

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

Школа Инженерная школа энергетики

Направление подготовки Электроснабжение промышленных предприятий

Отделение школы (НОЦ) 13.04.02 «Электроэнергетика и электротехника»

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
Закономерности накопления водорода и дефектов в магнии

УДК 669.721.019:661.96:621.351

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
5ГМ7В	Жаткина Александра Андреевна		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОЭФ	Лаптев Р.С	к.т.н., доцент		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН	Подопригора И. В.	к.экон.н., доцент		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель	Атепаева Н.А.			

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Сурков М.А.	к.т.н., доцент		

Томск-2019 г

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ
по основной образовательной программе высшего профессионального
образования, направление подготовки 13.04.02 Электроэнергетика и электротехника,
квалификация - магистр

Код резу- льтата	Результат обучения (компетенции выпускника)
Универсальные компетенции	
P1	Совершенствовать и развивать свой интеллектуальный и общекультурный уровень, добиваться нравственного и физического совершенствования своей личности, обучению новым методам исследования, к изменению научного и научно-производственного профиля своей профессиональной деятельности.
P2	Свободно пользоваться русским и иностранным языками как средством делового общения, способностью к активной социальной мобильности.
P3	Использовать на практике навыки и умения в организации научно-исследовательских и производственных работ, в управлении коллективом, использовать знания правовых и этических норм при оценке последствий своей профессиональной деятельности.
P4	Иметь представление о методологических основах научного познания и творчества, роли научной информации в развитии отрасли, навыки проведения работ с привлечением современных информационных технологий, синтезировать и критически резюмировать информацию.
Профессиональные компетенции	
P5	Применять углубленные естественные, математические, социально-экономические и профессиональные знания в междисциплинарном контексте в инновационной инженерной деятельности в области электроэнергетики и электротехники.
P6	Ставить и решать инновационные задачи инженерного анализа в области электроэнергетики и электротехники с использованием глубоких фундаментальных и специальных знаний, аналитических методов и сложных моделей в условиях неопределенности.
P7	Выполнять инженерные проекты с применением оригинальных методов проектирования для достижения новых результатов, обеспечивающих конкурентные преимущества электроэнергетического и электротехнического производства в условиях жестких экономических и экологических ограничений.
P8	Проводить инновационные инженерные исследования в области электроэнергетики и электротехники, включая критический анализ данных из мировых информационных ресурсов.
P9	Проводить технико-экономическое обоснование проектных решений; выполнять организационно-плановые расчеты по созданию или реорганизации производственных участков, планировать работу персонала и фондов оплаты труда; определять и обеспечивать эффективные режимы технологического процесса.
P10	Проводить монтажные, регулировочные, испытательные, наладочные работы электроэнергетического и электротехнического оборудования.
P11	Осваивать новое электроэнергетическое и электротехническое оборудование; проверять техническое состояние и остаточный ресурс оборудования и организовывать профилактический осмотр и текущий ремонт.

P12	Разрабатывать рабочую проектную и научно-техническую документацию в соответствии со стандартами, техническими условиями и другими нормативными документами; организовывать метрологическое обеспечение электроэнергетического и электротехнического оборудования; составлять оперативную документацию, предусмотренную правилами технической эксплуатации оборудования и организации работы.
-----	--

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСООБЪЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту:

Группа	ФИО
5ГМ7В	Жаткиной Александре Андреевне

Школа	ИШЭ	Отделение школы (НОЦ)	ОЭЭ
Уровень образования	Магистр	Направление/специальность	13.04.02 Электроэнергетика и электротехника

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

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Затраты на спец. оборудование – 4 652 900 руб. Основная заработная плата – 205 782 руб. Дополнительная заработная плата – 26 751,6 руб.
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	Амортизационные отчисления – 1 351 253,1 руб.
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	Отчисления во внебюджетные фонды – 28 % Районный коэффициент – 30 %

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ	Оценка степени готовности проекта к коммерциализации; SWOT-анализ; Диаграмма Ганта;
2. Разработка устава научно-технического проекта	Составление календарного плана проекта. Определение бюджета НИ
3. Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности	Определение эффективности и перспектив научного исследования.

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. Диаграмма Ганта
2. Матрица SWOT
3. График проведения и бюджет НТИ

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН	Подопригора И. В.	к.э.н., доцент		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
5ГМ7В	Жаткина Александра Андреевна		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
5ГМ7В	Жаткиной Александре Андреевне

Школа	ишЭ	Отделение школы (НОЦ)	ОЭЭ
Уровень образования	Магистр	Направление/специальность	13.04.02 Электроэнергетика и электротехника

Тема ВКР:

Закономерности накопления водорода и дефектов в магнии	
Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	Объектом исследования является порошок гидрида магния с целью его дальнейшего использования в качестве материала для хранения водорода. Рабочая зона – лаборатория НЗ 3-го корпуса ТПУ
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности: – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.	ГОСТ 12.1.006-84 ССБТ; СП 52.13330.2016; СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-03; СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03; ГОСТ 12.1.019-2017 ССБТ; СН 2.2.4/2.1.8.562-96; СП 51.13330.2011; Р 2.2.2006-05; ГОСТ 12.1.010-76 ССБТ; ФЗ от 22.07.2013 г. №123; ФЗ от 28 декабря 2013 г. N 426-ФЗ
2. Производственная безопасность: 2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов 2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия	1. Отклонение показательней микроклимата на рабочем месте; 2. Превышение уровня шума; 3. Повышенный уровень электромагнитных излучений; 4. Недостаточная освещенность рабочей зоны; 5. Химические вещества, косвенно действующие на организм работающего как опасные и вредные производственные факторы физической природы действия, обусловленные свойствами этих химических веществ воспламеняться, гореть, тлеть, взрываться и т.п.

	Мероприятиями по снижению воздействия выступают: 1. Наличие элеткроизоляции установок; 2. Наличие первичных средств пожаротушения; 3. Наличие охранно-пожарной сигнализации.
3. Экологическая безопасность:	Гидрид магния не токсичен, однако в процессе его подготовки необходим отдельный сбор мусора с целью дальнейшей переработки.
4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:	В связи с использованием водорода в процессе наводороживания существуют возможности возникновения пожара и взрыва. Чтобы избежать такой опасности необходимы следующие мероприятия: 1) наличие в помещении СИЗ; 2) наличие и поддержание в постоянной готовности системы общего оперативного и локального оповещения и информации о пожаре и взрыве; 3) при возникновении ЧС необходимо по возможности устранить все опасные источники. Если напор выхода газа сильный – дать газу полностью выйти. 4) Изолирование опасной зоны в радиусе 300 м, удаление посторонних.

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель ООД ШБИП	Атепаева Н.А.			

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
5ГМ7В	Жаткина Александра Андреевна		

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

Школа Инженерная школа энергетики

Направление подготовки Электроснабжение промышленных предприятий

Уровень образования Магистр

Отделение школы (НОЦ) Электроэнергетика и электротехника

Период выполнения (осенний / весенний семестр 2018/2019 учебного года)

Форма представления работы:

Магистерская диссертация

(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)
28.03.2019	Обзор литературы	20
10.04.2019	Объект и методы исследования	25
05.05.2019	Расчет и аналитический анализ	25
22.05.2018	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	15
24.05.2018	Социальная ответственность	15

Составил преподаватель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Лаптев Р.С	к.т.н., доцент		

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Сурков М.А.	к.т.н., доцент		

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

Школа Инженерная школа энергетики
Направление подготовки Электроснабжение промышленных предприятий
Отделение школы (НОЦ) Электроэнергетика и электротехника

УТВЕРЖДАЮ:
Руководитель ООП
_____ Сурков М.А.
(Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Магистерской диссертации

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

Студенту:

Группа	ФИО
5ГМ7В	Жаткиной Александре Андреевне

Тема работы:

Закономерности накопления водорода и дефектов в магнии	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

Исходные данные к работе	Исходный материал: мелкодисперсный магниевый порошок марки МПФ-4. Целью работы является исследование закономерности накопления водорода и дефектов в мелкодисперсном магниевом порошке марки МПФ-4 до и после наводороживания.
Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов	1. Литературный обзор, включающий историю развития водородной энергетики, методы хранения водорода, физические основы методов электрон-позитронной аннигиляций, взаимодействие водорода с дефектами. 2. Подготовка образцов для исследования. 3. Измерение параметров аннигиляции позитронов в образцах. 4. Определение типа и концентрации дефектов методами позитронной спектроскопии.

	5. Исследование зависимости изменения аннигиляционных характеристик образцов магния при высокотемпературном вакуумном отжиге. 6. Газофазное гидрирование образцов магния. 7. Измерение параметров аннигиляции позитронов в образцах магния после наводороживания. 8. Анализ полученных результатов.
Перечень графического материала	Графики характеристики позитронной аннигиляции
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы <i>(с указанием разделов)</i>	
Раздел	Консультант
Литературный обзор	Доцент ОЭФ Лаптев Р.С.
Материал и методы исследования	Доцент ОЭФ Лаптев Р.С.
Результаты эксперимента	Доцент ОЭФ Лаптев Р.С.
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Доцент ОСГН Подопригора И.В.
Социальная ответственность	Старший преподаватель Атепаева Н. А.
Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:	

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

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОЭФ	Лаптев. Р.С.	к.т.н., доцент		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
5ГМ7В	Жаткина А.А.		

Реферат

Выпускная квалификационная работа содержит 110 с., 14 рисунков, 28 таблиц, 86 источников, 1 приложение.

Ключевые слова: позитронная аннигиляция, дислокации, вакансионный комплекс, наводороживание, магний, поглощение водорода, позитронная спектроскопия.

Объектом исследования является мелкодисперсный магниевый порошок марки МПФ-4.

Целью работы является исследование закономерности накопления водорода и дефектов в магнии.

Методом временной аннигиляционной позитронной спектроскопии был проведено исследование дефектной структуры в порошке магния.

Структура дефектов в порошке магния определена по первой компоненте времени жизни, которые возможно связаны с аннигиляцией позитронов в вакансиях, либо с водород-вакансионными комплексами. Проведен расчет концентрации тривакансий по трехкомпонентной модели захвата позитронов. Согласно полученным данным наводороживание приводит к существенным изменениям временного распределения аннигиляции позитронов.

Основной областью применения установок для хранения водорода являются заправки грузового транспорта на водородных топливных элементах, а также стационарные системы. Потенциальными пользователями разрабатываемого решения являются потребители электрической энергии.

Значимость работы заключается в наличии большой емкости хранения энергии в металло-воздушных батареях на основе магния (в несколько раз больше, чем у литий-ионных). Магний относится к безопасным и недорогим и легким материалам. Отходами от использования магния являются окись и гидроокись магния, которые относятся к экологически чистым веществам.

Оглавление

Введение	14
1 Методы хранения водорода	16
1.1 История развития водородной энергетики	16
1.2 Получение, применение и хранение водорода	18
1.2.1 Особенности использования водорода	18
1.2.2 Виды и особенности хранения водорода	19
1.2.3 Металлогидридный способ хранения водорода	23
1.3 Особенности накопления водорода в магнии	25
1.4 Взаимодействие водорода с дефектами	27
1.4.1 Металлогидридный способ хранения водорода	27
1.4.2 Описание взаимодействия	29
1.5 Особенности аннигиляции позитронов в материалах	30
1.5.1 Физические основы и экспериментальные методы позитронной спектроскопии	30
1.5.2 Модель захвата позитронов дефектами	32
1.5.3 Анализ временного распределения аннигиляции позитронов	33
1.6 Автоматизированный комплекс Gas Reaction Controller	36
2 Материал и методы исследования	39
2.1 Материал	39
2.2 Расчет пробега позитронов и разработка методики спектрометрии временного распределения аннигиляции позитронов в порошке магния ...	39
3 Исследование дефектной структуры порошка магния	42
3.1 Исследование временного распределения аннигиляции позитронов в порошке магния в зависимости от температуры отжига до наводороживания	42

3.2	Определение основных типов дефектов и расчет их концентрации	43
3.3	Исследование временного распределения аннигиляции позитронов в гидриде магния после наводороживания после наводороживания	44
4	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение ...	48
4.1	Оценка готовности проекта к коммерциализации	48
4.2	SWOT-анализ.....	49
4.3	Планирование работ	54
4.3.1	Структура работ в рамках проекта.....	54
4.3.2	Определение трудоемкости выполнения работ.....	55
4.3.3	Разработка графика проведения научного исследования	56
4.3.4	Бюджет научного исследования.....	59
4.3.4.1	Расчет материальных затрат проекта.....	59
4.3.4.2	Расчет затрат на специальное оборудование для проекта	59
4.3.4.3	Основная заработная плата исполнителей темы	60
4.3.4.4	Дополнительная заработная плата исполнителей темы.....	62
4.3.4.5	Отчисления во внебюджетные фонды	63
4.3.4.6	Накладные расходы	64
4.3.4.7	Формирование бюджета затрат проекта	64
4.4	Оценка сравнительной эффективности исследования	65
5	Социальная ответственность	70
5.1	Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	70
5.2	Производственная безопасность	71
5.3	Анализ опасных и вредных производственных факторов	72
5.4	Обоснование мероприятий по снижению уровней воздействия опасных и вредных факторов на исследователя.....	76
5.5	Экологическая безопасность	77
5.6	Безопасность в чрезвычайных ситуациях	77
	Заключение	82
	Список использованных источников	83

Приложение А	92
--------------------	----

Введение

В работе исследуются закономерности накопления водорода и структурные дефекты в магнии после деформации и наводороживании методами позитронной спектроскопии.

Водородная энергетика является одним из самых быстро развивающихся научных направлений. Ввиду глобального потепления и других экологических проблем основное внимание мирового научного сообщества в настоящее время обращено к поискам альтернативных источников энергии, из которых особый интерес представляет развитие водородной энергетики. Использование водорода и топливных элементов открывает уникальный путь получения «безопасной» энергии, выработка которой не влияет на климат и повышает эффективность использования энергии.

Водород обладает низкой плотностью в газообразном виде, низкой температурой сжижения, высокой взрывоопасностью и негативным воздействием на свойства конструкционных материалов. Следовательно, возникает необходимость разработки эффективных и безопасных систем хранения водорода. Наиболее перспективным материалом для хранения водорода в форме гидридов считается магний, имеющий высокое значение водородоемкости, обратимая сорбция которого составляет до 7,6% (масс.) и 101 г/л. Металлический магний - это достаточно доступный и дешевый материал.

Чтобы исследовать электронную структуру материалов применяется метод позитрон-аннигиляционной спектроскопии (ПАС), как уникальный и эффективный метод определения дефектов (вакансии, дислокации) в твердом теле на основе обнаружения γ -излучения, которые передают информацию о времени жизни позитронов. ПАС включает в себя три метода, один из которых использован в работе – метод спектрометрии по времени жизни позитронов.

Он позволяет исследовать механизм и динамику возникновения, превращения в другие виды и исчезновения дефектов.

Целью работы является исследование дефектов и закономерности накопления водорода в мелкодисперсном магниевом порошке марки МПФ-4 до и после наводороживания.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие задачи:

1. Подготовка образцов;
2. Расчет пробега и разработка методики спектрометрии временного распределения аннигиляции позитронов в порошке магния;
3. Измерение параметров аннигиляции позитронов в мелкодисперсном магниевом порошке марки МПФ-4 до наводороживания;
4. Насыщение водородом из газовой среды автоматизированным комплексом Gas Reaction Controller;
5. Измерение параметров аннигиляции позитронов в мелкодисперсном магниевом порошке марки МПФ-4 после наводороживания;
6. Исследование временного распределения аннигиляции позитронов в порошке магния с разными стехиометрическими составами;
7. Определение типа и концентрации дефектов в мелкодисперсном магниевом порошке марки МПФ-4 методами позитронной спектроскопии;
8. Анализ полученных результатов.

1. Методы хранения водорода

1.1. История развития водородной энергетики

Использование ископаемых видов топлива все чаще приводит к загрязнению окружающей среды и выбросам двуокиси углерода. В крупных городах, где сосредоточены основные производственные мощности, складывается неблагоприятная экологическая обстановка. Концентрации вредных веществ в некоторых районах значительно превышают допустимую норму, что сказывается на безопасности для здоровья и жизни людей, животных, а также окружающей среды. Предпринимаются меры по освоению устойчивых и чистых источников энергии взамен использования ископаемых видов топлива.

В последние годы растёт интерес к водороду, привлекательность которого заключается в экологической чистоте и эффективности процессов преобразования энергии с его участием. Крупномасштабное развитие водородной энергетики зародилось в середине 70-х годов XX века как естественная реакция человеческого общества на возникшие экологические проблемы. В 1974 г. была создана Международная ассоциация по водородной энергетике.

Позже была детально разработана концепция водородной энергетики, согласно которой:

- Водород получают из воды с использованием не возобновляемых и возобновляемых источников;
- Водород необходимо хранить и транспортировать;
- Водород используют в промышленности, на транспорте и в быту;
- Использование водорода ведет за собой необходимость знания проблем надежности материалов и безопасности водородных систем.

В 1999 г. в США была принята программа Департамента энергетики США «Водород, топливные элементы и технологии инфраструктуры». В Японии осуществляются разработки, направленные на создание

инфраструктуры водородной энергетики и широкое внедрение стационарных энергоустановок на топливных элементах, а также автотранспорта, работающего на водородном топливе и топливных элементах [10]. Европа достаточно активно занимается созданием водородных проектов, страны Северной Европы имеют целый ряд межгосударственных и собственных национальных водородных программ. Разработки направлены на исследования выгодных способов производства водорода, хранения, транспортировки и создания автономных энергосистем. Китай занимает второе место по производству водорода в мире. Также активную деятельность в развитии концепции водородной энергетики ведут Канада, Индия, Австралия, Новая Зеландия, Бразилия, и др.

В настоящее время крупные компании, такие как General Motors, Ford Motors, BMW занимаются разработкой проектов по созданию фургона на водородном топливе, а Toyota уже выпустила в серийное производство автомобили с гибридными двигателями (комбинация бензин и водород) [12, 14]. Осуществляется строительство водородных заправочных станций преимущественно в Северной Америке, Германии, Японии.

В 2003 г. в России между РАН и «Норильским никелем» была создана программа работ по водородной энергетике. Также была введена программа по созданию доступных коммерчески энергоустановок на топливных элементах. Однако в России водородная энергетика в настоящее время не имеет широкого развития. Отсутствие национальных программ по разработке и производству топливных элементов (ТЭ), отсутствие государственного финансирования проектов исследований и разработок в области ТЭ, а также неразвитость конкретной политики по экологически чистым ресурсо- и энергосберегающим технологиям препятствуют работам в России по водородной энергетике [20]. Необходимы новые успешные разработки в области водородной энергетики, которые смогут повлиять на рост рынка распределенной генерации, что имеет схожие позиции развития экологически чистого и умного энергопотребления.

1.2. Получение, применение и хранение водорода

1.2.1. Особенности использования водорода

Водород - наиболее распространенный элемент во Вселенной и на Земле (в земной коре содержание водорода составляет 1,4 г/кг) [15]. Основными источниками водорода в составе химических соединений являются вода и органические соединения. Чтобы извлечь водород из связанного состояния разрабатывают методы, и в настоящее время технологии производства водорода составляют около 50 млн т, из них 68% относится к получению водорода в чистом виде, остальная часть - побочный продукт других производств [17].

Водород получают из природных органических топлив, среди которых самым освоенным методом является паровая конверсия метана. Через стенку трубы с участием катализатора (никель, корунд и др.) на поверхности отделяется водород. Процесс протекает в трубчатых печах, к которым подводится тепло извне при температуре 750–850 °С [27]. Но при этом конечный продукт содержит примеси, требуется доочистка.

Другим устоявшимся методом получения водорода является электролиз (электрохимический, термический, термохимический, биохимический, фотохимический и др.), в результате которого конечный продукт обладает высокой чистотой, но энергозатраты производства высокие. Также разработаны технологии, использующие альтернативные источники энергии (солнечные концентраторы). Проекты, использующие энергию ветра или энергию из мусора, находятся на стадии исследования. При использовании газификации твердого горючего и биомассы получаемый конечный продукт требует дополнительной интенсивной очистки.

Водород является эффективным в процессе преобразования энергии и экологически чистым энергоносителем. Наиболее распространенным и эффективным способом использования водорода для получения электроэнергии является разработка топливных элементов [30].

Преимущество заключается в более высоком коэффициенте полезного действия (КПД) по сравнению с современными тепловыми электростанциями, что способствует экономии ископаемых видов топлива, а также в меньших затратах в сравнении с расщеплением и синтезом ядерного горючего.

Но существует и другая сторона: низкая плотность водорода в газообразном состоянии (при комнатной температуре и атмосферном давлении 1 кг водорода имеет объем 9 м³ [10]), низкая температура его сжижения, а также высокая взрывоопасность (скорость распространения пламени у водорода в 8 раз выше, чем у метана, а энергия воспламенения в 14,5 раз ниже в сравнении с метаном) и негативное воздействие на свойства конструкционных материалов ставят необходимость разработки эффективных и безопасных систем хранения водорода. Большие объемы водорода можно безопасно аккумулировать в баллонах под давлением и подземных хранилищах. Однако способы доступного хранения водорода непосредственно в транспортных средствах или в качестве питания портативных электронных устройств еще исследуются.

1.2.2. Виды и особенности хранения водорода

Эффективность систем хранения водорода оценивается по следующим характеристикам:

1. Массовая (гравиметрическая) емкость. Определяется как отношение массы запасенного водорода в системе к массе системы в целом;
2. Объемная ёмкость. Определяется как отношение массы запасенного водорода в системе к объему всей системы в целом.
3. Условия хранения (давление и температура), герметичность установки;
4. Термодинамические свойства. Условия для поглощения водорода аккумулятором и для выделения водорода – $T(K)$, $P(MPa)$, необходимость катализатора;

5. Циклическая устойчивость. Количество циклов перезарядки с сохранением необходимых параметров;
6. Количественная оценка потерь водорода в режиме длительного хранения;
7. Безопасность. Водород пожаро- и взрывоопасен;
8. Стоимость.

В таблице 1 представлены требования к транспортируемому хранению водорода [25].

Таблица 1 – Требования к мобильным системам хранения водорода

Японская правительственная программа <i>WE – NET</i>	Департамент энергетики США	Международное Энергетическое Агентство
Количество водорода > 3мас.%; Температура дегидрирования < 100°С; Циклическая устойчивость 90% после 5000 циклов.	Количество водорода > 6 мас.%; Количество водорода по объему > 60 кг/м³.	Количество водорода > 5 мас.%; Температура дегидрирования > 150°С.

Таким образом, разработки систем хранения водорода должны обладать свойствами безопасности, а также технической и экономической эффективности. Департамент энергетики США разделяет способы хранения водородного топлива на 2 группы [12].

К первой группе относятся физические методы - сжатый газ, компрессирование и ожижение. Хранение в виде газа требует сжатия водорода. В небольших объёмах газообразный водород хранят и перевозят в сосудах из стали под давлением до 20 МПа (рис. 1). Баллоны окрашены в темно-зеленый цвет и имеют надпись “Водород”. Корпус вентиля изготавливают из латуни. Масса водорода в таком случае выше 6% (масс) [14]. В больших количествах водород хранят под давлением до 10 МПа в крупных газгольдерах (их обычно изготавливают из углеродистой стали). В России и за рубежом популярны газгольдеры мокрого типа благодаря своей простой

конструкции и надежности [21]. Они представляют из себя неподвижный резервуар, который наполнен водой. В нем располагается подвижный стакан-колокол. В основании резервуара расположен газовый канал, через который под колокол подаётся газ. По мере наполнения газом резервуара поднимается колокол, вода же препятствует выходу газа из-под колокола. При высвобождении газа вода является поршнем для вытеснения газа из подвижных частей.

Также газообразный водород хранят в естественных и искусственных подземных хранилищах, наиболее перспективным считается способ хранения в водоносных горизонтах. Недостатками использования газообразного хранения являются низкая объемная плотность и необходимость высокого давления при условии, что водород относится к взрывоопасным газам.



Рисунок 1 - Баллон для хранения водорода [24]

При хранении водорода в жидком виде его охлаждают до температуры $-253\text{ }^{\circ}\text{C}$ по причине неполярности молекул водорода [11]. При этом для жидкого состояния водорода находится в пределах от точки кипения 20 K до точки замерзания 17 K (твердое состояния водорода). Выше точки кипения водород переходит в газообразное состояние. Давление обычно чуть выше атмосферного ($1,3\text{ МПа}$). Предельное значение объемной плотности водорода определяется его плотностью в жидком состоянии (70 кг/м^3) [29]. Хранение водорода в жидком виде имеет потери, связанные с испарением. Однако, чем больше объем резервуара хранения, тем меньше потери. Для охлаждения и для

создания криогенных систем требуется затратить энергию, а также наличие специальных материалов и технологий. В больших количествах жидкий водород хранят в сосудах объемом до 5 тыс. м³. К ним относятся сосуды Дьюара. Сосуд Дьюара типа CLH, представленный на рис. 2, благодаря своей конструкции не нуждается в дополнительном охлаждении жидким азотом.



Рисунок 2 - Сосуд Дьюара типа CLH [27]

Вторая группа включает химические методы, которые характеризуются процессами взаимодействия водорода с материалом среды хранения. К ним относятся адсорбционные и абсорбционные методы, хранение в связанном состоянии.

В адсорбционном методе материалы хранения должны иметь высокую удельную поверхность, т.к. взаимодействие водорода с поверхностью адсорбента осуществляется посредством сил Ван-дер-Ваальса. К таким материалам относятся активированный уголь, углеродные нанотрубки, цеолиты [30]. Основная проблема метода заключается в достаточно низкой энергии связи водорода с поверхностью при температуре выше температуры жидкого азота.

Материалы для хранения химически связанного водорода либо содержат в своем составе водород и выделяют его при определенных условиях, либо способны генерировать его при взаимодействии с водой. К

таким веществами относят аммиак, метанол, этанол, которые имеют высокую плотность объемного содержания водорода (примерно 100 кг/м³) [14]. Однако существует недостаток химически связанного метода хранения водорода – среда хранения используется однократно.

Абсорбционный вариант хранения в гидридах имеет большие преимущества. Объем системы хранения меньше в 3 раза [25], в сравнении с хранением в баллонах. Транспортировка упрощается. С точки зрения техники безопасности поврежденный гидрид менее опасен, чем сосуд под давлением или система, содержащая сжиженный водород. Нет необходимости в дополнительных расходах на конверсию и сжижение. При выборе какого-либо конкретного гидрида основным фактором является стоимость, а также процентное содержание водорода в гидриде. Основные свойства гидридов указаны в таблице 2.

Таблица 2 - Свойства некоторых гидридов [20]

Гидрид	Содержание H ₂ ,% (масс.)	Равновесная температура при 0,1 МПа, К	Стоимость металла, долл./кг
$Li \leftrightarrow LiH$	12,7	1070	8,18
$Mg \leftrightarrow MgH_2$	7,7	560	0,38
$Ca \leftrightarrow CaH_2$	4,8	1190	2,20
$Na \leftrightarrow NaH$	4,2	800	0,30
$Mg_2NiH_{0,3} \leftrightarrow Mg_2NiH_4$	3,2	520	1,00
$K \leftrightarrow KH$	2,5	990	0,35
$VH_{0,95} \leftrightarrow VH_2$	2,0	285	4,00
$FeTiH_{0,1} \leftrightarrow FeTiH$	0,9	273	1,92

1.2.3. Металлогидридный способ хранения водорода

К наиболее перспективному альтернативному методу хранения водорода относится металлогидридный способ, т.е. хранение водорода в

форме интерметаллических соединений и в форме гидридов металла. В настоящей работе будет исследован металлгидридный (МГ) способ хранения.

Способ хранения в МГ считается безопасным. При комнатной температуре давление газообразного водорода над большинством типом металлгидридов крайне редко превышает нескольких атмосфер. Хранение водорода в гидридах металла может успешно конкурировать с традиционными методами хранения в отношении компактности, но уступать в массе системы.

Согласно ГОСТ Р 54114-2010 [3] осуществляется разработка передвижных устройств и систем для хранения водорода на основе гидридов металлов. Металлогидридный контейнер для хранения водорода - это корпус, в котором расположен теплообменник для осуществления переноса тепла от порошка металлгидрида, который выделяется в процессе поглощения водорода. Чтобы увеличить скорость процессов поглощения/ выделения водорода устанавливают полость, которую засыпают порошком размером не более 5-6 мм. При необходимости превышения заданного размера используют пористые матрицы из высокотеплопроводного металла, либо теплообменники внутренние [31].

Наиболее перспективным кандидатом для хранения водорода в форме гидридов считается магний, имеющий высокое значение водородоемкости, обратимая сорбция которого составляет до 7,6% (масс.) и 101 г/л [32]. Металлический магний-это достаточно доступный и дешевый материал. Гидрид магния имеет самую высокую плотность энергии (9 МДж/кг мг) из всех обратимых гидридов, применимых для хранения водорода [29]. Однако гидрид магния имеет низкую скорость диссоциации молекул водорода на поверхности магния, высокую термодинамическая стабильность (взаимодействие магния с водородом осуществляется при 250...400 °С вследствие низкой скорости диффузии водорода в кристаллической решетке гидрида магния); на поверхности гидрида на воздухе образуется оксид. Представленные особенности являются основными препятствиями его использования. Энтальпия образования гидрида магния равна 74,7 кДж/моль,

что ведет к необходимости больших энергозатрат на процессы сорбции/десорбции водорода. К недостаткам также относится вероятность спекания порошков гидрида.

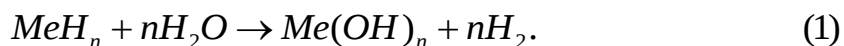
Во многих статьях авторами приведены способы улучшения скорости адсорбции и десорбции водорода, а также рабочей температуры. Наиболее эффективным методом считается измельчение магния до наноразмеров, а также добавление переходных металлов [33].

1.3 Особенности накопления водорода в магнии

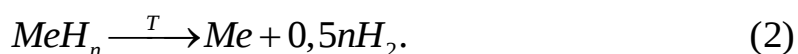
Металлические гидриды состоят из атомов металла и водородных атомов, находящихся в “ловушках”, являющимися дефектами решетки или вакансиями. Ловушка может быть дефектом строки, что приводит к увеличению напряжения решетки, особенно если при этом возникает молекулярный водород [40]. Для того, чтобы предотвратить рост трещин крупных металлических частиц, используют металл в виде порошка.

Реакция выделения водорода из гидридов металлов осуществляется либо с помощью гидролиза, либо с помощью диссоциации.

Реакция гидролиза:



Реакция диссоциации:



Первый процесс практически необратим, однако он даёт в результате реакции выходит вдвое больше водорода, чем его находится в гидриде. Термическая диссоциация гидрида позволяет создавать аккумуляторы водорода: изменение давления и температуры способствует изменению равновесия реакции выделения водорода [41].

Согласно уравнению металлогидридного способа аккумулялирования водорода, процесс образования гидрида из водорода и металла происходит с высвобождением теплоты, а процесс высвобождения водорода из гидрида -

эндотермический, т.е. необходимо подвести тепло к гидриду. Необходимым условием для последнего процесса является

$$Q_{\text{от.}} \geq \Delta H, \quad (3)$$

где $Q_{\text{от.}}$ - теплота высвобождения водорода из гидрида;

ΔH - теплота образования гидрида.

Причиной медленной скорости гидрирования является низкая скорость диссоциации молекул водорода на поверхности металла. Скорость роста образования гидрида магния зависит от давления водорода: термодинамическая движущая сила реакции прямо пропорциональна росту давления [42]. Однако при достаточно быстром начальном процессе гидрирования образуется поверхностный слой гидрида магния, блокирующий проникновение водорода.

Реакция образования металлогидрида является обратимой и осуществляется прямым взаимодействием металла / интерметаллида с газообразным водородом или электрохимическим процессом. Механизм его работы заключается в следующем [35]. Во-первых, молекулы водорода транспортируют к поверхности металла, после чего молекула диссоциирует (на этом этапе имеют важные значения микроструктуры магния, включая размер и границы зерен). Далее происходит образование водородсодержащего твердого раствора внутри магния или α -фаза (наличие дефектов в металлах влияет на процессы поглощения и распределения водорода в материалах, поэтому информация о содержании дефектов микроструктуры, т.е. наличии вакансий, имеет большое значение). После образуется сам гидрид, т.е. β -фаза.

В первой фазе концентрация атомов водорода небольшая, при этом осуществляется заполнение пустот кристаллической матрицы металла без изменения начальной структуры. Во второй фазе содержание атомов водорода заметно повышается, расположение их становится упорядоченным.

Гидрирование металла начинается с разрушения оксидной пленки на поверхности металла и проникновением молекул водорода внутрь (диссоциативная хемосорбция) [37]. Далее осуществляется формирование

зародышей гидридной фазы и их рост. При быстрой скорости начального процесса гидрирования формируется плотный гидридный поверхностный слой, что ведет к снижению скорости гидрирования (к примеру, компактные образцы металла с размером больше сотни микрон не имеют возможность быть полностью прогидрированными).

Чтобы на этом процесс гидрирования не останавливался применяют измельчение металла - размол в атмосфере, находящейся под контролем. Например, при времени помола гидроксида магния, составляющем 15 мин., в атмосфере водорода происходит лишь частичное разрушение оксидной пленки. Размер зерна составляет около 1 мкм. С увеличением продолжительности обработки гидроксида до нескольких часов размер уменьшается до 30-50 нм, что способствует увеличению скорости гидрирования.

Также для улучшения кинетики сорбции водорода применяют дополнительные компоненты (например, Li, Al, Ni), которые после помола вытравливают жидкофазными или газофазными методами. Скорость десорбции водорода при этом может увеличиться в 2-3 раза [43].

Интенсивность наводороживания металлов и сплавов определяют следующие факторы [44]:

- состав и состояние среды, из которой происходит наводороживание;
- состояние и форма поверхности наводороживаемого материала;
- химический состав и структура материала;
- наличие напряжений и деформаций;
- время наводороживания;
- условия, препятствующие десорбции водорода.

1.4 Взаимодействие водорода с дефектами

1.4.1 Виды дефектов

На показатели поглощения и распределения водорода в материалах сильно влияет наличие дефектов в металлах. Также при проникновении в

металл водорода, последний может инициировать различного рода новые дефекты, которые приводят к разрушению материалов. Имеются многочисленные исследования по данной теме, но точные механизмы влияния водорода на структурно-фазовое состояние еще не изучено.

По геометрическим признакам дефекты подразделяются на [41]:

- Точечные. Они малы во всех трех измерениях, размеры составляют один или несколько межатомных расстояний;
- Линейные. В двух измерениях имеют малые размеры, не превышающие нескольких параметров решетки, а в третьем характеризуются большой протяженностью;
- Поверхностные. Размеры в двух измерениях значительно превышают параметры решетки, в третьем - малы.
- Объемные. Имеют макроскопические размеры в трех измерениях.

Поскольку водород взаимодействует с дефектами типа точечных и линейных, подробнее остановимся на них. К точечным дефектам относятся вакансии и междоузлия. Вакансия образуется, когда некоторый узел в решетке не занят атомом. Образование вакансии ведет к перемещению атомов, расположенных рядом с дефектом; решетка становится напряженной. Междоузлия возникают, когда между узлами кристаллической решетки находится внедренный атом.

Следствием возникновения точечных дефектов являются упругие искажения. Вакансия приводит к растяжению, а междоузельный атом – к сжатию. Концентрация точечных дефектов заметно увеличивается с ростом температуры. Вакансии образуются на поверхности кристалла, на границах зерен, на поверхностях раздела, а также на дислокациях [41].

Дислокации относятся к линейным дефектам. Их возникновение происходит при пластической деформации кристаллов, причиной появления которой могут служить касательные напряжения либо механическая обработка. Характеризуются длинной протяженностью нарушения периодичности размещения узлов в определённом направлении, т.е. атомы

смещены относительно их равновесного положения. Протяженная область несовершенства, которая также имеет название “дислокационная трубка” имеет диаметр поперечного сечения 0,5 – 3 нм. Дислокации могут быть винтовыми или краевыми [40].

В определенных условиях наводораживание может быть причиной образования новых дефектов. При малом внедрении иона водорода в структуру кристаллической решетки в основном образуются точечные дефекты. При высоких дозах образуются мелкие вакансионные кластеры, дислокации и дислокационные петли.

1.4.2 Описание взаимодействия

Основной принцип движения водорода в металле при нормальных условиях заключается в перескоке атома из одного положения между узлами кристаллической решетки в другое. Диффузия водорода определяется градиентом концентрации, механическими напряжениями и температурой. При проникновении в материал водорода происходит активное его взаимодействие с дефектами (вакансии, дислокации, собственные междоузельные атомы, границы зерен) с последующим образованием сложных комплексов, состоящих из этих дефектов.

При взаимодействии атома водорода с дислокациями [45, 48] важен тип дислокации и наличие примесей. Водородная подвижность в металле зависит от плотности дислокаций, а также от концентрации водорода. Взаимодействие водорода с данным типом дефектов зависит от скорости деформации, концентрации, температуры и наличию примесей [46, 47].

Увеличению концентрации вакансий способствует накопление водорода в большом типе металлов и сплавов. Атом водорода занимает ближайшее к дефекту положение с минимумом потенциальной энергии вместо локализации в его центре [49]. Образование вакансий в избыточном количестве приводит к формированию микроповреждений (зародышей нано- и микропустот), что является начальным моментом водородной хрупкости.

Водородная хрупкость характеризуется негативным воздействием водорода на металл, что проявляется в снижении его прочностных и пластических свойств. Увеличивается чувствительность материала к наличию в нем трещин. Идентификация водородного охрупчивания производится по величине модуля Юнга, по значениям предельной прочности и относительному удлинению до состояния разрыва детали.

Существуют различные способы обнаружения дефектов в материале, среди которых наиболее перспективным считается метод позитронной спектроскопии благодаря высокой чувствительности и определению типа дефектов и их концентрации.

1.5 Особенности аннигиляции позитронов в материалах

1.5.1 Физические основы и экспериментальные методы позитронной спектроскопии

Позитронная аннигиляционная спектроскопия (ПАС) - это хорошо зарекомендовавший себя высокочувствительный метод обнаружения дефектов в структуре твердых тел. С помощью метода ПАС исследуются механизмы и динамика возникновения дефектов, их превращения и исчезновение [36].

В процессе аннигиляции частица и соответствующая ей античастица превращаются в кванты электромагнитного поля. Характер результирующих квантов и вероятность каналов аннигиляции могут быть определены типом взаимодействия и правилами отбора согласно закону сохранения. Освобождаемая при взаимодействии позитрона и электрона энергия, которая равна сумме масс электрона и позитрона, испускается в виде квантов электромагнитного излучения - фотонов. Наиболее вероятно в результате аннигиляции при наличии свободных позитрона и электрона появление двух гамма-квантов, наименее вероятно - трехфотонная аннигиляция. При наличии третьего тела возможна однофотонная аннигиляция, который воспринимает импульс отдачи. В качестве источников позитронов используют изотопы,

испускающие позитроны с широким энергетическим спектром ($0,2 \div 2$) МэВ [50]. К ним в основном относятся ^{22}Na (β^+ , γ), ^{44}Ti (β^+ , γ), ^{68}Ge (β^+ , γ), ^{58}Co (β^+ , γ).

При аннигиляции позитрона и электрона уместны законы сохранения импульса и энергии. В случае двухфотонной аннигиляции они имеют вид [38]:

$$k_1 + k_2 = p = 2mv; \quad (4)$$

$$k_1c + k_2c = E = 2mc^2. \quad (5)$$

где k_1 и k_2 – импульсы гамма-квантов;

$$m = m_0 / \sqrt{1 - v^2 / c^2}; \quad m_0 - \text{масса покоя позитрона};$$

E – энергия электрон-позитронной пары;

v – скорость движения центра масс пары электрон-позитрон.

Таким образом, согласно уравнениям (4) и (5), если скорость центра масс системы равна нулю, то фотоны разлетаются в противоположных направлениях с одинаковыми энергиями, равными 0,511 МэВ.

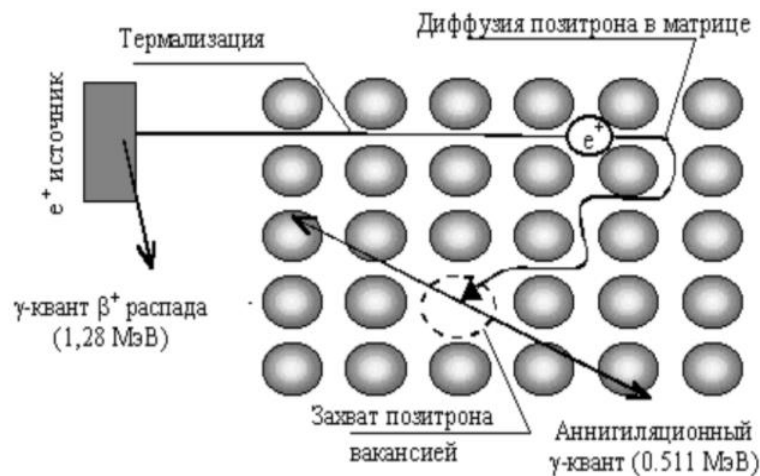


Рисунок 3 – Схема электрон-позитронной аннигиляции [51]

При движении центра масс, угол разлета гамма-квантов отличен от прямо противоположного направления, и энергия имеет отличное от установившегося (0,511 МэВ) значение[51].

При отличной от нуля скорости движения центра масс угол разлета отличается от 180 град на величину угла θ

$$\sin \theta \cong \frac{P_{\perp}}{m_0 c}, \quad (6)$$

Доплеровский сдвиг ΔE (изменение энергии фотона) определяется

$$\Delta E \cong \frac{1}{2} P_{\square} c, \quad (7)$$

Входящие в формулы (6) и (7) поперечная и продольная составляющие импульса центра масс являются перпендикулярным и параллельным направлениями испусканию фотонов соответственно.

Вышепредставленные выражения являются основой разработок методов для исследования структуры материалов [38]:

- Метод временного распределения аннигиляции позитронов (ВРАП);
- Метод анализа углового распределения аннигиляционных фотонов (УРАФ) ($180^\circ \pm \theta$);
- Метод доплеровского уширения аннигиляционной линии (ДУАЛ) ($0,511 \text{ МэВ} \pm \Delta E$).

1.5.2 Модель захвата позитронов дефектами

Применение позитронов для контроля дефектов основано на существовании его в твёрдых телах в двух состояниях: делокализованном в кристаллической решётке (имеющие возможность свободно передвигаться по материалу под действием разности потенциалов) и локализованном в окрестности дефектов. Локализованное состояние более стабильное благодаря меньшему значению собственной энергии [50].

В бездефектной кристаллической решетке позитрон аннигилирует свободно, электронная плотность при этом не нарушается. Если в твёрдых телах есть дефекты, позитрон аннигилирует из захваченного дефектами состояния. Такой процесс называется электронной аннигиляцией захвата. Позитрон захватывается ловушками из-за отсутствия отталкивающих сил ионов решетки, которые заряжены положительно. При этом увеличивается время жизни позитрона, а также количество аннигилирующих позитронов благодаря низкой локальной электронной плотности. Энергия захвата

является разностью между локализованным и делокализованным состояниями [51]. Фотоны, возникшие в результате процесса аннигиляции позитрона и электрона, дают информацию об строении внешних электронных оболочек атомов твёрдого тела, а также о типе и концентрации дефектов в материале.

Локализация позитрона в вакансиях обусловлена следующим образом. Находясь рядом с вакансиями позитроны испытывают меньшее кулоновское отталкивание, что обуславливает их локализацию со значительным выигрышем в энергии. Значение глубины потенциальной ямы вблизи вакансии позволяет образовать связанное позитронное состояние. Согласно [54] существует вероятность рассеивания свободных позитронов на вакансиях с уже локализованными позитронами.

Согласно [55] линия дислокации – это слабая ловушка для позитрона, и время жизни позитрона в ней ниже, чем в вакансиях. В связанных состояниях (дислокация + вакансия) позитрон сначала рассеивается с большой скоростью вдоль дислокации, а после ловится вакансией и там же аннигилирует.

1.5.3 Анализ временного распределения аннигиляции позитронов

Для определения времени жизни позитронов используется метод запаздывающих совпадений. Метод основан на измерении скорости счисления совпадений между ядерным гамма-квантом, рождающимся почти одновременно с позитроном и гамма-квантом, возникшим как результат аннигиляции (рис. 4). Значение времени жизни зависит от плотности электронов в месте нахождения позитрона, а также от скорости аннигиляции. В зависимости от размера поры, которая находится в материале, время жизни позитрона определяется как [51]:

$$\tau = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{R}{R + \Delta R} + \frac{1}{2\pi} \sin \frac{2\pi R}{R + \Delta R} \right)^{-1}, \quad (8)$$

где R – радиус поры,

ΔR - толщина электронного слоя.

Нулевой точкой отсчета времени жизни позитрона считается время возникновения гамма-кванта после позитронного распада (время возникновения после распада составляет 10^{-11} с).

Время жизни позитрона внутри твердого тела в пределах одной наносекунды. Этот отрезок времени разбивают на три стадии: термализация, диффузия и локализация. Процесс, определяющий глубину проникновения позитрона, называется термализацией. Его время составляет обычно несколько пикосекунд. После процесса термализации позитрон диффундирует в кристаллической решетке. В бездефектном материале длина диффузии ограничена временем жизни позитрона.

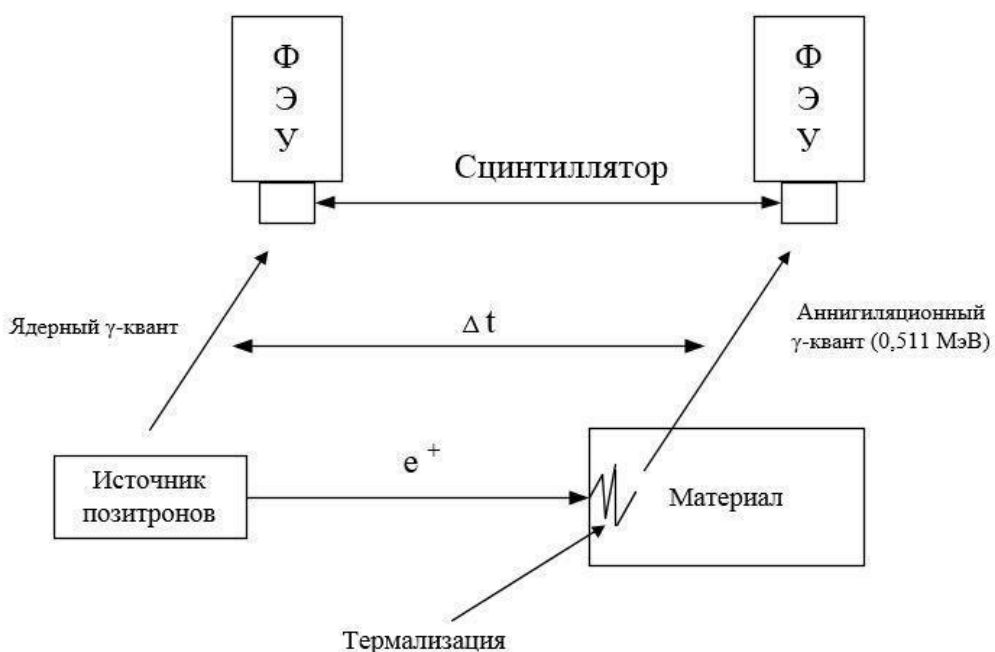


Рисунок 4 – Схема измерения времени жизни позитронов [51]

Распределение позитронов по глубине материала после процесса термализации определяется как [50]:

$$N(z) = e^{-\alpha_+ Z}, \quad (9)$$

где α_+ - коэффициент поглощения позитронов в конкретном материале;

Z - средняя глубина проникновения позитрона.

Длина пробега позитрона достигает 20-300 мкм, благодаря чему возможно эффективное исследование электронной структуры в материале.

При проникновении позитрона в вещество, он быстро теряет энергию за счет упругого и неупругого взаимодействий с частицами среды.

После позитрон диффундирует в решетке, на что он затрачивает основную часть жизни. Скорость позитрона замедляется, а его движение распространяется в среде, имеющей распределение центров захвата.

Длина диффузии определяется как:

$$L_+ = \sqrt{\tau_b D_+}, \quad (10)$$

где τ_b - время жизни позитрона;

D_+ - коэффициент диффузии.

Далее позитрон либо аннигилирует, либо захватывается дефектами. При аннигиляции позитрон и электрон превращают свою массу в энергию аннигиляционных фотонов. Как отмечалось ранее, стандартное значение энергии каждого γ -кванта составляет 0,511 МэВ.

Рабочая установка спектрометра времени жизни позитрона состоит из цепи, составляющие которой указаны на рисунке 5.

В представленной работе применяется радиоактивный источник позитронов ^{44}Ti . Источник расположен между двумя образцами материала. ВИП осуществляет питание сцинтилляционных детекторов. Последние на основе фотоэлектронных умножителей и сцинтилляторов BaF_2 регистрируют γ -кванты. Первый детектор регистрирует образование ядерного γ -кванта (сигнал «старт»), второй детектор (сигнал «стоп») регистрирует другой γ -квант, который является результатом процесса аннигиляции [57].

Импульсы, которые регистрируются детекторами, поступают на дискриминаторы, где фиксируется момент начала события и происходит разделение поступивших сигналов, различающихся друг от друга амплитудой. Сигнал от детектора «старт» направляется на ДДПС с установленным порогом дискриминации с целью не захватывать область аннигиляционного пика, равного 0,511 МэВ. На другой дискриминатор приходит сигнал с анода детектора «стоп», где установлены пороги для импульсов, соответствующих

аннигиляционным γ - квантам с энергией 0,511 МэВ. С дискриминатора «старт» импульсы поступают на стартовый вход ВАП (время – цифрового преобразователя). С ДДПС «стоп» импульсы подаются через блок наносекундной задержки на стоповый вход ВАП.

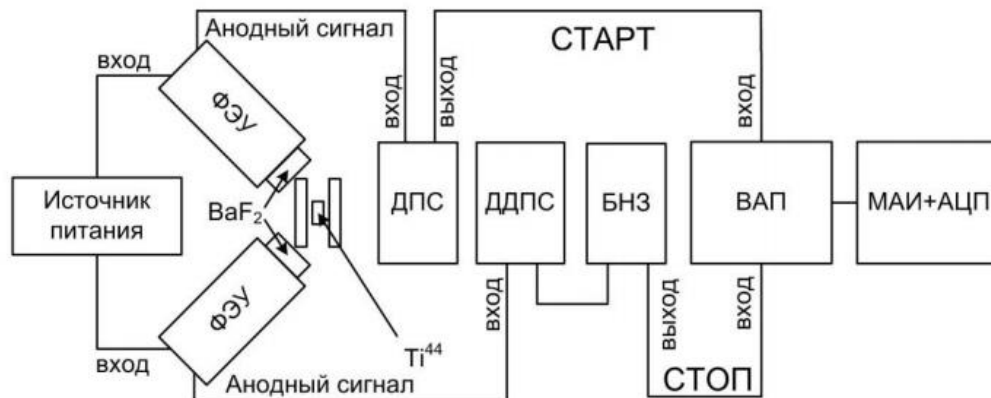


Рисунок 5 – Схема спектрометра времени жизни позитронов: ВИП – высоковольтный источник питания, ФЭУ – фотоэлектронный умножитель, ДДПС – дифференциальный дискриминатор постоянной составляющей, БНЗ – блок наносекундной задержки, ВАП – время-амплитудный преобразователь, МАИ – многоканальный анализатор импульсов, АЦП – аналогово-цифровой преобразователь [57].

Вышепредставленный процесс описывает измерение промежутка времени между реперным (1,157 МэВ) и аннигиляционным (0,511 МэВ) γ -квантами, т.е. время жизни позитрона.

1.6 Автоматизированный комплекс Gas Reaction Controller

Автоматизированный комплекс Gas Reaction Controller (GRC) позволяет определить количество поглощенного газа в твердых телах. Поскольку в комплексе одновременно используется и криостат, и печь диапазон температур составляет от -30 °С до 1000 °С. Значение давлений в камерах низкого давления имеет предел 202,64 кПа, а в камере высокого давления – 5066 кПа.

Измерение процессов сорбции и десорбции водорода осуществляется путем взвешивания образца и занесением его массы и плотности в

программное обеспечение; далее образец помещается в камеру под вакуумом; происходит равномерный нагрев (охлаждение) с постоянной откачкой. После расчётным путем определяется количество водорода. Завершение режима осуществляется удалением водорода из камеры и охлаждением (нагревом) [59].

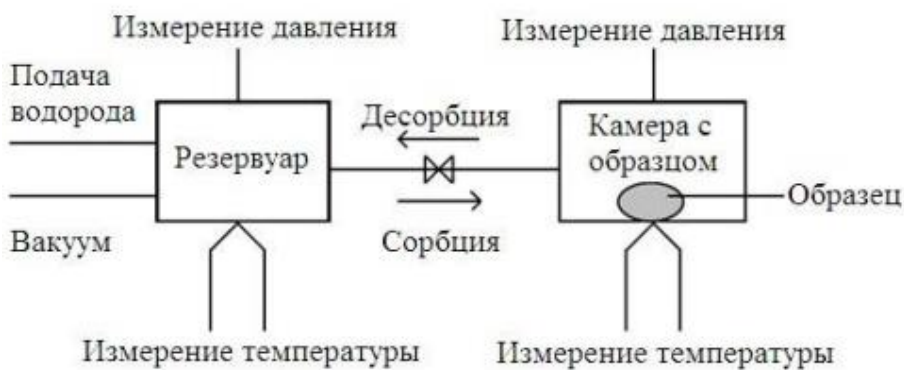


Рисунок 6 – Принцип работы GRC [60]

При наличии в твердом теле уже некоторого содержания водорода (N_{S0}) это значение вводится в программу перед началом реакции.

Принцип работы установки GRC заключен в следующем. Количество водорода (N_0), которое изначально было задано, напускается в резервуар. Далее при открытии клапана водород передается в соседнюю камеру. После сорбции водорода реакция завершается и вычисляется суммарное молярное количество водорода (N_g) в обеих камерах. Сорбированный твердым телом молярный объем водорода (N_s) находится по формуле:

$$N_s = N_0 - N_g, \quad (11)$$

Согласно уравнению идеального газа молярный объем (N_0) находится через давление и температуру. Таким образом, точность измерения количества водорода на установке GRC определяется точностью измерений давления и температуры. При постоянном поддержании значения температуры (при н.у.) точность измерения количества поглощенного водорода составляет $0,3 \text{ см}^3$.

Количество водорода в реакционной камере определяется по давлению водорода, его температуре и занимаемым им объемом. Тогда уравнение для одного моля газа выглядит следующим образом:

$$\frac{pV}{RT} = 1 + \frac{B(T)}{V} + \frac{C(T)}{V} + \frac{D(T)}{V}, \quad (12)$$

где $B(T)$, $C(T)$ и $D(T)$ – коэффициенты, зависящие от температуры.

Уравнения для коэффициентов представлены в формулах 13-15:

$$B(T) = B_0 - \frac{A_0}{RT} - \frac{c}{T^3}, \quad (13)$$

$$C(T) = -B_0b + \frac{A_0a}{RT} - \frac{B_0c}{T^3}, \quad (14)$$

$$D(T) = \frac{B_0bc}{T^3}. \quad (15)$$

Таким образом, количество молекул газа n в известном объеме и при известных значениях давления и температуры рассчитывается операционным методом согласно уравнению 16:

$$n = \left(\frac{pV}{RT} \right) / \left(1 + B(T) \frac{n}{V} + C(T) \frac{n^2}{V^2} + D(T) \frac{n^3}{V^3} \right). \quad (16)$$

2. Материал и методы исследования

2.1 Материал

Исходным материалом для получения гидрида магния является мелкодисперсный магниевый порошок марки МПФ-4 чистотой 99,2%. Насыпная плотность магниевого порошка составляет 0,45 – 0,49 г/см³. В таблице 3 указан гранулометрический состав порошка.

Таблица 3 – Гранулометрический состав магниевого порошка [61]

Фракция частиц (номера сеток)	+0,16	-0,16+0,1	0.1+0.008	-0.08+0.056	-0.056
Массовая доля фракций, %	не более 0.3	5-10	18-48	25-50	12-28

2.2 Расчет пробега позитронов и разработка методики спектрометрии временного распределения аннигиляции позитронов в порошке магния

Расчет пробега позитронов был осуществлен в программе LYS-1, которая позволяет рассчитать профиль позитронной имплантации в любом месте образца. В программу были внесены значения плотности вещества и его атомный номер.

Коэффициент обратного рассеяния позитронов был рассчитан с помощью формулы:

$$R = 0,342 \cdot \log(Z) - 0,146. \quad (17)$$

где Z – среднее атомное число.

Коэффициент поглощения был рассчитан как:

$$Ab = 12,6 \cdot Z^{0.17} \cdot D / E_{max}^{1.28}. \quad (18)$$

где D – плотность материала,

E_{max} – максимальная энергия позитронов, излучаемых радионуклидом.

Программа позволяет смоделировать исследуемый образец по составляющим материалам. Используется два образца, в которых нижним и

верхним слоем является каптон (материал из полиимида, стабильный в широком диапазоне температур от -273 до +400 °C), а внутрь засыпается порошок магния рассчитанной толщины. Между двумя образцами располагают источник позитронов - изотоп ^{44}Ti , производящий позитроны с максимальной энергией 1,5 МэВ. Плотность магния составляет 1,738 г/см³, атомный номер – 12. Каптон имеет плотность, равную 1,42 г/см³, атомный номер – 7.

Таким образом, рассчитанные коэффициенты были занесены в программу для определения толщины засыпания порошка магния (рис. 7).

	thickness [um]	Backscattering coefficient	Absorption coefficient [1/cm]	Intensity with source contribution [%]	Intensity without source contribution [%]
Terminal Layer 1	0	0	0	0,00	0,00
Layer2	50	0,13	15	0,00	0,00
Layer3	10000	0,22	20	33,84	33,84
Layer4	50	0,13	15	6,97	6,97
Source Layer5	12	0,32	0	0,00	---
Layer6	50	0,13	15	10,22	10,22
Layer7	10000	0,22	20	48,98	48,98
Layer8	50	0,13	15	0,00	0,00
Terminal Layer 9	0	0	0	0,00	0,00

Рисунок 7 – Данные программы LYS-1

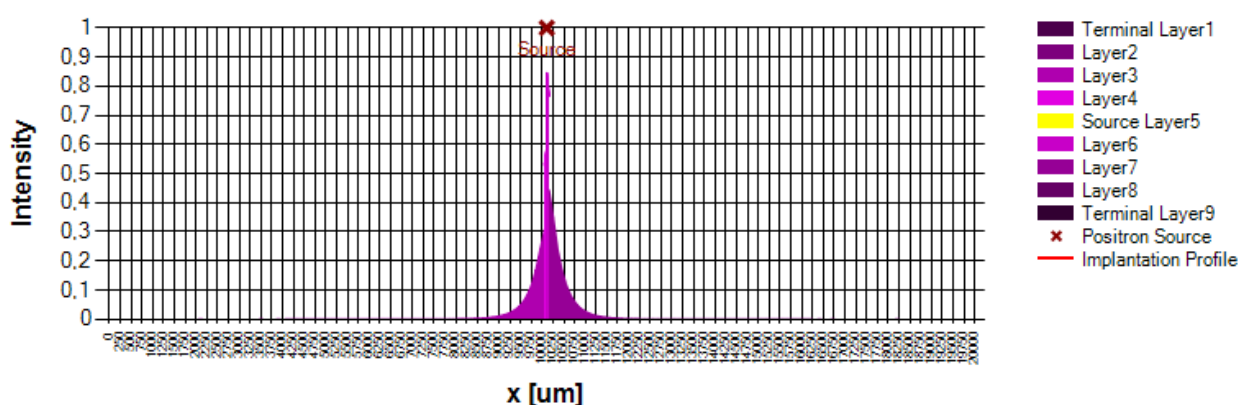


Рисунок 8 – Профиль позитронной имплантации

Толщина засыпания порошка магния составляет $H = 4,500$ мм. На рис.9 указан образец – кювета из органического стекла, засыпанная порошком магния. Сверху нанесен каптон.

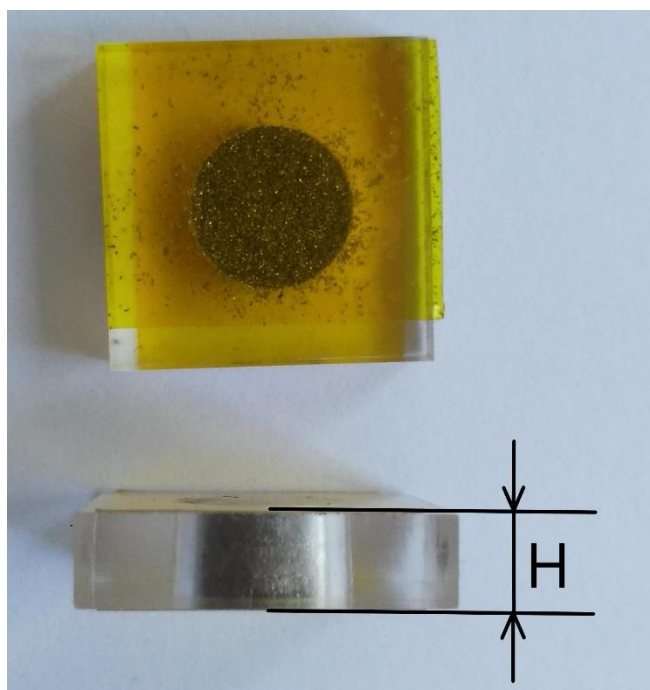


Рисунок 9 – Кювета, заполненная порошком магния

4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

Целью данного раздела является оценка эффективности разработки систем хранения водорода в гидриде магния, поскольку этот материал определяется как рентабельный в виду высокой емкости водорода и легкому весу. К тому же данный вид хранения является экологически чистым способом, а водород как топливо не имеет вредных отходов в результате получения из него электрической энергии. В настоящей работе необходимо решить задачи, такие как:

- планирование проекта;
- расчет затрат на проектирование;
- расчет капитальных вложений;
- расчет эксплуатационных затрат;
- расчет себестоимости выходной энергии;

4.1 Оценка готовности проекта к коммерциализации

На какой бы стадии жизненного цикла не находилась научная разработка полезно оценить степень ее готовности к коммерциализации и выяснить уровень собственных знаний для ее проведения или завершения. Для этого необходимо заполнить специальную форму, содержащую показатели о степени проработанности проекта с позиции коммерциализации и компетенциям разработчика научного проекта. Перечень вопросов приведен в таблице 6.

Таблица 6 – Бланк оценки степени готовности научного проекта к коммерциализации

№ п/п	Наименование	Степень проработанности научного проекта	Уровень имеющихся знаний у разработчика
1.	Определен имеющийся научно-технический задел	4	4

Таблица 6. Продолжение – Бланк оценки степени готовности научного проекта к коммерциализации

2.	Определены перспективные направления коммерциализации научно-технического задела	3	3
3.	Разработан бизнес-план коммерциализации научной разработки	3	2
4.	Определены пути продвижения научной разработки	3	3
5.	Разработана стратегия реализации научной разработки	4	4
6.	Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	2	2
7.	Имеется команда для коммерциализации научной разработки	4	3
8.	Проработан механизм реализации научного проекта	4	4
	ИТОГО БАЛЛОВ	27	25

Из данной таблицы можно сделать вывод о том, что разработка научного исследования является перспективной только для научных целей. Это объясняет, что методом ВРАФ занимаются только некоторые российские научные лаборатории, с помощью которого можно решить актуальные проблемы исследования поверхности материала.

4.2 SWOT-анализ

Для исследования внешней и внутренней среды выполняемого научного исследования был проведён SWOT-анализ. SWOT – Strengths (сильные стороны), Weaknesses (слабые стороны), Opportunities (возможности) и Threats (угрозы).

В таблице 7 представлена матрица SWOT, которая по выделенным критериям характеризует разработанный проект.

Таблица 7 – Матрица SWOT.

Сильные стороны	Слабые стороны
С1. Актуальность тематики. С2. Заявленная экономичность технологии. С3. Быстрый анализ полученных данных. С4. Неразрушающий контроль материалов. С5. Чувствительность к изменению концентрации дефектов порядка нанометров в металлах. С6.Безопасность проведения исследований.	Сл1. Недостаточное количество измерений. Сл2. Недостаточная активность у источника позитрона. Сл3. Недостаточные приборы эксперимента. Сл4. Большой срок экспериментального периода. Сл5. Сложность обработка спектры времени жизни позитронов
Возможности	Угрозы
В1. Использование источника, имеющего большую радиоактивность. В2. Возможность появления новых условий измерений. В3. Использование новых приборов. В4. Возможность работать вместе с другими институтами, в котором используют спектрометр позитронной аннигиляции новой серии. В5. Полученные результаты откроют новое направление в исследованиях водородной энергетики.	У1. Недостаток финансового обеспечение научного исследования. У2. Разработанная новая иная технология, позволяющая исследовать тип дефектов в объеме полимеров. У3. Проведение подобных экспериментов в других учебных заведениях.

Использование интерактивной матрицы помогает разобраться с различными комбинациями взаимосвязей областей SWOT. Интерактивные матрицы проекта представлена в таблицах 8-11.

Каждый фактор помечается либо знаком «+» (означает сильное соответствие сильных сторон возможностям), либо знаком «-» (что означает слабое соответствие); «0» – если есть сомнения в том, что поставить.

Таблица 8 – Интерактивная матрица проекта.

Возможности проекта		C1	C2	C3	C4	C5	C6
	B1	0	+	-	+	+	+
	B2	0	+	+	+	+	+
	B3	+	+	+	-	-	-
	B4	+	+	+	0	+	0
	B5	-	-	+	-	+	+

Таблица 9 – Интерактивная матрица проекта

Возможности проекта		Сл1	Сл2	Сл3	Сл4	Сл5
	B1	-	+	+	-	-
	B2	+	-	+	-	-
	B3	+	+	+	-	-
	B4	+	+	+	-	+
	B5	-	-	-	-	-

Таблица 10 – Интерактивная матрица проекта

Угрозы проекта		C1	C2	C3	C4	C5	C6
	У1	+	+	-	-	-	-
	У2	-	-	+	+	+	+
	У3	-	-	-	-	-	-

Таблица 11 – Интерактивная матрица проекта

Угрозы проекта		Сл1	Сл2	Сл3	Сл4	Сл5
	У1	-	-	0	+	-
	У2	+	+	+	+	0
	У3	+	+	-	+	+

Итоговая матрица SWOT-анализа составлена в таблице 12.

Таблица 12 – SWOT-анализ

	Сильные стороны	Слабые стороны
	С1. Актуальность тематики. С2. Заявленная экономичность технологии. С3. Быстрый анализ полученных данных. С4. Неразрушающий контроль материалов. С5. Чувствительность к изменению концентрации дефектов порядка нанометров в металлах. С6.Безопасность проведения исследований.	Сл1. Недостаточное количество измерений. Сл2. Недостаточная активность у источника позитрона. Сл3. Недостаточные приборы эксперимента. Сл4. Большой срок экспериментального периода. Сл5. Сложность обработка спектры времени жизни позитронов
В1. Использование источника, имеющего большую радиоактивность. В2. Возможность появления новых условий измерений. В3. Использование новых приборов синхротрон. В4. Возможность работать вместе с другими институтами, в котором используют спектрометр позитронной аннигиляции новой серии. В5. Полученные результаты откроют новое направление в исследованиях система – водорода .	В3В4С4 – используя новый прибор, взаимодействуя совместно с другими разработчиками на основе существующих результатов и ресурсов квалифицированного персонала получить новые результаты исследования, разработать новые продукты и привлекать финансовые ресурсы.	В2В5Сл1 – С помощью новых условий измерений и другого современного прибора в других институтах возможно увеличить количество измерений. В4Сл4 – Искать новые источники позитронов, у которых есть высокая активность В5Сл5 – упростить путем взаимодействия с другими институтами метод обработки

Таблица 12. Продолжение – SWOT-анализ

Угрозы	С1С2У1 - Актуальность	У1Сл4 – Привлечение
У1. Недостаток финансового обеспечения научного исследования со стороны государства	тематики, экономичность технологии может привлекать новые финансовые ресурсы.	новых финансовых ресурсов и усиление сотрудничества с другими разработчиками.
У2. Разработанная новая технология пэм, позволяющая исследовать тип дефектов в объеме полимеров.	С4С5С6У2 – Метод позитронной аннигиляции преобладает над методом ПЭМ тем, что он не разрушает ни	У2Сл4 – с помощью источника медленных позитронов других разработчиков начать исследование
У3. Проведение подобных экспериментов в других учебных заведениях.	поверхности, ни объема материала, а также он позволяет определять дефекты в 0,1-1нм.	распределения дефектов по глубине материала.
	С3У3 - Квалифицированный персонал кафедры владеет как богатыми знаниями о методе позитронной аннигиляции и материаловедении, так и отличной способностью осуществлять ряд сложных исследований, поэтому это может поспособствовать обойти конкурентов в области новых исследований.	

Таким образом, выполнив SWOT-анализ можно сделать вывод, что на данный момент преимущества используемого метода преобладают над его недостатками по сравнению с другими методами, при этом следует обратить внимание на следующие преимущества метода позитронной аннигиляции, такие как неразрушающий контроль материалов, чувствительность к

изменению концентрации дефектов порядка нанометров в материалах, определение дефектов в объеме полимеров, и детектирование дефектов размера 0,1–1 нм. Эти сильные стороны позволяют в большой степени устранить угрозы. К тому же, тесная связь лаборатории с другими институтами помогает легко преодолеть слабые стороны самого метода.

4.3 Планирование работ

4.3.1 Структура работ в рамках проекта

Планирование работ необходимо осуществлять в следующем порядке:

- Определение структуры работы в научном исследовании;
- определение участников в работе;
- формулирование продолжительности работы;
- построение графика проектирования.

Рабочая группа для проектирования состоит из руководителя и студента-дипломника.

Необходимо перечислить этапы и соответствующие работы в рамках исследования, и к тому же каждого исполнителя необходимо распределить по видам работ. Порядок этапов работы и распределение находятся в таблице 13.

Таблица 13 – Перечень этапов работ и распределение исполнителей

Основные этапы	№ раб	Содержание работ	Должность исполнителя
Составление технического задания	1	Разбор и утверждение технического задания	Руководитель
Выбор направления исследования	2	Подбор и изучение материалов по теме	Инженер
	3	Выбор направления исследований	Инженер
	4	Календарное планирование работ по теме	Руководитель
Теоретические и экспериментальные исследования	5	Проведение теоретических расчетов и обоснований	Инженер
	6	Расчет пробега позитронов	Инженер

Таблица 13. Продолжение – Перечень этапов работ и распределение исполнителей

	7	Проведение экспериментальных исследований	Инженер
Подведение итогов	8	Анализ полученных результатов	Инженер
	9	Оценка эффективности полученных результатов	
Разработка технической документации и проектирование	10	Построение графиков по полученным результатам	Инженер
Оформление отчета по НИР	11	Оформление пояснительной записки	Инженер

4.3.2 Определение трудоемкости выполнения работ

Трудовые затраты являются основной частью стоимости разработки, поэтому важно определить трудоемкость работ каждого участника.

Трудоемкость проведения исследований оценивается в человеко-днях и носит вероятностный характер. Чтобы найти ожидаемое значение трудоемкости, используется следующая формула:

$$t_{\text{ож.}i} = \frac{3 \cdot t_{\text{min.}i} + 2 \cdot t_{\text{max.}i}}{5} \quad (22)$$

где $t_{\text{ож.}i}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения i -ой работы чел.-дн.;

t_{mini} – минимально возможная трудоемкость выполнения i -ой работы, чел.-дн.;

t_{maxi} – максимально возможная трудоемкость выполнения i -ой работы, чел.-дн.

Далее необходимо определить длительность каждой работы, измеряемая в рабочих днях. Такой расчет необходим для обоснованного вычисления зарплаты, поскольку доля заработной платы в общей сметной стоимости научных исследований в процентном соотношении составляет примерно 65%.

$$T_{pi} = \frac{t_{ож.i}}{q_i} \quad (23)$$

где T_{pi} – продолжительность одной из работ, раб. дн.;

$t_{ожi}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения одной из работ, чел.-дн;

q_i – численность исполнителей, которые выполняют одну и ту же работу в одно время, на конкретном этапе, чел.

4.3.3 Разработка графика проведения научного исследования

Диаграмма Ганта является наиболее наглядным представлением графика проведения работ, которую необходимо построить.

Диаграмма Ганта представляет собой горизонтальный график, на котором работы представлены в виде отрезков с датами начала и окончания выполнения работ.

Согласно данным из таблицы 14, построена диаграмма Ганта, которая разбита по месяцам за период дипломирования.

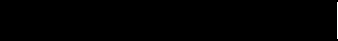
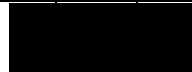
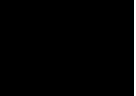
Таблица 14 – Временные показатели проведения проекта

Наименование	Длительность, дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников
Составление и утверждение технического задания	10	10.10.2017	30.10.2017	Лаптев Р.С.
Литобзор	120	1.11.2017	3.03.2018	Жаткина А.А.
Календарное планирование работ по теме	3	01.03.2018	04.03.2018	Жаткина А.А.
Оформление теоретической части	30	4.03.2018	4.04.2018	Жаткина А.А.
Составление расчетной модели	15	5.04.2018	20.04.2018	Жаткина А.А.
Экспериментальная часть 1	20	23.04.2018	18.05.2018	Жаткина А.А.
Экспериментальная часть 2	50	17.09.2018	23.11.2018	Жаткина А.А.

Таблица 14. Продолжение – Временные показатели проведения проекта

Оформление расчетной части	15	21.01.2019	08.02.2019	Жаткина А.А.
Анализ полученных результатов	10	11.02.2019	22.02.2019	Лаптев Р.С., Жаткина А.А.
Оценка эффективности полученных результатов	10	25.02.2019	13.03.2019	Лаптев Р.С., Жаткина А.А.
Построение графиков	10	18.03.2019	29.03.2019	Жаткина А.А.
Оформление работы	35	1.04.2019	17.05.2019	Жаткина А.А.

Таблица 15 – Диаграмма Ганта

№ раб	Вид работ	Исполнители	Т, кал. дн.	Продолжительность выполнения работ															
				Окт.	Нояб.	Дек.	Янв.	Фев.	Март	Апр.	Май	Сент.	Окт.	Нояб.	Янв.	Февр.	Март	Апр.	Май
1	Составление и утверждение технического задания	Руководитель	10																
2	Литобзор	Инженер	120																
3	Календарное планирование работ	Инженер	3																
4	Оформление теоретической части	Инженер	30																
5	Составление расчетной модели	Инженер	15																
6	Экспериментальная часть	Инженер	20																
7	Экспериментальная часть	Инженер	50																
8	Оформление расчетной части	Инженер	15																
9	Анализ полученных результатов	Руководитель, инженер	10													 			
10	Оценка эффективности полученных результатов	Руководитель, инженер	10														 		
11	Построение графиков	Инженер	10																
12	Оформление работы	Инженер	35																

 –руководитель;  – инженер.

Таким образом, количество дней работ для руководителя составляет 30 дней, для инженера – 318 дней.

4.3.4 Бюджет научного исследования

Планирование бюджета проекта производится с достоверным отражением всех видов расходов, которые связаны с его выполнением. Бюджет научно-технического исследования будет состоять из:

- материальных затрат научно-технического исследования;
- основной заработной платы;
- дополнительной заработной платы;
- страховые отчисления;
- накладные расходы.

4.3.4.1 Расчет материальных затрат проекта

Включает в себя стоимость всех материалов, которые используются при разработке исследования. В таблице 16 приведена стоимость всех материалов, используемых при разработке проекта.

Таблица 16 – Материальные затраты

Наименование	Единица измерения	Количество	Цена за ед., руб.	Затраты на материалы (З _м), руб.
Бумага для принтера	Пачка	1	250	250
Ручки	шт.	2	45	90
Карандаши	шт.	1	25	25
Калькулятор инженерный	шт.	1	600	600
Картридж для принтера	шт.	1	1500	1500
Папка-скоросшиватель	шт.	1	25	25
				2490

4.3.4.2 Расчет затрат на специальное оборудование для проекта

В эту статью входят затраты, связанные с приобретением специальных оборудований, которые были необходимы для проведения работ. В сумму

оборудования необходимо внести затраты на доставку и монтаж в размере 15% от цены самого оборудования. Расчет затрат по данной статье занесен в таблицу 17.

Таблица 17 – Стоимость оборудования

№ п/п	Наименование оборудования	Кол-во единиц оборудования	Цена единицы оборудования, руб.	Амортизация, руб.	Общая стоимость оборудования, руб.
1	Персональный компьютер	1	46 000	15 362,7	52 900
2	Спектрометр	1	3 500 000	1 168 904,1	4 025 000
3	Источник позитронов	1	500 000	166 986,3	575 000
Итого:					4 652 900

Приведем расчет амортизации компьютера. Поскольку ПК будет использован в течении определенного срока, его стоимость учитывается с помощью амортизации по формуле:

$$A = \frac{\text{Стоимость} \cdot N_{\text{дней.исп-ния}}}{\text{Срок.службы} \cdot 365}, \quad (24)$$

$$A = \frac{\text{Стоимость} \cdot N_{\text{дней.исп-ния}}}{\text{Срок.службы} \cdot 365} = \frac{52\,900 \cdot 318}{3 \cdot 365} = 15\,362,7 \text{ руб.}$$

4.3.4.3 Основная заработная плата исполнителей темы

Включает в себя базовую заработную плату инженерных и научных работников. Расходы на зарплату определяются на основе трудоемкости выполняемой работы и существующей системы тарифных ставок. К основной заработной плате прибавляются премии, которые выплачиваются каждый месяц из фонда, и их размер составляет 20-30% от тарифа и оклада.

Должностной оклад рассчитывается по формуле:

$$З_{\text{м}} = З_{\text{тс}} \cdot (k_{\text{пр}} + k_{\text{д}}) \cdot k_{\text{р}}, \quad (25)$$

Должностной оклад работников за месяц, таким образом, составляет:

- Для руководителя, согласно окладу

$$З_{\text{м}} = З_{\text{тс}} \cdot (1 + k_{\text{пр}} + k_{\text{д}}) \cdot k_{\text{р}} = 23\,264 \cdot (0,3 + 0,2) \cdot 1,3 = 15\,122 \text{ руб.}$$

- Для инженера

$$З_{\text{м}} = З_{\text{тс}} \cdot (1 + k_{\text{пр}} + k_{\text{д}}) \cdot k_{\text{р}} = 17\,000 \cdot (0,3 + 0,2) \cdot 1,3 = 11\,050 \text{ руб.}$$

где $З_{\text{тс}}$ – заработная плата по тарифу, руб.;

$k_{\text{пр}}$ – премиальный коэффициент, который равен 0,3;

$k_{\text{д}}$ – коэффициент доплат и надбавок равен 0,2;

$k_{\text{р}}$ – районный коэффициент, для Томска составляет 1,3.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$З_{\text{дн}} = \frac{З_{\text{м}} \cdot М}{F_{\text{д}}} \quad (26)$$

Таблица 18 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Инженер
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней:		
выходные дни	51	102
праздничные дни	16	16
Потери рабочего времени:		
отпуск	56	28
невыходы по болезни	7	7
Действительный годовой фонд рабочего времени	235	212

Таким образом, среднедневную заработную плату составляет:

- Для руководителя

$$З_{\text{дн}} = \frac{З_{\text{м}} \cdot М}{F_{\text{д}}} = \frac{15\,122 \cdot 10,4}{235} = 669 \text{ руб.}$$

- Для инженера

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_{\text{м}} \cdot M}{F_{\text{д}}} = \frac{11\,050 \cdot 11,2}{212} = 584 \text{ руб.}$$

где $Z_{\text{м}}$ – месячный должностной оклад работника, руб.;

M – количество месяцев работы без отпуска в течение года: при отпуске в 24 раб. дня $M = 11,2$ месяца, 5-дневная неделя; при отпуске в 48 раб. дней $M = 10,4$ месяца, 6-дневная неделя;

$F_{\text{д}}$ – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн.

Основная зарплата рассчитывается по формуле:

$$Z_{\text{осн}} = Z_{\text{дн}} \cdot T_{\text{р}}. \quad (27)$$

Таким образом, основная зарплата от предприятия составляет:

- Для руководителя

$$Z_{\text{осн}} = Z_{\text{дн}} \cdot T_{\text{р}} = 669 \cdot 30 = 20\,070 \text{ руб.}$$

- Для инженера

$$Z_{\text{осн}} = Z_{\text{дн}} \cdot T_{\text{р}} = 584 \cdot 318 = 185\,712 \text{ руб.,}$$

где $Z_{\text{осн}}$ – основная зарплата одного работника;

$T_{\text{р}}$ – продолжительность работ, раб. дн.;

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

Таблица 19 – Основная заработная плата

Исполнитель	$Z_{\text{тс}}$, руб.	$k_{\text{пр}}$	$k_{\text{д}}$	$k_{\text{р}}$	$Z_{\text{м}}$, руб.	$Z_{\text{дн}}$, руб.	$T_{\text{р}}$, раб.дн.	$Z_{\text{осн}}$, руб.
Руководитель	23 264	0,3	0,2	1,3	15 122	669	30	20 070
Инженер	17 000	0,3	0,2	1,3	11 050	584	318	185 712
								205 782

4.3.4.4 Дополнительная заработная плата исполнителей темы

Дополнительная зарплата начисляется, если: существуют отклонения от нормальных условий труда: происходит совмещение работы с обучением, предоставляется оплачиваемый отпуск, а также может быть связана с

обеспечением гарантий и компенсаций. Все величины доплат прописаны в Трудовом кодексе Российской Федерации.

Найдем величину по следующей формуле:

$$Z_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} \cdot Z_{\text{осн}} \quad (28)$$

где – коэффициент дополнительной заработной платы, принимается равным 0,13.

- Руководитель

$$Z_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} \cdot Z_{\text{осн}} = 0,13 \cdot 20\,070 = 2\,609,1 \text{ руб.};$$

- Инженер

$$Z_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} \cdot Z_{\text{осн}} = 0,13 \cdot 185\,712 = 24\,142,5 \text{ руб.};$$

4.3.4.5 Отчисления во внебюджетные фонды

Страховые отчисления относят к обязательным нормам органов государственного социального страхования, пенсионного фонда, медицинского страхования от затрат на оплату труда работников, а также несчастные случаи.

Величина отчислений рассчитывается по следующей формуле:

$$Z_{\text{внеб}} = k_{\text{внеб}} \cdot (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}), \quad (29)$$

где $k_{\text{внеб}}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (ПФР, ФОМС и пр.). Размер страховых взносов составляет 28 %, согласно п.6 ч.1 ст.58 закона №212-ФЗ.

Отчисления во внебюджетные фонды представлены в таблице 20.

Таблица 20 – Отчисления во внебюджетные фонды

Исполнитель	Основная заработанная плата, руб.	Дополнительная заработанная плата, руб.
Руководитель	20 070	2 609,1
Инженер	185 712	24 142,5

Таблица 20. Продолжение – Отчисления во внебюджетные фонды

Коэффициент отчислений во внебюджетные фонды	0,28
Итого	
Руководитель	6 350,1
Инженер	58 759,2

4.3.4.6 Накладные расходы

Накладные расходы - это затраты организации, которые не попали в предыдущие статьи расходов. К таким можно отнести: расходы на услуги связи, типографические услуги, оплату электроэнергии и др.

Значение накладных расходов рассчитываются по формуле:

$$Z_{\text{накл}} = (Z_{\text{м}} + Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}} + Z_{\text{внеб}} + A) \cdot 0,16, \quad (30)$$

где $k_{\text{нр}}$ – коэффициент, который учитывает накладные расходы, принят равным 16%.

$$Z_{\text{накл}} = (26\,172 + 205\,782 + 26\,751,6 + 65\,109,4 + 1\,351\,253,1) \cdot 0,16 = 268\,010,9 \text{ руб.}$$

4.3.4.7 Формирование бюджета затрат проекта

Основой для формирования стоимости бюджета является расчетная стоимость затрат на исследовательскую работу.

Сведем все статьи в таблицу 21 для определения бюджета затрат на проект.

Таблица 21 – Бюджет затрат проекта

Статья	Сумма, руб.	%
1. Материальные затраты проекта	2 490	0,04
2. Специальное оборудование	4 652 900	70,7
2. Затраты на амортизацию	1 351 253,1	20,5

Таблица 21. Продолжение – Бюджет затрат проекта

3. Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	205 782	3,1
4. Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	26 751,6	0,4
5. Отчисления во внебюджетные фонды	65 109,4	1
6. Накладные расходы	268 010,9	4,1
Итого плановая себестоимость	6 578 231,3	100

Минимальное количество денежных средств составляет 6 578 231,3 руб., которые необходимы при проектировании системы хранения водорода на основе гидрида магния.

4.4 Оценка сравнительной эффективности исследования

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

Интегральный показатель финансовой эффективности научного исследования получают в ходе оценки бюджета затрат трех (или более) вариантов исполнения научного исследования. Для этого наибольший интегральный показатель реализации технической задачи принимается за базу расчета (как знаменатель), с которым соотносятся финансовые значения по всем вариантам исполнения.

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\phi}^p = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{max}}, \quad (31)$$

где I_{ϕ}^p - интегральный финансовый показатель разработки;

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

Φ_{max} – максимальная стоимость исполнения научно-исследовательского проекта (в т.ч. аналоги).

Таблица 22 – Группировка затрат по статьям аналогов разработки

Статья	Аналог 1	Аналог 2
1. Материальные затраты проекта	50 000	75 000
2. Специальное оборудование	4 850 000	4 800 000
2. Затраты на амортизацию	1 300 000	1 280 000
3. Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	205 000	205 000
4. Отчисления во внебюджетные фонды	65 000	65 000
5. Накладные расходы	275 000	275 000
Итого плановая себестоимость	6 745 000	6 700 000

$$I_{\phi}^p = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{max}} = \frac{6578231,3}{6745000} = 0,97;$$

$$I_{\phi}^{a1} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{max}} = \frac{6745000}{6745000} = 1;$$

$$I_{\phi}^{a2} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{max}} = \frac{6700000}{6745000} = 0,99;$$

Полученная величина интегрального финансового показателя разработки отражает соответствующее численное удешевление стоимости разработки в разы.

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

$$I_m^p = \sum_{i=1}^n a_i b_i^p; \quad I_m^a = \sum_{i=1}^n a_i b_i^a; \quad (32)$$

где I_m – интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов;

a_i – весовой коэффициент i -го параметра;

b_i^a, b_i^p – бальная оценка i -го параметра для аналога и разработки, устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания;

n – число параметров сравнения.

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности рекомендуется проводить в форме таблицы, пример которой приведен ниже.

Таблица 23 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Критерии	Весовой коэффициент параметра	Текущий проект	Аналог 1	Аналог 2
1. Удобство в эксплуатации	0,3	3	4	3
2. Материалоемкость	0,1	4	3	3
3. Надежность	0,23	4	2	3
4. Простота реализации	0,12	2	3	2
5. Энергосбережение	0,25	5	5	5
Итого	1			

Значения коэффициентов ресурсоэффективности следующие:

$$I_m^p = \sum_{i=1}^n a_i b_i^p = 0,3 \cdot 3 + 0,1 \cdot 4 + 0,23 \cdot 4 + 0,12 \cdot 2 + 0,25 \cdot 5 = 3,71;$$

$$I_m^{a1} = \sum_{i=1}^n a_i b_i^a = 0,3 \cdot 4 + 0,1 \cdot 3 + 0,23 \cdot 2 + 0,12 \cdot 3 + 0,25 \cdot 5 = 3,57;$$

$$I_m^{a2} = \sum_{i=1}^n a_i b_i^a = 0,3 \cdot 3 + 0,1 \cdot 3 + 0,23 \cdot 3 + 0,12 \cdot 2 + 0,25 \cdot 5 = 3,38;$$

Интегральный показатель эффективности разработки (аналога) рассчитывается по формуле:

$$I_{фин}^p = \frac{I_m^p}{I_{\phi}^p}; I_{фин}^a = \frac{I_m^a}{I_{\phi}^a}; \quad (33)$$

$$I_{фин}^p = \frac{3,71}{0,97} = 3,82;$$

$$I_{фин}^{a1} = \frac{3,57}{1} = 3,57;$$

$$I_{фин}^{a1} = \frac{3,38}{0,99} = 3,41;$$

Сравнение интегрального показателя эффективности текущего проекта и аналогов позволит определить сравнительную эффективность проекта.

Сравнительная эффективность проекта:

$$\mathfrak{E}_{cp} = \frac{I_{фин}^p}{I_{фин}^a}; \quad (34)$$

Таблица 24 – Сравнительная эффективность разработки

Показатели	Аналог 1	Аналог 2	Разработка
Интегральный финансовый показатель разработки	1	0,99	0,97
Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	3,57	3,38	3,71
Интегральный показатель эффективности	3,57	3,41	3,82
Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1,07	1,12	

Заключение

При планировании научно-исследовательской работы был произведен подсчет бюджета исследования. В процессе формирования бюджета были использованы группировки по материальным затратам и затратам на специальное оборудование (4 655 390 руб), по амортизационному отчислению оборудования (1 351 253,1 руб), затратам по основной заработной плате исполнителей (205 782 руб), затратам по дополнительной заработной плате (26 751,6 руб), отчислениям во внебюджетные фонды (70 225,2 руб) и накладным расходам (268 829,4 руб). Всего бюджет составил 6 578 231,3 руб.

Осуществлено планирование проведения работ по научно-техническому исследованию, общая продолжительность которой составляет 318 дней.

Произведена оценка интегральных показателей эффективности исследования. Сравнение значений интегральных показателей эффективности позволяет судить о приемлемости существующего варианта решения поставленной в магистерской диссертации технической задачи с позиции финансовой и ресурсной эффективности.

Водород привлекает к себе внимание со всего мира в качестве энергоносителя, что приводит к всесторонним исследованиям технологии и способам решения проблем производства, хранения и применения водорода. Интерес к водороду как энергии будущего обусловлен тем, что он является чистой энергией (в результате выработки электрической энергии в качестве отходов получается вода), самым распространенным элементом во Вселенной, самым легким и имеющим большое значение энергии на единицу массы топливом.

В данном разделе рассмотрены вопросы, связанные с реализацией процесса хранения водорода в гидриде магния в соответствии с нормами производственной санитарии, техники производственной безопасности и охраны окружающей среды. Представлена оценка влияния проекта на окружающую среду, разработаны организационные меры обеспечения безопасности установки и меры безопасности в чрезвычайных ситуациях. Произведен анализ влияния вредных и опасных факторов во время проектирования и в условиях работы системы хранения водорода, отображены меры по снижению их влияния. Основной областью применения установок для хранения водорода являются заправки грузового транспорта на водородных топливных элементах. Потенциальными пользователями разрабатываемого решения являются потребители электрической энергии. Работа выполнялась в лаборатории НЗ третьего корпуса ТПУ.

5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

Нормальная продолжительность рабочего времени не может превышать 40 часов в неделю согласно ТК РФ и ежегодный оплачиваемый отпуск продолжительностью 28 календарных дней. Для работников, работающих в

условиях неполного рабочего времени, нагрузка устанавливается пропорционально занимаемой ставке [1].

Работа выполнялась в лаборатории третьего корпуса ТПУ. Данное помещение относится к классу без повышенной опасности. Согласно СанПиН 2.2.2/2.4.1340–03 «Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы», расстояние между рабочими столами, на которых расположены мониторами должно быть не менее 2 м, между боковыми поверхностями видеомониторов расстояние должно быть не менее 1,2 м [2]. Дисплеи должны быть установлены таким образом, чтобы от экрана до оператора было не менее 60-70 см, но не ближе 50 см с учетом размеров алфавитно-цифровых знаков и символов. Напряженность электромагнитного поля вокруг монитора в диапазоне частот 5 Гц–2 кГц составляет не более 10 В/м. Согласно стандарту ТСО'03 и СанПиН 2.2.2/2.4.1340–03 мониторы соответствуют техническим стандартам.

Согласно СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 для обеспечения оптимальной работоспособности и сохранения здоровья на протяжении рабочей смены должны устанавливаться регламентированные перерывы – при 8-часовом рабочем дне продолжительностью 15 минут через каждый час работы.

Конструкция рабочего стула (кресла) должна обеспечивать поддержание рациональной рабочей позы при работе на ПЭВМ, позволять изменять позу с целью снижения статического напряжения мышц шейно-плечевой области и спины для предупреждения развития утомления. Тип рабочего стула (кресла) следует выбирать с учетом роста пользователя, характера и продолжительности работы с ПЭВМ.

5.2 Производственная безопасность

Согласно ГОСТ 12.0.003-2015 «Опасные и вредные производственные факторы. Классификация» выделен перечень опасных и вредных факторов,

характерных для рабочей производственной среды, Перечень занесен в таблицу 25.

Таблица 25 - Возможные опасные и вредные факторы

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015)	Этапы работ			Нормативные документы
	Разрабо тка	Изготов ление	Эксплуа тация	
1. Превышение уровня шума		+		ГОСТ 12.1.003-2014 ССБТ; ГОСТ 12.1.029-80 ССБТ; СН 2.2.4/2.1.8.562–96; СП 51.13330.2011;
2. Недостаточная освещенность рабочей зоны	+	+	+	СП 52.13330.2016; СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278– 03;
3. Повышенный уровень электромагнитных излучений		+		ГОСТ 12.1.019-2017 ССБТ; СанПиН 2.2.2/2.4.1340–03; ГОСТ 12.1.006-84 ССБТ;
4. Отклонение показателей микроклимата	+	+	+	ГОСТ 12.1.005-88 СанПиН 2.2.4.584- 96 СП 60.13330.2016
5. Химические вещества, косвенно действующие на организм работающего как опасные и вредные производственные факторы физической природы действия, обусловленные свойствами этих химических веществ воспламеняться, гореть, тлеть, взрываться и т.п.		+		ГОСТ 12.1.010-76 ССБТ; ФЗ от 22.07.2013 г. №123;

5.3 Анализ опасных и вредных производственных факторов

В лаборатории расположен генератор азота - основной источник шума. С периодичностью примерно раз в минуту происходит шумовой выхлоп

отходящего газа. Согласно паспорту генератора максимальный уровень шума на расстоянии 1 метр составляет 85 дБ. Согласно СН 2.2.4/2.1.8.562–96 предельно допустимый уровень звука на рабочем месте при легкой степени нагрузки составляет 80 дБ. Для снижения уровня шума могут быть применены глушитель отработанного газа, либо средства, снижающие шум и вибрацию на пути их распространения. Также возможно применение противошумных вкладышей, наушников. Сама установка хранения водорода в ходе своей работы не производит шума.

Недостаток естественного света обусловлен подвальным расположением лаборатории, в которой проводилась работа. Важна и равномерность освещения по площади, поскольку перевод взгляда с более освещенных на менее освещенные поверхности и наоборот может влиять на снижение остроты зрения.

Согласно СП 52.13330.2016 при средней точности различения объектов освещенность рабочей поверхности от системы общего искусственного освещения должна составлять 150 лк. Коэффициент пульсации освещенности – критерий оценки относительной глубины колебаний освещенности в результате изменения во времени светового потока источников света при их питании переменным током – должен иметь значение не более 20%. Поскольку помещение подвальное – отсутствует необходимость в расчете коэффициента естественной освещенности. Значение искусственного освещения в лаборатории в пределах нормы, коэффициент пульсации освещенности не превышает допустимого значения.

Микроклимат в производственном помещении включает в себя температуру, относительную влажность и скорость движения воздуха. С целью создания нормативных условий для персонала, установлены нормы производственного микроклимата согласно ГОСТ 12.1.005-88 «Воздух рабочей зоны. Общие санитарно-гигиенические требования», СанПиН 2.2.4.584- 96 «Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений».

Условия реализации устройств вентиляции и отопления описываются в СП 60.13330.2016 «Отопление, вентиляция и кондиционирование воздуха».

В таблице 26 представлены оптимальные параметры микроклимата в производственных помещениях для легкой категории работ, к которой относятся работы, выполняемые сидя и не требующие физического напряжения.

Таблица 26 – Оптимальные параметры микроклимата

Период года	Температура, °С	Относительная влажность, %	Скорость движения воздуха, м/с, не более
Теплый	23-25	40-60	0,1
Холодный	22-24	40-60	0,1

Согласно ГОСТ 12.1.002-84 «Электрические поля промышленной частоты» облучение электрическим полем регламентируется как по величине напряженности, так и по продолжительности действия. Отрицательное воздействие электромагнитного поля возрастает с повышением частоты, продолжительности и интенсивности излучения. Согласно санитарно-эпидемиологическим правилам оценку электромагнитных полей осуществляют отдельно по напряженности электрического поля и напряженности магнитного поля. Безопасные уровни излучений регламентируются нормами СанПиН 2.2.2/2.4.1340–03 и представлены в таблице 27.

Таблица 27 – 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

Поскольку техника в лаборатории заземлена и магнитное и электрическое поля имеют значения в пределах нормы.

Категория разделения помещений по взрывопожарной и пожарной опасности осуществляется согласно НПБ 105-03. Лаборатория, в которой выполнялись эксперименты, относится к категории «А» повышенная взрывопожароопасность, так как лаборатория содержит горючие газы и легковоспламеняющиеся жидкости в таком количестве, что могут образовываться взрывоопасные парогазовоздушные смеси. Также в лаборатории находятся вещества и материалы, способные взрываться и гореть при взаимодействии с водой, кислородом или с воздухом, что расчетное избыточное давление взрыва в помещении превышает 5 кПа. Данное помещение выполнено из кирпича, который относится к трудно сгораемым материалам. Возникновение пожара при работе с электронной аппаратурой может быть по причинам как электрического, так и неэлектрического характера. Причинами возникновения пожара неэлектрического характера являются халатное неосторожное обращение с огнем. Причины возникновения пожара электрического характера: короткое замыкание, перегрузки по току, статическое электричество и так далее.

Касательно работы с водородным топливом имеются применяется ГОСТ Р 51673-2000 «Водород газообразный чистый. Технические условия». Сырьем для получения газообразного чистого водорода является технический водород по ГОСТ 3022-80, получаемый электролитическим разложением воды с последующим его сжатием и очисткой. Резервуары и трубопроводы для водорода требуют тщательно герметизации. Утечку водорода трудно обнаружить без помощи специальных приспособлений.

Требования к проектированию, конструкции, материалам и методам испытания систем для хранения газообразного водорода в металлгидридных соединениях установлены в ГОСТ Р 54114-2010. В ГОСТ Р ИСО 14687-1-2012 установлены параметры водородного топлива, определяющие его характеристики и особенности применения, связанные с производством,

хранением, транспортированием и заправкой транспортных средств, эксплуатацией устройств и систем, предназначенных для работы на этом виде топлива.

5.4 Обоснование мероприятий по снижению уровней воздействия опасных и вредных факторов на исследователя

Лаборатория относится к помещению с особой опасностью поражения электрическим током. В помещении применяются следующие меры защиты от поражения электрическим током: недоступность токоведущих частей для случайного прикосновения, все токоведущие части изолированы и ограждены. Недоступность токоведущих частей достигается путем их надежной изоляции, применения защитных ограждений, расположения токоведущих частей на недоступной высоте. В качестве средств индивидуальной защиты применяют инструменты с электроизолированными ручками, резиновые перчатки, резиновые сапоги и деревянные лестницы.

Ослабление мощности электромагнитного поля на рабочем месте, в частности в производственном помещении, достигается путём увеличения расстояния между источником излучения и рабочим местом, установкой отражающих или поглощающих экранов между источником и рабочим местом, размещение токоведущих элементов аппаратов и устройств в ферромагнитные оболочки кожухи. Самым эффективным методом является установка экранирующих экранов. Экраны могут защищать как сам источник, так и рабочее место, также применяют заземляющие экраны. Положения по безопасности при работе с электрооборудованием, а также меры защиты от поражения электрическим током изложены в ГОСТ ИЕС 61140–2012. В таблице 28 указаны допустимые уровни напряженности электрического поля и время продолжительности пребывания в нем.

Таблица 28 – Допустимые уровни напряжённости электрического поля и продолжительности пребывания работающих без средств защиты

Напряженность электрического поля, кВ/м	Допустимая продолжительность пребывания человека в течение суток в эл. Поле, мин.
Менее 5	Без ограничений
5 – 10	Не более 180
10 – 15	Не более 90
15 – 20	Не более 10
20 – 25	Не более 5

5.5 Экологическая безопасность

Использование водородного топлива безвредно с экологической стороны, т.к. в результате его работы получается только вода. Процесс подготовки металлгидрида также экологически безопасен. Однако в ходе работы подготовки металлгидрида необходимо позаботиться о отдельных контейнерах для отходов бытового характера: отдельные мусорные баки для бумаги, стекла, пластика, резины и так далее. Необходимо заключить договор с компанией, вывозящей мусор, чтобы она обеспечивала доставку разделенных отходов фирмам, занимающимся переработкой отходов.

5.6 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

При наводороживании системы применяется водород в газообразном виде; при осуществлении этого процесса необходим строгий контроль за давлением и температурой.

На стыке между трубопроводом для водорода и аппаратурой по наводороживанию должно устанавливаться, насколько это применимо, оборудование, позволяющее производить техническое обслуживание и (или) в случае возникновения чрезвычайных ситуаций измерительное оборудование, устройства для регулировки давления и (или) расхода газа, а также фильтры. Для перекрытия части системы трубопроводов в чрезвычайных ситуациях и

проведения регламентного техобслуживания должны использоваться запорные клапаны с механизмом блокировки. Запорный клапан должен устанавливаться в легкодоступном месте в трубопроводе для подачи водорода таким образом, чтобы поток водорода при необходимости мог быть перекрыт.

Системы обеспечения безопасности в чрезвычайных ситуациях должны оставаться активными во всех режимах работы. Аварийная система должна отключать все функции и операции, которые могут помешать выполнению процедуры аварийного останова станции.

Если работник получил травму от электрического тока, обеспокоен как можно скорее решение электричество, проверить состояние жертвы и вызвать скорую помощь, если это необходимо. До прибытия скорой помощи предоставьте пострадавшему необходимую первую помощь или, в случае необходимости, организуйте доставку жертвы в ближайшее медицинское учреждение, сообщите начальнику структурного подразделения о произошедшем происшествии.

В случае пожара немедленно прекратите работу, закройте газовый баллон, отсоедините электрооборудование, вызовите пожарную службу в 01 или 010, сообщите о случившемся менеджеру агрегата и начните тушение пожара с помощью первичного средства пожаротушения.

Предотвращение пожаров основано на устранении благоприятных условий воспламенения. В рамках четырех проблем решается пожарной безопасности: предотвращение пожаров и пожаров, локализация пожаров, защита людей и имущества, борьба с пожарами. Предотвращение возгорания достигается за счет исключения легко воспламеняющихся предметов и источников воспламенения, а также для поддержания окружающей среды в условиях, которые препятствуют возгоранию.

Для устранения причин возникновения и локализации пожаров в помещении лаборатории должны проводиться следующие мероприятия:

- использование только исправного оборудования;

- проведение периодических инструктажей по пожарной безопасности;
- отключение электрооборудования, освещения и электропитания при предполагаемом отсутствии обслуживающего персонала или по окончании работ;
- содержание путей и проходов для эвакуации людей в свободном состоянии.

На рисунке 14 представлен план эвакуации лаборатории 3 корпуса, в которой выполнялись разработки материала для хранения водорода.



Рисунок 14 – План эвакуации из рабочего помещения [50]

Для локализации или ликвидации загорания на начальной стадии используются первичные средства пожаротушения. Первичные средства пожаротушения обычно применяют до прибытия пожарной команды. Огнетушители водо-пенные (ОХВП-10) используют для тушения очагов пожара без наличия электроэнергии. Углекислотные (ОУ-2) и порошковые огнетушители предназначены для тушения электроустановок, находящихся под напряжением до 1000 В. Для тушения токоведущих частей и электроустановок применяется переносной порошковый огнетушитель, например, ОП-5. Также в

помещениях необходимо на каждом этаже размещать не менее двух переносных огнетушителей; наличие охранно-пожарной сигнализации.

Хранение СД в специализированных резервуарах и установка на них приборов регистрирующих изменение параметры состояния вещества - в случае разгерметизации срабатывают сигнальные устройства. Ограждение площадки с резервуаром (место хранения) заградительной полосой (нейтрализация), в случае растекания вещества, размер зоны растекания не выйдет за пределы площадки, вещество будет нейтрализовано и утилизировано.

В смеси с воздухом и кислородом водород пожаровзрывоопасен. Минимальная (максимальная) концентрация горючего вещества в однородной смеси с окислителем - концентрационный предел распространения пламени – для водородно-воздушной смеси составляет 4,12 % - 75%; для водородно-кислородной смеси 4,1%-96%.

Мерами по ликвидации чрезвычайных ситуаций при обращении с газообразным водородом является устранение всех источников воспламенения, если это не представляет опасности. Изолирование опасной зоны в радиусе не менее 300 м. Удаление посторонних, не задействованных в ликвидации ЧС. Необходимо держаться наветренной стороны; соблюдать меры пожарной безопасности; не курить; устранить источники огня и искр. В опасную зону допускается входить только в защитных средствах. Пострадавшим оказать первую медицинскую помощь, отправить людей из очага поражения на медицинское обследование. Обо всех аварийных ситуациях необходимо сообщать в местные органы Роспотребнадзора, региональный комитет охраны окружающей среды и природных ресурсов, в региональный комитет по ГО и ЧС.

Средствами индивидуальной защиты для аварийных бригад являются изолирующие противогаз ИП-4М и спецодежда. В очаге пожара использовать огнезащитный костюм в комплекте с самоспасателем СПИ-20. К рекомендуемым средствам тушения пожаров от газообразного водорода относятся азот и диоксид углерода.

Порядок действий при ликвидации аварийных и чрезвычайных ситуаций следующий:

- Вызвать газоспасательную службу района. Сообщить в территориальный орган Роспотребнадзора;
- По возможности устранить течь с соблюдением мер предосторожности. При интенсивной утечке дать газу полностью выйти.

Заключение

В данном разделе были рассмотрены вопросы, связанные с организацией рабочего места в соответствии с нормами техники производственной безопасности и охраны окружающей среды; выявлены и проанализированы опасные и вредные производственные факторы, даны практические рекомендации по технике безопасности. Обеспечение безопасности персонала на рабочем месте является очень важной задачей. Организация должна обеспечивать необходимые условия труда для рабочих, минимизировать вредные и опасные факторы производственной среды. Персонал должен обладать специализированными умениями и навыками для выполнения соответствующих работ на установках.

Рабочая установка в ходе эксплуатации не несет за собой вредного воздействия на экологию и безопасна в эксплуатации при правильном использовании. Однако соблюдение техники безопасности всегда необходимо.

Заключение

Необходимость поиска новых источников энергии обусловлена истощением мировых запасов органического топлива. Водород, как самый распространенный элемент во Вселенной, а также не имеющий отрицательного воздействия на экологию, является достойным кандидатом. Для использования водорода в качестве энергоносителя необходима эффективная и безопасная система хранения, среди которой гидрид магния имеет самую высокую плотность энергии (9 МДж/кг) из всех обратимых гидридов, применяемых для хранения водорода. Однако, высокая рабочая температура, плохая кинетика дегидрирования и низкое количество циклов сорбции/десорбции ведут к необходимости новых разработок.

В ходе проведенных исследований по полученным результатам были определены значения временных компонент. До наводороживания наименьшее время жизни соответствует бездефектной кристаллической решетке. Долгоживущие компоненты связаны либо с аннигиляцией позитронов, захваченных поверхностью порошкообразного материала, либо с локализацией в нанопорах. Средний размер нанопор составляет $3,2 \pm 0,1$ нм. После наводороживания две долгоживущие компоненты также связаны с особенностями аннигиляции позитронов в порошкообразном материале. Однако короткоживущая компонента τ_a увеличилась более чем на 15 %. Ее значение может соответствовать либо аннигиляции позитронов в вакансиях, либо в водород-вакансионных комплексах. Для однозначного определения и интерпретации данной компоненты необходимо проводить дополнительные исследования.

Список использованных источников

1. РФ Т. К. Трудовой Кодекс Российской Федерации» от 30.12. 2001 № 197-ФЗ //Российская газета. – 2001. – №. 256.
2. Бондаренко, Геннадий Германович. Основы материаловедения: учебник / Г. Г. Бондаренко, Т. А. Кабанова, В. В. Рыбалко. — Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014. — 760 с.: ил.. — Учебник для высшей школы. — Предметный указатель: с. 748-760..
3. Давыдов, Виктор Николаевич. Техника безопасности при работах по химии / В. Н. Давыдов, Э. Г. Злотников. — СПб.; Москва: Сага Форум, 2008. — 112 с.: ил. — Библиогр.: с. 97-99.
4. Борзенко В. И., Дуников Д. О., Малышенко С. П. Кризисные явления в металлгидридных устройствах хранения водорода //Теплофизика высоких температур. – 2011. – Т. 49. – №. 2. – С. 256-264.
5. Дудник А. Б. и др. Цифровой спектрометр времени жизни позитронов на основе метода β^+ γ -совпадений //Вопросы атомной науки и техники. – 2013.
6. Тарасов Б. П., Лотоцкий М. В. Водород для производства энергии: проблемы и перспективы //Альтернативная энергетика и экология. – 2006. – Т. 40. – №. 8. – С. 72-90.
7. Окорокова Н. С., Пушкин К. В. Управляемый генератор водорода на базе гидронного химического источника тока //Электронный журнал «Труды МАИ. – 2012. – №. 51.
8. Кулькова С. Е. и др. Теоретическое исследование поверхности материалов перспективных для хранения водорода: поверхностная активность и адсорбционные свойства //Физическая мезомеханика. – 2004. – Т. 7. – №. S1-1.
9. Канило П. М., Костенко К. В. Перспективы становления водородной энергетики и транспорта //Автомобильный транспорт. – 2008. – №. 23.
10. Нечаев Ю. С. Физические комплексные проблемы старения, охрупчивания и разрушения металлических материалов водородной энергетики

и магистральных газопроводов //Успехи физических наук. – 2008. – Т. 178. – №. 7. – С. 709-726.

11. Ключка Ю. П., Кривцова В. И. Особенности использования водорода на автомобильном транспорте. – 2009.

12. Горлачев В. Ю. Эколого-энергетический аспект качества жизни //Гуманитарный вектор. Серия: Философия, культурология. – 2012. – №. 3.

13. Горлачев В. Ю. Социально-экологические основания перехода к альтернативной энергетике. – 2010.

14. Ажажа В. М. и др. Материалы для хранения водорода: анализ тенденции развития на основе данных об информационных потоках //Вопросы атомной науки и техники. – 2006.

15. Зотов Б. И. Безопасность жизнедеятельности на производстве: Учебник для студентов вузов, обучающихся по специальностям 311300, 311500, 311900/ВИ Курдюмов.-2-издание, переработанное и дополненное.-М.: Колос, КолосС, 2003.-432 с.: ил..-(Учебники и учебные пособия для студентов высших уч) ISBN 5-9532-0094-3, 3000 экз //М.: КолосС. – 2003.

16. Горьков, Валерий Павлович. Библиотека программ мессбауэровской спектроскопии. Учебное пособие : учебное пособие для вузов / В. П. Горьков, А. А. Чечина; Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова (МГУ). — Москва: Изд-во Московского ун-та, 1988. — 87 с.: ил.. — Библиогр.: с. 83-85..

17. Взаимодействие дефектов и свойства металлов: [сборник научных трудов] / Тульский политехнический институт (ТулПИ) ; под ред. В. И. Саррака , С. А. Головина. — Тула: ТПИ, 1976. — 191 с.: ил.: 20 см..

18. Костанян Р. К. и др. ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ МАГНИЯ В МЕТАЛЛО-ВОЗДУШНЫХ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ГЕНЕРАТОРАХ //Альтернативная энергетика и экология (ISJAEE). – 2018. – №. 19-21. – С. 52-61

19. Xu E. et al. Influence of micro-amount O₂ or N₂ on the hydrogenation/dehydrogenation kinetics of hydrogen-storage material MgH₂ //International Journal of Hydrogen Energy. – 2017. – Т. 42. – №. 12. – С. 8057-8062.
20. Казаков А. В. и др. Малая распределенная энергетика России: совместная выработка тепло-и электроэнергии //Вестник науки Сибири. – 2013. – №. 4 (10).
21. Кузнецов П. В. и др. Позитронная спектроскопия дефектов в субмикрористаллическом никеле после низкотемпературного отжига //Физика твердого тела. – 2015. – Т. 57. – №. 2. – С. 209-218.
22. Мошникова В. А., Терукова Е. И. Основы водородной энергетики //СПб.: Изд-во SPbGETU “ЛЕТИ. – 2010.
23. Графутин В. И. и др. Применение и развитие методов позитронной аннигиляционной спектроскопии для определения размеров нанобъектов в пористых системах, дефектных материалах и наноматериалах //Наноструктуры. Математическая физика и моделирование. – 2010. – Т. 2. – №. 2. – С. 15-42.
24. Ключка Ю. П., Кривцова В. И. Определение времени разрушения баллона с водородом, обусловленного изменением температурных параметров окружающей среды. – 2010.
25. Радченко Р. В., Мокрушин А. С., Тюльпа В. В. Водород в энергетике: учебное пособие. – 2014.
26. Шпильрайн Э. Э. Введение в водородную энергетику. – Рипол Классик, 1984.
27. Канарев Ф. М. Введение в водородную энергетику //Сб. трудов МИС-РТ, Москва. – 1999. – №. 11. – С. 3-14.
28. Павлов Н. В. Создание автореципиентов для хранения, транспортирования и выдачи сжатого водорода //Технические газы. – 2008. – №. 2. – С. 43-47.

29. Wang Y., Wang Y. Recent advances in additive-enhanced magnesium hydride for hydrogen storage //Progress in Natural Science: Materials International. – 2017. – Т. 27. – №. 1. – С. 41-49.
30. Нечаев Ю. С. Физические комплексные проблемы старения, охрупчивания и разрушения металлических материалов водородной энергетики и магистральных газопроводов //Успехи физических наук. – 2008. – Т. 178. – №. 7. – С. 709-726.
31. Тарасов Б. П., Лотоцкий М. В., Яртысь В. А. Проблема хранения водорода и перспективы использования гидридов для аккумулялирования водорода //Российский химический журнал. – 2006. – Т. 50. – №. 6. – С. 34-48.
32. Luna C. R. et al. On the perfect MgH_2 (–Nb,–Zr) systems and the influence of vacancy-like defects on their structural properties. A self-consistent first principle calculations study of the electron and positron parameters //Journal of Alloys and Compounds. – 2013. – Т. 556. – С. 188-197.
33. Yu J. C. et al. Synthesis and characterization of porous magnesium hydroxide and oxide nanoplates //The Journal of Physical Chemistry B. – 2004. – Т. 108. – №. 1. – С. 64-70.
34. Yang W. et al. Characterizations of the thermal decomposition of nano-magnesium hydroxide by positron annihilation lifetime spectroscopy //Powder technology. – 2017. – Т. 311. – С. 206-212.
35. Wang L. et al. A critical review of Mg-based hydrogen storage materials processed by equal channel angular pressing //Metals. – 2017. – Т. 7. – №. 9. – С. 324.
36. Robles J. M. C., Ogando E., Plazaola F. Positron lifetime calculation for the elements of the periodic table //Journal of Physics: Condensed Matter. – 2007. – Т. 19. – №. 17. – С. 176222.
37. Zhang J., Yan S., Qu H. Recent progress in magnesium hydride modified through catalysis and nanoconfinement //International Journal of Hydrogen Energy. – 2018. – Т. 43. – №. 3. – С. 1545-1565.

38. Siegel R. W. Positron annihilation spectroscopy //Annual Review of Materials Science. – 1980. – Т. 10. – №. 1. – С. 393-425.
39. Ярославцев, Андрей Борисович. Химия твердого тела / А. Б. Ярославцев. — Москва: Научный мир, 2009. — 328 с.
40. Асабина Е. А. Дефекты в твердых телах и их влияние на свойства функциональных материалов: Электронное учебно-методическое пособие //Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет.–2012.–65 с. – 2012.
41. Фетисов, Геннадий Павлович. Материаловедение и технология металлов : учебник для среднего профессионального образования / Г. П. Фетисов, Ф. А. Гарифуллин. — Москва: Оникс, 2007. — 624 с.: ил.. — Для среднего профессионального образования. — Библиогр.: с. 619..
42. Богодухов, Станислав Федорович. Курс материаловедения в вопросах и ответах : учебное пособие / С. И. Богодухов, В. Ф. Гребенюк , А. В. Синюхин. — Москва: Машиностроение, 2005. — 288 с.
43. Анимица И. Е., Кочетова Н. А., Нейман А. Я. Учебно-методический комплекс дисциплины" Материалы для водородной энергетики". – 2008.
44. Чернов И. П. и др. Физические свойства насыщенных водородом металлов и сплавов //Томск: Изд-во Томского политехнического университета. – 2009.
45. Birnbaum H. K., Sofronis P. Hydrogen-dislocation interactions //Hydrogen Effects in Materials. – 1994. – P. 15-34
46. Гельд, П.В. Водород в металлах и сплавах // П.В Гельд, Р.А. Рябов. — М: Металлургия, 1974. – 271 с.
47. Спивак, Л.В. Водород в металлах: учебное пособие / Л.В. Спивак. - Пермь: ПГУ, 2011. – Ч. 1. – 175 с.
48. Flanagan T. B., Bowerman B. S., Biehl G. E. Hysteresis in metal/hydrogen systems //Scripta Metallurgica. – 1980. – Vol. 14. – №. 4. – P. 443-447.
49. Лаптев Р. С. Разработка метода аннигиляции позитронов для контроля дефектной структуры в системах металл-водород : дис. – 2014.

50. Лидер А. М. Позитронная спектроскопия для контроля микроструктурных изменений в системах "металл-водород": диссертация на соискание ученой степени доктора технических наук: спец. 05.11. 13 : дис. — 2017.

51. Чернов И. П., Черданцев Ю. П., Тюрин Ю. И. Методы исследования систем металл-водород //М.: Энергоатомиздат. — 2004. — Т. 270. — С. 60.

52. Батаев, Владимир Андреевич. Методы структурного анализа материалов и контроля качества деталей : учебное пособие / В. А. Батаев, А. А. Батаев, А. П. Алхимов. — 2-е изд.. — Москва: Флинта Наука, 2008. — 220 с.

53. Неорганическое материаловедение энциклопедическое издание: в 2 т.: / Национальная академия наук Украины (НАНУ), Институт проблем материаловедения им И. Н. Францевича (ИПМ ; под ред. Г. Г. Гнесина; В. В. Скорохода . — Киев : Наукова думка , 2008 Т. 1: Основы науки о материалах . — 2008. — 1152 с.:

54. Бабич А. В., Погосов В. В., Рева В. И. О локализации позитронов в вакансиях металла //Физика твердого тела. — 2015. — Т. 57. — №. 11. — С. 2081-2089.

55. Погосов В. В. Метод определения работы выхода электронов и позитронов из металла, содержащего вакансии //Физика твердого тела. — 2017. — Т. 59. — №. 6. — С. 1051-1055.

56. Арефьев К. П. и др. Аннигиляция позитронов в насыщенном водородом титане //Физика твердого тела. — 2003. — Т. 45. — №. 1. — С. 3-7.

57. Бордулев Ю. С. и др. Оптимизация параметров спектрометра для исследования времени жизни позитронов в материалах //Современные наукоемкие технологии. — 2013. — №. 8-2. — С. 184-189.

58. Korhonen T., Puska M. J., Nieminen R. M. First-principles calculation of positron annihilation characteristics at metal vacancies //Physical Review B. — 1996. — Т. 54. — №. 21. — С. 15016.

59. Кудияров В.Н., Лидер А.М. Изучение процессов сорбции и десорбции водорода при помощи автоматизированного комплекса Gas Reaction Controller // Фундаментальные исследования. - 2013. - №. 10 - С. 3466-3471.

60. Сыпченко В. С. и др. Исследование влияния параметров низкотемпературной водородной плазмы на эффективность насыщения материалов водородом //Известия высших учебных заведений. Физика. – 2014. – Т. 57. – №. 11-3. – С. 110-114.

61. Лепаев А. Н., Ксенофонтов С. И., Васильева А. М. Движение горящих частиц металла в продуктах горения конденсированных систем //Вестник Чувашского государственного педагогического университета им. ИЯ Яковлева. – 2014. – №. 4 (84).

62. Гулидова Л. В., Чао Л. Электрон-позитронная аннигиляция для изучения структуры наноалмазов после циклической сорбции водорода //Перспективы развития фундаментальных наук: сборник научных трудов XIV Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых, г. Томск, 25-28 апреля 2017 г. Т. 1: Физика.—Томск, 2017. – Изд-во ТПУ, 2017. – Т. 1. – С. 201-203.

63. Goworek T. Comments on the relation: positronium lifetime–free volume size parameters of the Tao–Eldrup model //Chemical physics letters. – 2002. – Т. 366. – №. 1-2. – С. 184-187.

64. Прокопьев Е. П. Захват термализованных позитронов на притягивающие центры в ионных кристаллах и полупроводниках //Труды Международного симпозиума «Надежность и качество». – 2010. – Т. 2.

65. Shantarovich V. P. et al. Analysis of the free volume elements in polymeric system by the position annihilation method //Vysokomolekulyarnye Soedineniya. Seriya A i Seriya B. – 1997. – Т. 39. – №. 3. – С. 445-450.

66. Прокопьев Е. П. Захват термализованных позитронов на притягивающие центры в ионных кристаллах и полупроводниках //Труды Международного симпозиума «Надежность и качество». – 2010. – Т. 2.

67. Chen B. H. et al. Improving the hydrogenation properties of MgH_2 at room temperature by doping with nano-size ZrO_2 catalyst //Journal of Alloys and Compounds. – 2016. – T. 655. – C. 21-27.
68. Jain I. P., Lal C., Jain A. Hydrogen storage in Mg: a most promising material //International Journal of Hydrogen Energy. – 2010. – T. 35. – №. 10. – C. 5133-5144.
69. Dornheim M. et al. Hydrogen storage in magnesium-based hydrides and hydride composites //Scripta Materialia. – 2007. – T. 56. – №. 10. – C. 841-846.
70. Krause-Rehberg R., Leipner H. S. Positron annihilation in semiconductors: defect studies. – Springer Science & Business Media, 1999. – T. 127.
71. West R. N. Positron studies of lattice defects in metals //Positrons in Solids. – Springer Berlin Heidelberg, 1979. – P. 89-144
72. Eldrup M. Positron methods for the study of defects in bulk materials //Le Journal de Physique IV. – 1995. – T. 5. – №. C1. – C. C1-93-C1-109.
73. Robles J. M. C., Ogando E., Plazaola F. Positron lifetime calculation for the elements of the periodic table //Journal of Physics: Condensed Matter. – 2007. – T. 19. – №. 17. – C. 176222
74. J.M.C. Robles, E. Ogando, F. Plazaola, Calculation of positron characteristics for elements of the periodic table, J. Phys. Conf. Ser. 265 (2011) 012006. doi:10.1088/1742-6596/265/1/012006.
75. T.E.M. Staab, R. Krause-Rehberg, B. Vetter, B. Kieback, The influence of microstructure on the sintering process in crystalline metal powders investigated by positron lifetime spectroscopy: I. Electrolytic and spherical copper powders, J. Phys. Condens. Matter. 11 (1999) 1757–1786. doi:10.1088/0953-8984/11/7/009.].
76. Sakaki K., Araki H., Shirai Y. Recovery of Hydrogen Induced Defects and Thermal Desorption of Residual Hydrogen in LaNi_5 //Materials Transactions. – 2002. – Vol. 43. – №. 7. – P. 1494-1497
77. Asselli A. A. C., Santos S. F., Huot J. Hydrogen storage in filed magnesium //Journal of Alloys and Compounds. – 2016. – T. 687. – C. 586-594.

78. Liu X. et al. Investigation of the hydrogen states in magnesium alloys and their effects on mechanical properties //Materials & Design. – 2017. – T. 134. – C. 446-454.
79. Zhang J., Yan S., Qu H. Recent progress in magnesium hydride modified through catalysis and nanoconfinement //International Journal of Hydrogen Energy. – 2018. – T. 43. – №. 3. – C. 1545-1565.
80. Afzal M., Mane R., Sharma P. Heat transfer techniques in metal hydride hydrogen storage: a review //International Journal of Hydrogen Energy. – 2017. – T. 42. – №. 52. – C. 30661-30682.
81. Rueda M., Sanz-Moral L. M., Martín Á. Innovative methods to enhance the properties of solid hydrogen storage materials based on hydrides through nanoconfinement: A review //The Journal of Supercritical Fluids. – 2018. – T. 141. – C. 198-217.
82. Marty P. et al. Various tools for optimizing large scale magnesium hydride storage //Journal of Alloys and Compounds. – 2013. – T. 580. – C. S324-S328.
83. Dornheim M. et al. Hydrogen storage in magnesium-based hydrides and hydride composites //Scripta Materialia. – 2007. – T. 56. – №. 10. – C. 841-846.
84. Kim J. H. et al. Hydrogen storage in magnesium based-composite hydride through hydriding combustion synthesis //International Journal of Hydrogen Energy. – 2010. – T. 35. – №. 18. – C. 9641-9645.
85. Liu W. et al. Carbon nanostructures/Mg hybrid materials for hydrogen storage //Diamond and Related Materials. – 2018. – T. 82. – C. 19-24.
86. Edalati K. et al. Design and synthesis of a magnesium alloy for room temperature hydrogen storage //Acta Materialia. – 2018. – T. 149. – C. 88-96.

Приложение А

Введение, глава 1.1 -1.5.1
Обзор литературы

Студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
5ГМ7В	Жаткина Александра Андреевна		

Консультант кафедры ОЭФ :

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОЭФ	Лаптев Р.С	к.т.н., доцент		

Консультант – лингвист кафедры иностраннх языков :

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Токмашев Д.М.	к.фил.н., доцент		

Introduction

The paper investigates the patterns of hydrogen accumulation and structural defects in magnesium after deformation and hydrogenation using of positron spectroscopy.

Hydrogen energy is one of the rapidly developing research areas. Now in view of global warming and other environmental problems, the main attention of the world scientific community is turned to the search for alternative energy sources. The development of hydrogen energy is of particular interest. The use of hydrogen and fuel cells opens a unique way to obtain "safe" energy, the production of which does not affect the climate and increases the efficiency of energy use.

Hydrogen has a low density in a gaseous form, a low liquefaction temperature, a high explosion hazard and a negative effect on the properties of structural materials. The properties of hydrogen pose the need to develop efficient and safe hydrogen storage systems. The most promising candidate for the storage of hydrogen in the form of hydrides is magnesium, which has a high value of hydrogen intensity, the reversible sorption of which is up to 7.6% (mass.) And 101 g / l. Metallic magnesium is a enough affordable and cheap material.

The positron-annihilation spectroscopy (PAS) method is used to investigate the electronic structure of materials. This unique and effective method determines the presence of defects (vacancies, dislocations) in a solid based on the detection of γ -radiation, which give information about the positron lifetime. The PAS includes three methods, one of which was used in the work. It is the method of spectrometry for the lifetime of positrons. It allows to explore the mechanism and dynamics of the occurrence, transformation into other types and the disappearance of defects.

The aim of the work is to study the pattern of accumulation of hydrogen and defects in fine magnesium powder MPF-4 before and after hydrogenation.

To achieve this goal it was necessary to solve the following tasks:

- Sample preparation;

- Calculation of the positron's mean free path and development of a technique positron lifetime spectroscopy in magnesium powder;
- Measurement of positron annihilation parameters in fine magnesium powder MPF-4 before hydrogenation;
- Saturation of hydrogen from the gas environment using the automated Gas Reaction Controller;
- Measurement of the parameters of positron annihilation in fine magnesium powder MPF-4 after hydrogenation;
- Study of positron lifetime spectroscopy in magnesium powder depending on the annealing temperature;
- Determination of the type and concentration of defects in the fine magnesium powder MPF-4 using positron spectroscopy;
- Analysis of the results.

1. Hydrogen storage methods

1.1 History of the developing of hydrogen energy

The use of fossil fuels increasingly leads to environmental pollution and carbon dioxide emissions. In large cities, where the main production facilities are concentrated, an unfavorable ecological situation is taking shape. Concentrations of harmful substances in some cases significantly exceed the permissible rate, which affects the safety for the health and life of people, animals and the environment. Enterprises are taking steps to develop sustainable and clean energy sources.

In the last one decade hydrogen has attracted worldwide interest as an energy carrier. This has generated comprehensive investigations on the technology involved and how to solve the problems of production, storage and applications of hydrogen. The large-scale development of hydrogen energy began in the mid 70s of the 20th century as a natural reaction of human society to the environmental problems. In 1974, the International Association of Hydrogen Energy was established.

Later the concept of hydrogen energy was developed in detail, according to which:

- Hydrogen is obtained from water using non-renewable and renewable sources;
- Hydrogen must be stored and transported;
- Hydrogen is used in industry and transport;
- The use of hydrogen leads to the need to know the problems of reliability of materials and the safety of hydrogen systems.

In 1999 the United States adopted the program of Department of Energy which names «Hydrogen, Fuel Cells and Infrastructure Technologies». In Japan developments are being carried out aimed at creating the infrastructure of hydrogen energy and the widespread introduction of stationary power plants on fuel cells, as well as vehicles operating on hydrogen fuel and fuel cells [10]. Europe is quite actively engaged in the creation of hydrogen projects, the countries of Northern Europe have a

number of interstate and own national hydrogen programs. Development focused on the study of profitable methods of hydrogen production, storage, transportation and creation of autonomous power systems. China ranks second in hydrogen production in the world. Also, Canada, India, Australia, New Zealand, Brazil, and others are active in the development of the concept of hydrogen energy.

Currently, large companies such as General Motors, Ford Motors, BMW are developing projects to create a hydrogen-powered van, and Toyota has already commercialized cars with hybrid engines (a combination of gasoline and hydrogen) [12, 14]. Hydrogen filling stations are being built mainly in North America, Germany, and Japan.

In 2003 in Russia between the Russian Academy of Sciences and Norilsk Nickel a hydrogen energy development program was created. A program has also been introduced for commercial fuel cell power installations. However, in Russia, hydrogen energy is not widely developed. The lack of national programs for the development and production of fuel cells, the lack of targeted state funding of research and development in the field of fuel cells, and the underdevelopment of a particular policy on environmentally friendly resource and energy-saving technologies impede work in Russia on hydrogen energy [20]. Despite significant interest in hydrogen as a clean fuel with zero CO₂ emissions, there are still considerable issues that need to be addressed for the future application of hydrogen as a fuel. Among these issues, the design of new technology to store hydrogen safely, with high volumetric and gravimetric density and without using a heating system is a major challenging task.

1.2 Receiving, using and storing hydrogen

1.2.1. Properties of the use of hydrogen

Hydrogen is the most common element in the Universe and on Earth (the hydrogen content is 1.4 g / kg in the earth's crust) [15]. The main sources of hydrogen in the composition of chemical compounds are water and organic compounds. To extract hydrogen from a bound state, methods are being developed, and at present,

hydrogen production technologies amount to about 50 million tons, of which 68% refers to the production of hydrogen in pure form, the rest is a by-product of other industries [17].

Hydrogen is obtained from natural organic fuels, among which the most developed method is steam reforming of methane. Through the pipe wall with the participation of the catalyst (nickel, corundum, etc.) hydrogen is separated on the surface. The process takes place in tube furnaces to which heat is supplied from the outside at temperature of 750–850 ° C [27]. But at the same time the final product contains impurities, additional purification is required.

Another well-established method for producing hydrogen is electrolysis (electrochemical, thermal, thermochemical, biochemical, photochemical, etc.), as a result of which the final product has high purity, but the energy costs of production are high. Also there are technologies that use alternative energy sources (solar concentrators). Projects that use wind energy or energy from garbage are at the research stage. When using gasification of solid fuel and biomass, the final product obtained requires additional intensive cleaning.

Hydrogen is an effective means of energy conversion and environmentally friendly energy carrier. The most common and effective way to use hydrogen to generate electricity is the development of fuel cells [30]. Advantages consist in higher efficiency factor in comparison with modern thermal power plants, which contribute to saving of fossil fuels, as well as in lower costs in comparison with nuclear fuel splitting and synthesis.

But low density of gaseous hydrogen (at atmospheric pressure and room temperature 1 kg of hydrogen has a volume of 9 m³ [10]), low liquefaction temperature, and high explosion hazard and the negative impact on the properties of structural materials make it necessary to develop efficient and safe hydrogen storage systems. The flame propagation rate of hydrogen is 8 times higher than that of methane, and the ignition energy is 14.5 times lower than methane. Large amounts of hydrogen can be safely stored in pressure vessels and underground storage facilities. However,

methods for the available storage of hydrogen directly in vehicles or as power for portable electronic devices are still being investigated.

1.2.2 Types and features of hydrogen storage

The effectiveness of hydrogen storage systems is estimated by the following characteristics:

1. Mass (gravimetric) capacity. It is defined as the ratio of the mass of stored hydrogen in the system to the mass of the system as a whole;
2. Bulk capacity. It is defined as the ratio of the mass of stored hydrogen in the system to the volume of the entire system as a whole.
3. Storage conditions (pressure and temperature), tightness, sensitivity to moisture and air;
4. Thermodynamic properties. Conditions for the absorption of hydrogen by the accumulator and for the evolution of hydrogen — T (K), P (MPa), the need for a catalyst;
5. Cyclic stability. The number of recharge cycles while maintaining the necessary parameters
6. Quantitative assessment of hydrogen loss in long-term storage;
7. Security. Hydrogen is flammable and explosive;
8. Cost.

The development of hydrogen storage systems must have safety properties, as well as technical and economic efficiency. The US Department of Energy divides hydrogen storage methods into groups [12].

The first group includes physical methods like compressed gas, compression and liquefaction. Gas storage requires the compression of hydrogen. Hydrogen gas in small quantities is stored and transported in steel vessels under pressure up to 20 MPa (Fig. 1). The cylinders themselves are painted in dark green and have the inscription “Hydrogen”. The valve body is made of brass. The mass of hydrogen in this case is higher than 6 mas.% [14]. Large quantities of hydrogen are stored under pressure up to

10 MPa in large gas holders (they are usually made of carbon steel). Wet type gas holders are popular in Russia and abroad due to their simple design and reliability [21]. They are a fixed reservoir that is filled with water. It houses a movable glass bell. At the base of the tank there is a gas channel through which gas is supplied under the bell. As the tank is filled with gas, the bell rises while water prevents gas from escaping from under the bell. With the release of gas, water is a piston to displace gas from moving parts.

Table A.1 – Current requirements for mobile hydrogen storage systems

When it comes to the industrial storage of hydrogen, salt caverns, exhausted oil and gas fields or aquifers can be used as underground stores.

Figure A.1 - Hydrogen storage cylinder [24]

Although being more expensive, cavern storage facilities are most suitable for hydrogen storage. The disadvantages of using gaseous storage are low bulk density and the need for high pressure, provided that hydrogen is an explosive gas.

Liquid hydrogen is in demand today in applications requiring high levels of purity, such as in the chip industry for example. As an energy carrier, LH₂ has a higher energy density than gaseous hydrogen, but it requires liquefaction at $-253\text{ }^{\circ}\text{C}$, which involves a complex technical plant and an extra economic cost. When storing liquid hydrogen, the tanks and storage facilities have to be insulated in order to keep in check the evaporation that occurs if heat is carried over into the stored content, due to conduction, radiation or convection. Tanks for liquid hydrogen are used today primarily in space travel. For cooling and for creating cryogenic systems energy is required, as well as the availability of special materials and technologies. Liquid hydrogen is stored in large quantities in vessels up to 5 thousand m³. These include Dewar vessels. Dewar vessel type CLH, presented in Fig. 2, does not need additional cooling with liquid nitrogen.



Figure A.2 - Dewar vessel type CLH

The second group includes chemical methods which are described by the processes of interaction of hydrogen with the storage material. These include adsorption and absorption methods, storage in a bound state.

In the adsorption method, the storage materials must have a high specific surface area because the interaction of hydrogen with the surface of the adsorbent is carried out by means of van der Waals forces. Such materials include activated carbon, carbon nanotubes, zeolites [30]. The main problem of the method is the rather low binding energy of hydrogen with the surface at a temperature above the temperature of liquid nitrogen.

Materials for the storage of chemically bound hydrogen either contain hydrogen in their composition and secrete it under certain conditions, or are able to generate it when interacting with water. The advantage of storage in ammonia, methanol, ethanol is the high density of the bulk hydrogen content (about 100 kg / m³) [14]. The disadvantage is that with a chemically bound method of storing material, the storage medium is used only once.

An optimum hydrogen-storage material is required to have various properties viz. high hydrogen capacity per unit mass and unit volume which determines the amount of available energy, low dissociation temperature, moderate dissociation pressure, low heat of formation in order to minimize the energy necessary for hydrogen release, low heat dissipation during the exothermic hydride formation, reversibility, limited energy loss during charge and discharge of hydrogen, fast kinetics, high stability against O₂ and moisture for long cycle life, cyclability, low cost of recycling and charging infrastructures and high safety.

In metal hydride storage systems the hydrogen forms interstitial compounds with metals. Here molecular hydrogen is first adsorbed on the metal surface and then incorporated in elemental form (H) into the metallic lattice with heat output and released again with heat input. When choosing a particular hydride the main factor is the cost as well as the percentage of hydrogen in the hydride. The main properties of hydrides are shown in table A.2.

Table A.2 - Properties of some hydrides [20]

Hydride	H ₂ content, wt%	Equilibrium temperature at 0.1 MPa, K	Cost, dollar / kg
Li ↔ LiH	12,7	1070	8,18
Mg ↔ MgH ₂	7,7	560	0,38
Ca ↔ CaH ₂	4,8	1190	2,20
Na ↔ NaH	4,2	800	0,30
Mg ₂ NiH _{0,3} ↔ Mg ₂ NiH ₄	3,2	520	1,00
K ↔ KH	2,5	990	0,35
VH _{0,95} ↔ VH ₂	2,0	285	4,00
FeTiH _{0,1} ↔ FeTiH	0,9	273	1,92

1.2.3 Metal hydride hydrogen storage method

The most promising alternative storage method is the metal hydride method - hydrogen storage in the form of intermetallic compounds and in the form of metal hydrides. In this paper, the metal hydride storage method will be investigated.

Safe and high-density storage of hydrogen is a key issue for development of hydrogen as a clean energy carrier. Hydride-forming materials are potential candidates for safe and high-density storage of hydrogen and among them Mg-based alloys are the most investigated ones due to their high gravimetric capacity.

According to ГОСТ P 54114-2010 [3] the development of mobile devices and systems for hydrogen storage based on metal hydrides is carried out. The metal hydride hydrogen storage container is a body in which a heat exchanger is located to transfer heat from the metal hydride powder, which is released during hydrogen absorption. To increase the speed of the processes of absorption / evolution of hydrogen a cavity is created for filling the powder with a size of no more than 5-6 mm. Porous matrices of high-heat metal, or internal heat exchangers are suitable when the actual size exceeds the specified [31].

In order to realize the safe, efficient and compact hydrogen storage, various solid-state hydrogen storage materials based on the physisorption or chemisorption of hydrogen have been developed over the past decades. Among them, magnesium hydride, MgH_2 , is identified as one of the most promising candidates due to its high hydrogen storage density, low cost and abundance of Mg element. However, the sluggish kinetics and high thermodynamic stability of MgH_2 result in its high operation temperature and low hydrogen sorption rate, impeding its practical application. Its reversible sorption amounts to 7.6 wt% and 101 g / l [32]. The enthalpy of MgH_2 formation, $\Delta H = -74.7$ kJ/mol, which leads to the need for high energy consumption for hydrogen sorption / desorption processes. In opposition, the slow reaction kinetics and high temperatures needed for hydrogen absorption and release have been hindering its practical use. This slow kinetics is especially important during the first absorption (activation) of hydrogen by magnesium. The activation of magnesium normally takes several hours, even days and requires high hydrogen pressures and temperatures above 400C.

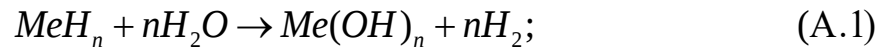
Widespread research has been conducted over the past couple of decades to solve those problems, with significant advancements achieved through mainly focused on improving the H_2 dissociation ability as well as its diffusion inside the Mg matrix. One of the most effective methods is to reduce the Mg grain size to the nanoscale and the addition of transition metals [33].

1.3 Features of the accumulation of hydrogen in magnesium

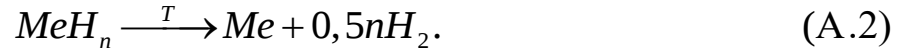
Metallic hydrides consist of metal atoms and hydrogen atoms that are in “traps,” which are lattice defects or vacancies. A trap can be a row defect, which leads to an increase in the lattice voltage, especially if molecular hydrogen is produced in this process [40]. In order to prevent the growth of cracks of large metal particles, use metal in the form of powder.

The reaction of hydrogen evolution from metal hydrides is carried out either by hydrolysis or by dissociation.

Hydrolysis reaction:



Dissociation reaction:



The first method makes it possible to obtain twice as much hydrogen as it is in the hydride, but this process is practically irreversible. Thermal dissociation of hydride allows the creation of hydrogen accumulators: a change in pressure and temperature contributes to a change in the equilibrium reaction of hydrogen evolution [41].

According to the equation of the metal hydride method of hydrogen accumulation the process of hydride formation from hydrogen and metal occurs with the release of heat, and the process of hydrogen release from hydride is endothermic, i.e. heat must be supplied to the hydride. A prerequisite for the latter process is

$$Q_{o.t.} \geq \Delta H, \quad (A.3)$$

where $Q_{o.t.}$ - the heat of hydrogen release from the hydride;

ΔH - hydride formation heat.

For absorption, the reaction is limited by combined steps of physisorption and dissociation of the molecular hydrogen, diffusion through any existing hydride layer and nucleation of the hydride. For desorption, the process consists of nucleation of the metal phase, diffusion of the atomic hydrogen through the metal and hydride and recombination to molecular hydrogen at the surface. The rate-limiting process for desorption is diffusion of the hydrogen through the hydride material.

Uptake of hydrogen gas starts with the adsorption and dissociation of hydrogen molecules on sites on the magnesium surface followed by diffusion and hydride formation. Concerning its mechanism of operation, there are four steps required for hydrogen to be stored in Mg alloys: first, H_2 dissociates on the surface of the Mg alloy. In this step, surface properties such as morphology and surface structures as well as the purity of the Mg alloy are among the factors influencing H_2 dissociation; second, diffusion of the dissociated H atoms in the Mg alloy. In this stage, the microstructures

of Mg including the grain size and grain boundaries represent the most important issues for the diffusion of H atoms inside the metal; third the formation of the hydrogen-containing solid solution inside Mg or α phase. In this stage, microstructure defects such as dislocations and vacancies are necessary aspects to be considered; fourthly, phase transformation takes place between H atoms and Mg to form MgH_2 . It is β -phase. In this stage, catalysts play an important role in the transformation.

Metal hydrogenation begins with the destruction of the oxide film on the metal surface and the penetration of hydrogen molecules into the interior (dissociative chemisorption) [37]. Next is the formation of nuclei of the hydride phase and their growth. With the rapid speed of the initial hydrogenation process a dense hydride surface layer is formed, which leads to a decrease in the rate of hydrogenation (for example, compact metal samples with a size of more than a hundred microns are not able to be fully hydrogenated).

During the hydrogen absorption at low concentrations, a solid solution phase is formed. In this concentration region, the partial hydrogen pressure is clearly dependent on the amount of stored hydrogen. When the hydrogen concentration reaches a certain critical value, the phase transition is initiated and the α phase transforms into the β phase.

So that the hydrogenation process does not stop metal grinding is used - in an atmosphere under control. For example, at the time of grinding magnesium hydride which is 15 minutes in the atmosphere of hydrogen only partial destruction of the oxide film occurs. The grain size is about 1 micron. With an increase in the processing time of the hydride up to several hours the size decreases to 30-50 nm, which contributes to an increase in the rate of hydrogenation.

Also to improve the kinetics of hydrogen sorption additional components are used (for example, Li, Al, Ni), which after grinding are etched by liquid-phase sludge or gas-phase methods. The rate of hydrogen desorption may increase by a factor of 2–3 [43].

The intensity of hydrogenation of metals and alloys is determined by the following factors [44]:

- composition and state of the environment from which hydrogenation occurs;
- condition and shape of the surface of the hydrogenated material;
- chemical composition and structure of the material;
- the presence of stresses and deformations;
- time of hydrogen exposure;
- conditions preventing the desorption of hydrogen.

1.4 Interaction of hydrogen with defects

1.4.1 Types of defects

The presence of defects in metals affects the rates of absorption and distribution of hydrogen in materials. As the magnesium reacts with hydrogen at the solid–gas interface first, the subsequent hydriding requires the diffusion of hydrogen through the magnesium hydride layer which is known to be slow. The poor kinetics limit the rate at which hydrogen can be stored. Additionally, because the reaction is exothermic (storing the hydrogen) or endothermic (releasing the hydrogen), heat transport in the material is an important factor

Geometrically defects are divided into [41]:

- Point defects. They are small in all three dimensions, the dimensions are one or several interatomic distances;
- Line defects. In two dimensions, they are small in size, not exceeding several lattice parameters, while in the third they are characterized by a large extent;
- Surface defects. Dimensions in two dimensions significantly exceed the lattice parameters, in the third – small;
- Bulk defects. They have macroscopic dimensions in three dimensions.

Since hydrogen interacts with point and linear type defects we'll dwell on them in more detail. Point defects include vacancies and internodes. A vacancy is formed

when a certain node in the lattice is not occupied by an atom. The formation of a vacancy leads to the displacement of atoms located near the defect; the crystal lattice becomes tight. Interstices occur when an embedded atom is between the nodes of lattice sites.

The result of the occurrence of point defects are elastic distortions. Vacancy leads to stretching, and the interstitial atom leads to compression. The concentration of point defects increases with increasing temperature. Vacancies are formed on the crystal surface, on the grain boundaries, on the interfaces, and also on dislocations [41].

Dislocations are linear defects. Their occurrence begins with the plastic deformation of crystals, the cause of which can be tangential stresses or mechanical processing. Characterized by a long length of violation accommodation periodicity of nodes in a certain direction, i.e. atoms are shifted relative to their equilibrium position. The extended region of imperfection, which also has the name “dislocation tube” has a cross-sectional diameter of 0.5 - 3 nm. Dislocations can be screw or edge [40].

Under certain conditions, hydrogen absorption may be the cause of the formation of new defects. Point defects formed with a small penetration of the hydrogen ion into the structure of the crystal lattice. With a large number of ion implants small vacancy clusters, dislocations, and dislocation loops formed.

1.4.2 Description of interaction

The basic principle of the movement of hydrogen in a metal under normal conditions is to jump an atom from one position between the lattice nodes to another. The diffusion of hydrogen is determined by the concentration gradient, mechanical stresses and temperature. When hydrogen penetrates into the material, it actively interacts with defects (vacancies, dislocations, own interstitial atoms, grain boundaries) with the subsequent formation of complex complexes consisting of these defects.

When a hydrogen atom interacts with dislocations [45, 48] the type of dislocation and the presence of impurities are important. Hydrogen mobility in a metal depends on the density of dislocations, as well as on the concentration of hydrogen.

The interaction of hydrogen with this type of defect depends on the strain rate, concentration, temperature, and the presence of impurities [46, 47].

Increasing the concentration of vacancies contributes to the accumulation of hydrogen in most metals and alloys. The hydrogen atom occupies the position closest to the defect with a minimum of potential energy instead of localization at its center [49]. The formation of vacancies in an excess amount leads to the formation of microdamages (embryos of nano- and microvoids), which is the initial moment of hydrogen embrittlement.

Hydrogen embrittlement is characterized by the negative effect of hydrogen on the metal, which is manifested in the reduction of its strength and plastic properties. Increases the sensitivity of the material to the presence of cracks in it. Hydrogen embrittlement identification is performed by the value of the Young's modulus, by the values of the ultimate strength and relative elongation to break the part.

There are various ways of detecting defects in the material, among which positron spectroscopy is considered the most promising due to its high sensitivity and determination of the type of defects and their concentration.

1.5 Features of positron annihilation in materials

1.5.1 Physical principles and experimental methods of positron spectroscopy

Positron Annihilation Spectroscopy (PAS) is a well-established high-sensitivity technique for detecting open volume defects in solids. The PAS method helps explore the mechanisms and dynamics of the onset of defects, their transformations and disappearance [36].

Thus PAS is a unique and valuable technique to characterize the vacancy-type defects and open volume defects in solid based on the detection of γ -radiation [21,22], which convey information of the lifetime of positrons. In addition, the correct identification of defects with PAS requires the knowledge of accurate positron lifetimes for the various kinds of defects, which can be provided by first-principles

calculations. Isotopes emitting positrons with a wide energy spectrum (0.2–2) MeV are used [50]. These mainly include ^{22}Na (β^+ , γ), ^{44}Ti (β^+ , γ), ^{68}Ge (β^+ , γ), ^{58}Co (β^+ , γ).

In the annihilation of a positron and an electron the laws of conservation of momentum and energy are appropriate. In the case of two-photon annihilation they have the form [38]:

$$k_1 + k_2 = p = 2mv; \quad (\text{A.4})$$

$$k_1 c + k_2 c = E = 2mc^2. \quad (\text{A.5})$$

where k_1 and k_2 are gamma quantum pulses:

$$m = m_0 / \sqrt{1 - v^2 / c^2}; \quad m_0 - \text{rest mass of positron};$$

E is the energy of an electron-positron pair;

v is the velocity of the center of mass of the electron-positron pair.

Thus, according to equations (A.4) and (A.5), if the velocity of the center of mass of the system is zero, then the photons fly in opposite directions with identical energies equal to 0.511 MeV.

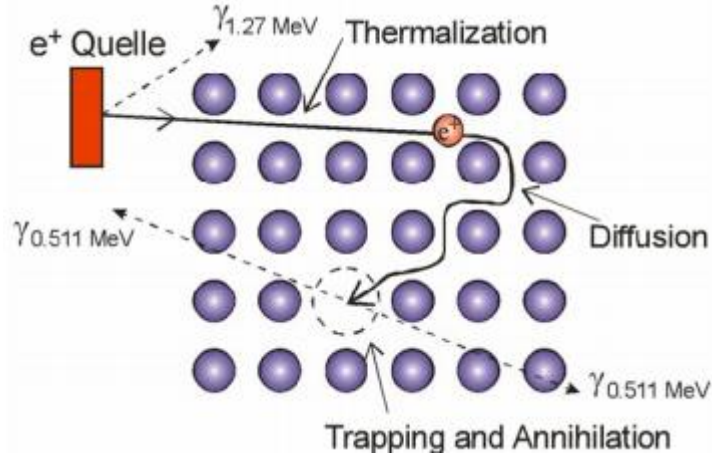


Figure A.3 - Diagram of electron-positron annihilation [70]

When the center of mass move, the angle of gamma-quanta scattering is different from the opposite direction, and the energy has a different value from the steady-state (0.511 MeV) [51].

At non-zero speed of the center of mass the angle of scattering differs from 180 degrees by the angle θ

$$\sin \theta \cong \frac{P_{\perp}}{m_0 c}, \quad (\text{A.6})$$

The Doppler shift ΔE (change in photon energy) is determined by

$$\Delta E \cong \frac{1}{2} P_{\parallel} c, \quad (\text{A.7})$$

The transverse and longitudinal components of the center of mass impulse in formulas (A.6) and (A.7) are perpendicular and parallel directions to the emission of photons, respectively.

The above expressions are the basis for the development of methods for studying the structure of materials [38]:

- Positron annihilation lifetime spectroscopy (PALS);
- Angular correlation of annihilation radiation (ACAR) ($180^\circ \pm \theta$);
- Doppler broadening spectroscopy (DBS) ($0,511 \text{ MeV} \pm \Delta E$).