

Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Школа Инженерная школа ядерных технологий

Направление подготовки (специальность) 03.03.02 «Физика»

Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
Диффузия водорода в альфа-фазе титана: расчёты из первых принципов

УДК 669.295:669.788.019.234

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б42	Ши Юй		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент ОЭФ ИЯТШ ТПУ	Святкин Леонид Александрович			

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурс эффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Черепанова Наталья Владимировна	Кандидат философских наук		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Ларионова Екатерина Владимировна	Кандидат химических наук		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Зав. кафедрой	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Руководитель ОЭФ	Лидер Андрей Маркович	д.т.н.		

Томск – 2018 г.

Запланированные результаты обучения по программе

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

	деятельности.	
<i>Профессиональные компетенции</i>		
Р6	<p><u>Научно-исследовательская деятельность</u></p> <p>Проводить научные теоретические и экспериментальные исследования в областях: материаловедения, атомной и ядерной физики, водородной энергетики, физики плазмы с помощью современной приборной базы с использованием специализированных знаний физики и освоенных профильных дисциплин.</p>	Требования ФГОС3+ (ПК-1, ПК-2)
Р7	<p><u>Научно-инновационная деятельность</u></p> <p>Применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований, а также профессиональные знания и умения в результате освоения профильных дисциплин для проведения физических исследований в инновационных областях науки, используя современные методы обработки, анализа и синтеза информации.</p>	Требования ФГОС3+ (ПК-3, ПК-4, ПК-5)
Р8	<p><u>Организационно-управленческая</u></p> <p>Использовать на практике теоретические основы организации и планирования физических исследований, участвовать в подготовке и составлении научной документации по установленной форме, понимать и применять на практике методы управления в сфере природопользования</p>	Требования ФГОС3+ (ПК-6, ПК-7, ПК-8)
Р9	<p><u>Педагогически-просветительская</u></p> <p>Проектировать, организовывать, анализировать педагогическую деятельность, владеть последовательностью изложения материала с использованием междисциплинарных связей физики с другими дисциплинами, участвовать в информационно-образовательных мероприятиях по пропаганде и распространению научных знаний</p>	Требования ФГОС3+ (ПК-9)

Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Школа базовой инженерной подготовки

Направление подготовки (специальность) 03.03.02 «Физика»

Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

УТВЕРЖДАЮ:

Руководитель ООП

(Подпись) _____ (Дата) Лидер А.М.
(Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ

на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Бакалаврской работы

Студенту:

Группа	ФИО
150Б42	Ши Юй

Тема работы:

Диффузия водорода в альфа-фазе титана: расчёты из первых принципов	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	02.02.2018 г., 617/с

Срок сдачи студентом выполненной работы:

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе

*(наименование объекта исследования или проектирования;
производительность или нагрузка; режим работы
(непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья
или материал изделия; требования к продукту, изделию или
процессу; особые требования к особенностям функционирования
(эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности
эксплуатации, влияния на окружающую среду; энергозатратам;
экономический анализ и т. д.).*

Атомная структура системы титан-водород,
диффузия водорода в решетке альфа-титана.

<p>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</p> <p><i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i></p>	<ul style="list-style-type: none"> - Обзор литературных источников с целью выяснения влияния водорода на атомную и электронную структуру титана; - Определение из первопринципных расчетов атомной структуры системы титан-водород при различной концентрации водорода в решетке титана; - Расчет из первых принципов профилей диффузионных барьеров и коэффициентов диффузии водорода в решетке альфа-титана; – Анализ полученных результатов; – Финансовый менеджмент; ресурсоэффективность и ресурсосбережение; – Социальная ответственность; – Заключение.
<p>Перечень графического материала <i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i></p>	<ul style="list-style-type: none"> – Зависимость теплоты образования системы титан-водород от соотношения атомов водорода и титана – Профили диффузионных барьеров для атома водорода в решетке альфа-титана – Температурная зависимость коэффициентов диффузии водорода в альфа-титане
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы	
Раздел	Консультант
Социальная ответственность	Ларионова Екатерина Владимировна, доцент Отделение контроля и диагностики
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Черепанова Наталья Владимировна, доцент Школа инженерного предпринимательства, Отделение социально-гуманитарных наук
<p>Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:</p>	
<ol style="list-style-type: none"> 1. Структура и свойства системы титан-водород 2. Методика расчета 3. Система Ti–H: результаты и обсуждение 4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение 5. Социальная ответственность 	

<p>Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику</p>	<p>01.03.2017</p>
--	-------------------

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент ОЭФ ИЯТШ ТПУ	Святкин Леонид Александрович			

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б42	Ши Юй		

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

Студенту:

Группа	ФИО
150Б42	Ши Юй

Школа	Инженерная школа ядерных технологий	Отделение школы	Отделение экспериментальной физики
Уровень образования	Бакалавр	Направление/специальность	03.03.02 Физика

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

<i>1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	<i>Определение стоимости ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых информационных и человеческих</i>
<i>2. Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	<i>Знакомство и отбор норм и нормативов расходования ресурсов</i>

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

<i>1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения</i>	<i>Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ</i>
<i>2. Планирование и формирование бюджета научных исследований.</i>	<i>Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет.</i>
<i>3. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования</i>	<i>Определение ресурсной, финансовой, экономической составляющей</i>

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. Оценка конкурентоспособности технических решений
2. Матрица SWOT
3. Альтернативы проведения НИ
4. График проведения и бюджет НИ
5. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИ

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	20.05.2018
---	------------

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Черепанова Н. В.	к.ф.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б42	Ши Юй		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА

«СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
150Б42	Ши Юй

Школа	Инженерная школа ядерных технологий	Отделение школы	Отделение экспериментальной физики
Уровень образования	Бакалавр	Направление/специальность	03.03.02 Физика

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

<p>1. Описание рабочего места (рабочей зоны, технологического процесса, механического оборудования) на предмет возникновения:</p> <ul style="list-style-type: none"> - вредных проявлений факторов производственной среды (метеоусловия, вредные вещества, освещение, шумы, вибрации, электромагнитные поля, ионизирующие излучения) - опасных проявлений факторов производственной среды (механической природы, термического характера, электрической, пожарной и взрывной природы) - негативного воздействия на окружающую природную среду (атмосферу, гидросферу, литосферу) - чрезвычайных ситуаций (техногенного, стихийного, экологического и социального характера) 	<p>1. При работе на компьютере на работников возможно воздействие следующих вредных факторов:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Микроклимат; - Электромагнитные поля - Статическое электричество - Шум - Недостаточное освещение <p>А также опасных факторов:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Электрическое напряжение; - Воздействие высокой температуры;
--	---

<p>2. Знакомство и отбор законодательных и нормативных документов по теме</p>	<p>Документы по воздействию ПЭВМ:</p> <ul style="list-style-type: none"> - инструкция № 2 -08 по охране труда при работе с ПЭВМ и ВДТ; СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03. Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам - организация работы; ГОСТ Р 50948 -01. Средства отображения информации индивидуального пользования. Общие эргономические требования - требования безопасности; ГОСТ Р 5094 -01. Средства отображения информации индивидуального пользования. Методы измерений и оценки эргономических параметров и параметров безопасности; ГОСТ Р 50923 -96. Рабочее место оператора. Общие эргономические требования и требования к производственной среде. Методы измерения. <p>Микроклимат:</p>
---	--

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

<p>1. Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности:</p> <ul style="list-style-type: none"> - физико-химическая природа вредности, её связь с разрабатываемой темой; - действие фактора на организм человека; - приведение допустимых норм с необходимой размерностью (со ссылкой на соответствующий нормативно-технический документ); - предлагаемые средства защиты (сначала 	<p>1. Характеристика факторов изучаемой производственной среды, описывающих процесс взаимодействия человека с окружающей производственной средой:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Воздействие электрического напряжения на организм человека; - Воздействие высокой температуры на организм человека; - Воздействие химических веществ на дыхательные пути и организм человека в
---	--

коллективной защиты, затем индивидуальные защитные средства)	целом; – Утечка газа из баллона; – Микроклимат.
2. Анализ выявленных опасных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности – механические опасности (источники, средства защиты); – термические опасности (источники, средства защиты); – электробезопасность (в т.ч. статическое электричество, молниезащита – источники, средства защиты); – пожаровзрывобезопасность (причины, профилактические мероприятия, первичные средства пожаротушения)	2. Анализ опасных факторов проектируемой производственной среды: – электробезопасность (непосредственное питание установки от сети постоянного тока 220 В; средства защиты, предусмотренные конструкцией установки, соблюдение правил и инструкций по электробезопасности при работе); – термическая опасность (печь нагрева образцов; защита специальной конструкцией установки, изолирующие слои, соблюдение правил безопасности и эксплуатации установки); – пожаровзрывобезопасность (баллоны с газом; соблюдение правил безопасности и эксплуатации установки).
Перечень графического материала:	
При необходимости представить эскизные графические материалы к расчётному заданию (обязательно для специалистов и магистров)	

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	24.05.2018
---	------------

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОКД ТПУ	Ларионова Е. В.	К.Х.Н		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б42	Ши Юй		

Министерство образования и науки Российской Федерации
 федеральное государственное автономное образовательное учреждение
 высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
 ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Школа Инженерная школа ядерных технологий

Уровень образования бакалавриат

Направление подготовки 03.03.02 «Физика»

Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

Период выполнения _____

Форма представления работы:

бакалаврская работа

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

**КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН
 выполнения выпускной квалификационной работы**

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
01.03.2017	Аналитический обзор литературы	15
02.10.2017	Исследование атомной структуры системы титан-водород	15
19.02.2018	Исследование диффузионных барьеров и коэффициентов диффузии водорода в альфа-фазе титана	20
30.04.2018	Анализ результатов	15
24.05.2018	Социальная ответственность	15
20.05.2018	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	15
25.05.2018	Заключение	5

Составил преподаватель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент ОЭФ ИЯТШ ТПУ	Святкин Леонид Александрович			

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Руководитель ОЭФ	Лидер Андрей Маркович	д.т.н.		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 87 с., 16 рис., 22 табл., 31 источник.

Ключевые слова: система титан-водород, первопринципные расчеты, теплота образования, диффузия водорода, коэффициент диффузии.

Объектами исследования являются атомная структура системы титан-водород и процесс диффузии водорода в альфа-фазе титана.

Цель работы – теоретическое исследование профилей диффузионных барьеров и температурной зависимости коэффициентов диффузии водорода в α -фазе титана. Расчеты выполняются в рамках теории функционала электронной плотности с использованием метода псевдопотенциала.

В процессе исследования проводились: оптимизация атомной структуры и релаксация решетки системы Ti–H; определение всех возможных диффузионных скачков атома H в решетке твердых растворов $Ti_{16}H$ и $Ti_{16}H_2$; расчет профилей диффузионных барьеров для атома водорода в решетке твердых растворов $Ti_{16}H$ и $Ti_{16}H_2$; расчет температурной зависимости коэффициентов диффузии водорода в твердом растворе $Ti_{16}H$.

В результате исследования получено, что минимальный барьер диффузии соответствует переходу из одного тетраэдрического междоузлия в другое, осуществляемому вдоль гексагональной оси (величина этого барьера $\sim 0,20$ эВ). К основным способам миграции атома водорода также относятся диффузионные скачки между тетраэдрическими и октаэдрическими, а также между октаэдрическими междоузлиями (величина барьеров для этих скачков

варьируется в пределах 0,45-0,75 эВ). Коэффициенты диффузии водорода в α -титане вдоль кристаллографических направлений [100] и [001] практически не различаются и при комнатной температуре составляют $\sim 10^{-15}$ м²/с.

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

Область применения: результаты исследований могут быть использованы для прогнозирования и описания процессов диффузии водорода в титане и сплавах на его основе при разработке защитных покрытий от коррозии конструкционных материалов.

Экономическая эффективность/значимость работы заключается в первопринципном изучении особенностей взаимодействия водорода с титаном на микроскопическом уровне, что может быть использовано в дальнейшем для разработки и создания защитных покрытий конструкционных материалов .

В будущем планируется проведение расчетов из первых принципов упругих и электрических свойств титана в зависимости от концентрации водорода в нем.

Оглавление

Глава I Структура и свойства системы титан-водород.....	18
1.1 Структура и свойства титана.....	18
1.2 Система титан-водород.....	19
1.3 Водородное охрупчивание титана.....	20
1.4 Диффузия атомов в системе TiH_x	23
Глава II Методика расчета.....	26
2.1 Основные приближения.....	26
2.1.1 Адиабатическое приближение.....	27
2.1.2 Одноэлектронное приближение.....	28
2.1.3 Зонное приближение.....	30
2.2 Метод расчета.....	31
Глава III. Система $Ti-N$: результаты и обсуждение.....	33
3.1 Расчетные ячейки.....	33
3.2 Параметры решетки.....	37
3.3 Теплота образования.....	39
3.4 Направления диффузионных скачков.....	42
3.5 Профили диффузионных барьеров.....	46
3.6 Коэффициент диффузии.....	50
Глава 4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение.....	56
4.1 Планирование научно-исследовательских работ.....	56
4.1.1 Структура работ в рамках научного исследования.....	56
4.1.2 Определение трудоемкости выполнения НИОКР.....	58

4.1.3	Разработка графика проведения научного исследования.....	59
4.2	Бюджет научно-технического исследования (НТИ).....	63
4.2.1	Расчет материальных затрат НТИ.....	63
4.2.2	Расчет затрат на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ.....	64
4.2.3	Основная и дополнительная заработная плата исполнителей темы.....	65
4.2.4	Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления).....	68
4.2.5	Накладные расходы.....	69
4.2.6	Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта.	70
Глава 5.	Социальная ответственность.....	70
5.1	Техногенная безопасность.....	71
5.1.1	Микроклимат.....	72
5.1.2	Электромагнитные поля.....	73
5.1.3	Шум.....	74
5.1.4	Недостаточное освещение.....	76
5.1.5	Электрическое напряжение.....	78
5.1.6	Воздействие высокой температуры.....	79
5.2	Региональная безопасность.....	79
5.3	Организационные мероприятия обеспечения безопасности.....	79
5.4	Особенности законодательного регулирования проектных решений.....	80
	Заключение.....	83
	Список использованных источников.....	85

Введение

В течение последних десятилетий исследование системы титан-водород представляет научный интерес, поскольку Ti считается одним из наиболее перспективных материалов для хранения водорода, что обусловлено его высоким сродством к водороду (H). Сплавы на основе титана используются в качестве конструкционных материалов в химической и авиа-космической промышленности и в процессе эксплуатации подвергаются воздействию водородом [1]. На сегодняшний день система титан-водород достаточно широко изучена.

Хорошо известно, что добавление H в Ti существенно влияет на его микроструктуру, а также стабильность. Понимание взаимодействия H с различными кристаллическими структурами Ti (ОЦК, ГЦК, ГПУ) на микроскопическом уровне очень важно для контроля и предсказания свойств системы Ti-H при различных условиях эксплуатации.

Задача контролирования и предсказания свойств веществ на основании знания химического состава давно привлекает исследователей. Однако еще в 1929 году П. Дирак писал, что хотя теоретический фундамент для этого уже создан, решение уравнений еще крайне сложно [2]. Проводимые в данной работе расчеты основаны на использовании метода функционала плотности с разложением волновых функций по плоским волнам и описанием электронной структуры атомов с помощью псевдопотенциалов: параметры кристаллической структуры (параметры решетки, положения атомов в элементарной ячейке),

энергии различных фаз, фононный спектр, зонная структура, тензоры пьезоэлектрических и упругих модулей.

Целью данной работы является теоретическое исследование профилей диффузионных барьеров и температурной зависимости коэффициентов диффузии водорода в α -фазе титана. Все расчеты выполняются в рамках функционала электронной плотности с использованием метода псевдопотенциалов, реализованым в пакете программ ABINIT [3].

Для выполнения поставленной цели были решены следующие задачи:

1. Ознакомиться с процессами, происходящими в титане при растворении в нем водорода;
2. Изучить метод псевдопотенциала и особенности его применения;
3. Провести оптимизацию атомной структуры и релаксацию решетки системы Ti–H.
4. Рассчитать теплоты образования системы Ti–H.
5. Вычислить профили диффузионных барьеров для атома водорода в решетке твердых растворов $Ti_{16}H$ и $Ti_{16}H_2$.
6. Рассчитать температурную зависимость коэффициентов диффузии водорода в твердом растворе $Ti_{16}H$.
7. Выявить особенности профилей диффузионных барьеров и температурной зависимости коэффициентов диффузии водорода в альфа-фазе титана.

Научная новизна работы заключается в следующем: впервые выполнены теоретические исследования влияния концентрации водорода в титане на диффузионные барьеры для атомов водорода в решетке титана.

Глава I Структура и свойства системы титан-водород

1.1 Структура и свойства титана

Титан – это химический элемент с атомным номером 22 в периодической таблице Менделеева. Это серебристо-белый переходный металл, отличающийся небольшим весом, высокой прочностью, металлическим блеском, устойчив к влажной коррозии хлором. Титан считается редким металлом, который в связи с характером его существования трудно добывать.

Титан существует в двух кристаллических формах: α -Ti с гексагональной плотноупакованной решёткой (ГПУ) и β -Ti с кубической объёмно-центрированной упаковкой (ОЦК). Как показано на рисунке 1.

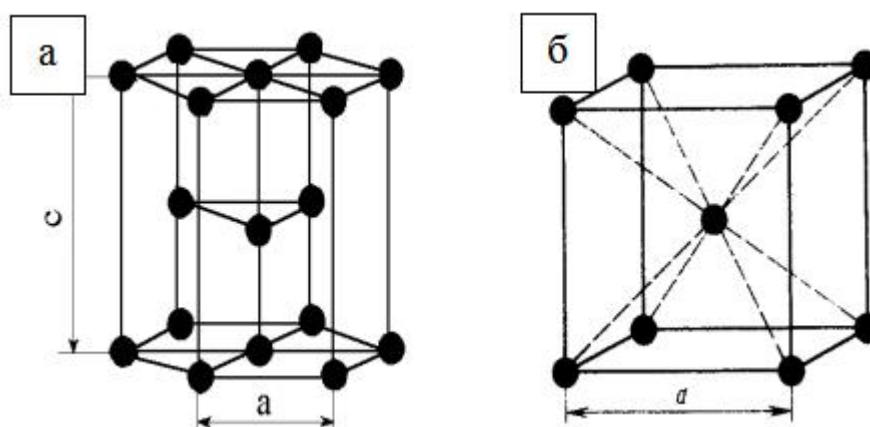


Рисунок 1 – Две кристаллические формы титана: а) α -Ti и б) β -Ti

При повышении температуры до 883°C , структуры α -Ti и β -Ti могут переходить друг в друга. Титан обладает двумя очень полезными характеристиками: устойчивость к коррозии и высокая прочность. В беспримесном состоянии, прочность титана сопоставима с прочностью некоторых сталей, но титан легче их на 45 процентов. Существует два

аллотропа и пять природных изотопов титана: ^{46}Ti (8,25%), ^{47}Ti (7,44%), ^{48}Ti (73,72%), ^{49}Ti (5,41%) и ^{50}Ti (5,18%) [4].

1.2 Система титан-водород

Взаимодействие водорода с металлом усложняется образованием гидридной фазы, а также наличием аллотропического превращения в металлическом титане. При температурах выше 500 °С в системе титан-водород существуют три фазы: α -фаза (ГПУ), β -фаза (ОЦК) и δ -фаза (ГЦК) [5]. α -фаза и β -фаза являются низко- и высокотемпературными аллотропическими формами металлического титана, и δ -фаза соответствует гидриду. Как показано на рисунке 2.

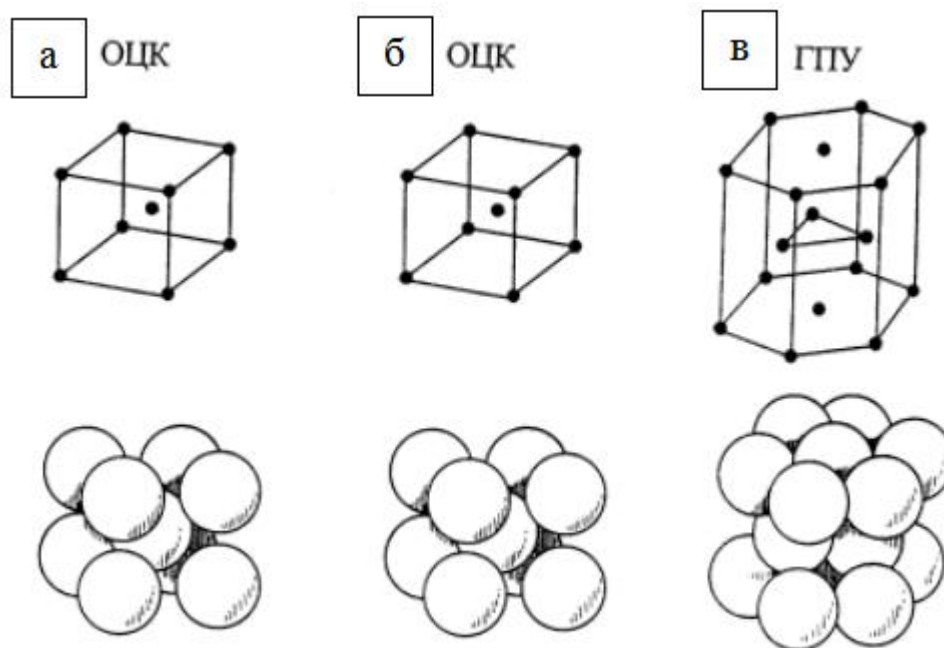


Рисунок 2 – Три фазы системы Ti-H:

а) α -фаза (ГПУ), б) β -фаза (ОЦК), в) δ -фаза (ГЦК)

1.3 Водородное охрупчивание титана

Водородное охрупчивание представляет собой процесс охрупчивания и разрушения материалов из-за действия атомарного водорода. Это явление наиболее резко проявляется в таких материалах, как титан и его сплавы, сплавы никеля и высокопрочные стали. Водород может попасть в расплавленный материал в процессе плавки и остаться в нём в перенасыщенном состоянии после затвердевания или же наводороживание может происходить в процессе эксплуатации или в процессе других обработок материала (сварка или тепловая обработка, и т.п.). В настоящее время, одним из объяснений явления водородного охрупчивания может являться рекомбинация атомарного водорода в молекулярный на дислокациях и нанопорах с сопровождающим этот процесс резким возрастанием давления и последующим зарождением трещин в металле [6].

Водородное охрупчивание титана вызывается растворением в титане водорода и возникновением локальных напряжений в решетке металла, превышающих предел прочности, в результате внутри титана образуется трещины. Проблема водородного охрупчивания титана и сплавов на его основе до сих пор является актуальной [7-11].

1) Водородное охрупчивание α -титана

Растворимость водорода в α -титане а, следовательно, и его влияние на механические свойства металла зависят температуры, при которой происходит насыщение водородом (рисунки 3 и 4). Отметим, что чистота металла также влияет на растворимость водорода, поэтому необходимо различать титан

высокой чистоты от технического титана и α -титана, легированного различными элементами. Растворимость водорода в чистом α -титане составляет ~ 8 ат.% при 325°C и $0,1$ ат.% при 125°C [12].

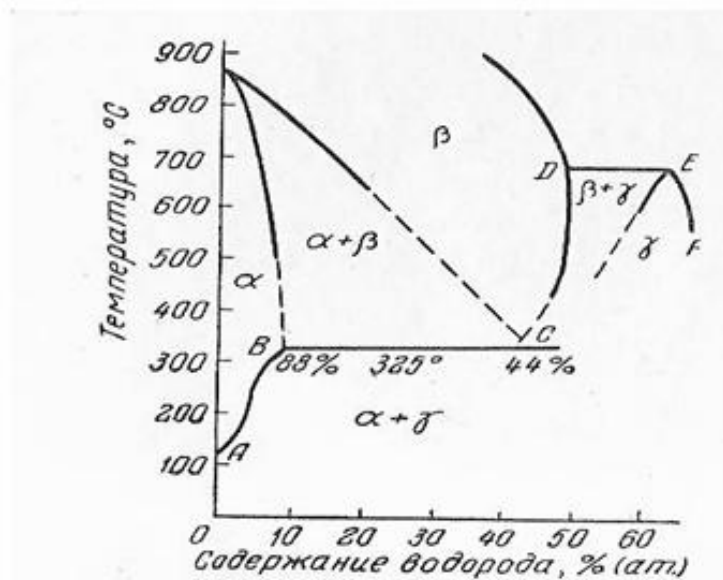


Рисунок 3 – Изменение пластичности титана высокой чистоты при растяжении при комнатной температуре в зависимости от содержания водорода [12]

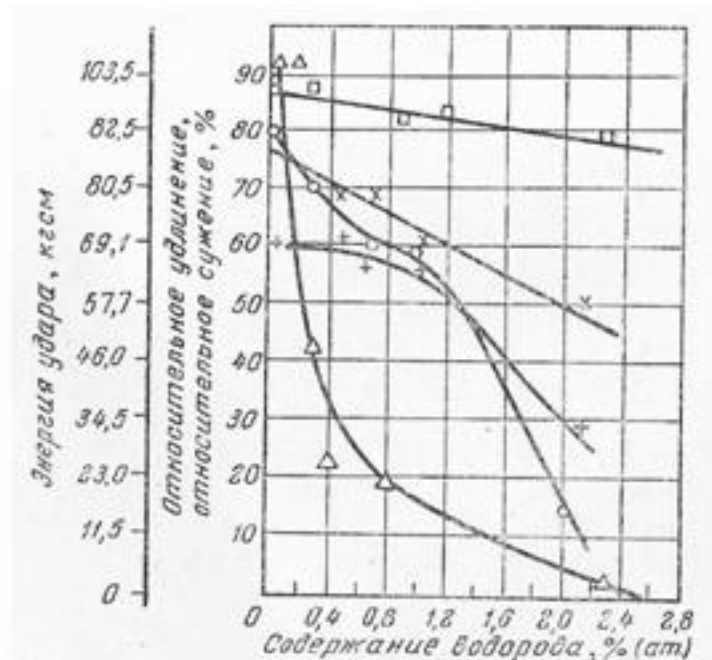


Рисунок 4 – Изменение механических свойств чистого титана в зависимости от содержания водорода и скорости растяжения при комнатной температуре [12]

2) Водородное охрупчивание α - β -титановых сплавов

Водород в α - β -сплавах стабилизирует β -фазу титана. При эвтектоидных температурах распределение водорода между бета- и альфа-фазами определяется соотношением 5: 1. При комнатной температуре это соотношение выше, потому что растворимость водорода в альфа-фазе значительно снижается. Многие исследователи изучили охрупчивание α - β титановых сплавов под действием водорода. Райльский считает, что α - β -титановый сплав, содержащий до 4,5 ат.% Водорода, который в 5 раз выше, чем концентрация, вызывающая охрупчивание, не имеет гидридной фазы. Однако автордиографические исследования α - β титановых сплавов, содержащих не более 2,7 ат.% водорода, показывают, что водород распределяется вдоль границы между α - β -фазами после термического старения. При производстве технических α - β титановых сплавов используется большое количество примесей, которые стабилизируют β -фазу, и поэтому водородное охрупчивание этих сплавов изучено в очень разнообразных титановых сплавах. Однако во всех исследованных сплавах феномен водородного охрупчивания показал те же характеристики.

Более высокое значение растворимости водорода в β -фазе титана по сравнению с α -фазой приводит к разным результатам водородного охрупчивания α - β -сплавов и однофазного α -титана. В α - β -сплавах при растворении водорода изменяются преимущественно свойства, определяемые при испытании на растяжение (рисунок 5), а не свойства, определяемые при ударном испытании.

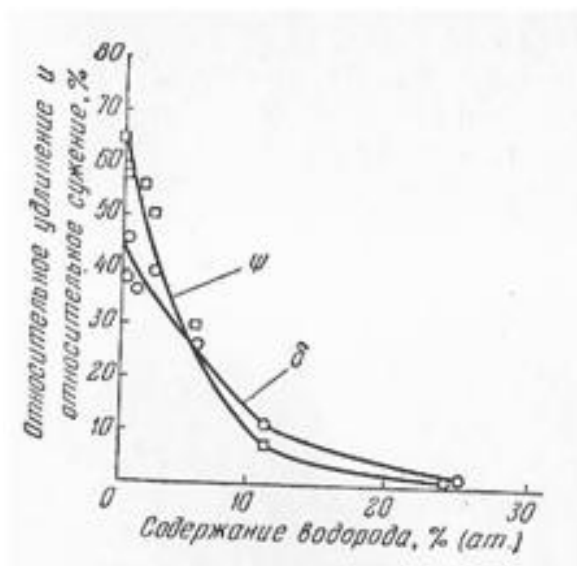


Рисунок 5 – Изменение механических свойств технически чистого Ti в зависимости от содержания водорода [12]

1.4 Диффузия атомов в системе TiH_x

Из-за отсутствия радиоизотопа самодиффузия в титане не была измерена экспериментально. Оценки энергии активации для самодиффузии в титане могут быть сделаны из измерений теплоты плавления, температуры плавления и загрязнения воздуха коммерческим титаном.

Согласно работе [13] энергия активации самодиффузии в титане составляет $Q = 73600$ кал/моль. В работе [14] дается оценочное значение $Q = 73600$ кал/моль. Отметим, что энергия активации для самодиффузии в титане, как ожидается, будет примерно одинаковой для двух фаз титана.

Рейнольдс, Огден и Яффе [15] обнаружили, что энергия активации загрязнения воздуха коммерческим титаном составляет $Q = 75300$ кал/моль. Чтобы объяснить эту высокую энергию активации, они предложили механизм, требующий противоточной диффузии атомов титана и атомов кислорода, в

которых самодиффузия титана создавала пустоты, в которых была бы и диффузия кислорода. Это объяснение представляется более возможным, чем постулирование междоузельного механизма. Если эта модель существует, то наблюдаемая энергия активации должна хорошо согласоваться с энергией активации для самодиффузии в титане

Поскольку высокотемпературная ползучесть, как правило, контролируется диффузией [16], во многих случаях энергии активации для двух процессов были одинаковыми. Опп, Шерби и Дорн [17] вычислили энергию активации для высокотемпературной ползучести титана из экспериментальных данных Каффа и Гранта [18]. Согласно их работе $Q = 60000$ кал/моль, что несколько меньше, чем приведенные выше оценки энергии активации для самодиффузии в титане.

Кусамини, Яги, Юкава и Нода [19,20] определяли диффузию водорода в титане из измерений выбросов водорода из коммерчески чистого титана. Образцы титана в форме стержня дегазировали в вакууме при 700, 750, 800, 850 и 900°C и собирали и измеряли выделяющийся водород, был рассчитан коэффициент диффузии водорода в альфа-титане:

$$D = 0,27 \cdot 10^{-2} \exp(-14200/RT), \quad (1.1)$$

Василевский и Кель растворяли водород радиально в цилиндры из титана высокой чистоты. Из измеренных градиентов концентрации были оценены коэффициенты диффузии и были найдены в соответствии с уравнением Аррениуса для α -фаза титана

$$D = 1,8 \cdot 10^{-2} \exp(-12380/RT), \quad (1.2)$$

и для β -фаза титана

$$D = 1,95 \exp(-6640/RT). \quad (1.3)$$

Костер, Бангерт и Эверс [21] исследовали внутреннее трение в закаленном альфа-титане, величина которого прямо пропорциональна содержанию водорода. Этот пик был интерпретирован как вызванный индуцированной стрессом междуузельной диффузии водорода в альфа-твердом растворе. Пик имеет энергию активации $Q = 15000$ кал/моль, что справедливо согласуется со значениями, полученными для водорода в альфа-титане в работах [19,20,22].

Из исследования диффузии водорода в сплаве 4% Al, 4% Mn и 92% Ti (С-130АМ) при комнатной температуре Дэниелс, Гармон и Триано [23] получено, что $D = 1,9 \cdot 10^{-9}$ см²/сек. Это значение попадает между экстраполированными коэффициентами диффузии полученными Василевского и Кея [22] для диффузии водорода в альфа и бета-титане.

Согласие на коэффициент диффузии водорода в титане среди разных авторов неплохо, причем данные Василевского и Кея [22], вероятно, являются наиболее точными.

Глава II Методика расчета

2.1 Основные приближения

Система любого твердого тела состоит из 10^{23} взаимодействующих частиц друг с другом. Поэтому расчет уровней энергии и волновых функций твердого тела очень затруднителен, и мы используем упрощающие предположения.

Кристалл – это ансамбль взаимодействующих друг с другом электронов и атомных ядер, поэтому его полный гамильтониан можно записать в следующем виде:

$$\hat{H}_t = \hat{T}_e + \hat{T}_L + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{eL} + \hat{V}_{LL} , \quad (2.1)$$

где \hat{T}_e – оператор кинетической энергии электронов;

\hat{T}_L – оператор кинетической атомных ядер;

\hat{V}_{ee} – потенциальные энергии соответственно взаимодействия электронов;

\hat{V}_{eL} – потенциальные энергии соответственно взаимодействия электронов с ядрами;

\hat{V}_{LL} – потенциальные энергии соответственно взаимодействия ядер.

Энергии можно записать в следующем виде:

$$\hat{T}_e = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 , \quad \hat{T}_L = -\sum_I \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_I^2 ,$$
$$\hat{V}_{ee} = \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} , \quad \hat{V}_{eL} = \sum_{i,I} \frac{Z_I e^2}{|\vec{R}_I - \vec{r}_i|} , \quad \hat{V}_{LL} = \sum_{I \neq J} \frac{Z_I Z_J e^2}{|\vec{R}_I - \vec{R}_J|} , \quad (2.2)$$

где i, j – индексы соответственно к электронам;

I, J – индексы соответственно к ядрам;

Z – заряд ядра;

e – заряд электрона.

Выражения (2.2) записаны в нерелятивистской форме и не учитывают наличие спина у электрона.

Уравнение Шрёдингера можно записать в следующем виде:

$$\hat{H}_i \Psi(\{\vec{R}\}, \{\vec{r}\}) = E \Psi(\{\vec{R}\}, \{\vec{r}\}), \quad (2.3)$$

где $\{\vec{R}\}$ – совокупности пространственных и спиновых координат всех ядер;

$\{\vec{r}\}$ – совокупности пространственных и спиновых координат всех электронов;

\hat{H}_i – гамильтониан (2.1);

$\Psi(\{\vec{R}\}, \{\vec{r}\})$ – волновая функция зависит от координат всех ядер и электронов.

Решить проблему (2.3) не представляется возможным до сих пор. Но если использовать приближенные методы для уравнения (2.3), то можно упростить расчет энергетического спектра и волновых функций электронов.

2.1.1 Адиабатическое приближение

Система атомов состоит из ядер и электронов. Масса электронов значительно меньше массы ядра, а скорость электронов значительно выше скорость ядра. Пока ядро делает колебание вокруг своего положения равновесия, электроны совершат достаточно большое число колебаний вокруг ядра. По этой причине, можно считать, что атомные ядра находятся в состоянии

покоя по отношению к электронам. Это приближение называется адиабатическим (приближение Борна – Оппенгеймера, 1927 [24])

Если представить волновую функции ядер и электронов как:

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

то мы можем получить следующие два уравнения:

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

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

где n – набор квантовых чисел, описывающих состояния электронов;

v – набор квантовых чисел, описывающих состояния системы ядер

При определении энергии электронной подсистемы мы фиксируем координаты ядер. Данные энергии затем в качестве потенциальной энергии входят в уравнении Шредингера для ядер.

2.1.2 Одноэлектронное приближение

Уравнение (2.5) очень сложная задача многих тела. Мы можем использовать одноэлектронное приближение для упрощения уравнения. До сих пор широко используют два различных подхода для реализации этого приближения: метод Хартри–Фока [25] и теория функционала электронной плотности [26].

Основная идея теории функционала плотности – это использование электронной плотности:

$$n(\vec{r}) = \langle \psi(\vec{r}) | \sum_{i=1}^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) | \psi(\vec{r}) \rangle. \quad (2.7)$$

Таким образом, все свойства системы в основном состоянии полностью

определяется электронной плотностью $n_0(\vec{r})$ [27].

При использовании теории функционала плотности уравнение Шредингера (2.5) для многоэлектронной волновой функции сводится к одноэлектронному уравнению Кона–Шема:

$$\hat{H}_{KSH}\psi_n(\vec{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}_{\text{eff}}(\{\vec{R}\}, \vec{r}) \right) \psi_n(\vec{r}) = \varepsilon_n \psi_n(\vec{r}), \quad (2.8)$$

$$\hat{V}_{\text{eff}}(\{\vec{R}\}, \vec{r}) = \hat{V}_{\text{ext}}(\{\vec{R}\}, \vec{r}) + \hat{V}_H(\vec{r}) + \hat{V}_{xc}(\vec{r}), \quad (2.9)$$

где ε_n – собственные значения энергии;

$\psi_n(\vec{r})$ – волновая функция описывающая состояние одного электрона;

$\hat{V}_{\text{ext}}(\{\vec{R}\}, \vec{r})$ – внешний потенциал (взаимодействие ядер с электронами);

$$\hat{V}_{\text{ext}}(\{\vec{R}\}, \vec{r}) = \hat{V}_{eL} = \sum_{i,I} \frac{Z_I e^2}{|\vec{R}_I - \vec{r}_i|}, \quad (2.10)$$

$\hat{V}_H(\vec{r})$ – потенциал Хартри (кулоновское взаимодействие электронов с электронами);

$$\hat{V}_H(\vec{r}) = 4\pi e^2 \int \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3\vec{r}', \quad (2.11)$$

$\hat{V}_{xc}(\vec{r})$ – обменно–корреляционный потенциал (обменно– корреляционные эффекты);

$$\hat{V}_{xc}(\vec{r}) = \frac{\partial}{\partial n(\vec{r})} \int n(\vec{r}) \varepsilon_{xc}[n(\vec{r})] d^3\vec{r}, \quad (2.12)$$

Здесь $\varepsilon_{xc}[n(\vec{r})]$ – плотность обменно–корреляционного потенциала, точная форма такого же неизвестна, но она имеет ряд параметрических интерполяционных формул. Поскольку $\hat{V}_H(\vec{r})$ и $\hat{V}_{xc}(\vec{r})$ зависят от электронной плотности, которую и определяют, то необходимо искать эти потенциалы, решая самосогласованную задачу.

2.1.3 Зонное приближение

Зонная теория твёрдого тела является квантовомеханической теорией движения электронов в твёрдом теле.

В основе зонной теории определяет следующие приближения [28]:

1. Твёрдые тела являются идеально периодическими кристаллами.
2. Положение равновесия узла решетки фиксировано, то есть предполагается, что ядро является стационарным (адиабатическое приближение). Затем вводится небольшое колебание атомов вокруг положения равновесия, которое можно назвать фононом как возмущение электронного спектра.
3. Многоэлектронная задача сводится к одной электронной задаче: влияние данного электрона на все другие электроны описывается некоторым средним периодическим полем.

Наиболее широко в конкретных расчетах зонной структуры используются следующие методы [29]:

- Метод линейных комбинаций атомных орбит (ЛКАО).
- Метод присоединённых плоских волн (ППВ).
- Метод Функции Грина (Корринги — Кона — Ростокера, или ККР).
- Метод ортогонализированных плоских волн (ОПВ).
- Метод псевдопотенциала

2.2 Метод расчета

Метод псевдопотенциала – это обобщение метода ортогонализированных плоских волн (ОПВ). Теория псевдопотенциала дает возможность уточнения расчетов ОПВ и объясняет, почему расчеты методом почти свободных электронов могут давать хорошее согласие с реальными зонными структурами.

Основная идея метода псевдопотенциала – введение слабого потенциала, отличающегося от реального кристаллического потенциала, который характеризуется амплитудой рассеяния электронов проводимости. Волновая функция электрона испытывает осцилляции вблизи ядра атома, уменьшая электронную плотность (рисунок 6).

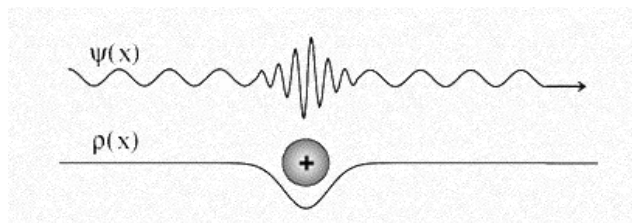


Рисунок 6 – Осцилляции волновой функции $\psi(x)$ и $\rho(x)$ плотности электронов вблизи ядра атома

Метод псевдопотенциала в теории металлов включает три предположения [30]: 1) Рассматривают самосогласованное поле; 2) Считают, что электронные состояния разделяются на внутренние оболочки с сильно локализованными волновыми функциями и состояния зоны проводимости; 3) Используют теорию возмущений решать расчет движения электронов в зоне проводимости.

Обычно вводят псевдоволновые функции:

$$\tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} C_{\vec{k}+\vec{G}} e^{i(\vec{k}+\vec{G})\vec{r}} = \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) + \sum_c \psi_{\vec{k}}^c(\vec{r}) \int \tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}^{c*}(\vec{r}) d^3\vec{r}, \quad (2.13)$$

Но это подстановка не проявляет осцилляций, обусловленных сильным основным потенциалом, внутри нее. Она подставляется в обычное стационарное уравнение Шредингер как:

$$\hat{H} \tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r}) + \sum_c (E - E_c) \psi_{\vec{k}}^c(\vec{r}) \int \tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}^{c*}(\vec{r}) d^3\vec{r} = E_{\vec{k}} \tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2.14)$$

И может быть представлена в следующем виде:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} + W(\vec{r}) \right] \cdot \tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r}) = E_{\vec{k}} \tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2.15)$$

где $W(\vec{r})$ – нелокальный оператор псевдопотенциала, который зависит от энергии и определен соотношением:

$$W(\vec{r}) = V(\vec{r}) + V^R(\vec{r}), \quad (2.16)$$

$$V^R(\vec{r}) \tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_c (E - E_c) \psi_{\vec{k}}^c(\vec{r}) \int \tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}^{c*}(\vec{r}) d^3\vec{r}, \quad (2.17)$$

Матричный элемент потенциала $V^R(\vec{r})$ в соответствии с формулой:

$$\int \tilde{\psi}_{\vec{k}}^*(\vec{r}) V^R(\vec{r}) \tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r}) d^3\vec{r} = \sum_c (E - E_c) \left| \int \tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}^{c*}(\vec{r}) d^3\vec{r} \right|^2, \quad (2.18)$$

Кроме того, псевдопотенциал зависит от энергии искомого уровня. Так как многие из фундаментальных теорем не применяют псевдопотенциал, мы можем положить энергию валентных электронов во всех формулах, куда она входит равной энергии, которые нам нужны. Обычно это будет энергия Ферми.

Потом собственные значения оператора $H + V^R$ уже не будут совпадать с точными собственными значениями исходного гамильтониана, исключая уровней с энергией Ферми. С помощью такого метода можно найти совокупность волновых векторов, для которых энергия валентных электронов совпадает с энергией Ферми и потом построить поверхность Ферми.

Глава III. Система Ti–H: результаты и обсуждение

3.1 Расчетные ячейки

В таблице 1–3 представлены расчётные ячейки системы Ti–H с ОЦК, ГЦК, и ГПУ структурой с указанием октаэдрических (О-междоузлия) и тетраэдрических (Т-междоузлия) междоузлий, занимаемых атомами водорода. Чёрные шарики соответствуют атомам металла (узлам решётки), красные и зелёные шарики – О- и Т-междоузлиям, соответственно. Для каждой кристаллической структуры рассмотрено 5 различных концентраций атомов водорода в решетке титана $X = \text{H/Ti}$: 0,125, 0,25, 0,5, 1,0 и 2,0.

Все расчеты в работе выполнялись в рамках теории функционала электронной плотности с использованием методов псевдопотенциала и проекционных присоединенных волн, которые реализованы в пакете программ ABINIT [3]. Обменно-корреляционные эффекты рассматривались с использованием обобщенного градиентного приближения в форме Пердю–Бурке–Эрнцерхофа. В работе самосогласование электронной плотности считалось достигнутым, когда сходимость полной энергии кристалла составляла $\sim 0,03$ мэВ. Для ГПУ, ГЦК, ОЦК структур систем Ti_8H и Ti_4H набор k-точек составлял, соответственно, $8 \times 8 \times 10$ и $16 \times 16 \times 5$, $7 \times 7 \times 10$ и $14 \times 14 \times 5$, $6 \times 6 \times 12$ и $12 \times 12 \times 6$. Для ГПУ, ГЦК и ОЦК остальных рассмотренных систем набор k-точек составлял, соответственно, $16 \times 16 \times 10$, $14 \times 14 \times 10$ и $12 \times 12 \times 12$. Релаксация считалась завершённой, когда силы, действующие на каждый атом расчетной ячейки, становились меньше $5 \text{ мэВ/\text{Å}}$.

Таблица 1 – Расчетные ячейки системы Ti–H с ОЦК структурой

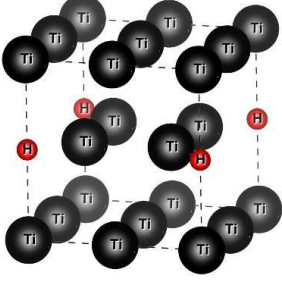
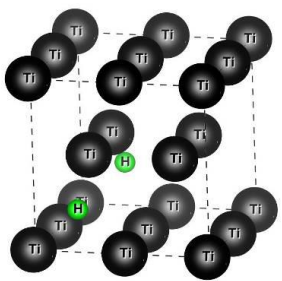
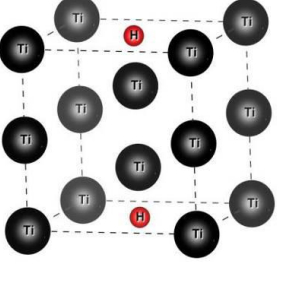
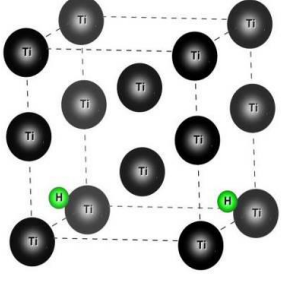
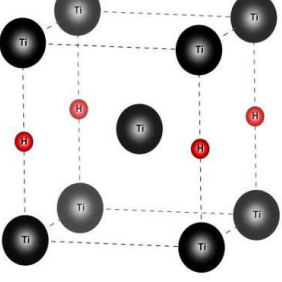
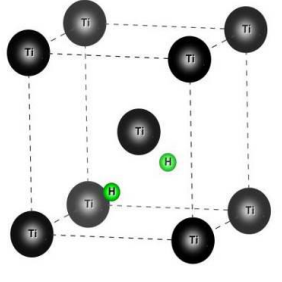
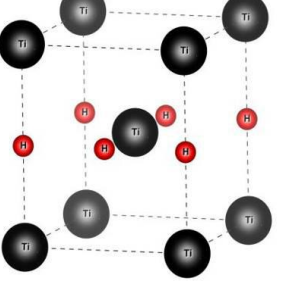
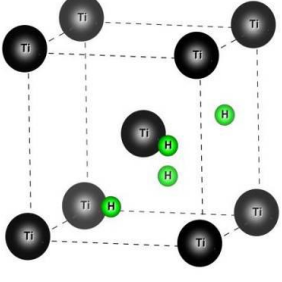
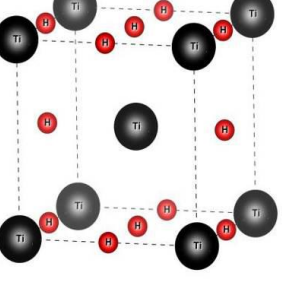
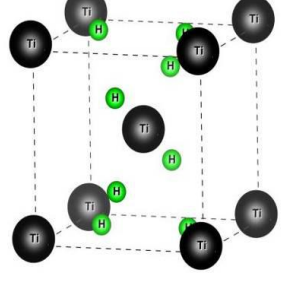
Система	Расчетные ячейки	
	О-междоузлия	Т-междоузлия
Ti_8H		
Ti_4H		
Ti_2H		
TiH		
TiH_2		

Таблица 2 – Расчетные ячейки системы Ti-H с ГЦК структурой

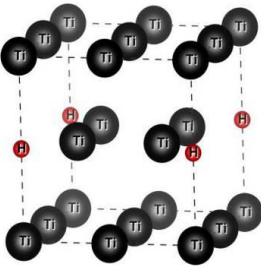
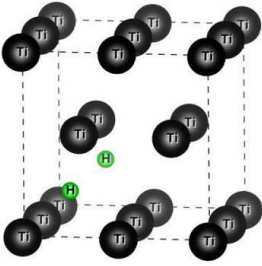
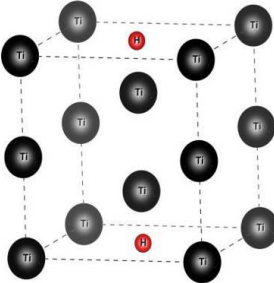
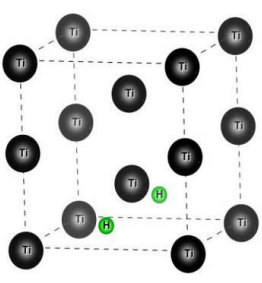
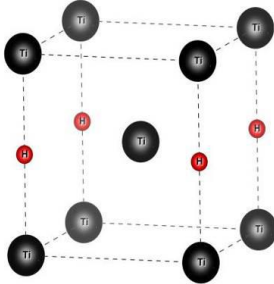
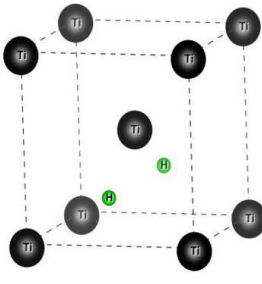
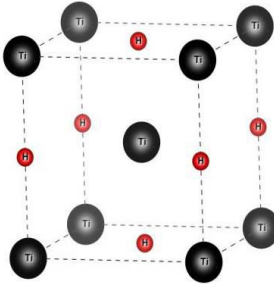
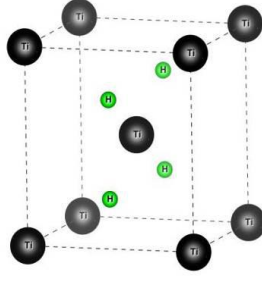
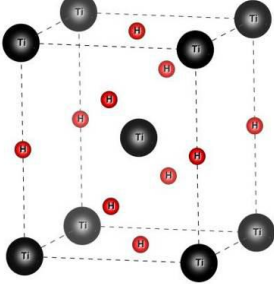
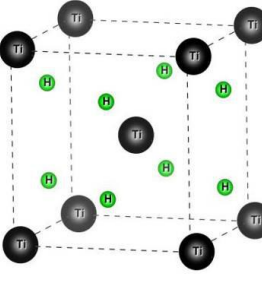
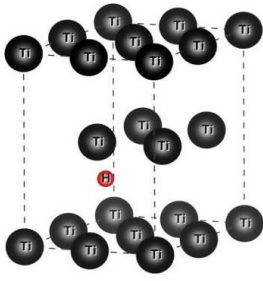
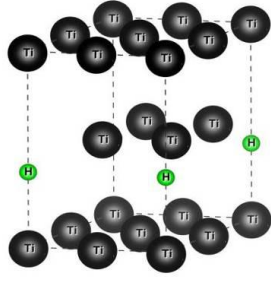
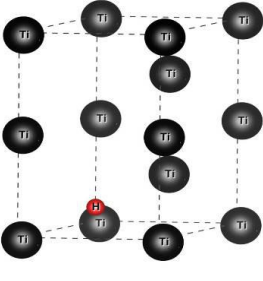
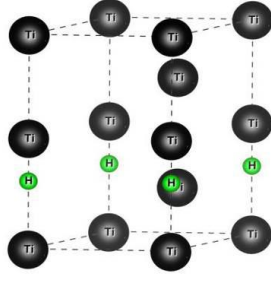
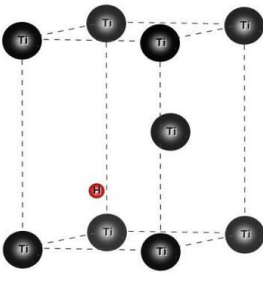
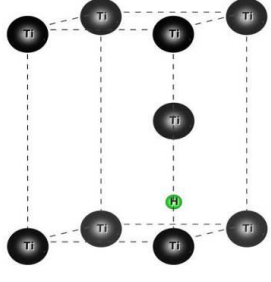
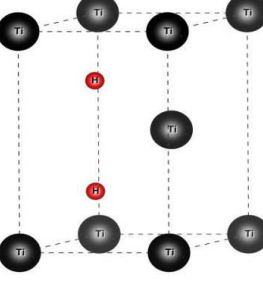
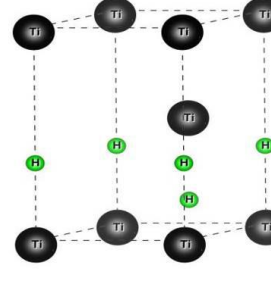
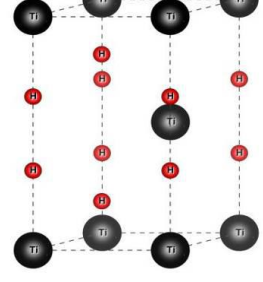
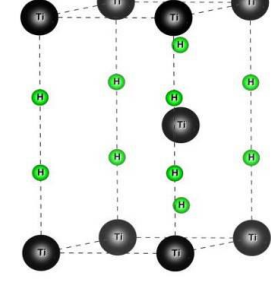
Система	Расчетные ячейки	
	О-междоузлия	Т-междоузлия
Ti_8H	 <p>Diagram showing the O-interstitial structure of Ti_8H. The unit cell contains 8 Ti atoms (black spheres) and 2 H atoms (red spheres) located at the O-interstitial sites.</p>	 <p>Diagram showing the T-interstitial structure of Ti_8H. The unit cell contains 8 Ti atoms (black spheres) and 2 H atoms (green spheres) located at the T-interstitial sites.</p>
Ti_4H	 <p>Diagram showing the O-interstitial structure of Ti_4H. The unit cell contains 4 Ti atoms (black spheres) and 2 H atoms (red spheres) located at the O-interstitial sites.</p>	 <p>Diagram showing the T-interstitial structure of Ti_4H. The unit cell contains 4 Ti atoms (black spheres) and 2 H atoms (green spheres) located at the T-interstitial sites.</p>
Ti_2H	 <p>Diagram showing the O-interstitial structure of Ti_2H. The unit cell contains 2 Ti atoms (black spheres) and 2 H atoms (red spheres) located at the O-interstitial sites.</p>	 <p>Diagram showing the T-interstitial structure of Ti_2H. The unit cell contains 2 Ti atoms (black spheres) and 2 H atoms (green spheres) located at the T-interstitial sites.</p>
TiH	 <p>Diagram showing the O-interstitial structure of TiH. The unit cell contains 1 Ti atom (black sphere) and 1 H atom (red sphere) located at the O-interstitial site.</p>	 <p>Diagram showing the T-interstitial structure of TiH. The unit cell contains 1 Ti atom (black sphere) and 1 H atom (green sphere) located at the T-interstitial site.</p>
TiH_2	 <p>Diagram showing the O-interstitial structure of TiH_2. The unit cell contains 1 Ti atom (black sphere) and 2 H atoms (red spheres) located at the O-interstitial sites.</p>	 <p>Diagram showing the T-interstitial structure of TiH_2. The unit cell contains 1 Ti atom (black sphere) and 2 H atoms (green spheres) located at the T-interstitial sites.</p>

Таблица 3 – Расчетные ячейки системы Ti-H с ГПУ структурой

Система	Расчетные ячейки	
	О-междоузлия	Т-междоузлия
Ti_8H		
Ti_4H		
Ti_2H		
TiH		
TiH_2		

3.2 Параметры решетки

Чтобы выяснить влияние примеси Н на атомные объемы различных фаз Ti–Н, были вычислены постоянные ГПУ, ГЦК и ОЦК решеток с октаэдрической и тетраэдрической координациями атомов водорода, соответственно. Результаты расчетов приведены в таблице 4–6. Кроме того, экспериментальные и теоретические параметры решетки Ti–Н, полученные в других работах, также представлены в таблице.

Таблица 4 – Параметры ОЦК решетки системы Ti–Н

Система	О-междоузлия				Т-междоузлия			
	Наш расчёт		Другой расчёт [31]	Эксп. [31]	Наш расчёт		Другой расчёт [31]	Эксп. [31]
	<i>a</i> , Å	<i>c</i> , Å	<i>a</i> , Å	<i>a</i> , Å	<i>a</i> , Å	<i>c</i> , Å	<i>a</i> , Å	<i>a</i> , Å
Ti ₈ H	3,290		3,281	3,281	3,284	3,274	3,274	3,281
Ti ₄ H	3,300		3,308	3,299	3,313		3,298	3,299
Ti ₂ H	3,358		3,352	3,327	3,343		3,337	3,327
TiH	3,564	3,112	—	—	3,412		—	—
TiH ₂	3,590		—	—	3,491		—	—

Таблица 5 – Параметры ГЦК решетки системы Ti-H

Система	О-междоузлия				Т-междоузлия			
	Наш расчёт		Другой расчёт	Эксп.	Наш расчёт		Другой расчёт	Эксп.
	<i>a</i> , Å	<i>c</i> , Å	<i>a</i> , Å	<i>a</i> , Å	<i>a</i> , Å	<i>c</i> , Å	<i>a</i> , Å	<i>c</i> , Å
Ti ₈ H	4,139	4,102	4,119	4,122	4,153	4,140	4,146	4,122
Ti ₄ H	4,142	—	4,132	4,145	4,148	4,246	4,185	4,145
Ti ₂ H	4,163	—	4,156	4,190	4,243	—	4,248	4,190
TiH	4,187	4,205	—	—	4,184	4,588	—	—
TiH ₂	4,169	4,779	—	—	4,387	4,512	—	—

Таблица 6 – Параметр ГПУ решетки системы Ti-H

Система	О-междоузлия				Т-междоузлия			
	Наш расчёт		Другой расчёт*		Наш расчёт		Другой расчёт*	
	<i>a</i> , Å	<i>c</i> , Å	<i>a</i> , Å	<i>a</i> , Å	<i>a</i> , Å	<i>c</i> , Å	<i>a</i> , Å	<i>c</i> , Å
Ti ₈ H	2,952	4,672	2,943	4,673	2,956	4,723	2,958	4,721
Ti ₄ H	2,914	4,706	2,943	4,732	2,965	4,788	2,979	4,808
Ti ₂ H	2,969	4,760	2,965	4,759	2,980	4,940	3,007	4,983
TiH	2,967	4,911	—	—	2,994	5,121	—	—
TiH ₂	2,981	5,490	—	—	3,004	5,566	—	—

Из таблицы видно, что с ростом концентрации водорода в титане для всех рассмотренных структур (ОЦК, ГЦК, и ГПУ) наблюдается увеличение параметров решётки. При одинаковой относительной концентрации водорода в титане, изменение параметров ГЦК решётки самые большие. Для ОЦК решётки, параметры решетки с октаэдрической координацией атомов

водорода больше, чем в случае тетраэдрической. А для ГЦК и ГПУ решётки наблюдается обратная ситуация. Рассчитанные нами параметры решетки и согласуются с соответствующими экспериментальными данными с погрешностью менее 1,3%.

3.3 Теплота образования

В работе также рассчитана теплота образования Q_e системы Ti-H:

$$Q_e = E_H * e * N_A / n, \quad (3.1)$$

$$E_H = E(\text{Ti}_N\text{H}_m) - E(\text{Ti}_N) - \frac{m}{2} E(\text{H}_2), \quad (3.2)$$

где E_H – энергия растворения водорода в титане,

$E(\text{Ti}_N)$ и $E(\text{Ti}_N\text{H}_m)$ – полные энергии чистого Ti и твердого раствора Ti_NH_m с относительной концентрацией атомов водорода $X = m/N$,

N и m – количество атомов титана и водорода, соответственно, в расчетной ячейке,

$E(\text{H}_2)$ – энергия молекулы водорода,

e – заряд электрона,

N_A – число Авогадро,

$n = N + m$ – количество атомов в расчетной ячейке.

На рисунке 7 представлены рассчитанные значения теплоты образования Q_e различных фаз Ti-H. Как видно из рисунка, при относительной концентрации водорода в титане от $X = \text{H/Ti} = 0,125$ до $X = 0,75$ теплота образования Q_e системы Ti-H с ОЦК решёткой и атомами водорода в

T-междоузлиях самая низкая. При относительной концентрации от $X = 0,75$ до $X = 2,0$ теплота образования Q_e системы Ti-H с ГЦК решёткой и атомами водорода в T-междоузлиях самая низкая. Для большинства ситуаций с ростом относительной концентрации водорода в титане величина теплоты Q_e уменьшается. В случае ОЦК решётки с атомами водорода в O-междоузлиях данная зависимость не наблюдается.

На рисунке 8 приведена зависимость теплоты образования Q_e различных фаз Ti-H от концентрации водорода в металле, полученная в работе [29]. Как видно из рисунка, что с увеличением концентрации H, линейное изменение Q_e хорошо согласуется с экспериментальными данными в литературе [30]. Некоторые характеристики очевидны из рисунка. Во-первых, видно, что для всех шести исследованных структур теплоты Q_e уменьшается почти линейно с увеличением концентрации H. Во-вторых, видно, что при относительной концентрации водорода в титане от $X = 0,03$ до $X = 0,3$ теплота образования Q_e системы Ti-H с ГПУ решёткой и атомами водорода в T-междоузлиях самая низкая. При относительной концентрации от $X = 0,3$ до $X = 0,5$ теплота образования Q_e системы Ti-H с ГЦК решёткой и атомами водорода в T-междоузлиях самая низкая.

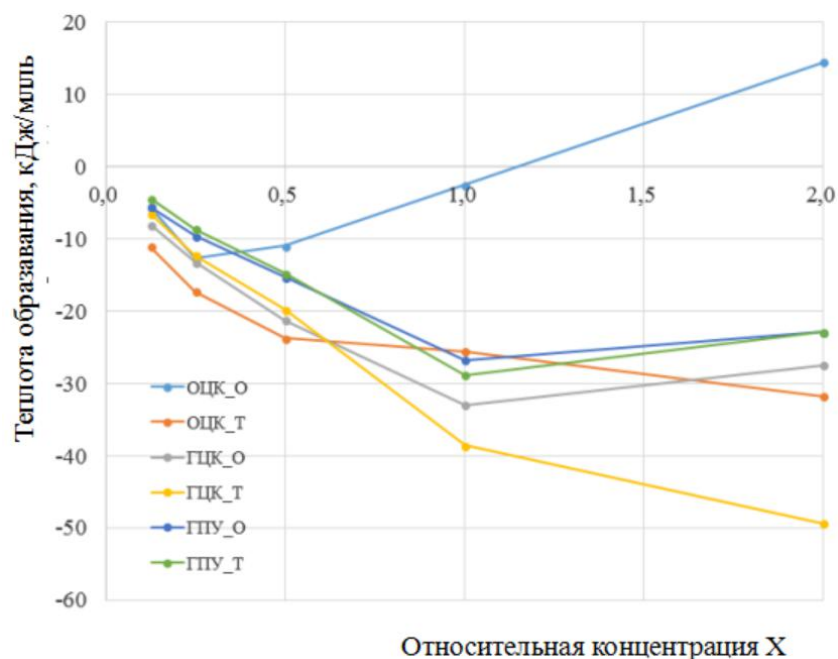


Рисунок 7 – Теплота образования Q_e системы Ti-N в зависимости от концентрации водорода

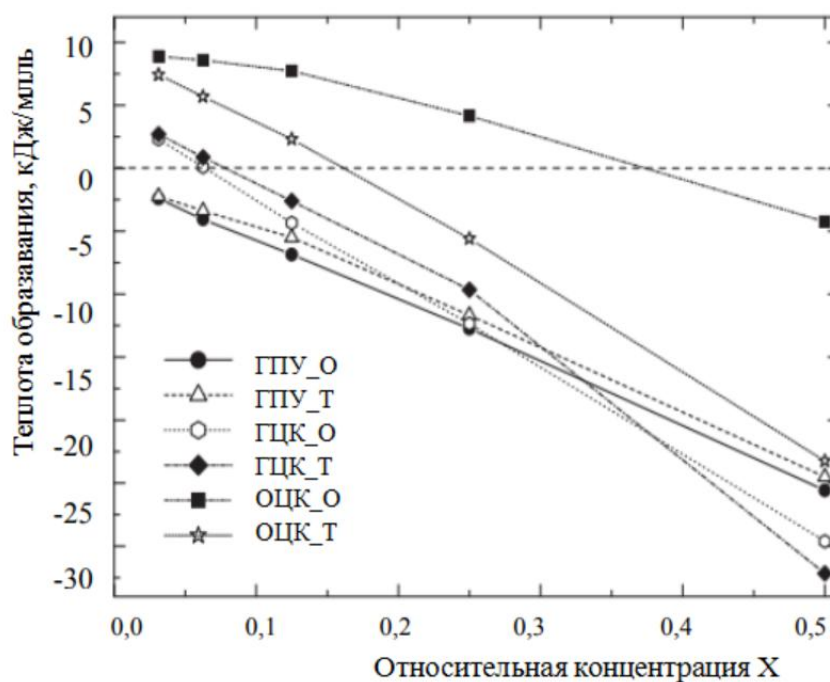


Рисунок 8 – Теплота образования Q_e системы Ti-N в зависимости от концентрации водорода, полученная в работе [29]

Из сравнения рисунков 7 и 8 видно, что почти все кривые зависимости $Q_e(X)$, рассчитанные в нашей работе, лежат ниже по энергиям, чем кривые,

полученные в работе [29]. Только теплоты образования твердого раствора водорода в октаэдрических междуузлиях ГПУ решетки титана при концентрации водорода от 0,125 до 0,5 хорошо согласуются с результатом работы [29]. В других интервалах наши результаты достаточно сильно отличаются от результатов работы [29], что вызвано, возможно, недостаточно хорошим набором базиса в наших расчетах.

3.4 Направления диффузионных скачков

В таблице 7 представлены расчётные ячейки твердого раствора $Ti_{16}H$ с ГПУ структурой с указанием октаэдрических (о-междуузлии) и тетраэдрических (t-междуузлии) междуузлий, занимаемых атомами водорода. В таблице 8 представлена расчётная ячейка твердого раствора $Ti_{16}H_2$ с ГПУ структурой с самой низкой энергией. Чёрные шарики соответствуют атомам металла (узлам решётки), красные и зелёные шарики – о- и t-междуузлиям, соответственно. В обоих случаях концентрация атомов водорода в решетке титана составляет $X = H/Ti = 0,0625, 0,125$.

Чтобы выяснить влияние примеси H на атомные объемы Ti–H, были вычислены постоянные решеток с октаэдрической и тетраэдрической координациями атомов водорода, соответственно. Результаты расчетов приведены в таблице 9. Кроме того, экспериментальные и теоретические параметры решетки Ti–H, полученные в других работах, также представлены в таблице.

Таблица 7 – Расчетные ячейки системы $Ti_{16}H$ с ГПУ структурой

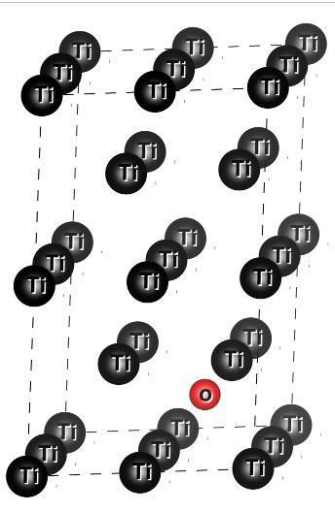
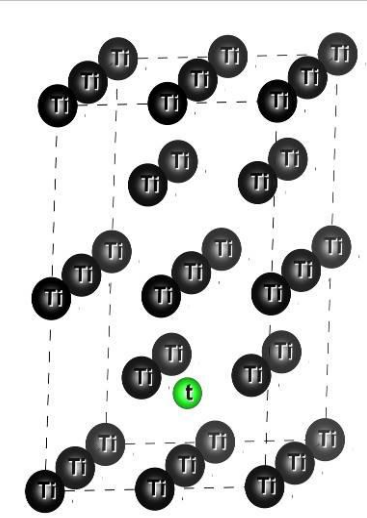
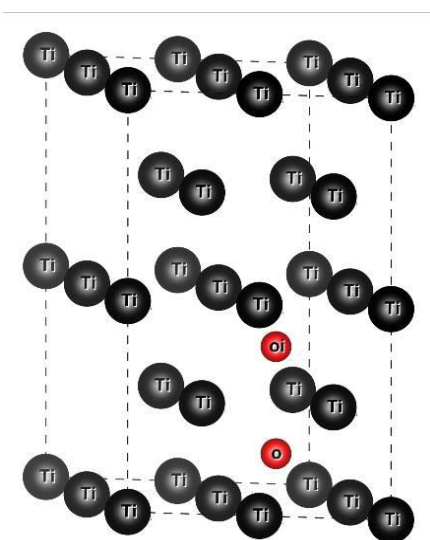
Система	Расчетные ячейки	
	О-междоузлия	T-междоузлия
$Ti_{16}H$		

Таблица 8 – Расчетные ячейки системы $Ti_{16}H_2$ с ГПУ структурой

Система	Расчетные ячейки
$Ti_{16}H$	

Из таблицы видно, что с ростом концентрации водорода в титане для всех рассмотренных структур наблюдается увеличение параметров решётки. Для ГПУ решётки, параметры решетки с октаэдрической координацией атомов

водорода меньше, чем в случае тетраэдрической. Рассчитанные параметры решетки согласуются с соответствующими экспериментальными данными.

Таблица 9 – Параметр ГПУ решетки системы Ti-H

Система	О-междоузлия					
	Наш расчёт		Другой расчёт*[31]		Эксп. расчёт*[31]	
	$a, \text{Å}$	$c, \text{Å}$	$a, \text{Å}$	$c, \text{Å}$	$a, \text{Å}$	$c, \text{Å}$
Ti ₁₆ H	2,944	4,662	2,938	4,654	2,948	4.722
Ti ₈ H	2,952	4,672	2,943	4,673	—	—
Система	Т-междоузлия					
	Наш расчёт		Другой расчёт*[31]		Эксп. расчёт*[31]	
	$a, \text{Å}$	$c, \text{Å}$	$a, \text{Å}$	$c, \text{Å}$	$a, \text{Å}$	$c, \text{Å}$
Ti ₁₆ H	2,949	4,677	2,947	4,680	2,948	4,722
Ti ₈ H	2,956	4,723	2,958	4,721	—	—

Чтобы рассчитать диффузионные барьеры для атома водорода в решетке титана при относительной концентрации $X = \text{H}/\text{Ti} = 0,0625$, нужно найти все возможные направления диффузионных скачков атома H в Ti, и потом определить путь с минимальными по высоте диффузионными барьерами. На рисунках 9 и 10 представлены все возможные диффузионные скачки атома H в Ti. Октаэдрические междоузлия обозначены как o, o1, o2, тетраэдрические – t, t1, t2. Из рисунков видно, что существуют 7 неэквивалентных диффузионных скачков атома водорода в системе Ti₁₆H: o→t, o→o1, o→o2, t→o, t→t1, t→t2, t→t3. Отметим, что барьер t→t3 в работе не представлен, так как расчет его параметров не был завершен.

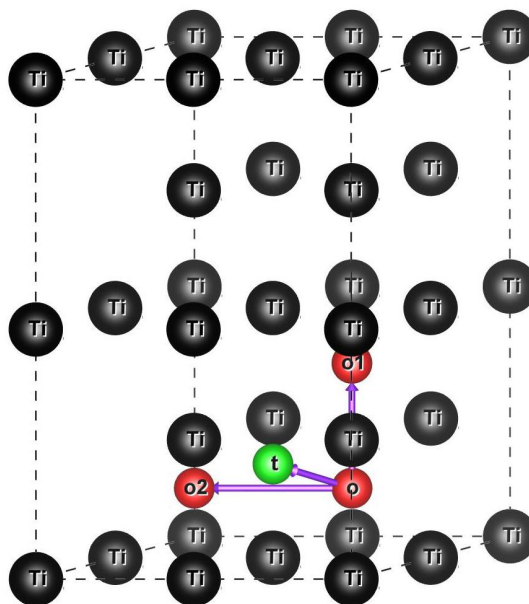


Рисунок 9 – Направления неэквивалентных диффузионных скачков из t-междоузлия в системе $Ti_{16}N$. t – начальное междоузлие, t1, t2, t3, o – конечные междоузлия в диффузионных скачках.

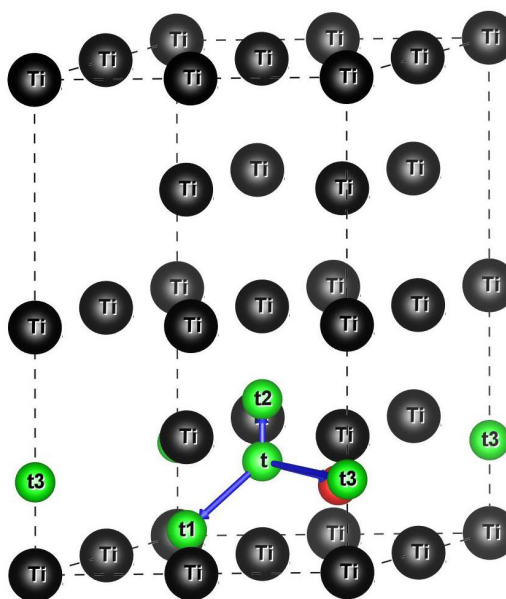


Рисунок 10 – Направления неэквивалентных диффузионных скачков из o-междоузлия в системе $Ti_{16}N$. o – начальное междоузлие, o1, o2, t – конечные междоузлия в диффузионных скачках

На рисунке 11 представлены все рассмотренные диффузионные скачки атома Н в Ti в твердом растворе Ti₁₆H₂. Октаэдрические междуузлия обозначены как o, o₁, o₂, тетраэдрические – t₁, t₂, t₃. Чтобы выявить влияние атома водорода на профили диффузионных барьеров другого атома водорода, мы рассмотрели 6 неэквивалентных диффузионных скачков атома водорода в системе Ti₁₆H₂: o_i→o₁, o_i→o₂, o→t₁, t₁→o₂, t₁→t₂, t₂→t₃.

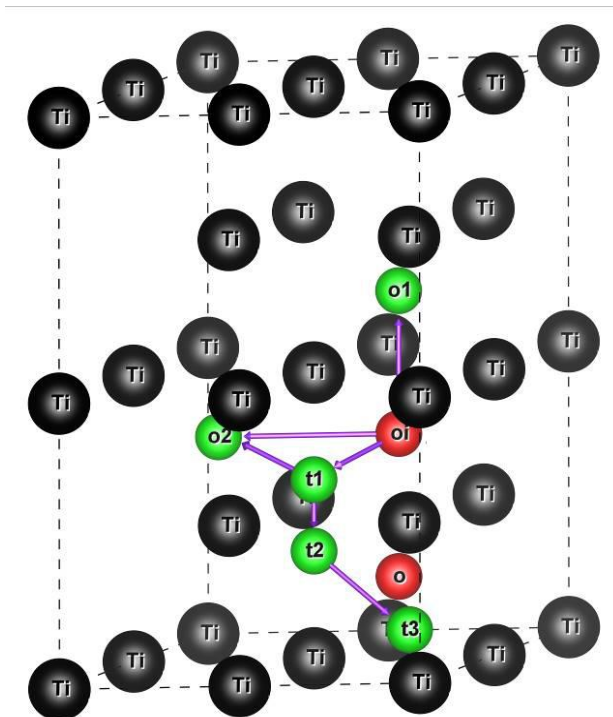


Рисунок 11 – Направления неэквивалентных диффузионных скачков в системе

Ti₁₆H₂. o_i, t₁, t₂ – начальное междуузлие,

o₁, o₂, t₁, t₂, t₃ – конечные междуузлия в диффузионных скачках

3.5 Профили диффузионных барьеров

Для расчета энергий, необходимых для смещения водорода в направлении диффузионного скачка между двумя близлежащими междуузлиями, мы последовательно смещали атом водорода вдоль линии,

соединяющей исходное междоузлие с конечным междоузлием. Высота барьера ΔE в различных точках линии смещения рассчитывалась следующим образом:

$$\Delta E = E_i - E_0, \quad (3.3)$$

где E_i – полная энергия элементарной ячейки с атомом водорода, расположенным в точке на линии смещения.

E_0 – полная энергия элементарной ячейки с атомом водорода в исходном междоузлии.

Для нахождения параметров диффузионных скачков (высота барьера E и длина скачка d) мы использовали алгоритм NEB (nudged elastic band), смещая атом водорода в направлении диффузионного скачка из исходного междоузлия в конечное. Кроме того, атомы титана фиксировались в положениях, соответствующих ситуации, когда водород находится в исходном междоузлии при сдвиге атома водорода вдоль линий, соединяющих соседние междоузлия. Результаты расчетов представлены на рисунках 12, 13.

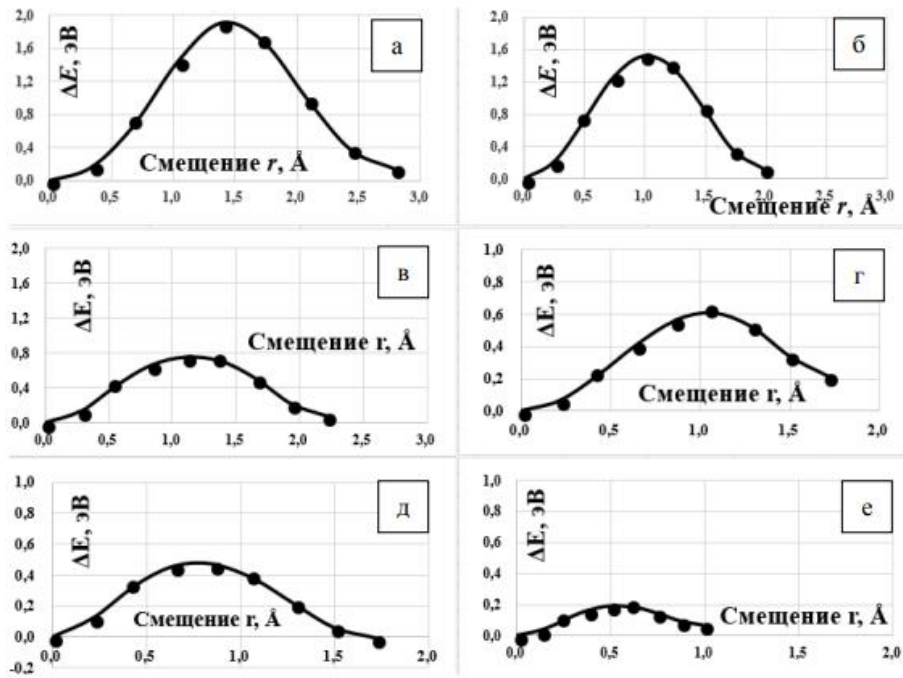


Рисунок 12 – Изменение энергии системы $Ti_{16}N$ в зависимости от смещения атома N относительно своего начального положения

а) $o \rightarrow o_2$, б) $t \rightarrow t_1$, в) $o \rightarrow o_1$, г) $o \rightarrow t$, д) $t \rightarrow o$, е) $t \rightarrow t_2$

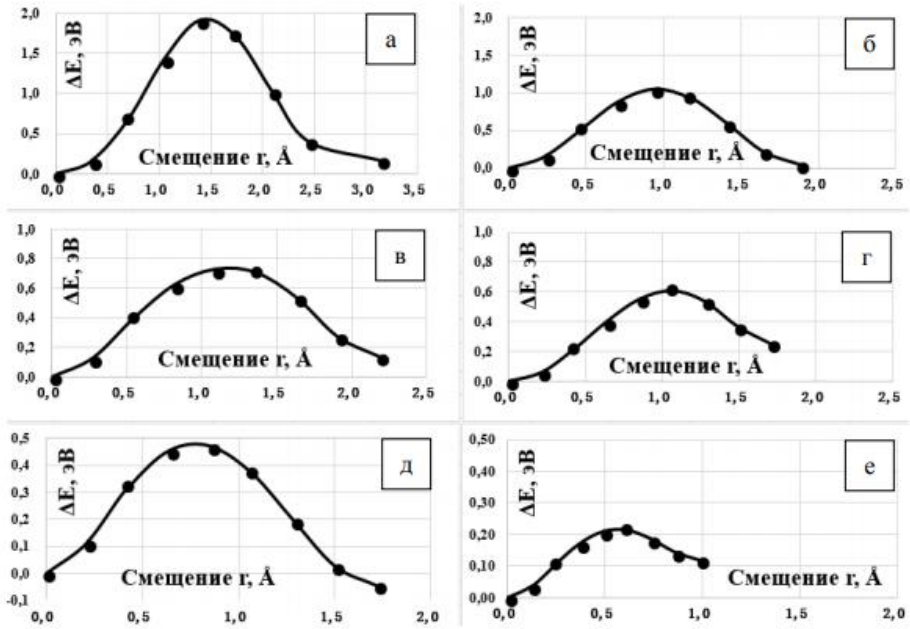


Рисунок 13 – Изменение энергии системы $Ti_{16}N_2$ в зависимости от смещения атома N относительно своего начального положения

а) $o \rightarrow o_2$, б) $t \rightarrow t_1$, в) $o \rightarrow o_1$, г) $o \rightarrow t$, д) $t \rightarrow o$, е) $t \rightarrow t_2$

Из рисунка 12 можно видеть, что минимальный барьер диффузии соответствует переходу $t \rightarrow t_2$ (величина этого барьера $\sim 0,19$ эВ). Однако из рис. 10 видно, что данный переход не может быть рассмотрен в качестве единственного в механизме миграции водорода в титане, поскольку данный переход осуществляется только между двумя близлежащими тетраэдрическими междоузлиями и не позволяет атому водорода перемещаться по всему объему кристалла. К основным способам миграции атома водорода относятся диффузионные скачки между тетраэдрическими и октаэдрическими, а также между октаэдрическими междоузлиями (величина барьеров для этих скачков варьируется в пределах 0,46-0,75 эВ). Из сравнения рисунков 12 и 13 можно видеть, что качественно механизм миграции атома водорода в присутствии вблизи другого атома водорода не изменяется. Однако наблюдается некоторые различия в длине и высоте некоторых диффузионных барьеров в твердых растворах $Ti_{16}H$ и $Ti_{16}H_2$ из-за взаимодействия между близлежащими атомами водорода в твердом растворе $Ti_{16}H_2$. Детальный анализ результатов расчетов, представленных в таблице 10, показал, что в твердом растворе $Ti_{16}H_2$, когда один атом водорода диффундирует, другой атом водорода незначительно возмущается, что приводит как к уменьшению, так и увеличению высоты барьеров в зависимости от направления диффузионных скачков. Из таблицы 10 видно, что добавление еще одного атома водорода в твердый раствор $Ti_{16}H$ приводит к увеличению длины барьера $o \rightarrow o_2$ ($o, o_i \rightarrow o_2$) и высоты барьера $t \rightarrow t_2$ ($o, t_1 \rightarrow t_2$). Также в присутствии второго атома водорода наблюдается уменьшению длины барьеров $t \rightarrow t_1$ ($o, t_2 \rightarrow t_3$) и $o \rightarrow o_1$ ($o, o_i \rightarrow o_1$) и высоты

барьеров $t \rightarrow t1$ ($o, t2 \rightarrow t3$) и $o \rightarrow o1$ ($o, oi \rightarrow o1$).

Таблица 10 – Сравнение барьеров диффузии для системы $Ti_{16}N$ и $Ti_{16}N_2$.

$Ti_{16}N$			$Ti_{16}N_2$		
Путь диффузии	Длина барьера диффузии, Å	Высота барьера диффузии, эВ	Путь диффузии	Длина барьера диффузии, Å	Высота барьера диффузии, эВ
$o \rightarrow o2$	2,786	1,908	$o, oi \rightarrow o2$	3,136	1,912
$t \rightarrow t1$	1,977	1,523	$o, t2 \rightarrow t3$	1,878	1,041
$o \rightarrow o1$	2,206	0,749	$o, oi \rightarrow o1$	1,909	0,727
$o \rightarrow t$	1,708	0,610	$o, oi \rightarrow t1$	1,703	0,609
$t \rightarrow o$	1,710	0,468	$o, t1 \rightarrow o2$	1,717	0,469
$t \rightarrow t2$	0,988	0,190	$o, t1 \rightarrow t2$	0,983	0,212

3.6 Коэффициент диффузии

В работе для оценки коэффициента диффузии, использовалось уравнение Аррениуса:

$$D = D_0 \cdot e^{-eE/kT} \quad (3.4)$$

где D_0 – предэкспоненциальный множитель;

E – высота барьера;

k – постоянная Планка;

T – температура.

Предэкспоненциальный множитель D_0 в уравнении Аррениуса оценивался в нашей работе как:

$$D_0 = \frac{f \cdot d^2}{N} \quad (3.5)$$

где f – частота колебаний атома водорода в исходном междоузлии;

N – количество эквивалентных диффузионных скачков атома водорода из начального междоузлия.

В нашей работе величина частоты f оценивалась с помощью квадратичной аппроксимации зависимости энергии E в направлении «Седловой» точки от величины этого смещения:

$$f \approx \frac{\sqrt{\frac{2C}{m_p}}}{2\pi} \quad (3.6)$$

где C – коэффициент квадратичного члена в зависимости полной энергии E кристалла от величины смещения атома водорода из исходного междоузлия;

m_p – масса ядра атома водорода.

Результаты расчетов параметров диффузионных скачков приведены в таблице 11. Чтобы оценить общий коэффициент диффузии, мы рассмотрим последовательность диффузионных скачков, необходимых для перемещения атома водорода в системе Ti–H на расстояние равное параметру решетки. На рисунках 14 и 15 показаны диффузионные скачки атома водорода вдоль направления [001] и [100], соответственно: а) из одного октаэдрического в другое октаэдрическое междоузлие; б) из одного тетраэдрического в другое тетраэдрическое междоузлие.

Таблица 11 – Параметры диффузии атома водорода в системе Ti-H

Система	Путь диффузии	Высота барьера E , эВ	Длина скачка d , Å	Коэффициент C , эВ/Å ²	Частота колебаний f , ТГц	Коэффициент D_0 , мм ² /с
Ti ₁₆ H	o→o1	0,749	2,206	1,742	29,07	0,707
	o→o2	1,908	2,786	1,435	26,38	3,414
	o→t	0,610	1,708	1,382	25,90	1,260
	t→t1	1,523	1,977	3,430	40,80	5,312
	t→t2	0,190	0,988	2,317	33,53	3,275
	t→o	0,468	1,710	2,959	37,89	3,692
Ti ₁₆ H ₂	oi→o1	0,727	2,182	1,779	29,38	1,399
	oi→o2	1,912	3,136	1,324	25,34	4,155
	oi→t1	0,609	1,703	1,337	25,47	2,460
	t2→t3	1,041	1,717	2,988	38,08	5,610
	t1→t2	0,213	0,983	2,993	38,11	3,682
	t1→o2	0,469	1,878	2,651	35,86	6,325

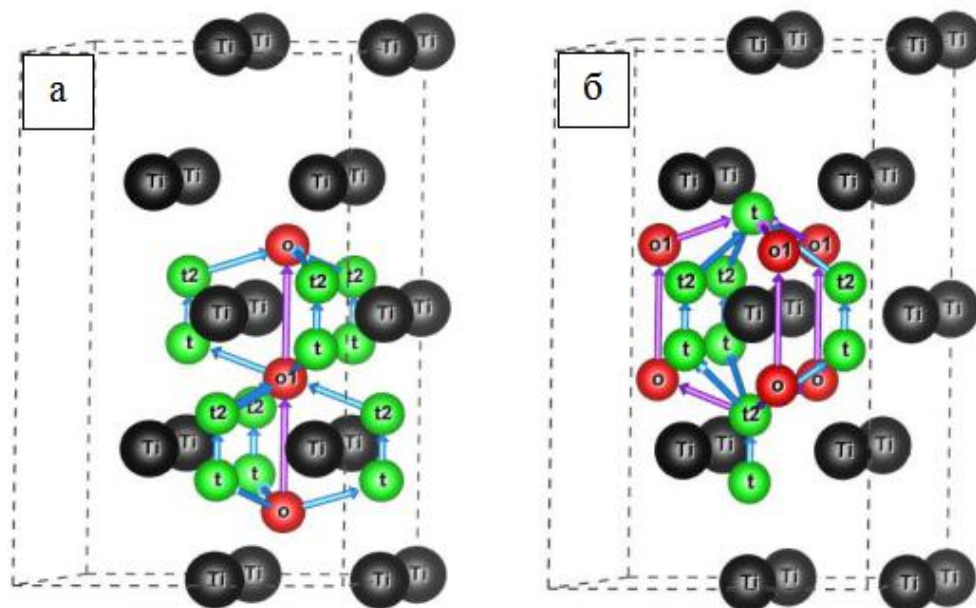


Рисунок 14 – Диффузионные скачки атома водорода вдоль направлении [001]

а) из О-междоузлия в О-междоузлие, б) из Т-междоузлия в Т-междоузлие

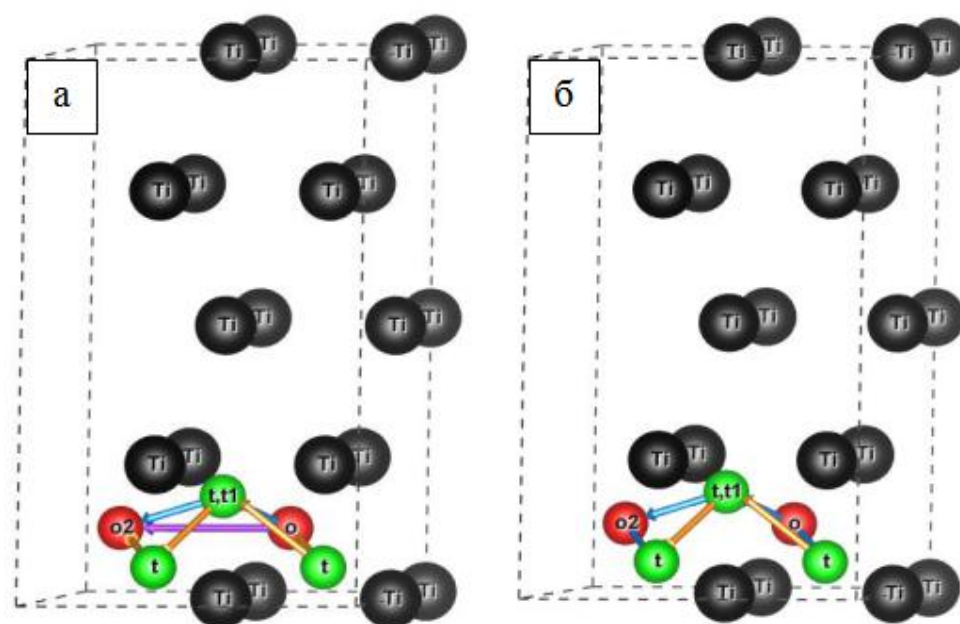


Рисунок 15 – Диффузионные скачки атома водорода вдоль направлении [100]

а) из О-междоузлия в О-междоузлие, б) из Т-междоузлия в Т-междоузлие

В работе для оценки общего коэффициента диффузии использовались формулы для последовательных диффузионных скачков (3.7) и параллельных диффузионных скачков (3.8):

$$D = \frac{1}{\frac{1}{D_1} + \frac{1}{D_2} + \dots + \frac{1}{D_n}}, \quad (3.7)$$

$$D = D_1 + D_2 + \dots + D_n, \quad (3.8)$$

Основы на этих формулах, можно определить коэффициент диффузии $D[001] = D_{o \rightarrow o}[001] + D_{t \rightarrow t}[001]$. Из анализа рисунка 15 можно записать $D_{o \rightarrow o}[001]$ и $D_{t \rightarrow t}[001]$ в следующем виде:

$$D_{o \rightarrow o}[001] = (D_{o \rightarrow o1} + 3 \cdot \frac{1}{\frac{1}{D_{o \rightarrow t}} + \frac{1}{D_{t \rightarrow t2}} + \frac{1}{D_{t2 \rightarrow o1}}}) / 2, \quad (3.9)$$

$$D_{t \rightarrow t}[001] = \frac{1}{\frac{1}{D_{t \rightarrow t2}} + \frac{1}{3 \cdot (\frac{2}{D_{t \rightarrow t}} + \frac{1}{D_{t \rightarrow t2}}) + 3 \cdot (\frac{1}{D_{t2 \rightarrow o}} + \frac{1}{D_{o \rightarrow o1}} + \frac{1}{D_{o1 \rightarrow t}})}}, \quad (3.10)$$

Коэффициенты диффузии водорода вдоль направлении [100] можно рассчитать по формулам

$$D_{o \rightarrow o}[100] = (D_{o \rightarrow o2} + \frac{1}{\frac{1}{D_{o \rightarrow t} + \frac{1}{\frac{1}{D_{o \rightarrow t}} + \frac{1}{D_{t \rightarrow t1}}}} + \frac{1}{D_{t \rightarrow o} + \frac{1}{\frac{1}{D_{t1 \rightarrow t}} + \frac{1}{D_{t \rightarrow o}}}}}) \cdot 2, \quad (3.11)$$

$$D_{t \rightarrow t}[100] = D_{t \rightarrow t2} + \frac{1}{\frac{1}{D_{t \rightarrow o}} + \frac{1}{D_{o \rightarrow t}}}, \quad (3.12)$$

Результаты расчетов показаны на рисунке 16. Из рисунка 16 видно, что коэффициенты диффузии водорода в α -титане вдоль направлений [100] и [001] практически не различаются. Коэффициенты диффузии водорода вдоль направлении [100] хорошо согласуется экспериментальной зависимостью [22].

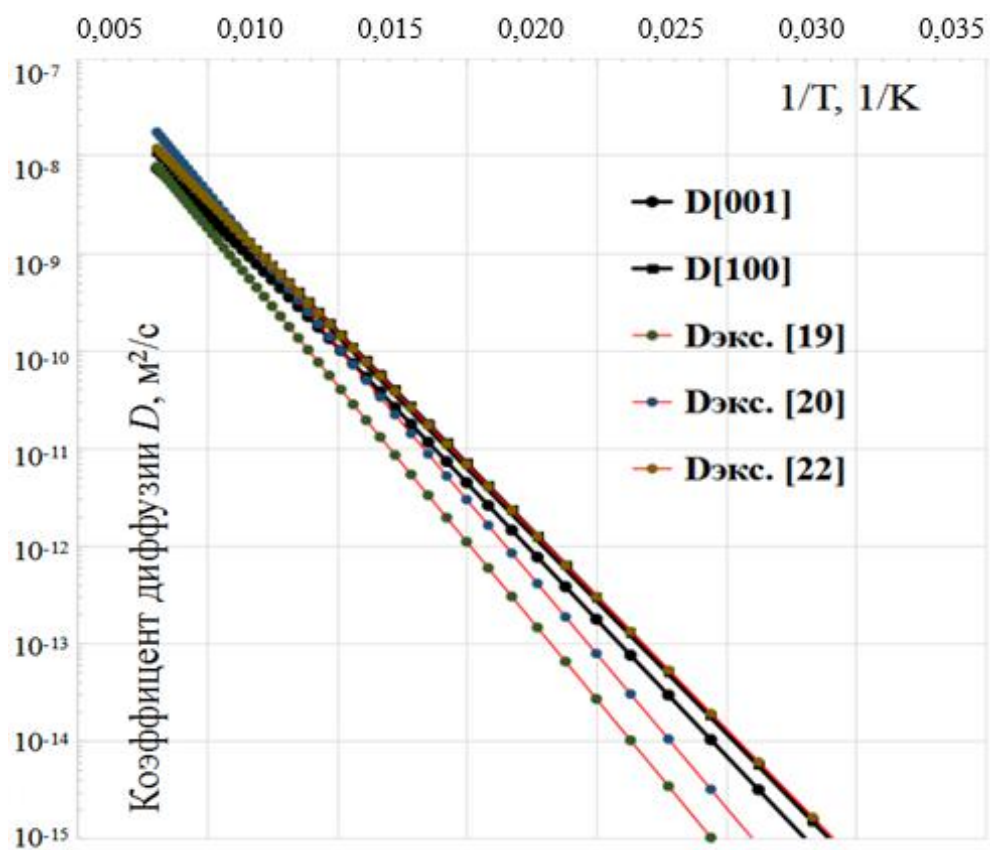


Рисунок 16 – Зависимость коэффициента диффузии от температуры
в твердом растворе Ti_{16}N

Глава 4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

Введение

В процессе поиска источников финансирования для научных исследований и коммерциализации результатов оценка бизнес-ценности работы является условным условием, в то же время в то же время одновременно в одно и то же время.

В дополнение к техническим параметрам предыдущих разработок необходимо понимать коммерческую привлекательность научных исследований.

Целью этих частей «финансового управления, ресурсоэффективности и ресурсосбережения» является проектирование, проектирование и создание компетентного разработчика, отвечающего требованиям эффективности и сохранения ресурсов ресурсов.

4.1 Планирование научно-исследовательских работ

4.1.1 Структура работ в рамках научного исследования

В рамках планирования научного проекта необходимо построить календарный и сетевой графики проекта. Линейный график представляется в виде таблицы 12. Научные исследования выполнила группа, в состав которой входили научный руководитель, лаборанты, и студент.

Таблица 12– Календарный план проекта

Основные этапы	№ работы	Содержание работы	Должность исполнителя
Разработка задания на НИР	1	Составление и утверждение задания НИР	Руководитель, студент-дипломник
Проведение НИР			
Выбор направления исследования	2	Изучение поставленной задачи и поиск материалов по теме	Студент-дипломник
	3	Выбор методов исследования	Студент-дипломник, руководитель
	4	Календарное планирование работ	Руководитель, студент-дипломник
Теоретические и экспериментальные исследования	5	Разработка приборов для исследования	Руководитель, студент-дипломник
	6	Проведение экспериментов	Студент-дипломник
Обобщение и	7	Анализ полученных	Студент-дипло

оценка результатов		результатов, выводы	мник, руководитель
	8	Оценка эффективности полученных результатов	Руководитель, студент-дипло мник
Оформление отчета по НИР	9	Составление пояснительной записки	Студент-дипло мник

4.1.2 Определение трудоемкости выполнения НИОКР

В большинстве случаев затраты на рабочую силу составляют значительную часть затрат на разработку, поэтому важно определить трудоемкость каждого участника научных исследований.

Кропотливая оценка выполнения научных исследований является квалифицированным специалистом и имеет вероятностный характер, поскольку она зависит от многих факторов, которые трудно рассмотреть. Чтобы определить ожидаемое (среднее) значение интенсивности труда $t_{ожи}$, используйте следующую формулу:

$$t_{ожи} = \frac{3t_{мини} + 2t_{махи}}{5}, \quad (4.1)$$

где $t_{ожи}$ – ожидаемая трудозатрата для работы на один день; $t_{мин}$ – наименьшая возможная трудозатрата с учетом i -й работы (оптимистичная оценка:

предполагает наиболее благоприятное совпадение), чел.-дн.; t_{\max} – задание позиции i Максимально возможная трудозатрата (пессимистическая оценка: предполагают наиболее неблагоприятное совпадение), чел.-дн.

В соответствии с ожидаемой интенсивностью работы продолжительность каждой работы основывается на работе по работе, в то время как доля работы по работе, которая учитывает несколько исполнителей, выполняющих заработную плату параллельно, заработная плата, заработная плата, заработная плата, заработная плата и т. д., Составляет примерно 65%.

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

4.1.3 Разработка графика проведения научного исследования

Учась в аспирантуре, студенты часто становятся участниками относительно небольших научных тем. Поэтому наиболее удобно и интуитивно установить теорию тезиса о теории науки.

Диаграмма Ганта – горизонтальные диаграммы пояса, которые характеризуются длительным периодом времени, начинаются с завершения этих проектов

Чтобы облегчить рисование, рабочее время для каждого рабочего дня должно быть преобразовано в календарные дни. Для этого используйте следующую формулу:

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

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

продолжительность выполнения i -й работы в рабочих днях; $K_{\text{кал}}$ – коэффициент календарности.

Коэффициент календарности определяется по следующей формуле:

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

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

Определим длительность этапов в рабочих днях и коэффициент календарности:

$$k_{\text{кал}} = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}}} = \frac{365}{365 - 52 - 14} = 1,22, \quad (4.5)$$

тогда длительность этапов в рабочих днях, следует учесть, что расчетную величину продолжительности работ T_k нужно округлить до целых чисел.

Расчитанные значения в календарных днях по каждой работе T_{ki} необходимо округлить до целого числа.



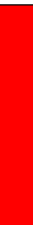

















Таблица 13 – Временные показатели проведения ВКР

№ работы	Исполнители	Продолжительность работ				
		t_{min} , чел-дн	t_{max} , чел-дн	$T_{\text{ож}}$, чел-дн	$T_{\text{р}}$, раб.дн	$T_{\text{к}}$, кал.дн
1	Руководитель, студент-дипломник	1	4	2	4	5
2	Студент-дипломник	15	40	25	17	21
3	Студент-дипломник, руководитель	5	10	8	4	5

№ работы	Исполнители	Продолжительность работ				
		t_{\min} , чел-дн	t_{\max} , чел-дн	$T_{\text{ож}}$, чел-дн	T_p , раб.дн	T_k , кал.дн
4	Руководитель, студент-дипломник	4	12	9	7	9
5	Руководитель, студент-дипломник	10	25	19	10	12
6	Студент-дипломник	15	25	16	16	20
7	Студент-дипломник, руководитель	5	10	8	4	5
8	Руководитель, студент-дипломник	2	5	4	4	5
9	Студент-дипломник	2	7	5	5	6
Итого	Руководитель			33		
	Студент-дипломник			71		

В таблице 13 показан календарный план. Расписание составлено на основе самого продолжительного рабочего времени в рамках исследовательского проекта в Таблице 14 и разбивается на месяц и неделю в течение периода сертификации. В то же время работа над диаграммой должна основываться на разных оттенках исполнителей.

Таблица 14 – Календарный план проведения НИР

Этапы	Вид работы	Исполнители	t _k	Февраль	Март	Апрель	Мая	Июнь
1	Составление и утверждение задания НИР	Студент-дипломник, руководитель	5	 				
2	Изучение поставленной задачи и поиск материалов по теме	Студент-дипломник	21		  			
3	Выбор методов для исследования	Студент-дипломник, руководитель	5			 		
4	Календарное планирование работ	Студент-дипломник, руководитель	9			 		
5	Разработка приборов для исследования	Студент-дипломник, руководитель	12			 		
6	Проведение экспериментов	Студент-дипломник	20			  		
7	Анализ полученных результатов, выводы	Студент-дипломник, руководитель	5				 	
8	Оценка эффективности полученных результатов	Студент-дипломник, руководитель	5				 	
9	Составление пояснительной записки	Студент-дипломник	6				 	

 - руководитель,  - студент-дипломник

4.2 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)

При планировании бюджетов НТИ вы должны обеспечить полное и надежное отражение всех видов затрат, связанных с их реализацией. В процессе формирования бюджета технологической инновации в соответствии со статьей используются следующие группировки затрат:

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

4.2.1 Расчет материальных затрат НТИ

Расчет материальных затрат осуществляется по следующей формуле:

$$Z_m = (1+k_T) \cdot \sum_{i=1}^m C_i \cdot N_{расхi} , \quad (4.6)$$

где m – количество видов материальных ресурсов, потребляемых в ходе научных исследований, $N_{расхi}$ – объем i -го материального ресурса, планируемого для научных исследований (в единицах кг, м, м² и т. д.); C_i – цена приобретения единицы i -го вида потребляемых материальных ресурсов (руб./шт., руб./кг, руб./м, руб./м² и т.д.); k_T – фактор, учитывающий стоимость

транспортировки и закупок. Транспортные расходы составляют 15-25% от стоимости материалов.

Таблица 15 – Материальный затраты

Наименование	Единица измерения	Количество	Цена за ед., руб.	Затраты на материалы, (Зм), руб.
Сплавы	Шт.	20	100	2000
Бумага	Лис.	150	2	300
Интернет	М/бит	1	350	350
Ручка	Шт.	1	20	20
Тетрадь	Шт.	1	50	50
Итого			522	2700

4.2.2 Расчет затрат на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ

В данную статью включают все затраты, связанные с приобретением специального оборудования (приборов, контрольно-измерительной аппаратуры, стенов, устройств и механизмов), необходимого для проведения работ по конкретной теме.

При приобретении спецоборудования необходимо учесть затраты по его доставке и монтажу в размере 15% от его цены.

Затраты на электроэнергию для установки: $Z_{\text{элек.}} = (0,5\text{кВт} \times 10\text{час} + 1,5\text{кВ} \times 80\text{час} + 0,16\text{кВт} \times 20\text{час} + 0,12\text{кВт} \times 40\text{час}) \times 6 \text{руб.кВт/час} = 798 \text{руб}$

Таким образом, затрат на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ равен 82,4 тыс.руб.

Таблица 16 – Расчет бюджета затрат на приобретение спецоборудования для научных работ

№ п/п	Наименование оборудования	Время использования оборудования, ч	Цена использования оборудования, руб./ч.	Общая стоимость оборудования, тыс. руб.
1	Установка автоматизированного комплекса Gas Reaction Controller	10	500	5
2	Стенд измерения параметров ультразвука	80	800	64
3	Индукционный нагреватель	20	30	0,6
4	Компьютер	40	300	12
Итого				81,6

4.2.3 Основная и дополнительная заработная плата исполнителей темы

Статья включает основную заработную плату работников,

непосредственно занятых выполнением проекта, (включая премии, доплаты) и дополнительную заработную плату. Заработная плата рассчитывается по формуле (4.8):

$$Z_{\text{зп}} = Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}} , \quad (4.7)$$

где $Z_{\text{осн}}$ – основная заработная плата; $Z_{\text{доп}}$ – дополнительная заработная плата.

Основная заработная плата ($Z_{\text{осн}}$) руководителя (лаборанта, инженера) от предприятия (при наличии руководителя от предприятия) рассчитывается по формуле (4.9):

$$Z_{\text{осн}} = Z_{\text{дн}} \cdot T_p , \quad (4.8)$$

где $Z_{\text{осн}}$ – основная заработная плата одного работника; T_p – продолжительность работ, выполняемых работником, раб. дн.; $Z_{\text{дн}}$ – среднедневная заработная плата работника, руб.

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_m \cdot M}{F_d} , \quad (4.9)$$

где Z_m – месячный должностной оклад работника, руб.; M – количество месяцев работы без отпуска в течение года (при шестидневной неделе $M=10,4$); F_d – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала ($F_d=1794$). Баланс рабочего времени показан на таблице 17.

Таблица 17 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Инженер
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней - выходные дни	66	66

Показатели рабочего времени	Руководитель	Инженер
- праздничные дни		
Потери рабочего времени		
- отпуск	48	48
- невыходы по болезни		
Действительный годовой фонд рабочего времени	251	251

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_M = Z_{TC} \cdot (1 + k_{PP} + k_D) \cdot k_P, \quad (4.10)$$

где Z_{TC} – заработная плата по тарифной ставке, руб.; k_{PP} – премиальный коэффициент, равный 0,3 (т.е. 30% от Z_{TC}); k_D – коэффициент доплат и надбавок составляет примерно 0,2 – 0,5 (НИИ и на промышленных предприятиях – за расширение сфер обслуживания, за профессиональное мастерство, за вредные условия: 15-20 % от Z_{TC}); k_P – районный коэффициент, равный 1,3 (для Томска).

В состав основной заработной платы включается премия, выплачиваемая ежемесячно из фонда заработной платы в размере 20–30 % от тарифа или оклада. Расчет основной заработной платы сводится в таблице 18.

Таблица 18 – Расчет основной заработной платы

Исполнители	$Z_{осн}$, руб	k_{PP}	k_D	k_P	Z_M , руб	$Z_{дн}$, руб	T раб. дни	Z итого
Руководитель	33600	0,3	-	1,3	43680	915	33	30195
Инженер	9893	0,3	-	1,3	12860	532	71	37772

Стоимость дополнительной зарплаты этого специального исполнителя учитывает сумму дополнительных платежей, которые отклоняются от обычных

условий труда и праздничных дней, связанных с предоставлением гарантий и компенсации и т. д.).

Дополнительная заработная плата рассчитывается исходя из 10 – 15% от основной заработной платы, работников, непосредственно участвующих в выполнении темы:

$$З_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} \cdot З_{\text{осн}} , \quad (4.11)$$

где $З_{\text{доп}}$ – дополнительная заработная плата, руб.; $k_{\text{доп}}$ – коэффициент дополнительной зарплаты; $З_{\text{осн}}$ – основная заработная плата, руб.

4.2.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

В данной статье расходов отражаются обязательные отчисления по установленным законодательством Российской Федерации нормам органам государственного социального страхования (ФСС), пенсионного фонда (ПФ) и медицинского страхования (ФФОМС) от затрат на оплату труда работников.

Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется исходя из следующей формулы:

$$З_{\text{внеб}} = k_{\text{внеб}} \cdot (З_{\text{осн}} + З_{\text{доп}}) , \quad (13)$$

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

На 2018 г. в соответствии с Федеральным законом от 24.07.2009 №212-ФЗ установлен размер страховых взносов равный 30,1%. На основании пункта 1 ст.58

Закона №212-ФЗ для учреждений осуществляющих образовательную и научную деятельность в 2018 году водится пониженная ставка –30,1%.

Таблица 19 – Отчисления во внебюджетные фонды

Исполнитель	Основная заработная плата, руб	Дополнительная заработная плата(12% от основной), руб
Руководитель проекта	30195	3623,4
Студент-дипломник	37772	4532,64
Коэффициент отчислений	0,302	
Итого	22989,16	

4.2.5 Накладные расходы

Косвенные затраты учитывают другие организационные расходы, которые не были включены в предыдущие статьи расходов: печатные и ксерокопии исследовательских материалов, платы за услуги связи, расходы на электричество, почтовые и телекоммуникационные расходы, плату за воспроизведение материала и т. Д. Их значения определяются по следующей формуле:

$$Z_{\text{накл}} = (\text{сумма статей } 1 \div 7) \cdot k_{\text{нр}}, \quad (14)$$

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

Величину коэффициента накладных расходов можно взять в размере 16%.

4.2.6 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

Таблица 20 – Расчет бюджета затрат НИИ

Наименование статьи	Сумма, руб.
Материальные затраты НИИ	3100
Затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	62088
Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	67967
Отчисления во внебюджетные фонды	22989,16
Накладные расходы	203
Бюджет затрат НИИ	156347,16

Вывод

В исследовании планирования оценивается бюджет. Стоимость научной (экспериментальной) работы, выполняемой специальным оборудованием, используемым при формировании группового бюджета материальной стоимости (3100 рублей) (62088 рублей) за основной поток исполнения заработной платы (67967 руб.) За счет внебюджетных средств (22 989,16 руб.), накладные расходы (203 рубля). Общий бюджет составляет 156 347,16 руб. Эта оценка стоимости бизнеса необходима для представления финансовой ситуации и перспектив текущих научных исследований.

Глава 5. Социальная ответственность

Введение

Исследовательская работа на тему исследования диффузии водорода в альфа-фазе титана (расчёты из первых принципов) предполагает проведение работ на компьютере. В течение последних десятилетий исследование системы титан-водород представляет научный интерес, поскольку Ti считается одним из наиболее перспективных материалов для хранения водорода, что обусловлено его высоким сродством к водороду (H). Сплавы на основе титана используются в качестве конструкционных материалов в химической и авиа-космической промышленности и в процессе эксплуатации подвергаются воздействию водородом. На сегодняшний день система титан-водород достаточно широко изучена.

5.1 Техногенная безопасность

Работа компьютера осуществляется за счет питания от сети переменного тока напряжением 220 В. При выполнении работ на компьютере возможно воздействие следующих вредных факторов:

- Микроклимат;
- Электромагнитные поля
- Статическое электричество
- Шум
- Недостаточное освещение

Также возможно воздействие таких опасных производственных факторов как:

- Электрическое напряжение;
- Воздействие высокой температуры;

5.1.1 Микроклимат

Основными факторами, характеризующими микроклимат производственной среды, являются: температура, текучесть и влажность. Отклонения от этих параметров приводят к ухудшению здоровья работника, снижению его работоспособности и появлению различных заболеваний.

Из-за интенсивного потоотделения, обезвоживания, потери минеральных солей и водорастворимых витаминов, увеличения скорости дыхания и влияния на работу других органов и систем (вызывают серьезные и постоянные изменения в сердечно-сосудистой системе, обращают внимание на высокие температуры Ослабление, координация движения, невосприимчивость тела и т. д.).

Перегрев тела при высоких температурах и высокой относительной влажности способствует переносу тепла с поверхности кожи при низких температурах, что приводит к переохлаждению организма. Низкая влажность вызывает неприятное ощущение в виде сухости слизистой оболочки дыхательных путей.

При оценке метеорологических условий на производственном объекте с учетом времени года, интенсивности выполняемых физических работ и

количества избыточных калорий в помещении. Наилучшая температура и допустимые погодные и влажностные условия установлены в соответствии с СанПин 2.2.4.548-96 (таблица 21).

Параметры микроклимата для удобства комнаты обязательно нормализуются, то есть меры и меры необходимы для контроля защиты от высоких и низких температур, отопления, вентиляции и кондиционирования воздуха, искусственного освещения и т. д.

Таблица 21 – Оптимальные показатели микроклимата на рабочих местах производственных помещений (СанПиН 2.2.4.548-96)

Период года	Категория работ по уровню энергозатрат, Вт	Температура воздуха, °С	Температура поверхности, °С	Относительная влажность воздуха, %	Скорость движения воздуха, м/с
Холодный	Ia (до139)	22-24	21-25	60-40	0,1
Теплый	Ia (до139)	23-25	22-26	60-40	0,1

5.1.2 Электромагнитные поля

Дипломная работа выполнялась с применением персональных компьютеров (ПЭВМ) типа IBM PC. Основным вредным фактором, воздействию которого подвергается инженер-исследователь при работе за компьютером, является электромагнитное излучение.

Безопасные уровни излучений регламентируются нормами СанПиН 2.2.2/2.4.1340–03 и представлены в таблице 22.

Таблица 22– Временные допустимые уровни (ВДУ) электромагнитных полей, создаваемых ПЭВМ на рабочих местах

Наименование параметров	Нормы в диапазоне частот	ВДУ
Напряженность электрического поля	5 Гц - 2 кГц	25 В/м
	2 кГц - 400 кГц	2,5 В/м
Плотность магнитного потока	5 Гц - 2 кГц	250 нТл
	2 кГц - 400 кГц	25 нТл
Напряженность электростатического поля		15 кВ/м

Пагубное воздействие на человеческий ПК происходит в глазах, кожных заболеваниях, неврологических и психиатрических заболеваниях и так далее. Показаны допустимые нагрузки напряженности электрического поля: 25 вольт / метр (5 Гц-2 кГц) и 2,5 В / м (2-400 кГц). Для предотвращения электромагнитных полей используются различные фильтры. Направление света должно быть на северо-восток или север. Источники искусственного освещения: люминесцентные лампы ЛБ и ДРЛ. Лучшие параметры микроклимата. При использовании ПК уровень звука не должен превышать значение, установленное для этих видов работы. Кроме того, защитные фильтры (сетка) рекомендуются для уменьшения влияния рассеянного рентгеновского излучения на ПК-мониторы.

5.1.3 Шум

Сильный шум вызывает трудности в распознавании цветовых сигналов, снижает быстроту восприятия цвета, остроту зрения, зрительную адаптацию, нарушает восприятие визуальной информации, снижает способность быстро и точно выполнять координированные движения, уменьшает на 5–12 % производительность труда. Длительное воздействие шума с уровнем звукового давления 90 дБ снижает производительность труда на 30–60 %.

В рассматриваемом кабинете основными источниками шума являются кондиционер, три компьютера (охлаждение внутри системного блока, оптические приводы DVD-ROM).

При выполнении основной работы на ПЭВМ в помещениях, где работают программисты, уровень шума не должен превышать 50 дБА.

В соответствии со спецификацией на компьютер DNS Office XL, уровень шума блока питания компьютера составляет 5–10 дБА, уровень шума охлаждающего устройства процессора 15–20 дБА, остальные элементы охлаждения являются пассивными и их уровень шума не учитывается. Шум, вызываемый работой оптических приводов, также не учитывается, так как они используются в работе незначительно малое время.

В соответствии со спецификацией на кондиционер LG S09AWU, максимальный уровень шума, производимого внутренним его блоком, составляет 28 дБА.

Чтобы соответствовать стандартам уровня шума, при работе в доме организации должны соблюдаться следующие правила:

1) Внутренний блок кондиционирования воздуха должен находиться далеко от персонала, занятого творческой деятельностью (программисты), и не использовать его на полную мощность при разрешении погодных условий;

2) Предотвращать компоненты компьютерной системы своевременно (очистить смазку движущихся частей пылесоса и охлаждающего оборудования, заменить чрезмерно шумные компоненты).

5.1.4 Недостаточное освещение

Разумное освещение на рабочем месте может предотвратить травмы и многие профессиональные заболевания. Правильно организованное освещение создает хорошие условия труда и повышает эффективность и производительность труда. Освещение рабочего места должно позволить работать без стресса. Существует три типа освещения: натуральное, искусственное и комбинированное.

Требования промышленной системы освещения следующие:

1) Степень освещенности и характер выполненной работы соответствуют;

2) Яркость рабочей поверхности и окружающего пространства полностью и равномерно распределена;

3) Наилучшая направленность светового потока, излучаемого осветительным устройством;

4) Долговечность, экономичность, электрическая и пожарная безопасность, эстетика, удобство и простота в эксплуатации.

В соответствии с СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03, искусственное освещение в помещениях осуществляется системой общего равномерного освещения.

В производственных и административных общественных местах, если он в основном занимается документацией, разрешается использовать комбинированную систему освещения (общее освещение дополнительно устанавливается с помощью местного осветительного устройства для освещения места расположения документа).

Визуальная работа программиста характеризуется очень точной работой. Это требует освещения в 300-500 люкс. Позволяет устанавливать локальную осветительную арматуру для освещения документа, при условии, что он не создает блики на поверхности экрана и не увеличивает освещенность экрана более чем на 300 люкс. Местные светильники должны иметь непрозрачный отражатель с углом защиты не менее 40 градусов.

В качестве источника света при искусственном освещении следует использовать люминесцентную лампу, которая в основном представляет собой тип ЛБ. Освещение должно быть в виде непрерывной или прерывистой линии светильников сбоку рабочего места, параллельно линии визирования пользователя в макет персонального компьютера (ПК). Когда компьютер находится вокруг комнаты, линия светильника должна быть выше рабочего стола, рядом с передним концом оператора.

Согласно СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03, естественное освещение осуществляется посредством проемов, ориентированных преимущественно на

север и северо-восток и обеспечивающих коэффициент естественной освещенности (КЕО) не менее 1,5 %.

Для обеспечения того, чтобы компьютер использовал стандартизованное значение освещения местоположения, необходимо очищать осветительное оборудование не реже двух раз в год и своевременно заменять старые осветительные приборы аналогичным осветительным оборудованием.

5.1.5 Электрическое напряжение

Влияние напряжения на людей обусловлено протекающим через него током. Циркуляция тока может вызвать раздражение и повреждение различных органов человеческого тела. Порог не срабатывает при 50 Гц (6-16 мА). Предотвращение текущих эффектов посредством организационных, инженерных, медицинских и профилактических мер.

Если работник получил травму из-за поражения электрическим током, необходимо как можно скорее защитить пострадавшего от поражения электрическим током, проверить состояние жертвы и при необходимости вызвать скорую помощь. Перед тем, как прибыть машина скорой помощи, предоставьте жертве необходимую первую помощь или организуйте, чтобы лицо было отправлено в ближайшее медицинское учреждение, когда это необходимо, и уведомите начальника структурного подразделения о том, что произошло.

5.1.6 Воздействие высокой температуры

Запрещается открывать крышку нагретой печи, дотрагиваться до камеры, а также необходимо одевать спецодежду, во избежание получения термических ожогов при работе с экспериментальными установками с высокими рабочими температурами.

5.2 Региональная безопасность

Лабораторные работы всегда сопровождаются постоянным образованием различных отходов: отходов, инструментов, абразивов, макулатуры и т. д.

При использовании суперкомпьютера есть отходы: бумага. Бумага используется для записи результатов эксперимента. Эти отходы могут вызвать загрязнение в литосфере. Чтобы защитить поверхностные и подземные воды от загрязнения и истощения, вы можете повторно использовать бумагу.

5.3 Организационные мероприятия обеспечения безопасности

Организационные меры для обеспечения безопасной работы компьютеров также разумны: люди в рабочей области могут присутствовать в течение 8 часов. Для вашей безопасности приступайте к работе и носите необходимые инструменты и оборудование, необходимые для подготовки рабочего стола. Вы также должны проверить поврежденное извне электрическое оборудование, доступность и управляемость, измерительные и сигнальные устройства, компьютеры, тумблеры, переключатели и т. Д. Если

обнаружена неисправность и не разрешено выполнять техническое обслуживание самостоятельно, это необходимо сообщить менеджеру лаборатории. Регулирование и ремонт оборудования могут выполняться только инженерами-технологами.

Если обнаружено, что любое используемое оборудование неисправно, а обучение технике безопасности и тестирование не выполняются в соответствии с установленными процедурами, запрещается продолжать работу.

Работа с суперкомпьютерами должна проводиться в чистой комнате. Пыль, пар, кислоты, щелочи, коррозионные газы и другие вредные примеси не должны вызывать коррозию. Нельзя открывать огонь рядом с прибором.

5.4 Особенности законодательного регулирования проектных решений

Обучать и контролировать работу в возрастном суперкомпьютере, который позволяет в возрасте до 18 лет не иметь медицинских табу на рабочем месте, чтобы быть в безопасности.

Существует не менее трудная работа, чем группа II электричества для выполнения работы над суперкомпьютерами с помощью специальных правил обучения и экзаменов и электроустановок, которые позволяют рабочим работать самостоятельно и позволяют рабочим, правилам безопасности, газовым баллонам, приобретенным навыкам и безопасным путям. И квалифицирован для работы с газовыми баллонами.

Повторная проверка знаний норм и правил электробезопасности, правил безопасной работы с газовыми баллонами проводится с работниками не реже 1

раза в 12 месяцев, повторный инструктаж на рабочем месте – не реже 1 раза в 3 месяца

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

По данной теме рассматриваются законодательный и нормативные документы:

- инструкция № 2-25 по охране труда при выполнении работ на установке Gas Reaction Controller;

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

- инструкция № 2-07 по охране труда при работе с баллонами, работающими под давлением.

Документы по воздействию ПЭВМ:

- инструкция № 2-08 по охране труда при работе с ПЭВМ и ВДТ;

- СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03. Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организация работы;

- ГОСТ Р 50948-01. Средства отображения информации индивидуального пользования. Общие эргономические требования и требования безопасности;

– ГОСТ Р 50949-01. Средства отображения информации индивидуального пользования. Методы измерений и оценки эргономических параметров и параметров безопасности;

– ГОСТ Р 50923-96. Рабочее место оператора. Общие эргономические требования и требования к производственной среде. Методы измерения.

Микроклимат:

– ГОСТ 12.1.005 Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны;

– СанПиН 2.2.4.548-96 Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.

Заключение

В работе был проведен анализ материалов ряда статей, посвященных теоретическим и экспериментальным исследованиям системы титан-водород. Добавление Н в Тi существенно влияет на его микроструктуру, а также стабильность, и понимание взаимодействия Н с Тi на микроскопическом уровне очень важно для контроля и предсказания свойств системы Ti-H. В работе использовался оптимизированный сохраняющий норму псевдопотенциал Вандербилята. Обменно-корреляционные эффекты рассматривались в рамках обобщенно-градиентного приближения в форме Пердю–Бурке–Эрнцерхофа.

В работе рассчитаны параметры решетки и теплота образования системы Ti-H при разных соотношениях атомов водорода и титана. Для всех рассмотренных конфигураций системы Ti-H представлены расчетные ячейки. Получено, что с ростом концентрации водорода в титане наблюдается увеличение параметров решётки. При концентрации водорода $X = \text{H}/\text{Ti}$ от 0,125 до 0,5 теплота образования Q_e системы Ti-H с ГПУ решёткой и атомами водорода в О- междуузлиях хорошо совпадают с результатами других расчетов.

В работе получено, что минимальный барьер диффузии соответствует переходу из одного тетраэдрического междуузлия в другое, осуществляемому вдоль гексагональной оси (величина этого барьера $\sim 0,20$ эВ). Однако этот переход не позволяет атому водорода перемещаться по всему объему кристалла, поэтому к основным способам миграции атома водорода также относятся диффузионные скачки между тетраэдрическими и октаэдрическими, а также

между октаэдрическими междоузлиями (величина барьеров для этих скачков варьируется в пределах 0,45-0,75 эВ).

Установлено, что в системах $Ti_{16}H$ и $Ti_{16}H_2$ основные пути миграции атома водорода не изменяются. Однако наблюдается некоторые различия в длине и высоте некоторых диффузионных барьеров в системах $Ti_{16}H$ и $Ti_{16}H_2$ из-за взаимодействия между близлежащими атомами водорода в системе $Ti_{16}H_2$. При этом в системе $Ti_{16}H_2$ наблюдаются как уменьшение, так и увеличение характеристик барьеров диффузии (высоты и длины) по сравнению с системой $Ti_{16}H$ в зависимости от направления диффузионных скачков одного атома водорода относительно другого.

В работе рассчитан коэффициент диффузии водорода в системе $Ti_{16}H$ вдоль кристаллографических направлений $[100]$ и $[001]$. Показано, что вдоль этих кристаллографических направлений коэффициенты диффузии практически не различаются и при комнатной температуре составляют $\sim 10^{-15}$ м²/с.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Lutjering G., Williams J.C.: «Titanium. 2nd ed. Springer». –2007. – P. 10с.
2. Дирак. П. Квантовая теория электрона :«СНТ». –Vol. 2. – P. 327-340с.
3. ABINIT – abinit [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.abinit.org> – 21.12.16.
4. Audi G., Wapstra A.H., and Thibault C.: «The AME2003 atomic mass evaluation (II). Tables, graphs, and references.». –2007.
5. Yun-Ya D., Li Y., Shu-Ming P., Xing-Gui L., Fei G., XiaoTao. Z.. Chin. Phys. Lett. –2010.
6. Kolachev B A. Hydrogen Embrittlement for Nonferrous Metals. Moscow: Metallurgy Press. –1996. – P. 73-74с.
7. Самарова И.Н.: «Водородное охрупчивание титана и его сплавов» –2010.
8. Rokhmanenkov A, Kuksin A, Yanilkin A. Simulation of hydrogen diffusion in TiHx structures. Phys Metals Metallogr 2017;118(1):28-38.
9. Jasak H, Jemcov A, Tukovic Z. OpenFOAM: a C++ library for complex physics simulations. In: International workshop on coupled methods in numerical dynamics, Vol. 1000. Croatia: IUC Dubrovnik; –2007. – P. 1-20с.
10. Born M.,Oppenheimer R. Zur Quanten theorie der Molekeln // Annalen der Physik. – 1927. – Vol. 84. – P. 457-484с.
11. Хартри Д. Расчёты атомных структур. – М.: ИИЛ, 1960. – P. 256с.
12. Hartree D. R. The wave mechanics of an atom with a non-Coulomb central field. Part I. Theory and Methods // Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. – 1928. – Vol. 24. – № 1. – P. 89–110с.

13. LeClaire A.D.: «Прогресс в области физики металлов». – 1949. – Vol. 1. – P. 306с.
14. A.D. LeClaire, «Прогресс в области физики металлов», – 1949. – Vol. 1 – P. 306с.
15. Nachtrieb N.H. и Handler G.S., Acta Met. –1954. – Vol 2 – P. 797с.
16. Reynolds J.E., Ogden H.R. и Jaffee R.I., BMI-TML Report № 10.
17. J.E. Dorn, «Creep and Recovery», ASM, 1946 – P.255с.
18. R.L. Orr, O.D. Sherby и J.E. Dorn, Trans. ASM, – 1954. – Vol. 46. – P. 113с.
19. F.B. Кафф, младший и Н. Дж. Грант, Железный век, – 1952. – Vol. 170. – P. 134с.
20. Н. Kusamichi, Y. Yagi, T. Yukawa и T. Noda, Nippon Kinzoka Gakkaishi, – 1956. – Vol. 39. – P. 39с.
21. Н. Kusamichi, Y. Yagi, T. Yukawa и T. Noda, Jap Sci. Rev. Mining Met., – 1957. – Vol. 1. – P. 133с.
22. W. Koster, L. Bangert and M. Evers, Z. Metallkunde, – 1956. – Vol. 47. – P. 564с.
23. R.J. Wasilewski и G.L. Kehl, Metallurgia, – 1954. – Vol. 50. – P. 225с.
24. R.D. Daninels, E.L. Harmon, Jr. and A.R. Troiano, WADC Tech. Повт. 57-30, ASTIA № документа ADI18136 (1957).
25. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous Electron Gas // Phys. Rev. – 1964. – Vol. 136. – № 3B. – P. 864–871с.
26. A.D. LeClaire, «Прогресс в области физики металлов», – 1949. – Vol. 1. – P. 306с.

27. Цидильковский И. М. Электроны и дырки в полупроводниках. Энергетический спектр и динамика. М.: «Наука» – 1972.– Р. 91с.
28. Харрисон У. Псевдопотенциалы в теории металлов. – М.: Мир,– 1968. – Р. 366с.
29. Займан Дж. Принципы теории твердого тела. – М.: Мир,– 1974. – Р. 472с.
30. Griessen R, Riesterer T. Heat of formation models. In: Schlapbach L, editor. Hydrogen in intermetallic compounds. I. Berlin: Springer; – 1988. – Р. 219-84с.
31. Liang C.P., Gong H.R., Structural stability, mechanical property and phase transition of the Ti-H system // Int. J. Hydrogen Energ. – Vol. 35. – 2010. – Р. 11378-11386с.