения приведен в таблице 4.10.

Таблица 4.10 – Расчет бюджета затрат НТИ

Наименование статьи	Сумма		Примечание
	Исп. 1	Исп. 2	
1. Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	99 101	99 101	Таблица 4.6
2. Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	14 865	14 865	Таблица 4.7
3. Отчисления во внебюджетные фонды	22 793	22 793	Таблица 4.8
4. Накладные расходы	21 882	21 882	16 % от суммы ст. 1-3
5. Бюджет затрат НТИ	158 641	158 641	Сумма ст. 1-4

Как видно из таблицы 4.10 основные затраты НТИ приходятся на основную заработную плату исполнителей.

#### 4.5 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования

Определение эффективности происходит на основе расчета интегрального показателя эффективности научного исследования. Его нахождение связано с определением двух средневзвешенных величин: финансовой эффективности и ресурсоэффективности.

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\text{max}}} \quad (4.14)$$

Здесь  $I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i}$  – интегральный финансовый показатель разработки;

$\Phi_{pi}$  – стоимость  $i$ -го варианта исполнения;

$\Phi_{\text{max}}$  – максимальная стоимость исполнения научно-исследовательского проекта (в т.ч. аналоги).

Интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов исполнения объекта исследования можно определить следующим образом:

$$I_{pi} = \sum a_i b_i \quad (4.15)$$

Здесь  $I_{pi}$  – интегральный показатель ресурсоэффективности для  $i$ -го варианта исполнения разработки;

$a_i$  – весовой коэффициент  $i$ -го варианта исполнения разработки;

$b_i^a$ ,  $b_i^p$  – балльная оценка  $i$ -го варианта исполнения разработки; устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания;

$n$  – число параметров сравнения.

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности приведен в форме таблице 4.11.

Таблица 4.11 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Критерий	Весовой коэффициент параметра	Исп. 1	Исп. 2
1 Простота выполнения исследований	0,30	5	5
2 Удобство в эксплуатации	0,15	4	4
3 Энергосбережение	0,15	3	4
4 Надежность	0,20	4	5
5 Воспроизводимость результатов	0,20	4	4
ИТОГО	1	4,15	4,5

Сравнив значения интегральных показателей ресурсоэффективности, можно сделать вывод, что реализация технологии в первом исполнении является более эффективным вариантом для выполнения работы.

Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения разработки ( $I_{исп.i.}$ ) определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле:

$$I_{исп.1} = \frac{I_{p-исп1}}{I_{финр}^{исп.1}}, \quad I_{исп.2} = \frac{I_{p-исп2}}{I_{финр}^{исп.2}} \text{ и т.д.} \quad (4.16)$$

Сравнение интегрального показателя эффективности вариантов исполнения разработки позволит определить сравнительную эффективность проекта (см. таблицу 4.12) и выбрать наиболее целесообразный вариант из предложенных. Сравнительная эффективность проекта ( $\mathcal{E}_{ср}$ ):

$$\mathcal{E}_{ср} = \frac{I_{исп.1}}{I_{исп.2}}. \quad (4.17)$$

Таблица 4.12 – Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Исп. 1	Исп. 2
1	Интегральный финансовый показатель разработки	1	1
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,15	4,5
3	Интегральный показатель эффективности	4,15	4,5
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	0,9	1

Вывод: Сравнительный анализ общих метрик эффективности показывает, что второй вариант более подходит для проведения расчетов, так как этот вариант является наиболее экономичным и ресурсоэффективным по сравнению с первым вариантом.

В рамках данного раздела диссертации была проведена оценка конкурентоспособности теоретического расчета VASP прогноза структуры  $(La, Y)H_{10}$  по сравнению с его программным расчетом прогноза структуры; рассчитан показатель, оценивающий перспективность данной технологии, который определяет уровень перспективности как «выше среднего». Был составлен перечень этапов работ и определена их трудоемкость, построен календарный план-график выполнения работ. Рассчитан ориентировочный бюджет на создание научной разработки, а также проведена оценка эффективности научного исследования с позиции ресурсосбережения и сравнительная эффективность разработки.

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА**  
**«СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ» ГОТОВО**

Студенту: "vs01@tpu.ru" <vs01@tpu.ru>

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>
150Б91	Ван Сяоя

<b>Школа</b>	<b>ИЯТШ</b>	<b>Отделение (НОЦ)</b>	<b>ОЭФ</b>
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	03.03.02 Физика

Тема ВКР:

<b>Сверхпроводимость (La, Ba) N<sub>10</sub> под высоким давлением</b>	
<b>Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:</b>	
<p><b>Введение</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика) и области его применения.</li> <li>– Описание рабочей зоны (рабочего места) при разработке проектного решения/при эксплуатации</li> </ul>	<p><i>Объект исследования:</i> сверхпроводимость (La,Y)N<sub>10</sub> под высоким давлением</p> <p><i>Область применения:</i> Физика конденсированных сред.</p> <p><i>Рабочая зона:</i> компьютерный зал (Цзилиньский университет, КНР).</p> <p><i>Размеры помещения:</i> 4 м x 3,5 м x 3 м.</p> <p><i>Количество и наименование оборудования рабочей зоны:</i> персональный компьютер.</p> <p><i>Рабочие процессы, связанные с объектом исследования, осуществляющиеся в рабочей зоне:</i> SQS использовался для генерации неупорядоченных сплавов, VASP - для оптимизации структуры, а программный пакет Quantum-ESPRESSO - для изучения сверхпроводимости..</p>
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
<p><b>1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности при эксплуатации:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства;</li> <li>– организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.</li> </ul>	<p>Специальные: должностная инструкция работника.</p> <p>Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 № 197-ФЗ (ред. от 02.12.2019).</p> <p>ГОСТ 12.2.032-78. ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования (дата введения: 01.01.1979).</p> <p>ГОСТ 12.2.033-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ стоя. Общие эргономические требования (дата введения: 01.01.1979).</p>
<p><b>2. Производственная безопасность при эксплуатации:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– Анализ выявленных вредных и опасных производственных факторов</li> </ul>	<p><i>Вредные производственные факторы:</i> шум на рабочем месте, отклонение показателей микроклимата, недостаточная освещенность рабочей зоны.</p> <p><i>Опасные производственные факторы:</i> электрический ток.</p>



	<i>Требуемые средства коллективной и индивидуальной защиты от выявленных факторов: противошумные наушники, вентиляция, кондиционирование воздуха.</i>
<b>3. Экологическая безопасность при эксплуатации</b>	<i>Воздействие на селитебную зону: отсутствует. Воздействие на литосферу: твердые отходы. Воздействие на гидросферу: отсутствует. Воздействие на атмосферу: отсутствует.</i>
<b>4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях при эксплуатации</b>	<i>Возможные ЧС при разработке и эксплуатации проектируемого решения: авария, взрыв, загрязнение атмосферы отравляющими веществами. Наиболее типичная ЧС: пожар в помещении.</i>
<b>Дата выдачи задания для раздела по линейному графику</b>	

**Задание выдал консультант:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ООД ШБИП	Сечин А.И.	Д.Т.Н.		

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б91	Ван Сяоя		

## 5 Социальная ответственность

Объектом исследования является сверхпроводимость  $(La,Y)H_{10}$  под высоким давлением.

Исследование выполнялось в компьютерном зале Цилиньского университета (КНР). Размеры помещения: высота 4 м, ширина 3.5 м, длина 3 м, площадь 42 м<sup>3</sup>. Рабочее оборудование для проведения исследования – персональный компьютер.

В процессе проведения исследования рассчитывали сверхпроводимость  $(La,Y)H_{10}$  на ПК с использованием пакета программ VASP, Quantum-ESPRESSO.

С целью оценки степени безопасности исследования сверхпроводимости  $(La,Y)H_{10}$  под высоким давлением в данном разделе ВКР необходимо рассмотреть правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности; потенциальные вредные и опасные факторы и способы снижения их воздействия; экологическую безопасность научного проекта, а также вопросы безопасности в чрезвычайных ситуациях.

### 5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

#### 5.1.1 Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя) правовые нормы трудового законодательства

Организации должны соблюдать требования трудового кодекса Российской Федерации от 30.12.2001 № 197-ФЗ [1].

Согласно данному документу, нормальная продолжительность рабочего времени не может превышать 40 часов в неделю, в данном случае продолжительность рабочей недели составляет шесть дней. Как следствие, применяется следующий режим работы: с понедельника по пятницу 7 часов в день, в субботу 5 часов в день. Оплата труда производится в размере не ниже

уровня МРОТ, и нормы труда установлены в соответствии с уровнем техники, технологии, организации производства и труда.

Компенсации и гарантии регламентируются в трудовом кодексе Российской Федерации [1], в локальных нормативных актах, в коллективном договоре и трудовом договоре.

### **5.1.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя**

Рабочее место располагается в подвале в компьютерном зале (Цзилиньский университет, КНР). Размеры помещения: высота 4 м, ширина 3.5 м, длина 3 м, площадь 42 м<sup>3</sup>. Рабочее оборудование персональный компьютер.

При проведении исследования инженер находится в положении стоя или сидя. Следовательно, при организации рабочего места исследователя требуется соблюдение нормативов ГОСТ 12.2.032-78 [2] и ГОСТ 12.2.033-78 [3].

Компьютерный зал оснащен отоплением и вентиляцией. Для отделки помещений используют диффузно-отражающие материалы. Поверхность пола соответствует следующим требованиям: ровность, удобство для очистки, наличие антистатических свойств, отсутствие выбоин. В помещении держат аптечку первой медицинской помощи и огнетушитель. Расположение рабочего стола обеспечивает удобство работы за ним и дает возможность осмотра, а также ремонта находящегося на нем оборудования.

## **5.2 Производственная безопасность**

Исследование выполнялось в компьютерном зале Цзилиньского университета (КНР). Размеры помещения: высота 4 м, ширина 3.5 м, длина 3 м, площадь 42 м<sup>3</sup>. Рабочее оборудование – персональный компьютер.

Для идентификации потенциальных факторов использован ГОСТ 12.0.003-2015 [4]. Перечень выявленных возможных опасных и вредных факторов представлен в таблице 5.1.

Таблица 5.1 – Возможные опасные и вредные факторы

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015)	Этапы работ			Нормативные документы
	Разработ ка	Изготовл ение	Эксплуат ация	
1. Анализ электробезопасности • наличие электроисточников, характер их опасности; • установление класса электроопасности помещения, а также безопасные номиналы тока, напряжения, сопротивления заземления.уровня шума		+		ГОСТ 12.1.003-2014 [5] СН 2.2.4/2.1.8.562-96 [6] ГОСТ 12.1.029-80. ССБТ [7]
2. Отклонение показателей микроклимата	+	+		ГОСТ 12.1.005-88 [8] ГОСТ 12.1.007-76.ССБТ [9] СанПиН 1.2.3685-21 [10] ГОСТ 12.4.011-89 [11]
3. Анализ электробезопасности	+	+	+	ГОСТ 12.1.038-82 [12] ГОСТ Р 12.1.019-2009 [13]
4. Анализ освещенности рабочей зоны	+	+		СанПиН 1.2.3685-21 [10]

## 5.2.1 Анализ опасных и вредных производственных факторов

### 5.2.1.1 Анализ показателей шума

Гигиенические нормативы по шуму устанавливаются национальным законодательством [5].

В таблице 5.2 показаны допустимые уровни шума представленные в Санитарных нормах [6].

Таблица 5.2 – Предельно допустимые уровни звука и эквивалентные уровни звука на рабочих местах для трудовой деятельности разных категорий тяжести и напряженности в дБА

Категория напряженности трудового процесса	Категория тяжести трудового процесса				
	легкая физическая нагрузка	средняя физическая нагрузка	тяжелый труд 1 степени	тяжелый труд 2 степени	тяжелый труд 3 степени
Напряженность легкой степени	80	80	75	75	75
Напряженность средней степени	70	70	65	65	65
Напряженный труд 1 степени	60	60	-	-	-
Напряженный труд 2 степени	50	50	-	-	-

Работа исследователя в компьютерном зале относится к категории работ с легкой степенью напряжённости и с легкой физической нагрузкой. Для рабочих мест таких работников предельно допустимый уровень шума составляет 80 дБА.

Длительное воздействие шума является причиной возникновения определенных заболеваний нервной системы.

С воздействием шума, превышающего норму, связано повышение артериального давления, снижение слуха, и т. п. [14]. Показатели уровня шума в компьютерном зале соответствуют нормативам.

При превышении норм по шуму нужно принимать меры по снижению уровня шума и защите работников от его воздействия в соответствии с [7], используя в том числе такие меры, как:

- применение противошумных наушников;
- оборудование акустических экранов;

Кроме того, необходимо рационально размещать рабочие места, а также создавать шумозащищенные зоны.

### 5.2.1.2 Анализ показателей микроклимата

Показателями микроклимата производственных помещений называются температура и относительная влажность воздуха, скорость движения воздуха [15].

В таблице 5.3 обозначены оптимальные и допустимые показатели микроклимата в рабочей зоне помещения для категории работ «Легкая Ia» по ГОСТ 12.1.005-88 [8].

Влажность воздуха влияет на терморегуляцию организма: с высокой влажностью связано затруднение терморегуляции, слишком низкая влажность приводит к пересыханию слизистой оболочки дыхательных путей.

Движение воздуха в значительной степени отражается на самочувствии человека: результатом движения воздуха меньше нормы является головная боль; вследствие движения воздуха больше нормы возможны переохлаждение и простудные заболевания.

Таблица 5.3 – Требования к микроклимату помещения для категории работ «Легкая Ia»

Период года	Температура, °С					Относительная влажность, %		Скорость движения, м/с	
	оптимальная	допустимая				оптимальная	допустимая на рабочих местах постоянных и	оптимальная, не более	допустимая на рабочих местах
		верхняя граница		нижняя граница					
		на рабочих местах							
	постоянных	непостоянных	постоянных	непостоянных					
Холодный	22-24	25	26	21	18	40-60	75	0,1	Не более 0,1

Теплый	23- 25	28	30	22	20	40- 60	55 (при 28°C)	0,1	0,1- 0,2
--------	-----------	----	----	----	----	-----------	------------------	-----	-------------

Если температуры окружающего воздуха высокие, то это может приводить к перегреву, обмороку, тепловому удару, обезвоживанию. Если температура окружающего воздуха на рабочем месте слишком низкая, то это может приводить к простудным заболеваниям, снижению иммунитета, замерзанию [16].

В компьютерном зале существует опасность, что скорость движения воздуха недостаточна, и исследователи не могут работать в этой среде в течение длительного периода времени.

Для обеспечения соответствия показателей микроклимата требуемым оптимальным и допустимым нормам следует проводить измерение показателей микроклимата в соответствии с требованиями, представленными в СанПиН 1.2.3685-21 [10].

Чтобы поддерживать требуемые параметры микроклимата в рабочей зоне, используют защиту от источников теплового излучения, систему вентиляции, кондиционирование воздуха, отопление, влажную уборку, увлажнение воздуха.

В компьютерном зале требуется выполнение санитарно-гигиенических, медико-биологических и организационно-технических мероприятий:

- вентиляция и очистка воздуха;
- кондиционирование воздуха;
- локализация вредных факторов;
- отопление;
- автоматический контроль и сигнализация [11].

### 5.2.1.3 Анализ электробезопасности

Электрический ток рассматривается в качестве повышенного источника опасности. В таблице 5.4 выделены предельно допустимые значения электрического тока при неаварийном режиме работы электрооборудования [12].

Таблица 5.4 – Предельно допустимые значения напряжений прикосновения и токов

Род тока	$U$ , В	$I$ , мА
	не более	
Переменный, 50 Гц	2,0	0,3
Переменный, 400 Гц	3,0	0,4
Постоянный	8,0	1,0

Основными источниками поражения электрическим током являются поврежденная проводка, розетка, выключатель и открытые металлические участки электроприборов.

К основным причинам воздействия тока на человека относятся ситуации: 1) человек случайно прикасается или приближается на опасное расстояние к токоведущим частям; 2) в результате повреждения изоляции или ошибочных действий персонала на металлических частях оборудования появляется напряжение; 3) напряжение появляется на отключённых токоведущих частях, где работают люди, в связи с ошибочным включением установки; 4) провод замыкается на землю, в результате чего появляется шаговое напряжение на поверхности земли [17].

Электрический ток оказывает на человека следующие виды воздействия:

1) термическое – приводит к ожогам, нагреву кровеносных сосудов и других органов, вследствие чего в них появляются функциональные расстройства;



2) электролитическое – для электролитического действия тока характерно разложение крови и других органических жидкостей, что приводит к нарушениям их физико-химического состава;

3) механическое – повреждения (разрыв, расслоение и др.) различных тканей организма в результате электродинамического эффекта;

4) биологическое – может являться причиной нарушения и полного прекращения деятельности органов дыхания и кровообращения [18].

Электробезопасность включает следующие технические и организационные средства и мероприятия, предназначенные для обеспечения защиты людей от воздействия тока:

– выполнение электроустановок в соответствии с требованиями электробезопасности;

– использование электрического разделения;

– применение системы защитных проводов; применение электрического разделения сети [18].

#### **5.2.1.4 Анализ показателей освещенности рабочей зоны**

Нормы освещения в помещении для работы с персональным компьютером по [10] представлены в таблице 5.5.

В результате неблагоприятных условий освещения может утомляться зрительный анализатор, снижаться работоспособность, могут появляться профессиональные заболевания [19].

С неблагоприятными условиями освещения связано повышенное утомление и развитие близорукости. Неблагоприятные условия освещения вызывают повышенное утомление и апатию.

Таблица 5.5 – Нормируемые показатели естественного, искусственного и совмещенного освещения

Рабочая поверхность и плоскость нормирования КЕО и освещённости (Г – горизонтальная, В – вертикальная) и высота плоскости над полом, м	Естественное освещение КЕО $e_n$ , %		Совмещённое освещение КЕО $e_n$ , %		Искусственное освещение				
	при верхнем или комбинированном освещении	при боковом освещении	при верхнем или комбинированном освещении	при боковом освещении	Освещённость, лк		Показатель диска форта, М, не более	Коэффициент пульсации освещённости, КЕО $e_n$ , %	
					при комбинированном освещении	при общем освещении			
					все го	от общего			
Г-0,8	2,4	1,9	2,0	0,5	397	255	367	37	37

Длительное пребывание в условиях недостаточного освещения способствует световому голоданию и снижению интенсивности обмена веществ в организме.

Для правильного освещения в компьютерном зале необходимо верно выбирать вид освещения, количество и расположение ламп, тип осветительных приборов. Компьютерный зал освещен верхним общим освещением.

Используемое в компьютерном зале освещение обеспечивает достаточную освещённость рабочей поверхности, освещённость стабильная, без блескости и без теней.

### 5.3 Экологическая безопасность

При написании ВКР вредных выбросов в атмосферу, почву и водные источники не производилось, радиационного заражения не произошло,

чрезвычайные ситуации не наблюдались, поэтому не оказывались существенные воздействия на окружающую среду и никакого ущерба окружающей среде не было нанесено.

Объект исследования является теоретическим, но разрабатывается в компьютере. Поэтому с точки зрения влияния на окружающую среду рассмотрим влияние компьютерной техники, использованной при его разработке.

Компьютерная техника потребляет сравнительно небольшое количество электроэнергии, поэтому по затратам на электроэнергию она не оказывает существенной опасности для окружающего мира.

Компьютеры, утратившие потребительские свойства, относятся к IV классу опасности (малоопасные отходы). Обезвреживание и размещение отходов I–IV классов опасности проводятся организациями, имеющими лицензию на осуществление этой деятельности. При неправильной утилизации компьютера может значительно пострадать экология, поэтому предлагается следующий порядок утилизации:

- 1) удаление всех опасных компонентов;
- 2) удаление всех крупных пластиковых частей. Оставшиеся после разборки части отправляют в большой измельчитель, и все дальнейшие операции автоматизированы;
- 3) измельченные в гранулы остатки компьютеров подвергаются сортировке. Сначала с помощью магнитов извлекаются все железные части. Затем приступают к выделению цветных металлов, которых в ПК значительно больше.

Все полученные в ходе переработки материалы могут вторично использоваться в различных производственных процессах.

## 5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

Под чрезвычайными ситуациями понимаются опасные события или явления, в результате чего нарушается безопасность жизнедеятельности.

К основным причинам возникновения чрезвычайных ситуаций относятся две категории: 1) внешние – стихийные бедствия, неожиданное прекращение подачи электроэнергии, воды, технологических продуктов и т. д.; 2) внутренние – сложность технологий, недостаточная квалификация персонала, проектно-конструкторские недоработки, физический и моральный износ оборудования, низкая трудовая и технологическая дисциплина и т. п.

В компьютерном зале наиболее вероятно возникновение чрезвычайных ситуаций (ЧС) техногенного характера. ЧС техногенного характера называются ситуации, которые возникают в результате производственных аварий и катастроф на объектах; пожаров, взрывов на объектах; загрязнения атмосферы отравляющими веществами. Следствием ЧС техногенного характера могут быть внезапное обрушение зданий и сооружений, нарушение работы энергетических сетей, коммунального жизнеобеспечения, очистных сооружений, технологических линий и т. д.

В случае возникновения ЧС в организации необходимо выполнить следующий комплекс мероприятий: 1) эвакуация; 2) укрытие людей в защитных сооружениях; 3) обеспечение индивидуальными средствами защиты; 4) организация медицинской помощи пострадавшим.

В качестве наиболее распространенной вероятной ЧС в компьютерном зале выделяют пожар.

Помещение для работы за персональными компьютерами по степени пожароопасности относится к классу П-П, так как в нем присутствует пыль во взвешенном состоянии [20].

Причины возникновения пожара могут быть электрического и неэлектрического характера.

Причины возникновения пожара электрического характера: короткое замыкание, перегрузки по току, искрение и электрические дуги, статическое электричество и т. п.

Причины возникновения пожара неэлектрического характера: халатное, неосторожное обращение с огнем (курение, оставленные без присмотра нагревательные приборы, использование открытого огня); самовоспламенение и самовозгорание веществ.

Для устранения причин возникновения пожаров в помещении для работы с персональными компьютерами должны проводиться следующие мероприятия: а) сотрудникам необходимо пройти противопожарный инструктаж; б) необходимо знание сотрудниками расположения средств пожаротушения и умение ими пользоваться; в) требуется обеспечить правильный тепловой и электрический режим работы оборудования; г) пожарный инвентарь и первичные средства пожаротушения необходимо содержать в исправном состоянии и располагать на видном и легко доступном месте.

Если в организации возник пожар, то после его ликвидации определяется возможность дальнейшего использования оборудования и имеющихся коммуникаций. Исследовательское оборудование, трубопроводы, электрооборудование проверяются на соответствие их состояния нормам пожарной безопасности. В случае отсутствия повреждений можно продолжать работу [21].

### **Выводы по разделу**

В результате проведенных исследований в рамках раздела «Социальная ответственность» были изучены правовые нормы трудового законодательства при проведении исследования сверхпроводимости  $(La, Y)NiO$  под высоким давлением.

Проанализированы основные вредные и опасные факторы, которые могут возникать в процессе исследований: показатели микроклимата, уровень

шума, освещенность рабочей зоны, значения опасности электрической цепи, потенциальные опасности пожара. Были описаны мероприятия по снижению уровней воздействия данных факторов.

Рассмотрен характер воздействия проектируемого решения на окружающую среду. В процессе выполнения исследования было выявлено, что отходы, полученные в ходе исследований, не оказывали влияние на гидросферу и литосферу. Во избежание загрязнения окружающей среды отходы утилизировались в строгом соответствии с соответствующими документами.

Проанализированы природные и технические чрезвычайные ситуации, которые могут возникнуть в компьютерном зале. Для предотвращения чрезвычайных ситуаций были разработаны превентивные меры, а также разработаны процедуры для обработки помещения после чрезвычайных ситуаций.

## СПИСОК ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 № 197-ФЗ (ред. от 02.12.2019).
2. ГОСТ 12.2.032-78. ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования (дата введения: 01.01.1979).
3. ГОСТ 12.2.033-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ стоя. Общие эргономические требования (дата введения: 01.01.1979).
4. ГОСТ 12.0.003-2015. ССБТ. Опасные и вредные производственные факторы. Классификация (дата введения: 01.03.2017).
5. ГОСТ 12.1.003-2014. ССБТ. Шум. Общие требования безопасности (дата введения: 01.11.2015).
6. СН 2.2.4/2.1.8.562-96. Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории застройки (утв. Постановлением Госкомсанэпиднадзора РФ от 31 октября 1996 г.).
7. ГОСТ 12.1.029-80. ССБТ. Средства и методы защиты от шума. Классификация (дата введения: 01.07.1981).
8. ГОСТ 12.1.005-88. ССБТ. Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны (дата введения: 01.01.1989).
9. ГОСТ 12.1.007-76. ССБТ. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности (дата введения: 01.01.1977).
10. [СанПиН 1.2.3685-21 «Гигиенические нормативы и требования к обеспечению безопасности и \(или\) безвредности для человека факторов среды обитания»](#) (утв. Постановлением № 2 от 28 января 2021 г.).
11. ГОСТ 12.4.011-89. ССБТ. Средства защиты работающих. Общие требования и классификация (дата введения: 01.07.1990).
12. ГОСТ 12.1.038-82 ССБТ. Электробезопасность. Предельно допустимые уровни напряжений прикосновения и токов (дата введения: 01.07.1983).
13. ГОСТ Р 12.1.019-2009 ССБТ. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты (дата введения: 01.01.2011).

14. Влияние шума на организм человека [Электронный ресурс] // Управление Федеральной службы по надзору в сфере защиты прав потребителей и благополучия человека по Карачаево-Черкесской республике. – 2011. – URL: <http://09.rospotrebnadzor.ru/content/vliyanie-shuma-na-organizm-cheloveka> (дата обращения: 20.03.2023).
15. Микроклимат на рабочем месте [Электронный ресурс] // Управление Федеральной службы по надзору в сфере защиты прав потребителей и благополучия человека по Кемеровской области – Кузбассу. – 2016. – URL: <http://42.rospotrebnadzor.ru/content/874/54136/> (дата обращения: 20.03.2023).
16. Мушников, В. С. Условия труда работающих: влияние нагревающего микроклимата промышленных помещений на организм человека: Методическая разработка / В. С. Мушников, В. В. Вьюхин, В. И. Лихтенштейн, Л. Г. Турчанинов. – Екатеринбург: УрФУ, 2019. – 22 с.
17. Назаренко, О. Б. Безопасность жизнедеятельности: учебное пособие / О. Б. Назаренко. – Томск: Изд-во ТПУ, 2010. – 144 с.
18. Куликов, Г. Б. Безопасность жизнедеятельности: учебник / Г. Б. Куликов. – М.: МГУП, 2010. – 408 с.
19. Михалёва, К. А. Влияние параметров световой среды на здоровье человека / К. А. Михалёва [Электронный ресурс] // Городской округ Верхотурский. – 2017. – URL: <http://adm-verhotury.ru/social/helth/media/2017/10/16/vliyanie-parametrov-svetovoj-sredyi-na-zdorove-cheloveka/> (дата обращения: 20.03.2023).
20. ФЗ «Технический регламент о требованиях пожарной безопасности» от 22.07.2008 № 123-ФЗ (с изменениями от 30 апреля 2021 года).
21. ВНЭ 5-79. Правила пожарной безопасности при эксплуатации предприятий химической промышленности (утв. Министерством химической промышленности 25 июля 1979 г.).



## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проведены исследования сверхпроводимости  $(La_3, Y_1)H_{40}$  при высоких давлениях. Установлено, что фаза  $Rm\bar{3}m-La_3YH_{40}$  кинетически стабильна при 250 и 300 ГПа. Для альтернативного сплава  $(La_{0,75}, H_{0,25})H_{10}$  предсказана температура сверхпроводящего перехода около 309 К ( $\sim +36$  °С) при 250 ГПа и около 295 К ( $\sim +22$  °С) при 300 ГПа. Также было обнаружено, что альтернативные сплавы с соотношением атомных номеров La, Y = 1:1, 3:1, 1:3 ( $La_2Y_2H_{40}, La_3Y_1H_{40}, La_1Y_3H_{40}$ ) кинетически стабильны при 300 ГПа, а температура сверхпроводящего перехода всех этих сплавов составляет приблизительно выше комнатной температуры при 300 ГПа.

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- [1] Onnes H K. Leiden Comm. 1911, V.122b, 122 с.
- [2] Электронный ресурс: <https://www.nobelprize.org/prizes/physics/1913/summary>.
- [3] Meissner, W;Ochsenfeld, R.Short initial announcements.[J].Naturwissenschaften,1933,V.21:P.787-788
- [4] Onnes H K. The resistance of pure mercury at helium temperatures[J]. 1911,V.124,P.261-263
- [5] Oya G I, Saur E J. Preparation of Nb<sub>3</sub>Ge films by chemical transport reaction and their critical properties [J]. Journal of Low Temperature Physics, 1979, V. 34(5), P.569-583
- [6] Bednorz, Johannes Georg; Müller, Katharina Alex.Possible high T<sub>c</sub> superconductivity in the Ba-La-Cu-O system [J]. Zeitschrift für Physik B Condensed Matter,1986, V.64(2),P.189-193.
- [7] Электронный ресурс: <https://www.nobelprize.org/prizes/physics/1987/summary/>
- [8] 赵忠贤,陈立泉,杨乾声 等. 科学通报.1987, V.32, 817 с
- [9] Wu M K,Ashburn J R,Torng C J et al. Phys. Rev. Lett.,1987,V.58, 908
- [10] Gao L,Xue Y ,Chen F et al. Phys. Rev. B, 1994 , V.50, 4260
- [11] Kaminhara Y, Watanade T, Hirano M, et al. Iron-based layered superconductor La[O<sub>1-x</sub>F<sub>x</sub>]FeAs (x=0.05-0.12) with T<sub>c</sub>=26 K [J]. Journal of the American Chemical Society, 2008, V.130(11),3296.
- [12] Chen G F,Li Z,Wu D et al. Chin. Phys. Lett.,2008,V.25, 2235
- [13] Jun Nagamatsu, Norimasa Nakagawa, Takahiro Muranaka, Yuji Zenitani, Jun Akimitsu.. Superconductivity at 39 K in magnesium diboride[J].Nature,2001,V.410(6824), 63.
- [14] Duan D, Liu Y, Tian F, et al. Pressure-induced metallization of dense (H<sub>2</sub>S)<sub>2</sub>H<sub>2</sub> with high-T<sub>c</sub> superconductivity [J]. Scientific Reports, 2014, V.4(1), 6968.

[15] Duan D, Huang X, Tian F, et al. Pressure-induced decomposition of solid hydrogen sulfide [J]. *Physical Review B*, 2015, V.91(18), 180502.

[16] Liu H, Nanumov I I, Hoffmann R, et al. Potential high-T<sub>c</sub> superconducting lanthanum and yttrium hydrides at high pressure [J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2017, V.114(27) P. 6990-6995.

[17] Peng F, Sun Y, Pickard C J, et al. Hydrogen clathrate structures in rare earth hydrides at high pressures: Possible route to room-temperature superconductivity [J]. *Physical review letters*, 2017, V.119(10), 107001.

[18] Wittig J. Pressure-Induced Superconductivity in Cesium and Yttrium. *Phys. Rev. Lett*, 1970, V.24, P.812-815.

[19] Tetsuji Kume, Hiroyuki Ohura, Shigeo Sasaki, Hiroyasu Shimizu, Ayako Ohmura, Akihiko Machida, Tetsu Watanuki, Katsutoshi Aoki, and Kenichi Takemura. High-pressure study of YH<sub>3</sub> by Raman and visible absorption spectroscopy. *PHYSICAL REVIEW B*, 2007, V.76, 024107.

[20] Kim D Y, Scheicher R H and Ahuja, Predicted High-Temperature Superconducting State in the Hydrogen-Dense Transition-Metal Hydride YH<sub>3</sub> at 40K and 17.7GPa. *R. Phys. Rev. Lett*, 2009,103,077002..

[21] Liu H Y, Ivan I. Naumov, Roald Hoffmann, N. W. Ashcroft c, and Russell J. Hemley. Potential high-T<sub>c</sub> superconducting lanthanum and yttrium hydrides at high pressure. *PNAS Early Edition*.2017, V.1, 6.

[22] Jamieson, John C.;Lawson, A. W.;Nachtrieb, N. D..New Device for Obtaining X-Ray Diffraction Patterns from Substances Exposed to High Pressure[J].*Review of Scientific Instruments*,1959,V.30(11).

[23] Dubrovinsky ;Natalia Dubrovinskaia ;Vitali B Prakapenka ;Artem M Abakumov. Implementation of micro-ball nanodiamond anvils for high-pressure studies above 6 Mbar[J].*Nature Communications*,2012,V.3(10), 1163.

[24] Drozdov AP, Eremets MI, Troyan IA, Ksenofontov V, Shylin SI. Conventional superconductivity at 203 kelvin at high pressures in the sulfur hydride system. *Nature*. 2015; V.525, P.73–76.

[25] Li Y, Hao J, Liu H, Tse JS, Wang Y, Ma Y. Pressure-stabilized superconductive yttrium hydrides. *Sci Rep.* 2015,V.5, 9948.

[26] Drozdov AP, Kong PP, Minkov VS, Besedin SP, Kuzovnikov MA, Mozaffari S, et al. Superconductivity at 250 K in lanthanum hydride under high pressures. *Nature.* 2019, V.569, 528– 531.

[27] Xiaohua Zhang;Yaping Zhao;Guochun Yang.Superconducting ternary hydrides under high pressure[J].*WIREs Computational Molecular Science*,2022,V.12(3): e1582

[28] Li Y, Hao J, Liu H, et al. The metallization and superconductivity of dense hydrogen sulfide [J]. *J. Chem. Phys.*, 2014, V.140(17), 174712.

[29] Drozdov A P, Erements M I, Troyan I A, et al. Conventional superconductivity at 203 kelvin at high pressures in the sulfur hydride system [J]. *Nature*, 2015, V.525(7567), P.73-76.

[30] 孙莹,刘寒雨,马琰铭.高压下富氢高温超导体的研究进展[J].*物理学报*,2021,V.70(01),P.137-142.

[31] Kostrzewa, M., Szczeńiak, K. M., Durajski, A. P. & Szczeńiak, R. From LaH<sub>10</sub> to room-temperature superconductors. 2020,V.10, P.1–8.

[32] Dmitrii V. Semenok, Ivan A. Troyan, Alexander G. Kvashnin, Superconductivity at 253 K in lanthanum–yttrium ternary hydrides[J].*Materials Today*,2021,

[33] Kresse G, Furthmuller J, Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations uplane-wave basis set . *Physical Review* ,1996,V.54(16), P. 11169-11186

[34] 刘寒雨.超高压下固体氢的奇异结构与性质研究[D].吉林大学,2013.

[35] Bushlanov P V, Blatov V A, Oganov A R. Topology-based crystal structure generator. *Computer Physics Communications*, 2019, V.236.P.1-7

[36] Lepeshkin S V, Baturin V S, Uspenskii Y A, et al. Method for Simultaneous Prediction of Atomic Structure and Stability of Nanoclusters in a Wide Area of Compositions [J].*Journal of Physical Chemistry Letters*, 2019,V. 10(1),P.102-106.

[37] Oganov A R, Lyakhov A O, Valle M. How Evolutionary Crystal Structure Prediction Works-and Why [J]. Accounts of Chemical Research, 2011, V.44(3), P.227-237.

[38] Zunger A, Wei S H, Ferreira L G, et al. Special quasirandom structures[J]. Physical Review Letters, 1990, V.65(3), P.353-356.

[39] Sanchez J M, Ducastelle F, Gratias D. Generalized cluster description of multicomponent systems[J]. Physica A: Statistical and Theoretical Physics, 1984, V.128(1), P.334-350.

[40] Jiang C, Wolverton C, Sofo J, et al. First-principles study of binary bcc alloys using special quasirandom structures [J]. Physical Review , 2004, V.69(21), 214202.

[41] Zunger A, Wei S H, Ferreira L G, et al. Special quasirandom structures[J]. Physical Review Letters, 1990, V.65(3) P. 353-356.

[42] Wolverton C. Crystal structure and stability of complex precipitate phases in A-Cu-Mg-(Si) and Al-Zn-Mg alloys. Acta Materialia, 2001, V.49(16), P.3129-3142.

[43] Jiang C, Wolverton C, Sofo J, et al. First-principles study of binary bcc alloys using special quasirandom structures[J]. Physical Review , 2004, V. 69(21), 214202.