

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 16.04.01 Техническая физика
 Отделение школы (НОЦ) Научно-образовательный центр Б.П. Вейнберга

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
Вычисление потенциалов межатомного взаимодействия в металлах при наличии ионизационных процессов, вызванных излучением

УДК 5392:539.16.04:620.22

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОДМ91	Сангыл-оол Аиза Игоревна		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор НОЦ Б.П. Вейнберга, ИЯТШ	Янин С.Н.	Доктор физико-математических наук		

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН ШБИП	Трубченко Татьяна Григорьевна	Кандидат экономических наук, доцент		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент Отделения общетехнических дисциплин ШБИП	Антоневич Ольга Алексеевна	Кандидат биологических наук		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент НОЦ Б.П. Вейнберга, ИЯТШ	Сиделев Д.В.	Кандидат технических наук, доцент		

Компетенции выпускников ООП «Пучковые и плазменные технологии» по направлению
16.04.01 Техническая физика (2019 года приёма)

Код компетенции	Наименование компетенции
УК(У)-1	Способность осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, выработать стратегию действий
УК(У)-2	Способность управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла
УК(У)-3	Способность организовывать и руководить работой команды, выработывая командную стратегию для достижения поставленной цели
УК(У)-4	Способность применять современные коммуникативные технологии, в том числе на иностранном (-ых) языке (-ах), для академического и профессионального взаимодействия
УК(У)-5	Способность анализировать и учитывать разнообразие культур в процессе межкультурного взаимодействия
УК(У)-6	Способность определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы её совершенствования на основе самооценки
ОПК(У)-1	Способность к профессиональной эксплуатации современного научного и технологического оборудования и приборов, предназначенных для использования в области технической физики
ОПК(У)-2	Способность демонстрировать и использовать углублённые теоретические и практические знания фундаментальных и прикладных наук, в том числе из области технической физики
ОПК(У)-3	Готовность руководить коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия
ОПК(У)-4	Готовность к коммуникации в устной и письменной формах на русском и иностранном языках для решения задач профессиональной деятельности в области технической физики
ОПК(У)-5	Способность осуществлять научный поиск и разработку новых перспективных подходов и методов к решению профессиональных задач, готовность к профессиональному росту, к активному участию в научной деятельности, конференциях, выставках и презентациях
ПК(У)-1	Способность критически анализировать современные проблемы технической физики, ставить задачи и разрабатывать программу исследования, выбирать адекватные способы и методы решения экспериментальных и теоретических

Код компетенции	Наименование компетенции
	задач, интерпретировать, представлять и применять полученные результаты
ПК(У)-2	Способность самостоятельно выполнять физико-технические научные исследования для оптимизации параметров объектов и процессов с использованием стандартных и специально разработанных инструментальных и программных средств
ПК(У)-3	Готовность осваивать и применять современные физико-математические методы для решения профессиональных задач в области технической физики, составлять практические рекомендации по использованию полученных результатов
ПК(У)-4	Способность представлять результаты исследования в формах отчётов, рефератов, публикаций и презентаций
ПК(У)-5	Готовность принимать непосредственное участие в учебной и учебно-методической работе по направлению «Техническая физика», участвовать в разработке программ учебных дисциплин и курсов
ПК(У)-6	Способность проводить учебные занятия, лабораторные работы, обеспечивать практическую и научно-исследовательскую работу обучающихся
ПК(У)-7	Способность применять и разрабатывать новые образовательные технологии
ПК(У)-8	Способность разрабатывать и оптимизировать современные наукоёмкие технологии в областях технической физики, связанных с применением пучковых и плазменных технологий, с учетом экономических и экологических требований
ПК(У)-9	Способность разрабатывать, проводить наладку и испытания, эксплуатировать наукоемкое технологическое и аналитическое оборудование
ПК(У)-10	Готовность решать прикладные инженерно-технические и технико-экономические задачи с помощью пакетов прикладных программ

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

Школа Инженерная школа ядерных технологий
 Направление подготовки (специальность) 16.04.01 Техническая физика
 Отделение школы (НОЦ) Научно-образовательный центр Б.П. Вейнберга

УТВЕРЖДАЮ:
 Руководитель ООП
 _____ Сиделев Д.В.
 (Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Магистерской диссертации

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

Студенту:

Группа	ФИО
ОДМ91	Сангыл-оол Аизе Игоревне

Тема работы:

Вычисление потенциалов межатомного взаимодействия в металлах при наличии ионизационных процессов, вызванных излучением

Утверждена приказом директора (дата, номер)

Срок сдачи студентом 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 особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i></p>	<p>Объектом исследования является изменение межатомного взаимодействия в металлах при ионизации и возбуждении электронной подсистемы.</p>
<p>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов <i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной</i></p>	<ol style="list-style-type: none"> 1. Изучить методы расчета парных потенциалов межатомного взаимодействия; 2. Вычислить константы, входящие в формфактор псевдопотенциалов для дополнительно ионизированных ионных остовов; 3. Создать компьютерную модель, рассчитывающую потенциалы взаимодействия для ионов различной зарядности; 4. Проанализировать полученные результаты.

<i>работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i>	
Перечень графического материала <i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i>	1. Титульный лист. 2. Introduction. 3. Введение. 4. Актуальность работы. 5. Цель работы и задачи. 6. Метод выполнения задач. 7. Программа для вычисления потенциалов межатомного взаимодействия для различных зарядовых состояний ионов металла. 8. Программа для построения графиков. 9. Расчет потенциалов межатомного взаимодействия для различных зарядовых состояний ионов алюминия, также при электронном возбуждении подсистемы. 10. Получение данных и построение графиков. 11. Представить математическую модель молекулярной динамики при наличии ионизационных процессов, вызванных излучением. 12. Обсуждение полученных результатов. 13. Научное положение, выносимое на защиту. 14. Заключение.

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы

(с указанием разделов)

Раздел	Консультант
«Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»	Доцент ОСГН ШБИП Трубченко Т.Г., к.э.н.
«Социальная ответственность»	Доцент ООТД ШБИП Антонец О.А., к.б.н
«Раздел на английском языке»	Доцент отделения иностранных языков ШБИП Зеремская Ю. А., к. филол. н.

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

1. Применение и описание метода псевдопотенциала;
2. Метод псевдопотенциала;
3. Результаты исследований и их анализ.

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

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор НОЦ Б. П. Вейнберга	Янин С.Н.	Доктор физико-математических наук		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОДМ91	Сангыл-оол А.И.		

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

Студенту:

Группа		ФИО	
ОДМ91		Сангыл-оол Аизе Игоревне	
Школа	ИЯТШ	Отделение школы (НОЦ)	НОЦ Б.П. Вейнберга
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	16.04.01 Техническая физика

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

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Использование информации, представленной в российских и иностранных научных публикациях, аналитических материалах и изданиях, нормативно-правовых документах.
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 и инновационного потенциала НТИ	Описание потенциальных потребителей, анализ конкурентных технических решений, SWOT-анализ.
2. Разработка устава научно-технического проекта	Определение целей и ожиданий, требований проекта. Определение заинтересованных сторон и их ожиданий.
3. Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок	Составление календарного плана проекта. Определение бюджета НТИ. Диаграмма Ганта.
4. Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности	Анализ проекта с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. «Портрет» потребителя результатов
2. Матрица SWOT
3. График проведения и бюджет
4. Оценка научно-технической эффективности

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН ШБИП	Трубченко Т.Г.	Кандидат экономических наук		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОДМ91	Сангыл-оол А.И.		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа ОДМ91	ФИО Сангыл-оол Аиза Игоревна
-----------------	---------------------------------

Школа	ИЯТШ	Отделение (НОЦ)	НОЦ Б.П. Вейнберга
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	16.04.01 Техническая физика

Тема ВКР:

Вычисление потенциалов межатомного взаимодействия в металлах при наличии ионизационных процессов, вызванных излучением

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

<p>1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения</p>	<p>Объект исследования: изменение межатомного взаимодействия в металлах при ионизации и возбуждении электронной подсистемы. Методика: метод псевдопотенциала. Место проведения исследований: НОЦ Б.П. Вейнберга, аудитория 333, 11 корпус ТПУ. Рабочая зона: работа с ЭВМ. Область применения: молекулярно-динамическое моделирование радиационных процессов в металлах и сплавах</p>
---	---

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

<p>1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:</p> <ul style="list-style-type: none"> – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны. 	<p>-ГОСТ 12.1.029-80 Система стандартов безопасности труда (ССБТ); -СанПиН 2.2.4.548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений; -07.11.2016 г. СП 52.13330 «СНиП 23-05-95 Естественное и искусственное освещение»; - ГОСТ 12.1.038-82 ССБТ «Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Электробезопасность».</p>
<p>2. Производственная безопасность:</p> <p>2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов</p> <p>2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия</p>	<p>Вредные факторы: -Отклонение показателей микроклимата; -Недостаточная освещенность рабочей зоны; -Электромагнитное излучение. Опасные факторы: -Повышенное значение напряжения в электрической цепи, замыкание которой может привести к поражению электрическим током.</p>
<p>3. Экологическая безопасность:</p>	<p>Литосфера: - Выброс отработанной оргтехники.</p>
<p>4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:</p>	<p>Возможные ЧС: -возникновение пожара, под которым понимается вышедший из-под контроля процесс горения.</p>

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ООТД ШБИП	Антоневич О.А.	Кандидат биологических наук		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОДМ91	Сангыл-оол Аиза Игоревна		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 120 с., 24 рис., 19 табл., 42 источников, 2 приложения (одно на английском языке).

Ключевые слова: псевдопотенциал, ионный остов, валентные электроны, электроны проводимости, уровень Ферми, локальный и нелокальный член, формфактор.

Объектом исследования является изменение межатомного взаимодействия в металлах при ионизации и возбуждении электронной подсистемы.

Цель работы – изучение взаимодействия заряженных частиц с твердотельными структурами с точки зрения анализа эффектов, остающихся в настоящее время недостаточно изученными, а именно, формы потенциалов межатомного взаимодействия металлов при ионизации атомов и возбуждении электронов проводимости в области треков быстрых заряженных частиц и в зоне релаксации возбужденных состояний.

На основе псевдопотенциального подхода проанализировано поведение потенциалов межатомного взаимодействия в алюминии в условиях возбуждения электронной подсистемы. Локальное увеличение концентрации электронов проводимости вызывает «размягчение» кристаллической решетки, когда равновесной становится конфигурация с меньшим межатомным расстоянием. Рассчитаны потенциалы межатомного взаимодействия для этого случая.

Область применения: полученные в работе потенциалы межатомного взаимодействия могут быть использованы для молекулярно-динамического моделирования радиационных процессов в металлах и сплавах.

Оглавление

Введение.....	12
1 Понятие о псевдопотенциале.....	15
1.1 Основные положения метода псевдопотенциала	22
1.2 Получение констант псевдопотенциала на базе данных по спектроскопии.....	35
2 Влияние ионизирующего излучения на межатомное взаимодействие в металлах.....	39
2.1 Потенциалы межатомного взаимодействия в алюминии для различных зарядовых состояний.....	42
2.2 Изменение межатомных сил при возбуждении электронной подсистемы.....	50
3 Обсуждение результатов	60
4 Финансовый менеджмент, ресурсосбережение и ресурсоэффективность	62
4.1 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	63
4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования	63
4.2 SWOT-анализ.....	64
4.3 Планирование научно-исследовательских работ	66
4.3.1 Структура работ в рамках научного исследования	66
4.3.2 Определение трудоемкости выполнения работ	67
4.3.3 Разработка графика проведения исследования.....	68
4.4 Бюджет научно-технического исследования	71
4.4.1 Расчет материальных затрат	72
4.4.2 Расчет амортизационных отчислений	73
4.5 Основная заработная платы и отчислений во внебюджетные фонды ..	74
4.5.1 Расчет общей себестоимости.....	75
4.6 Оценка научно-технической эффективности исследования	76
5 Социальная ответственность	79

5.1	Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	80
5.1.1	Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя) правовые нормы трудового законодательства	80
5.1.2	Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя	81
5.2	Производственная безопасность	83
5.3	Анализ опасных и вредных производственных факторов.....	84
5.3.1	Производственный шум	85
5.3.2	Повышенное значение напряжения в электрической цепи.....	87
5.3.3	Производственный микроклимат и его влияние на организм человека	89
5.3.4	Производственное освещение	90
5.4	Экологическая безопасность	94
5.5	Безопасность в чрезвычайных ситуациях	94
	Заключение	98
	Список используемой литературы	100
	Приложение А	104
	Приложение В.....	119

Введение

Пучки заряженных частиц и плазма нашли широкое применение в задачах технологической обработки различных материалов и изделий. В настоящее время накоплен большой опыт по структурно-фазовому модифицированию поверхности, её очистке путём распыления или травления, нанесению покрытий, улучшающих физико-химические свойства материалов и во многих других областях.

Непрерывно появляются новые виды оборудования, которые постепенно расширяют наши возможности. В последние десятилетия достигнуты большие успехи в генерации мощных наносекундных пучков, позволивших обеспечить высокую мощность энерговыделения и совершенно новые возможности для радиационных и плазменных технологий. Успех в решении практически любой технологической задачи зависит от того, насколько хорошо мы понимаем механизмы взаимодействия заряженных частиц и плазмы с твёрдым телом. Несмотря на большие достижения в этой области, есть много вопросов, которые нуждаются в более детальной проработке.

Например, слабо изученной, но в то же время весьма важной в научном плане, является задача, связанная с поведением металлических структур в условиях воздействия излучения большой мощности. Здесь происходят, в частности, такие явления, как изменение межатомных потенциалов при ионизации ионных остовов и возбуждении свободного электронного газа. Наличие в металле двух взаимосвязанных подсистем - ионной и электронной - приводит к тому, что последовательное рассмотрение процессов диссипации энергии весьма сложно так как взаимодействие плазмы и пучков заряженных частиц с ионной и электронной подсистемами происходит по различным законам. Кроме того, в процессе взаимодействия осуществляется перекачка энергии от одной подсистемы к другой. В этой связи далеко не всегда энергия, теряемая частицей в какой-либо области вещества, трансформируется, а тепловую в той же области, что также усложняет задачу.

Прямое экспериментальное исследование изменения формы потенциалов межатомного взаимодействия при ионизации и возбуждении электронов проводимости не представляется возможным в силу высокой скорости релаксации и микроскопических размеров зоны существования этих состояний. Возбужденные состояния электронов могут передаваться на значительные расстояния, приводя к изменению формы потенциалов межатомных взаимодействий через изменение экранирующих свойств среды. Усиление экранирования может уменьшать равновесное расстояние между атомами в металле, что проявится в снижении порога смещения атомов из положения равновесия, изменении упругих характеристик среды, усилении диффузионных процессов, отразится на развитии каскадов атомных столкновений. Для этого необходимо знать, как влияет возбуждение электронной подсистемы на межатомное взаимодействие.

Ионизация, напротив, может вызвать уменьшение глубины потенциальной ямы и увеличение равновесного расстояния между атомами, что приведет к распылению поверхности по механизму «кулоновского взрыва», изменению параметров дефектной структуры и т.д. Поэтому надо вычислить потенциалы взаимодействия между ионами различной зарядности.

Указанные выше проблемы определяют **актуальность** темы магистерской диссертации, связанной с исследованием воздействия пучков заряженных частиц на твердотельные структуры.

Таким образом, **целью исследования** является изучение взаимодействия заряженных частиц с твердотельными структурами с точки зрения анализа эффектов, остающихся в настоящее время недостаточно изученными, а именно, формы потенциалов межатомного взаимодействия металлов при ионизации атомов и возбуждении электронов проводимости в области треков быстрых заряженных частиц и в зоне релаксации возбужденных состояний.

Для этого необходимо решить следующие **задачи**:

1. На основе метода псевдопотенциалов разработать методику расчета потенциалов межатомного взаимодействия для металлов в условиях ионизации.

2. Вычислить потенциалы взаимодействия между ионами различной зарядности и при повышении концентрации электронов проводимости.

Объект исследования – изменение межатомного взаимодействия в металлах при ионизации и возбуждении электронной подсистемы, а **предмет исследования** – разработка метода расчёта потенциалов взаимодействия, учитывающего вышеперечисленные эффекты.

Положение, выносимое на защиту:

При ионизации и возбуждении электронов проводимости в металлах существенно изменяется форма потенциалов межатомного взаимодействия, конкретный вид которых можно вычислить методом псевдопотенциалов. Изменение потенциалов межатомного взаимодействия под действием излучения влияет на развитие каскадных процессов и может приводить к распылению поверхности вследствие появления сил отталкивания между атомами.

Научная новизна заключается в следующем:

1. На базе псевдопотенциального подхода с использованием метода квантовых дефектов был разработан новый способ расчета потенциалов межатомного взаимодействия в металлах при наличии ионизированных состояний.

2. Найдены потенциалы взаимодействия для атомов с различной степенью ионизации и в условиях возбуждения свободного электронного газа.

Практическая ценность работы заключается в следующем:

1. На базе разработанного метода расчета потенциалов взаимодействия при наличии ионизированных состояний появляется возможность вычисления их для различных металлов и сплавов.

2. Полученные в работе потенциалы межатомного взаимодействия могут быть использованы для молекулярно-динамического моделирования радиационных процессов в металлах и сплавах.

1 Понятие о псевдопотенциале

Теория псевдопотенциала - новая, развивающаяся область теории металлов. Возник он в процессе изучения зонной структуры твердых тел. Теория псевдопотенциала привел к значительным успехам в расчете свойств реальных металлов.

В связи развитием теории псевдопотенциалов - метода, позволяющего применять принципы квантовой механики к описанию валентных электронов в твердых телах. Естественным следствием этой идеи явилось предположение о том, что конфигурации валентных электронов в твердом теле могут быть определены в первом приближении суперпозиций конфигураций валентных электронов изолированных атомов. Затем можно ввести поправки, учитывающие искажения электронных орбит за счет соседних атомов.

Стандартный метод вычисления орбиты метеороида состоит в том, что сначала вычисляют, какой была бы траектория, если бы действовала только притяжение Солнца, а затем определяют, как искажается эта траектория за короткие промежутки времени планетами (при этом, конечно, учитывается положение планет в данный момент).

В квантовой механике движение электрона задается орбиталью, точно так же движение метеороида определяется орбитой.

Вычисляя вероятностное распределение или плотность заряда для данного электрона, удобнее рассматривать электрон как суперпозицию волн, а не как частицу.

Так как амплитуда электронной волны зависит от выбранной точки пространства, то математическое выражение, характеризующее амплитуду электронной волны в пространстве, называется волной функцией электрона.

Волновая функция - это абстрактное математическое выражение, ее нельзя непосредственно измерить. Но некоторые свойства, например, плотность заряда, могут быть вычислены из волновой функции и изучены эмпирически. Алгебраическое сложение амплитуд волн называется интерференцией. Если две

волновые функции взаимно усиливаются, то получается конструктивная интерференция, если они подавляют друг друга, то имеет место деструктивная интерференция.

Электронная волновая функция – это стационарная, устойчивая интерференционная картина, которая создается данной совокупностью атомов в результате всех процессов рассеяния, отражения и прохождения электронной волны.

Волновая функция зависит также от энергии электрона: грубо говоря, чем больше его энергия, тем больше число осцилляций в единицу времени.

Решениями волнового уравнения, описывающего движение электронов в твердом теле, могут быть стоячие волны, т.е. волновые картины, неизменные во времени. Основные свойства твердого тела можно предсказать, исходя из образующейся стоячей волны.

Хотя длина связей в разных веществах примерно одинакова, все же довольно малые ее изменения могут явиться причиной значительных различий в химической структуре.

Внутренние электроны настолько крепко связаны с ядром, что их можно рассматривать, как часть «замороженного» атомного остова.

У.К. Херринг обнаружил, что волновая функция валентного электрона должна иметь на один узел, или нулевое значение, больше, чем волновая функция внешнего электрона атомного остова. Дополнительный узел расположен вблизи области, в которой волновая функция внешнего электрона остова достигает своего максимального значения. Другими словами, амплитуда волновой функции валентного электрона приблизительно равна нулю на поверхности остова, и поэтому квадрат амплитуды, т.е. вероятность нахождения электрона в данной области, также приблизительно равен нулю. Следовательно, валентный электрон избегает поверхности атомного остова.

А как изменение волновой функции валентного электрона внутри атомного остова влияет на энергетическое состояние этого электрона? Ответ на этот вопрос основывается на важной идее, выдвинутой Херрингом.

Исходя из своих численных расчетов следует, что дополнительная осцилляция волновой функции валентного электрона, связанная с добавочным узлом, приводит к появлению у валентного электрона добавочной кинетической энергии в те периоды времени, когда он находится внутри атомного остова. Он установил, что эта добавочная кинетическая энергия (которая всегда положительна) почти в точности компенсируется большой отрицательной потенциальной энергией, приобретаемой электроном при приближении к ядру, когда он попадает в область остова. Следовательно, размер остова слабо влияет на энергию валентного электрона вне остова, так как полная энергия электрона внутри остова всегда приблизительно равна нулю.

С 1957 по 1966 г. интернациональная группа ученых, занимающихся теоретической физикой твердого тела, развила новые методы, которые включали в себя идеи Херринга о компенсации энергии валентного электрона, но обобщили многие трудности теоретического и вычислительного плана. Эти методы составили теорию псевдопотенциалов.

К 1970 г. теория псевдопотенциалов завоевала почти всеобщее признание и сегодня она является практически единственной квантовой теорией строения твердых тел.

Их вычислительные методы были нацелены на то чтобы непосредственно оперировать с волновыми функциями валентных электронов, в то же время систематически и последовательно отбрасывая атомные остовы. Эти ученые поняли, что выводы Херринга о компенсации энергии в области остова атома можно использовать лучшим образом, если их принять во внимание с самого начала, а не применять последовательно при вычислении волновых функций электронов атомного остова. Новый метод рассматривает движение валентного электрона под действием «атома», называемого псевдоатомом (рис.1), который обладает положительным зарядом, небольшим по сравнению с зарядом ядра.

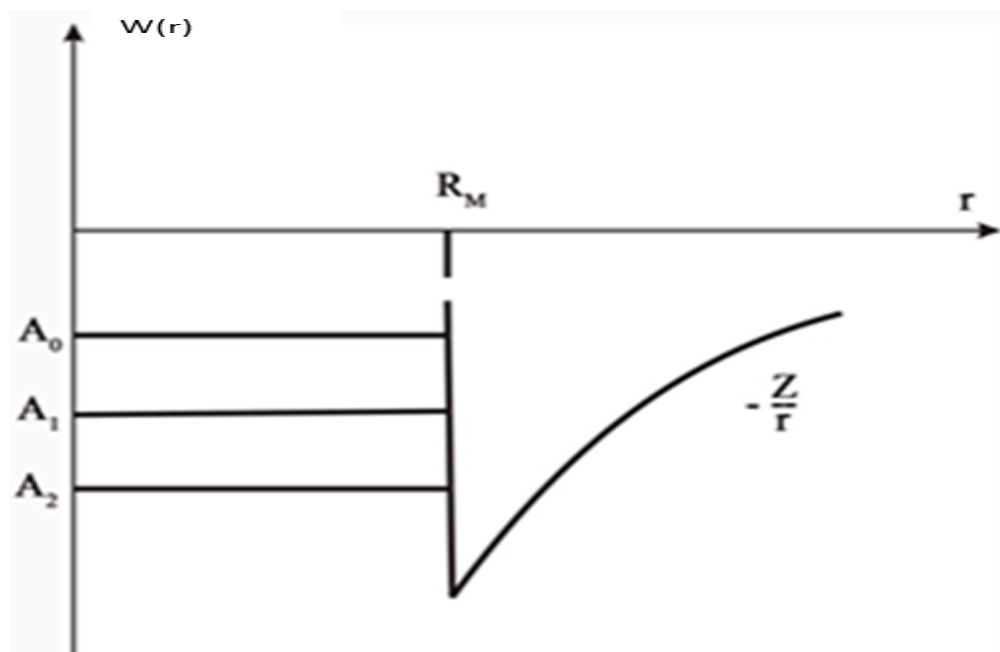


Рисунок 1.1 – Псевдоатом

На рис. 1.1 показаны энергетические уровни электронов (A_0 , A_1 , A_2) по шкале энергии $W(r)$ и радиуса r , в этой потенциальной яме ионного остова. R_M – модельный радиус. Он разбивается на две части: одна определяется взаимодействием электронов с «голым ионом», а вторая часть добавляется с целью ввести поправку на отталкивание валентного электрона внутренними оболочками. Внутри некоторой сферы, радиуса R_M , потенциал постоянен, а затем при $r > R_M$ является чисто кулоновским $-\frac{Z}{r}$.

С математической точки зрения, особенно при работе с электронной вычислительной машиной (ЭВМ), удобно определять волновую функцию электрона, рассматривая изменение импульса электронной волны при рассеянии ее псевдоатомом. Тем не менее, в волновой механике импульс волны определяется направлением распространения волны и волновым числом, т.е. числом колебаний, приходящимся на единицу длины.

На практике рассеяние электрона описывается через рассеяние каждой из составляющих его волн, или фурье-компонент. Согласно теореме, впервые доказанной французским математиком Ж.Б. Фурье, почти любая периодическая функция задается суперпозицией простых синусоидальных и конусоидальных

волн с различными амплитудами и частотами, интерферирующих друг с другом. И наоборот, волну сложной формы можно разложить на синусоидальные и конусоидальные компоненты. Затем с ними можно выполнить математические операции, и из вновь образованных компонент можно составить новую волну.

Физики, изучающие квантовую теорию, при решении волнового уравнения теперь используют величину, являющуюся мерой степени рассеяния отдельной фурье-компоненты волны валентного электрона одним атомным остовом. Эта величина называется псевдопотенциалом электрона.

С помощью фурье-анализа можно создать сколь угодно точное приближение формы волны путем наложение синусоидальных и конусоидальных волн с определенными амплитудами и частотами.

В теории псевдопотенциалов электронные волны представляются их фурье-компонентами (синусоидальными и конусоидальными волнами) из-за простоты, с которой можно оперировать фурье-разложениями волн при работе на ЭВМ. На практике для описания электронной волны использовались от 4 до 1000 синусоидальных и конусоидальных волн.

Когда валентные электроны заключены в конечном объеме, как, например, в твердых телах, можно вычислить их среднюю плотность и, следовательно, объем пространства, приходящийся в среднем на один электрон. Поэтому, исходя из принципа неопределенности, можно оценить неопределенность в задании импульса любого электрона в твердом теле: величина импульса ограничена с одной стороны нулем, а с другой – максимальным значением, известным, как импульс Ферми (названным по имени Энрико Ферми).

Поэтому, когда электроны заключены в некотором заданном объеме, их импульсы должны быть распределены между всеми возможными дискретными состояниями от низшего, или основного, состояния до состояния, соответствующего импульсу Ферми.

Псевдопотенциал можно понимать, как общую рассеивающую способность атома в кристалле.

Псевдопотенциалом определяется эффективность, с которой атом преобразует импульс отдельной фурье-компоненты электронной волны в некоторый заданный конечный импульс. Импульс волны в квантовой механике задается направлением ее распространения и числом осцилляций волны, приходящихся на единицу длины.

Действительно, оказывается, что рассеивающая способность отдельного псевдоатома вовсе не должна зависеть от начального и конечного направления распространения волны. Вместо этого, она прежде всего зависит от разности углов между этими направлениями.

Какова связь между изменением импульса электронной волны и рассеивающей способностью псевдоатома внутри атомного остова? Из-за принципа Паули валентные электроны не могут находиться в энергетических состояниях, занятых электронами остова. Таким образом, волновая функция валентного электрона осциллирует в области остова с большей частотой, что указывает на возрастание импульса электрона. Но с другой стороны энергия валентного электрона, находящегося внутри остова, приблизительно равна нулю. Физически это эквивалентно предположению, что как бы сильно ни изменялась падающая волна в области остова, амплитуда рассеянной волны вне остова равняется нулю: волна валентного электрона слабо рассеивается в результате взаимодействия с атомным остовом.

Рассеяние электронных волн в кристалле чрезвычайно чувствительно к углу между падающей и рассеянной волнами. Как мы отмечали выше, атомы, лежащие в одной плоскости, рассеивают падающую волну подобно полупрозрачному зеркалу.

Псевдопотенциалы, или рассеивающие способности, соответствующие критическим рассеяниям, могут быть выражены как разности электронных энергий. Таким образом, значения псевдопотенциала экспериментально определяются для всех критических рассеяний, для которых изменение импульса меньше или приблизительно равно удвоенному импульсу Ферми. После этого можно вычислить волновые функции валентных электронов кристалла.

Причина различий между рассеивающей способностью в твердом теле заключается в основном в перераспределении валентного заряда, происходящем, когда атомы связываются вместе в твердое тело.

Если суммарное рассеяние достаточно велико, то атомы вещества образуют ковалентную связь. В углероде, кремнии и германии псевдопотенциалы, положительны, и, поэтому, суммарная величина рассеяния достаточно большая для образования ковалентной связи.

Диапазон свойств веществ, описываемых на языке псевдопотенциалов, к настоящему времени стал столь широким, что этот язык, вероятно, единственный, который подходит для квантовомеханического описания поведения электронов в веществе.

Сейчас псевдопотенциалы получены для большинства элементов периодической таблицы. Они одинаково хорошо описывают химическую связь в сплавах и в твердых бинарных соединениях. В таком соединении атомы различных элементов притягивают валентные электроны с различной силой, и поэтому зарядовая плотность валентных электронов больше вблизи атомов одного из элементов. В этом случае связь образуется частично за счет электростатического притяжения между противоположно заряженными ионами. Остальная энергия связи по своей природе может быть обусловлена или металлической, или ковалентной связями.

Степень ионизации химической связи в кристалле может быть выражена через разности псевдопотенциалов двух атомов, вычисленные при определенных критических изменениях импульса, вызванных рассеянием на плоскостях решетки. (Для проверки данного положения можно рассмотреть, как образуется связь между двумя атомами одного и того же элемента. В этом случае легко видеть, что, когда разность псевдопотенциалов двух атомов равна нулю, степень ионизации связи также равняется нулю: сдвиг валентных электронов невозможен.) Сила ковалентной или металлической связи может быть выражена через сумму псевдопотенциалов двух атомов.

Вычисления волновых функций электронов в частично ионных, частично ковалентных телах через псевдопотенциалы показывают, что максимальная плотность заряда валентных электронов расположена вдоль направления связи между двумя атомами, а не вблизи одного из них.

1.1 Основные положения метода псевдопотенциала

Задача изложить основные положения метода, рассмотреть различные факторы, влияющие на точность вычислений, и только затем перейти к расчетам потенциалов взаимодействия в металлах.

Существенная особенность формализма псевдопотенциала, в его построении не предполагается наличия какой-либо симметрии в системе. Метод модельного псевдопотенциала позволяет рассматривать ион как черный ящик, а все внимание уделяется тому, чтобы он правильно воспроизводил рассеивающую способность истинного потенциала.

Энергию зонной структуры можно представить в пространстве через сферически симметрическую функцию, описывающую взаимодействие двух ионов. Электростатическая энергия прямого межионного взаимодействия обусловлена потенциалом кулоновского отталкивания. Характеристическая функция определяется через формфактор псевдопотенциала и функцию экранирования. Следует подчеркнуть, что в металлах энергия связи определяется двумя составляющими: энергией электронного газа и зависящей от энергии структуры. Если мы знаем эффективный потенциал межионного взаимодействия, то просуммировав его по узлам решетки в случае кристалла или выполнив соответствующее интегрирование получим только часть полной энергии системы. В металле еще необходимо вычислить энергию, которая не зависит от структуры и определяется кинетической, обменной и корреляционной энергиями электронов. Металл можно рассматривать как систему, состоящую из ионов и электронов.

Отмеченная особенность металлического состояния и должна учитываться при построении уравнения состояния.

Формфактор псевдопотенциала «голового иона», описывает электрон-ионное взаимодействие.

Полную характеристическую функцию рассматриваемой системы с квантово-механической точки зрения дает решение уравнения Шредингера.

Как это впервые заметил Ферми, нет необходимости в изучении всей системы, когда нужна информация лишь о ее некоторой части, достаточно лишь заменить истинный потенциал на «эффективный» потенциал, чтобы результаты были близки к истинным. Эта идея лежит в основе метода псевдопотенциала.

Ионную подсистему для большинства металлов, за исключением, может быть, металлического водорода, можно рассматривать классически. Для электронной же подсистемы необходимо квантово-механическое описание. Рассматривать движение электронов в поле фиксированных по положению ядер. Тогда потенциал включает лишь взаимодействие электронов с ядрами и взаимодействие электронов между собой.

Число электронов в металле очень велико (10^{23}). Таким образом, невозможно решить уравнение для стольких переменных. Во многих случаях можно рассмотреть поведение одного электрона, движущегося в поле, созданном ядрами, и среднего поля, созданного всеми другими электронами. Потенциал этого среднего поля должен быть самосогласованным, поскольку он зависит от электронных состояний, и они, в свою очередь, определяются потенциалом.

Далее представляется возможным разделить все электронные состояния в металле на локализованные состояния ионного остова и состояния зоны проводимости или коллективизированные.

Истинная волновая функция электрона проводимости в области внутренних оболочек быстро осциллирует, что является следствием принципа Паули, который можно сформулировать как требование ортогональности волновых функций зоны проводимости волновым функциям остова.

Из-за сильных осцилляций в области остова электроны имеют большую кинетическую энергию, которая в значительной степени компенсирует сильный притягивающий потенциал ядра. По этой же причине вероятность пребывания электрона проводимости в этой области мала. Эти соображения позволяют предполагать, что эффективный потенциал взаимодействия валентных электронов с ионом оказывается небольшим. И к истинному потенциалу притяжения необходимо добавить некоторый отталкивательный ион-электронный потенциал.

Модель свободных электронов позволяет описывать некоторые экспериментально наблюдаемые свойства (теплопроводность, электропроводность, магнитная восприимчивость и др.). Эксперименты по определению ферми-поверхности в щелочных и поливалентных металлах дали прямое подтверждение того, что влияние потенциала решетки на электроны проводимости мало, а метод псевдопотенциала позволил дать ясную физическую трактовку этого явления. Слабость псевдопотенциала позволяет решать уравнение Шредингера с использованием теории возмущений низких порядков. В отличие от истинного потенциала он оказывается в общем случае нелокальным оператором и зависит от нескольких переменных.

Если действие оператора сводится к умножению исходной функции на другую функцию того же аргумента, то такой оператор называют локальным. Примером локального потенциала является модельный потенциал пустого остова.

Нелокальный оператор зависит от двух или более переменных. В методе псевдопотенциала часто имеют дело с разложением функции по собственным функциям момента количества движения. Для этого вводится так называемый проекционный оператор. Этот оператор не локален. Так мы увидим, что модельный потенциал Хейне-Абаренкова-Анималу внутри области модельного радиуса описывается нелокальным членом, а вне этой области обычным локальным кулоновским потенциалом.

Нелокальность псевдопотенциала влечет за собой определенные вычислительные трудности, поскольку необходимо определить его матричный элемент, зависящий от нескольких параметров. Однако при рассмотрении

электронных свойств металлов, когда нас интересуют матричные элементы псевдопотенциала, связывающие состояния, лежащие вблизи поверхности Ферми, часто используются так называемым приближением сферы Ферми.

Псевдопотенциальный метод позволяет, в общем, вычислить псевдопотенциал «голого» иона. Однако каждый ион окружен коллективизированными электронами; средняя плотность этой среды определяется количеством внешних валентных электронов в атоме. Эта плотность неоднородна в пространстве вокруг ионов и перераспределяется таким образом, что она каким-то образом защищает ионные потенциалы.

Таким образом, можно полагать, что в модели металла, состоящей из ионов и газа коллективизированных валентных электронов, последние «чувствуют» полный потенциал ионной подсистемы плюс экранирующий потенциал, создаваемый самими электронами. В случае локального потенциала учет экранирования осуществляется просто делением матричного элемента потенциала «голого» иона на так называемую диэлектрическую проницаемость.

Таким образом, можно сразу отметить, что экранируются главным образом длинноволновые компоненты матричного элемента. Экранирование с помощью диэлектрической проницаемости приводит к появлению осцилляций в псевдопотенциале и эффективном потенциале межионного взаимодействия. Физически появление осцилляций в экранированном потенциале можно объяснить наличием резкой границы сферы Ферми. Электроны скапливаются в области положительного заряда иона, и из-за наличия резкой границы электронных длин волн появляются эффекты интерференции. В результате вокруг иона образуются не только области повышенной концентрации заряда, но и области пониженной концентрации, из которых электроны выталкиваются. Эти осцилляции заряда часто называют фриделевскими. Таким образом, потенциалы при учете экранирования становятся короткодействующими.

До сих пор мы рассматривали экранирование в приближении Хартри, т.е. полагали, что на электрон действует потенциал иона плюс самосогласованный потенциал электронного газа. При этом не учитывали обменное и корреляционное

взаимодействие между электронами проводимости. В работе Хаббарда предложено учитывать эффекты обмена и корреляции с помощью модифицированной функции диэлектрической проницаемости Хартри. Следует сразу отметить, что эти приближения учитывают только эффекты обмена. Так, в работе Сингви, Тоси, Лэнда и Шолэндера учитываются как обменные, так и корреляционные эффекты. Таким образом, можно предполагать, что при вычислении свойств, зависящих от формфактора, игнорировать влияние эффектов обмена и корреляции нельзя.

Метод псевдопотенциала, естественно, был развит первоначально для простых металлов. Начнем с изложения априорного метода расчета псевдопотенциалов. Этот метод в принципе дает возможность определить свойства реальных металлов, не прибегая к какой-либо экспериментальной информации. Для возможности построения априорного потенциала, по-видимому, главное значение имеет приближение, связанное с разделением всех электронных состояний на сильно локализованные внутренние состояния и состояния зоны проводимости. Весь формализм построения априорного потенциала подробно описан Харрисоном. Для нахождения формфакторов априорного потенциала складываются: 1) потенциала валентного заряда, создаваемого частью полного заряда ядра, не компенсируемой электронами внутренних оболочек; 2) кулоновского потенциала, создаваемого остатком заряда ядра и электронами остова; 3) потенциала обменного взаимодействия между электронами остова и внешними электронами; 4) потенциала электронов проводимости; 5) потенциала экранирования. Единственными исходными данными, необходимыми для численного определения формфакторов априорного потенциала, являются плотность и получаемые из расчетов в приближении Хартри-Фока для изолированного иона радиальные волновые функции и энергетические параметры. Для более глубокого понимания природы межчастичного взаимодействия в металлах априорный подход несомненно важен и полезен.

Потенциал точечного иона предложен Харрисоном. Он разделен на две части: одна определяется взаимодействием электрона с «голым» ионом и

описывается как кулоновское взаимодействие, а вторая часть добавляется для введения коррекции отталкивания валентного электрона внутренними слоями.

По сущности потенциал Хейне-Абаренкова-Анималу (Х-А-А) близок к априорному потенциалу. Параметры модельного потенциала Х-А-А вычисляются с помощью метода квантовых дефектов (МКД).

Такой подход позволяет избежать определения в явном виде потенциала ионного остова, что необходимо делать в методе априорного потенциала, поскольку параметры модельного потенциала находят, используя сведения об энергетических уровнях свободного электрона в поле положительного иона. Сущность метода квантовых дефектов состоит в использовании сферической симметрии ионов простых металлов и предположении, что потенциал иона существенно не отличается от кулоновского внутри сферы.

Согласно принципу Паули, никакие два электрона не могут иметь одновременно одинаковые все четыре квантовых числа, т.е., например, в атоме внешние электроны не могут попасть во внутренние, полностью заполненные оболочки инертного газа.

Так, во втором малом периоде таблицы Менделеева у всех веществ заполненной является оболочка гелия. Следовательно, на внешние электроны в этих атомах будут действовать сферически симметричные потенциалы ионов. В МКД собственное значение энергии представляется через эффективное квантовое число. Квантовый дефект позволяет учесть различие между модельным потенциалом и кулоновским. МКД применим в том случае, если потенциал изолированного иона, действующий на электрон, несущественно отличается от кулоновского потенциала.

Новый квантовый дефект характеризует сдвиг от нуля до данного набора квантовых чисел, описывающих состояние электрона в сферически симметричном поле положительного иона. Очевидно МКД имеет отношение только к кулоновской части потенциала.

В методе псевдопотенциалов эффективное парное взаимодействие представляется в виде [6]:

$$\varphi(r) = \varphi_{\text{пр}}(r) + \varphi_{\text{косв}}(r), \quad (1.1.1)$$

где $\varphi_{\text{пр}}(r)$ - потенциал прямого кулоновского взаимодействия между ионами, $\varphi_{\text{косв}}(r)$ - потенциал косвенного взаимодействия, которое осуществляется через электроны проводимости. Эти величины можно записать следующим образом:

$$\varphi_{\text{пр}}(r) = \frac{z_i z_j e^2}{r}, \quad (1.1.2)$$

$$\varphi_{\text{косв}}(r) = \frac{\Omega}{\pi^2} \int_0^{\infty} F(q) \frac{\sin(qr)}{qr} q^2 dq, \quad (1.1.3)$$

где $F(q) = \frac{\Omega q^2}{8\pi} \frac{1-\varepsilon(q)}{\varepsilon^*(q)} \omega_i(q)\omega_j(q)$ - характеристическая функция зонной структуры;

q - волновой вектор; z_i, z_j - заряды взаимодействующих ионов с индексами i, j ; $\omega_i(q), \omega_j(q)$ - неэкранированные формфакторы псевдопотенциала соответствующих компонентов; Ω - атомный объем; $\varepsilon(q)$ - диэлектрическая проницаемость [2]. Характеристическая функция зонной структуры, которая описывает экранирование. Первый формфактор это некая потенциальная яма, она в обратном пространстве - это пространство импульсов.

Здесь $\varepsilon(q)$ - диэлектрическая проницаемость [1]:

$$\varepsilon(q) = 1 + \frac{m_e e^2}{4\pi k_F h \eta^2} \left(\frac{1 - \eta^2}{2\eta} \ln \left| \frac{1 + \eta}{1 - \eta} \right| + 1 \right), \quad (1.1.4)$$

где $\eta = q/2k_F$, $k_F = (3\pi^2 N_e)^{1/3}$ - импульс электрона на поверхности Ферми [8]; N_e - концентрация свободных электронов; m_e - масса электрона; h - постоянная Планка; $\varepsilon^*(q) = 1 + [\varepsilon(q) - 1][1 - f(q)]$ - диэлектрическая проницаемость с учетом эффекта обмена и корреляции между электронами проводимости; $f(q)$ - функция, учитывающая многоэлектронные эффекты, для которой в настоящее время имеется большое количество приближений, полученных различными авторами. Нами в расчетах потенциалов использовалась, в частности, аппроксимация Сингви [3]:

$$f(q) = A \cdot \left\{ 1 - \exp \left[-B \cdot \left(\frac{q}{k_F} \right)^2 \right] \right\}, \quad (1.1.5)$$

где A' и B' - параметры, зависящие от концентрации свободных электронов и определяемые интерполяцией из табличных данных (табл.1.1). Это неудобно для изучения зависимости формы потенциалов взаимодействия от электронной плотности, которая может меняться под действием излучения. Поэтому в расчетах применялась более удобная в этом отношении аппроксимация Клейнмана [4]:

$$f(q) = \frac{\left[\frac{q^2}{(q^2 + \xi k_F^2)} + \frac{q^2}{\xi k_F^2} \right]}{4}. \quad (1.1.6)$$

Здесь

$$\xi = \frac{2}{\left[1 + 0.153 \left(\frac{ar_s}{\pi} \right) \right]}, \quad (1.1.7)$$

$$a = \left(\frac{4}{9\pi} \right)^{1/3}, \quad r_s = \left(\frac{3}{4\pi N_e} \right)^{1/3}. \quad (1.1.8)$$

Формула Клейнмана учитывает только обменное взаимодействие между электронами проводимости, а выражение Сингви включает в себя и корреляционные эффекты.

Выражение Сингви для $f(q)$ лучше удовлетворяет правилу сумм при вычислении парных корреляционных функций и сжимаемости электронной подсистемы. Суть заключается в использовании коррекции для локального поля, которая зависит от функций корреляции пар электронной системы и приводит к необходимости самосогласованного решения системы уравнений для определения совместной реализации функции $\epsilon(q)$ и функции корреляции пар электрона.

Параметр r_s характеризует радиус сферы приходящийся на 1 электрон. Для каждого металла необходимо сначала определить r_s , а затем уже параметры A и B путем интерполяции.

Параметры A и B табулированы как функции r_s для $1 \leq r_s \leq 6$ и приведены ниже.

Таблица 1.1.1 - Параметры A и B в зависимости от r_s

r_s	1	2	3	4	5	6
A	0.70853	0.85509	0.97805	1.08482	1.17987	1.26569
B	0.36940	0.33117	0.30440	0.28430	0.36850	0.25561

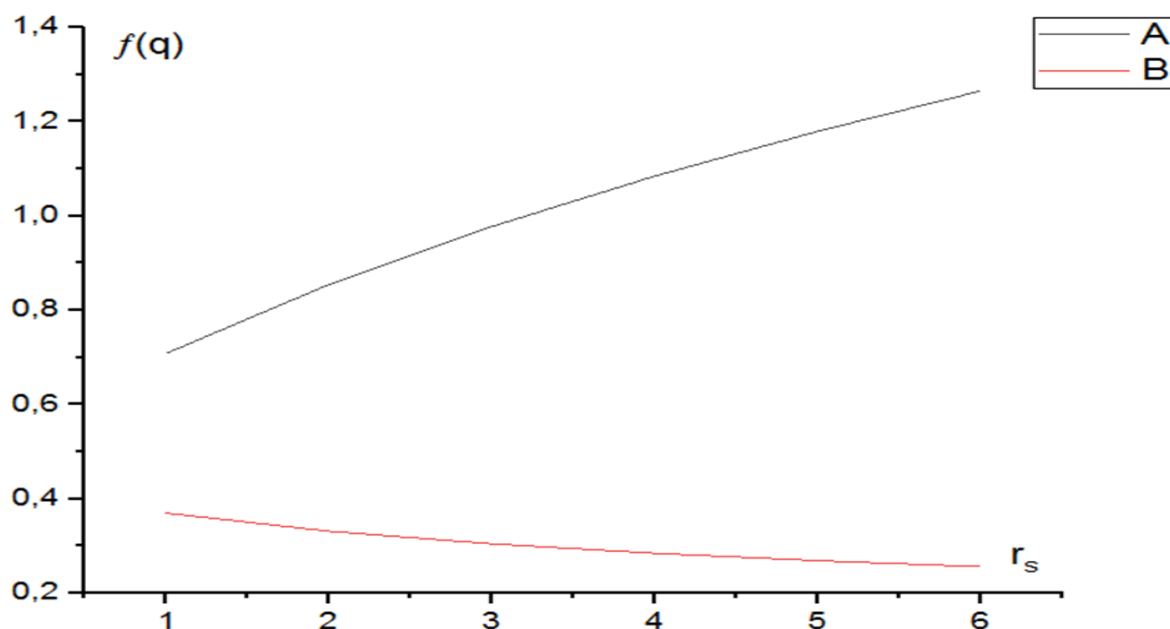


Рисунок 1.1.1 – Зависимость $f(q)$ от r_s : A и B - параметры, зависящие от концентрации свободных электронов

Параметры концентрации свободных электронов и плотности электронов проводимости для алюминия:

r_s - в нормальном состоянии; r_s^* - 20 % превышение импульса электронов проводимости над фермиевскими.

Таблица 1.1.2 - Параметры A и B в зависимости от r_s для алюминия

Параметры для алюминия		A	B
r_s	2.07	0.86357	0.329323
r_s^*	1.95	0.847762	0.3330815

Такая модификация позволяет точно удовлетворить правилу сумм для сжимаемости, что свидетельствует о достоверности предлагаемого приближения для $f(q)$.

Важной величиной, применяемой в расчетах различных свойств металлов, является формфактор псевдопотенциала $\omega(q)$. Если известны волновые функции ионного остова, он может быть найден при решении уравнения Шредингера [2]. Однако, этот подход сопряжен с большими трудностями расчетного характера, в результате чего на практике широко используются так называемые модельные псевдопотенциалы, строящиеся на основе некоторых физических закономерностей; причем входящие в них подгоночные параметры выбираются таким образом, чтобы результаты расчета хорошо известных физических свойств совпадали с экспериментальными данными. Этими свойствами являются параметры поверхности Ферми в металлах, частоты фононных спектров, модули упругости и т.д.

В работе [5] предложен модельный псевдопотенциал, для которого информацию о параметрах потенциала и волновых функциях электронов внутренних оболочек получают из спектроскопических данных об энергетических уровнях свободных ионов и атомов. Сейчас он является одним из наиболее широко распространенных. Такой псевдопотенциал включает в себя экспериментальные поправки, учитывающие обменное взаимодействие, а также корреляции между электронами проводимости и внутренних оболочек.

Идея, на которой основано введение модельных потенциалов, заключается в утверждении, что ион можно рассматривать как некий «черный ящик», устроенный так, чтобы правильно воспроизводить волновую функцию валентного электрона в области вне ионного радиуса R_c . На практике «черный ящик» реализуется путем замены глубокого ионного (остовного) потенциала слабым модельным потенциалом. Как следует из теории псевдопотенциала, для электронов с различными орбитальными моментами l необходимо вводить разные потенциалы, кроме того, потенциал оказывается зависящим и от энергии электрона E . Такой потенциал при подстановке в уравнение Шредингера дает

правильное значение энергии валентного электрона E , а волновые функции совпадают с истинными. Существенным моментом для расчета металла при таком подходе является возможность трактовать слабый модельный потенциал как возмущение.

Модельный псевдопотенциал Хейне – Абаренкова – Анималу, характеризующий энергию взаимодействия электрона проводимости с ионным остовом, записывается в форме:

$$W(r) = - \sum_l A_l(E) P_l, \quad r \leq R_M, \quad (1.1.9)$$

$$W(r) = -\frac{z}{r}, \quad r > R_M, \quad (1.1.10)$$

где P_l - проекционный оператор, выделяющий из волновой функции, на которую он действует, компонент с орбитальным квантовым числом l ; E - энергия соответствующего состояния; A_l - параметр, характеризующий глубину потенциальной ямы; z - заряд иона; R_M - модельный радиус.

Формфактор псевдопотенциала может либо определяться из «первых принципов», либо аппроксимироваться какой-нибудь достаточно простой функцией (модельный псевдопотенциал). В соответствии с этим практически все работы по псевдопотенциальным расчетам свойств металлов можно разделить на две группы: «первопринципные» – использующие для описания металла лишь данные о свободных ионах и «подгоночные», в которых параметры, входящие в аппроксимирующую формфактор псевдопотенциала функцию, подбираются на основании каких-нибудь хорошо изученных достаточно надежно измеренных свойств металлов. Оказывается, что при учете различных факторов, рассматриваемых последовательно в рамках первого подхода – нелокальности, а также поправок на эффективную массу, «ортогонализационную дырку» и т.д. появляются значительные вычислительные трудности при использовании теории возмущений. Еще большие трудности возникают при изучении свойств, связанных с изменением объема, приходящегося на ион в кристаллической решетке. Кроме того, точность таких расчетов при описании структурных и

атомных свойств, как правило, меньшая, чем аналогичных расчетов с модельными псевдопотенциалами. В связи с этим вряд ли можно надежно использовать такие первопринципные расчеты для описания фазовых переходов, дефектов структуры и других структурно чувствительных явлений [6].

Для описания свойств твердых тел и изучения процесса взаимодействия излучения со средой термин наоборот решетки играет важную роль. С понятием обратной решетки, позволяющим по-новому рассмотреть длину волны излучения, которое работает с серией атомных плоскостей, мы теперь будем работать с первым и последним волновым вектором отраженной волны.

Формфакторы псевдопотенциала находятся через Фурье – преобразование:

$$\omega(\vec{q}) \equiv \langle \vec{k}' | W | \vec{k} \rangle = \frac{1}{\Omega} \int e^{-i\vec{k}'\vec{r}} W(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}} d^3r, \quad (1.1.11)$$

где \vec{k} и \vec{k}' - волновые векторы падающего и рассеянного ионным остовом электрона, а $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$ - вектор передачи импульса.

Степень применимости рассматриваемого метода к расчету потенциалов межатомного взаимодействия исследуемых материалов во многом определяется качеством формфакторов, которые должны быть универсальными, применимыми для широкого круга материалов.

Этим требованием удовлетворяет формфактор Хейне – Абаренкова – Анималу [6], использованный нами в расчете потенциалов межатомного взаимодействия простых металлов. Он имеет вид суммы локального $B(q)$ и нелокального $F = (k, k', q)$ членов. Для незранированного иона его можно представить в виде:

$$\omega(q) = F(k, k', q) + B(q), \quad (1.1.12)$$

где

$$B(q) = -\frac{8\pi A_2}{\Omega q^3} [\sin(qR_M) - qR_M \cos(qR_M)] - \frac{8\pi z}{\Omega q^2} \cos(qR_M) + \\ + \left[\frac{4\pi |E_c|}{\Omega q^3} - \frac{24\pi z a_{eff}}{\Omega q^2 (qR_c)^3} \right] [\sin(qR_c) - qR_c \cos(qR_c)]. \quad (1.1.13)$$

Если $k = k'$, то есть когда $[\vec{q}] \leq 2k_F$:

$$\begin{aligned}
F(k, k', q) = & -4\pi\Omega^{-1}R_M^3(A_0 - A_1)\{[j_0(kR_M)]^2 - [kR_M]^{-1} \cos(kR_M) j_1(kR_M)\} \\
& - 12\pi\Omega^{-1}R_M^3(A_1 - A_2) \left(1 - \frac{q^2}{2k^2}\right) \{[j_1(kR_M)]^2 \\
& - j_0(kR_M)j_1(kR_M)\}. \tag{1.1.14}
\end{aligned}$$

Здесь

$$j_0(x) = x^{-1} \sin x, \tag{1.1.15}$$

$$j_1(x) = x^{-2} \sin x - x^{-1} \cos x, \tag{1.1.16}$$

$$j_2(x) = (3x^{-3} - x^{-1}) \sin x - 3x^{-2} \cos x. \tag{1.1.17}$$

Когда $k \neq k'$, то есть $[\vec{q}] > 2k_F$, нелокальный член равен:

$$\begin{aligned}
F(k, k', q) = & -\frac{8\pi R_M^2(A_0 - A_2)}{\Omega[k^2 - k'^2]} [kj_1(kR_M)j_0(k'R_M) - k'j_1(k'R_M)j_0(kR_M)] - \\
& - \frac{24\pi(A_1 - A_2)R_M k^2 - k'q^2}{\Omega(k^2 - k'^2)} \frac{k^2 - k'q^2}{2kk'} [kj_2(kR_M)j_1(k'R_M) - k'j_2(k'R_M)j_1(kR_M)] \tag{1.1.18}
\end{aligned}$$

Здесь R_c - радиус ионного остова; a_{eff} - изменение заряда электрона, обусловленное проецированием плоской волны на волновые функции остовных состояний; E_c - корреляционная энергия однородного электронного газа в расчете на один электрон.

В работе [6] также приведено выражение для учета экранирования нелокального члена $F(k, k', q)$. При этом формфактор экранированного потенциала определяется следующим образом:

$$\omega_0(q) = \frac{B(q)}{\varepsilon(q)} + F(k, k', q) + I(q), \tag{1.1.19}$$

где $I(q)$ - вклад от экранирования нелокального члена.

Однако, строгого метода определения $I(q)$, а поскольку эта величина мала, то вкладом от нее пренебрегают. При этом используется приближение локального

экранирования, когда экранированный формфактор получают просто делением $\omega(q)$ на функцию $\varepsilon(q)$.

Аналогичный подход позволяет вычислять формфакторы псевдопотенциалов переходных металлов [7].

В связи с тем, что подынтегральное выражение в формуле (1.1.3) имеет очень сложный вид, конкретный потенциал межатомного взаимодействия не может быть получен в аналитической форме. Поэтому вычисления приходится производить численно, взяв в качестве верхнего предела интегрирования величину, равную примерно $40 \dots 50 k_F$. Как показали наши расчеты, это обеспечивает необходимую точность вычислений.

Таким образом, мы изложили методику вычисления парных потенциалов межатомного взаимодействия в металлах, основанную на методе псевдопотенциалов. Для практической реализации данного метода необходимо иметь константы, входящие в выражение для формфактора псевдопотенциала. Обычно они определяются путем подгонки результатов расчета к каким-либо характеристикам вещества. Однако, в нашем случае их целесообразно определять из «первых принципов» на базе данных по спектроскопии.

1.2 Получение констант псевдопотенциала на базе данных по спектроскопии

Энергетические уровни E_{nl} отдельного электрона в поле положительных ионов с электронными оболочками, аналогичными сферически-симметричным электронным оболочкам инертных газов, в частности Na^+ , Mg^{2+} , Al^{3+} , Si^{4+} , P^{5+} , S^{6+} , Cl^{7+} , удовлетворяют соотношению [7]

$$E_{nl} = -\frac{Z^2}{(n - \delta_{nl})^2} + \Delta_{nl}, \quad (1.2.1)$$

где Z – заряд ионного остова; δ_{nl}, Δ_{nl} – квантовые дефекты, характеризующие отклонение атомного потенциала данной конфигурации оболочек инертного газа от кулоновского, обусловленного зарядом $|Ze|$.

Из рис. 1.2.1 следует, что соотношение величины спектроскопических термов рассмотренного атомного ряда от квадрата заряда ионного остова хорошо описывается линейной зависимостью.

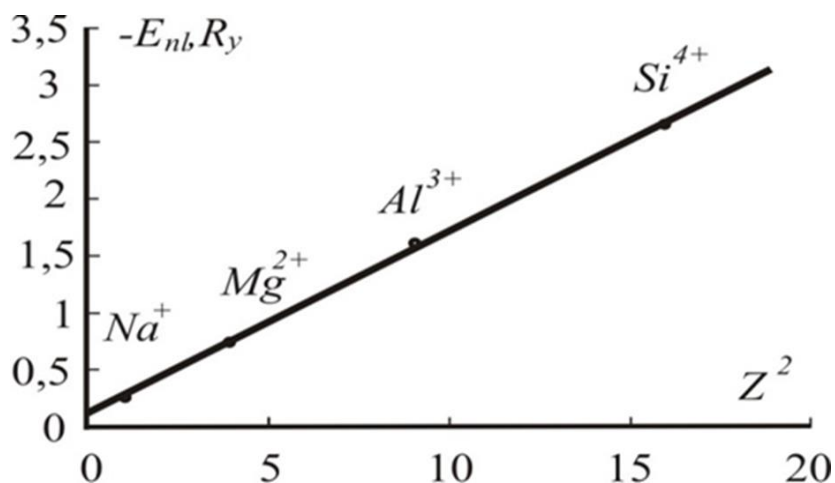


Рисунок 1.2.1 – Зависимость энергетических уровней электронов E_{3p} в поле положительных ионов от квадрата заряда ионного остова

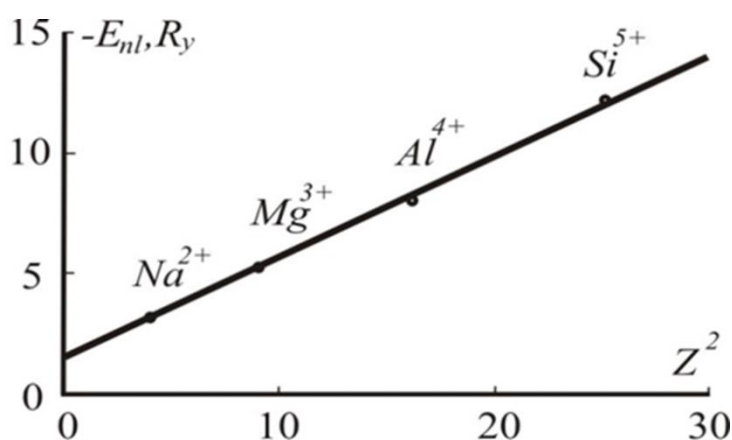


Рисунок 1.2.2 – Зависимость энергетических уровней электронов E_{2p} в поле положительных ионов от квадрата заряда ионного остова

Оказалось, что существуют аналогичные зависимости и для дополнительно ионизированных остовов (рис. 1.2.2). Здесь будет реализован следующий ряд: Na^{2+} , Mg^{3+} , Al^{4+} , Si^{5+} , P^{6+} , S^{7+} , Cl^{8+} .

На основе этого эмпирического закона мы определили параметры формфактора для дополнительно ионизированных остовов, связав их с энергиями $\delta_{nl} = E_{nl} - \Delta_{nl}$ как это было сделано в работе [7] для переходных металлов.

Радиальное волновое уравнение с модельным потенциалом, описывающее движение электрона, запишется в виде

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + V_l \right] \chi(r) = \frac{1}{2} \varepsilon \chi(r) \quad (1.2.2)$$

где $\chi(r)$ – радиальная волновая функция, l – орбитальный момент количества движения. При такой записи ε задается в ридбергах, V_l – в атомных единицах.

Модельный потенциал взаимодействия электрона с ионным остовом имеет вид:

$$V_l = -A_l(\varepsilon) \text{ при } r \leq R_m, \\ -\frac{Z}{r} \text{ при } r > R_m, \quad (1.2.3)$$

где R_m – модельный радиус, близкий радиусу ионного остова, на котором производится сшивка внутреннего и внешнего решения волнового уравнения.

После подстановок $\rho = Zr$ и $\bar{\rho} = r\sqrt{2A_l - |\varepsilon|}$ выражение (1.2.2) запишется в виде:

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \bar{\rho}^2} + \frac{l(l+1)}{\bar{\rho}^2} + 1 \right] \chi = 0 \text{ при } r \leq R_m, \quad (1.2.4)$$

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} \right] \chi + \varepsilon' \chi = 0 \text{ при } r > R_m, \quad (1.2.5)$$

где $\varepsilon' = \varepsilon/Z^2$.

Решениями уравнения (1.2.4) являются сферические функции Бесселя, а уравнение (1.2.5) представляет собой волновое уравнение Кулона, решения которого находились по методике, изложенной в работе [8].

Приравнивая логарифмические производные решений уравнений (1.2.4) и (1.2.5) при $r = R_m$, получим выражение для определения параметров A_l :

$$\frac{xj_{l-1}(x)}{j_l} - l = \frac{{}^0D^l(ZR_m) + \gamma(N, l){}^1D^l(ZR_m)}{{}^0U^l(ZR_m) + \gamma(N, l){}^1U^l(ZR_m)}, \quad (1.2.6)$$

где $x = R_m\sqrt{2A_l - |\varepsilon_{nl}|}$; $j_l(x)$ – сферическая функция Бесселя; ${}^0U^l$, ${}^1U^l$ – соответственно регулярная и иррегулярная часть волновой функции Кулона; $N = n - \delta_{nl}$ – эффективное главное квантовое число; $D^l = \rho\left(\frac{dU^l}{d\rho}\right)$;

$$\gamma(N, l) = \frac{\Gamma(N - l)N^{2l+i}tg\pi(N - l - 1)}{\Gamma(N + l + 1)}; \quad (1.2.7)$$

Γ - гамма-функция [9].

Величины спектроскопических термов ε_{nl} определялись по таблицам [10]. Значения A_l являются функцией энергии $\varepsilon = \varepsilon_{nl}$ при фиксированном l и могут быть точно определены только для тех энергий, которые соответствуют наблюдаемым линиям в спектрах излучения электрона в потенциале остова. Функция $A_l(\varepsilon_{nl})$ при этом выбирается таким образом, чтобы модельный потенциал давал собственные значения, совпадающие с ε_{nl} . Поэтому сначала определяются A_l для стольких значений энергии, сколько существует экспериментальных линий, а затем производится линейная интерполяция или экстраполяция к энергии Ферми [10].

2 Влияние ионизирующего излучения на межатомное взаимодействие в металлах

Актуальность изучения действия радиации на вещество обусловлены расширением работы по воздействию мощных импульсных потоков ионизирующего излучения на различные материалы и изделия. В частности, эта задача актуальна для модификации поверхности твердого тела и задача радиационных испытаний.

В молекулах и твердых телах положительные заряды ядер и отрицательные заряды электронных оболочек уравниваются при нормальных условиях, обеспечивая среднюю электроотраильность и стабильность ионных структур. Под влиянием плазменных потоков и ионизирующего излучения на материалы происходят различные физические явления, которые могут привести к изменениям потенциалов межатомного взаимодействия.

Во время физического распыления падающие частицы вызывают движение атомов узлов решетки, отдавая им часть своей энергии. Первичные смещенные атомы проникают глубоко в материал, производят вторичные дислоцированные атомы и т. д., образуя каскад поляризации (столкновения). Из-за хаотического характера каскадных ударных процессов некоторые атомы получают импульсы в противоположном направлении, если их энергия выше, чем поверхностная связь.

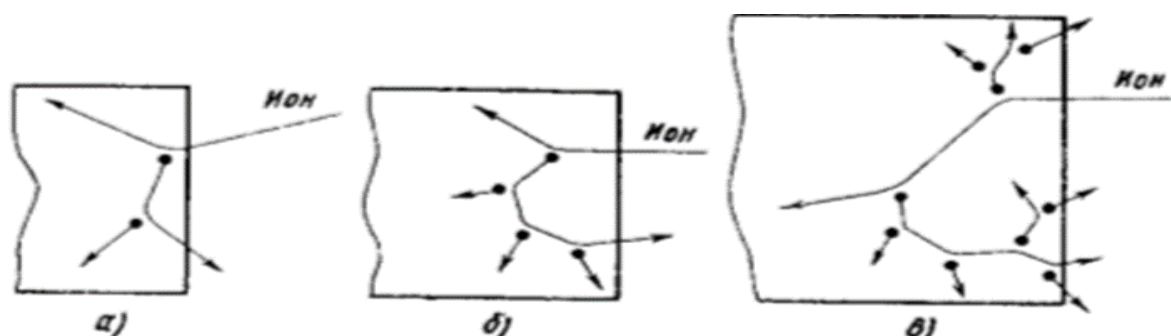


Рисунок 2.1– Схемы столкновений, приводящих к столкновению: а – распыление рикошетом, б – распыление первично выбитого атома отдачи, в – распыление атомов в результате каскада столкновений

Схема «а» показывает механизм распыления рикошетом, когда атом отдачи, получивший энергию от бомбардирующего иона, сталкивается с другим атомом мишени и сразу же вылетает в вакуум. Схема «б» показывает распыление атомов отдачи, т.е. случай, когда атом отдачи, получивший энергию непосредственно от бомбардирующего иона, беспорядочно мигрирует до выхода из мишени, не требуя более энергии. Схема «в» показывает каскад столкновений, рожденный бомбардирующим ионом.

Во время распыления происходит передача кинетической энергии от бомбардирующего иона к атомам твердого тела. Частицы могут покидать поверхность в разных зарядовых состояниях – нейтральном, положительно или отрицательно заряженном. Очевидно, что распыление будет происходить, если энергия бомбардирующего иона превышает некоторое пороговое значение. Для кристаллов, энергия связи в которых составляет приблизительно 10 эВ, значение пороговой энергии примерно равно 25 эВ.

Результатом облучения твердого тела быстрыми частицами может быть образование сильно неупорядоченной области на пути быстро движущейся частицы в кристалле (рис. 2.2), размер и форма которой зависят от энергии, массы и природы быстрой частицы, атомной массы кристалла, его температуры и структуры.

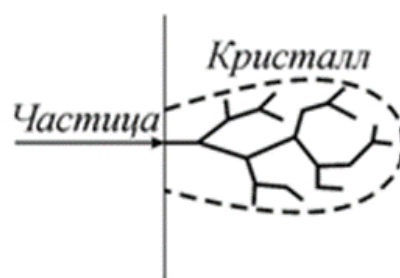


Рисунок 2.2 – Схема образования разупорядоченной области в кристалле (выделенная пунктиром) за счет каскада смещений атомов (сплошные линии)

Этот процесс происходит за очень короткое время $10^{-13} - 10^{-15}$ с. После этого наступает длительный процесс релаксации, по окончании которого приходит в термодинамическое равновесие.

Потенциалы межатомного взаимодействия находят свое применение в молекулярно-динамическом моделировании каскадных процессов и распыления (рис. 2.3).

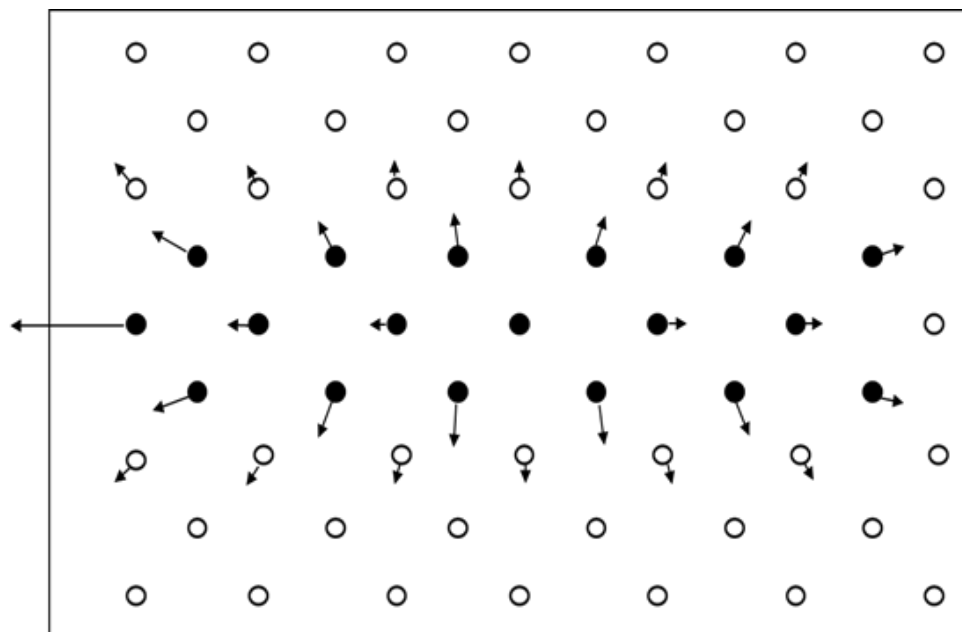


Рисунок 2.3 – Начальные траектории движения ионизированных атомов

Малая энергия необходимая для ионизации и возбуждении электронной подсистемы, это заряженные электроны с энергией 10 МэВ, ионы с энергией 10 МэВ, фотоны с небольшой энергией связи.

Свойства металлов определяются их строением на межатомном и внутриатомном уровнях, фазовой или иной структурой. При нагревании или деформировании металлов и сплавов структура их меняется, следовательно, меняются и свойства.

Ионизирующее излучение взаимодействуя с металлом большую часть энергии затрачивает на ионизацию и возбуждение электронной подсистемы, что приводит к некоторому увеличению температуры и тем самым увеличивается пластичность металлов.

3 Обсуждение результатов

Варианты связи в металле изучались при наличии ионизированных состояний. Расчеты производились на основе псевдопотенциального метода с использованием программного кода, параметры которого определялись методом квантовых дефектов.

Важной величиной, применяемой в расчетах различных свойств металлов, является формфактор псевдопотенциала. Если известны волновые функции ионного остова, он может быть найден при решении уравнения Шредингера. Однако, этот подход сопряжен с большими трудностями расчетного характера, в результате чего на практике широко используются так называемые модельные псевдопотенциалы, строящиеся на основе некоторых физических закономерностей; причем входящие в них подгоночные параметры выбираются таким образом, чтобы результаты расчета хорошо известных физических свойств совпадали с экспериментальными данными. Этими свойствами являются параметры поверхности Ферми в металлах, частоты фононных спектров, модули упругости и т.д.

В данной работе мы использовали модельный псевдопотенциал, для которого информацию о параметрах потенциала и волновых функциях электронов внутренних оболочек получают из спектроскопических данных об энергетических уровнях свободных ионов и атомов. Сейчас он является одним из наиболее широко распространенных. Такой псевдопотенциал включает в себя экспериментальные поправки, учитывающие обменное взаимодействие, а также корреляции между электронами проводимости и внутренних оболочек.

Псевдопотенциальные константы формфактора Хейне-Абаренкова-Анималу являются основными исходными данными для расчета потенциалов межатомного взаимодействия. С помощью квантовых дефектов можно различить потенциальные функции ионов металлов. Параметры ионизированных ионов заряда можно найти таким же образом.

Таким образом, в ионизированной области потенциалы межатомного взаимодействия существенно отличаются от естественного состояния. Между атомами существуют силы отталкивания, которые могут изменить структуру кристаллической решетки. Полученный нами потенциал взаимодействия позволяет моделировать физические явления, происходящие здесь на микроскопическом уровне, методом молекулярной динамики.

Для анализа поведения вещества на макроскопическом уровне необходимо иметь уравнения состояния, учитывающие ионизированные состояния.

4 Финансовый менеджмент, ресурсосбережение и ресурсоэффективность

Введение

Выполнение раздела «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» несет в себе цель выполнить комплексное описание и анализ финансово-экономических аспектов проекта. Но настоящая магистерская работа является частью фундаментально-теоретических исследований.

Цель работы – изучение взаимодействия заряженных частиц с твердотельными структурами с точки зрения анализа эффектов, остающихся в настоящее время недостаточно изученными, а именно, формы потенциалов межатомного взаимодействия металлов при ионизации атомов и возбуждении электронов проводимости в области треков быстрых заряженных частиц и в зоне релаксации возбужденных состояний.

Работа носит фундаментально-теоретический характер и выполняется с целью расширения научных знаний о явлениях и закономерностях влияния ионизирующего излучения на межатомное взаимодействие в металлах. На базе разработанного метода расчета потенциалов взаимодействия при наличии ионизированных состояний появляется возможность вычисления их для различных металлов и сплавов. Полученные в работе потенциалы межатомного взаимодействия могут быть использованы для молекулярно-динамического моделирования радиационных процессов в металлах и сплавах.

4.1 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Работа посвящена вычислению потенциалов межатомного взаимодействия в алюминии при наличии ионизационных процессов, вызванных излучением с помощью ЭВМ. Новизна разработки состоит на базе псевдопотенциального подхода с использованием метода квантовых дефектов, разработан новый способ расчета потенциалов межатомного взаимодействия в металлах при наличии ионизированных состояний. Также найдены потенциалы взаимодействия для атомов с различной степенью ионизации и в условиях возбуждения свободного электронного газа.

Работа с ЭВМ – представляет собой программу Rad Studio XE4 на основе которого построен программный код C++ для вычисления потенциалов межатомного взаимодействия в металлах, также программа Origin для построения графиков, в котором будут изображены потенциальные ямы. Вычисление потенциалов межатомного взаимодействия в металлах имеет важное значение для математического моделирования динамики молекул в металле. Настоящая работа проводится в аудитории 333, 11 корпуса ТПУ.

Данная методика в первую очередь интересна для исследовательского применения и дает возможность теоретического изучения влияния ионизирующего излучения на свойство металлов.

Данная работа в основном ориентирована на получение научных достижений и открытий.

4.2 SWOT-анализ

SWOT-анализ проводится для комплексной оценки внешней и внутренней среды проекта. В силу того, что разработка расчета потенциалов межатомного взаимодействия в металлах является лишь частным способом применения рассмотренного подхода, при SWOT-анализе рассматриваются сильные и слабые стороны, возможности и угрозы применительно к способу решения поставленной задачи. SWOT – Strengths (сильные стороны), Weaknesses (слабые стороны), Opportunities (возможности) и Threats (угрозы). Результаты исследования приведены в SWOT-анализ (таблица 4.2.1).

Таблица 4.2.1 – SWOT-анализ

	<p>Сильные стороны:</p> <p>С1. Заявленная экономичность и энергоэффективность технологии.</p> <p>С2. Экологичность технологии.</p> <p>С3. Более низкая стоимость исследований.</p> <p>С4. Наличие бюджетного финансирования.</p> <p>С5. Квалифицированный персонал.</p>	<p>Слабые стороны:</p> <p>Сл1. Отсутствие у потенциальных потребителей квалифицированных кадров по работе с научной разработкой.</p> <p>Сл2. Отсутствие автоматизации.</p> <p>Сл3. Большой срок для построения программного кода C++.</p> <p>Сл4. Сложность применения подхода при постоянно меняющихся данных.</p>
<p>Возможности:</p> <p>В1. Использование</p>	<p>В1В2С1С2.</p> <p>Эффективность</p>	<p>В1В2Сл1Сл2.</p> <p>Потенциальная стоимость</p>

<p>инновационной инфраструктуры ТПУ.</p> <p>В2. Появление дополнительного спроса.</p> <p>В3. Разработка автоматизации, по перенесению данных от одной программы в другую.</p> <p>В4. Подъем металлургического рынка.</p>	<p>предварительного моделирования будет только возрастать.</p> <p>В3С3. Автоматизация ускорит разработку систем с применением С++.</p>	<p>вероятной ошибки незначительно для моделирования.</p> <p>В3Сл3. При реализации автоматизации указанная слабая сторона нивелируется.</p> <p>В4Сл4. Уменьшение спроса на новый продукт.</p>
<p>Угрозы:</p> <p>У1. Отсутствие спроса.</p> <p>У2. Повышенные требования к точности данных.</p> <p>У3. Ограничения на разработку приложения, по автоматизации.</p>	<p>У1С2С3. Экономичность и энергоэффективность увеличивают интерес к методу и мотивируют на повышение спроса.</p> <p>Отсутствие отходов, безопасность процесса и его чистота являются основным преимуществом.</p>	<p>У1Сл3. Подвешенное состояние использования метода, если не вводить в систему расчетов по математическому моделированию динамики молекул.</p> <p>У3Сл1Сл2. Возможен отказ от рассмотренного подхода.</p>

По итогам SWOT-анализа выявлены возможности для дальнейшего развития.

1. Для противодействия угрозе У1 в систему следует ввести математическое моделирование динамики молекул.

2. В случае предъявления повышенных требований к точности данных (угроза У2), в этом случае следует отказаться от использования С++ и перенести

вычисления на уровень ручного расчета, либо использовать данные, полученные при экспериментах.

3. Для противодействия угрозе УЗ можно лишь улучшить некоторые моменты по работе с программами, но полностью автоматизировать процесс получения данных на данном этапе нет возможности.

4.3 Планирование научно-исследовательских работ

4.3.1 Структура работ в рамках научного исследования

Комплекс предполагаемых работ включает в себя следующие задачи:

- определить структуру работ в рамках исследования;
- определить участников каждой работы;
- установить продолжительность работ;

Работа выполнялась студентом (инженер) под руководством научного руководителя (таблица 4.3.1.1).

Таблица 4.3.1.1 – Список производимых задач и работ и их исполнители

Этапы работы	Загрузка исполнителей
1. Постановка целей и задач исследования	НР – 80% И – 20%
2. Обзор литературы	И – 100%
3. Разработка технического задания	НР – 30% И – 70%
4. Разработка календарного плана работ	НР – 20% И – 80%
5. Идентификация объекта	И – 100%
6. Создание модели в C++	И – 100%
7. Сравнительный анализ методов настройки на модели системы	И – 100%

8.	Установка связи C++ с Origin	НР – 10% И – 90%
9.	Обработка полученных результатов	НР – 15% И – 85%
10.	Оформление расчётно-пояснительной записки	И – 100%
11.	Подведение итогов	НР – 100%

4.3.2 Определение трудоемкости выполнения работ

Основная часть стоимости разработки метода составляется из трудовых затрат, поэтому важно определить трудоемкость работ всех участников разработки проекта.

Несмотря на то, что трудоемкость зависит от трудно учитываемых параметров, т.е. носит вероятностный характер, ее можно определить экспертным путем, в «человеко-днях». Ожидаемое (среднее) значение трудоемкости $t_{ож\ i}$ определяется по формуле:

$$t_{ож\ i} = \frac{3t_{min\ i} + 2t_{max\ i}}{5}, \quad (4.3.2.1)$$

где $t_{min\ i}$ – минимально возможное время выполнения поставленной задачи исполнителем (является оптимистичной оценкой: при удачном стечении обстоятельств), чел.-дн.; $t_{max\ i}$ – максимально возможное время выполнения поставленной задачи исполнителем (является пессимистичной оценкой: при неудачном стечении обстоятельств, чел.-дн.

На основании расчетов ожидаемой трудоемкости работ, необходимо определить продолжительность каждой работы в рабочих днях T_p :

$$T_{p\ i} = \frac{t_{ож\ i}}{Ч_i}, \quad (4.3.2.2)$$

где $Ч_i$ – количество исполнителей, одновременно выполняющих поставленную задачу, чел.

По всем работам результаты расчета продолжительности в рабочих днях представлены в таблице 4.3.3.1.

4.3.3 Разработка графика проведения исследования

Диаграмма Ганта является наиболее удобным и наглядным способом представления графика проведения работ и представляет собой отрезки, размещенные на горизонтальной шкале времени. Каждый отрезок соответствует отдельной задаче или подзадаче. Начало, конец и длина отрезка на шкале времени соответствуют началу, концу и длительности задачи.

Для построения графика Ганта длительность каждой из выполняемых работ из рабочих дней переводились в календарные дни по формуле:

$$T_{ki.рук} = T_{pi} \cdot k_{кал}, \quad (4.3.3.1)$$

$$T_{ki.инж} = T_{pi} \cdot k_{кал}, \quad (4.3.3.2)$$

где $k_{кал}$ – календарный коэффициент.

Для каждого исполнителя расчеты производились индивидуально. Календарный коэффициент определялся по формуле:

$$k_{кал} = \frac{T_{кал}}{T_{кал} - T_{вых} - T_{пр}}, \quad (4.3.3.3)$$

где $T_{кал}$ – общее количество календарных дней в году; $T_{кал}$ – общее количество выходных дней в году; $T_{пр}$ – общее количество праздничных дней в году.

Расчет трудоемкости и продолжительности работ, на примере задачи «Составление и утверждение технического задания»:

$$t_{ож i} = \frac{3t_{min i} + 2t_{max i}}{5} = \frac{3 \cdot 2 + 2 \cdot 4}{5} = 2.8 \text{ чел. -дн.} \quad (4.3.3.4)$$

$$T_{pi} = \frac{t_{ож i}}{Ч_i} = \frac{2.8}{1} = 2.8 \text{ раб. дн.} \quad (4.3.3.5)$$

Расчет календарного коэффициента для пятидневной рабочей недели (рабочая неделя инженера):

$$k_{\text{кал}} = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}}} = \frac{365}{365 - 104 - 14} = 1.48. \quad (4.3.3.6)$$

Расчет календарной продолжительности выполнения работы, на примере задачи «Выбор направления исследований»:

$$T_{ki, \text{рук}} = T_{pi} \cdot k_{\text{кал}} = 2.8 \cdot 1.48 = 4.144 \approx 4 \text{ кал. дн.} \quad (4.3.3.7)$$



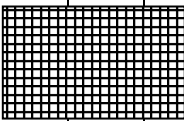



Все полученные значения в календарных днях округлялись до целого числа. Результаты представлены в таблице 4.3.3.1.

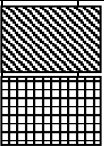


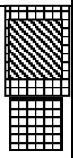
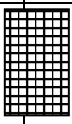

Таблица 4.3.3.1 – Временные показатели проектирования

Название работы	Трудоёмкость						Длит-сть в рабочих днях, T_{pi}		Длит-сть в календарных днях, T_{ki}	
	t_{\min} , чел.-дн.		t_{\max} , чел.-дн.		$t_{\text{ож}}$, чел.-дн.					
	Руковод.	Инженер	Руковод.	Инженер	Руковод.	Инженер	Руковод.	Инженер	Руковод.	Инженер
Составление и утверждение плана работы	2	-	4	-	2.8	-	2.8	-	4	-
Выбор направления работы и способа решения задач	2	-	4	-	2.8	-	2.8	-	4	-
Подбор и изучение материалов по теме	-	21	-	28	-	23.8	-	23.8	-	35
Составление плана действий по работе	4	4	7	7	5.2	5.2	2.6	2.6	4	4
Подготовка программного кода C++	-	3	-	5	-	3.8	-	3.8	-	7
Проведение вычислительных работ	14	24	20	34	16.4	28	8.2	14	12	21
Выполнение расчетов	-	7	-	10	-	8.2	-	8.2	-	12
Анализ и обработка полученных результатов	-	5	-	8	-	6.2	-	6.2	-	9

Обсуждение и оценка эффективности результатов	5	6	7	9	5.8	7.2	2.9	3.6	4	5
Составление пояснительной записки	-	3	-	6	-	4.2	-	4.2	-	6
Подготовка к защите	-	4	-	6	-	4.8	-	4.8	-	7

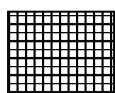
Таблица 4.3.3.2 – Календарный план-график проведения работы

Вид работ	Исполнители	T_{ki} , кал. дн.	Продолжительность выполнения работ										
			февр		март		апр		май				
			1	2	1	2	1	2	1	2			
Составление и утверждение технического задания	Руководитель	4											
Выбор направления исследований и способа решения задач	Руководитель	4											
Подбор и изучение материалов по теме	Инженер	35											
Составление плана экспериментов	Руководитель, инженер	4		 									
Подготовка образцов для экспериментов	Инженер	7											

Проведение экспериментальных работ	Руководитель, Инженер	21							
Выполнение расчетов	Инженер	12							
Анализ и обработка полученных результатов	Инженер	9							
Обсуждение и оценка эффективности и результатов	Руководитель, Инженер	5							
Составление пояснительной записки	Инженер	6							
Подготовка к защите	Инженер	7							



– руководитель;



– инженер.

В результате выполнения подраздела был разработан план-график выполнения этапов работ для руководителя и инженера, позволяющий оценить и спланировать рабочее время исполнителей.

4.4 Бюджет научно-технического исследования

Планирование бюджета позволяет оценить затраты на проведение исследования до его фактического начала и позволяет судить об экономической

эффективности работы. В данном разделе подсчитываются следующие статьи расходов:

- материальные затраты;
- амортизационные отчисления;
- заработная плата исполнителей;
- отчисления во внебюджетные фонды;
- накладные расходы.

4.4.1 Расчет материальных затрат

В этом подразделе оценивается стоимость всех материальных ценностей, непосредственно расходуемых в процессе выполнения работ.

Теоретические исследования, а также моделирование системы требуют ряд программных продуктов: Microsoft Office, Rad Studio XE4, Origin и др. Большинство из них предоставляются бесплатно для студентов ТПУ, другие находятся в свободном доступе в сети «Интернет». Таким образом, затраты на материалы включают в себя расходы на канцелярские принадлежности. Для исследований используется персональный компьютер с бесплатным доступом к лицензии Rad Studio XE4. В материальные затраты также включаются транспортно-заготовительные расходы (ТЗР) в пределах от 5% до 20% от общей цены материалов. Расчёт материальных затрат приведён в табл. 4.4.1.1.

Таблица 4.4.1.1 – Материальные затраты

Наименование	Цена за ед., руб.	Кол-во, шт.	Сумма, руб.
Офисная бумага, упак. 500 листов	310	1	310
Тетрадь общая, 48 л.	50	1	50
Шариковая ручка	30	3	90

Организатор	300	1	300
Итого			750
Итого с учётом ТЗР (10%)			825

4.4.2 Расчет амортизационных отчислений

Написание выпускной квалификационной работы по плану занимает 5 месяцев. Для моделирования и проведения расчётов используется персональный компьютер первоначальной стоимостью 60000 рублей. Срок полезного использования для офисной техники составляет от 2 до 3 лет [37].

Норма амортизации H_A рассчитывается как:

$$H_A = \frac{1}{T} \cdot 100\%, \quad (4.4.2.1)$$

где T – срок полезного использования, лет.

Если принять срок полезного использования равным 3 годам, тогда норма амортизации H_A :

$$H_A = \frac{1}{3} \cdot 100\% = 33.3\%, \quad (4.4.2.2)$$

Годовые амортизационные отчисления:

$$A_{\text{год}} = 60000 \cdot 0.33 = 19800 \text{ руб.} \quad (4.4.2.3)$$

Ежемесячные амортизационные отчисления:

$$A_{\text{мес}} = \frac{19800}{12} = 1650 \text{ руб.} \quad (4.4.2.4)$$

Итоговая сумма амортизации основных средств:

$$A = 1650 \cdot 5 = 8250 \text{ руб.} \quad (4.4.2.5)$$

4.5 Основная заработной платы и отчислений во внебюджетные фонды

Оклад научного руководителя (в должности доцента) составляет 33 664 рублей, оклад консультанта (в должности ассистента) – 12 664 рублей. Оклад студента (инженера) принимается равным окладу соответствующего специалиста низшей квалификации, т.е. ассистента и составляет 12 664 рублей. В 2021 году с учётом 48-дневного отпуска 252 рабочих дня. Среднее количество рабочих дней в месяце составит 21 день. Среднедневная заработная плата для руководителя составит 1603.05 рублей в день, для консультанта и инженера – 603.05 рублей в день.

Заработная плата включает в себя основную и дополнительную части. При этом основная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$ЗП_{\text{осн}} = ЗП_{\text{дн}} \cdot T_{\text{рд}} \cdot (1 + K_{\text{пр}} + K_{\text{д}}) \cdot K_{\text{р}}, \quad (4.5.1)$$

где $ЗП_{\text{дн}}$ – среднедневная заработная плата, руб.;

$T_{\text{рд}}$ – трудоёмкость выполнения работы в рабочих днях;

$K_{\text{пр}}$ – коэффициент премирования;

$K_{\text{д}}$ – коэффициент доплат;

$K_{\text{р}}$ – районный коэффициент.

Результаты расчёта основной заработной платы по формуле 5.5.1 приведены в табл. 4.5.1.

Таблица 4.5.1 – Расчёт основной заработной платы

Исполнители	$ЗП_{\text{дн}}$	$K_{\text{р}}$	$K_{\text{д}}$	$K_{\text{пр}}$	$T_{\text{рд}}$	$ЗП_{\text{осн}}$, руб
Руководитель	1603.05	0.1	0.2	1.3	9.72	26332.98
Инженер	603.05	0	0.2	1.3	79.32	74620.92
Итого						100953.9

Дополнительная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$ЗП_{\text{доп}} = ЗП_{\text{осн}} \cdot 0.12, \quad (4.5.2)$$

где $ЗП_{осн}$ – основная заработная плата, руб.

Отчисления во внебюджетные фонды в соответствии с Налоговым кодексом РФ рассчитываются по формуле:

$$ЗП_{внеб} = (ЗП_{осн} + ЗП_{доп}) \cdot 0.3, \quad (4.5.3)$$

где $ЗП_{осн}$ – основная заработная плата, руб;

$ЗП_{доп}$ – дополнительная заработная плата, руб.

Результаты расчётов по формулам 4.5.2 и 4.5.3 приведены в табл. 4.5.2.

Таблица 4.5.2 – Расчёт дополнительной заработной платы и отчислений

Исполнители	$ЗП_{доп}$	$ЗП_{внеб}$
Руководитель	3159.96	8847.88
Инженер	8954.51	25072.63
Итого	12114.47	33920.51

Накладные расходы принимаются в размере 10% от величины всех остальных расходов.

4.5.1 Расчет общей себестоимости

Таблица 4.5.1.1 – Суммарные расходы

Наименование	Сумма, руб.	Удельный вес, %
Материальные затраты	825	0.464
Затраты на амортизацию	8250	4.64
Основная заработная плата	100953.9	58.93
Дополнительная заработная плата	12114.47	7.07
Страховые взносы	33920.51	19.8
Накладные расходы	15606.38	9.09
Итого	171670.26	100

В ходе подсчёта затрат на разработку проекта выявлено, что основная часть (63%) средств расходуется на заработную плату исполнителей.

4.6 Оценка научно-технической эффективности исследования

Поскольку выполняемые в данной работе исследования являются научно-исследовательскими, то вследствие этого эффект достигнутый в работе может быть чисто научным. Он характеризует лишь получение новых научных знаний и отражает прирост информации, предназначенной для внутреннего потребления.

Для итоговой оценки результатов работы используют один из видов эффекта, а остальные используют в качестве дополнительных характеристик. Количественная оценка научного эффекта обычно производится с помощью коэффициентов K_H и K_{HT} , которые рассчитывают по следующим формулам:

$$K_H = \sum_{i=1}^n k_i^{3H} \cdot k_i^{DY}, \quad (4.6.1)$$

$$K_{HT} = \sum_{i=1}^m k_i^{3H} \cdot k_i^{DY}, \quad (4.6.2)$$

где K_H - коэффициент научной результативности;

K_{HT} - коэффициент научно - технической результативности;

k_i^{3H} - коэффициент значимости i -го фактора;

k_i^{DY} - коэффициент достигнутого уровня i -го фактора;

n - количество факторов научной результативности;

m - количество факторов научно - технической результативности.

Характеристики факторов научной результативности представлены в (табл. 4.6.1).

Таблица 4.6.1 – Факторы научной результативности

Фактор	k_{3H}	k_{DY}
Новизна полученных или предполагаемых результатов	0.8	0.6
Глубина научной проработки	0.3	0.6

Степень вероятности успеха	0.5	0.4
----------------------------	-----	-----

Коэффициенты достигнутого уровня по указанным факторам полагаются равными:

$k_{ду1} = 0.8$ - по-новому объясняются те же факты, дополняются и уточняются ранее полученные закономерности;

$k_{ду2} = 0.7$ - многоаспектный анализ, взаимосвязь между факторами с наличием объяснения;

$k_{ду3} = 0.6$ - поставленные задачи теоретически и технически осуществимы, успех возможен.

Тогда коэффициент научной результативности:

$$K_H = 0.6 \cdot 0.8 + 0.3 \cdot 0.6 + 0.7 \cdot 0.4 = 0.86$$

Характеристики факторов научно-технической результативности приводятся в (табл. 4.6.2).

Таблица 4.6.2 – Факторы научно-технической результативности

Фактор	$k_{зН}$	$k_{ду}$
Перспективность использования результатов	0,5	0,7
Масштаб возможной реализации результатов	0,3	0,5
Завершенность полученных результатов	0,2	0,4

Коэффициенты достигнутого уровня по указанным факторам полагаются равными:

$k_{ду1} = 0.8$ - результаты будут использованы в конкретном научном направлении при разработке новых технических решений;

$k_{ду2} = 0.4$ - время реализации до трёх лет, на конкретном предприятии;

$k_{ду3} = 0.7$ - достаточная завершенность полученных результатов, развёрнутый анализ.

$$K_{HT} = 0.5 \cdot 0.7 + 0.3 \cdot 0.5 + 0.2 \cdot 0.4 = 0.58$$

Максимально возможное значение K_H и K_{HT} - это единица. Очевидно, что чем ближе полученные значения к максимуму, тем выше результативность проделанной работы.

О высокой степени научной и практической ценности проводимой работы свидетельствуют высокие значения вычисленных коэффициентов научной и научно – технической эффективности. Технический эффект характеризуется получением в результате работы сведений о возможностях разработанного метода при экономических затратах в 171670.26 руб.

Выводы по разделу «Финансовый менеджмент, ресурсосбережение и ресурсоэффективность»

В ходе написания магистерской диссертации, разрабатывался метод по расчету потенциалов межатомного взаимодействия в металлах с помощью программного кода C++ и программы Origin. Метод является перспективным за счет возможности сокращения экономических затрат, таких как отсутствие экспериментов на лабораторных установках. Но имеется минус, это необходимость в квалифицированном персонале, что повышает экономические затраты на зарплату.

С научного подхода, данный метод создает базу расчета потенциалов взаимодействия при наличии ионизированных состояний и появляется возможность вычисления их для различных металлов и сплавов.

Полученные в работе потенциалы межатомного взаимодействия могут быть использованы для молекулярно-динамического моделирования радиационных процессов в металлах и сплавах.

О высокой степени научной и практической ценности проводимой работы свидетельствуют высокие значения коэффициентов научной и научно – технической эффективности при экономических затратах в 171670.26 руб.

5 Социальная ответственность

Введение

В современных условиях одним из основных направлений коренного улучшения всей профилактической работы по снижению производственного травматизма и профессиональной заболеваемости является повсеместное внедрение комплексной системы управления охраной труда, то есть объединение разрозненных мероприятий в единую систему целенаправленных действий на всех уровнях и стадиях производственного процесса.

В основе законодательства Российской Федерации об охране труда лежит конституция Российской Федерации и трудовой кодекс Российской Федерации. Обязанности по обеспечению безопасных условий и охраны труда в организации возлагаются на работодателя. Согласно Федеральному закону от 17 июля 1999 г. №181–ФЗ "Об основах охраны труда в Российской Федерации" (с изменениями от 20 мая 2002 г., 10 января 2003 г., 9 мая, 26 декабря 2005 г.).

Настоящая магистерская диссертация посвящена вычислению потенциалов межатомного взаимодействия в металлах при наличии ионизационных процессов, вызванных излучением. Исследование предполагает работу с ЭВМ. Объектом исследования является изменение межатомного взаимодействия в металлах при ионизации и возбуждении электронной подсистемы, а предметом исследования является разработка метода расчёта потенциалов взаимодействия, учитывающего вышеперечисленные эффекты.

Научно-технической базой для проведения исследований стала аудитория 333, 11 корпус университета ТПУ.

5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

5.1.1 Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя)

правовые нормы трудового законодательства

Весь персонал обязан знать и строго соблюдать правила техники безопасности. Обучение персонала технике безопасности и производственной санитарии состоит из вводного инструктажа, и инструктажа на рабочем месте ответственным лицом (ГОСТ 12.0.004-2015 ССБТ. Организация обучения безопасности труда. Общие положения).

Проверка знаний правил техники безопасности проводится квалификационной комиссией после обучения на рабочем месте. Проверяемому, присваивается соответствующая его знаниям и опыту работы квалификационная группа по технике безопасности и выдается специальное удостоверение.

К работе с ЭВМ допускаются лица, прошедшие вводный инструктаж и инструктаж по безопасности труда на рабочем месте. К самостоятельной работе допускаются работники после специального обучения и проверки знаний правил электробезопасности, приобретенных навыков и безопасных способов выполнения работы [37].

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

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

При введении в эксплуатацию нового оборудования сотрудники, которые будут работать на нем, должны пройти внеплановый инструктаж по правилам эксплуатации и безопасной работе на данном оборудовании (ГОСТ Р 12.1.019-

2009 ССБТ. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты).

5.1.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя

Рациональная планировка рабочего места предусматривает четкий порядок и постоянство размещения предметов, средств труда и документации. То, что требуется для выполнения работ чаще должно располагаться в зоне легкой досягаемости рабочего пространства, как показано на рисунке 5.1.2.1.

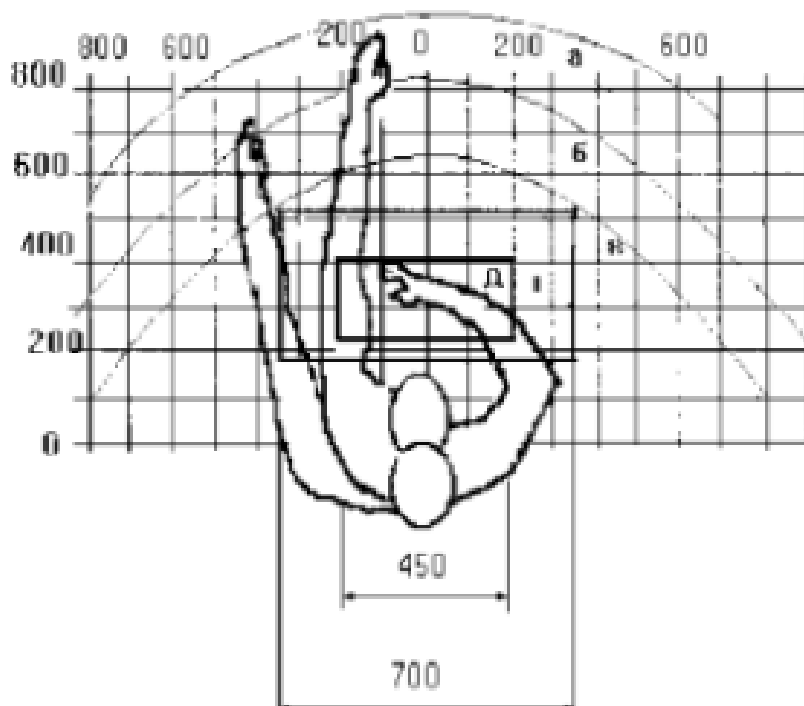


Рисунок 5.1.2.1 – Зоны досягаемости рук в горизонтальной плоскости: а – зона максимальной досягаемости рук; б – зона досягаемости пальцев при вытянутой руке – зона легкой досягаемости ладони; г – оптимальное пространство для грубой ручной работы; д – оптимальное пространство для тонкой ручной работы

Оптимальное размещение предметов труда и документации в зонах досягаемости рук: дисплей размещается в зоне а (в центре); клавиатура – в зоне г/д; системный блок размещается в зоне б (слева); принтер находится в зоне а (справа); документация – в зоне легкой досягаемости ладони – в (слева) – литература и документация, необходимая при работе; в выдвижных ящиках стола – литература, не используемая постоянно.

Обязательная техника безопасности при работе на ПК требует выполнения следующих нормативов при размещении монитора:

- расстояние между столами сотрудников составляет не менее 2 метров, а между боковыми поверхностями мониторов – не менее 1.2 метра;

- экран используемого монитора находится на расстоянии 0.6-0.7 метра от глаз работника.

При этом электростатический потенциал дисплея не должен превышать 500 В.

При проектировании письменного стола должны быть учтены следующие требования. Высота рабочей поверхности стола рекомендуется в пределах 680-800 мм. Высота рабочей поверхности, на которую устанавливается клавиатура, должна быть 650 мм. Рабочий стол должен быть шириной не менее 700 мм и длиной не менее 1400 мм. Должно иметься пространство для ног высотой не менее 600 мм, шириной – не менее 500 мм, глубиной на уровне колен – не менее 450 мм и на уровне вытянутых ног – не менее 650 мм.

Рабочее кресло должно быть подъёмно–поворотным и регулируемым по высоте и углам наклона сиденья и спинки, а также расстоянию спинки до переднего края сиденья. Рекомендуется высота сиденья над уровнем пола 420-550 мм. Конструкция рабочего кресла должна обеспечивать: ширину и глубину поверхности сиденья не менее 400 мм; поверхность сиденья с заглублённым передним краем. Монитор должен быть расположен на уровне глаз оператора на расстоянии 500-600 мм. Согласно нормам, угол наблюдения в горизонтальной плоскости должен быть не более 45 градусов к нормали экрана. Лучше если угол

обзора будет составлять 30 градусов. Кроме того, должна быть возможность выбирать уровень контрастности и яркости изображения на экране [37].

Должна предусматриваться возможность регулирования экрана:

- по высоте +3 см;
- по наклону от 10 до 20 градусов относительно вертикали;
- в левом и правом направлениях.

Клавиатуру следует располагать на поверхности стола на расстоянии 100-300 мм от края. Нормальным положением клавиатуры является её размещение на уровне локтя оператора с углом наклона к горизонтальной плоскости 15°. Более удобно работать с клавишами, имеющими вогнутую поверхность, четырёхугольную форму с закруглёнными углами. Конструкция клавиши должна обеспечивать оператору ощущение щелчка. Цвет клавиш должен контрастировать с цветом панели.

5.2 Производственная безопасность

Производственные условия на рабочем месте характеризуются наличием опасных и вредных факторов, которые классифицируются по группам элементов: физические, химические, биологические, психофизиологические.

Таблица 5.2.1 – Возможные опасные и вредные факторы

Факторы (ГОСТ 12.0.003–2015)	Нормативные документы		
	Разработ	Исследов	
1. Повышенный уровень шума	-	-	ГОСТ 12.1.029-80 «Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Средства и методы защиты от шума.

			Классификация».
2. Отклонение показателей микроклимата	+	+	СанПиН 2.2.4.548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.
3. Недостаточная освещенность рабочей зоны	+	+	07.11.2016 г. СП 52.13330 «СНиП 23-05-95 Естественное и искусственное освещение».
4. Повышенное значение напряжения в электрической цепи, замыкание которой может произойти через тело человека	+	+	ГОСТ 12.1.038-82 ССБТ «Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Электробезопасность.»

5.3 Анализ опасных и вредных производственных факторов

Вредные факторы могут привести к серьезным заболеваниям работника, ухудшению его физического и психологического состояния.

Выполнение магистерской работы происходило с использованием ЭВМ. При однообразной умственной работе, требующей значительного нервного напряжения и большого сосредоточения, рекомендуется выбирать неяркие, малоконтрастные цветочные оттенки, которые не рассеивают внимание (малонасыщенные оттенки холодного зеленого или голубого цветов). При работе, требующей интенсивной умственной или физической напряженности, рекомендуются оттенки тёплых тонов, которые возбуждают активность человека.

Экран и системные блоки производят электромагнитное излучение. Основная его часть происходит от системного блока и видеокабеля. Согласно [37]

напряженность электромагнитного поля на расстоянии 50 см вокруг экрана по электрической составляющей должна быть не более:

- в диапазоне частот 5Гц-2кГц - 25В/м;
- в диапазоне частот 2кГц-400кГц – 2.5В/м.

Плотность магнитного потока должна быть не более:

- в диапазоне частот 5Гц-2кГц - 250нТл;
- в диапазоне частот 2кГц-400кГц - 25нТл.

Существуют следующие способы защиты от ЭМП:

-увеличение расстояния от источника (экран должен находиться на расстоянии не менее 50 см от пользователя);

-применение приэкранных фильтров, специальных экранов и других средств индивидуальной защиты.

При работе с компьютером источником ионизирующего излучения является дисплей. Под влиянием ионизирующего излучения в организме может происходить нарушение нормальной свертываемости крови, увеличение хрупкости кровеносных сосудов, снижение иммунитета и др. Доза облучения при расстоянии до дисплея 20 см составляет 50 мкбэр/час. По нормам [37] конструкция ЭВМ должна обеспечивать мощность экспозиционной дозы рентгеновского излучения в любой точке на расстоянии 0,05 м от экрана не более $7.7 \cdot 10^{-4}$ А/кг, что соответствует эквивалентной дозе, равной 100 мкР/час.

Утомляемость органов зрения может быть связана как с недостаточной освещенностью, так и с чрезмерной освещенностью, а также с неправильным направлением света.

5.3.1 Производственный шум

Воздействие шума в первую очередь влияет на органы слуха, нервную и сердечно-сосудистую системы [38].

Согласно таблице 5.3.1.1 выполнение вычислительных работ с помощью ЭВМ, относится к умственной работе, по точному графику с инструкцией, требующую точную категорию зрительных работ, норма уровня звука 65 дБ А. Уровень шума исправного современного компьютера находится в пределах от 35 до 50 дБ А. Если в компьютере установлен плохо сбалансированный вентилятор, то он, особенно на первых минутах после включения, может достигать 55 дБ А и более.

В соответствии с ГОСТ 12.1.003-83 рабочие места в помещениях программистов вычислительных машин и в лабораториях для теоретических работ и обработки данных, уровень звука устанавливается 60 дБ А. Стандарт соответствует СТ СЭВ 1930-79 в части допустимых значений уровней звукового давления и уровней звука на рабочих местах. Так что воздействие уровня звука на рабочем месте находится в пределах нормы.

Таблица 5.3.1.1 – Уровни шума для различных видов трудовой деятельности с учетом степени напряженности

Вид трудовой деятельности	Уровни звука и эквивалентные уровни звука, дБ А
Работа по выработке концепций, новых программ; творчество; преподавание	40
Труд высших производственных руководителей, связанных с контролем группы людей, выполняющих преимущественно умственную работу	50
Высококвалифицированная умственная работа, требующая сосредоточенности; труд, связанный исключительно с разговорами по средствам связи	55
Умственная работа, выполняемая с часто получаемыми указаниями и акустическими сигналами;	60

работа, требующая постоянного* слухового контроля; высокоточная категория зрительных работ**	
Умственная работа, по точному графику с инструкцией (операторская), точная категория зрительных работ	65
Физическая работа, связанная с точностью, сосредоточенностью или периодическим слуховым контролем	80

5.3.2 Повышенное значение напряжения в электрической цепи

Используемое помещение относится к 1 группе без повышенной опасности (сухое, хорошо отапливаемое, помещение с токонепроводящими полами, с температурой 18--20°, с влажностью 40--50%).

Неисправность проводки установки может стать причиной поражения электрическим током. Прохождение тока может вызывать у человека раздражение и повреждение различных органов. Пороговый не отпускающий ток составляет 50 Гц (6–16мА). Защита от воздействия электрического тока осуществляется путем проведения организационных, инженерно-технических и лечебно-профилактических мероприятий [41].

Для предотвращения поражения электрическим током следует проводить следующие мероприятия:

1. содержать оборудование в работоспособном состоянии и эксплуатировать его в соответствии с нормативно-техническими документами;
2. своевременно проводить техническое обслуживание;
3. соблюдать технику безопасности при работе с оборудованием;
4. проводить инструктаж для работников.

В случае удара электрическим током, необходимо выполнить следующий набор операций:

-освободить пострадавшего от действия электрического тока и оценить состояние пострадавшего (выключить общий рубильник);

-вызвать скорую медицинскую помощь или врача, либо принять меры для транспортировки пострадавшего в ближайшее лечебное учреждение;

-если пострадавший находится в сознании, но до этого был в состоянии обморока или продолжительное время находился под действием тока, ему до прибытия врача необходимо обеспечить полный покой и в дальнейшем медицинское наблюдение в течение 2-3 часов;

-если пострадавший находится в бессознательном состоянии, но с сохранившимся дыханием, его следует ровно и удобно положить, расстегнуть одежду, создать приток свежего воздуха и обеспечить полный покой, дать понюхать нашатырный спирт. Если пострадавший плохо дышит, необходимо сделать искусственное дыхание и непрямой массаж сердца;

-при отсутствии признаков жизни (отсутствие дыхания, пульса, реакции зрачка на свет) нельзя считать пострадавшего мертвым. Ему должна быть оказана первая медицинская помощь в виде искусственного дыхания и непрямого массажа сердца. Искусственное дыхание и непрямой массаж сердца следует делать непрерывно до прибытия врача;

-переносить пострадавшего в другое место следует только в тех случаях, когда ему или лицу, оказывающему помощь, продолжает угрожать опасность или, когда оказание помощи на месте невозможно.

Безопасным для организма человека можно считать переменный ток силой не выше 0.05 А ток силой более 0.05 – 0.1 А опасен и может вызвать смертельный исход.

Безопасным напряжением для человека считается напряжение 42 В в нормальных условиях и 12 В в условиях повышенной опасностью (сырость, высокая температура, металлические полы и др.).

5.3.3 Производственный микроклимат и его влияние на организм человека

При работе с ЭВМ для создания нормальных условий труда в производственных помещениях ГОСТ 12.1.005-88 и СанПиН 2.2.4.584-96 «Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений» должны выполняться условия поддержания микроклимата рабочего места, которые не будут оказывать вредного влияния на здоровье работника.

В связи с этим законодательно установлены оптимальные значения температуры и допустимый максимум в жаркий период года. Для офисных работников они составляют 23-25°C при относительной влажности в 40-60%. Допускается повышение температуры до 28°C.

В холодный период года внутри помещений должно быть соблюдено комфортное значение температуры – 23-25°C. Допустимы колебания нормы до 1-2°C, а кратковременно в течение рабочего дня столбик термометра может «скакать» на 3-4°C.

Параметрами, характеризующими микроклимат, являются:

1. температура воздуха;
2. относительная влажность воздуха;
3. скорость движения воздуха.

Данная магистерская работа относится к легкой категории I а – до 139 Вт. Это работа производится сидя, не требует физического напряжения.

Оптимальные величины показателей микроклимата на рабочих местах производственных помещений представлены в таблице 5.3.3.1.

Таблица 5.3.3.1 – Оптимальные величины показателей микроклимата на рабочих местах производственных помещений

Период года	Температура воздуха, °C	Относительная влажность воздуха, %	Скорость движения воздуха, м/с
-------------	-------------------------	------------------------------------	--------------------------------

Холодный	22-24	60÷40	0,1
Теплый	23-25	60÷40	0,1

Для создания оптимальных метеорологических условий применяется кондиционер, который поддерживает оптимальные параметры микроклимата автоматически, независимо от меняющихся условий. В холодное время года для поддержания в помещении оптимальной температуры воздуха применяется отопление.

5.3.4 Производственное освещение

Согласно СНиП 23-05-95 СП 52.13330.2010 в лаборатории, где происходит периодическое наблюдение за ходом производственного процесса при постоянном нахождении людей в помещении освещенность при системе общего освещения не должна быть ниже 200 Лк.

Правильно спроектированное и выполненное освещение обеспечивает высокий уровень работоспособности, оказывает положительное психологическое действие на человека и способствует повышению производительности труда.

На рабочей поверхности должны отсутствовать резкие тени, которые создают неравномерное распределение поверхностей с различной яркостью в поле зрения, искажает размеры и формы объектов различия, в результате повышается утомляемость и снижается производительность труда.

Расчёт общего равномерного искусственного освещения горизонтальной рабочей поверхности выполняется методом коэффициента светового потока, учитывающим световой поток, отражённый от потолка и стен. Длина помещения $A = 5.7$ м, ширина $B = 4.3$ м, высота = 3.7 м. Высота рабочей поверхности над полом $h_p = 1.0$ м. Согласно СНиП 23-05-95 необходимо создать освещенность не ниже 200 Лк ($E_H=200$).

Площадь помещения:

$$S = A \cdot B, \quad (5.3.4.1)$$

где A – длина, м; B – ширина, м.

$$S = 5.7 \cdot 4.3 = 24.51 \text{ м}^2 \quad (5.3.4.2)$$

Коэффициент отражения свежепобеленных стен с окнами, без штор $\rho_c=50\%$, свежепобеленного потолка $\rho_{II}=70\%$. Коэффициент запаса, учитывающий загрязнение светильника, для помещений с малым выделением пыли равен $K_3 = 1.5$. Коэффициент неравномерности для люминесцентных ламп $Z = 1.1$.

Выбираем лампу дневного света OSRAM DULUX L 32W/840 2G11, световой поток которой равен $\Phi_{лд} = 2900$ Лм.

Выбираем светильники ССП-158 32Вт 4000К IP65 LLT 4690612008950. Этот светильник имеет одну лампу мощностью 32 Вт, длина светильника равна 1150 мм, ширина – 60 мм.

Интегральным критерием оптимальности расположения светильников является величина λ , которая для люминесцентных светильников с защитной решёткой лежит в диапазоне 1.1–1.3. Принимаем $\lambda=1.1$, расстояние светильников от перекрытия (свес) $h_c = 0.3$ м.

Высота светильника над рабочей поверхностью определяется по формуле:

$$h = h_n - h_p, \quad (5.3.4.3)$$

где h_n – высота светильника над полом, высота подвеса, h_p – высота рабочей поверхности над полом.

Высота светильника над полом, высота подвеса:

$$h_n = H - h_c = 3700 - 300 = 3400 \quad (5.3.4.4)$$

Высота рабочей поверхности над полом: $h_{rp} = 800$.

Расчетная высота, высота светильника над рабочей поверхностью:

$$h = h_n - h_{rp} = 3400 - 800 = 2600 = 2.6 \text{ м} \quad (5.3.4.5)$$

Расстояние между соседними светильниками или рядами определяется по формуле:

$$L = \lambda \cdot h = 1.1 \cdot 2.6 = 2.86 \text{ м} \quad (5.3.4.6)$$

Число рядов светильников в помещении:

$$n_{\text{ряд}} = \frac{(B - \frac{2}{3}L)}{L} + 1 = \frac{4.3 - \frac{2}{3} \cdot 2.86}{2.86} + 1 \approx 2 \quad (5.3.4.7)$$

Число светильников в ряду:

$$n_{\text{св}} = \frac{(A - \frac{2}{3}L)}{L_{\text{св}} + 0.5} = \frac{5.7 - \frac{2}{3} \cdot 2.86}{1.150 + 0.5} \approx 2 \quad (5.3.4.8)$$

Общее число светильников:

$$n = n_{\text{ряд}} \cdot n_{\text{св}} = 2 \cdot 2 = 4 \quad (5.3.4.9)$$

Расстояние от крайних светильников или рядов до стены определяется по формуле:

$$l = \frac{L}{3} = \frac{2.86}{3} = 0.953 \text{ м} \quad (5.3.4.10)$$

Размещаем светильники в два ряда. На рисунке изображен план помещения и размещения светильников с люминесцентными лампами.

Однако необходимо провести дополнительные расчеты:

$$4300 = L_2 + \frac{2}{3}L_3 + 2 \cdot 1150 \quad (5.3.4.11)$$

$$L_2 = \frac{(4300 - 2300) \cdot 3}{5} = 1200 \quad (5.3.4.12)$$

$$l = \frac{L_2}{3} = \frac{1200}{3} = 400 \quad (5.3.4.13)$$

Аналогичные расчеты проводим для длины комнаты:

$$5700 = L_1 + \frac{2}{3}L_1 + 2 \cdot 60 \quad (5.3.4.14)$$

$$L = \frac{(5700 - 120) \cdot 3}{5} = 3348 \quad (5.3.4.15)$$

$$l = \frac{L_1}{3} = \frac{3348}{3} = 1116 \quad (5.3.4.16)$$

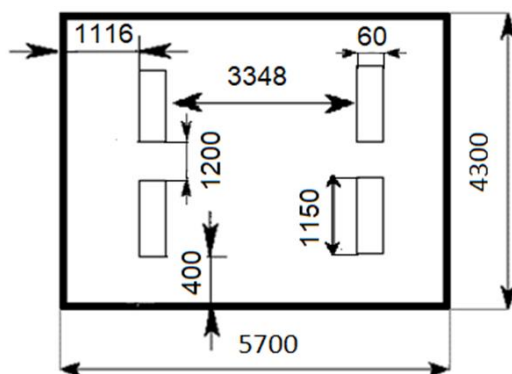


Рисунок 5.3.4.1 – Схема размещения светильников в помещении

Индекс помещения определяется по формуле:

$$i = \frac{A \cdot B}{h \cdot (A+B)} = \frac{5.7 \cdot 4.3}{2.6 \cdot (5.7+4.3)} = 0.94 \quad (5.3.4.17)$$

Для коэффициентов отражения берутся приблизительные значения:

= 50% и потолка = 30%. Значения коэффициента использования светового потока светильников с люминесцентными лампами примем равным 53 %.

Потребный световой поток группы люминесцентных ламп светильника определяется по формуле:

$$\Phi_{\Pi} = \frac{E \cdot A \cdot B \cdot K_3 \cdot Z}{n \cdot \eta} = \frac{200 \cdot 5.7 \cdot 4.3 \cdot 1.5 \cdot 1.1}{4 \cdot 0.53} = 2861.42 \text{ лм} \quad (5.3.4.18)$$

Делаем проверку выполнения условия:

$$-10\% \leq \frac{\Phi_{ЛД} - \Phi_{\Pi}}{\Phi_{ЛД}} \cdot 100\% \leq 20\%; \quad (5.3.4.19)$$

$$\frac{\Phi_{ЛД} - \Phi_{\Pi}}{\Phi_{ЛД}} \cdot 100\% = \frac{2900 - 2861.42}{2900} \cdot 100\% = 1.3\%. \quad (5.3.4.20)$$

Таким образом: $-10\% \leq 1.3\% \leq 20\%$, необходимый световой поток светильника не выходит за пределы требуемого диапазона.

Общая мощность осветительной системы:

$$P = n \cdot P_{л} \text{ (Вт)},$$

где n – число ламп, 4 шт.; $P_{л}$ – мощность лампы 32 Вт.

$$P = 32 \cdot 4 = 128 \text{ Вт}.$$

5.4 Экологическая безопасность

В настоящее время одним из важных вопросов в любой сфере деятельности является вопрос экологичности. Экологичность отхода представляет собой способность отхода не оказывать отрицательного воздействия на окружающую среду за пределами допустимых значений.

В данной работе вычисления проводились с помощью ЭВМ и поэтому потенциальным отходом в дальнейшем является отработанная электротехника. Организация имеет право признать списанную оргтехнику отходом. Отходы оргтехники относятся к отходам 5 класса опасности – подлежат сбору, временному хранению, учету и сдаче на утилизацию (<https://ecoproverka.ru/othody-org-tehniki/>). Отходы оргтехники представлены: системным блоком компьютера; отработанными картриджами печатающих устройств с содержанием тонера менее 7 %, клавиатурой, манипуляторами «мышь» с соединительными проводами; мониторами компьютерными жидкокристаллическими. Утилизация компьютерной техники по ГОСТ Р 55102-2012 Ресурсосбережение. Обращение с отходами. Руководство по безопасному сбору, хранению, транспортированию и разборке отработавшего электротехнического и электронного оборудования, за исключением ртутисодержащих устройств и приборов.

5.5 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

Согласно федеральному закону от 22 июля 2008 г. N 123-ФЗ "Технический регламент о требованиях пожарной безопасности" помещения, по взрывопожарной и пожарной опасности.

Так как помещение по степени пожаровзрывоопасности относится к категории В1-В4 (<https://docs.cntd.ru/document/1200071156>), т.е. к помещениям с веществами и материалами, способные при взаимодействии с водой, кислородом воздуха или друг с другом только гореть, необходимо предусмотреть ряд профилактических мероприятий.

Возможные причины загорания:

- неисправность токоведущих частей установок;
- работа с открытой электроаппаратурой;
- короткие замыкания в блоке питания;
- несоблюдение правил пожарной безопасности;
- наличие горючих компонентов: документы, двери, столы, изоляция кабелей и т.п.

Организационные мероприятия предусматривают правильную эксплуатацию оборудования, правильное содержание зданий и территорий, противопожарный инструктаж рабочих и служащих, обучение производственного персонала правилам противопожарной безопасности, издание инструкций, плакатов, наличие плана эвакуации.

К техническим мероприятиям относятся: соблюдение противопожарных правил, норм при проектировании зданий, при устройстве электропроводов и оборудования, отопления, вентиляции, освещения, правильное размещение оборудования.

К режимным мероприятиям относятся, установление правил организации работ, и соблюдение противопожарных мер. Для предупреждения возникновения пожара от коротких замыканий, перегрузок и т. д. необходимо соблюдение следующих правил пожарной безопасности:

- исключение образования горючей среды (герметизация оборудования, контроль воздушной среды, рабочая и аварийная вентиляция);
- применение при строительстве и отделке зданий негорючих или трудно сгораемых материалов;
- правильная эксплуатация оборудования (правильное включение оборудования в сеть электрического питания, контроль нагрева оборудования);
- правильное содержание зданий и территорий (исключение образования источника воспламенения - предупреждение самовозгорания веществ, ограничение огневых работ);

-обучение производственного персонала правилам противопожарной безопасности;

-издание инструкций, плакатов, наличие плана эвакуации;

-соблюдение противопожарных правил, норм при проектировании зданий, при устройстве электропроводов и оборудования, отопления, вентиляции, освещения;

-правильное размещение оборудования;

-своевременный профилактический осмотр, ремонт и испытание оборудования.

В зависимости от условий в помещении опасность поражения человека электрическим током увеличивается или уменьшается. Не следует работать с ЭВМ в условиях повышенной влажности (относительная влажность воздуха длительно превышает 75%), высокой температуры (более 35°C), наличии токопроводящей пыли, токопроводящих полов и возможности одновременного прикосновения к имеющим соединение с землёй металлическим элементам и металлическим корпусом электрооборудования. Оператор ЭВМ работает с электроприборами: компьютером (дисплей, системный блок и т.д.) и периферийными устройствами. Существует опасность электропоражения в следующих случаях:

-при непосредственном прикосновении к токоведущим частям во время ремонта ЭВМ;

-при прикосновении к нетоковедущим частям, оказавшимся под напряжением (в случае нарушения изоляции токоведущих частей ЭВМ);

-при прикосновении с полом, стенами, оказавшимися под напряжением;

-при коротком замыкании в высоковольтных блоках: блоке питания и блоке дисплейной развёртки. (<https://studfile.net/preview/4243236/page:16/>)

Мероприятия по обеспечению электробезопасности электроустановок следующие. Отключение напряжения с токоведущих частей, на которых или вблизи которых будет проводиться работа, и принятие мер по обеспечению невозможности подачи напряжения к месту работы, вывешивание плакатов,

указывающих место работы, заземление корпусов всех установок через нулевой провод, покрытие металлических поверхностей инструментов надежной изоляцией, недоступность токоведущих частей аппаратуры (заклучение в корпуса электропоражающих элементов, заклучение в корпус токоведущих частей).

Выводы по разделу «Социальная ответственность»

В ходе выполнения работы был разработан метод расчета потенциалов межатомного взаимодействия в металлах, с помощью которого полученные данные в работе потенциалы межатомного взаимодействия могут быть использованы для молекулярно-динамического моделирования радиационных процессов в металлах и сплавах. По экономическим затратам вычисления с помощью разработанного метода в несколько раз меньше, чем, к примеру, ручной расчет. Так же одной не мало важной особенностью является экономия времени. Вычисления с помощью ЭВМ по сравнению с традиционным методом позволяет добиться высоких скоростей получения информации о процессах, происходящих в металлах под действием ионизирующего излучения; также этот процесс является экономичным и экологически чистым. Применение ЭВМ позволяет обойтись без ручного расчета, что оказывает колоссальное превосходство в плане получения точных результатов вычислений.

Заключение

В настоящее время активно ведутся работы по воздействию мощных импульсных потоков ионизирующего излучения на различные материалы и изделия. Процесс прохождения ионизирующего излучения, несущего через материю большое количество энергии, оставляет свой след в виде изменений структуры материи. В частности, в области диапазона быстро заряженных частиц и вблизи поверхности твердого тела атомы ионизируются, при интенсивном облучении и потенциалы межатомного взаимодействия меняются, этим обстоятельством невольно пренебрегают, что приводит к снижению точности вычислений. Для изучения поведения материи, частично или полностью ионизированной, необходимо знать потенциалы межатомного взаимодействия.

В настоящее время изучению такой возможности не уделяется должного внимания, так как потенциалы взаимодействия, обычно используемые в машинных моделях, не учитывают изменения свойств твердого тела в условиях облучения. В этой связи требуется метод, позволяющий рассчитывать потенциалы «из первых принципов» с учетом изменения свойств твердотельных структур под действием излучения. Метод, предсказывающий конфигурацию валентных электронов, который может многое сказать о тех свойствах вещества, которые зависят от межатомных связей. Этот метод называется метод псевдопотенциала. Метод псевдопотенциала рассматривает электроны атомного остова и атомное ядро как некую единую частицу без внутренней структуры. Он был главным теоретическим методом исследования свойств поверхностей твердых тел. На поверхностях и границах упорядоченная картина связей существенно нарушается, и возникающее в результате этого перераспределение плотности электронного заряда может оказывать влияние на связи между атомами на глубине в несколько атомных слоев внутри вещества. Ими также были теоретически объяснены свойства границ между металлами и полупроводниками и между двумя полупроводниками.

Хотя в данной работе сделан упор на практическое применение метода, тем не менее изложены по возможности без излишних подробностей и математического обоснования основные положения метода, рассмотрели различные факторы, влияющие на точность вычислений, и только затем перешли к расчетам потенциалов взаимодействия в реальных расплавах.

Таким образом, на основе метода квантовых дефектов был разработан способ расчета параметров псевдопотенциального формфактора для дополнительных ионизированных ионных ядер. На примере алюминия рассчитываются параметры формфактора Хейне-Абаренкова-Анималу, а на его основе получаются парные потенциалы межатомного взаимодействия. Установлено, что в отличие от атома в нормальном заряженном и ионизированном состоянии глубина первого минимума в потенциальной функции уменьшается. Кроме того, в паре ионизированных частиц первый минимум потенциальной функции полностью исчезает, заставляя их падать в отталкивающую ветвь.

Поведение потенциалов межатомного взаимодействия в алюминии в условиях возбуждения электронной подсистемы анализируется на основе псевдопотенциального подхода. При этом локальное увеличение концентрации электронов проводимости вызывает «размягчение» кристаллической решетки. На этот случай тоже рассчитываются потенциалы межатомного взаимодействия.

Получены уравнения состояния для металлов в присутствии дополнительных ионизированных атомов. В частности, встречаются изобары для различных концентраций дополнительных ионизированных состояний.

Изменения потенциалов межатомного взаимодействия, вызванные потоками плазмы и ионизирующего излучения, могут вызывать распыление поверхности в районе дорожки быстро заряженной частицы.

Список используемой литературы

1. Харрисон У. Псевдопотенциалы в теории металлов. — М.: Наука, 1981. — 320 с.
2. Портной К.И., Богданов В.И., Фукс Д.Л. Расчет взаимодействия и стабильности фаз. — Москва: Металлургия, 1981. — 248 с.
3. Гроссе П. Свободные электроны в твердых телах. — М.: Мир, 1982. — 270 с.
4. Ватолин Н.А., Кобелева Р.М., Юрьев А.А., Пастухов Э.А. Зависимость электронных и термодинамических свойств жидких двойных сплавов от выбора псевдопотенциала и структурных данных. — АН СССР: Мет., 1983. — 46-53 с.
5. Ухов В.Ф., Ватолин Н.А., Гельчинский Б.Р., Беспачко В.П., Есин О.А. Межчастичное взаимодействие в жидких металлах. — М.: Наука, 1979. — 195 с.
6. Heine V., Abarenkov J.V. A New Method for the Electronic Structure of Metals. *Phil. Mag.* — 1964. — Vol.9. — P. 451-465.
7. Animaly A.O.E., Heine V., The Screened Model Potential for 25 Elements. *Phil. Mag.* — 1965. — Vol.12. — P. 1249-1270.
8. Animaly A.O.E. Electronic Structure of Transition Metals // *Quantum Defects and Model Potential. Phys. Rev.* — 1973. — Vol.8. — P.3542-3554.
9. Кертис А.Р. Волновые функции Кулона. — М.: ВЦ АН СССР, 1969. — 14 с.
10. Ham F.S. *Solid State Phys. N.Y.* — Vol. 1. — 1955. — P. 127.
11. Moore C.E. *Atomic Energy Levels // Washington National Bureau of Standards.* — Vol. 1. — 1949. — P. 130.
12. Цише Г., Леманн Г., Эшриг Г., Пааш Г., Реннерт П., Таут М. Достижения электронной теории металлов. — М.: Мир, 1984. — 134 с.
13. Ландау ЛД., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика // *Квантовая механика.* — М.: Наука, 1989. — 153 с.
14. Харрисон У. Электронная структура и свойства твердых тел. — М.: Мир, 1989. — 114 с.
15. Кумахов М.А., Комаров Ф.Ф. Энергетические потери и пробеги ионов в твердых телах. — Минск: Издательство БГУ им. В.И. Ленина, 1979. — 320 с.

16. Франк – Каменецкий Д.А. Плазма – четвертое состояние вещества. — М., Атомиздат, 1975. — 159 с.
17. Борин И.П. О действии электронного давления при торможении осколков деления ядер в металлах // Реакторное материаловедение. — М.: ЦНИИ атоминформ, 1978. — 123-129 с.
18. Шалаев А.М., Адаменко А.А. Радиационно – стимулированное изменение электронной структуры. — М.: Атомиздат, 1977. — 176 с.
19. Томпсон М. Дефекты и радиационные повреждения в металлах. — М.: Мир, 1972.
20. Faust W.E., O’Neal T.N., Chaplin R.L. Measurements of the electron-irradiation damage in Mg. Phys. Rev. – 1969. – Vol. 183. – P. 609.
21. Lomer J.H., Niblett D.H. Some effects of Electron Irradiation on the Internal Friction of Cu. Phil. Mag. – 1962. – Vol.7. – P.1121.
22. Lucasson P.G., Wolker R.M. Production and Recovery of Electron-Induced Radiation Damage in a Number of Metals. Phys. Rev. 1962. – Vol.127. – P.485.
23. Nelly H.H., Kufer D.W., Sosin A. Electron Irradiation and Recovery of Tungsten. Phys. State Solids. – Vol.28. – P.675.
24. Nelly H.H., Bauer W. Electron – Irradiation Damage – Rate Measurements in Al. Phys. Rev. – 1966. – Vol.149. – P.535.
25. Rizk R., Vajda P., Maury F. On the Point Defect Production in Electron – Irradiated Molybdenum. Phys. State Solids. – 1972. – Vol.14. – P.135.
26. Wolfenden A.J. Defect production rate at low temperatures. Nucl. Mat. – 1971. – Vol.38. – P.114.
27. Wurm J., Dworshak F., Schuster H. Defect production rate in metals of low – temperature, electron irradiated aluminium. Radiat. Eff. – 1970. – Vol.5. – P.117.
28. Youngblud G., Myhra S., DeFord J.W. Measurements of the threshold displacement energy in Tf and Nb. Phys. Rev. – 1969. – Vol.188. – P.1101.
29. Анисимов С.И., Имас Я.А., Романов Г.С. Действие излучения большой мощности на металлы. — М.: Наука, 1979. — 272 с.

30. Баранов И.А., Мартыненко Ю.В., Цепелевич С.О., Явлинский Ю.Н. Неупругое распыление твердых тел ионами. Успехи физических наук. — М.: Наука, 1988. — 477-511 с.
31. Бакай А.С., Сергеева Г.Г., Фатеев М.П. Влияние гамма - излучения на электронную структуру металлов. Вопросы атомной науки и техники, сер.: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение, вып.3(26). — М.: Наука, 1983. — 32-35 с.
32. Данильченко Б.А., Круликовская М.П. Влияние гамма – облучения на температуру перехода твердая – жидкая фаза. — Украинский физический журнал, 1971.
33. Das G., Mitchell T.E. Recrystallization induced by electron irradiation of deformed nickel. Scripta Met. – 1974. – Vol.8. – P.1135-1139.
34. Sclad P.S., Mitchell T.E. Effects of electron irradiation on precipitation in Al-3,5% Cu. Acta Met. – 1975. – Vol.23. – P.1287-1305.
35. Данильченко Б.А., Круликовская М.П., Чирко Л. И. Процесс разупорядочения латуни под действием γ - излучения. — Успехи физических наук. 1977—565-567 с.
36. Приказ Минтруда России от 15.12.2020 N 903н "Об утверждении Правил по охране труда при эксплуатации электроустановок" (Зарегистрировано в Минюсте России 30.12.2020 N 61957).
37. СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 "Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы" (с изменениями на 21 июня 2016 года).
38. ГОСТ 12.1.029-80 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Средства и методы защиты от шума. Классификация. – М.: ИПК Издательство стандартов, 2001.
39. СанПиН 2.2.4.548-96 «Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений».
40. СП 52.13330.2011 «Естественное и искусственное освещение».

41. ГОСТ 12.1.038-82 Система стандартов безопасности труда (ССБТ).
Электробезопасность. Предельно допустимые значения напряжений
прикосновения и токов (с Изменением N 1). – М.: ИПК Издательство стандартов,
2001.

42. ГОСТ 12.2.003-91 Система стандартов безопасности труда (ССБТ).
Оборудование производственное. Общие требования безопасности. – М.: ИПК
Издательство стандартов, 2001.

Приложение А

(обязательное)

Calculation of interatomic interaction potentials in metals in the presence of radiation-induced ionization processes

Студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОДМ91	Сангыл-оол А.И.		

Руководитель ВКР:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор НОЦ Б. П. Вейнберга	Янин С.Н.	Доктор физико- математических наук		

Консультант – лингвист отделения иностранных языков школы ШБИП

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент отделения иностраных языков ШБИП	Зеремская Ю.А.	Кандидат филол.наук		

Contents

Introduction	106
1 The pseudopotential method	107
2 Obtaining pseudopotential constants from the spectroscopy database	108
3 Interatomic interaction potentials in aluminum for different charge states	111
4 Change in the interatomic forces during the excitation of the electronic subsystem	112
Conclusion.....	117
References	118

Introduction

Currently, work is being actively carried out on the effect of powerful pulsed ionizing radiation fluxes on various materials and products. The process of passing ionizing radiation, which carries a large amount of energy, through the substance, leaves its mark in the form of changes in the structure of the substance. In particular, in the region of the track of a fast charged particle, as well as near the surface of a solid body, ionized atoms arise under intense irradiation, the interaction potentials of which with the surrounding particles change significantly, but this circumstance is inadvertently neglected, which leads to the «loss» of some defects and a decrease in the accuracy of calculations. To study the behavior of partially or completely ionized matter, it is necessary to know the corresponding potentials of interatomic interaction.

1 The pseudopotential method

Currently, the study of this possibility is not given due attention, since the interaction potentials commonly used in machine models do not take into account changes in the properties of a solid under irradiation conditions. In this regard, we need a method that allows us to calculate potentials “from the first principles”, taking into account changes in the properties of solid-state structures under the influence of radiation. We use a method that predicts the configuration of valence electrons, which can say a lot about the properties of matter that depend on interatomic bonds. Valence electrons are the outer, least strongly bound electrons that form chemical bonds with other atoms. For example, in a hydrogen atom, the orbit configuration of a single electron that is valence can be calculated from its potential energy. In the case of more complex atoms, a mathematical expression is introduced for each valence electron, which determines the configuration of the orbit, such an expression is the generalized potential energy. This method is called the pseudopotential method. The pseudopotential method considers the electrons of the atomic core and the atomic nucleus as a single particle without an internal structure.

2 Obtaining pseudopotential constants from the spectroscopy database

To calculate the interatomic interaction potentials, we used the Heine – Abarenkov – Animalu model pseudopotential, which characterizes the interaction energy of the conduction electron with the ionic backbone. The E_{nl} energy levels of a single electron in the field of positive ions with electron shells similar to the spherically symmetric electron shells of inert gases, in particular Na^+ , Mg^{2+} , Al^{3+} , Si^{4+} , P^{5+} , S^{6+} , Cl^{7+} , satisfy the relation [1]:

$$E_{nl} = -\frac{Z^2}{(n - \delta_{nl})^2} + \Delta_{nl}, \quad (2.1)$$

where Z - is the charge of the ion core; δ_{nl} , Δ_{nl} - are quantum defects that characterize the deviation of the atomic potential of a given configuration of inert gas shells from the Coulomb potential due to the charge $|Ze|$.

As can be seen from the figure, the ratio of the value of the spectroscopic terms of the considered atomic series to the square of the charge of the ion core is well described by a linear dependence.

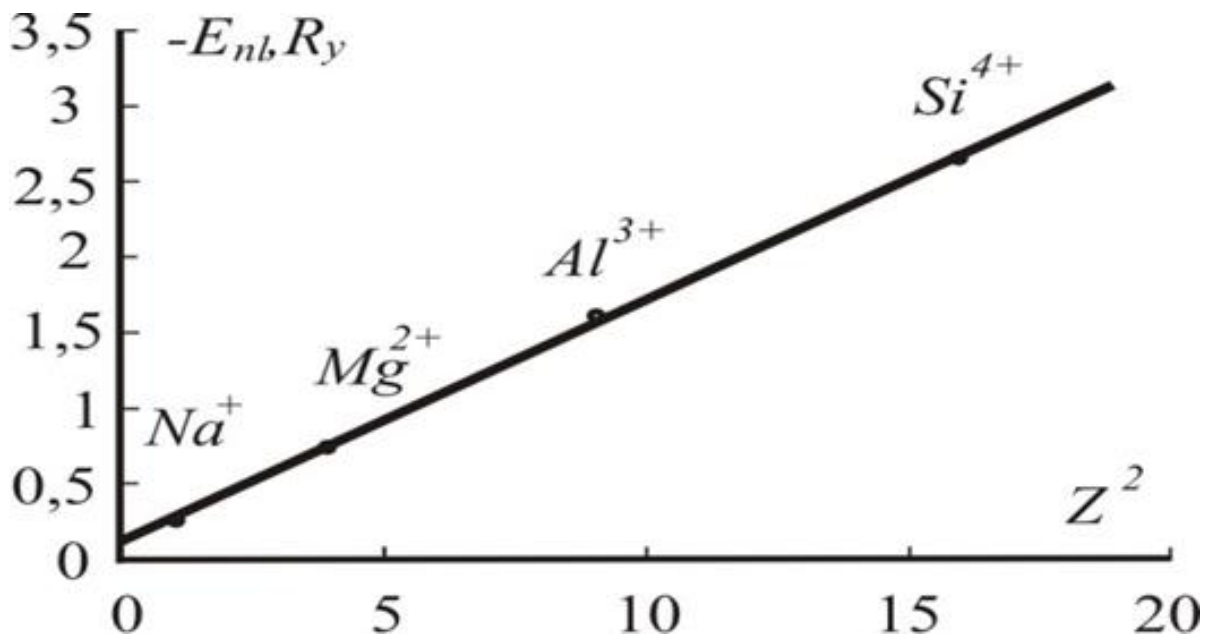


Figure 1-Dependence of the energy levels of E_{3p} electrons in the field of positive ions on the square of the charge of the ion core

It turned out that there are similar dependencies for additionally ionized cores (Fig. 2). The following series will be implemented here: Na^{2+} , Mg^{3+} , Al^{4+} , Si^{5+} , P^{6+} , S^{7+} , Cl^{8+} . Based on this empirical law, we determined the parameters of the form factor for the additional ionized frames, associating them with the energies $\varepsilon_{nl} = E_{nl} - \Delta_{nl}$. The procedure was performed in a similar manner to that used for transition metals.

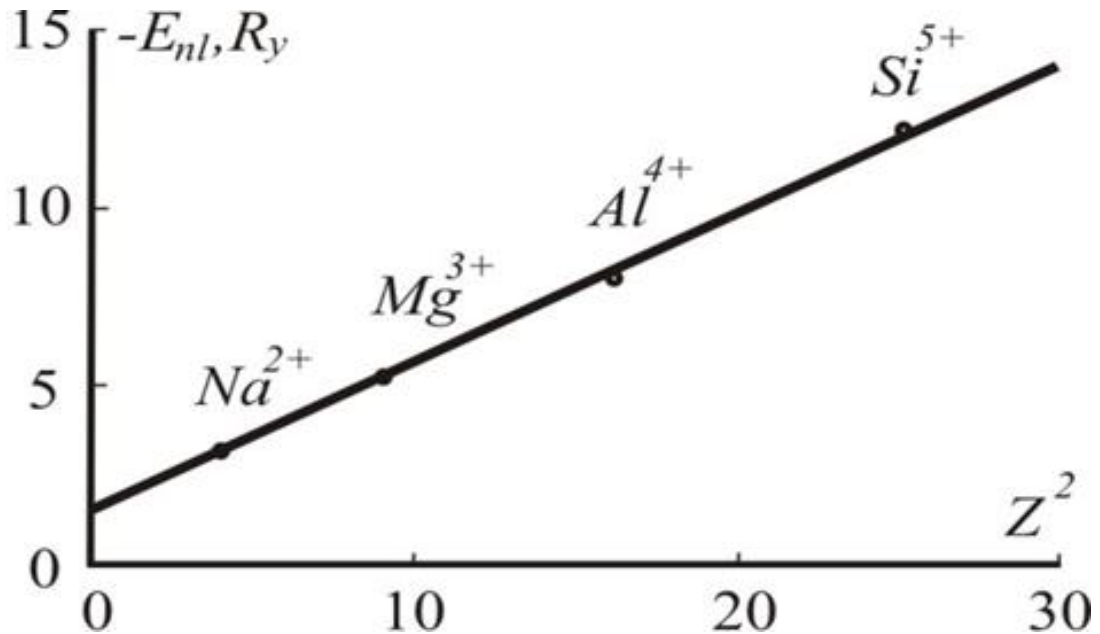


Figure 2-Dependence of the energy levels of E_{2p} electrons in the field of positive ions on the square of the charge of the ion core

By equating the logarithmic derivatives of the solutions of the radial wave equation with the model potential describing the electron motion, the parameters characterizing the depth of the potential well A_l were found [2].

The values of the E_{nl} terms were determined from the tables of spectroscopic data. The A_l parameters are a function of the energy $\varepsilon = \varepsilon_{nl}$ at a fixed l and can only be accurately determined for those energies that correspond to the observed lines in the electron emission spectra in the core potential. The function $A_l(\varepsilon_{nl})$ is chosen in such a way that the model potential gives eigenvalues that coincide with ε_{nl} . Therefore, A_l is first determined for as many energy values as there are experimental lines, and then linear interpolation or extrapolation to the Fermi energy is performed. The procedure for

calculating the parameters of the pseudopotential form factor is described in more detail in in the paper written by Krivobokov V. P., Yanin S. N. [3].

An important value used in the calculations of the interaction potential is the radius of the ion core R_c , which was calculated from the conditions of equality of the logarithmic derivatives of the electron wave functions inside and outside the core.

The table compares the parameters of the model potential for aluminum in the normal charge state, taken from the literature and obtained by us for the additional ionized core. All dimensional quantities are represented in atomic units.

Table 1-Model potential parameters

Z	A_0	A_1	A_2	R_m	R_c	α
3	1,38	1,64	1,92	2	1,08	0,024
4	1,45	1,756	1,46	2	1,05	0,022

Here α - is a parameter that characterizes the effective charge of the conduction electron, R_m - is the model radius.

The form factor constants of the Heine – Abarenkov – Animalu pseudopotential, presented in the table, are the main source data for calculating the interatomic interaction potentials. On their basis, it is possible to find potential functions for ions with three-and four-fold ionization. The parameters for higher-charge ions can be found in a similar way.

3 Interatomic interaction potentials in aluminum for different charge states

Figure 3 shows the interatomic interaction potentials in aluminum calculated from the data in Table 1 for different charge states. The calculation is performed for the case when the concentration of ionized atoms is small and, consequently, the concentration of conduction electrons does not differ from the usual one.

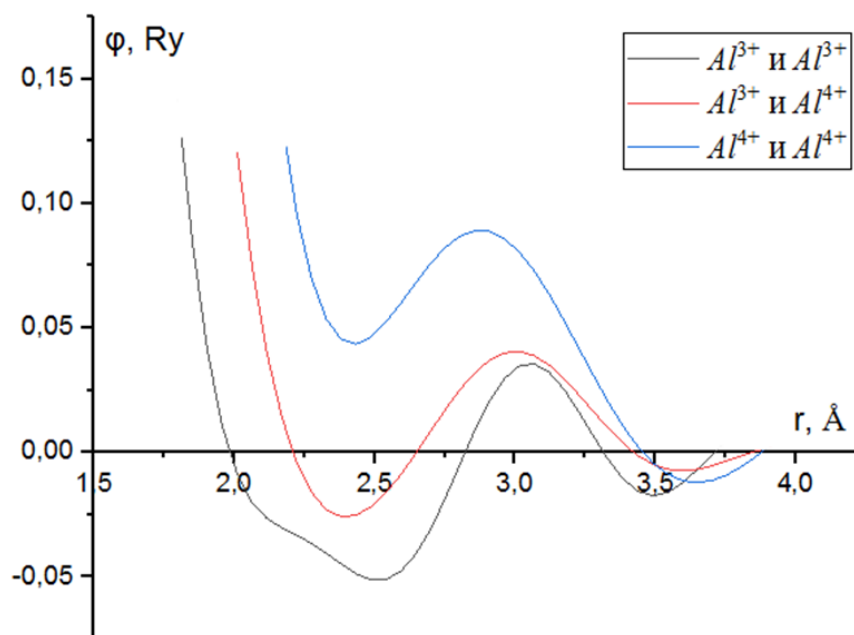


Figure 3-Interatomic interaction potentials for aluminum:

- 1 - for two three-charge ions;
- 2 - for trivalent and quadrivalent ions;
- 3 - for two quadrivalent ions

As can be seen from the figure, ionization leads to the fact that the depth of the first minimum of the potential function, corresponding to the distance between the nearest neighbors for trivalent and quadrivalent ions, is significantly reduced compared to the case of normal three-charged states. Moreover, for a pair of four-charged particles, the first minimum disappears altogether. The atoms fall on the repulsion branch of the interaction potential, as a result of which the crystal lattice passes into a non-equilibrium state.

4 Change in the interatomic forces during the excitation of the electronic subsystem

A significant part of the energy of a fast charged particle in a metal is spent on the ionization of atoms and the excitation of conduction electrons. Electrons accelerating in the field of a charged particle are decelerated, transferring their energy to the conduction electrons in a space bounded by a radius of about ten interatomic distances from the track. For example, in the region of the trajectory of the fission fragment, the electron energy density reaches 10^{12} erg / cm³, which corresponds to an increase in the energy of free electrons above the Fermi energy of aluminum by about half.

Although the fact of changing the nature of the interatomic interaction during the excitation of the electronic subsystem is not in doubt, experimental observation of it is a very difficult task. In [4], an analysis of this phenomenon is proposed on the basis of experimental data on the threshold energy of the displacement of an atom from the equilibrium position E_d , which is determined by the change in the value of a physical quantity that depends on the concentration of point defects (for example, electrical conductivity), with a changing energy of incident particles.

The offset threshold was determined in a large number of works. In different experiments, different values were obtained for the same elements, even for polycrystalline materials. A comparison of the experimental results indicates the existence of a certain dependence of the E_d value on the energy range of the bombarding particles.

The analysis of the works listed in [4] allowed us to conclude that the threshold displacement energy is lower the lower the lower limit of the energy of the bombarding particles used (in the considered energy range of 0.1 – 3 MeV). The peculiarities of the behavior of E_d as a function of the energy of the incident particle can be explained by a change in the nature of the interatomic interaction in the metal under the conditions of excitation of the electronic subsystem.

During the movement, a fast charged particle loses energy by transferring it to the free electrons and the electrons of the ion core, and when it collides with the core ion,

directly to it. We can assume that the excitation wave moves in front of the accelerated particle. Thus, even before the collision with a fast charged particle, the primary knocked-out atom and the surrounding ions are in a state other than equilibrium.

In order to find out whether the existence of such a region is possible, consider the times of energy redistribution in the metal. It is known that the characteristic relaxation time of the excitation of an individual electron is on the order of 10^{-15} s, and the characteristic time of the transfer of the excitation from the electron gas to the ion subsystem is 10^{-12} s (the characteristic time of the change in the lattice temperature from the moment of the appearance of the fast charged particle track, associated with the exchange of energy between Fermi electrons and ion cores). The time of establishing the equilibrium between the electron gas and the lattice is about 10^{-12} s. Thus, if the period of the jump of an atom from one equilibrium position to another is inversely proportional to the Debye frequency, which is about 10^{-13} s, then during the existence of the excited state, a sufficiently large number of movements of ions in the environment of electrons with increased energy is possible.

In [4], the threshold displacement energies obtained by extrapolation are presented in comparison with the graphs of energy losses of primary electrons for ionization and excitation of a free electron gas. In experiments to determine the displacement threshold, the target thickness is much smaller than the free path of the electron, so the energy absorbed by the electrons is proportional to the specific energy loss. There is a correlation between the loss of electronic braking and the value of the displacement threshold. The more energy is transferred to the electronic subsystem, the lower the experimentally observed value of the displacement threshold. Phenomena associated with an abnormally high sputtering coefficient by fission fragments are observed. The local heating of the electronic subsystem, which leads to a change in the forces of interatomic interaction, was considered as one of the reasons. In addition, it was experimentally found that gamma and electron radiation of relatively low intensity have a significant effect on phase transformations in metals and alloys [4]. In particular, under the action of gamma radiation, the ordering temperature of the β - Cu – Zn alloy is shifted. It was hypothesized that gamma radiation causes a “softening” of the crystal

lattice, that is, a decrease in the elastic modulus, which is manifested in a shift in the ordering temperature. Since the density of point defects created by radiation is extremely small and the observed effect depends not so much on the dose as on the intensity of irradiation, it can be assumed that this phenomenon is due to the deviation of the electron distribution function from the thermodynamically equilibrium one due to the effect of radiation.

Thus, an increase in the temperature of the conduction electrons in metals leads to a change in the interatomic interaction potentials and, consequently, to a decrease in the potential barriers to the movement of ions. The nature of this phenomenon lies, in our opinion, in the strengthening of the shielding of the ion cores by Fermi electrons.

In [5], an attempt is made to calculate the electron distribution function in intrinsitive metals under the influence of gamma radiation on the basis of the kinetic equation and to calculate the change in the shear modulus of the metal in a pseudopotential approximation. The deviation of the electron distribution function from the Fermi function was directly taken into account in the change of the polarization operator through some additive, which leads to the decompensation of the direct Coulomb interaction between the ions by means of conduction electrons. Then, the elastic modulus was calculated based on changes in the nature of interatomic interactions. It was concluded that the change in the elastic modulus is small, due to the small number of over-Fermi electrons.

We attempted to find out the effect of the thermal blurring of the Fermi surface on the interatomic interaction potentials by direct calculations. To this end, we have modernized the Lindhard function obtained in the Fermi sphere approximation:

$$\begin{aligned} \chi(q) &= \frac{2}{N_a} \sum_{\vec{k} < \vec{k}_F} (\vec{k}^2 - |\vec{k} + \vec{q}|^2)^{-1} = \\ &= \frac{2\Omega_a}{(2\pi)^3 N_a} \int_0^{k_F} 2\pi k^2 dk \int_0^\pi \frac{\sin\theta d\theta}{-2kq\cos\theta - q^2}, \end{aligned} \quad (4.1)$$

where N_a - is the concentration of atoms, and Ω_a - is the volume. per atom.

In the integrand (2), the function of the distribution of the conduction electrons over the pulses was included, taking into account the temperature dependence of the concentration of the conduction electrons:

$$\chi(q) = \frac{C\Omega}{(2\pi)^2 q} \int_0^{\infty} \frac{k}{1 + \exp\left(\frac{k^2/2 - \varepsilon_F}{k_B T}\right)} \ln \left| \frac{q + 2k}{q - 2k} \right| dk, \quad (4.2)$$

where C - is the normalizing constant equal to

$$C = \varepsilon_F \left[k_B T \ln\left(1 + \exp \frac{\varepsilon_F}{k_B T}\right) \right]^{-1}. \quad (4.3)$$

Here k_B - is the Boltzmann constant, T - is the temperature of the electron gas.

Calculations of the interatomic interaction potentials with this function have shown that the temperature has little effect on the shielding properties of the conduction electrons. At the same time, the shielding properties strongly depend on their concentration. Figure 4 shows the interatomic interaction potentials for the normal state and for the case when the concentration of valence electrons is 20% higher than normal (in this case, the electron momentum on the Fermi surface increases by 20%). Such a local increase in the concentration can occur in the region of the track of a fast charged particle and lead to a “softening” of the crystal lattice.

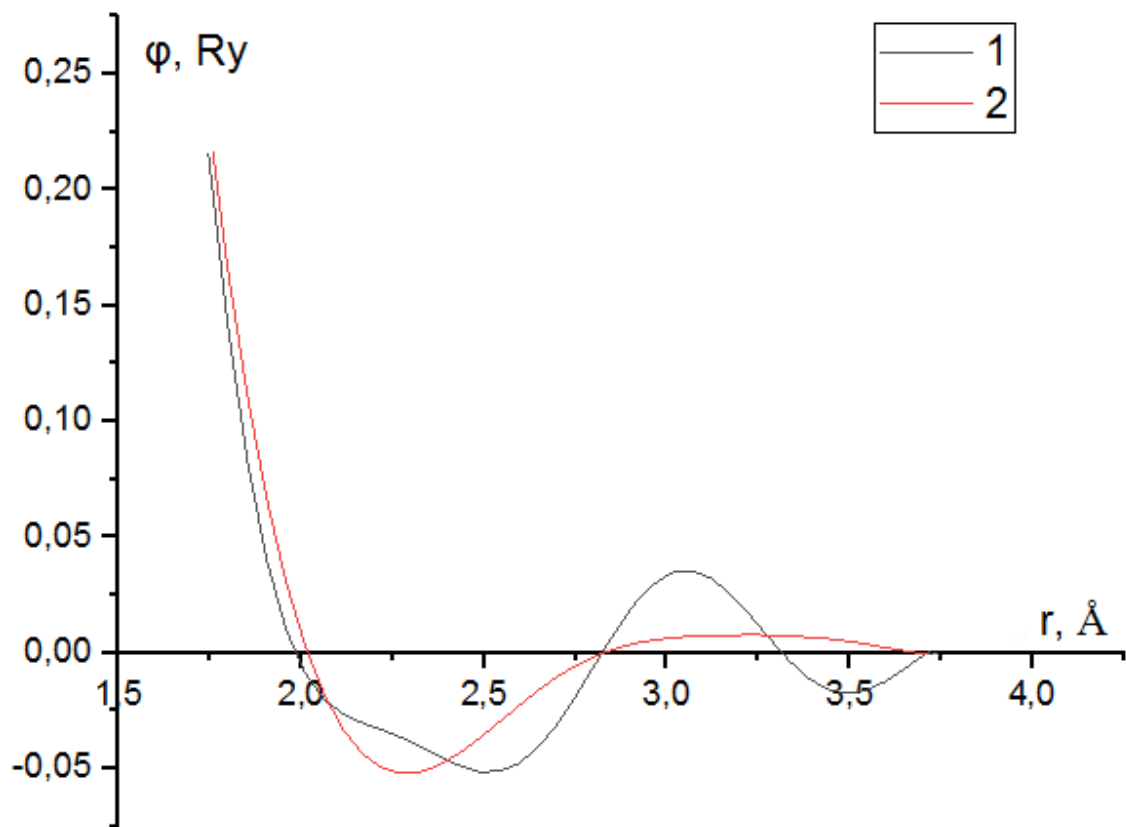


Figure 4-Interatomic interaction potentials for aluminum: 1 - in the normal state; 2 - the momentum of the conduction electrons exceeds the Fermi momentum by 20%


Conclusion

Thus, on the basis of the quantum defect method, a method for calculating the parameters of the pseudopotential form factor for additionally ionized ion cores has been developed [7]. The parameters of the Heine-Abarenkov-Animalu form factor are calculated and based on them, the paired interatomic interaction potentials for ion cores of different charges are obtained [8]. The behavior of the interatomic interaction potentials under the conditions of excitation of the electronic subsystem is analyzed. It is found that the thermal blurring of the Fermi surface does not lead to a significant change in the interatomic interaction forces. At the same time, a local increase in the concentration of conduction electrons causes a “softening” of the crystal lattice, when the configuration with a smaller interatomic distance becomes equilibrium. The interatomic interaction potentials for this case are calculated. The change in the interatomic interaction potentials caused by ionizing radiation causes various physical phenomena, such as the intensification of diffusion processes, sputtering of the surface from the track region of a fast charged particle, etc. [6]. These phenomena can be studied by mathematical modeling, in particular, by the method of molecular dynamics [9].

References

1. Yanin S. N. The calculation method of interaction between metal atoms under influence of the radiation// IOP Conference Series: Materials Science and Engineering .—2015. — Vol. 81 : Radiation-Thermal Effects and Processes in Inorganic Materials, 5 p.
2. Krivobokov V.P., Yanin S.N. Matter states equations under strong radiation // Eurasian Physical Technical Journal. 2005 Vol. 2, N 2(4). P. 39-46.
3. Кривобоков В.П., Янин С.Н. Влияние ионизации на межатомное взаимодействие в металле. – Известия РАН, серия физическая, 1992, т. 56, №6, с. 12-16.
4. Шалаев А.М., Адаменко А.А. Радиационно – стимулированное изменение электронной структуры. М.: Атомиздат, 1977.
5. Бакай А.С., Сергеева Г.Г., Фатеев М.П. Влияние гамма - излучения на электронную структуру металлов. // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. 1983. Вып.3(26). С. 32 – 35.
6. Блейхер Г.А., Кривобоков В.П., Янин С.Н. Механизмы диссипации энергии в металлической мишени при воздействии мощных ионизирующих излучений// Проблемы физики высоких плотностей энергии: сборник докладов международной конференции "XVIII Харитоновские тематические научные чтения", 19-22 апреля 2016 года, Саратов: / Российский федеральный ядерный центр - Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики (РФЯЦ-ВНИИЭФ) . — 2017 . — Т. 1 , С. 301-306 .
7. Faust W.E., O'Neal T.N., Chaplin R.L. Measurements of the electron irradiation damage in Mg. Phys. Rev. – 1969. – Vol. 183. – P. 609.
8. Lomer J.H., Niblett D.H. Some effects of Electron Irradiation on the Internal Friction of Cu. Phil. Mag. – 1962. – Vol.7. – P.1121.
9. Lucasson P.G., Wolker R.M. Production and Recovery of Electron Induced Radiation Damage in a Number of Metals. Phys. Rev. 1962. – Vol.127. – P.485.

ИРКУТСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ



ГРАМОТА

ЗА МЕСТО

ВРУЧАЕТСЯ


Сангыл-оол Анзе Игоревна

В КОНКУРСЕ
«НА ОСТРИЕ НАУКИ»
В СЕКЦИИ: «ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА»

С ДОКЛАДОМ НА ТЕМУ: *Влияние гомогенизирующего излучения*

НАУЧНЫЙ РУКОВОДИТЕЛЬ: *Яшин Сергей Николаевич, д.ф.м.н.*

ПРОРЕКТОР ПО НАУЧНОЙ РАБОТЕ



[Signature] А. М. КОНОНОВ
10.03.2021

ИРКУТСК 2021



Грамота

Награждается

Сангыл-оол Аиза Игоревна

За участие во всероссийском конкурсе
«На острие науки»
в рамках конференции

"Прикладные исследования в области физики"

В секции: «Физика твердого тела»

С докладом: «Влияние ионизирующего излучения на
межатомное взаимодействие в металлах»

**Научный руководитель: Янин Сергей Николаевич,
д.ф-м.н., профессор**

Проректор по научной работе



 А.М. Кононов

10 марта 2021 г.