

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
Теоретическое исследование системы Ва-Хе под высоким давлением

УДК: 538.945.42-047.37:546.295:546.43

Обучающийся

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б91	Люй Шу		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор отделение эксперименталь ной физики	Никитенков Николай Николаевич	Доктор физико- математическ их наук		

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Лаборатория перспективных материалов и обеспечения безопасности водородных энергосистем: Инженер	Адильжан К. Дюсамбаев			

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.

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОСВОЕНИЯ ООП/ОПОП

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

ОПК(У)-8	Способен критически переосмысливать накопленный опыт, изменять при необходимости направление своей деятельности.
ОПК(У)-9	Способен получить организационно-управленческие навыки при работе в научных группах и других малых коллективах исполнителей.
Профессиональные компетенции	
ПК(У)-1	Способностью использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин
ПК(У)-2	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
ПК(У)-3	Готовность применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований
ПК(У)-4	Способность применять на практике профессиональные знания и умения, полученные при освоении профильных физических дисциплин
ПК(У)-5	Способность пользоваться современными методами обработки, анализа и синтеза физической информации в избранной области физических исследований
ПК(У)-6	Способность понимать и использовать на практике теоретические основы организации и планирования физических исследований
ПК(У)-7	Способность участвовать в подготовке и составлении научной документации по установленной форме
ПК(У)-8	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	Люй Шу

Тема работы:

Теоретическое исследование системы Ва-Хе под высоким давлением
<i>Утверждена приказом директора (дата, номер)</i>

Срок сдачи обучающимся выполненной работы:	
--	--

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p>Исходные данные к работе <i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к функционированию (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.)</i></p>	<ul style="list-style-type: none"> – CALYPSO был использован для изучения кристаллической структуры и электронных свойств соединений бария и ксенона при высоком давлении.
<p>Перечень разделов пояснительной записки подлежащих исследованию, проектированию и разработке <i>(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)</i></p>	<ul style="list-style-type: none"> – проведение литературного обзора; – CALYPSO, программное обеспечение для прогнозирования кристаллической структуры, использовалось для прогнозирования структуры соединений бария и ксенона под высоким давлением и отсеивания стабильных структур; – используя расчет по первому принципу, рассчитываются и обсуждаются электронные свойства стабильных соединений при высоком давлении; – обсуждение результатов;

	– заключение.
Перечень графического материала <i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i>	
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы <i>(с указанием разделов)</i>	
Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Верховская Марина Витальевна, Доцент ОСГН
Социальная ответственность	Сечин А.И., Профессор ООД ШБИП

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

Задание выдал руководитель:

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

Задание принял к исполнению обучающийся:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б91	Дюй Шу		

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:

Группа	ФИО
150Б91	Дюй Шу

Тема работы:

Теоретическое исследование системы Ва-Хе 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	Дюй Шу		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСООБЪЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту: Люй Шу

Группа	ФИО
150Б91	Люй Шу

Школа	ИШПР	Отделение	ОЭФ
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	03.03.02 Физика

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

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Работа с информацией, представленной в российских и иностранных научных публикациях, аналитических материалах, статических бюллетенях и изданиях, нормативно-правовых документах; анкетирование; опрос.
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	Проведение предпроектного анализа. Определение целевого рынка и проведение его сегментирования. Выполнение SWOT-анализа проекта
2. Определение возможных альтернатив проведения научных исследований	Определение целей и ожиданий, требований проекта. Определение заинтересованных сторон и их ожиданий.
3. Планирование процесса управления НИИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок	Составление календарного плана проекта. Определение бюджета НИИ
4. Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности	Проведение оценки экономической эффективности исследования получения полиметилметакрилата суспензионным способом

Перечень графического материала(с точным указанием обязательных чертежей):

1. Оценка конкурентоспособности технических решений
2. Матрица SWOT
3. График проведения НИИ
4. Определение бюджета НИИ
5. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИИ

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

Задание выдал консультант:

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

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б91	Люй Шу		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА

«СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ» ГОТОВО

Студенту: "ls05@tpu.ru" <ls05@tpu.ru>

Группа	ФИО		
150Б91	Люй Шу		
Школа	ИЯТШ	Отделение (НОЦ)	ОЭФ
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	03.03.02 Физика

Тема ВКР:

Теоретическое исследование системы Ва-Хе под высоким давлением	
Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
Введение – Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика) и области его применения. – Описание рабочей зоны (рабочего места) при разработке проектного решения/при эксплуатации	<i>Объект исследования:</i> Теоретическое исследование системы Ва-Хе под высоким давлением. <i>Область применения:</i> Физика конденсированных сред. <i>Рабочая зона:</i> Компьютерный зал (Цилинский университет, КНР). <i>Размеры помещения:</i> 4 м x 3,5 м x 3 м. <i>Количество и наименование оборудования рабочей зоны:</i> Персональный компьютер. <i>Рабочие процессы, связанные с объектом исследования, осуществляющиеся в рабочей зоне:</i> Используйте программный пакет CALYPSO для прогнозирования структуры соединений бария и ксенона при высоком давлении.
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности при эксплуатации: – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.	Специальные: должностная инструкция работника. Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 № 197-ФЗ (ред. от 02.12.2019). ГОСТ 12.2.032-78. ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования (дата введения: 01.01.1979). ГОСТ 12.2.033-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ стоя. Общие эргономические требования (дата введения: 01.01.1979).
2. Производственная безопасность при эксплуатации: – Анализ выявленных вредных и опасных производственных факторов	<i>Вредные производственные факторы:</i> шум на рабочем месте, отклонение показателей микроклимата, недостаточная освещенность рабочей зоны. <i>Опасные производственные факторы:</i> электрический ток. <i>Требуемые средства коллективной и индивидуальной защиты от выявленных факторов:</i> противошумные наушники, вентиляция, кондиционирование воздуха.
3. Экологическая безопасность при эксплуатации	<i>Воздействие на селитебную зону:</i> отсутствует. <i>Воздействие на литосферу:</i> твердые отходы. <i>Воздействие на гидросферу:</i> отсутствует. <i>Воздействие на атмосферу:</i> отсутствует.
4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях при эксплуатации	<i>Возможные ЧС при разработке и эксплуатации проектируемого решения:</i> авария, взрыв, загрязнение атмосферы отравляющими веществами. <i>Наиболее типичная ЧС:</i> пожар в помещении.
Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	

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	Люй Шу		

Реферат

Выпускная квалификационная работа 85 с., 21 рисунка, 18 таблиц, 67 источников.

Ключевые слова: Высокое давление, предсказание кристаллической структуры, соединение бария с ксеноном

Объектом исследования является соединение барий-ксенон под высоким давлением.

Цель работы – Исследование структуры и электронных свойств соединений бария-ксенона в различных пропорциях под высоким давлением.

Для достижения цели были поставлены следующие задачи:

1. Провести аналитический обзор информационных источников.

2. Использовать метод CALYPSO в сочетании с расчетами из первых принципов для прогнозирования кристаллической и электронной структуры соединений щелочноземельного металла Ba и инертного газа Xe под высоким давлением.

Основные результаты. – Установлено, что высокое давление играет ключевую роль в образовании стабильных соединений Ba-Xe, и в соединениях Ba-Xe атомы бария и атомы ксенона связаны ионными связями, где атомы Ba действуют как доноры электронов в соединении.

Область применения: Результаты исследования могут быть использованы для понимания свойств соединений щелочноземельных металлов и редкоземельного газа ксенона при высоком давлении.

Экономическая эффективность/значимость работы заключается в том, что теоретические прогнозы в большой степени экономят временные ресурсы.

Оглавление

Введение.....	12
Глава 1. Теоретическое исследование системы Ва-Хе под высоким давлением.	
Постановка задачи (Обзор научно-технической литературы)	13
1.1 Наука о высоком давлении	13
1.1.2 Влияние высокого давления на вещества	16
1.2 Химия редких газов и изучение ксенона	18
1.2.1 Система Mg-NG (Xe, Kr, Ar)	21
1.2.2 Система Cs-Xe	22
1.2.3 Система Li-Xe.....	23
1.3 Состояние исследования щелочноземельного металла бария.....	25
Глава 2. Методы прогнозирования кристаллической структуры	28
2.1 Существующие методы компьютерного моделирования.....	29
2.2 Метод Calypso.....	31
2.2.1 Физика, лежащая в основе метода.....	32
2.2.2 Рабочий процесс CALYPSO.....	34
2.2.3 Особенности и текущее состояние алгоритма	37
Глава 3. Исследовательская часть	39
3.1. Постановка задачи исследования	39
3.2. Полученные результаты и их обсуждение.....	40
3.2.1 Стабильность барий-ксеноновых соединений под высоким давлением.....	41
3.3.2 Структура соединений ксенона бария под высоким давлением .	43
3.3.3 Электронные свойства соединений бария-ксенона при высоком давлении	46
3.3 Выводы	49
Глава 4. Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	51
4.1 SWOT-анализ	51

4.2	Определение возможных альтернатив проведения научных исследований	52
4.3	Планирование научно-исследовательских работ	53
4.3.1	Структура работ в рамках научного исследования	53
4.3.2	Определение трудоемкости выполнения работ.....	54
4.3.3.	Разработка графика проведения научного исследования.....	55
4.4	Бюджет научно-технического исследования (НТИ)	59
4.4.1	Расчет материальных затрат НТИ	59
4.4.2	Расчет затрат на оборудование для научно-экспериментальных работ	60
4.4.3	Основная заработная плата исполнителей темы.....	60
4.4.4	Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления) .	62
4.4.5	Накладные расходы.....	63
4.4.6.	Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта	64
4.5	Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	65
Глава 5.	Социальная ответственность	68
5.1	Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности ...	68
5.1.1	Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя) правовые нормы трудового законодательства	68
5.1.2	Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя.....	69
5.2	Производственная безопасность.....	69
5.2.1	Анализ опасных и вредных производственных факторов	70
5.3	Экологическая безопасность	76
5.4	Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....	77
5.5	Выводы по разделу.....	78
	Список использованных источников.....	80

Введение

В этой статье структура и электронные свойства соединений Ва-Хе при различных высоких давлениях были изучены с использованием программного обеспечения для прогнозирования кристаллической структуры (CALYPSO) и методов расчета на основе первых принципов

Актуальность проблемы. Редкий газообразный элемент ксенон нелегко вступает в химическую реакцию при атмосферном давлении, но он может вступать в реакцию при высоком давлении. Существует меньше исследований щелочных металлов и ксенона при высоком давлении, а барий обладает самой низкой электроотрицательностью среди щелочноземельных металлов. Поэтому в данной статье барий используется в качестве примера для проведения теоретических исследований соединений барий-ксенон. Изучение соединений бария и ксенона способствует углублению понимания соединений редких газов под высоким давлением.

Цель работы - Исследование структуры и электронных свойств соединений бария-ксенона в различных пропорциях под высоким давлением.

Для достижения данной цели были решены следующие задачи:

1. Провести аналитический обзор информационных источников
2. Использовать метод CALYPSO в сочетании с расчетами из первых принципов для прогнозирования кристаллической и электронной структуры соединений щелочноземельного металла Ва и инертного газа Хе под высоким давлением.
3. Расчеты на основе первых принципов используются для обсуждения и расчета электронных свойств и структуры стабильных соединений под высоким давлением.

Глава 1. Теоретическое исследование системы Ва-Хе под высоким давлением. Постановка задачи (Обзор научно-технической литературы)

1.1 Наука о высоком давлении

Давление является основной термодинамической переменной, которая влияет на свойства материалов, которая относится к давлению вещества на единицу площади, а ее основной единицей измерения является Паскаль (Па), а другие часто используемые единицы включают бар (стандартное атмосферное давление), ГПа и т.д. Высокое давление - это экстремальное состояние, которое обычно относится к условиям выше нормального давления (примерно равно 1.0×10^5 Па). Явления высокого давления распространены в природе, такие как наличие очень высоких давлений как на Земле, так и на планетах, а давление внутри Земли увеличивается с глубиной, до 3,6 миллиона атмосфер. Взрывы также могут создавать ударные волны и высокое давление. Давление широко используется на протяжении десятилетий в качестве мощного инструмента для обнаружения материалов, недоступных в обычных условиях окружающей среды [1-5]. С постепенной зрелостью методов исследования высокого давления постепенно сформировалась новая дисциплина, наука о высоком давлении. В лаборатории условия высокого давления необходимы для открытия и исследования новых веществ. В зависимости от способа создания высокого давления науку о высоком давлении можно разделить на статическую и динамическую.

Самые ранние эксперименты в области статической физики и физики высокого давления восходят к сжатию жидкой воды Кантоном в 1762 году. Однако на протяжении более ста лет физика высокого давления велась в диапазоне 0,5 ГПа, пока после 1906 года Бриджмен не предложил и не использовал принципы «поддержки массы» и «многоступенчатой герметизации» для совершенствования экспериментального устройства высокого давления, так что максимальное давление, создаваемое им, может

достРГать около 10 ГПа[6], что значительно способствовало развитию технологии испытаний высокого давления. В 1978 году Мао и Белл и др. разработали алмазный верхний наковальню типа Мао-Белла (Diamond anvil cell, DAC) со скошенной поверхностью и увеличили максимальное давление в полости примерно до 172 ~ 185 ГПа [7-8], а пресс DAC также заключается в том, что они совместимы с различными методами измерения *in situ*, такими как определение структуры веществ с помощью рентгеновской дифракции или дифракции нейтронов. Для определения структуры материала. Давление, оказываемое алмазом на такие устройства, как верхние наковальни, в совокупности называется гидростатическим давлением, а экспериментальные исследования с использованием гидростатического давления также называют гидростатическим экспериментом высокого давления. В дополнение к алмазно-верхним наковальням, системы, которые генерируют статические высокие давления, также включают в себя высокопроизводительные прессы (large-volume presses), такие как противоположные наковальни (opposite-anvil) и системы с несколькими наковальнями (multiple-anvil systems).

С точки зрения динамической технологии высокого давления (то есть технологии получения высокого напряжения импульсной нагрузкой) давление, создаваемое установками динамического сжатия, может достРГать нескольких тысяч ГПа [9-10] с использованием крупномасштабных ударно-волновых установок, и широко используется в исследованиях физики высокого давления и военной науке и технике.

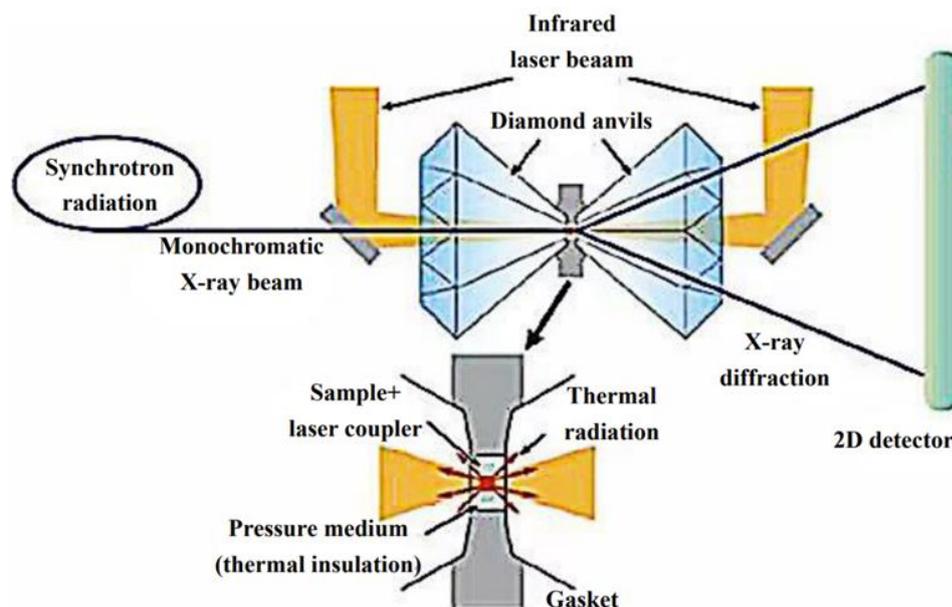


Рисунок 1.1 Устройство DAC в сочетании с лазерным нагревом и рентгеновской дифракцией in situ

В дополнение к развитию экспериментальных методов, расчеты функциональной теории плотности (ФТП) из первых принципов также оказали значительное влияние на открытие материалов под высоким давлением. С 90-х годов высоковольтное моделирование и ФТП были дополнительно объединены, и физики предсказали много новых фаз высокого давления твердых материалов, особенно полупроводниковых материалов. Расчеты ФТП позволяют точно и надежно идентифицировать различные свойства и даже сверхпроводящие свойства материалов высокого давления. Используя минимизацию общей энергии различных структур в зависимости от давления, легко изучить структурный фазовый переход, вызванный давлением, а расчеты энергии ФТП позволяют точно различать относительную стабильность конкурирующих фаз с разрешением в несколько миллиэлектронвольт. В результате эти расчеты могут предоставить новую информацию и способствовать пониманию экспериментальных наблюдений. Высокоуровневые вычисления. Основываясь на этих теоретических методах, разработка многих вычислительных программ на основе первых принципов

стала более зрелой и широко используемой в области вычислительного моделирования, таких как программное обеспечение для вычислений первых принципов VASP [40], программное обеспечение для структурного прогнозирования CALYPSO. Благодаря развитию этих программ теоретические расчеты больше не ограничиваются влиянием внешней среды или подготовкой образцов, и могут легко достигать суровых условий, которые не могут быть достигнуты или трудно достичь экспериментально, что значительно способствует развитию науки о высоком давлении. По сравнению с зависимостью экспериментальной науки высокого давления от экспериментального оборудования, теоретическая наука о высоком давлении предъявляет высокие требования к производительности компьютера. А в последние годы развитие высокопроизводительных компьютеров также оказало сильную поддержку развитию теоретической науки о высоких давлениях, такой как японский «Фуугаку», американский «Вершина» и китайский «Тайху Лейк Шэньвэй Лайт» и другие суперкомпьютеры достигли порядка миллиардов вычислений в секунду. Разработка суперкомпьютеров и методов структурных исследований первых принципов обеспечила теоретическое моделирование с прогностической силой, необходимой для того, чтобы помочь в обнаружении поля. Под руководством теории эксперименты, ориентированные на теорию, значительно ускорили открытие материалов, включая сверхпроводящие материалы, сверхтвердые материалы и т. д., и принесли новую надежду для различных технологий.

1.1.2 Влияние высокого давления на вещества

Давление является основной термодинамической переменной, влияющей на структуру вещества, которая может уменьшать расстояние между атомами, изменять энергетическую последовательность электронных орбиталей и режим накопления атомов, а также осуществлять регуляцию структуры материала, что, в свою очередь, приводит к появлению новых структур и новых

СВОЙСТВ.

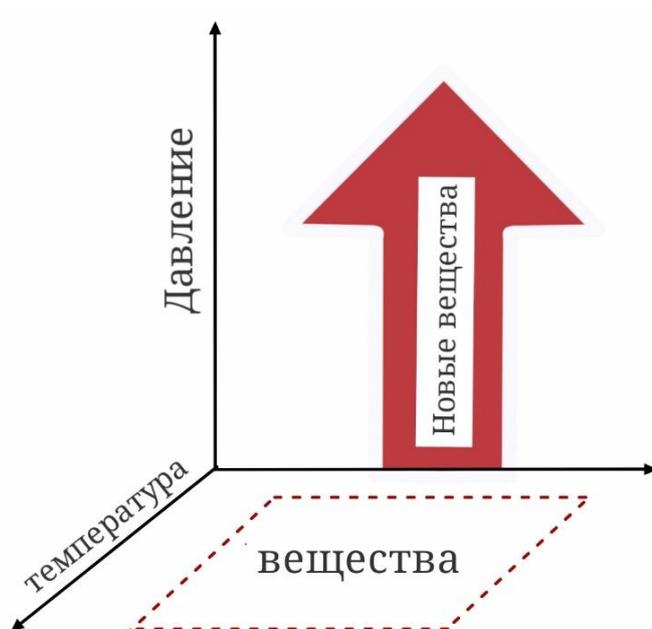


Рисунок 1.2 Принципиальная схема производства новых веществ, индуцированного высоким давлением

Высокое давление может изменять энергетическую стабильность различных возможных структур, изменяя расстояние между атомами и схемы связи, тем самым создавая новые материалы за счет структурных фазовых переходов.

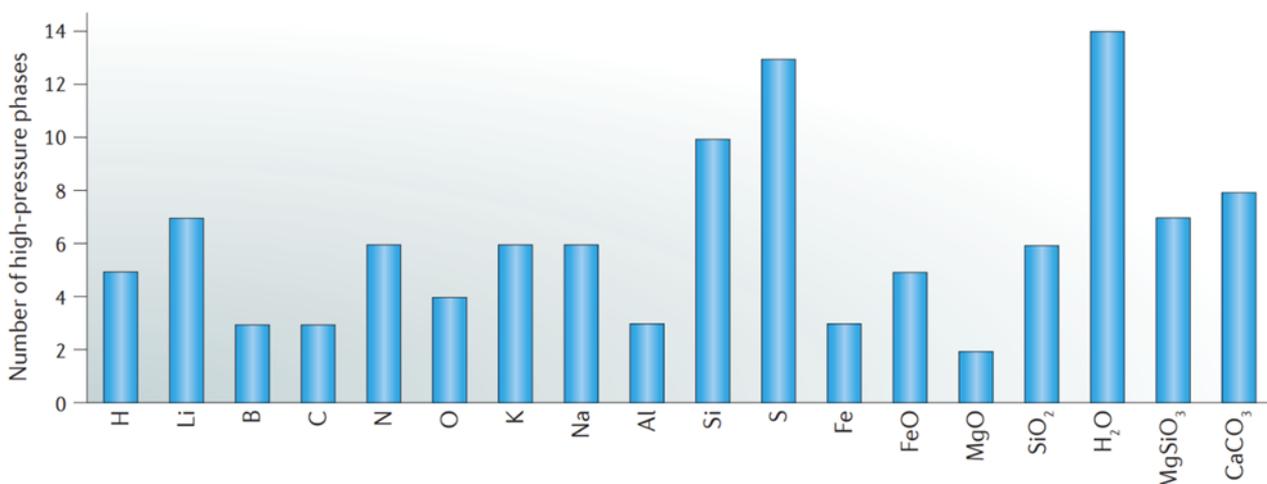


Рисунок 1.3 Количество фазовых переходов кристаллической структуры, происходящих при высоком давлении в различных системах (элементарное, бинарное соединение, тройное соединение) при высоком давлении

Давление может вызвать увеличение электронной плотности, в результате чего кинетическая энергия электронов будет расти быстрее, чем потенциальная энергия. Таким образом, существует общая тенденция к делокализации электронов, т.е. к индуцированному давлением расширению зоны, закрытию зазора, металлизации и т. д. Теоретически достаточно высокое давление может превратить все проводники в изоляторы, такие как металлические элементы, такие как металлический натрий, которые будут преобразованы в изоляционные материалы при высоком давлении. Давление может изменить порядок энергии внешних атомных орбиталей, таких как s , p и d -орбитали. Таким образом, электроны могут быть перенесены с занятых орбит на незанятые орбитали путем орбитальной гибридизации. Давление также вызывает изменения химических свойств атома, например, электроотрицательности атома. Кроме того, влияние давления на режим связывания также может быть отражено в химических пропорциях, например, четырехкратно скоординированная структура сфалерита или слюрита при высоком давлении будет фазироваться в шестикратно скоординированную структуру никелида кремния или хлорида кремния [12]

1.2 Химия редких газов и изучение ксенона

Ксенон (Xe) — один из элементов редких газов, расположенный в группе ноля в периодической таблице химических элементов. Как показывает модель атомной оболочки, электроны атома упакованы и расположены в оболочке в соответствии с принципом наименьшей энергии, принципом исключения Паули и правилом Хундта, а самый внешний электронный слой является важным фактором в определении химических свойств вещества. Если самый внешний электронный слой атома содержит меньше электронов, он имеет тенденцию терять электроны и становится положительными ионами; И наоборот, если его внешний электронный слой почти завершен, он имеет

тенденцию получать электроны и становиться отрицательными ионами. Внешняя электронная оболочка элемента инертного газа полностью заполнена, поэтому этим элементам трудно реагировать при комнатной температуре и давлении, но при индукции высокого давления они могут проявлять новые химические свойства.

Химия редких газов (Редкий газ, РГ) началась с теоретических предсказаний, хотя в то время не хватало каких-либо известных соединений РГ и современных теорий атомных оболочек. Самое раннее исследование Хе датируется 1931 годом, когда Лайнус Полинг предсказал, что F и O могут окислять Хе и Kr [13], и десятилетия спустя Нил Бартлетт экспериментально продемонстрировал соединения на основе металлов. В 1962 году, когда Бартлетт объявил об открытии соединения 1:1 ХеPtF₆ между ксеноном и гексафторплатином, формула которого также может быть записана Хе⁺[PtF₆]⁻ [14]. В последующие десятилетия все больше и больше других соединений редких газов постепенно открывались учеными, и химия РГ стала новой отраслью химии.

В последние годы в исследованиях высокого давления по химии РГ по-прежнему доминировало теоретическое прогнозирование, но мы оснащены более мощными инструментами, включая расчеты функциональной теории плотности (ФТП) и различные алгоритмы поиска кристаллической структуры. Этот новый метод не только привел к прогнозированию и синтезу многих новых соединений, но и выявил много новых типов РГ-связей, почти все типы связей, включая отрицательно заряженный РГ, сильные ковалентные связи РГ-РГ и Н-связанные РГ связи, можно найти в соединениях РГ под высоким давлением [15], что в значительной степени способствует исследованиям и разработкам химии РГ.

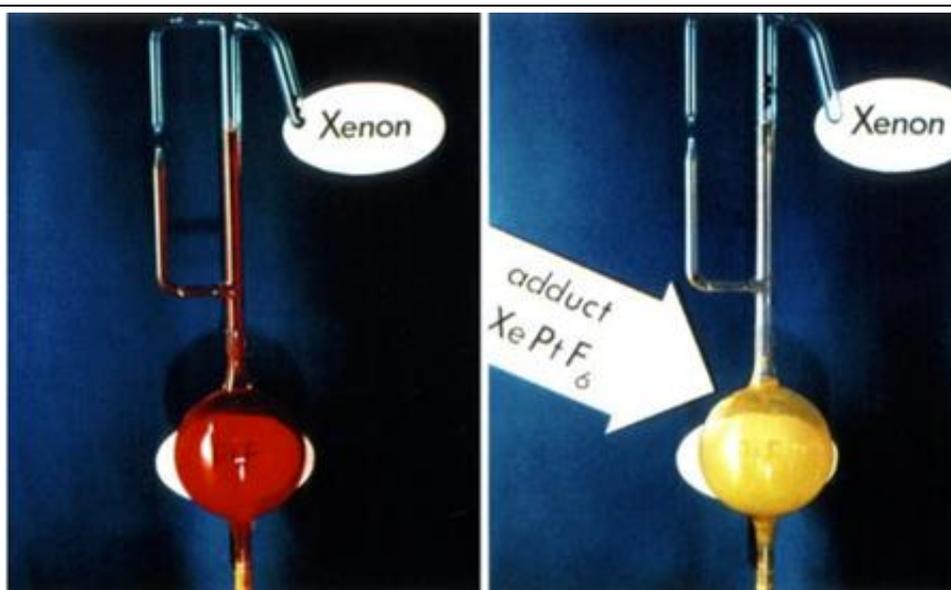


Рисунок 1.4 Исторический эксперимент, реконструированный в Национальной лаборатории Лоуренса Беркли для первого соединения благородных газов [16]

Основываясь на выводах Бартлетта, ксенон (Xe) был принят в теории и эксперименте для образования соединений с неметаллами или переходными металлами, проявляя катионные характеристики при определенных условиях. При нормальном атмосферном давлении энергия орбитальных $6s$ в Xe намного выше, поэтому независимо от того, с каким донором электронов он взаимодействует, он не может содержать никаких дополнительных электронов, напротив, почти каждый другой элемент, включая наиболее активные металлы, такие как Cs, может удерживать электрон и становиться Cs^- . Это также является причиной того, что элементы РГ использовались в качестве восстановителей для обеспечения электронов для участия в реакциях в течение многих лет. Однако давление может существенно изменять энергию атомных орбиталей [17] и, в некоторых случаях, их относительный порядок.

Недавняя теоретическая работа показала, что Xe обладает анионными свойствами в некоторых соединениях, образованных щелочными металлами при высоком давлении.

1.2.1 Система Mg-NG (Xe, Kr, Ar)

Согласно исследованию Miao et al., Mg и несколько РГ элементов (включая Xe, Kr и Ar) могут образовывать стабильные соединения $MgRG$ и Mg_2RG при давлениях выше 125, 250 и 250 ГПа соответственно [18], и эта работа также демонстрирует новое химическое свойство редких газов, то есть они могут получать электроны, которые отрицательно заряжены, и образовывать термостабильные соединения с Mg при высоком давлении, а полученные соединения металлов принимают очень простые структуры, такие как тип CsCl.

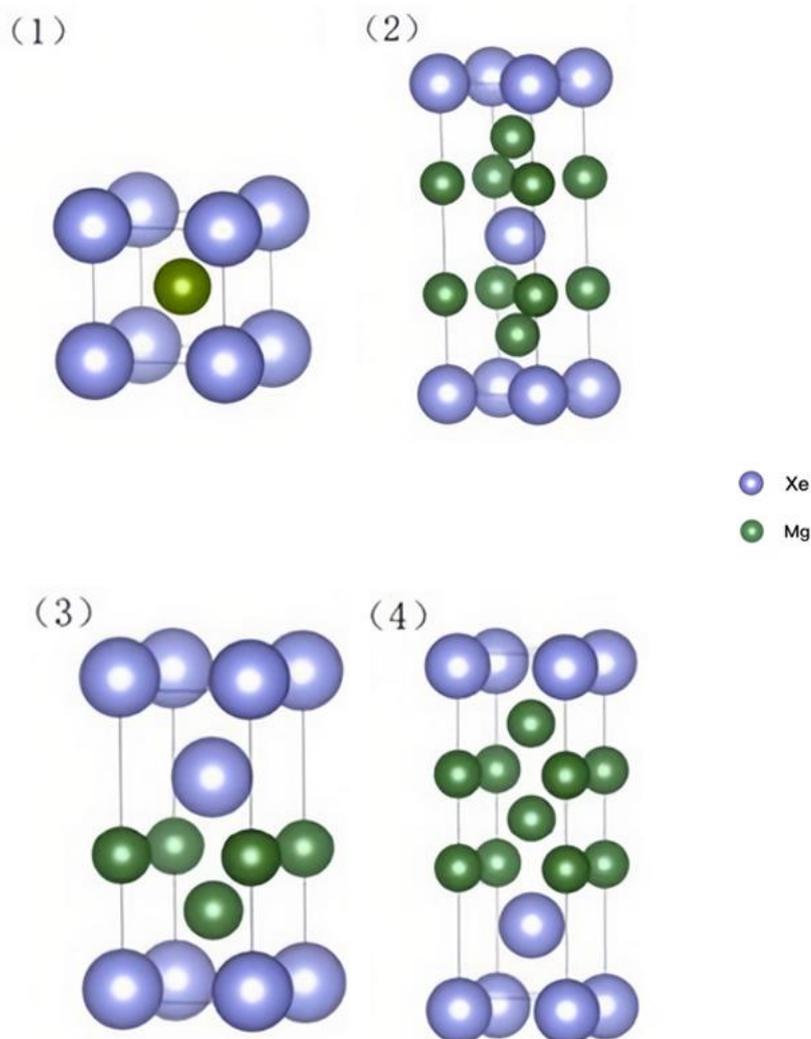


Рисунок 1.5 Mg-Xe соединений: (1) Структура $MgXe$; (2) $MgXe-P4/nmm$; (3) Mg_2Xe-I4/mmm ; (4) Mg_2Xe-P4/nmm

Вычислением спектров фононов также подтверждается динамическая

стабильность соединений и структур при заданном давлении [Рисунок 1.6]. Влияние энергий нулевой точки (zero-point energies, ZPE) на энтальпию образования незначительно, менее 2 мэВ/атом ($\sim 0,1$ кДж/моль) для всех соединений. Незначительная величина ZPE характерна для соединений, не содержащих легких элементов, таких как H и Li. Кроме того, повышение температуры может также стабилизировать Mg–PГ соединения.

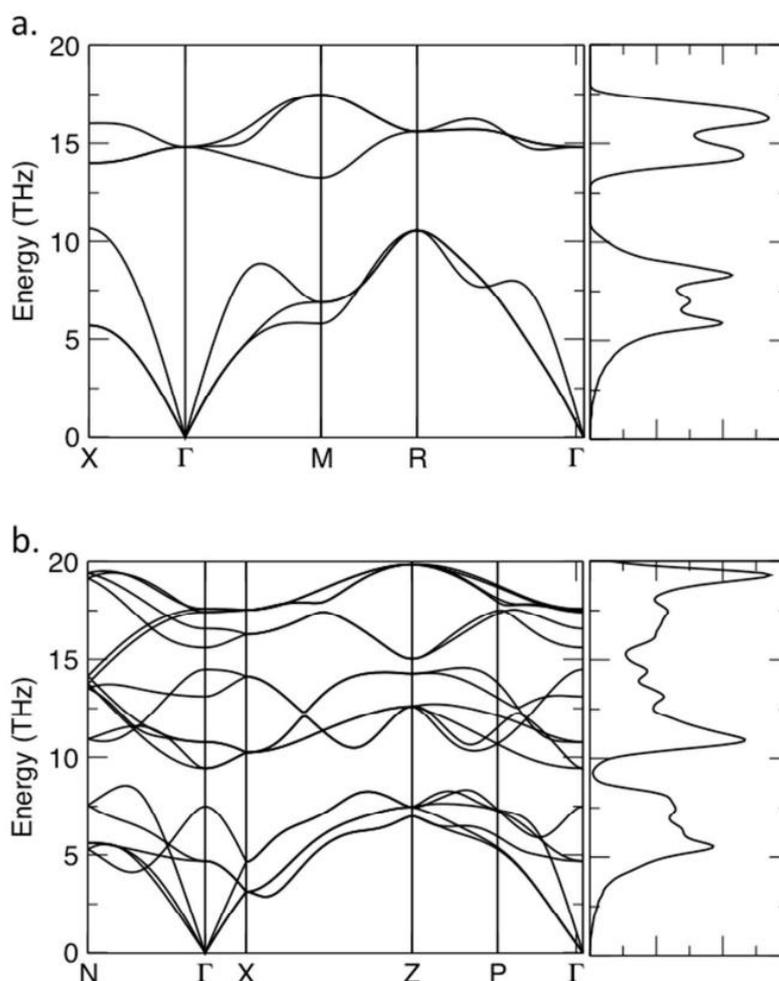


Рисунок 1.6 The phonon spectra of MgXe and Mg₂Xe at 200 GPa. (A) Дисперсия фононов (слева) и плотность состояний (справа) MgXe. (B) Дисперсия фононов (слева) и плотность состояний (справа) Mg₂Xe.

1.2.2 Система Cs-Xe

Помимо соединений Mg-Xe, существуют соединения Cs-Xe (CsXe₄, CsXe₃

и др.) [19] и Соединения Li-Xe (XeLi_n , $n=1-5$) [20]. При изучении системы Cs-Xe [19] Чжан и др. систематически исследовали систему Cs-Xe при 200 ГПа с использованием алгоритма CALYPSO и предсказывали стабильную стехиометрию, такую как CsXe_4 , CsXe_3 , CsXe_2 , CsXe , Cs_2Xe , Cs_3Xe и Cs_4Xe . Исследования показали, что соединения Cs-Xe становятся стабильными при давлениях выше 24 ГПа, и эта серия стабильных соединений Cs-Xe проявляет металлическое поведение посредством расчетов и исследований структуры электронной полосы, прогнозируемой плотности состояния (projected density of states, PDOS) и функции локализации электронов (electron localization function, ELF).

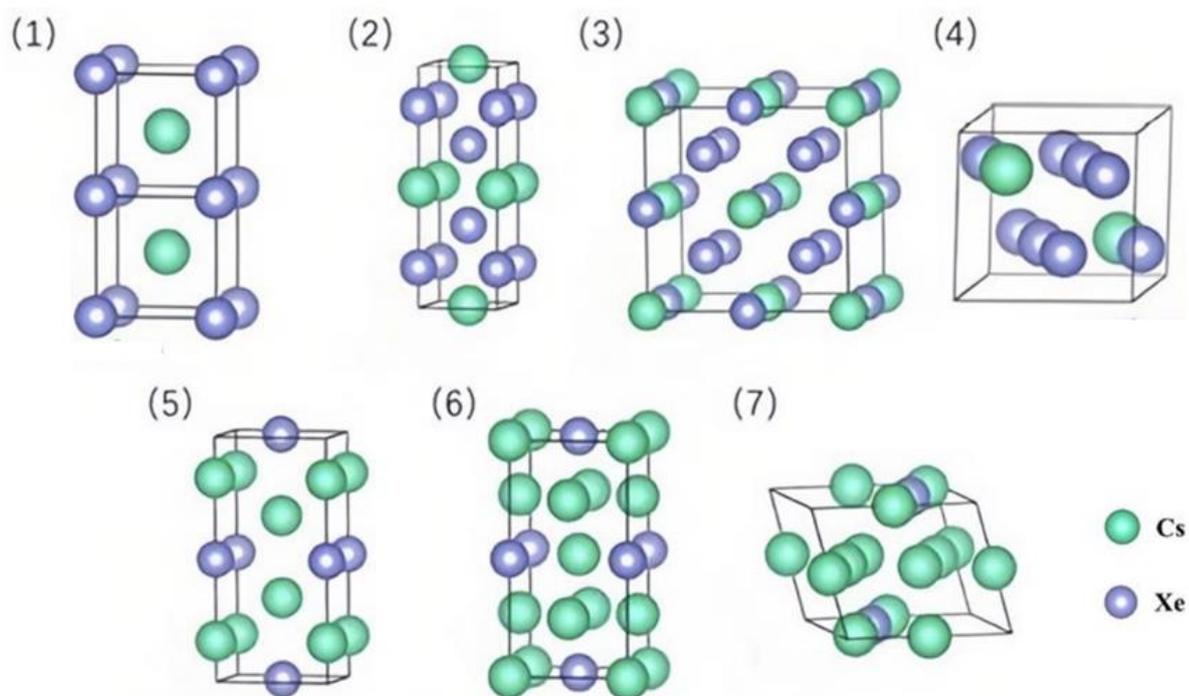


Рисунок 1.7 Соединения Cs-Xe при 200 ГПа: (1) CsXe , $Pm-3m$; (2) CsXe_2 , $I4/mmm$; (3) CsXe_3 , $Fm-3m$; (4) CsXe_4 , $P21/m$; (5) Cs_2Xe , $Immm$; (6) Cs_3Xe , $I4/mmm$; (7) Cs_4Xe , $P-1$

1.2.3 Система Li-Xe

В исследованиях, касающихся систем Li-Xe под высоким давлением [20],

было показано, что давление может изменять энергетическую последовательность орбиталей $Li\ 2s$ и $5d$ орбиталей Xe . Таким образом, под давлением смеси этих двух веществ может образовываться стабильное соединение $XeLi_n$ ($n = 1\sim 5$) при давлении выше 50 ГПа. Химия связи в этих соединениях металлическая.

Исследования показали, что все соединения $XeLi_n$ нестабильны при давлении от 0 ГПа до 50 ГПа. При увеличении $XeLi_5$ первым стал устойчивым к разложению на Xe и Li при 50 ГПа. При 100 и 150 ГПа $XeLi$ и $XeLi_3$ также становятся стабильными соответственно. В то время как давление достигает 200 ГПа, все пять соединений $Xe-Li$ устойчивы к разложению. Проверив их фоновые спектры[21], мы обнаруживаем, что все структуры $XeLi_n$ динамически стабильны в пределах их стабильного диапазона давлений. Также подтверждено, что энергетический эффект нулевой точки незначителен при изучении стабильности этих соединений. Во всех соединениях было обнаружено, что Xe имеет отрицательный заряд от -1 до -2 или выше. Помимо электростатических взаимодействий, существуют также связи между соседними атомами Xe . Поскольку занятие щелочного металла на d орбитали влияет на энтальпию образования соединения [25]

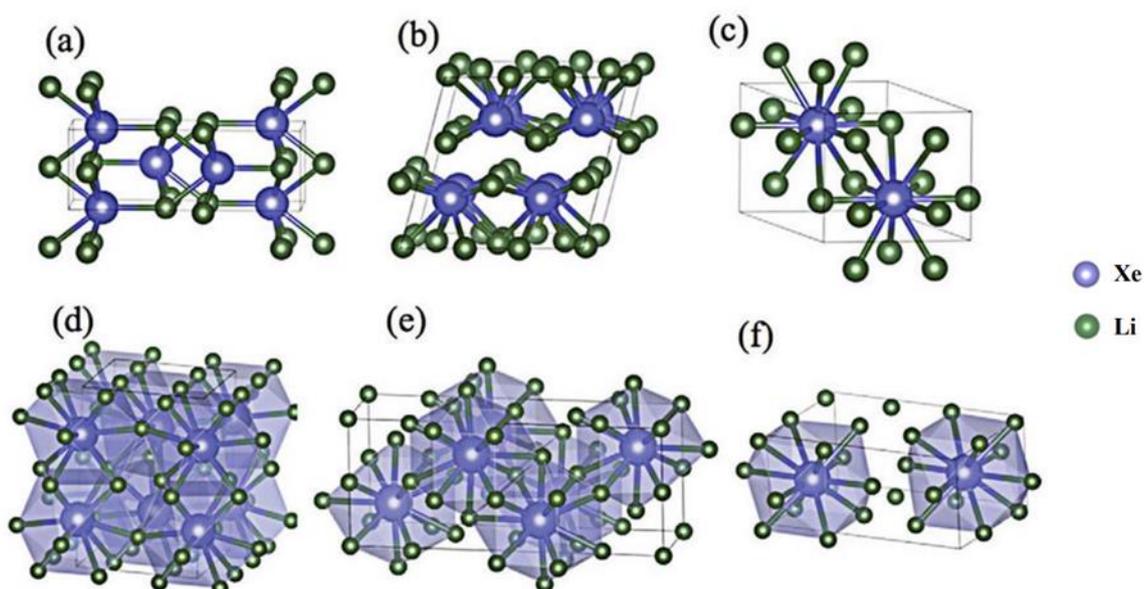


Рисунок 1.8 Соединения $Li-Xe$: (a) 150 GPa, $XeLi-Cmcm$; (b) 150 GPa, $XeLi_2-C12/m1$; (c) 150 GPa, $XeLi_3-P63/mmc$; (d) 200 GPa, $XeLi_3-P4/mbm$; (e) 200

GPa, XeLi₄ -*Pnma*;(f) 100 GPa, XeLi₅ -*Pmc*2₁.

В исследованиях до сих пор реакция восстановления элементов РГ не была тщательно изучена, и до сих пор нет экспериментального подтверждения, и основной проблемой, которую необходимо решить, является предел отрицательного заряда, который могут переносить элементы РГ, и его связь с внешним давлением, что также является важным направлением современных исследований химии РГ.

1.3 Состояние исследования щелочноземельного металла бария

Барий (Ba) представляет собой мягкий, серебристо-белый блестящий щелочноземельный металл с очень активными химическими свойствами, именно поэтому Ba никогда не встречался в элементарной форме в природе, где наиболее распространенными минералами являются барит (сульфат бария) и токсичный барит (карбонат бария). Сульфид щелочноземельного металла обладает фосфоресцирующим явлением, то есть будет продолжать излучать свет в темноте в течение определенного периода времени после облучения светом, и именно из-за этого свойства соединения бария стали привлекать внимание. В дополнение к использованию принципа реакции пламени бариевого соединения и получению сплавов, металлический барий также может быть использован в качестве газоподавителя для удаления вакуумных трубок и фототрубок. В качестве соседа металлического лантана (La), Ba часто выбирают в качестве металлического элемента для синтеза супергидридов и сверхпроводящих материалов под высоким давлением, таких как «клеткообразный» сверхпроводник Ba₈Si₄₆ [23] и псевдокубический BaH₁₂ [22].

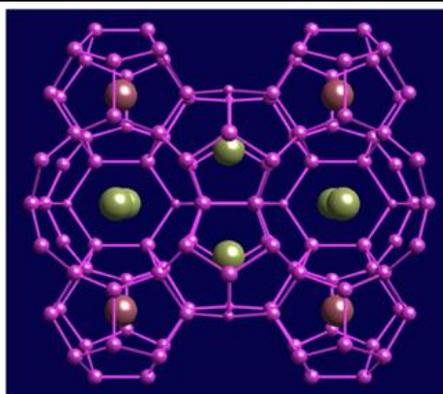


Рисунок 1.9 "Клеткообразный" сверхпроводник $\text{Ba}_8\text{Si}_{46}$

Высокое давление может вызывать фазовые переходы в веществе, и в предыдущих исследованиях элементарный Ba образует четыре фазы при высоком давлении 100 ГПа [46].

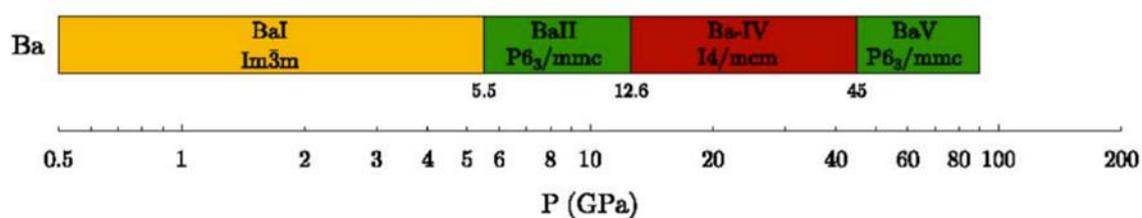


Рисунок 1.10 Фаза металла Ba под высоким давлением

Различные симуляции показали, что Хе может притягивать электроны из положительно заряженных элементов, а щелочные металлы или щелочноземельные металлы часто действуют как положительно заряженные элементы для электронов в реакциях из-за того, что самый внешний электронный слой имеет только один или два электрона. Под высоким давлением валентные электроны щелочных (земных) металлов выталкиваются на более высокие энергетические орбиты [24], образуя таким образом стабильные соединения с редкими газами. Хотя они оба являются соединениями, синтезированными щелочными металлами и редким газовым элементом Хе, структура и химические связи соединений Хе-Li и Хе-Cs совершенно различны, химические связи между Хе и Li являются металлическими связями, в то время как соединения Хе-Cs связаны ионными связями. Исследования показали, что это связано с различными электронными

конфигурациями двух, орбитальный порядок электронов изменяется из-за давления, а занятие щелочных металлов на орбитали уровня Ферми d также влияет на энтальпию образования соединения [25].

По сравнению с Li , может ли Ba , сильный восстанавливающий щелочноземельный металл с d орбиталью, также образовывать стабильное соединение с редким газовым элементом Xe при высоком давлении? До сих пор было не так много исследований по исследованиям соединений $Ba-Xe$, особенно кристаллической структуры и электронных свойств соединений $Ba-Xe$ при высоком давлении, поэтому очень важно изучить, имеют ли соединения $Ba-Xe$ новые пропорции при высоком давлении и имеет ли инертный элемент Xe более богатые фазовые переходы или кристаллические структуры при высоком давлении.

Глава 2. Методы прогнозирования кристаллической структуры

Кристаллическая структура относится к правильному расположению кристаллов с определенной периодичностью в пространстве с их внутренними атомами, ионами и молекулами, что является самой основной структурной особенностью кристаллов. Любой кристалл всегда может найти набор базисных векторов, соответствующих его трехмерной периодичности и соответствующим единичным ячейкам, поэтому кристаллическую структуру можно рассматривать как совокупность единичных ячеек, содержащих одну и ту же параллелепипедную форму в передней, задней, левой, правой, восходящей и нисходящей направлениях. Кристаллическая структура также определяет макроскопические свойства кристалла. Поэтому определение кристаллической структуры является условием изучения свойств кристаллов. Мэддокс писал в своей статье, что постоянная трудность в физике заключается в том, что до сих пор невозможно предсказать кристаллическую структуру даже простейших веществ по химическому составу материи.

В настоящее время рентгеновская дифракция (XRD) и другие методы обнаружения могут быть использованы экспериментально, а возможная структура образца может быть получена с помощью Ритвельда и других методов тонкой примерки, а в последние годы XRD широко используется в различных областях, таких как фазовый анализ, определение кристалличности, точное определение параметров решетки и т.д. Однако экспериментальные измерения часто ограничиваются чистотой образца, загрязнением примесями, силой дифракционного сигнала и недостаточными экспериментальными условиями, особенно в экстремальных условиях, таких как сверхвысокая температура и сверхвысокое давление, и определить кристаллическую структуру материалов экспериментальными средствами чрезвычайно сложно. Для вышеуказанных задач теоретические имитационные расчеты могут быть хорошо решены. Поэтому важным направлением стало определение кристаллической структуры с помощью теоретического моделирования. С развитием и совершенствованием вычислительной мощности компьютеров

все больше и больше методов прогнозирования кристаллической структуры быстро разрабатываются и совершенствуются.

2.1 Существующие методы компьютерного моделирования

В зависимости от того, требуется ли первоначальная структура, предсказание кристаллической структуры можно разделить на две категории: Одним из них являются методы, которые полагаются на первоначальную структуру, включая прыжки бассейна (Basin Hopping) , минимальные скачки (Minima Hopping) , имитацию отжига (Simulated Annealing) , гГантскую динамику (Meta Dynamics) и т. Д. Другой — это метод, который не опирается на первоначальную структуру, включая алгоритмы глобального поиска, такие как случайный поиск, оптимизация роя частиц и генетические алгоритмы.

Мы знаем, что соответствующая структурная энергия $E(R)$ может быть получена в соответствии с электронной плотностью основного состояния, а поскольку электронная плотность $\rho(r)$ соответствует кристаллической конфРГурации один к одному, то электронная плотность и структурная энергия также один к одному. Основываясь на теории приближения Борна-Оппенгеймера и функционала плотности, мы используем данную энергию для решения уравнения Шредингера в измерении $3Na$, а предсказание кристаллической структуры заключается в исследовании возможной структуры материи в таком $3Na$ -мерном пространстве. На рисунке ниже показана многомерная поверхность, состоящая из энергии $E(R)$ и кристаллической конфРГурации R пространства, также известного как поверхность потенциальной энергии Борна-Оппенгеймера (поверхность потенциальной энергии БО)[26]. Каждая точка на поверхности потенциальной энергии представляет собой конфРГурацию R и соответствующую ей энергию.

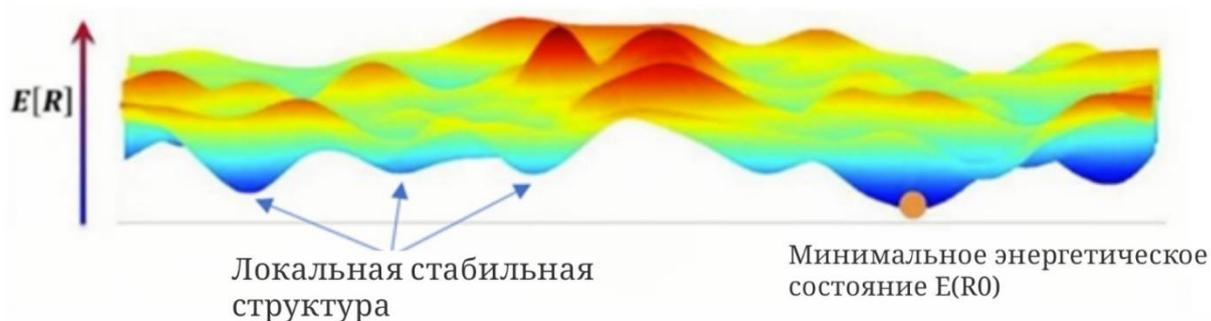


Рисунок 2.1 Принципиальная схема поверхности потенциальной энергии Борна-Оппенгеймера

Согласно принципу энергетического минимума, кристаллическая структура, существующая в природе, как правило, является структурой с наименьшей энергией на потенциальной поверхности, то есть базовой структурой или субстабильной структурой с немного более высокой энергией. Таким образом, при прогнозировании кристаллической структуры на самом деле исследуется область долины потенциальной энергии БО, то есть поиск минимальных значений в каждой долине, а затем определение минимальных значений на основе минимальных значений. Однако процесс нахождения минимальной точки обязательно включает в себя проблему барьерного перехода, поэтому первый тип метода структурного прогнозирования в основном фокусируется на способности барьерного перехода[27].

Метод бассейновых прыжков сочетает в себе локальные минимумы и алгоритм Монте-Карло, сначала локальную минимизацию исходной структуры и получение энергетического минимума, затем генерацию новой структуры путем случайного возмущения и локальной минимизации снова для получения нового энергетического минимума, а затем решая, принимать ли полученную новую структуру по критерию Метрополиса в методе Монте-Карло, и продолжая исследовать неизвестную область потенциальной энергетической поверхности, повторяя вышеуказанные шаги. Метод бассейновых прыжков проецирует сложную поверхность потенциальной энергии в ступенчатую форму путем внедрения метода локальной

минимизации, который значительно улучшает способность алгоритма Монте-Карло к барьерному переходу[28]. Аналогичным образом, метод минимального скачка вводит локальные минимумы для получения энергетического минимума. Разница в том, что метод минимального скачка не полагается на термодинамические свойства системы, а опирается на моделирование молекулярной динамики для развития и итерации новых структур путем непрерывной регулировки температуры[29]. Моделируемый метод отжРГа представляет собой моделирование «отжРГа» в металлургии, в структурном прогнозировании, использовании моделирования молекулярной динамики, после нагрева над барьером, а затем посредством медленного охлаждения система окончательно достРгает самого низкого энергостабильного состояния, теоретически доказано, что алгоритм может сойтись к глобальному оптимальному решению по вероятности[30]. Метод гРГантской динамики — это метод, который опирается на определенные координаты реакции, и, добавляя определенный гауссов потенциал в систему через регулярные промежутки времени в процессе моделирования, поверхность потенциальной энергии постепенно «заполняется», так что система может «вырваться» из различных локальных минимумов. Метод гРГантской динамики позволяет эффективно реконструировать потенциальную энергетическую поверхность системы и реализовать глобальную выборку системы в короткие сроки[31].

2.2 Метод Calypso

Метод прогнозирования структуры CALYPSO – это метод предсказания структуры, разработанный исследовательской группой Цзилиньского университета и одноименная программная реализация, которой нужно только знать химическое соотношение материала и заданные внешние условия (например, давление и т.д.), можно прогнозировать основное состояние и метастабильную структуру материала, а также проектировать функциональный материал, представляющий собой набор эвристических

методов глобального поиска, основанных на физических ограничениях[32-34].

2.2.1 Физика, лежащая в основе метода

Метод прогнозирования структуры CALYPSO сформирован на основе алгоритма оптимизации роя частиц.

Алгоритм оптимизации роя частиц (Particle Swarm Optimization, PSO) предложен Eberhart and Kennedy et al.[35-37] для моделирования коллективного кормового поведения птичьих стай и достигает поиска оптимальных решений в сложных пространствах путем моделирования коллективного обмена информацией стай. PSO также часто классифицируется как тип роевого интеллекта (Swarm Intelligence, SI) , а SI также включает алгоритм искусственной пчелиной колонии (ABC)[38].

Основная идея PSO заключается в том, чтобы рассматривать особей в группе как частицы, движущиеся с определенной скоростью в многомерном пространстве, и процесс движения частиц может быть специально смоделирован как процесс кормления особей в вышеупомянутой стае. Представьте себе сценарий, стая птиц случайным образом ищет пищу в лесу, пытаясь найти место с наибольшим количеством пищи, но все птицы не знают конкретного местоположения пищи, каждая птица ищет в соответствии со своим собственным направлением восприятия и суждения и записывает местоположение наибольшего количества пищи, которую они находят в процессе поиска, когда все птицы разделяют местоположение пищи и количество пищи, которую они находят в каждом процессе поиска, стая будет знать, где в настоящее время находится больше всего пищи. И в процессе поиска каждая птица корректирует направление своего следующего поиска в соответствии с местоположением наибольшего количества пищи в ее памяти и местоположением наибольшего количества пищи, зарегистрированного текущей стаей, так что после периода поиска стая может найти, в каком месте в лесу больше всего пищи. Стая птиц находит оптимальное назначение группы через коллективный обмен информацией, что является глобальным

оптимальным решением PSO.

Оптимальное решение, найденное каждой частицей, называется индивидуальным экстремальным значением ($pBest$), а оптимальным индивидуальным экстремальным значением в группе является глобальное оптимальное решение ($gBest$), и после непрерывной итерации и обновления может быть получено оптимальное решение. Обновленная формула для скорости и положения частиц выглядит следующим образом:

$$V_i^{t+1} = \omega V_i^t + c_1 r_1 (pbest_i^t - X_i^t) + c_2 r_2 (gbest^t - X_i^t) \quad (2.1)$$

$$X_i^{t+1} = X_i^t + V_i^{t+1} \quad (2.2)$$

где V_i^{t+1} - Скорость частицы i генерации $t+1$; X_i^{t+1} - Положение частицы i генерации $t+1$; $pbest_i^t$ - Индивидуальные экстремумы частицы i генерации t ; $gbest^t$ - Глобальное оптимальное решение роев частиц генерации t ; c_1, c_2 - Коэффициент обучения (обычно между 0-4); ω - вес инерции.

Принципиальная схема эволюции позиций частиц:

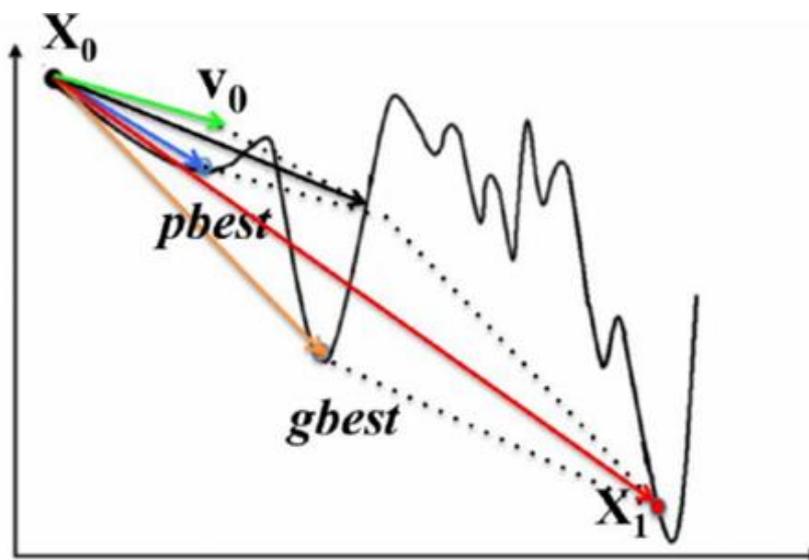


Рисунок 2.2 Принципиальная схема эволюции позиций частиц

Поскольку в алгоритме PSO нет операции перекрестного и вариационного действия, только глобальное экстремальное значение отправляет однонаправленную информацию о потоке к отдельному экстремальному значению, поэтому весь процесс поиска можно понимать как процесс отслеживания оптимального решения в реальном времени, что также делает

PSO в большинстве случаев способным быстро сходиться к глобальному оптимальному решению, а алгоритм PSO нуждается в корректировке меньшего количества параметров, простой структуре, легко реализуемой, поэтому он широко используется во многих областях, таких как трехмерная кристаллическая структура, кластерное и другое прогнозирование, и они интегрированы в программный пакет CALYPSO.

2.2.2 Рабочий процесс CALYPSO

Предсказание структуры CALYPSO сначала случайным образом генерирует начальную структуру в соответствии с заданным химическим соотношением и добавляет случайную выборку ее структуры с пределом симметрии. Кристалл состоит из 230 пространственных групп, которые сначала случайным образом выбираются в этих пространственных группах, и при выборе пространственной группы, благодаря характеру симметрии кристаллической структуры, параметры решетки могут быть получены в соответствии с начальной установкой, а атомные позиции могут быть получены через позиции Вайкоффа (Wyckoff Positions). Введение симметрии значительно сокращает пространство поиска и ускоряет сближение глобальной структуры.



Рисунок 2.3 Симметрия CALYPSO ограничивает процесс генерации структур

Вторым шагом является суждение о сходстве, мы знаем, что поверхность потенциальной энергии можно рассматривать как многомерную энергетическую поверхность, связанную несколькими энергетическими долинами через седловые точки, поэтому ряд структур, распределенных по определенной энергетической долине, упадет на дно энергетической долины после локальной оптимизации, то есть большинство подобных структур станут той же структурой после локальной оптимизации, и когда в процессе прогнозирования структуры создается большое количество подобных структур, оптимизация будет тратить много вычислительных ресурсов. Поэтому, чтобы избежать структурного дублирования, CALYPSO также использует параметры геометрической структуры для оценки структурного сходства и определяет структурное сходство на основе расстояния между атомами и характеризует характеристики структуры по типу связи и длине связи. На более позднем этапе метод превратился в матрицу признаков

связывания. Матрица элементов склеивания может отражать всю информацию о склеивании (длина склеивания, угол ключа и тип склеивания).

Третьим шагом является локальная оптимизация, которая в основном выполняется с помощью других программных пакетов расчета первых принципов (таких как VASP и т. д.) В прогнозировании структуры CALYPSO для получения локального минимума и сужения пространства поиска. Наконец, повторите описанные выше шаги через непрерывный итеративный цикл до тех пор, пока не будет завершено предсказание структуры сходимости.

Четвёртый шаг — эволюция структуры, ранжирование всей полученной структурной энергии, выбор определенной доли структур с более низкой энергией, применение алгоритмов оптимизации толпы, таких как рои частиц, для генерации следующего поколения и исключение подобных структур с помощью критерия подобия структур в процессе генерации структуры для уменьшения объема вычислений.

Наконец, повторяйте описанные выше шаги через непрерывный итеративный цикл до тех пор, пока прогнозирование структуры сходимости не будет завершено.

Кроме того, чтобы обеспечить разнообразие структур, CALYPSO также добавил механизм случайной генерации: на каждую генерацию случайно генерируемых структур приходилось 60%-80% от общего числа, а в предыдущем поколении путем сравнения свободной энергии между различными структурами была выбрана определенная доля более низких энергетических структур.

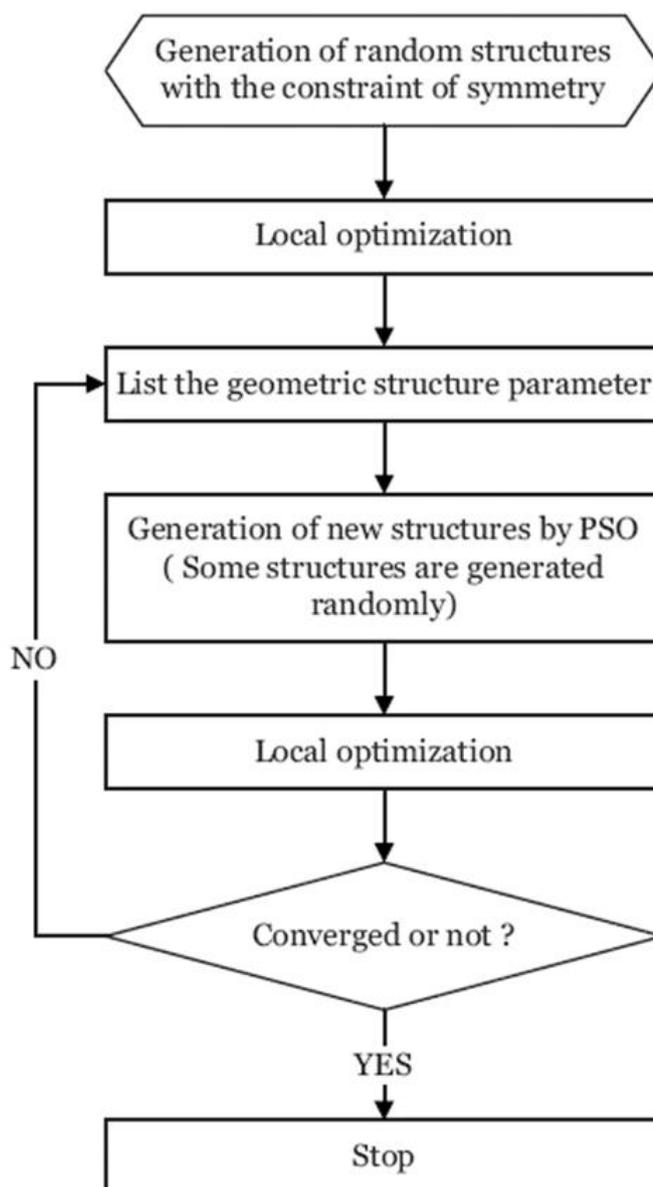


Рисунок 2.4 Схема рабочего процесса CALYPSO

2.2.3 Особенности и текущее состояние алгоритма

Метод прогнозирования структуры CALYPSO превратился в один из наиболее широко используемых методов прогнозирования структуры в мире, его функции включают трехмерное предсказание кристаллической структуры, двумерное предсказание структуры, прогнозирование структуры кластера или наночастиц и другие модули, включая проектирование новых высокотемпературных сверхпроводников водородной клетки под высоким

давлением, а множественные (LaH_{10} , YH_6 и YH_9) были синтезированы последующими экспериментами, что значительно способствует процессу исследования богатых водородом соединений высокотемпературных сверхпроводников. Высокий уровень успеха и высокая эффективность конвергенции указывают на то, что это эффективный и надежный метод прогнозирования структуры.

Глава 3. Исследовательская часть

Согласно предыдущим исследованиям, ксенон (Xe) может образовывать стабильные соединения с большинством элементов щелочных металлов (таких как Li [20], K [25], Rb [25], Cs [19] и т. д.) под высоким давлением. Итак, может ли щелочноземельный металлический элемент, который очень похож на щелочной металл с точки зрения электроотрицательности и атомного радиуса, образовывать стабильное соединение с ксеноном при высоком давлении? Каковы электронные свойства этих соединений? В этой главе авторы теоретически исследуют стабильность и электронные свойства соединений щелочноземельного металла бария и ксенона под высоким давлением.

3.1. Постановка задачи исследования

Ксенон находится в группе 0 пятого периода периодической таблицы, и его внеядерное расположение электронов составляет $[\text{Kr}]4d^{10}5s^25p^6$. Хотя ксенон является элементом редкого газа, с развитием науки о высоком давлении энергия электронной орбитали элемента редкого газа изменяется под действием высокого давления, так что образование химических связей привлекло широкое внимание, особенно в теоретическом предсказании, и было дост. РГ нуту много результатов, таких как соединения Cs-Xe под высоким давлением, соединения Mg-Xe и т. д. Согласно исследованию, Xe может получать электроны из положительно заряженных элементов, в то время как щелочные металлы или щелочноземельные металлы, которые имеют только один или два электрона во внешнем электронном слое, действуют как элементы, обеспечивающие электроны в соединениях. Например, элементы Xe и Cs в соединениях Xe-Cs связаны между собой ионной связью.

Щелочноземельный металл барий находится в шестом периоде периодической таблицы группы II.A, его внеядерное расположение электронов составляет $[\text{Xe}] 6s^2$, относится к элементу s -области, в процессе образования соединения легко потерять самые внешние $6s$ электроны, образование ионов

Ba^{2+} , наиболее распространенные соединения бария в природе включают сульфат бария. Под высоким давлением, Ba производит несколько различных фаз. В предыдущих исследованиях не так много исследований кристаллической структуры и электронных свойств соединений Ba-Xe при высоком давлении, поэтому очень важно изучить, имеют ли соединения Ba-Xe новые пропорции при высоком давлении и имеет ли инертный элемент Xe более богатые фазовые переходы или кристаллические структуры при высоком давлении.

В этой главе авторами теоретически рассчитаны структура и электронные свойства соединений барий-ксенон при высоком давлении, с помощью метода предсказания структуры предсказывают структуру соединений барий-ксенон с различными химическими пропорциями при высоких давлениях 50 и 100 ГПа, а также проанализированы электронные свойства полученных соединений барий-ксенона. Содержание и результаты работы подробно описаны ниже.

3.2. Полученные результаты и их обсуждение

Используя независимо разработанный нашей исследовательской группой метод предсказания кристаллической структуры CALYPSO, авторы статьи провели теоретические исследования и исследования структуры соединений Ba-Xe при 50 и 100 ГПа. Сначала авторы провели структурный поиск вариационного соотношения Ba_xXe_y ($x = 1-7$, $y = 1-7$) при 50 и 100 ГПа, чтобы найти химические соотношения с более низкой энергией. Впоследствии был проведен поиск структуры химического соотношения с меньшей энергией, и в этом процессе был проведен поиск структуры 2-ячейки и 4-ячейки для каждого химического соединения соответственно. Во всех процессах прогнозирования, чтобы обеспечить сходимость предсказаний структур, пространство поиска для каждого соединения составляет не менее 1500 структур.

В процессе прогнозирования структуры расчет первых принципов выполняется с помощью программного обеспечения VASP (The Vienna *Ab initio* Simulation Package), основанного на теории функционала плотности в

сочетании с обобщенной аппроксимацией градиента (Generalized Gradient Approximation, GGA).

Авторы используют псевдопотенциал, основанный на методе проецируемой дополненной волны (Projected augmented wave, PAW), для описания взаимодействия между электронами и ионами. Валентные электроны атомов Ва и Хе в псевдопотенциале составляют $5s^25p^66s^2$ и $5s^25p^6$ соответственно. Во время расчета используемая кинетическая энергия была усечена до 600 эВ, и была выбрана подходящая выборка к-точки, чтобы гарантировать, что результаты расчета могут сойтись к стандарту менее 1 мэВ/атом.

Для определения динамической устойчивости результирующей структуры авторы использовали программное обеспечение Phonopy [21] в сочетании с теорией возмущений функционала плотности (Density Functional Perturbation Theory, DFPT) [41-43]. В процессе расчета фононов авторы оценили кинетическую устойчивость трех термодинамически стабильных соединений, ВаХе, ВаХе₂ и Ва₃Хе, используя суперячейки, содержащие 96, 81 и 64 атома соответственно. Для оценки термодинамической устойчивости соединений бария-ксенона используется уравнение (3.1):

$$\Delta H_{atom} = \frac{H_{Ba_xXe_y} - xH_{Ba} - yH_{Xe}}{x + y}. \quad (3.1)$$

3.2.1 Стабильность барий-ксеноновых соединений под высоким давлением

Авторы использовали программное обеспечение для прогнозирования кристаллической структуры (CALYPSO), независимо разработанное группой и объединенное с методами расчета первых принципов для изучения структуры и электронных свойств соединений Ва-Хе при 50 и 100 ГПа. Авторы впервые изучили кристаллическую структуру соединений бария-ксенона с различными химическими пропорциями под высоким давлением, а также

использовали программное обеспечение CALYPSO для прогнозирования структуры соединений бария-ксенона при 50 и 100 ГПа соответственно и предсказали пропорции как Ba_mXe_n ($x = 1-7$, $y = 1-7$). При различных давлениях авторы извлекли структуру с наименьшей энергией в каждом химическом соотношении в качестве структуры основного состояния соотношения и построили график взаимосвязи между энергией и химическим соотношением на основе этого (рис. 3.1). Как показано, точки, падающие на сплошную линию, представляют собой термодинамически стабильную структуру, в то время как пунктирная линия представляет собой метастабильную структуру. Структура прогнозирования показывает, что все пропорции не могут быть стабильными при 50 ГПа; При 100 ГПа $Immm$ - $BaXe_2$, $P4/mmm$ - $BaXe$ и $Imm2$ - Ba_3Xe остаются стабильными.

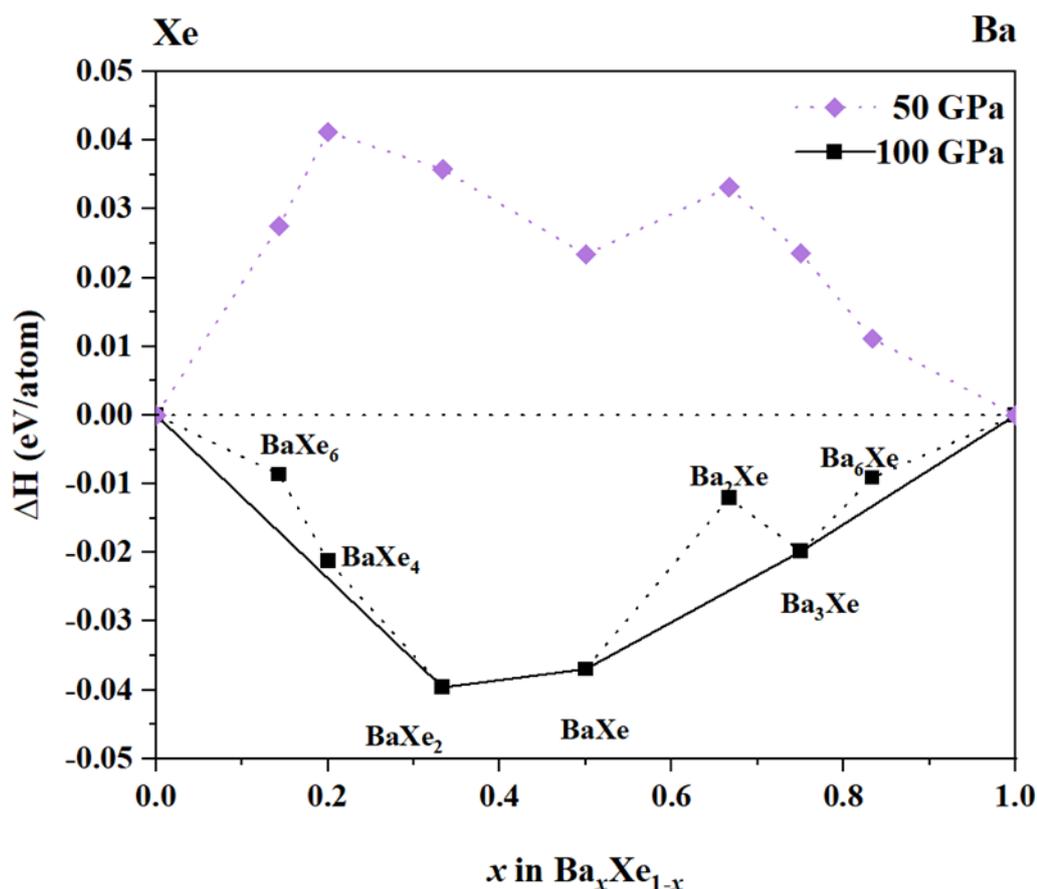


Рисунок 3.1 Стабильность соединений ксенона бария с различным химическим соотношением под высоким давлением, при этом фиолетовая линия является результатом расчета при давлении 50 ГПа; черная линия указывает на результат расчета при 100 ГПа

Для определения кинетической стабильности барий-ксеноновых соединений при различных давлениях авторами с помощью программного обеспечения Phonopy были выполнены расчеты фононного спектра на кристаллических структурах $BaXe_2$, $BaXe$ и Ba_3Xe при 100 ГПа, результаты исследования представлены на рисунке 3.2. Как видно из рисунка, в зоне Бриллюэна нет воображаемых частот и что эти структуры динамически стабильны.

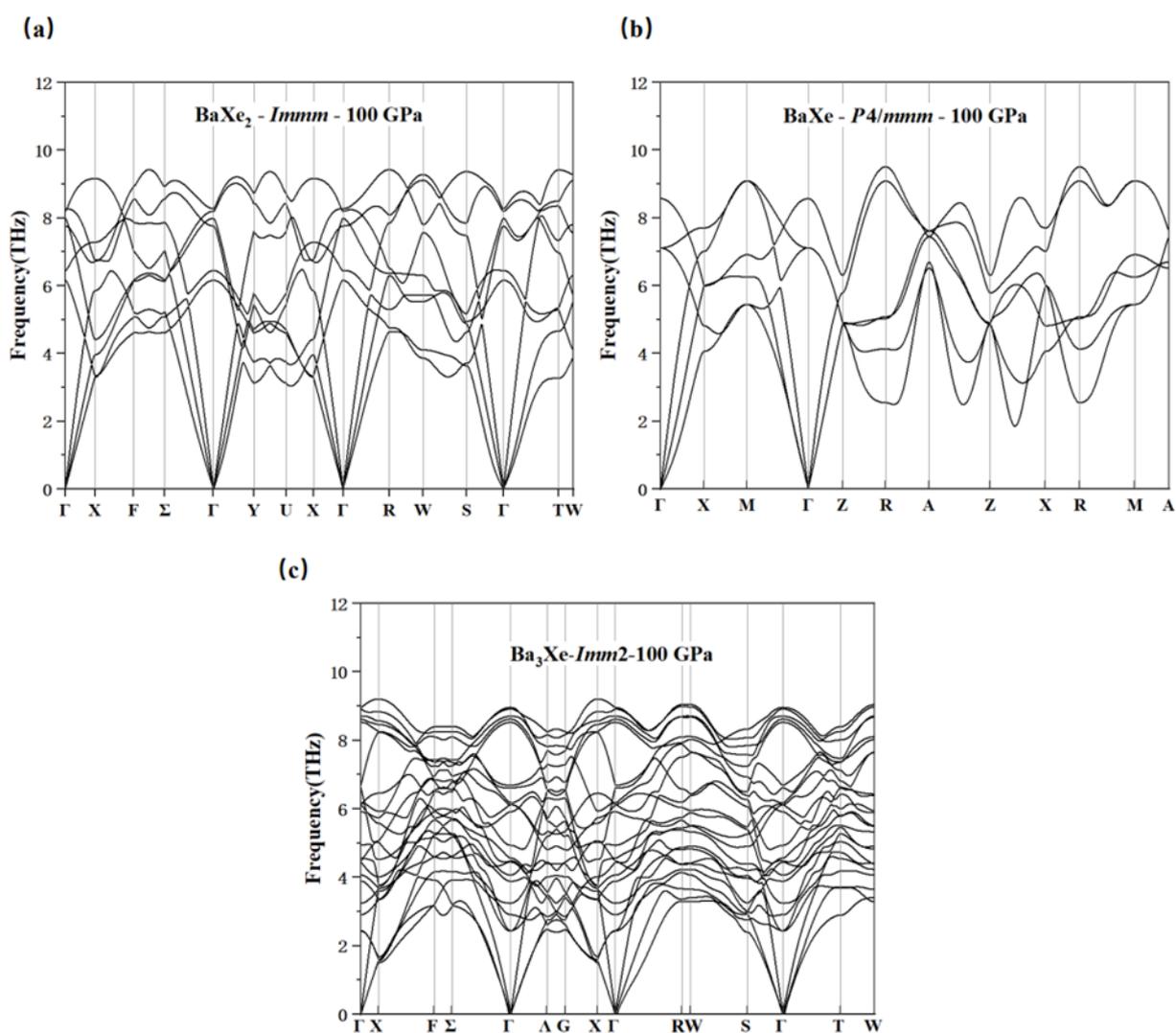


Рисунок 3.2 Фононные спектры $BaXe_2$, $BaXe$ и Ba_3Xe при 100 ГПа

3.3.2 Структура соединений ксенона бария под высоким давлением

Соединения $Ba-Xe$, стабильные при 100 ГПа, показаны на рисунке ниже, и для того, чтобы лучше понять структурные характеристики различных

соединений, авторы провели углубленный анализ структуры этих соединений. Из рисунка видно, что пространственные группы $BaXe_2$, $BaXe$ и Ba_3Xe , полученные под высоким давлением, являются $Im\bar{m}m$, $P4/m\bar{m}m$ и $Im\bar{m}2$ соответственно.

При 100 ГПа $BaXe_2$ состоит из квадратных решеток, уложенных чередующимися атомами ксенона бария, с расстоянием 3,08 Å между атомами бария и двумя соседними атомами ксенона и 3,03 Å между соседними атомами ксенона в одной плоскости. При 100 ГПа структура $BaXe$ также представляет собой сложенную квадратную решетку, в которой расстояние между двумя соседними атомами бария составляет 3,11 Å, а расстояние между соседними атомами бария и атомами ксенона составляет 2,95 Å, и каждый атом бария образует объемно-центрированную кубическую структуру с окружающими 8 атомами ксенона. Ba_3Xe представляет собой слоистую структуру, в структуре Ba_3Xe расстояние между каждым атомом ксенона и соседними атомами бария составляет от 2.96 Å до 2.99 Å, а расстояние между соседними атомами бария составляет от 2.98 Å до 3.00 Å.

В отличие от многих бинарных соединений, таких как соединения Mg-Ar, в которых используются многослойные гексагональные решетки, большинство сплавов Хе и щелочных металлов (ЩМ) (Na, K, Rb и Cs) состоят из многослойных квадратных решеток, в которых попеременно существуют слои Хе и ЩМ [25], а атомы бария как щелочноземельные металлы имеют кристаллическую структуру, которая очень похожа на соединения Хе-AM при образовании соединений с атомами ксенона под высоким давлением.

Параметры кристаллической структуры всех барий-ксеноновых соединений приведены в таблице 3.1.

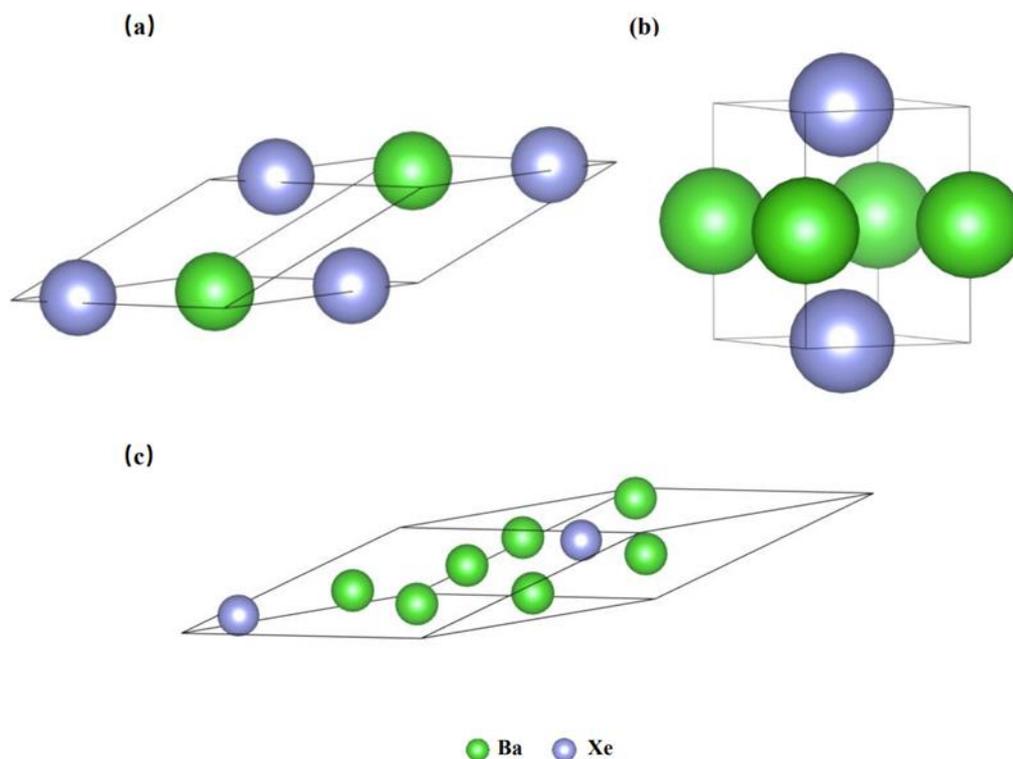


Рисунок 3.3 Кристаллическая структура BaXe_2 , BaXe и Ba_3Xe при 100 ГПа: а) Imm - BaXe_2 ; б) $P4/mmm$ - BaXe ; (с) $Imm2$ - Ba_3Xe

Таблица 3.1 Параметры кристаллической структуры соединений ксенона бария под высоким давлением.

Соединение	Давление (GPa)	Космическая группа	Параметры решетки (\AA , $^\circ$)	Атомарные координаты			
				Атом	x	y	z
Ba_3Xe	100	$Imm2$	$a = 19,459$ $b = 3,051$ $c = 5,093$ $\alpha = \beta = \gamma = 90,0$	Ba	0,251	0,500	0,049
				Ba	0,000	0,500	-0,267
				Ba	0,625	0,000	-0,112
				Ba	0,000	0,000	-0,771
				Xe	0,126	0,000	-0,113
BaXe	100	$P4/mmm$	$a = b = 3,115$ $c = 3,938$	Ba	0,000	0,000	0,500
				Xe	0,500	0,500	0,000

			$\alpha = \beta = \gamma$ $= 90,0$				
			$a = 9,195$				
BaXe ₂	100	<i>Immm</i>	$b = 3,123$	Ba	-0,500	0,000	0,000
			$c = 4,033$	Xe	-0,835	0,000	0,000
			$\alpha = \beta = \gamma$ $= 90,0$				

3.3.3 Электронные свойства соединений бария-ксенона при высоком давлении

Для изучения химии барий-ксеноновых связей в соединениях барий-ксенон при высоком давлении авторы рассчитали функцию локализации электронов (ЭЛФ). Электронные локальные функции (ЭЛФ) — это метод изучения структуры электронных существ. Он используется для описания вероятности нахождения электрона с одинаковым спином вблизи электрона в определенном месте в качестве эталона и может характеризовать степень локализации этого эталонного электрона [44-45]. Если локальная природа электрона в определенной области выше, тем больше степень, в которой электрон ограничен в этой области, и, наоборот, если локальность электрона ниже, тем меньше электрон ограничен в этой области, и электрон может свободно перемещаться в пространстве. ЭЛФ выражается в следующих формах:

$$ELF = \frac{1}{1 + \chi_{\sigma}^2}, \quad (3.2)$$

где $\chi_{\alpha} = \frac{D_{\sigma}}{D_{\sigma}^0}$, D_{σ} — плотность вероятности одного и того же электрона, встречающегося в радиусной области.

Для простоты понимания Веке *et al.* нормализовали выражение ЭЛФ, и значение обработанного ЭЛФ находилось в диапазоне от 0 до 1, причем верхнее значение 1 указывало на полную локализацию электрона, а значение 0

указывало на полную делокализацию электрона.

Вычисленные электронные локальные функции $Immm$ -BaXe₂, $P4/mmm$ -BaXe и $Imm2$ -Ba₃Xe при 100 ГПа показаны на рисунке 3.4, а распределение этих электронов сферическое, что характерно для замкнутых оболочек. Небольшое значение ЭЛФ в области между атомами бария и ксенона указывает на то, что в соединении барий-ксенон при 100 ГПа атом бария-ксенона связан ионной связью.

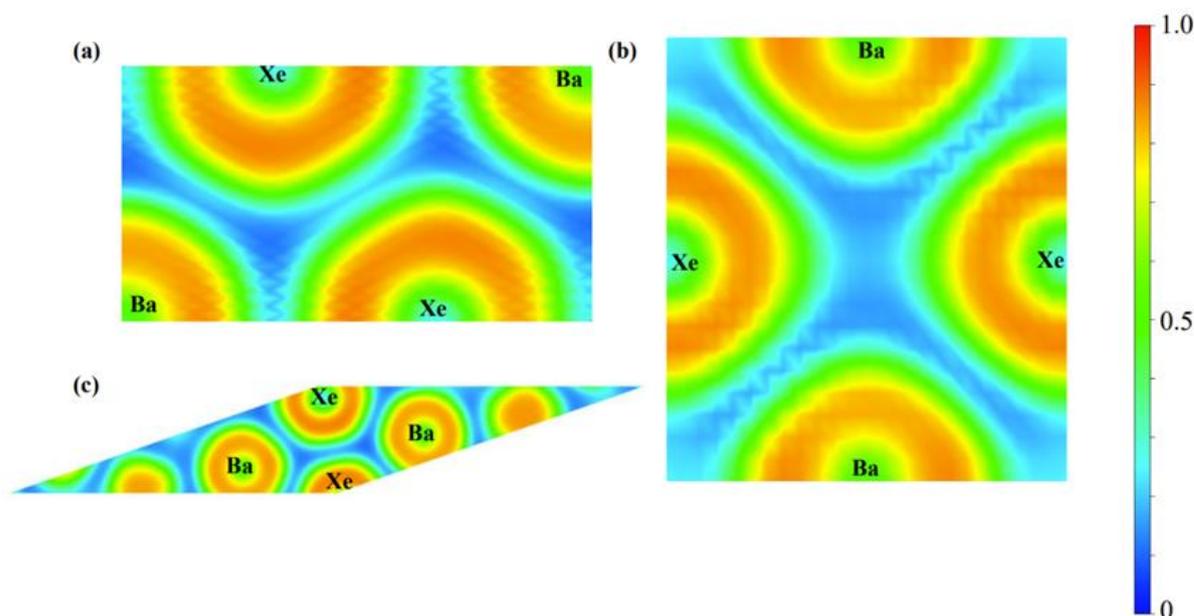


Рисунок 3.4 Электронные локальные функции BaXe₂, BaXe и Ba₃Xe при 100 ГПа: а) $Immm$ -BaXe₂; б) $P4/mmm$ -BaXe; в) $Imm2$ -Ba₃Xe

Кроме того, для дальнейшего анализа переноса заряда между атомами бария-ксенона авторы также провели анализ заряда Бадера на соединениях бария-ксенона при 100 ГПа, и результаты показаны на рисунке 3.5, в соединениях бария-ксенона атомы бария действуют как источники питания в соединении, теряя электроны, чтобы стать положительными ионами, и атомы ксенона, чтобы получить электроны до отрицательных ионов. И чем выше содержание бария в соединении ксенона бария, тем очевиднее перенос заряда между атомом бария и атомом ксенона. Этот результат аналогичен картине в системах Li-Xe, где перенос заряда между атомами лития и ксенона

увеличивается с увеличением количества атомов лития в соединениях лития-ксенона.

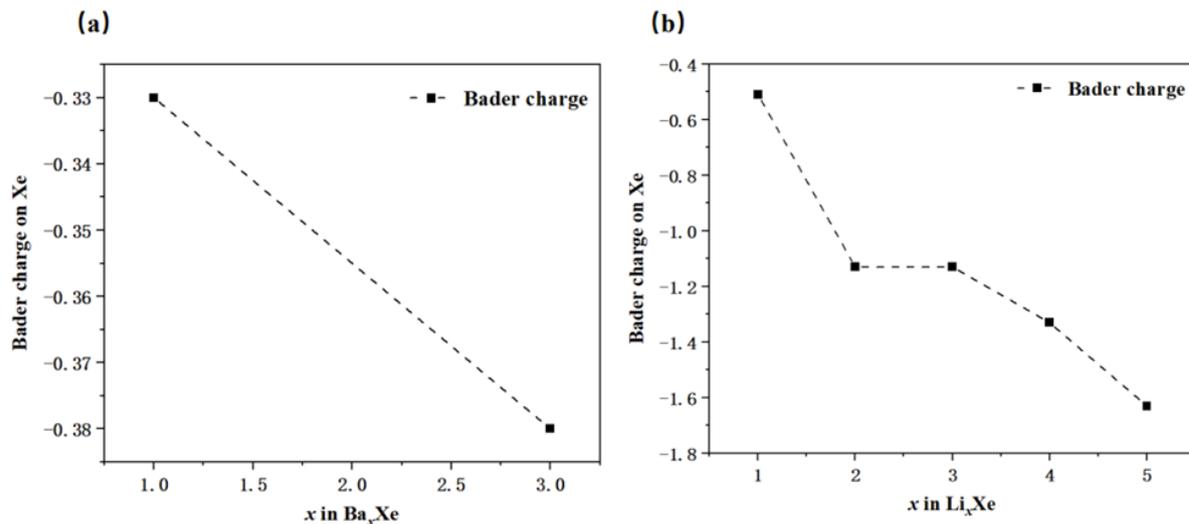


Рисунок 3.5 Перенос заряда между атомами бария и атомами ксенона в BaXe и Ba₃Xe при 100 ГПа с содержанием бария (a); Изменения переноса заряда между атомами лития и атомами ксенона в соединениях Li_nXe при 200 ГПа с содержанием лития (b) [20].

Кроме того, для дальнейшего понимания электронных свойств соединений бария-ксенона авторы также рассчитали соответствующие плотности электронного состояния *Immm*-BaXe₂, *P4/mmm*-BaXe и *Imm2*-Ba₃Xe при 100 ГПа. Результаты показаны на рисунке 3.6. Из рисунка 3.6 видно, что в трех структурах *5p*-орбитали атомов ксенона в основном распределены в области ниже поверхности Ферми, что указывает на то, что их *5p*-орбитали заняты большим количеством электронов, в то время как *4d*-орбитали атомов бария распределены в области над поверхностью Ферми, что указывает на то, что их энергия *4d*-орбитали выше и нет распределения электронов. Кроме того, с помощью анализа плотности электронного состояния вблизи поверхности Ферми можно обнаружить, что *4d*-орбиталь бария и ксеноновая *5p*-орбиталь частично перекрываются, что предварительно указывает на то, что между двумя орбиталями происходит перенос заряда.

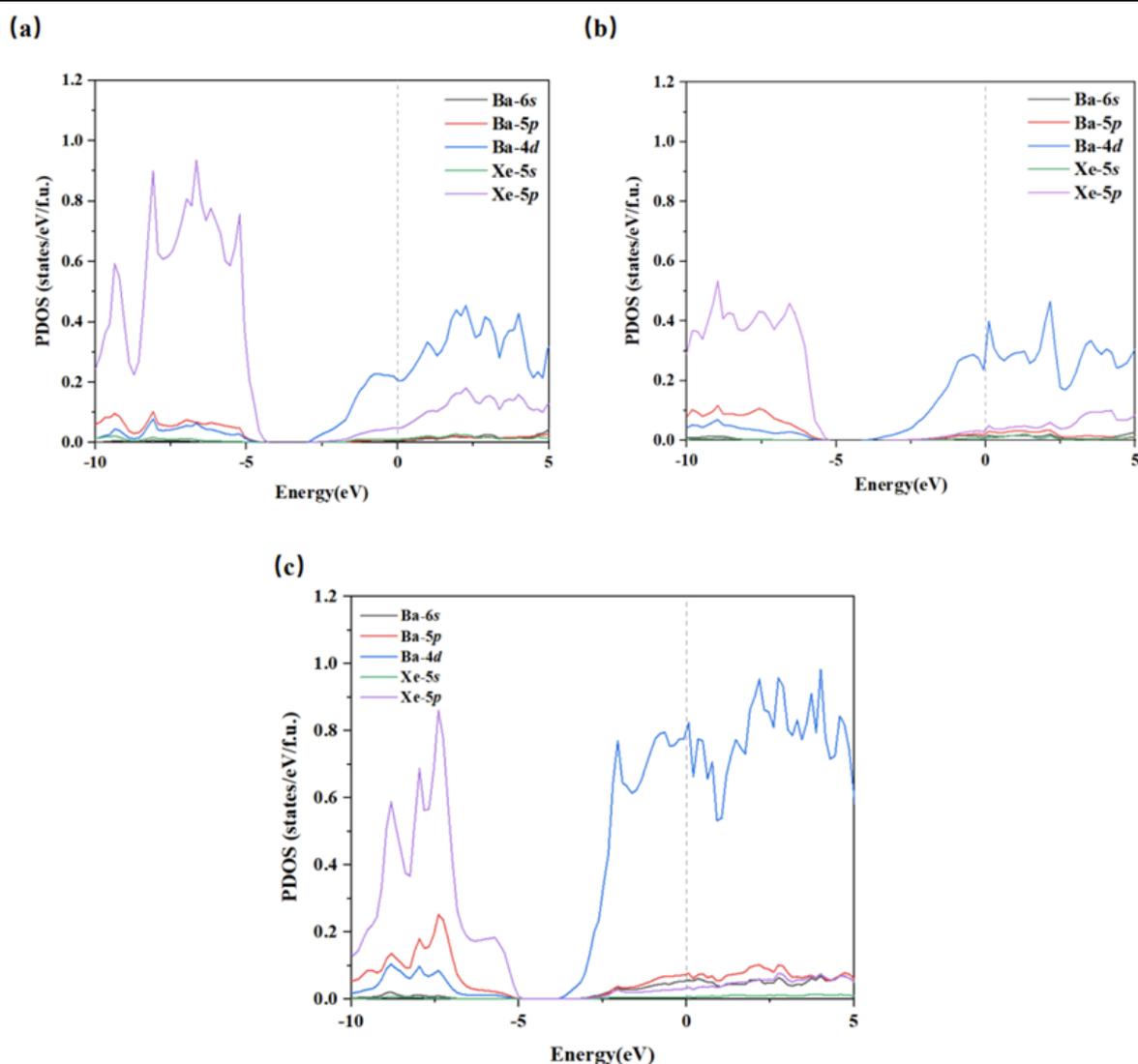


Рисунок 3.6 Плотность электронного состояния BaXe_2 , BaXe и Ba_3Xe при 100 ГПа: а) Imm - BaXe_2 ; б) $P4/mmm$ - BaXe ; в) $\text{Imm}2$ - Ba_3Xe

3.3 Выводы

При выполнении ВКР систематически исследовалась кристаллическая и электронная структуры соединения Ва-Хе при давлении 50 и 100 ГПа. Исследования проведены с помощью программного обеспечения CALYPSO в сочетании с расчетом на основе первых принципов. Обнаружено, что при 100 ГПа существуют три стабильных фазы системы Ва-Хе при химических соотношениях: Imm - BaXe_2 , $P4/mmm$ - BaXe и $\text{Imm}2$ - Ba_3Xe , а высокое давление сыграло ключевую роль в образовании стабильных фаз соединения Ва-Хе.

Кроме того, выяснилось, что в стабильных фазах соединения Ва-Хе действует ионный тип связи, при котором атомы Ва выступают в роли доноров электронов. Ожидается, что изучение систем Ва-Хе под высоким давлением расширит и углубит понимание свойств соединений, содержащих редкие газы при высоком давлении.

Глава 4. Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

В рамках проводимых работ проводится структурное моделирование под высоким давлением Ва-Хе. Моделирование проводилось в программном пакете CALYPSO программного обеспечения для прогнозирования кристаллической структуры Цзилиньского университета.

В последние годы широко используется CALYPSO для предсказания кристаллической структуры при высоком давлении, что внесло большой вклад в развитие науки о высоких напряжениях.

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>Сильные стороны научно-исследовательского проекта:</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>Слабые стороны научно-исследовательского проекта:</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>Возможности:</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>Угрозы:</p> <p>У1. Несвоевременное финансирование научного исследования при дальнейшем развитии проекта.</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	Цилинский 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	5 600\$ / 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	9	Проверка полученных результатов	С

результатов	10	Оформление заключения	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):3

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

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.;

$t_{ожи}$ – 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	Трудоемкость						Исполнитель	Т _р , раб. дн		Т _к , кал. дн	
		t _{min}		t _{max}		t _{ож}			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;

К – консультант;

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

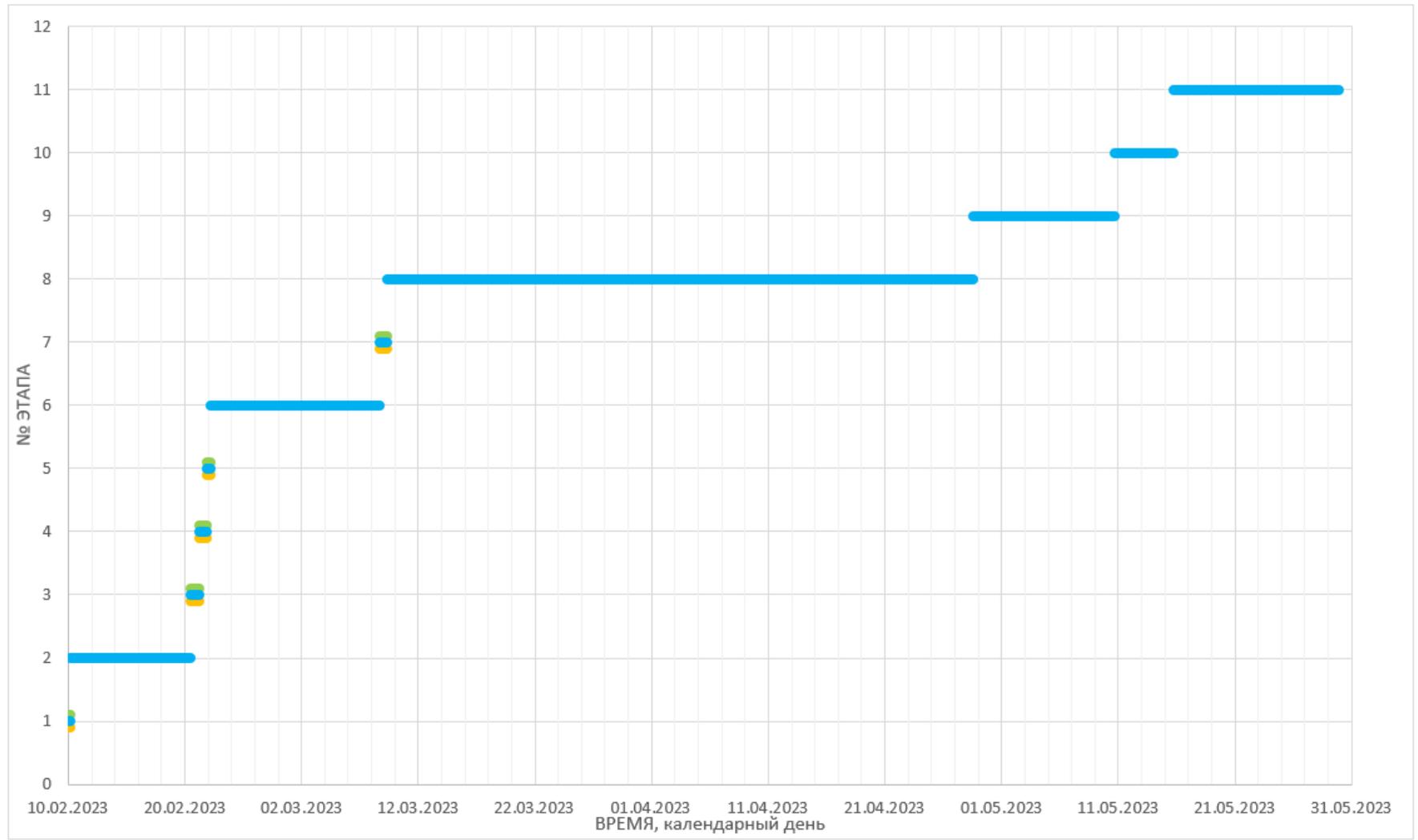


Рисунок 4.1 – Календарный план-график проведения НИОКР. Синим цветом показан магистрант, оранжевым – научный руководитель, зеленым – консультант

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 (4.5):

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

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:

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

здесь $З_{\text{осн}}$ – 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 4.11).

В таблице 4.5 приведен баланс рабочего времени каждого работника НТИ.

Таблица 4.5 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Студент	Консультант
Календарное число дней	365	365	365
Количество нерабочих дней			
• выходные дни:	53	53	53
• праздничные дни:	14	14	14
Потери рабочего времени			
• отпуск:	48	48	48
• невыходы по болезни:	7	7	7
Действительный годовой фонд рабочего времени	244	244	244

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_m = Z_{тс} \cdot (1 + k_{пр} + k_d) \cdot k_p, \quad (4.9)$$

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

$k_{пр}$ – премиальный коэффициент, равный 0,3 (т.е. 30% от $Z_{тс}$);

k_d – коэффициент доплат и надбавок составляет 50%;

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	$Z_{тс}$	$k_{пр}$	k_d	k_p	Z_m , руб	Z_d , руб	T_p , день	$Z_{осн}$, руб
Студент	22 000	0,3	0,5	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	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	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

Рассчитанная 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 4.148
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 НИИ приходится 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;

Φ_{pi} – стоимость i -го варианта исполнения;

Φ_{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:

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

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 интегральных показателей эффективности показывает, что предпочтительным для выполнения расчетов является второй вариант исполнения, так как данный вариант является наиболее экономичным и ресурсоэффективным, по сравнению со первым.

В рамках данного раздела ВКР оценивается конкурентоспособность теоретических расчетов конструкций под высоким давлением Ва-Хе по сравнению с другими аналогичными расчетами; 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.

Глава 5. Социальная ответственность

Объектом исследования является энергетический спектр бета-распада атомных ядер.

Исследование выполнялось в компьютерном зале Цзилиньского университета (КНР). Размеры помещения: высота 4 м, ширина 3.5 м, длина 3 м, площадь 42 м³. Рабочее оборудование для проведения исследования – персональный компьютер.

В процессе исследования персональный компьютер использовался для расчета и изучения кристаллической структуры и электронных свойств системы барий-ксенон под высоким давлением.

С целью оценки степени безопасности исследования свойствах бета-распада атомных ядер на основе микроскопической плотности заряда 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 [47].

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 [47], 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 м³. 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 [48] и ГОСТ 12.2.033-78 [49].

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 м³. Рабочее оборудование – персональный компьютер.

Для идентификации потенциальных факторов использован ГОСТ 12.0.003-2015 [50]. 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

ГРГиенические нормативы по шуму устанавливаются национальным законодательством [51].

В таблице 5.2 показаны допустимые уровни шума представленные в Санитарных нормах [52].

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 трудоого процесса	Категория тяжести трудового процесса				
	легкая физическа я 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. [60]. 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 [53], 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 [61].

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 [54].

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, °C					Относительная влажность, %		Скорость движения, м/с	
	оптимальная	допустимая				оптимальная	допустимая на рабочих местах постоянных и непостоянных, не более	оптимальная, не более	допустимая на рабочих местах постоянных и непостоянных
		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 [62].

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 [56].

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 [57].

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 [58].

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 [63].

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 [64].

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 [64].

5.2.1.4 Анализ показателей освещенности рабочей зоны

Нормы освещения в помещении для работы с персональным компьютером по [56] представлены в таблице 5.5.

В результате неблагоприятных условий освещения может утомляться зрительный анализатор, снижаться работоспособность, могут появляться

профессиональные заболевания [65].

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	Освещенность, лк		Показатель дискомфорта, М, не более	Коэффициент пульсации и освещённости, КЕО e_n , %, не более	
					при комбинированном освещении	при общем освещении			
Г-0,8	2.4	1.9	2.0	0,5	все го	от обще го	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 освещенность рабочей поверхности, освещенность 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 [66].

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 [67].

5.5 Выводы по разделу

В результате исследования, проведенного в рамках части «Социальная ответственность», в ходе исследования соединений бария и ксенона под высоким давлением были изучены правовые нормы трудового законодательства.

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 ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- [1] Holzapfel, W. B. Physics of solids under strong compression. *Rep. Prog. Phys.*, 1996, V. 59, P. 28–90.
- [2] Badding, J. V. High-pressure synthesis, characterization, and tuning of solid state materials. *Annu. Rev. Mater. Sci.*, 1998, V. 28, P. 631–658.
- [3] Hemley, R. J. Effects of high pressure on molecules. *Annu. Rev. Phys. Chem.*, 2000, V. 51, P. 763–800.
- [4] McMillan, P. F. New materials from high-pressure experiments. *Nat. Mater.*, 2002, V.1, P. 19–25.
- [5] McMillan, P. F. Chemistry at high pressure. *Chem. Soc. Rev.*, 2006, V. 35, P. 855–857.
- [6] Bridgman P W. Theoretically interesting aspects of high pressure phenomena. *Reviews of Modern Physics*, 1935, V. 7(1), P. 1-33.
- [7] Mao H K. High-Pressure Physics: Sustained Static Generation of 1.36[J]. *Science*, 1978, V. 200(4346), P. 1145–1147.
- [8] Mao H K, Bell P M, Dunn K J, *et al.* Absolute pressure measurements and analysis of diamonds subjected to maximum static pressures of 1.3-1.7 Mbar[J]. *Rev. Sci. Instrum.*, 1979, V. 50(8), P. 1002–1009.
- [9] Ruoff A L, Luo H, Vohra Y K. The closing diamond anvil optical window in multimegabar research[J]. *J. Appl. Phys.*, 1991, V. 69(9), P. 6413–6416.
- [10] Ruoff A L, Xia H, Xia Q. The effect of a tapered aperture on x-ray diffraction from a sample with a pressure gradient: Studies on three samples with a maximum pressure of 560 GPa [J]. *Rev. Sci. Instrum.*, 1992, V. 63(10), P. 4342–4348.
- [11] McMahon, J. M., Morales, M. A., Pierleoni, C. & Ceperley, D. M. The properties of hydrogen and helium under extreme conditions. *Rev. Mod. Phys.*, 2012, V. 84, P. 1607.
- [12] Mujica, A., Rubio, A., Muñoz, A. & Needs, R. J. Highpressure phases of group-IV, III–V, and II–VI compounds. *Rev. Mod. Phys.* 2003, V. 75, P. 863.
- [13] Pauling, L. The formulas of antimononic acid and the antimonates. *J. Am. Chem.*

Soc., 1933, V. 55, P. 1895–1900.

[14] Bartlett, N. Xenon hexafluoroplatinate (V) $\text{Xe}^+[\text{PtF}_6]^-$. Proc.Chem. Soc. Lond. 1962, V. 6, P. 218.

[15] Miao, M., Sun, Y., Liu, H., & Ma, Y. Open questions on the high-pressure chemistry of the noble gases. Communications Chemistry, 2022, V. 5(1), P. 15.

[16] Hargittai I. Neil Bartlett and the first noble-gas compound[J]. Structural Chemistry, 2009, V. 20, P. 953-959.

[17] Miao M.-s. S. and Hoffmann R., Acc. Chem. Res., 2014, V. 47, P. 1311.

[18] Miao, M. S., Wang, X. L., Brgoch, J., Spera, F., Jackson, M. G., Kresse, G., & Lin, H. Q. Anionic chemistry of noble gases: formation of Mg–NG (NG= Xe, Kr, Ar) compounds under pressure. Journal of the American Chemical Society, 2015. V. 137(44), P. 14122-14128.

[19] Zhang, S., Bi, H., Wei, S., Wang, J., Li, Q., & Ma, Y. Crystal structures and electronic properties of cesium xenides at high pressures. The Journal of Physical Chemistry C, 2015, V. 119(44), P. 24996-25002.

[20] Liu, Z., Botana, J., Miao, M., & Yan, D. Unexpected Xe anions in XeLi_n intermetallic compounds. Europhysics Letters, 2017, V. 117(2), P. 26002.

[21] Togo, Atsushi and Isao Tanaka. First principles phonon calculations in materials science. Scripta Materialia, 2015, V. 108, P. 1-5.

[22] Chen W, Semenok D V, Kvashnin A G, et al. Synthesis of molecular metallic barium superhydride: pseudocubic BaH_{12} [J]. Nature communications, 2021, V. 12(1), P. 273.

[23] 罗会仟. 超导“小时代”之三十三:压力山大更超导[J]. 物理, 2018, 47(10): 676-679. doi: 10.7693/wl20181011

[24] A. K. McMahan, Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys., 1984, V. 29, P. 5982(R).

[25] Tian, Y., John, S. T., Liu, G., & Liu, H. Predicted crystal structures of xenon and alkali metals under high pressures. Physical Chemistry Chemical Physics, 2022, V. 24(30), P. 18119-18123.

[26] Bjarne Amstrup, Gaibor J. Toth, Herschel Rabitz, Andras Lorincz

Identification of Born-Oppenheimer potential energy surfaces of diatomic molecules from optimized chirped pulses, *Chemical Physics*, 1995, V. 201, P. 95-105.

[27] 吴福伦,吴顺情,朱梓忠.晶体结构预测的新方法和典型应用[J].中国科学:物理学 力学 天文学,2021, V. 51(03), P. 58-66.

[28] Wales D J, Doye J P K. Global optimization by basin-hopping and the lowest energy structures of Lennard-Jones clusters containing up to 110 atoms. *J Phys Chem A*, 1997, V. 101, P. 5111–5116.

[29] Goedecker S. Minima hopping: An efficient search method for the global minimum of the potential energy surface of complex molecular systems. *J Chem Phys*, 2004, V. 120, P. 9911–9917.

[30] Pannetier J, Bassas-Alsina J, Rodriguez-Carvajal J, et al. Prediction of crystal structures from crystal chemistry rules by simulated annealing. *Nature*, 1990, V. 346, P. 343–345.

[31] Martonák R, Laio A, Parrinello M. Predicting crystal structures: The Parrinello-Rahman method revisited. *Phys Rev Lett*, 2003, V. 90, P. 075503.

[32] Wang, Y., Lv, J., Zhu, L., & Ma, Y. CALYPSO: A method for crystal structure prediction. *Computer Physics Communications*, 2012, V. 183(10), P. 2063-2070.

[33] Wang, Y., Lv, J., Zhu, L., & Ma, Y. Crystal structure prediction via particle-swarm optimization. *Physical Review B*, 2010, V.82(9), P. 094116.

[34] Gao B, Gao P, Lv S *et al.* Interface structure prediction via CALYPSO method. *Science Bulletin*, 2019, V. 64(5), P. 301-309.

[35] Kennedy J, Eberhart R. Particle Swarm Optimization[C] *Icnn95-international Conference on Neural Networks*. IEEE, 1995, V. 4, P. 1942-1948.

[36] R. Eberhart and J. Kennedy, A new optimizer using particle swarm theory, *MHS'95. Proceedings of the Sixth International Symposium on Micro Machine and Human Science*, 1995, P. 39-43.

[37] Shi Y. A modified particle swarm optimizer[C] *Evolutionary Computation Proceedings*, *IEEE World Congress on Computational Intelligence*, 1998, P. 69-73.

[38] Karaboga D. An idea based on honey bee swarm for numerical

optimization[J]. Comput. Technical Report - TR06. 2005.

[39] G. Kresse and D. Joubert From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method [J]. Physical Review B, 1999, V. 59(3), P. 1758.

[40] Kresse G, Furthmüller J. Efficient iterative schemes for *Ab initio* total-energy calculations using a plane-wave basis set. Phys. Rev. B, 1996, V. 54(16), P. 11169-11186.

[41] Chaput L, Togo A, Tanaka I, *et al.* Phonon-phonon interactions in transition metals [J]. Physical Review B, 2011, V. 84(9), P. 094302.

[42] Giannozzi P, Gironcoli S D, Pavone P, *et al.* *Ab initio* calculation of phonon dispersions in semiconductors [J]. Physical Review B, 1991, V. 43(9), P. 7231-7242.

[43] Gonze X, Lee C. Dynamical matrices, Born effective charges, dielectric permittivity tensors, and interatomic force constants from density-functional perturbation theory [J]. Physical Review B, 1997, V. 55(16), P. 10355.

[44] C. Mailhot, L. H. Yang, and A. K. McMahan Polymeric nitrogen[J]. Physical Review B, 1992, V. 46(22), P. 14419-14435.

[45] Zhao Z, Xu B, Tian Y. Recent advances in superhard materials[J]. Annual Review of Materials Research, Annual Reviews, 2016, V. 46, P. 383–406.

[46] Katzke H, Tolédano P. Competition between Burgers mechanism and Bain deformation in alkaline-earth metals: Host-guest structures of barium and strontium[J]. Physical Review B, 2007, V. 75(17), P. 174103.

[47] Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 № 197-ФЗ (ред. от 02.12.2019).

[48] ГОСТ 12.2.032-78. ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования (дата введения: 01.01.1979).

[49] [ГОСТ 12.2.033-78](#) ССБТ. Рабочее место при выполнении работ стоя. Общие эргономические требования (дата введения: 01.01.1979).

[50] ГОСТ 12.0.003-2015. ССБТ. Опасные и вредные производственные факторы. Классификация (дата введения: 01.03.2017).

[51] ГОСТ 12.1.003-2014. ССБТ. Шум. Общие требования безопасности

(дата введения: 01.11.2015).

[52] 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.).

[53] ГОСТ 12.1.029-80. ССБТ. Средства и методы защиты от шума. Классификация (дата введения: 01.07.1981).

[54] [ГОСТ 12.1.005-88](#). ССБТ. Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны (дата введения: 01.01.1989).

[55] ГОСТ 12.1.007-76. ССБТ. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности (дата введения: 01.01.1977).

[56] [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.).

[57] ГОСТ 12.4.011-89. ССБТ. Средства защиты работающих. Общие требования и классификация (дата введения: 01.07.1990).

[58] ГОСТ 12.1.038-82 ССБТ. Электробезопасность. Предельно допустимые уровни напряжений прикосновения и токов (дата введения: 01.07.1983).

[59] ГОСТ Р 12.1.019-2009 ССБТ. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты (дата введения: 01.01.2011).

[60] 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).

[61] 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).

[62] 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.
- [63] Назаренко, О. Б. Безопасность жизнедеятельности: учебное пособие / О. Б. Назаренко. – Томск: Изд-во ТПУ, 2010. – 144 с.
- [64] Куликов, Г. Б. Безопасность жизнедеятельности: учебник / Г. Б. Куликов. – М.: МГУП, 2010. – 408 с.
- [65] 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-sredy-i-na-zdorove-cheloveka/> (дата обращения: 20.03.2023).
- [66] ФЗ «Технический регламент о требованиях пожарной безопасности» от 22.07.2008 № 123-ФЗ (с изменениями от 30 апреля 2021 года).
- [67] ВНЭ 5-79. Правила пожарной безопасности при эксплуатации предприятий химической промышленности (утв. Министерством химической промышленности 25 июля 1979 г.).