

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

Школа ИЯТШ
Направление подготовки Физика
Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики ТПУ

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

| Тема работы |
|---|
| Влияние газофазного гидрирования на параметры кристаллической структуры технически чистого титана |

УДК 669.295.094.25.548.4

Студент

| Группа | ФИО | Подпись | Дата |
|--------|----------|---------|------|
| 150Б41 | Чжоу Даи | | |

Руководитель

| Должность | ФИО | Ученая степень, звание | Подпись | Дата |
|-----------|---------------|------------------------|---------|------|
| Ассистент | Сыртанов М.С. | | | |

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

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

По разделу «Социальная ответственность»

| Должность | ФИО | Ученая степень, звание | Подпись | Дата |
|------------|-----------------|------------------------|---------|------|
| Доцент ОКД | Ларионова Е. В. | к.х.н. | | |

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

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

Томск – 2018 г.

Запланированные результаты обучения по программе

| Код результата | Результат обучения (выпускник способен) | Требования ФГОС, критериев и/или заинтересованных сторон |
|---|---|--|
| <i>Общекультурные компетенции</i> | | |
| Р1 | Использовать основные этапы и закономерности исторического развития общества, основы философских, экономических, правовых знаний для формирования мировоззренческой, гражданской позиций и использования в различных сферах жизнедеятельности | Требования ФГОСЗ+ (ОК-1, ОК-2, ОК-3, ОК-4) |
| Р2 | К самоорганизации и самообразованию, работать в коллективе, к коммуникации в устной и письменной формах, в том числе на иностранном языке, толерантно воспринимать социальные, этические и культурные различия, использовать методы и средства физической культуры, приёмы первой помощи и методы защиты в условиях ЧС. | Требования ФГОСЗ+ (ОК-5, ОК-6, ОК-7, ОК-8, ОК-9) |
| <i>Общепрофессиональные компетенции</i> | | |
| Р3 | Использовать в профессиональной деятельности базовые естественнонаучные знания, современные концепции и ограничения естественных наук, использовать фундаментальные знания разделов общей и теоретической физики, математики для создания моделей и решения типовых профессиональных задач, в том числе с использованием знаний профессионального иностранного языка. | Требования ФГОСЗ+ (ОПК-1, ОПК-2, ОПК-3, ОПК-7) |
| Р4 | Понимать сущность и значение информации, соблюдать основные требования информационной безопасности, использовать методы, способы, средства получения и хранения информации, решать стандартные задачи на основе информационной и библиографической культуры. | Требования ФГОСЗ+ (ОПК-4, ОПК-5, ОПК-6) |
| Р5 | Получить организационно-управленческие навыки при работе в научных группах, критически переосмысливать накопленный опыт, изменять при необходимости профиль своей профессиональной деятельности, нести ответственность за последствия своей инженерной деятельности. | Требования ФГОСЗ+ (ОПК-8, ОПК-9) |
| <i>Профессиональные компетенции</i> | | |
| Р6 | <u>Научно-исследовательская деятельность</u> Проводить научные теоретические и экспериментальные исследования в областях: материаловедения, атомной и ядерной физики, водородной энергетики, физики плазмы с помощью современной приборной базы с использованием специализированных знаний физики и освоенных профильных дисциплин. | Требования ФГОСЗ+ (ПК-1, ПК-2) |

| | | |
|-----------|--|--------------------------------------|
| Р7 | <u>Научно-инновационная деятельность</u> Применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований, а также профессиональные знания и умения в результате освоения профильных дисциплин для проведения физических исследований в инновационных областях науки, используя современные методы обработки, анализа и синтеза информации. | Требования ФГОСЗ+ (ПК-3, ПК-4, ПК-5) |
| Р8 | <u>Организационно-управленческая</u> Использовать на практике теоретические основы организации и планирования физических исследований, участвовать в подготовке и составлении научной документации по установленной форме, понимать и применять на практике методы управления в сфере природопользования | Требования ФГОСЗ+ (ПК-6, ПК-7, ПК-8) |
| Р9 | <u>Педагогически-просветительская</u> Проектировать, организовывать, анализировать педагогическую деятельность, владеть последовательностью изложения материала с использованием междисциплинарных связей физики с другими дисциплинами, участвовать в информационно-образовательных мероприятиях по пропаганде и распространению научных знаний | Требования ФГОСЗ+ (ПК-9) |

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

Школа ИЯТШ
Направление подготовки (специальность) Физика
Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики ТПУ

УТВЕРЖДАЮ:
Руководитель

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

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

| |
|---------------------|
| Бакалаврской работы |
|---------------------|

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

Студенту:

| Группа | ФИО |
|--------|----------|
| 150Б41 | Чжоу Даи |

Тема работы:

| | |
|---|--|
| Влияние газофазного гидрирования на параметры кристаллической структуры технически чистого титана | |
| Утверждена приказом директора (дата, номер) | |

Срок сдачи студентом выполненной работы:

| | |
|--|--|
| | |
|--|--|

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

| | |
|---|--|
| <p>Исходные данные к работе</p> <p><i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i></p> | Объектом исследования является параметры кристаллической структуры технически чистого титана марки ВТ1-0 после газофазного гидрирования. |
|---|--|

| | |
|--|---|
| <p>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</p> <p><i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i></p> | <p>Провести анализ литературных данных.</p> <ul style="list-style-type: none"> - Экспериментальное исследование влияния водорода на структурно-фазовое состояние ВТ1-0. - Разработка модели поведения водорода в технически чистом титане в зависимости от концентрации. - Выявление корреляции между теоретическим расчетом и экспериментальными данными. - Социальная ответственность; - Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение; - Заключение. |
|--|---|

| | |
|---|---------------------------|
| <p>Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы</p> <p><i>(с указанием разделов)</i></p> | |
| <p>Раздел</p> | <p>Консультант</p> |
| <p>Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение</p> | <p>Черепанова Н.В.</p> |
| <p>Социальная ответственность</p> | <p>Ларионова Е. В.</p> |

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

Задание выдал руководитель:

| Должность | ФИО | Ученая степень, звание | Подпись | Дата |
|------------------|--------------|------------------------|---------|------|
| Ассистент ОФ ФТИ | Сыртанов М.С | | | |

Задание принял к исполнению студент:

| Группа | ФИО | Подпись | Дата |
|--------|----------|---------|------|
| 150Б41 | Чжоу Даи | | |

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

Студенту:

| | |
|---------------|------------|
| Группа | ФИО |
| 150Б41 | Чжоу Даи |

| | | | |
|----------------------------|-------------|----------------------------------|---------------------------------|
| Школа | ИЯТШ | Отделение | Экспериментальной физики |
| Уровень образования | Бакалавр | Направление/специальность | Физика |

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

| | |
|---|--|
| <ol style="list-style-type: none"> 1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических; энергетических; финансовых; информационных; человеческих; 2. Нормы и нормативы расходования ресурсов; 3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования. | <p>Определение стоимости ресурсов научного исследования (НТИ): материально-технических, энергетических, финансовых информационных и человеческих (373839.6 руб)</p> <p>Знакомство и отбор норм и нормативов расходования ресурсов</p> <p>Коэффициент, учитывающий накладные расходы 16%,</p> <p>Отчисления во внебюджетные фонды - 30%</p> |
|---|--|

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

| | |
|---|--|
| <ol style="list-style-type: none"> 1. Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения 2. Планирование научно-исследовательских работ 3. Составление бюджета внедрения инженерного | <ol style="list-style-type: none"> 1. Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ 2. Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет. 3. Определение ресурсной, финансовой, экономической составляющей |
|---|--|

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

| |
|---|
| <ol style="list-style-type: none"> 1. Оценка конкурентоспособности технических решений 2. График проведения и бюджет НТИ 3. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НТИ |
|---|

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

Задание выдал консультант:

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

Задание принял к исполнению студент:

| Группа | ФИО | Подпись | Дата |
|---------------|------------|----------------|-------------|
| 150Б41 | Чжоу Дай | | |

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

| | |
|---------------|------------|
| Группа | ФИО |
| 150Б41 | Чжоу Даи |

| | | | |
|----------------------------|-------------|----------------------------------|---------------------------------|
| Школа | ИЯТШ | Отделение | Экспериментальной физики |
| Уровень образования | Бакалавр | Направление/специальность | Физика |

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

| | |
|---|---|
| <p>1. <i>Описание рабочего места (рабочей зоны, технологического процесса, механического оборудования) на предмет возникновения:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> – <i>вредных проявлений факторов производственной среды (метеословия, вредные вещества, шумы, вибрации, электромагнитные поля, ионизирующие излучения)</i> – <i>опасных проявлений факторов производственной среды (механической природы, термического характера, электрической, пожарной и взрывной природы)</i> – <i>негативного воздействия на окружающую природную среду (атмосферу, гидросферу, литосферу)</i> – <i>чрезвычайных ситуаций (техногенного, стихийного, экологического и социального характера)</i> | <p>При работе на «Радуга-спектр» на работников возможно воздействие следующих вредных факторов:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Микроклимат; 2. Производственный шум 3. Электромагнитные излучения |
| <p>2. <i>Знакомство и отбор законодательных и нормативных документов по теме</i></p> | <p>По данной теме рассматриваются законодательный и нормативные документы:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Инструкция № 2-25 по охране труда при выполнении работ на установке Gas Reaction Controller; 2. Инструкция № 2-14 по охране труда при работе с электрооборудованием напряжением до 1000 В; 3. Инструкция № 2-07 по охране труда при работе с баллонами, работающими под давлением. 4. СП 2.6.1.758–99. Нормы радиационной безопасности. 5. ГОСТ 12.1.006–84 ССБТ. Электромагнитные поля радиочастот. Общие требования безопасности. 6. Микроклимат: 7. <input type="checkbox"/>ГОСТ 30494-96 Здания жилые и |

| | |
|--|---|
| | <p>общественные помещения. Параметры микроклимата в помещении;</p> <p>8. □ГОСТ 12.1.005 Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны;</p> <p>9. □СанПиН 2.2.4.548-96 Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.</p> <p>Методы измерений и оценки эргономических параметров и параметров безопасности.</p> |
| Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке: | |
| <p>1. Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности:</p> <ul style="list-style-type: none"> – физико-химическая природа вредности, её связь с разрабатываемой темой; – действие фактора на организм человека; – приведение допустимых норм с необходимой размерностью (со ссылкой на соответствующий нормативно-технический документ); – предлагаемые средства защиты (сначала коллективной защиты, затем – индивидуальные защитные средства) | <p>Характеристика факторов изучаемой производственной среды, описывающих процесс взаимодействия человека с окружающей производственной средой:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Загрязнение окружающей среды, вызванное утечкой электромагнитного излучения; 2. Загрязнение окружающей среды от экспериментальных отходов 3. Взрыв, вызванный высокими температурами |
| <p>2. Анализ выявленных опасных факторов проектируемой произведённой среды в следующей последовательности</p> <ul style="list-style-type: none"> – механические опасности (источники, средства защиты); – термические опасности (источники, средства защиты); – радиационная безопасность; – пожаровзрывобезопасность (причины, профилактические мероприятия, первичные средства пожаротушения) | <p>2. Анализ опасных факторов проектируемой производственной среды:</p> <ul style="list-style-type: none"> – Радиационная безопасность; – пожаровзрывобезопасность (соблюдение правил безопасности и эксплуатации установки). |
| <p>3. Охрана окружающей среды:</p> <ul style="list-style-type: none"> – защита селитебной зоны – анализ воздействия объекта на атмосферу (выбросы); – анализ воздействия объекта на гидросферу (сбросы); – анализ воздействия объекта на литосферу (отходы); – разработать решения по обеспечению экологической безопасности со ссылками на НТД по охране окружающей среды. | <p>3. Охрана окружающей среды:</p> <ul style="list-style-type: none"> – Утилизация металлических отходов – Защита от электромагнитного излучения |
| <p>4. Защита в чрезвычайных ситуациях:</p> <ul style="list-style-type: none"> – перечень возможных ЧС на объекте; – выбор наиболее типичной ЧС; – разработка превентивных мер по предупреждению ЧС; – разработка мер по повышению устойчивости объекта к данной ЧС; – разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий | <p>4. Защита в чрезвычайных ситуациях:</p> <ul style="list-style-type: none"> – Повышение устойчивости системы электроснабжения; – Обеспечение устойчивости теплоснабжения за счет запасных автономных источников теплоснабжения, кольцевания системы, заглубления теплотрасс.; – Обеспечение устойчивости систем водоснабжения; – Обеспечение устойчивости системы водоотведения. – Создание маршруты аварийного эвакуации и разработать планы аварийного |

| | |
|---|--|
| | спасения. |
| <p>5. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:</p> <ul style="list-style-type: none"> – специальные (характерные для проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны | 5. Правовые вопросы обеспечения безопасности |
| Перечень графического материала: | |
| <p>При необходимости представить эскизные графические материалы к расчётному заданию (обязательно для специалистов и магистров)</p> | План эвакуации людей |

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

Задание выдал консультант:

| Должность | ФИО | Ученая степень, звание | Подпись | Дата |
|------------|-----------------|------------------------|---------|------|
| Доцент ОКД | Ларионова Е. В. | к.х.н. | | |

Задание принял к исполнению студент:

| Группа | ФИО | Подпись | Дата |
|--------|----------|---------|------|
| 150Б41 | Чжоу Даи | | |

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

Школа ИЯТШ
Направление подготовки (специальность) Физика
Уровень образования Бакалавр
Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики ТПУ
Период выполнения (осенний / весенний семестр 2017/2018 учебного года)

Форма представления работы:

| |
|---------------------|
| Бакалаврская работа |
|---------------------|

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

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

| | |
|--|--|
| Срок сдачи студентом выполненной работы: | |
|--|--|

| Дата контроля | Название раздела (модуля) / вид работы (исследования) | Максимальный балл раздела (модуля) |
|---------------|--|------------------------------------|
| 01.03.2017 | Аналитический обзор литературы | 15 |
| 01.09.2017 | Экспериментальное исследование влияния водорода на структурно-фазовое состояние ВТ1-0 | 15 |
| 30.12.2017 | Разработка модели поведения водорода в технически чистом титане в зависимости от концентрации. | 20 |
| 30.04.2018 | Выявление корреляции между теоретическим расчетом и экспериментальными данными. | 15 |
| 25.05.2018 | Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение | 15 |
| 25.05.2018 | Социальная ответственность | 15 |
| 25.05.2018 | Заключение | 5 |

Составил преподаватель:

| Должность | ФИО | Ученая степень, звание | Подпись | Дата |
|-----------|--------------|------------------------|---------|------|
| Ассистент | Сыртанов М.С | | | |

СОГЛАСОВАНО:

| Руководитель ООП | ФИО | Ученая степень, звание | Подпись | Дата |
|------------------|------------|------------------------|---------|------|
| Руководитель ОЭФ | Лидер А.М. | д.т.н. | | |

ОПРЕДЕЛЕНИЯ

В данной работе используются такие понятия как:

Водород – первый элемент периодической системы элементов; обозначается символом Н.

Титан –элемент находится в побочной подгруппе четвертой группы, четвертого периода, с атомным номером 22.

Гидрид – соединения водорода с металлами и с имеющими меньшую электроотрицательность, чем водород, неметаллами. Иногда к гидридам причисляют соединения всех элементов с водородом.

Наводороживание – поглощение металлом водорода из газовой фазы либо в процессе коррозии.

Водородное охрупчивание – процесс охрупчивания и разрушения некоторых металлов вследствие воздействия атомарного водорода.

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 80 с., 13 рисунков, 15 таблиц, 35 литературных источника, 0 приложений.

Ключевые слова: водород, проницаемость водорода, технически чистый титан ВТ1-0, водородное охрупчивание, параметры решетки, механические свойства, метод рентгеновской дифракции, метод молекулярной динамики.

Объектом исследования являются параметры кристаллической структуры технически чистого титана марки ВТ1-0 после газофазного гидрирования.

Цель работы – исследование влияния концентрации водорода на структурно-фазовые превращения в технически чистом титане ВТ1-0.

В процессе исследования проводилась подготовка образцов технически чистого титана ВТ1-0, исследовались свойства титана и титанового сплава, проводилось насыщение водородом из газовой среды экспериментальных образцов и исследовалось влияние концентрации водорода на структурно-фазовые превращения в технически чистом титане ВТ1-0 методами рентгеновской дифрактометрии.

В первой главе описаны общие сведения взаимодействия водорода с металлами, такие как проникновение и состояние водорода в металлах. Описано взаимодействие водорода с титаном, влияние водорода на физико-механические свойства.

Во второй главе представлены экспериментальные установки: установка автоматизированного комплекса GRC для насыщения водородом из газовой среды и рентгеновский дифрактометр XRD-7000.

В третьей главе представлен метод молекулярной динамики и основные команды программы LAMMPS.

В четвертой главе представлены результаты исследования влияния концентрации водорода на структурно-фазовые превращения в технически чистом титане ВТ1-0. Показана корреляция между теоретическим расчетом и экспериментальными данными

СОДЕРЖАНИЕ

| | |
|--|----|
| ВВЕДЕНИЕ..... | 17 |
| 1 Водород в титане и титановых сплавах | 18 |
| 1.1 Система титан-водород..... | 18 |
| 1.1.1 Взаимодействие водорода с титаном | 19 |
| 1.1.2. Водородное охрупчивание | 21 |
| 1.1.3 Водородное охрупчивание титана..... | 22 |
| 1.2 Система металл-водород | 24 |
| 1.3 Влияние водорода на структурно-фазовое состояние титана и титановых сплавов..... | 25 |
| 1.4 Поглощение водорода титаном | 30 |
| 2 Материал и методы исследований | 33 |
| 2.1 Материал исследования..... | 33 |
| 2.2 Автоматизированный комплекс GRC | 33 |
| 2.3 Рентгеноструктурный анализ..... | 34 |
| 3 Метод молекулярной динамики | 37 |
| 3.1 Основы метода молекулярной динамики | 37 |
| 3.2 Определение программы LAMMPS | 38 |
| 3.3 Основные команды для создания атомов | 38 |
| 3.4 Основные команды для задания потенциала | 39 |
| pair_coeff..... | 40 |
| 3.5 Основные команды для задать вывод на экран информации | 40 |
| 3.6 Основные команды для задания условий при которых идет процесс(температура, давление)..... | 41 |
| 4 Экспериментальные результаты..... | 42 |
| 4.1 Подготовка образцов | 42 |
| 4.2 Моделирование системы водород-титан | 43 |
| 4.3 Определение структурных параметров методом рентгеновской дифракции | 46 |
| 5 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение... | 51 |

| | |
|---|----|
| 5.1 Потенциальные потребители результатов исследования | 51 |
| 5.2 Структура работ в рамках научного исследования | 52 |
| 5.3 Определение трудоемкости выполнения работ | 53 |
| 5.4 Построение графика работ | 57 |
| 5.5 Расчет материальных затрат научно-технического исследования | 58 |
| 5.5.1 Расчет затрат на прибора для научных работа..... | 59 |
| 5.5.2 Основная и дополнительная заработная плата исполнителей темы..... | 59 |
| 5.5.3 Отчисления во внебюджетные фонды | 60 |
| 5.5.4 Накладные расходы..... | 61 |
| 5.6. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, социальной и экономической эффективности исследования..... | 62 |
| 6. Социальная ответственность | 64 |
| 6.1 Производственная безопасность..... | 64 |
| 6.1.1 Анализ вредных и опасных факторов, которые может создать объект исследования и возникнуть в лаборатории. | 64 |
| 6.1.2 Обоснование мероприятий по защите исследователя от действия опасных и вредных факторов..... | 66 |
| 6.2 Экологическая безопасность..... | 69 |
| 6.2.1 Анализ влияния объекта и процесса исследования на окружающую среду. | 69 |
| 6.2.2 Обоснование мероприятий по защите окружающей среды. | 70 |
| 6.3 Безопасность в чрезвычайных ситуациях..... | 71 |
| 6.3.1 Анализ вероятных ЧС, которые может возникнуть в лаборатории и инициировать объект исследований. | 71 |
| 6.3.2 Обоснование мероприятий по предотвращению ЧС и разработка порядка действия в случае возникновения ЧС. | 72 |
| 6.4 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности. | 74 |
| 6.4.1 Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя) правовые нормы трудового законодательства. | 74 |

| | |
|---|----|
| 6.4.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя. | 75 |
| Заключение | 76 |
| СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ..... | 77 |

ВВЕДЕНИЕ

Титан и титановые сплавы находят основное применение в военной сфере промышленности, особенно в авиации и ракетной технике, где большое значение имеет уменьшение веса. Использование титана для невоенных целей основывается на его высокой коррозионной устойчивости, и хотя объем его потребления в этой области остается незначительным по сравнению с военной, спрос на него в качестве устойчивого к коррозии материала непрерывно увеличивается [1].

Титан является важнейшим конструкционным материалом, но водородное охрупчивание оказывает большое влияние на свойства титана и титановых сплавов. В процессе эксплуатации титановых сплавов в водородосодержащих средах в них проникает водород, способный существенно изменить структуру материала, что приводит к ранней деградации механических свойств и последующему разрушению. Поэтому, эффективное решение проблемы водородного охрупчивания приобретает большое значение для промышленного развития. Для понимания механизма деградации необходимо комплексное исследование (моделирование и экспериментальные данные) изменения структуры титановых сплавов под действием водорода.

Целью данной работы являлось исследование влияния концентрации водорода на структурно-фазовые превращения в технически чистом титане ВТ1-0.

Для решения поставленной цели необходимо было решить следующие задачи:

1. Экспериментальное исследование влияния водорода на структурно-фазовое состояние ВТ1-0.
2. Разработка модели поведения водорода в технически чистом титане в зависимости от концентрации.

3. Выявление корреляции между теоретическим расчетом и экспериментальными данными.

1 Водород в титане и титановых сплавах

1.1 Система титан-водород

Титан находится в побочной подгруппе четвертой группы, четвертого периода, с атомным номером 22. Это серебристо-белый переходный металл, который обладает легким весом, высокой прочностью, имеет металлический блеск и высокую коррозионную стойкость. Плотность титана варьируется в диапазоне 4.506-4.516 г/см³ (при температуре 20 °С), температура плавления (1668±3) °С, температура кипения (3260±20) °С, критическое давление 1130 атмосфер [2]. Титан обладает пластичностью. Наличие примесей в титановых сплавах оказывает большое влияние на механические свойства, в частности примесей (кислорода, азота, углерода).

Титан существует в двух кристаллических модификациях: α -титан с гексагональной решеткой и β -титан с кубической объемно-центрированной упаковкой (рисунок 1). Температура перехода α модификации в β составляет 882.5 °С.

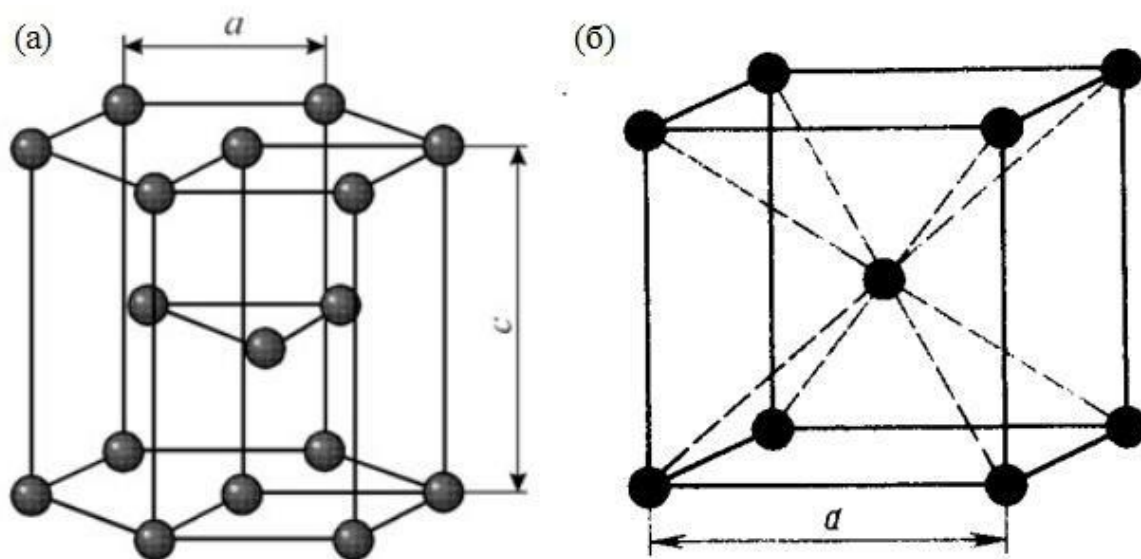


Рисунок 1 – Кристаллические фазы титана: α -титан с гексагональной решеткой (а) и β -титан с кубической объемно-центрированной упаковкой (б).

В системе титан-водород взаимодействие водорода с металлом усложняется образованием гидридной фазы, и наличием аллотропического превращения в металлическом титане (α -фазы и β -фазы). Это низкотемпературные и высокотемпературные аллотропические формы металлического титана. Гидрид титана называют γ -фазой, представляющий собой фазу внедрения переменного состава.

1.1.1 Взаимодействие водорода с титаном

В объемно-центрированной решетке (ОЦК) металлов водород должен находиться в тетраэдрических междуузлиях. В гранецентрированной кубической (ГЦК) и гексагональной плотноупакованной (ГПУ) решетках водород занимает октаэдрические позиции. Это корректно только для чистых металлов при малом содержании водорода в материале. На рисунке 2 и 3 представлена тетрагональные пустоты и октаэдрические пустоты в гексагональной решетке и кубической объемно-центрированной решетке.

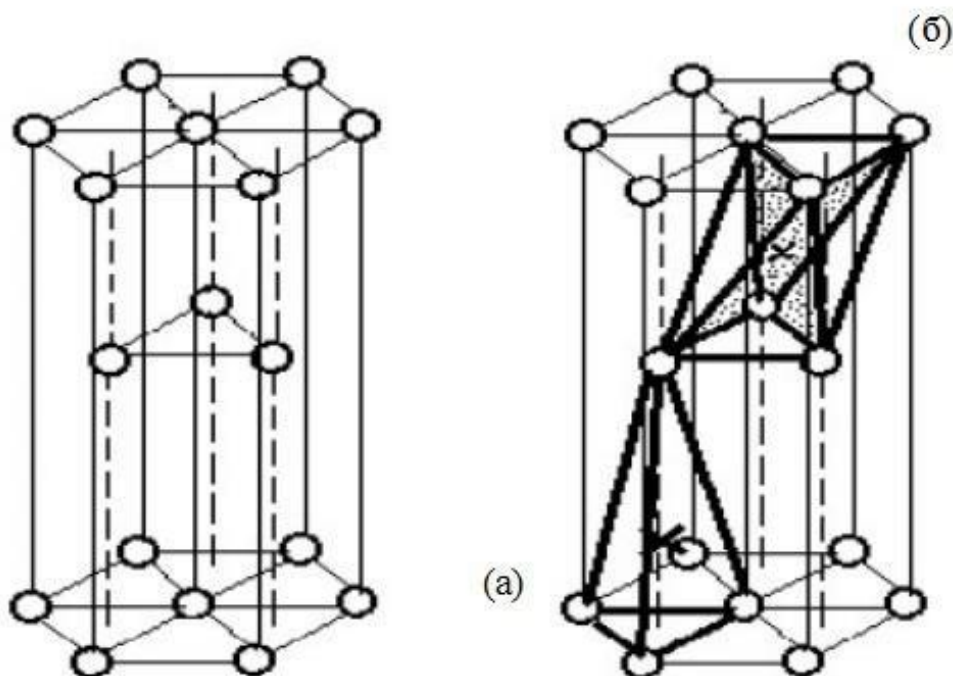


Рисунок 2 –Тетрагональные (а) и октаэдрические (б) пустоты в гексагональной решетке

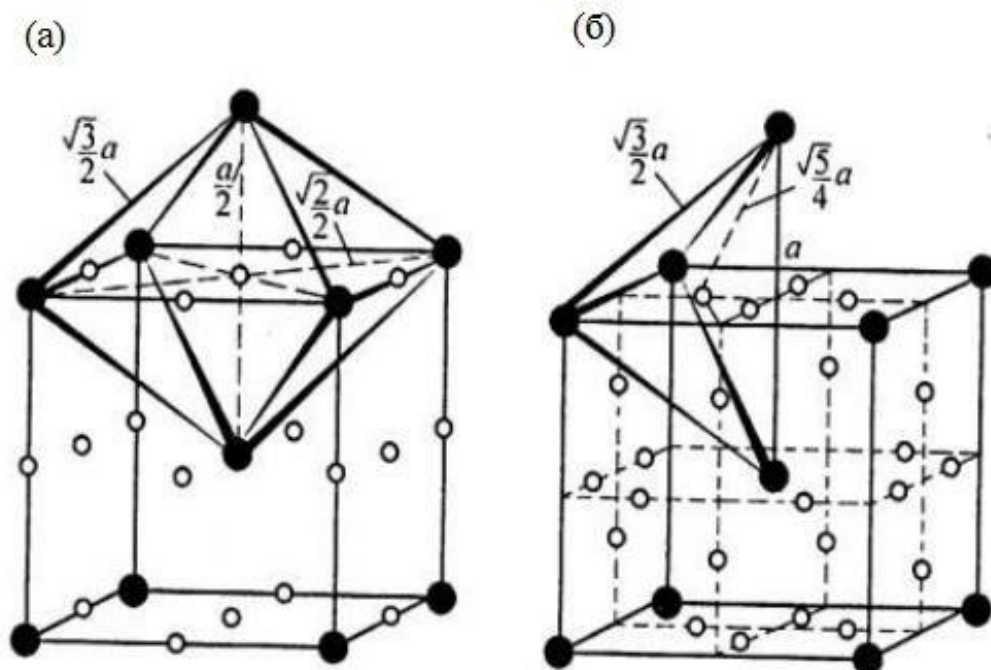


Рисунок 3 – Октаэдрические (а) и тетрагональные (б) пустоты в кубической объемно-центрированной решетке

Водород способен растворяться в Fe, Ni, Mo и других металлах. Процесс растворения водорода в указанных металлах является эндотермической реакцией, и, следовательно, имеет низкую растворимость. При растворении водорода в титане характер реакции экзотермический[3].

Растворимость водорода в металлах зависит от давления и может быть найдена из следующего выражения[4]:

$$CH = A \times P^{\frac{1}{2}} \times \exp(-\Delta E/RT)$$

где A является постоянной; P – давление водорода; ΔE является изменении энергии водорода из газообразного до твердом растворе. Отсюда можно сделать вывод о том, что увеличение давления водорода приводит росту количества водорода, находящегося в материале в виде твердого раствора.

1.1.2. Водородное охрупчивание

Водород может оказывать прямое воздействие на материал, разрушая его механические свойства; этот эффект называют " водородное охрупчивание ". Водородное охрупчивание оказывает негативное влияние на четыре основные отрасли использующие водород: производство, транспортировка, хранение и использование [5].

Водородное охрупчивание имеет 3 вида:

1. Внутреннее водородное охрупчивание. Имеет место, когда водород входит в металл в процессе его обработки. В процессе участвует 0,1-10 ppm водорода. Эффект наблюдается в интервале температур от 173 до 373 К, который является близким к комнатной температуре.

2. Внешнее водородное охрупчивание. Происходит, когда материал находится в атмосфере водорода. Поглощенный водород изменяет механические характеристики материала без формирования гидридной фазы. В данном случае водород находится в материале в виде твёрдого раствора. Эффект сильно зависит от напряжения в материале. Он также увеличивается при температуре близкой к комнатной.

3. Водородное охрупчивание с образованием гидридных фаз. Это явление, в котором водород вступает в химическую реакцию с составной частью металла, чтобы сформировать новый микроструктурных элемент (образование пузырей газообразного метана в результате реакции с углеродом) или фазы (гидрид) [6].

Случай образования гидридов представляет собой иную природу и для титановых сплавов является типичным. Микроструктура этих сплавов состоит, как правило, из двух фаз (α и β) с различной растворимостью по водороду и разными коэффициентами диффузии. Водород проникает в сплав в основном через границы зерен. Увеличение концентрации водорода приводит к образованию гидридов. Растворимость водорода в β фазе выше, чем в α .

1.1.3 Водородное охрупчивание титана

Сплавы на основе титана обеспечивают превосходную комбинацию высокопрочного соотношения и хорошей коррозионной стойкости, что делает эти сплавы наиболее важными передовыми материалами для различных аэрокосмических, морских, промышленных и коммерческих применений. Хотя титан считается достаточно устойчивым к химическому воздействию, могут возникнуть серьезные проблемы, когда сплавы на основе титана вступают в контакт с водородосодержащими средами, где они могут собирать большие количества водорода, особенно при повышенных температурах. Тяжесть и степень взаимодействия водорода с сплавами на основе титана непосредственно связаны с микроструктурой и составом титановых сплавов. Водородное повреждение титана и его сплавов проявляется в потере пластичности (охрупчивании) и / или снижении порога интенсивности напряжений при распространении трещин [7].

Коммерчески чистый титан очень устойчив к водородному охрупчиванию, тестировались мелкозернистые образцы при низких и средних скоростях деформации при испытаниях на одноосное растяжение. Однако он становится восприимчивым к водородному охрупчиванию в присутствии шероховатостей (зазубрин) при низких температурах или высоких скоростях деформации или больших размерах зерен [8].

В сплавах, близких к альфа и сплавах альфа + бета, основным механизмом водородного охрупчивания часто предполагается как результат осаждения и разложения хрупких гидридных фаз. При более низких температурах гидрид титана становится хрупким, что приводит к деградации механических свойств и увеличению ломкости этих сплавов. Титановые сплавы, микроструктуры которых содержат в основном α -фазу при воздействии внешней водородной среды при комнатной температуре, будут деградировать в основном за счет повторного образования и разрыва хрупкой гидридной фазы на границе раздела газ-металл или вблизи нее. Когда присутствует только α -фаза, деградация нечувствительна к внешнему

давлению водорода, поскольку образование гидрида в α -фазе может происходить практически при любом допустимом парциальном давлении водорода. При малой интенсивности напряжений трещины распространяются путем повторного образования и разрушения гидридов. При высокой интенсивности напряжений переход в режим разрушения происходил тогда, когда скорость распространения трещины превышала скорость, с которой гидрид мог образовываться перед трещиной, и отвечающим за механизм растрескивания являлась повышенная водородом локализованная пластичность.

В альфа + бета-сплавах, когда присутствует значительное количество β -фазы, водород может быть предпочтительно транспортирован внутри β -решетки и будет реагировать с α -фазой вдоль границ α / β . В этих условиях деградация, как правило, будет более значительной со степенью деградации, отражающей зависимость давления водорода от транспортировки водорода в β -фазе.

Поскольку бета-титановые сплавы обладают очень высокой растворимостью в водороде и не могут легко образовывать гидриды, до недавнего времени они считались достаточно устойчивыми к водороду, за исключением, возможно, при очень высоких давлениях водорода. Однако, недавние исследования показали, что эти сплавы могут быть сильно разрушаться (деградировать) под воздействием водорода. Например, было обнаружено водородное охрупчивание в сплавах Ti-Mo-Nb-Al, Ti-V-Cr-Al-Sn и Ti-V-Fe-Al, что значительно ниже концентрации водорода, необходимой для гидрирования β -фазы. Наиболее очевидной деградацией является образование δ -гидридной фазы, которая является хрупкой при низких температурах, аналогичной той, которая в основном в α -сплавах, за исключением того, что для этого требуется более высокое давление водорода. Кроме того, поскольку водород является сильным β -стабилизатором, α -фаза, присутствующая в этих β -сплавах, может быть преобразована в β -фазу с воздействием водорода при повышенных температурах. Поэтому, поскольку

в большинстве β -сплавов первичным механизмом упрочнения является наличие осадочной игольчатой α -фазы, их прочность будет снижаться, при поглощении водорода при повышенных температурах. Наконец, было замечено, что водород в твердом растворе в β -решетке, значительно ниже ожидаемого предела конечной растворимости для образования гидрида, может иметь существенное влияние на переход от пластичной до хрупкой фракции объемно-центрированной кубической структуры β сплавов [9].

1.2 Система металл-водород

Взаимодействия водорода и металла в зависимости от температуры делятся на два вида: эндотермическое и экзотермическое. При эндотермической реакции растворимость водорода увеличивается с ростом температуры. В случае экзотермической реакции сначала образуют твердый раствор, затем металлический гидрид. Поэтому в экзотермической реакции, количество запасенного водорода в металле, будет больше, чем растворимость водорода [10].

Водород в металлах может находиться в различных состояниях: в форме гидридов; в растворенном состоянии; захватываться дефектами; входить в состав гидроокиси $Me(OH)_n$ или воды адсорбированной поверхностью.

Атомы водорода могут растворяться в стали и диффундировать в ее решетке. Однако, молекулы водорода не растворяются, потому что размеры молекул больше размера атомов. После диффузии атомов водорода в сталь, они объединяются в молекулы водорода в решетки стали, после чего система будет продолжать поглощать атом водорода. Эти процессы влияют на скорость растворимости и диффузию водорода [11].

Водород может оказывать воздействие на механические свойства нержавеющей стали. Причиной изменения таких свойств может быть мартенситное превращения. Микротрещины часто образуются вдоль мартенсита, вызывая соответствующее потери пластичности.

1.3 Влияние водорода на структурно-фазовое состояние титана и титановых сплавов

Водорода хорошо растворим в титане. Водород, присутствующий в титане, находится в состоянии динамического равновесия между ионизированным атомом или атомами протона и водорода в междоузельном участке. Кристаллическая решетка α -титана имеет два типа пустот: тетрагональные пустоты с радиусом 0.34\AA и октаэдрические пустоты с радиусом 0.62\AA [12]. Радиус атомов водорода равен 0.41\AA , поэтому они могут размещаться лишь в октаэдрических пустотах. В объемно-центрированной решетке β -модификации титана пустоты с радиусом 0.44\AA почти точно соответствуют атомному радиусу водорода, поэтому водород лучше растворяется в β фазе титана стабилизируя ее.

Водородное охрупчивание титана связано с уменьшением растворимости водорода в титановых сплавах вблизи комнатной температуры. Поэтому влияние водорода может быть аппроксимировано, если известна растворимость водорода в титановых сплавах. Это особенно справедливо для альфа-сплавов, поскольку спонтанное образование гидридов происходит, когда концентрация водорода в металле превышает растворимость. Здесь следует отметить, что для титана и других металлов экзотермического окклюзионного типа существует разница между растворимостью водорода и общим количеством водорода, поглощаемого металлом. Поскольку одной из основных характеристик экзотермических окклюдеров является образование гидрида, и можно представить условия равновесия этого типа металл-водородную систему на диаграмма состояния системы металл-водорода, Затем их можно использовать для описания разницы между двумя вышеупомянутых величин [13].

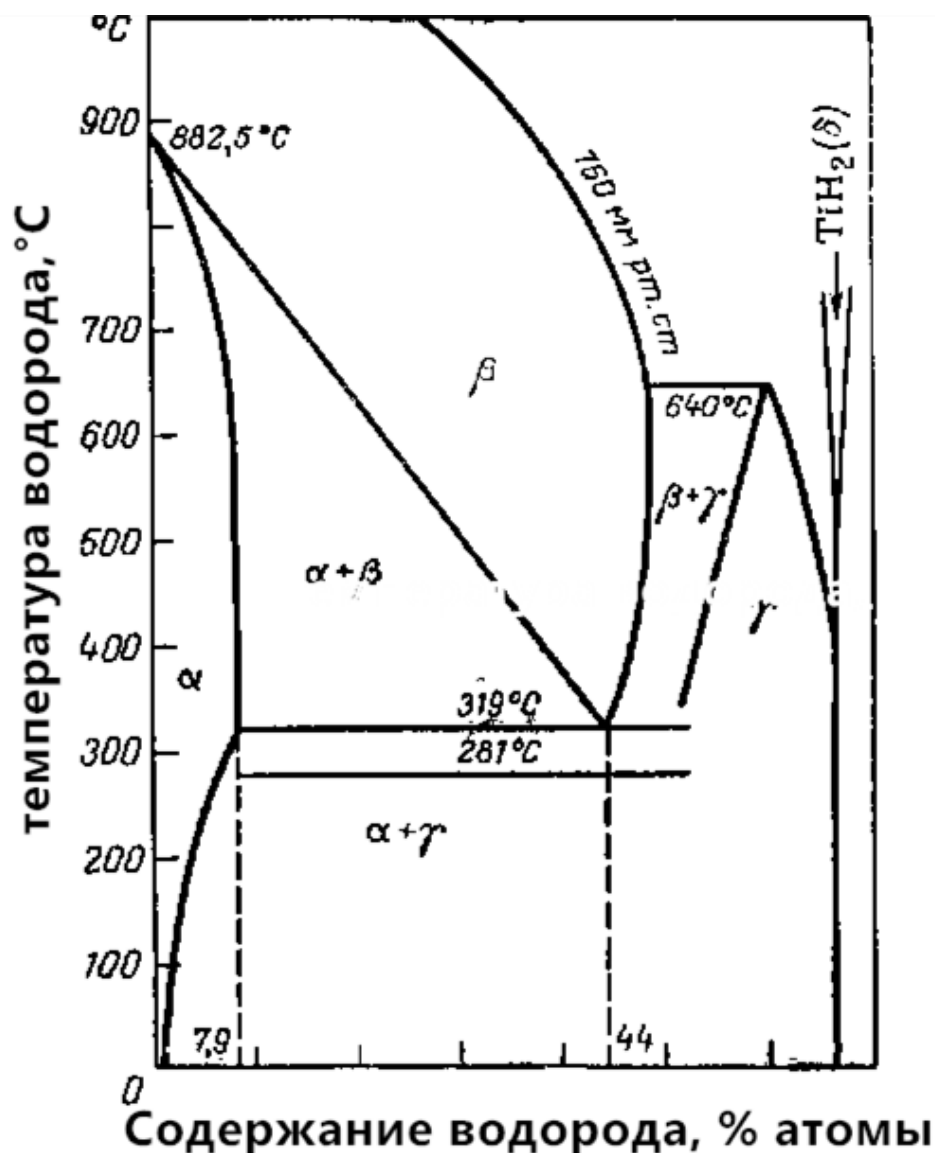


Рисунок 4 – диаграмма состояния системы титан-водорода

Взаимодействие водорода с титаном происходит в виде простого эвтектоидного превращения с фазами α + гидроида, образующимися непосредственно из β -фазы. Сильное стабилизирующее действие водорода на поле β -фазы приводит к снижению температуры альфа-бета преобразования от 882°C до эвтектоидной температуры 300°C. Термическая растворимость в водороде в β -фазе (без образования гидридной фазы) может достигать 50% при повышении температуры выше 600°C. Однако в α -фазе конечная растворимость в водороде составляет всего приблизительно 7% при 300°C и быстро уменьшается с понижением температуры. В переходных металлах IV группы водород стремится занимать тетраэдрические междоузлия. В результате более высокая растворимость, так же как быстрая диффузия

(особенно при повышенных температурах) водорода в бета-титане приводит к относительно открытой объемно-центрированной кубической (ОЦК) структуре, которая состоит из 12 тетраэдрических и шести октаэдрических пустот (пор). Для сравнения, гексагональная плотноупакованная (ГПУ) решетка альфа-титана имеет только четыре тетраэдрических и две октаэдрических пустоты (поры). При комнатной температуре может быть три разных типа гидридов титана (δ , ϵ и γ). δ -гидриды (TiH_x) имеют гранецентрированную кубическую решетку с атомами водорода, занимающими тетраэдрические пустоты (междоузлия) (структура CaF_2). Нестехиометрический коэффициент x δ -гидрида находится в широком диапазоне (1,5 - 1,99). При высоких концентрациях водорода ($x \geq 1,99$) δ -гидрид без диффузионным способом трансформируется в ϵ -гидрид с гранецентрированной тетрагональной (ГЦТ) структурой ($c/a \leq 1$ при температурах ниже $37^\circ C$). При низких концентрациях водорода (1-3 ат.%) формируется метастабильный γ -гидрид с гранецентрированной тетрагональной (ГЦТ) структурой c/a больше 1. В структуре γ -гидрида атомы водорода занимают половину тетраэдрических пустот (междоузлий) [14].

На рисунке 4 представлена фазовая диаграмма системы титан-водород. На оси абсцисс отражено содержание водорода в массовых%, на оси ординат – температура от 0 до $1000^\circ C$. Из диаграммы следует, что водород растворяясь в титане, понижает температуру его полиморфного превращения с $882,5$ до $319^\circ C$. В этой области возможно существование как α -фазы, так и β -фазы титана. Эвтектоидная точка лежит при содержании водорода в системе 43-44 атомы%. α -твердый раствор водорода в титане гомогенен до концентрации примерно 7,9 атом.% (при эвтектоидной температура). При дальнейшем увеличении концентрации наряду с ним наблюдается β -титан, затем чистая β -фаза, претерпевающая эвтектоидный распад при понижении температуры, двухфазная $\beta + \gamma$ область [15].

Водород в отличие от кислорода, азота и углерода оказывает незначительное влияние на механические свойства титана, но все же является

весьма вредной примесью, так как под его влиянием разрушаются изделия из титана и его сплавов при прокатке, ковке или нагреве.

Из диаграммы состояния титан — водород (рис. 4) следует, что по мере увеличения содержания водорода температура фазового превращения снижается, а температурная область существования двухфазной структуры $\alpha+\beta$ расширяется. Водород весьма энергично диффундирует в титан и образует растворы внедрения, подобно кислороду, азоту и углероду. При растворении водорода в титане выделяется тепло, при нагреве из сплавов выделяется водород.

При 20° α -титан, содержащий несколько десятитысячных долей процента избыточного водорода, будет иметь в структуре свободные гидриды, которые под микроскопом видны в виде тонких пластинок. Повышение хрупкости сплавов является следствием появления в их структуре увеличивающегося количества гидридов. Водород в пределах 0,3—0,5% (атомн.), обычно содержащийся в техническом титане, существенно понижает поглощение энергии при ударе без изменения предела прочности на растяжение.

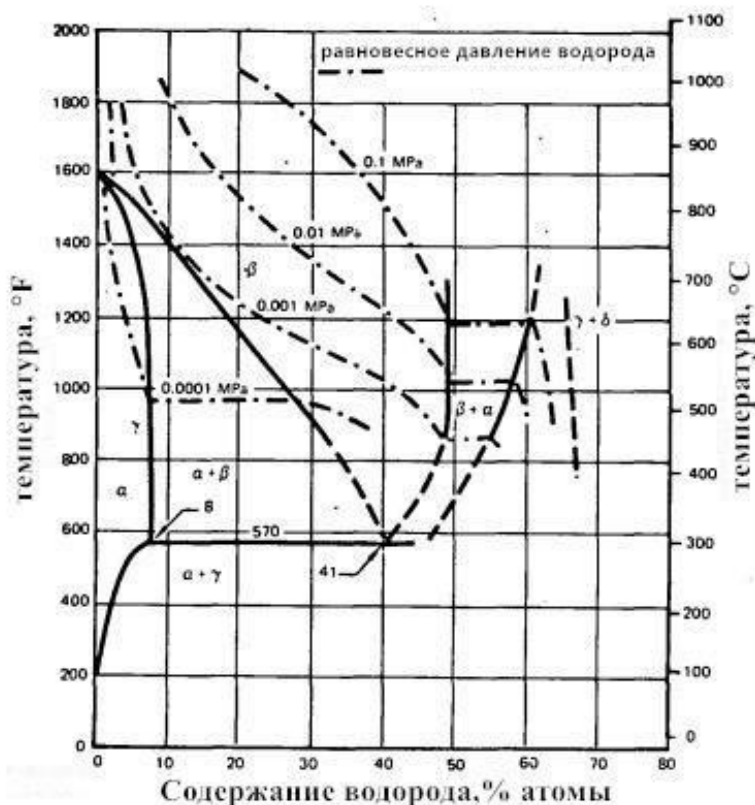


Рисунок 5 – бинарная фазовая схема титана-водорода на несколько водородные давления

Влияние давления водорода, окружающего титан, показано на рис.5, где показана равновесная диаграмма фазы титан-водород при нескольких давлениях водорода [16]. При уменьшении давления равновесной водорода растворимость водорода снижается, особенно в β -фазе.

Водород может проникать и накапливаться в титановых сплавах во время некоторых технологических производственных операций, а также при работе титановых сплавов в агрессивных водородных средах [17].

Всасываемый водород вызывает охрупчивание и последующее разрушение титановых сплавов при достижении максимальной концентрации растворенного в объеме [18]. Структурное и фазовое состояние материала, рабочие условия (температура, давление и напряжение), а также состояние поверхности оказывают значительное влияние на процесс сорбции водорода.

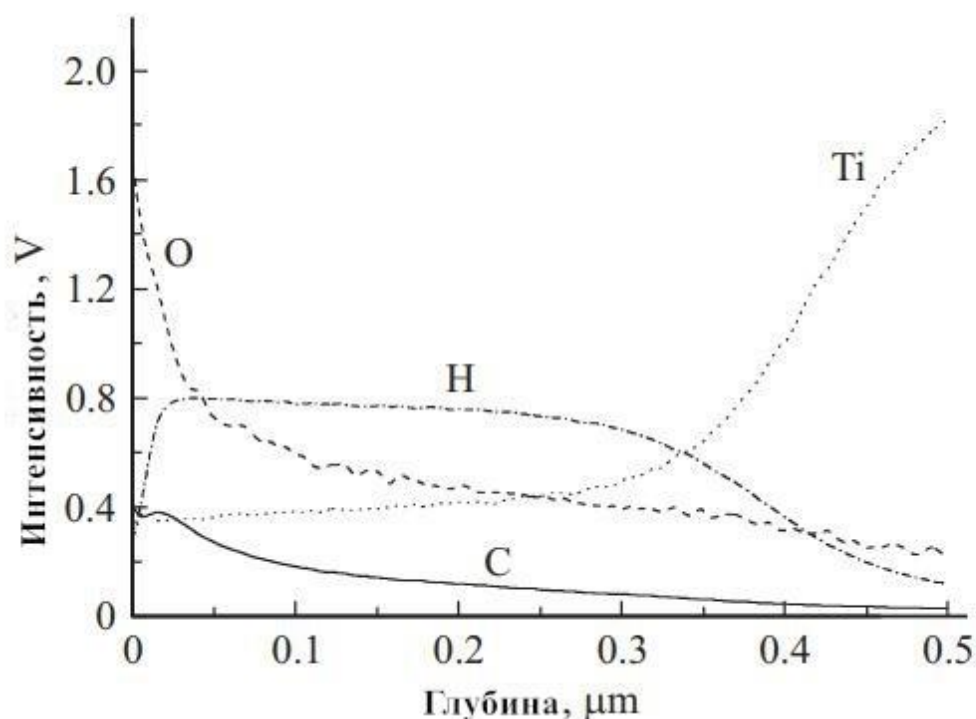


Рисунок 6 – Профиль распределения элементов в образцах титанового сплава после электролитического насыщения водородом

При электролитическом насыщении водород накапливается в приповерхностном слое образцов (рис. 6) и образует гидридные фазы с титановым сплавом с составом, близким к стехиометрическому составу. Насыщение водородом из газовой среды при высокой температуре сопровождается диффузией водорода в образце без образования гидридных фаз.

1.4 Поглощение водорода титаном

После превышения растворимости водорода в титане, титан будет продолжать поглощать водород, образуя гидриды. Образование дополнительных гидридов может продолжаться до тех пор, пока титан не превратится в гидрид с максимальным содержанием водорода, если созданы идеальные для этого условия [19].

Общее количество водорода, которое может быть поглощено титаном, контролируется поверхностными условиями, влияющими на адсорбцию атомарного или молекулярного водорода, а затем диффузией адсорбированного на поверхности водорода в объеме материала. Переменным, влияющими на поглощение, являются чистота поверхности, температура и парциальное давление водорода. Поглощение водорода при 274°C в зависимости от давления водорода показано на рис. 7 [20]. Изображена линейная зависимость адсорбции от квадратного корня давления водорода, свидетельствующая о том, что на поверхности происходит диссоциация молекулярного водорода на атомарный. Кроме того, скорость поглощения водорода будет полностью зависеть от площади поверхности, так что количество, поглощаемое за определенное время, будет увеличиваться по мере увеличения отношения площади поверхности к объему.

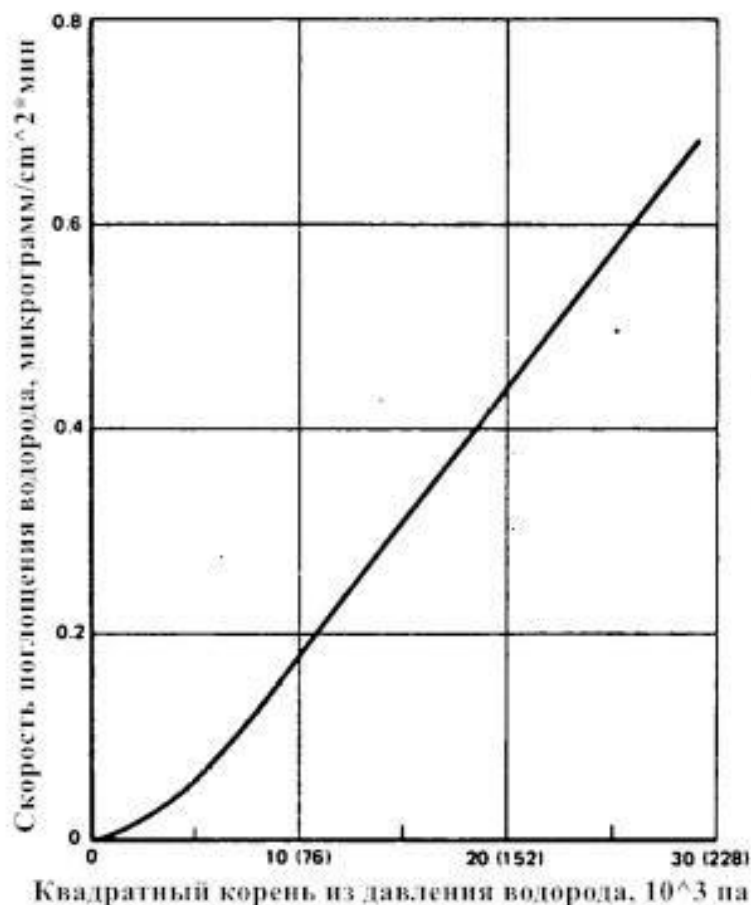


Рисунок 7 – Влияние давления на скорость абсорбции водорода по иодид титана на 274°С

Наличие оксидной пленки на поверхности металла может значительно замедлить поглощение водорода титаном. Предположительно, этот эффект связан с предотвращением поглощения адсорбированного слоя водорода или гидрида на поверхности. Показатель эффективности оксидного слоя показан на рис. 8 [21]. Если для поглощения оксидной пленки в металле требуется достаточное время, то поглощение водорода происходит с нормальной скоростью. Об этом свидетельствует поведение образца, изображенного на рис. 8, имеющего очень тонкий оксидный слой. Охлаждение образца до комнатной температуры после образования оксидной пленки с последующим повторным нагревом приводит к потере значительной части защитных свойств оксидной пленки, очевидно, из-за растрескивания.

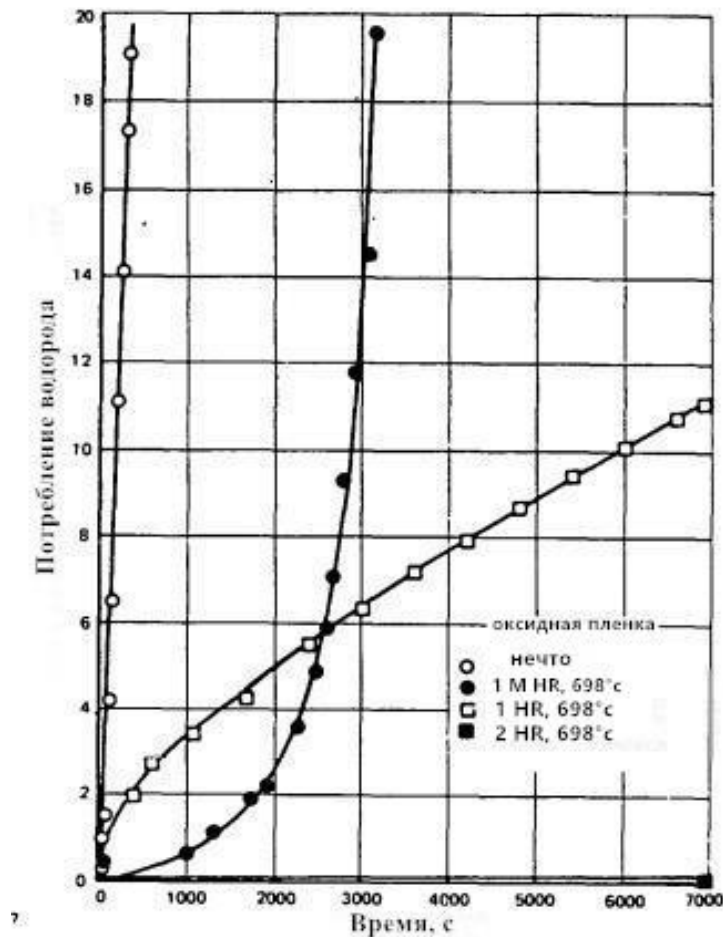


Рисунок 8 – скорость реакции при 698°C и давление водорода с титаном высокой чистоты, имеющие различные толщины оксидного фильма

Если оксидная пленка нестабильна или повреждена при истирании, может произойти абсорбция водорода. Любая истираемость для разрушения сплошной оксидной пленки повышает восприимчивость к поглощению водорода.

2 Материал и методы исследований

2.1 Материал исследования

К техническому титану относится марка ВТ1-0, имеющая серебристо-белый оттенок с удельной плотностью в $4,32 \text{ г/см}^3$. Данный металл обладает довольно большой легкостью, высокой плотностью, превосходной стойкостью к коррозии с незначительным изменением коэффициента теплового расширения [22].

Технический титан ВТ1-0 имеет свариваемость без ограничений и может применяться практически во всех областях промышленного производства. ВТ1-0 обладает превосходными качествами водородной прочности, он хрупок, пластичен. Благодаря этому его применение обосновано в различных областях, от производства медицинских инструментов, до машиностроения [23].

В качестве материала исследований использовался титановый сплав ВТ1-0. Образцы представляли собой прямоугольные пластины размером 20x20x1 мм.

В таблице 1 представлен состав сплава ВТ1-0

Таблица 1 – Химический состав в масс% материала ВТ1-0

| Fe | C | Si | N | Ti | O | H | Примесей |
|---------|---------|--------|---------|----------------|---------|---------|---------------|
| до 0,18 | до 0,07 | до 0,1 | до 0,04 | 98,61- 99,7 | до 0,12 | до 0,01 | прочих 0,3 |

2.2 Автоматизированный комплекс GRC

Автоматизированный комплекс GRC (GAS REACTION CONTROLLER LP) используется для измерения количества водорода, поглощенного материалами. Принцип работы GRC можно понять из рисунка 9.

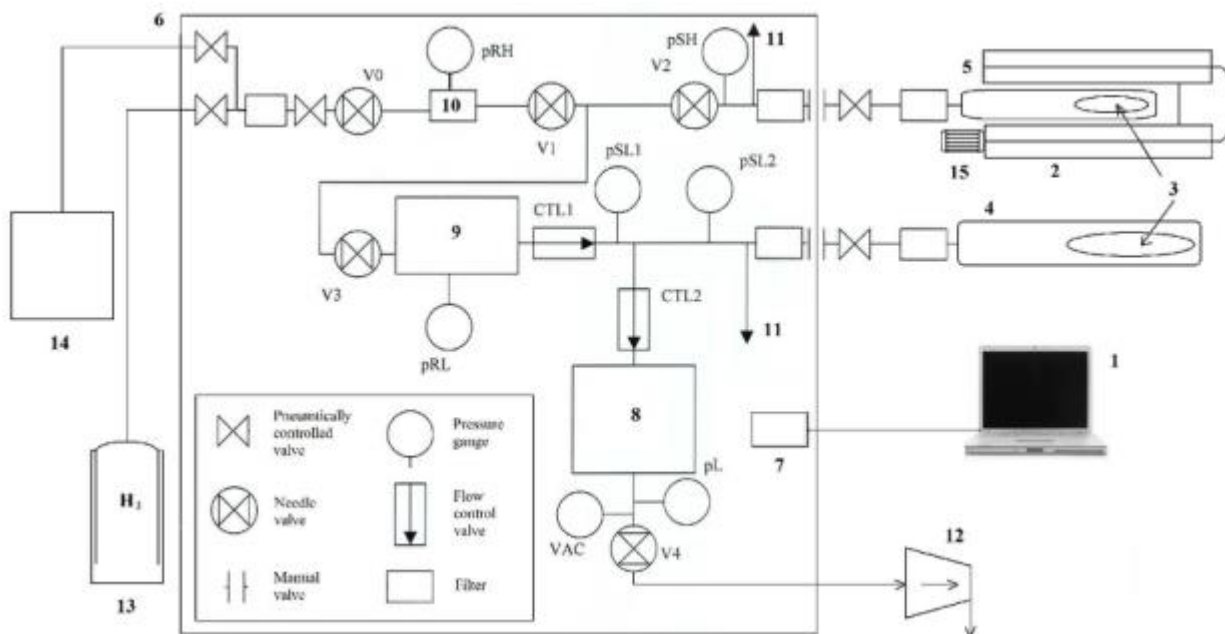


Рисунок 9 – Схема автоматизированного комплекса GRC

1 - компьютер; 2 - печи или криостат; 3 - образец; 4 - камера низкого давления; 5 - камера высокого давления; 6 - контроллер; 7- электронной системы управления; 8 - регулировка громкости; 9 - резервуар низкого давления; 10 - резервуар высокого давления; 11 - система аварийного удаления водорода; 12 - вакуумный узел; 13 - цилиндр с водородом; 14 - генератор водорода; 15 - система охлаждения [24].

Эксперимент по исследованию процессов сорбции и десорбции водорода выполняются в следующем порядке:

1. Образец взвешиваются и записывают данные.
2. Образец помещают в камеру, камера плотно закрывается, чтобы предотвратить утечку.
3. Провести откачку до давления порядка 2 Па.
4. Насыщение экспериментальных образцов водородом при температуре 450 °С и давлении 2 атмосферы.

2.3 Рентгеноструктурный анализ

Рентгенодифракционный анализ – один из дифракционных методов исследования структуры вещества. В основе данного метода лежит явление

дифракции рентгеновских лучей. При выполнении условия Вульфа-Брэггов наблюдаются интенсивные пики рассеяния (рис.10) [25]:

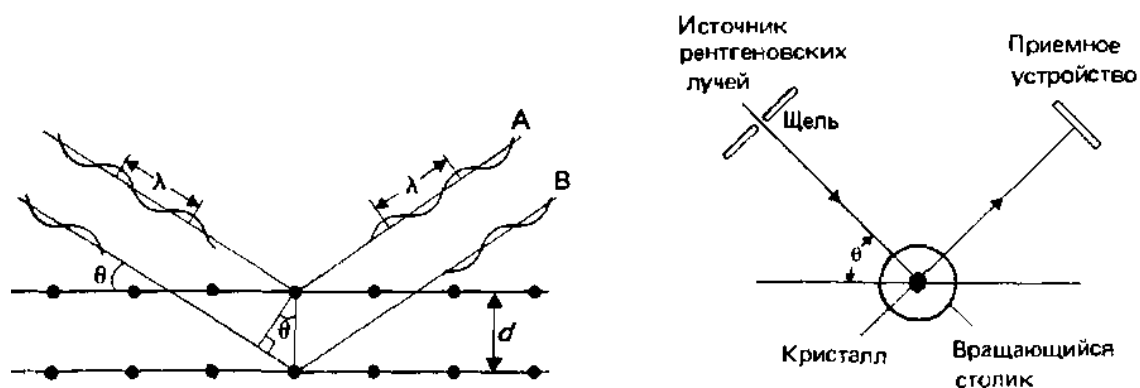


Рисунок 10 – Условие Вульфа — Брэггов

Условие Вульфа — Брэггов определяет направление максимумов дифракции упруго рассеянного на кристалле рентгеновского излучения.

$$2d\sin\theta = n\lambda \quad (1)$$

где d — межплоскостное расстояние, θ — угол скольжения, n — порядок дифракционного максимума, λ — длина волны.

Когда рентгеновские лучи рассеиваются из кристаллической решетки, наблюдаются пики рассеянной интенсивности, которые соответствуют следующим условиям:

1. Угол падения = угол рассеяния.
2. Разница в длине пути равна целому числу длин волн.

Условие максимальной интенсивности, содержащееся выше в законе Брэгга, позволяет рассчитать детали кристаллической структуры или, если известно, кристаллическую структуру, определить длину волны рентгеновских лучей, падающих на кристалл [26].

Закон Брэгга говорит нам о местонахождении пика с индексами hkl . θ_{hkl} связан с межплоскостным расстоянием d , следующим образом:

$$\lambda = 2d_{hkl}\sin\theta_{hkl} \quad (2)$$

$$1/d^2 = 4 \sin^2\theta/\lambda^2 \quad (3)$$

Известно, что d можно вычислить из индексов Миллера (hkl) по формуле (4) в кубической решетке:

$$1/d^2 = (h^2 + hk + l^2)/a^2 \quad (4)$$

После того, как параметры решетки могут определены:

$$4 \sin^2\theta/\lambda^2 = (h^2 + k^2 + l^2)/a^2 \quad (5)$$

$$a^2 = (h^2 + k^2 + l^2)\lambda^2/4 \sin^2\theta \quad (6)$$

В гексагональной решетке d можно вычислить из индексов Миллера (hkl) по форму (7):

$$1/d^2 = 4/3((h^2 + hk + l^2)/a^2) + l^2/c^2 \quad (7)$$

После того, как параметры решетки могут определены:

$$4 \sin^2\theta/\lambda^2 = 4/3((h^2 + hk + l^2)/a^2) + l^2/c^2 \quad (8)$$

3 Метод молекулярной динамики

Молекулярная динамика (МД) - это метод компьютерного моделирования, который позволяет отследить эволюцию системы взаимодействующих атомов во времени посредством решения уравнений движения. Важное преимущество метода МД это возможность моделировать системы при заданной температуре или при заданных скоростях атомов (ионов) с достаточно высокой скоростью расчета [27].

3.1 Основы метода молекулярной динамики

Метод молекулярной динамики основан на расчете эволюции системы взаимодействующих частиц (атомов, молекул) путем интегрирования уравнений их движения. В этом методе эволюция системы атомов рассчитывается по средством решения системы уравнений динамики, которые записываются для каждого атома. В качестве уравнения динамики в классической МД используется уравнение второго закона Ньютона. Существует также квантовая МД, в ней уравнение движения – уравнение Шредингера [28].

Классический метод молекулярной динамики - один из важнейших численных методов в теории конденсированного состояния [29].

В классической МД решается система уравнений 2 закона Ньютона:

$$m_i \times \vec{a}_i = \vec{F}_i \quad (9)$$

где m_i - масса i -й частицы, **Ошибка! Источник ссылки не найден.** - ее ускорение, и **Ошибка! Источник ссылки не найден.** - сила, действующая на нее. МД это детерминистический метод. Зная начальные положения частиц, можно рассчитать все последующие.

3.2 Определение программы LAMMPS

Одна из наиболее известных программ для классической молекулярной динамики - LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator). Данная программа является свободной (open source, GPL) и используется для расчетов взаимодействий до десятков миллионов атомов. Программа написана на языке C++ и не имеет графического интерфейса (только командный режим). Возможна компиляция исходных кодов под различные операционные системы (Linux, OS X, Windows). Кроме того, имеется большое количество различных опций компиляции, которые позволяют создавать исполняемый файл под конкретную архитектуру процессора и архитектуру графического процессора (Fermi, Kepler) [30].

3.3 Основные команды для создания атомов

lattice

Определим решетку для использования другими командами. В LAMMPS (набор программ для моделирования структуры молекул) решетка представляет собой набор точек в пространстве, определяемый элементарной ячейкой с атомами, которая бесконечно копируется во всех измерениях. Параметры команды «lattice» могут использоваться для определения широкого круга кристаллографических решеток.

LAMMPS использует эту команду двумя способами. Во-первых, команда «create_atoms» создает атомы в точках решетки внутри вычислительного поля. Стоит обратить внимание, что команда «create_atoms» позволяет определить разные типы атомов разным атомам решетки. Во-вторых, период решетки в данных x, y, z, подразумеваемых ею, может использоваться другими командами как единицы расстояния (например, create_box, region и velocity), которые удобно использовать, когда основная геометрия проблемы заключается в атомах на решетке.

Стиль решетки должен соответствовать измерениям моделирования. Стили `sc` или `bcc`, или `fcc`, или `hcp`, или `diamond` предназначены для 3d-задач. Стили `sq` или `sq2`, или `hex` для 2d-задач. Стиль `custom` может использоваться для задач 2d или 3d.

Решетка состоит из элементарной ячейки, набора атомов внутри этой ячейки и набора параметров преобразования (масштаб, адрес начала, местонахождение), которые преобразовывают элементарную ячейку в поле моделирования. Векторы a_1 , a_2 , a_3 являются краевыми векторами элементарной ячейки. Это спецификация «примитивных» векторов в твердотельной кристаллографии, но в LAMMPS единичная ячейка, определяемая ими, не обязательно должна быть «примитивной ячейкой» минимального объема.

region

Эта команда определяет геометрическую область пространства. Различные команды используют области. Например, область может заполняться атомами через команду «`create_atoms`». Или ограничивающий прямоугольник вокруг области можно использовать для определения поля моделирования с помощью команды «`create_box`». Или атомы в области могут быть идентифицированы в качестве группы при помощи групповой команды или удалены с помощью команды «`delete_atoms`». Или поверхность области может использоваться в качестве граничной стены или области при помощи команды «`fix`».

Команды, которые используют области, обычно проверяют, находится ли положение атома в области или нет. Для этой цели координаты на границе области считаются внутренними по отношению к области.

3.4 Основные команды для задания потенциала

pair_style

Задайте формулу, которую использует LAMMPS для вычисления парных взаимодействий. В LAMMPS парные потенциалы определяются

между парами атомов, которые находятся в пределах расстояния отсечки, и набор активных взаимодействий обычно изменяется со временем. Команда «bond_style» для определения потенциалов между парами связанных атомов, которые обычно остаются на месте во время моделирования.

В LAMMPS попарные силовые поля охватывают различные взаимодействия, некоторые из которых включают в себя многочастичные эффекты, например, «EAM, Stillinger-Weber, Tersoff, REBO». Они по-прежнему классифицируются как «попарные» потенциалы, потому что набор взаимодействующих атомов со временем изменяется (в отличие от связей молекул), и, таким образом, список соседей используется для нахождения соседних взаимодействующих атомов.

pair_coeff

Укажем коэффициенты попарных силовых полей для одной или нескольких пар типов атомов. Количество и значение коэффициентов зависят от стиля пары. Коэффициенты пар также могут быть установлены в файле данных, который считывается командой «read_data» или в файле перезагрузки.

3.5 Основные команды для задать вывод на экран информации

thermo

Команда применяется, если нужно вычислить и вывести на экран термодинамическую информацию (например, температуру, энергию, давление) по временным значениям, кратным N в начале и конце моделирования. Значение 0 будет выводиться только термодинамикой в начале и в конце. Содержимое и формат печатаемого файла контролируются командами «thermo_style» и «thermo_modify».

Вместо числового значения N можно обозначить как переменную равного стиля, которая должна быть указана как «v_name», где name - это имя переменной.

3.6 Основные команды для задания условий при которых идет процесс(температура, давление)

fix

Установим команду «fix», которая будет применена к группе атомов. В LAMMPS «fix» - это любая операция, применяемая к системе во время пошагового интегрирования или минимизации. Примеры включают в себя исправление позиций атомов и скоростей с учетом интегрирования по времени, регулируя температуру, применяя ограничительные силы для атомов, соблюдая предельные условия, вычисляя диагностики и т.д. Есть десятки исправлений, определенных в LAMMPS, и могут быть добавлены еще новые.

run

Эта команда запускает расчет. Запустить или продолжить динамику для указанного количества временных интервалов.

Когда стиль выполнения является «respa», N ссылается на внешний цикл (наибольший) «timesteps». Допустимо значение $N = 0$; Только термодинамика системы вычисляется и печатается, не принимая «timestep».

Ключевое слово ‘up to’ означает выполнение прогона, начинающегося с текущего «timestep» до указанного «timestep». Если вам нужно перезапустить свой скрипт несколько раз, вы можете продолжать перезапуск вашего скрипта с той же командой run до тех пор, пока симуляция не завершится.

4 Экспериментальные результаты

4.1 Подготовка образцов

Для проведения исследования была подготовлена серия образцов технически чистого титана. Образцы предварительно была механически отшлифована и отполирована для удаления загрязнений на поверхности.

Шлифование — механическая или ручная операция по обработке материала. Механическое шлифование обычно используется для обработки твёрдых и хрупких материалов в заданный размер с точностью до микрона [31].

Перед проведением различных испытаний поверхность образцов необходимо подвергать механической шлифовке.

Для частичного отжига дефектов и снятия внутренних напряжений образцы были подвергнуты термической обработке в вакууме при температуре 750°C в течение 1 часа.

Наиболее распространенный вид термической обработки титановых сплавов — отжиг всех разновидностей. Закалка и старение применяются в меньшей степени; термомеханическая обработка находится в стадии промышленного внедрения, к химикотермической обработке прибегают в редких случаях [32].

На следующем этапе работы проводилось насыщение водородом при температуре $T=450$ °C и давлении $P=2$ Па до различного концентрации для исследования влияния концентрации водорода на изменение параметров кристаллической структуры титана. Различная концентрация водорода в исследуемых образцах достигалась за счет варьирования времени наводороживания.



Рисунок 11 – Внешний вид дифрактометра Shimadzu XRD-7000S

Рентгеноструктурный анализ проводился путем анализа дифрактограмм исследуемых образцов, полученных на дифрактометре Shimadzu XRD-7000S внешний вид которого представлен на рисунке 11. Дифракционные картины регистрировали с использованием $\text{Cu K}\alpha_1/\alpha_2$ излучения. В ходе проведения эксперимента использовались следующие параметры: скорость сканирования – 2° в минуту; шаг сканирования – $0,03^\circ$; диапазон углов – $30\text{--}80^\circ$; накопление в точке 1,5 секунды. Идентификация фаз и расчет параметров решеток осуществлялись с использованием базы данных ICDD PDF-4+ и программы PowderCell 2.4 соответственно.

4.2 Моделирование системы водород-титан

При изучении системы титана водорода структура решетки должна выбирать гексагональную решетку, соответствующую α -титану, и объемно центрированную кубическую решетку, соответствующую β -титану. Для выбора пустоты, в которой находится атом водорода, в гексагональной решетке должна быть выбрана октаэдрическая пустота, а в объемно центрированной кубической решетке должна быть выбрана тетраэдрическая пустота. Потому что кристаллическая решетка α -титана имеет два типа

пустот: тетрагональные пустоты с радиусом 0.34\AA и октаэдрические пустоты с радиусом 0.62\AA и радиус атомов водорода равен 0.41\AA , поэтому они могут размещаться лишь в октаэдрических пустотах. В объемно-центрированной решетке β -модификации титана пустоты с радиусом 0.44\AA почти точно соответствуют атомному радиусу водорода. Чтобы создать такую модель водородной титановой системы, написан следующий входной файл.

```
# ----- Create Atoms -----
      lattice custom 2.951 &
      a1 1.0 0 0 a2 0.0 1.73 0 a3 0 0 1.59 &
      basis 0.33 0.67 0.25 basis 0.33 0.67 0.75
region box1 block 0 5 0 5 0 5 units lattice
      create_box 2 box1
      create_atoms 1 box
      lattice custom 2.951 &
      a1 1.0 0 0 a2 0.0 1.73 0 a3 0 0 1.59 &
      basis 0.0 0.0 0.0 basis 0.5 0.5 0.0 &
      basis 0.0 0.33 0.5 basis 0.5 0.83 0.5
region centerpoint block 1 10 1 10 2 10
      delete_atoms region centerpoint
      create_atoms 2 box
```

Команда «lattice» указывает, какой тип решетки используется (оцк, гцк, гпу и т. д.), А число, следующее за этим, задает постоянную решетки. Команда «region » задает ячейку моделирования. В данном случае мы использовали единичные решетки и указали, что ячейка моделирования должна равняться 1 решетке в каждом направлении. После этого команда «create_box» для создания поля будет использовать параметры, указанные в команде «region» [33].

```
# ----- Define Interatomic Potential -----
      pair_style adp
      pair_coeff * * ti_h_18rr.adp.alloy Ti H
```

```
neighbor 2.0 bin
```

```
neigh_modify delay 10 check yes
```

Команда «pair_style» указывает, какой тип межатомного потенциала будет использоваться, а «pair_coeff» указывает файл, в котором хранятся пары потенциальных коэффициентов.

```
# ----- Run Minimization -----
```

```
reset_timestep 0
```

```
timestep 0.00001
```

```
dump m0 all movie 50 movie.avi type type
```

```
#fix 1 all box/relax iso 0.0 vmax 0.001
```

```
velocity all create 500 12345
```

```
thermo 1000
```

```
thermo_style custom step pe lx ly lz press pxx pyy pzz c_eatoms
```

```
fix 1 all npt temp 450 450 100 iso 0 0 1000
```

```
min_style cg
```

```
#minimize 1e-12 1e-12 1000 1000
```

Команда «fix» использует условие «box/relax», при помощи которого все направления («iso») уменьшаются до давления 0, 0 па для всех атомов («all»). «Thermo» определяет выходные данные во время минимизации. «Thermo_style» указывает, какой тип вывода отображается на экране. «Min_style» указывает, что сопряженный градиент будет использоваться для минимизации, а «minimize» начинает минимизацию, т. е. границы ячейки моделирования уменьшаются от заданной постоянной решетки (2.94 ангстрема) до фактической постоянной решетки (2.95 ангстрема) [34].

4.3 Определение структурных параметров методом рентгеновской дифракции

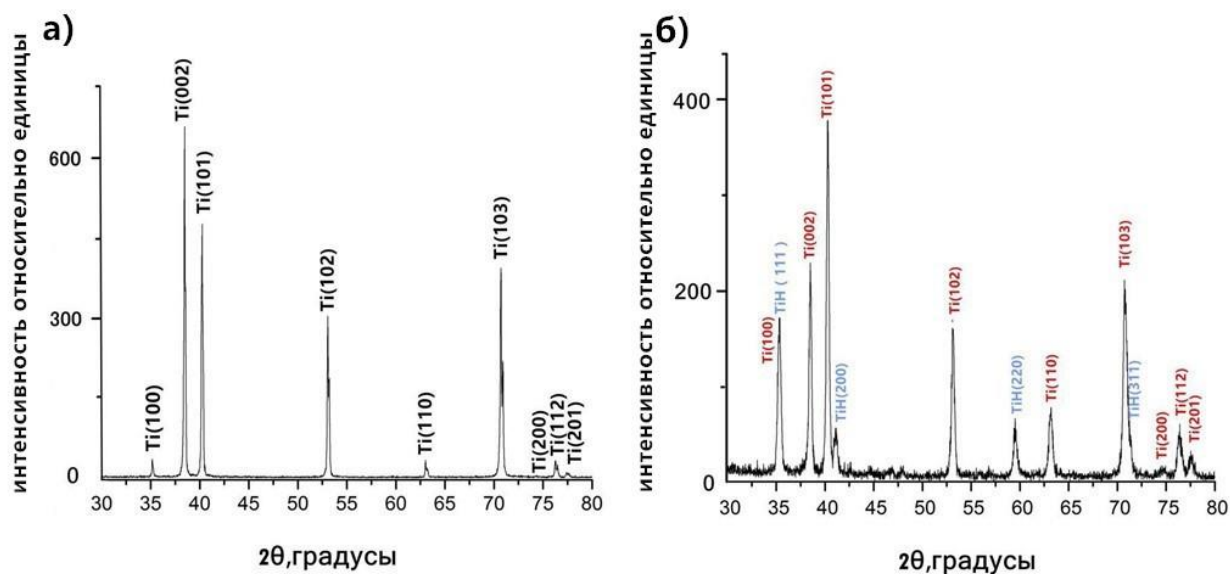


Рисунок 12 – Рентгеновская дифрактограмма технически чистого титана: α - Ti с концентрацией водорода 0,028 масс. % (а) и α - Ti и гидрид Ti с концентрацией водорода 0,669 масс. % (б)

Наиболее распространенный вид дифрактометрических исследований — идентификация фаз и количественный анализ фазового состава образца. Рентгеноструктурный анализ кристаллических веществ распадается на два этапа [35].

1) Определение размеров элементарной ячейки кристалла, числа частиц (атомов, молекул) в элементарной ячейке и симметрии расположения частиц (так называемой пространственной группы).

2) Расчёт электронной плотности внутри элементарной ячейки и определение координат атомов, которые отождествляются с положением максимумов электронной плотности.

Оценка параметров кристаллической структуры экспериментально была произведена методом рентгеновской дифрактометрии. На рисунке 12 а идентифицирована только α фаза титана с гексагональной

плотнупакованной кристаллической структурой. Необходимо отметить, что в направлении (002) наблюдается увеличение интенсивности рефлекса, что связано с текстурой прокатки титановых сплавов. На рисунке 12 б обнаружены фаза чистого α титана (отмечены красным) и фаза гидрода титана с объёма центрированной кубической решеткой (отмечены синим). Межплоскостные расстояния для α и β титана были рассчитаны с использованием уравнение Вульфа-Брэггов. Далее были рассчитаны параметры кристаллических структур по формулам 6 и 8 указанные в разделе 2.3.

Расчёт параметров кристаллической структуры и соотношение c/a для α титана, а также параметры решетки для β титана в диапазоне концентраций водорода от 0,004% до 0,955% представлены в таблицах 2.3.4.

Таблица 2 – Зависимость параметров решеток от содержания водорода для α - фаза титана

| Концентрации водорода, масс. % | Параметр решетки a , Å | Параметр решетки c , Å | Отношение c/a |
|--------------------------------|--------------------------|--------------------------|-----------------|
| 0,004 | 2,9486 | 4,6838 | 1,5884 |
| 0,028 | 2,9496 | 4,6867 | 1,5889 |
| 0,030 | 2,9477 | 4,6846 | 1,5892 |
| 0,038 | 2,9498 | 4,6853 | 1,5883 |
| 0,042 | 2,9469 | 4,6849 | 1,5897 |
| 0,050 | 2,9483 | 4,6849 | 1,5890 |
| 0,058 | 2,9463 | 4,6816 | 1,5889 |
| 0,063 | 2,9447 | 4,6819 | 1,5899 |
| 0,068 | 2,9437 | 4,6803 | 1,5899 |
| 0,069 | 2,9432 | 4,6772 | 1,5891 |
| 0,070 | 2,9466 | 4,6814 | 1,5887 |
| 0,078 | 2,9433 | 4,6792 | 1,5898 |

| | | | |
|-------|--------|--------|--------|
| 0,079 | 2,9435 | 4,6789 | 1,5896 |
| 0,093 | 2,9448 | 4,6804 | 1,5893 |
| 0,113 | 2,9452 | 4,6791 | 1,5887 |
| 0,120 | 2,9448 | 4,6798 | 1,5892 |
| 0,137 | 2,9472 | 4,6824 | 1,5887 |
| 0,146 | 2,9446 | 4,6797 | 1,5892 |
| 0,176 | 2,9448 | 4,6799 | 1,5892 |
| 0,225 | 2,9468 | 4,6843 | 1,5896 |
| 0,290 | 2,9388 | 4,6724 | 1,5899 |
| 0,562 | 2,9428 | 4,6796 | 1,5902 |
| 0,669 | 2,9486 | 4,6890 | 1,5902 |
| 0,789 | 2,9492 | 4,6906 | 1,5904 |
| 0,955 | 2,9487 | 4,6905 | 1,5907 |

Таблица 3 – Теоретические и экспериментальные расчеты параметров кристаллической структуры для α - фаза титана

| Концентрации водорода, масс. % | X=H/Ti 10000 | Экспериментальные данные | Экспериментальные данные с/а | теоретический расчет | теоретический расчет с/а |
|--------------------------------|--------------|--------------------------|------------------------------|----------------------|--------------------------|
| 0,137 | 659 | 2,9472 4.6824 | 1,5887 | 2,938 4,654 | 1.5841 |
| 0,290 | 1396 | 2,9388 4.6724 | 1,5899 | 2,943 4,673 | 1.5878 |
| 0,562 | 2713 | 2,9428 4.6796 | 1,5902 | 2,943 4,732 | 1.6078 |
| 0,955 | 4628 | 2,9487 4.6905 | 1,5907 | 2,955 4,759 | 1.6105 |

Таблица 4 – Теоретические и экспериментальные расчеты параметров кристаллической структуры для гидрида титана

| Концентрации и водорода, масс. % | X=H/Ti 10000 | Эксперимент альные данные | теоретически й расчет |
|--|-----------------|---------------------------------|--------------------------|
| 0,669 | 3233 | 4.4179 | 4.419 |
| 0,789 | 3817 | 4,4183 | 4,432 |
| 0,955 | 4628 | 4.4189 | 4,456 |

Исходя из представленных таблиц теоретический расчет параметров кристаллической структуры при концентрациях от 0,004% до 0,137% не был представлен, так как метод молекулярной динамики основан на моделирование бездефектных и не напряжённых кристаллических структур. При малых концентрациях водорода в технически чистом титане основное влияние на накопление и распределение водорода оказывают точечные и линейные дефекты, а также уровень напряжения в исследуемом материале. В связи с этим моделирование поведения водорода в технически чистом титане марки VT1-0 при малых концентрациях не проводилось.

В диапазоне концентраций водорода от 0% до 0,137% в образцах идентифицирована только α - фаза титана. Параметры решетки α -Ti в данном случае имеют небольшой разброс значений. Это связано с дефектной структурой материала и внутренними напряжениями. В диапазоне концентраций от 0,137% до 0,562% выявлено резкое возрастание соотношения с/а в α титане, которое связано с искажениями кристаллической структуры и насыщением водородом. Дальнейшее увеличение концентрации водорода до 0,955% приводит к замедлению роста соотношения с/а в α титане, что связано с фазовым переходом α -Ti \rightarrow δ -TiH. Однако по результатам теоретического расчета параметры решетки α титана продолжают резко увеличиваться.

В области концентраций водорода (0% - 0.176%), соответствующих α -фазе в H-Ti системе, соотношение с/а меняется незначительно, причем характер изменения значений а и с совпадает: увеличению а соответствует

увеличение параметра c и наоборот, т.е. решетка в пространстве попеременно то расширяется, то сужается. Фаза концентрации водорода 0,225% до 0,562% соответствует фазе $(\alpha + \beta)$. При преодолении фазовой границы основание (0001) гексагональной α -фазы решетки изменяется на базовую плоскость β -фазы кубической решетки (001), а межплоскостное расстояние между базальной плоскостью α -фазы немного больше межплоскостного расстояния между базальными плоскостями β -фазы, поэтому преодоление фазовой границы приводит к незначительному искажению решетки, т. Е. Расширение оси c происходит в гексагональной решетке, поэтому c / a резко возрастет. После преодоления фазовой границы кристаллическая решетка стабильно расширена, значение увеличено.

В диапазоне концентраций водорода от 0,669% до 0,955% наблюдается рост значений параметров решетки гидрида титана с увеличением концентрации водорода. Установлена корреляция между теоретическими и экспериментальными данными мало и в данной области на рентгенограммах обнаруживаются рефлексы δ -фазы гидрида титана (до 50 об. %).

5 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

5.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Чтобы представить результаты окончательной квалификационной работы по теме «Влияние газофазного гидрирования на параметры кристаллической структуры технически чистого титана» на целевом рынке, прежде всего необходимо проанализировать потребителей результатов исследований и в свою очередь, определить сегмент рынка.

Определить определенную часть рынка или группу потребителей, имеющих определенные общие характеристики, реализацию сегментации, т. е. Формирование определенных групп, которые нуждаются в этом продукте.

Реализация сегментирования рынка услуг по спектру проведения научных исследований в области газофазного гидрирования на параметры кристаллической структуры технически чистого титана по следующим критерием представлена в таблице 4.

Таблица 5 – Карта сегментирования рынка услуг по спектру проведения исследований влияния газофазного гидрирования на параметры кристаллической структуры технически чистого титана

| | | Спектр проведения научных исследований влияния газофазного гидрирования на параметры кристаллической структуры технически чистого титана | | |
|-----------------------|---|--|----------------------------------|--|
| | | Непродолжительные сроки проведения эксперимента | Быстрый анализ полученных данных | Исследование Водородного охрупчивания титана |
| Методика исследования | Методика электрохимического проникновения | | | |
| | Рентгеновский структурный анализ | | | |

| | | | | |
|--|-----------------------------------|--|--|--|
| | Метод молекулярной динамики | | | |
|--|-----------------------------------|--|--|--|

На карте сегментирования рынка услуг по спектру проведения исследований влияния газофазного гидрирования на параметры кристаллической структуры технически чистого титана приведены следующие научно-исследовательские институты и лаборатории, представленные в таблице 6.

Таблица 6 – Научно-исследовательские институты и лаборатории

| | |
|--|--|
| Международная научно-образовательная лаборатория технологии водородной энергетики НИ ТПУ г. Томск | |
| Международная научно-образовательная лаборатория «Водородная энергетика и плазменные технологии» НИ ТПУ г. Томск | |

Анализируя карту сегментации, представленную в таблице 4, следует, что исследования влияния газофазного гидрирования на параметры кристаллической структуры технически чистых методов электрохимического проникновения титана и методов молекулярной динамики мало интересуют представленные научные институты и лаборатории в Таблице 5. На основе таблицы 5 анализ рентгеноструктурных анализа с последующим быстрым анализом полученных данных и исследованием водородного охрупчивания титана следует направлять на максимальные усилия и ресурсы предприятия.

5.2 Структура работ в рамках научного исследования

Для достижения и выполнения конкретной задачи при проведении научных исследований в заключительной квалификационной работе необходимо сформировать рабочую группу. Для каждого вида запланированных работ создается соответствующая должность исполнителей. В таблице 7 показан список этапов и работ в рамках проведения исследований в окончательной работе.

Таблица 7 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

| Основные этапы | № работы | Содержание работ | Должность исполнителя |
|--|----------|--|--------------------------------|
| Разработка задания на НИР | 1 | Составление и утверждение технического задания | Научный руководитель |
| Выбор направления исследования | 2 | Поиск и изучение литературы по теме | Научный руководитель и студент |
| | 3 | Выбор направления исследований | Студент |
| | 4 | Планирование работы | Научный руководитель |
| Теоретические и экспериментальные исследования | 5 | Изучение литературы | Студент |
| | 6 | Разработка экспериментальной модели | Научный руководитель и студент |
| | 7 | Проведение эксперименто | Студент |
| | 8 | Измерение и получение результатов | Студент |
| | 9 | Анализ полученных результатов | Научный руководитель и студент |
| Оформление отчета | 10 | Составление пояснительной записки | Студент |

5.3 Определение трудоемкости выполнения работ

Расчет интенсивности труда осуществляется экспериментально-статистическим методом, основанным на определении ожидаемого времени работы в человеко-днях по формуле:

$$t_{ожі}=(3t_{mini}+2t_{maxi})/5 \quad (10)$$

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

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

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

Рассчитаем значение ожидаемой трудоёмкости работы:

Для работа № 1:

$$t_{ожі}=(3\cdot 5+2\cdot 8)/5=6.2 \text{ чел.-дн.}$$

Для работа № 2:

$$t_{ожі}=(3\cdot 12+2\cdot 16)/5=13.6 \text{ чел.-дн.}$$

Для работа № 3:

$$t_{ожі}=(3\cdot 5+2\cdot 9)/5=6.6 \text{ чел.-дн.}$$

Для работа № 4:

$$t_{ожі}=(3\cdot 5+2\cdot 8)/5=6.2 \text{ чел.-дн.}$$

Для работа № 5:

$$t_{ожі}=(3\cdot 9+2\cdot 15)/5=11.4 \text{ чел.-дн.}$$

Для работа № 6:

$$t_{ожі}=(3\cdot 6+2\cdot 9)/5=7.2 \text{ чел.-дн.}$$

Для работа № 7:

$$t_{ожі}=(3\cdot 8+2\cdot 12)/5=9.6 \text{ чел.-дн.}$$

Для работа № 8:

$$t_{ожі}=(3\cdot 6+2\cdot 9)/5=7.2 \text{ чел.-дн.}$$

Для работа № 9:

$$t_{ожі}=(3\cdot 5+2\cdot 10)/5=7 \text{ чел.-дн.}$$

Для работа № 10:

$$t_{ожі}=(3\cdot 8+2\cdot 12)/5=9.6 \text{ чел.-дн.}$$

Чтобы определить продолжительность работы в рабочие дни, мы используем формулу:

$$T_{pi} = t_{ожі}/Чі \quad (11)$$

где T_{pi} – продолжительность одной работы, раб. дн.; $Чі$ – численность исполнителей, выполняющих одновременно одну и ту же работу на данном этапе, чел.

Для работа № 1:

$$T_{pi} = 6.2/2 = 3,1 \text{ раб.дн.}$$

Для работа № 2:

$$T_{pi} = 13.6/1 = 13,6 \text{ раб.дн.}$$

Для работа № 3:

$$T_{pi} = 6.6/1 = 6,6 \text{ раб.дн.}$$

Для работа № 4:

$$T_{pi} = 6.2/1 = 6,2 \text{ раб.дн.}$$

Для работа № 5:

$$T_{pi} = 11.4/1 = 11,4 \text{ раб.дн.}$$

Для работа № 6:

$$T_{pi} = 7.2/2 = 3,6 \text{ раб.дн.}$$

Для работа № 7:

$$T_{pi} = 9.6/1 = 9,6 \text{ раб.дн.}$$

Для работа № 8:

$$T_{pi} = 7.2/1 = 7,2 \text{ раб.дн.}$$

Для работа № 9:

$$T_{pi} = 7/2 = 3,5 \text{ раб.дн.}$$

Для работа № 10:

$$T_{pi} = 9.6/1 = 9,6 \text{ раб.дн.}$$

Для удобства составления расписания календаря продолжительность этапов в рабочие дни пересчитывается в календарные дни и рассчитывается по следующей формуле:

$$T_{ki} = T_{pi} * K \quad (12)$$

где T_{ki} – продолжительность выполнения одной работы, календ. дн.;
 T_{pi} – продолжительность одной работы, раб. дн.; K – коэффициент календарности, предназначен для перевода рабочего времени в календарное.

Коэффициент календарности рассчитывается по формуле:

$$K = T_{кг} / (T_{кг} - T_{вд} - T_{пд}) \quad (13)$$

где $T_{кг}$ – количество календарных дней в году; $T_{вд}$ – количество выходных дней в году; $T_{пд}$ – количество праздничных дней в году.

$$K = T_{кг} / (T_{кг} - T_{вд} - T_{пд}) = 365 / (365 - 52 - 66) = 1.47$$

Таблица 8 – Временные показатели проведения ВКР

| № | Исполни | Продолжительность работа |
|---|---------|--------------------------|
|---|---------|--------------------------|

| работы | -тели | t_{mini} чел.-дн | t_{maxi} чел.-дн | $t_{\text{ожi}}$ чел.-дн | T_{pi} раб.дн | T_{ki} кал-дн |
|---------------|--|---|------------------------------|-----------------------------|---------------------------|---------------------------|
| 1 | Научный руководи тель | 5 | 8 | 6,2 | 6,2 | 12 |
| 2 | Научный руководи тель и студент | 12 | 16 | 13,6 | 6,8 | 10 |
| 3 | Студент | 5 | 9 | 6,6 | 6,6 | 9 |
| 4 | Научный руководи тель | 5 | 8 | 6,2 | 6,2 | 9 |
| 5 | Студент | 9 | 15 | 11,4 | 11,4 | 16 |
| 6 | Научный руководи тель и студент | 6 | 9 | 7,2 | 3,6 | 5 |
| 7 | Студент | 8 | 12 | 9,6 | 9,6 | 14 |
| 8 | Студент | 6 | 9 | 7,2 | 7,2 | 10 |
| 9 | Научный руководи тель и студент | 5 | 10 | 7 | 3,5 | 5 |
| 10 | Студент | 8 | 12 | 9,6 | 9,6 | 14 |
| Итого | | Студент: 60.5 Научный руководитель: 33.5 | | | | |

5.4 Построение графика работ

Наиболее удобным и видимым типом рабочего графика является построение полосы диаграммы исследований в виде диаграмм Ганта. На основании таблицы 8 построим календарный план-график.

Таблица 9 – Календарный план-график проведения НИОКР по теме «Влияние газофазного гидрирования на параметры кристаллической структуры технически чистого титана»

| Этап | работы | Исполнители | T_{ki} кал-дн | Февраль | март | апрель | май | июнь |
|------|--|--------------------------------|--------------------|---------|------|--------|-----|------|
| 1 | Составление и утверждение технического задания | Научный руководитель | 12 | ■ | | | | |
| 2 | Поиск и изучение литературы по теме | Научный руководитель и студент | 10 | | ■ | | | |
| 3 | Выбор направления исследований | Студент | 9 | | ■ | | | |
| 4 | Планирование работы | Научный руководитель | 9 | | ■ | | | |
| 5 | Изучение литературы | Студент | 16 | | ■ | | | |
| 6 | Разработка экспериментальной модели | Научный руководитель и студент | 5 | | | ■ | | |
| 7 | Проведение эксперимента | Студент | 14 | | | ■ | | |

| | | Исп.1 | Исп.2 | Исп.1 | Исп.2 | Исп.1 | Исп.2 |
|-------------------------|-----------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| Образцы | СМ ³ | 30 | 30 | 21 | 21 | 630 | 630 |
| Шлифовальн ые бумаги | ШТ | 5 | 5 | 60 | 60 | 300 | 300 |
| Ручка | ШТ | 1 | 1 | 20 | 20 | 20 | 20 |
| тетрадь | ШТ | 1 | 1 | 20 | 20 | 20 | 20 |
| Спирт | МЛ | 100 | 100 | 0,1 | 0,1 | 10 | 10 |
| Перчатки | ШТ | 1 | 1 | 3 | 3 | 3 | 3 |
| Халат | ШТ | 1 | 1 | 460 | 460 | 460 | 460 |
| Итого | | | | | | 1443 | 1443 |

5.5.1 Расчет затрат на прибора для научных работа

Таблица 11 – Затрат на прибор для научных работа

| №п/п | название прибора | Время использо- вания прибора, час | | Цена использования прибора, тыс. руб/час | | Общая стоимость прибора,тыс. руб. | |
|-------|-------------------------------------|--|-------|---|-------|--|-------|
| | | Исп.1 | Исп.2 | Исп.1 | Исп.2 | Исп.1 | Исп.2 |
| 1 | Дифрактометра Shimadzu XRD-7000S | 8 | 9 | 6 | 6 | 48 | 54 |
| 2 | Автоматизированный комплекс GRC | 6 | 7 | 9 | 7 | 54 | 49 |
| Итого | | | | | | 102 | 103 |

5.5.2 Основная и дополнительная заработная плата исполнителей темы

Проведем расчет заработной платы относительно того времени, в течение которого работал руководитель и студент

$$Z_{zn} = Z_{осн} + Z_{доп}, \quad (15)$$

где: $Z_{осн}$ – основная заработная плата; $Z_{доп}$ – дополнительная заработная плата (12-20 % от $Z_{осн}$).

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

$$Z_{осн} = Z_{дн} \cdot T_p, \quad (16)$$

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

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{дн} = \frac{Z_m \cdot M}{F_d}, \quad (17)$$

где Z_m – месячный должностной оклад работника, руб; M – количество месяцев работы без отпуска в течение года: при отпуске в 48 раб. дней $M=10,4$ месяца, 6-дневная неделя; Районный коэффициент: 0.3

Таким образом, заработная плата руководителя:

$$Z_{осн} = \frac{Z_m \cdot M}{F_d} * T_p = (17000 * (1 + 0.3) * 10.4) * 33.5 / 251 = 30675.8$$

заработная плата студента:

$$Z_{осн} = \frac{Z_m \cdot M}{F_d} * T_p = (9893 * (1 + 0.3) * 10.4) * 60.5 / 251 = 32675.8$$

$$Z_{zn} = Z_{осн} + Z_{доп}$$

$$Z_{zn} = Z_{осн} + Z_{доп} = (30675.8 + 32675.8) + (30675.8 + 32675.8) * 12\% = 70953.8$$

5.5.3 Отчисления во внебюджетные фонды

Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется исходя из следующей формулы:

$$Z_{внеб} = k_{внеб} \cdot (Z_{осн} + Z_{доп}) \quad (18)$$

где квнеб – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды.

На 2018 г. в соответствии с Федеральным законом от 24.07.2009 №212-ФЗ установлен размер страховых взносов равный 30%. Отчисления во внебюджетные фонды = З (Суммарная заработная плата) ×30%=21256.14

5.5.4 Накладные расходы

Величина накладных расходов определяется по формуле:

$$\text{Знакл} = (\Sigma \text{статей}) \cdot \text{к}_{\text{нр}} \quad (19)$$

где кнр – коэффициент, учитывающий накладные расходы. Величину коэффициента накладных расходов можно взять в размере 16%.

$$\text{Знакл} = (\Sigma \text{статей}) \cdot \text{к}_{\text{нр}} = (1443 + 102000 + 63351,6 + 34569 + 70953,8 + 21256,14) \cdot 0,16 = 46971,77$$

5.5.5 Формирование затрат на научно-исследовательского проекта

Таблица 12 – Расчет бюджета затрат НИИ

| Наименование | Сумма(руб) | | Примечание |
|--------------------------------------|------------|----------|----------------------|
| | Исп.1 | Исп.2 | |
| Материальные затраты | 1443 | 1443 | Пункт 4,1 |
| Затрат на прибора для научных работа | 102000 | 103000 | Пункт 4,2 |
| Расчет основной заработной платы | 63351.6 | 63351.6 | Пункт 4,3 |
| дополнительная заработная плата | 34569 | 34569 | Пункт 4,4 |
| Суммарная заработная плата | 70953.8 | 70953.8 | Пункт 4,4 |
| Отчисления во вне-бюджетные фонды | 21256.14 | 21256.14 | Пункт 4,5 |
| Накладные расходы | 46971.77 | 46971.77 | 16% от суммы ст. 1-5 |

| | | | |
|-------------------|----------|----------|---------------|
| Бюджет затрат НТИ | 340545.3 | 340545.3 | Сумма ст. 1-6 |
|-------------------|----------|----------|---------------|

5.6. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, социальной и экономической эффективности исследования.

Интегральный финансовый показатель развития определяется как:

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i} = \Phi_{pi} / \Phi_{\text{max}} \quad (20)$$

где $I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i}$ – интегральный финансовый показатель разработки; Φ_{pi} – стоимость i -го варианта исполнения; Φ_{max} – максимальная стоимость исполнения научно- исследовательского проекта.

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп.}1} = 188554.9 / 207567 = 0.9$$

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп.}2} = 207567 / 207567 = 1$$

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

$$I_{pi} = \sum a^i b^i \quad (21)$$

Таблица 13 – Сравнительная оценка характеристик вариантов реализации проекта.

| Критерии | Весовой коэффициент параметра | Исп. 1 | Исп. 2 | Весовой коэффициент параметра |
|-----------------------------|-------------------------------|--------|--------|-------------------------------|
| 1. Надежность | 0,2 | 5 | 5 | 0,2 |
| 2. универсальность | 0,2 | 4 | 4 | 0,2 |
| 3. Уровень материалоемкости | 0,15 | 4 | 4 | 0,15 |
| 4. Функциональная мощность | 0,2 | 5 | 5 | 0,2 |
| 5. Ремонтпригодность | 0,1 | 5 | 5 | 0,1 |
| 6. Энергосбережение | 0,15 | 4 | 4 | 0,15 |
| Итого | 1 | 4,5 | 4,5 | 1 |

$$I_{\text{исп.}1} = \Phi_{pi} / \Phi_{\text{max}} = 4,5 / 0,9 = 5$$

$$I_{\text{исп.2}} = \Phi_{\text{pi}} / \Phi_{\text{max}} = 4,5 / 1 = 4,5$$

Сравнительная эффективность проекта ($\mathcal{E}_{\text{ср}}$):

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = I_{\text{исп.i}} / I_{\text{испmax}} \quad (22)$$

Таблица 14 – Сравнительная эффективность разработки

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

Вывод: Эта оценка коммерческой ценности необходима для представления финансового состояния и перспектив текущих научных исследований. В процессе формирования бюджета были использованы группировки по материальным затратам (1443руб), затратам по основной заработной плате исполнителей тем (63351.6 руб), затратам по дополнительной заработной плате (34569 руб), затратам на научные, отчислениям во внебюджетные фонды (21256.14 руб) и накладным расходам (46971.77 руб).

6. Социальная ответственность

Введение: В эти современные времена сложных автоматических аналитических инструментов новые потенциальные опасности для жизни и конечности можно найти в неправильном использовании блестящих установки, которые автоматизируют анализ и много часов автоматической работы. Особо следует отметить в этой категории те инструменты, которые используют ионизирующие излучения и представляют особый интерес в этой разделе для тех, которые используют рентгеновское излучение. В данной главе рассмотрены правила безопасной работы труда при выполнении основных этапов осуществления эксперимента.

Исследовательская работа по структуре и свойствам титанового сплава BT1-0, насыщенного водородом, предполагает работу на различных установках. К наиболее критическому оборудованию относится рентгеновский дифрактометр и автоматизированный комплекс GRC. Поэтому рассмотрение безопасности и гигиены труда при осуществлении работ по измерению с помощью установки дифрактометра Shimadzu XRD-7000S и автоматизированный комплекс GRC особенно важны при проведении данного исследования.

6.1 Производственная безопасность.

6.1.1 Анализ вредных и опасных факторов, которые может создать объект исследования и возникнуть в лаборатории.

При проведении работ на установке рентгеновского дифрактометра и автоматизированного комплекса GRC возможно воздействие вредных факторов таких, как:

4. Микроклимат;
5. Производственный шум
6. Электромагнитные излучения

При работе с вакуумными и турбомолекулярными насосами. Влияние шума на организм человека является причиной негативных изменений, особенно в органах слуховой, нервной и сердечно-сосудистой систем. В соответствии с ГОСТ 12.1.003-83 допустимый уровень шума для работ, требующих концентрации, работы с повышенными требованиями к мониторингу и дистанционным контролем производственных циклов на рабочих местах в лабораториях с шумовым оборудованием составляет 75 дБА. Области с акустическим уровнем или эквивалентным уровнем шума выше 80 дБА обозначены знаками безопасности в соответствии с ГОСТ 12.4.026. Рекомендуется использовать следующие средства коллективной защиты: ограждения, объемные звукопоглотители, виброизолирующие опоры; средства индивидуальной защиты: специальные вкладыши, вкладыши для ушных вкладышей, защитные колпачки.

Опасности при использовании рентгеновских лучей представляют собой энергетические электромагнитные излучения, которые ионизируют вещество, с которым они взаимодействуют, выталкивая электроны из своих атомов. Степень ионизации, поглощения и изменения молекул на материале зависит от величины (потока и интенсивности излучения) и качества (спектрального распределения энергии фотона) излучения. Живые организмы, подвергающиеся воздействию различных доз ионизирующего излучения, могут быть ранены в результате таких воздействий, а смерть может быть вызвана сильными воздействиями. Крайне важно, чтобы все операторы рентгеновских приборов были осведомлены об их использовании, чтобы защитить себя от травм.

При нормализации метеорологических условий в производственных помещениях учитывается время года, физическая тяжесть выполняемой работы, а также количество избыточного тепла в помещении. Оптимальные и допустимые метеорологические условия температуры и влажности устанавливаются в соответствии с СанПин 2.2.4.548-96 (таблица 15).

Таблица 15 – Оптимальные величины показателей микроклимата на рабочих местах производственных помещений (СанПин 2.2.4.548-96)

| Период года | Температура воздуха, °С | Температура поверхностей, °С | Относительная влажность воздуха, % | Скорость движения воздуха, м/с |
|-------------|-------------------------|------------------------------|------------------------------------|--------------------------------|
| холодный | 21-23 | 20-24 | 60-40 | 0,1 |
| теплый | 22-24 | 21-25 | 60-40 | 0,1 |

Системы кондиционирования воздуха обеспечивают создание и автоматическое поддержание определенных параметров окружающей среды в помещении, независимо от погодных условий.

6.1.2 Обоснование мероприятий по защите исследователя от действия опасных и вредных факторов.

1. Рекомендуется использовать следующие средства коллективной защиты: ограждения, объемные звукопоглотители, виброизолирующие опоры; средства индивидуальной защиты: специальные вкладыши, вкладыши для ушных вкладышей, защитные колпачки.

2. Системы кондиционирования воздуха обеспечивают создание и автоматическое поддержание определенных параметров окружающей среды в помещении, независимо от погодных условий.

3. Излучение, возникающее в источнике высокого напряжения (то есть трансформатор и выпрямители), не должно превышать 0,5 мР за 1 час при каждом номинальном значении на расстоянии 5 см от корпуса источника питания.

4. Для рентгеновской дифракции и спектрографического оборудования, в котором полностью закрыт первичный рентгеновский луч, блуждающее излучение на расстоянии 25 см от комплекса корпусных корпусов трубки, измеренное с помощью мотора, соответствующего

энергии контролируемый диапазоном, должен быть уменьшен до минимального уровня и должен быть менее 2 мР за 1 час при каждом заданном рейтинге трубки.

5. Для рентгеновского оборудования с открытым пучком применяются следующие предписания:

(а) Легко видимые мигающие огни или другие одинаково заметные сигналы, которые срабатывают только при отпуске первичного рентгеновского луча (т. Е. Активируется рентгеновская трубка и отверстия пучка) должны быть обеспечены таким образом, чтобы предупреждать людей о потенциальной радиационной опасности. Этот сигнал должен быть помечен так, чтобы его назначение было легко идентифицировано. (b) Оператор должен находиться в непосредственном присутствии во все времена, когда оборудование работает. Отклонения от этой практики должны быть очищены через наблюдателя радиационной защиты. (с) Если оборудование не эксплуатируется, оборудование должно быть выключено таким образом, чтобы оно было доступно или работало только уполномоченным персоналом. Комментарий: поскольку скорость воздействия на порт луча может превышать 100 000 об / мин, экстремальные воздействия необходимы для предотвращения случайного воздействия первичного пучка. По этой причине технологии с открытым пучком следует использовать только после исчерпания всех других возможностей.

6. Каждый комплекс корпусных корпусов должен быть таким, чтобы предотвратить попадание частей тела в путь первичного луча излучения или вызвать перекрытие первичного луча излучения при входе в его путь.

7. Индикатор состояния затвора (открытый или закрытый) должен быть установлен на корпусе трубки или рядом с ним, что будет автоматически указывать положение каждого затвора с легко различимым образом.

8. Знак или ярлык с надписью «Предостережение-излучение - это

оборудование производит рентгеновское излучение при включении - только для квалифицированного персонала» или слова, имеющие сходные намерения, должны располагаться рядом с любым переключателем, который активирует рентгеновское излучение труба. Знак или ярлык должны использовать обычные радиационные предостерегающие цвета (пурпурный на желтом фоне) и должны иметь обычный символ излучения.

9. Знак или ярлык с надписью «Предостерегающий высокоинтенсивный рентгеновский луч» или слова, имеющие сходные намерения, должны быть размещены на каждом корпусе рентгеновской трубки или рядом с ним. Он должен быть расположен так, чтобы быть хорошо видимым для любого человека, который может работать в непосредственной близости от первичного луча излучения.

10. Красная или пурпурная сигнальная лампа с обозначением «X-Ray On» или ее эквивалент должны быть расположены на панели управления и загораться, только если рентгеновская трубка активирована. Кроме того, на корпусе трубки или рядом с каждым корпусом трубки должен быть включен индикатор состояния (вкл. Или выкл.) Маркированной рентгеновской трубки, предпочтительно красный или пурпурный свет, так что состояние трубки легко различимо.

11. Машины, использующие рентгеновскую дифракционную камеру, должны иметь соответствующие отверстия корпуса рентгеновской трубки, расположенные так, чтобы:

(а) Рентгеновская трубка могла быть активирована только тогда, когда система коллимирования камеры установлена на место, или (б) Механизм затвора позволяет первичному лучу излучения проходить только тогда, когда система коллимирования камеры находится на своем месте.

12. Связь между рентгеновской трубкой и коллиматором дифрактометра, камеры или другого аксессуара должна предотвращать вытекание рентгеновских лучей из муфты.

13. Защитные блокировки не должны использоваться для деактивации рентгеновского луча, за исключением чрезвычайной ситуации или во время тестирования системы блокировки. Если блокировочная система отключает рентгеновский луч, возобновить работу невозможен без сброса переключателя «ON» пульта на панели управления.

14. Все предохранительные устройства (блокировки, жалюзи, сигнальные лампы и т. Д.) Должны периодически проверяться, чтобы обеспечить их надлежащую работу. Эти тесты должны проводиться не реже одного раза в месяц. Записи таких тестов должны быть сохранены.

15. Все отверстия в головке проводов, которые не используются, должны быть запечатаны в закрытом положении таким образом, чтобы предотвратить случайное открытие. Покрытия для портов должны обеспечивать такую же степень защиты, как требуется от корпуса трубки (см. Пункт 14).

16. Следует использовать постоянное экранирование, предпочитая временную защиту. Комментарий: свинцовую фольгу следует использовать осторожно, так как она легко искажается и может допускать утечку радиации.

17. Рентгеновская дифракция и спектрографическое оборудование должны быть помещены в комнату отдельно от других рабочих мест, когда это возможно.

6.2 Экологическая безопасность.

6.2.1 Анализ влияния объекта и процесса исследования на окружающую среду.

При выполнении работы возможно воздействие следующих опасных производственных факторов:

1. Загрязнение окружающей среды, вызванное утечкой электромагнитного излучения;

2. Загрязнение окружающей среды от экспериментальных отходов

3. Взрыв, вызванный высокими температурами

Влияние электрического напряжения на человека связано с протекающим через него током. Прохождение тока может вызвать раздражение и повреждение различных органов у человека. Порог невозбуждающего тока составляет 50 Гц (6-16 мА). Защита от воздействия электрического тока осуществляется посредством организационных, инженерных и медицинских и профилактических мероприятий.

Индивидуальные основные изоляционные средства защиты от электропитания могут выдерживать рабочее напряжение электроустановок в течение длительного времени.

Цель защитного отключения - обеспечить электробезопасность, которая достигается путем ограничения времени воздействия опасного тока на человека. Защита осуществляется специальным защитным устройством (УЗО), которое, работая в режиме ожидания, постоянно контролирует условия травмы человека электрическим током. В электротехнике заземление используется для снижения напряжения касания до безопасного значения для людей и животных.

При работе на установке используются баллоны с аргоном и азотом. Работа баллонов связана с рядом опасных факторов. Цилиндр, заполненный сжатым газом, имеет высокую температуру, и если в нем образуются дырки, газ выходит из него с критической скоростью.

6.2.2 Обоснование мероприятий по защите окружающей среды.

В этой работе отходы представляют собой металлические порошки, полученные в результате очистки камеры и других компонентов установки.

Использование металлических отходов состоит из нескольких технологических операций, в том числе:

1. проверка металлических отходов (в том числе дозиметрических);
2. отделение отходов черных металлов от отходов цветных металлов;
3. Разделение различных неметаллических примесей;

4. окончательный контроль отходов;
5. обработка.

Не открывайте крышку нагретой духовкой, не прикасайтесь к камере или не одевайте одежду, чтобы избежать термических ожогов при работе с установкой, в которой размещен образец. Работа с контроллером газовой реакции должна проводиться в чистой комнате, свободной от пыли, паров, кислот и щелочей, агрессивных газов и других вредных примесей, что вызывает коррозию. Недопустимо иметь открытый огонь рядом с прибором.

Исследовательские проекты могут включать частые модификации аналитического рентгеновского оборудования, и часто возникает связанное с этим увеличение потенциальной радиационной опасности. Для охраны окружающей среды, возникающими на таких машинах, необходимы специальные усилия:

(a) Обследование радиационной защиты должно производиться непрерывно и должно производиться после каждой модификации устройства.

(b) Операторы оборудования должны носить устройства для контроля излучения, предпочтительно пальцев или запястья.

6.3 Безопасность в чрезвычайных ситуациях.

6.3.1 Анализ вероятных ЧС, которые может возникнуть в лаборатории и инициировать объект исследований.

Чрезвычайная ситуация представляет собой ситуацию в той или иной области, которая возникла в результате аварии, опасного природного явления, катастрофы, стихийного или иного бедствия, которое может привести к гибели людей, нанесению ущерба здоровью человека или окружающей среде, значительные материальные потери и уничтожение средств существования людей.

Рассмотрим две наиболее распространенные чрезвычайные ситуации, которые могут возникнуть на предприятии.

Первый случай: прекращение производства в результате сильных морозов.

Второй случай: искусственное разрушение.

Третий случай: внезапная утечка радиоактивного материала

6.3.2 Обоснование мероприятий по предотвращению ЧС и разработка порядка действия в случае возникновения ЧС.

1. Повышение устойчивости системы электроснабжения. Прежде всего, целесообразно заменить воздушные линии электропередачи кабельными (подземными) сетями, использовать резервные сети для потребителей электроэнергии, обеспечить резервные источники питания объекта (мобильные электрогенераторы).

2. Обеспечение стабильности теплоснабжения, системного звонка, углубления теплотрасс.

3. Обеспечение устойчивости системы водоотведения. Повышение устойчивости канализационной системы путем создания резервной сети трубопроводов, через которую загрязненная вода может быть отведена в случае отказа основной сети. Необходимо разработать схему аварийного сброса сточных вод непосредственно в водоемы. Насосы, используемые для откачки загрязненной воды, держа надежные источниками питания.

4. Установить предупредительные системы безопасности для несанкционированного доступа к предприятию в нерабочее время.

5. Письменные аварийные процедуры, касающиеся радиационной безопасности, устанавливаются для каждого объекта руководителем по защите от радиации и должны размещаться в удобном месте рядом с каждой рентгеновской дифракционной или спектрографической единицей. В них должны быть указаны номера телефонов врача и инспектора по радиационной защите и, как минимум, должны содержать инструкции для следующих действий, которые необходимо предпринять в случае известной или предполагаемой аварии, связанной с радиационным воздействием.

6. (a) Уведомление начальника радиационной защиты. (b) Организовать медицинское обследование, не забудьте уведомить обследующего врача, что может произойти облучение рентгеновскими лучами с низкой энергией.

7. Если по какой-либо причине временно необходимо изменить предохранительные устройства, например, в обход блокировок или снятие экранирования, такое действие должно быть:

8. (a) указано в письменной форме, одобрено уполномоченным органом по радиации и размещено вблизи корпус рентгеновской трубки, чтобы другие люди знали о существующем состоянии машины. (b) Прекращено как можно скорее.

9. Для всех работников, участвующих в использовании рентгеновского оборудования с открытым пучком, требуется мониторинг персонала (предпочтительные палец или запястье).

10. Данные о контроле за персоналом должны сохраняться в качестве постоянной записи супервизором радиационной защиты и должны быть доступны для изучения всем соответствующим персоналом.

11. Создать маршруты аварийного эвакуации и разработать планы аварийного спасения.

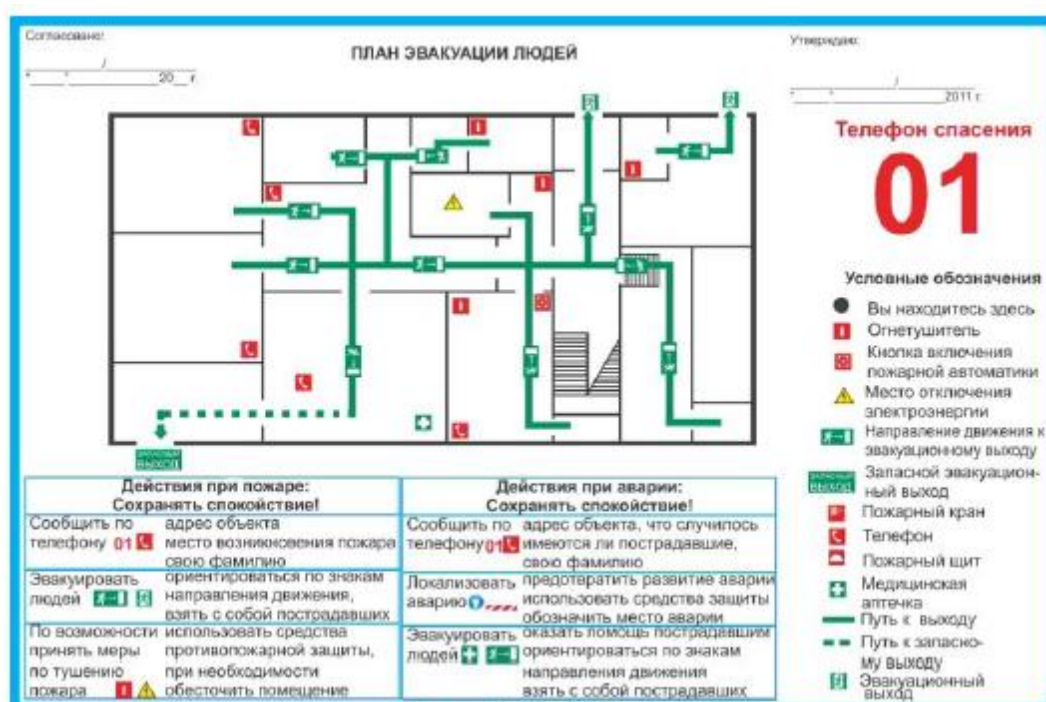


Рисунок 13 – План эвакуации людей

6.4 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности.

6.4.1 Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя) правовые нормы трудового законодательства.

Рассмотрение безопасности и гигиены труда при осуществлении работ по измерению с помощью установки дифрактометра Shimadzu XRD-7000S и автоматизированный комплекс GRC особенно важны при проведении данного исследования.

По данной теме рассматриваются законодательный и нормативные документы:

1. ГОСТ 12.1.006–84 ССБТ. Электромагнитные поля радиочастот. Общие требования безопасности.

2. ГОСТ 30494-96 Здания жилые и общественные помещения. Параметры микроклимата в помещении;

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

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

5. ГОСТ 12.1.003–2014 ССБТ. Шум. Общие требования безопасности.

6. ГОСТ 12.1.029-80 ССБТ. Средства и методы защиты от шума.

Классификация

7. ГОСТ Р 22.0.01-94. Безопасность в ЧС. Основные положения.

8. ГОСТ Р 22.3.03-94. Безопасность в ЧС. Защита населения.

Основные положения.

9. ГОСТ Р 22.0.07-95. Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Источники техногенных чрезвычайных ситуаций. Классификация и номенклатура поражающих факторов и их параметров.

6.4.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя.

Разработать хорошие меры в области радиационной безопасности

Существует несколько мер предосторожности, которые могут использовать операторы рентгеновского оборудования, чтобы уменьшить вероятность аварии на радиации. Тщательные лучевые обследования всегда должны выполняться на вновь установленном или модифицированном оборудовании. Кроме того, всегда должен находиться рядом с оборудованием измерительный прибор, так что случайные обследования могут выполняться часто.

Для каждого объекта лицо назначается ответственным за радиационную безопасность.

Только обученный персонал, одобренный руководителем радиационной защиты, должен иметь возможность устанавливать, переупаковывать или производить иные, чем обычные модификации рентгеновского генератора и корпуса трубки-аппарата.

Заключение

1. В диапазоне концентраций водорода от 0% до 0,137% в образцах идентифицирована только α - фаза титана. Параметры решетки α -Ti в данном случае имеют небольшой разброс значений. Это связано с дефектной структурой материала и внутренними напряжениями.
2. В диапазоне концентраций от 0,137% до 0,562%. выявлено резкое возрастание соотношения c/a в α титане, которое связано с искажениями кристаллической структуры и насыщением водородом. Дальнейшее увеличение концентрации водорода до 0,955% приводит к замедлению роста соотношения c/a в α титане, что связано с фазовым переходом α -Ti \rightarrow δ -TiH. Однако по результатам теоретического расчета параметры решетки α титана продолжают резко увеличиваться.
3. В диапазоне концентраций водорода от 0,669% до 0,955% наблюдается рост значений параметров решетки гидрида титана с увеличением концентрации водорода. Установлена корреляция между теоретическими и экспериментальными данными.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Технологические и эксплуатационные свойства титановых сплавов: учебное пособие / А. Г. Илларионов, А. А. Попов. – Екатеринбург : Изд-во Урал. ун-та, 2014. – 137 с.
2. Металлургия титана : учеб. пособие / В. А. Лебедев, Д. А. Рогожников – Екатеринбург : Издательство УМЦ УПИ, 2015. – 194 с.
3. Якименко Л.М. Электродные материалы в прикладной электрохимии — М.: Химия, 1977. — 264 с.
4. Causey R A. Tritium Barriers and Tritium Diffusion in Fusion Reactors Rion A. Causey, Richard A. Karnesky, Chris San Marchi[J].
5. Madina V, Azkarate I. Compatibility of materials with hydrogen. Particular case: Hydrogen embrittlement of titanium alloys[J]. International journal of hydrogen energy, 2009, 34(14): 5976-5980.
6. Нельсон Г. Г. Водородное охрупчивание. Охрупчивание конструкционных сталей и сплавов //М.: Metallurgy. – 1988. – С. 256-333.
7. Панин А. В. и др. Влияние водородной обработки на механическое поведение технического титана VT1-0, имеющего различное исходное структурное состояние //Физическая мезомеханика. – 2003. – Т. 6. – №. 5.
8. МОРОЗ Л. С., Хесин Ю. Д. Исследование механизма водородной хрупкости титана и его сплавов //Сб. Metallovedenie, Sudpromgiz. – 1959.
9. Колобов Ю. Р. и др. Влияние водородной обработки на механические свойства наноструктурированного титана. – 2015.
10. Гуляев А.П. Metallovedenie Издание 4 1963. –М.: Metallurgy, 1963.- 464с
11. Hydrogen migration and hydrogen-dislocation interaction in austenitic steels and titanium alloy in relation to hydrogen

embrittlement ;S.M.Teus,D.G.Savvakina,O.M.Ivasishin,V.G.Gavriljuk;23 July 2016

12. Методы исследования систем металл-водород: учебное пособие. Ю.П.Черданцев,И.П.Чернов,Ю.И.Тюрии,-Томск:Изд-во ТПУ,2008-286с.
13. Панин П. В., Дзунович Д. А., Алексеев Е. Б. Способы описания фазового состава титановых сплавов, дополнительно легированных водородом (обзор) //Труды ВИАМ. – 2015. – №. 3.
14. Cotterill, P.; The Hydrogen Embrittlement of Metals. Progress in Materials Science, Vol. 9, No. 4, 1961.
15. Лучинский Г.П. Химия титана-М.:Химия,1971.-471с.
16. Williams, D. N.; Hydrogen in Titanium and Titanium Alloys. TML Report No. 100, May 16, 1958.
17. Bonaccorsi L, Calabrese L, Pintaudi A, Proverbio E, Aliotta F, Ponterio R, et al. Reversible hydrogen absorption in a Ti-6Al-4V alloy produced by mechanical alloying. Int J Hydrogen Energy 2014;39:15540e8.
18. Lider AM, Larionov VV, Garanin GV, Krening MK. Ultrasonic testing for hydrogen for titanium-based materials and articles. Tech Phys 2013;58(9):1395e6.
19. Дергачев Ю. М. Абсорбция водорода переходными металлами //Неорганические материалы. – 2006. – Т. 42. – №. 2. – С. 147-150.
20. Gulbransen, E. A., and Andrew, K. F.; Kinetics of the Reactions of Titanium with Oxygen, Nitrogen, and Hydrogen. Trans. Am. Inst. Mining Met. Engrs., Vol. 185, 1949, p. 741.
21. Williams, D. N., Schwartzberg, F. R., Wilson, P. R., Albrecht, W. M., Mallett, M. W., and Jaffee, R. I.; "Hydrogen Contamination in Titanium and Titanium Alloys. Part IV. The Effect of Hydrogen on the Mechanical Properties and Control of Hydrogen in Titanium Alloys ," report from Battell e Memorial Institute to Wright Air Development Center, Contract No. AF 33(616)-2813, March, 1957.

-
22. Шаркеев Ю. П. и др. Структура и механические свойства наноструктурного титана после дорекристаллизационных отжигов //Физическая мезомеханика. – 2005. – Т. 8. – №. 5.
 23. Бетехтин В. И. и др. Механические свойства, плотность и дефектная структура субмикроструктурного титана ВТ1-0, полученного после интенсивной пластической деформации при винтовой и продольной прокатках //Журнал технической физики. – 2011. – Т. 81. – №. 11. – С. 58-63.
 24. Kudiiarov V N, Gulidova L V, Pushilina N S, et al. Application of automated complex Gas Reaction Controller for hydrogen storage materials investigation[C]//Advanced Materials Research. Trans Tech Publications, 2013, 740: 690-693.
 25. Миркин Л. И. Рентгеноструктурный анализ. Индицирование рентгенограмм: справочное руководство. – Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1981.
 26. Massa W. Crystal structure determination[M]. Springer Science & Business Media, 2013.
 27. Валуев А. А., Норман Г. Э., Подлипчук В. Ю. Метод молекулярной динамики: теория и приложения //Математическое моделирование: Физико-химические свойства вещества. – 1989. – С. 5.
 28. Назаров А А, Мулюков Р Р. Атомистическое моделирование материалов, наноструктур и процессов нанотехнологии[J]. Уфа: РИО БашГУ, 2010.
 29. Товбин Ю. К. Метод молекулярной динамики в физической химии. – 1996.
 30. Plimpton S, Crozier P, Thompson A. LAMMPS-large-scale atomic/molecular massively parallel simulator[J]. Sandia National Laboratories, 2007, 18.

-
31. Malkin S, Guo C. Grinding technology: theory and application of machining with abrasives[M]. Industrial Press Inc., 2008.
 32. Биронт В.С. Теория термической обработки металлов. - Отжиг: Учеб. пособие / СФУ: ИЦМиЗ. – Красноярск, 2007. – 234 с.
 33. Plimpton S. LAMMPS user's manual[J]. Sandia National Laboratory, 2005.
 34. Parks M L, Seleson P, Plimpton S J, et al. Peridynamics with LAMMPS: A User Guide, v0. 3 Beta[J]. Sandia Report (2011–8253), 2011.
 35. Китайгородский А. И. Рентгеноструктурный анализ мелкокристаллических и аморфных тел. – Рипол Классик, 2013.