



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

Инженерная школа ядерных технологий
Направление подготовки 03.03.02 Физика
ООП/ОПОП Физика
Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА БАКАЛАВРА

Тема работы
Влияние примеси титана на взаимодействие водорода с магнием: расчеты из первых принципов УДК 669.295:669.788

Обучающийся

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б95	Лян Синьюй		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОЭФ	Святкин Л.А.	к.ф.-м.н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Верховская М.В.	к.э.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Сечин А.И.	д.т.н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП/ОПОП, должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Заведующий кафедрой - руководитель отделения на правах кафедры	Лидер А.М.	д.т.н., профессор		

Томск – 2023 г.

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОСВОЕНИЯ ООП/ОПОП

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

	информационно-коммуникационных технологий и с учетом основных требований информационной безопасности.
ОПК(У)-7	Способен использовать в своей профессиональной деятельности знание иностранного языка.
ОПК(У)-8	Способен критически переосмысливать накопленный опыт, изменять при необходимости направление своей деятельности.
ОПК(У)-9	Способен получить организационно-управленческие навыки при работе в научных группах и других малых коллективах исполнителей.
Профессиональные компетенции	
ПК(У)-1	Способностью использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин
ПК(У)-2	Способностью проводить научные исследования в избранной области экспериментальных и (или) теоретических физических исследований с помощью современной приборной базы (в том числе сложного физического оборудования) и информационных технологий с учетом отечественного и зарубежного опыта
ПК(У)-3	Готовность применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований
ПК(У)-4	Способность применять на практике профессиональные знания и умения, полученные при освоении профильных физических дисциплин
ПК(У)-5	Способность пользоваться современными методами обработки, анализа и синтеза физической информации в избранной области физических исследований
ПК(У)-6	Способность понимать и использовать на практике теоретические основы организации и планирования физических исследований
ПК(У)-7	Способность участвовать в подготовке и составлении научной документации по установленной форме
ПК(У)-8	Способность понимать и применять на практике методы управления в сфере природопользования



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

Инженерная школа ядерных технологий
Направление подготовки (ООП/ОПОП) 03.03.02 Физика
Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

УТВЕРЖДАЮ:
Руководитель ООП/ОПОП
_____ Лидер А.М.
(Подпись) (Дата) (ФИО)

**ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы**

Обучающийся:

Группа	ФИО
150Б95	Лян Синьуй

Тема работы:

Влияние примеси титана на взаимодействие водорода с магнием: расчеты из первых принципов	
<i>Утверждена приказом директора (дата, номер)</i>	№ 31-7/с от 31.01.2023

Срок сдачи обучающимся выполненной работы:	06.06.2023
--	------------

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p>Исходные данные к работе (наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к функционированию (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.)</p>	<p>Примесь титана в гидриде магния. Связь магний-водород и титан-водород.</p>
<p>Перечень разделов пояснительной записки подлежащих исследованию, проектированию и разработке (аналитический обзор литературных источников с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе)</p>	<p>Провести обзор литературы о структуре и применении магния и его гидрида. Ознакомиться с теорией функционала электронной плотности и основными приближениями и методами, используемыми в расчетах из первых принципов атомной и электронной структур кристаллов. Вычислить и сравнить параметры решетки в чистом гидриде магния и в гидриде магния с титаном. Вычислить и сравнить энергию связи водорода в чистом гидриде магния и в гидриде магния с титаном. Установить влияния взаимного</p>

	<p>расположения атомов водорода и титана на энергию связи водорода.</p> <p>Определить влияние примесей титана на распределение валентной электронной плотности в гидриде магния.</p> <p>Выявить особенности взаимодействия водорода с примесью титана в гидриде магния.</p> <p>Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение.</p> <p>Социальная ответственность.</p>
Перечень графического материала <i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i>	
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы <i>(с указанием разделов)</i>	
Раздел	Консультант
Социальная ответственность	Сечин А.И.
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Верховская М.В.
Названия разделов, которые должны быть написаны на иностранном языке:	

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

Задание выдал руководитель / консультант (при наличии):

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОЭФ	Святкин Л.А.	К.ф.-М.Н.		

Задание принял к исполнению обучающийся:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б95	Лян Синьюй		

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

Инженерная школа ядерных технологий
 Направление подготовки (ООП/ОПОП) 03.03.02 Физика
 Уровень образования бакалавриат
 Отделение школы (НОЦ) отделение экспериментальной физики
 Период выполнения _____ (осенний / весенний семестр 2022/2023 учебного года)

КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН выполнения выпускной квалификационной работы

Обучающийся:

Группа	ФИО
150Б95	Лян Синьей

Тема работы:

Влияние примеси титана на взаимодействие водорода с магнием: расчеты из первых принципов
--

Срок сдачи обучающимся выполненной работы:	06.06.2023
--	------------

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
18.11.2022	Провести обзор литературы о структуре и применении магния и его гидрида.	15
16.12.2022	Ознакомиться с теорией функционала электронной плотности и основными приближениями и методами, используемыми в расчетах из первых принципов атомной и электронной структур кристаллов.	15
25.12.2022	Вычислить и сравнить параметры решетки в чистом гидриде магния и в гидриде магния с титаном.	5
10.03.2023	Вычислить и сравнить энергию связи водорода в чистом гидриде магния и в гидриде магния с титаном. Установить влияния взаимного расположения атомов водорода и титана на энергию связи водорода.	10
12.05.2023	Определить влияние примесей титана на распределение валентной электронной плотности в гидриде магния.	10
19.05.2023	Выявить особенности взаимодействия водорода с примесью титана в гидриде магния.	10
06.06.2023	Социальная ответственность	15
06.06.2023	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	15
06.06.2023	Заключение	5

СОСТАВИЛ:

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОЭФ	Святкин Л.А.	к.ф.-м.н.		

Консультант (при наличии)

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата

СОГЛАСОВАНО:**Руководитель ООП/ОПОП**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Заведующий кафедрой - руководитель отделения на правах кафедры	Лидер А.М.	д.т.н., профессор		

Обучающийся

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б95	Лян Синьюй		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 101 с., 11 рис., 24 табл., 88 источников.

Ключевые слова: расчеты из первых принципов, гидрид магния, титан, энергия связи водорода, электронная плотность.

Объектом исследования является: связь Mg-H в гидриде магния с примесью титана.

Цель работы – установление на основе расчетов из первых принципов особенностей влияния примеси титана на характер взаимодействия водорода с магнием в гидриде магния.

В процессе исследования проводились: выбор параметров расчета и построение расчетных моделей для магния, гидрида магния и гидрида магния с примесью титана. Расчет энергий связи водорода, параметров решеток и распределения электронной плотности в каждой рассмотренной системе.

В результате исследования выявлено, что добавление примеси титана в гидрид магния значительно снижает энергию связи Mg-H.

Основные конструктивные, технологические и технико-эксплуатационные характеристики: системы $Mg_{16-x}Ti_xH_{z-y}$ и $Mg_{16-x}Ti_xH_z$, где x представляет собой число атомов титана, y – число удаленных атомов водорода, а z – число атомов водорода в системе.

Степень внедрения: результаты представлены на XX международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Перспективы развития фундаментальных наук».

Область применения: твердый раствор магния с титаном может быть использован для изготовления перспективных материалов-накопителей водорода для хранения и транспортировки водорода в отрасли водородной энергетики.

Экономическая эффективность/значимость работы заключается в определении влияния примесей титана на энергию связи водорода в системах

Mg-H, что послужит руководством для изготовления материалов для хранения и транспортировки водорода в отрасли водородной энергетики.

В будущем планируется исследование влияния примесей титана на энергию связи водорода в твердом растворе водорода в магнии.

Содержение

ВВЕДЕНИЕ.....	13
1 ГИДРИД МАГНИЯ КАК ИСТОЧНИК ВОДОРОДА	15
1.1 Преимущества и проблемы водородной энергетики.....	15
1.2 Преимущества и проблемы применения Mg и MgH ₂	16
1.3 Наноструктуры	16
1.4 Наноконфигурация Mg/MgH ₂	18
1.5 Каталитические добавки в MgH ₂	19
1.5.1 Металлические сплавы	19
1.5.2 Соединения металлов	19
1.5.3 Композиты из металла и углерода	21
1.5.4 Примеси металлов.....	21
2 ОСНОВНЫЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ И МЕТОДЫ.....	23
2.1 Основные приближения	23
2.1.1 Адиабатическое приближение.....	24
2.1.2 Одноэлектронное приближение	24
2.1.3 Зонное приближение.....	25
2.2 Метод псевдопотенциала.....	26
2.3 Процедура самосогласования электронной плотности.....	27
3 ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ Ti И H В ГИДРИДЕ МАГНИЯ	31
3.1 Влияние параметров расчета на полную энергию и параметры решетки	31
3.2 Особенности взаимодействия водорода с примесью титана в гидриде магния.....	35
4 ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ.....	45
4.1 Потенциальные потребители результатов исследования	46

4.2 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научного исследования с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.....	48
4.2.1 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.....	48
4.2.2 SWOT – анализ	50
4.3 Планирование научно-технического исследования	53
4.3.1 Определение трудоемкости выполнения работ	54
4.4 Бюджет научного исследования	58
4.4.1 Расчет материальных затрат НТИ	58
4.4.2 Расчет затрат на специальное оборудование для научных работ.....	59
4.4.3 Основная заработная плата исполнителей темы	59
4.4.4 Дополнительная заработная плата	61
4.4.5 Отчисления во внебюджетные фонды	62
4.4.6 Расчет затрат на электроэнергию	62
4.4.7 Расчет затрат на научные и производственные командировки и накладные расходы	63
4.4.8 Формирование бюджета затрат НТИ	63
4.5 Ресурсоэффективность	64
4.6 Выводы по главе «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение».....	66
5 СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ.....	68
5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	71
5.2 Производственная безопасность	73
5.2.1 Анализ условий труда на рабочем месте.....	75
5.2.2 Анализ показателей микроклимата.....	76
5.2.3 Анализ показателей шума и вибрации.....	78
5.2.4 Анализ освещенности рабочей зоны.....	79
5.2.5 Анализ электробезопасности	83

5.2.6 Анализ пожарной безопасности	83
5.3 Экологическая безопасность.....	85
5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....	86
5.5 Выводы по главе «Социальная ответственность»	88
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	90
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	92

ВВЕДЕНИЕ

Данная работа посвящена исследованию атомной и электронной структур гидрида магния с примесью титана. Актуальность темы заключается в том, что экономическое развитие в значительной степени зависит от энергоресурсов, которые являются важной материальной основой для развития общества, поэтому развитие экологически чистой энергетики имеет важное значение. Водород обладает уникальным преимуществом во многих экологически чистых источниках энергии. Однако сейчас при использовании водорода в качестве топлива необходимо решить ряд технологических проблем, связанных с его хранением и транспортировкой [1]. Металлические гидриды, являющиеся эффективным источником водорода, всегда были предметом пристального внимания. Емкость хранения водорода для гидрида магния относительно высока [2]. Кроме того, магний широко распространён в природе, и его стоимость невелика. Активное взаимодействие магния и различных газов является неизбежной проблемой в применении материалов на основе магния в процессе их плавки, подготовки, переработки, транспортировки и применения, однако, несмотря на это есть надежда, что в будущем магний может стать основой для разработки промышленных источников водорода [3]. Примесь металлов может оказывать заметное влияние на адсорбционные свойства магния по отношению к водороду. Способность гидрида магния поглощать и выделять водород может быть повышена с помощью проектирования композитных систем [4]. Характер взаимодействия между примесными атомами металлов и атомами водорода в гидриде магния остается не до конца изученным. В практическом коммерческом применении необходимо также решить проблемы, связанные с снижением температуры десорбции водорода из гидрида магния, повышением гидродинамических свойств всасывания и др.

Целью работы является установление на основе расчетов из первых принципов особенностей влияния примеси титана на характер взаимодействия водорода с магнием в гидриде магния.

Для достижения поставленной цели требуется решить ряд задач:

1. Провести обзор литературы о структуре и применении магния и его гидрида.
2. Ознакомиться с теорией функционала электронной плотности и основными приближениями и методами, используемыми в расчетах из первых принципов атомной и электронной структур кристаллов.
3. Вычислить и сравнить параметры решетки в чистом гидриде магния и в гидриде магния с титаном.
4. Вычислить и сравнить энергию связи водорода в чистом гидриде магния и в гидриде магния с титаном. Установить влияния взаимного расположения атомов водорода и титана на энергию связи водорода.
5. Определить влияние примесей титана на распределение валентной электронной плотности в гидриде магния.
6. Выявить особенности взаимодействия водорода с примесью титана в гидриде магния.

1 ГИДРИД МАГНИЯ КАК ИСТОЧНИК ВОДОРОДА

1.1 Преимущества и проблемы водородной энергетики

Проблемы водородной энергетики являются актуальными задачами различных исследований в последние годы. С одной стороны, водородная энергетика может рассматриваться как одна из наиболее перспективных чистых и экологичных энергетических систем, с практически нулевым уровнем выбросов [5,6]. С другой стороны, водорода очень много, и водород является самым распространенным элементом во Вселенной и может быть получен различными электрохимическими и биологическими методами [7,8].

Водород сжигается для получения воды, которая имеет гораздо более высокую плотность энергии, чем бензин [9]. Химическая энергия водорода приблизительно в три раза выше, чем у нефтяных топлив, таких как бензин, керосин и дизельное топливо (водород – 141,79 МДж/кг, бензин – 45,58 МДж/кг, керосин – 45,42 МДж/кг, дизельное топливо – 45,00 МДж/кг) [10]. Технология производства водорода также совершенствуется, но вопрос о том, как безопасно и эффективно хранить водород, требует решения [11,12]. Основной недостаток хранения водорода связан с более низкой объемной плотностью водорода [13,14]. По сравнению с газообразным и жидким состоянием хранения водорода, физическая или химическая комбинация системы хранения водорода в твердом состоянии является эффективным способом безопасного хранения водорода [15], твердые металлические соединения могут хранить большое количество водорода, и этот метод имеет низкую себестоимость [12].

Накопление водорода в твердых материалах можно разделить на физисорбцию и хемосорбцию [15]. На больших поверхностях и в пористых материалах молекулы водорода адсорбируются на поверхностях и в порах путем физисорбции под действием ван-дер-ваальсовых взаимодействий [16,17]. Хемосорбция происходит в гидридах металлов, где атомы водорода химически связаны с металлами [18,19]. Но существует проблема слишком

большого веса материалов-накопителей водорода для их применения в промышленных масштабах.

Исследование емкости хранения легких твердых материалов стало важной областью задач водородной энергетики. Выбор материалов, которые могут отвечать требованиям высокой емкости хранения водорода и в то же время обладать такими преимуществами, как низкая стоимость, малый вес и высокая плотность энергии, имеет первостепенное значение.

1.2 Преимущества и проблемы применения Mg и MgH₂

Среди различных элементов магний (Mg) можно считать наиболее перспективным материалом для хранения водорода благодаря его широкой распространенности на Земле, малой плотности и высокой объемной водородной емкости [20].

Магний является одним из наиболее эффективных металлов для хранения водорода в различных формах гидридов металлов, таких как интерметаллические гидриды (Mg₂NiH_x), комплексные гидриды (Mg(AlH₄)₂, Mg(BH₄)₂) и элементарный гидрид (MgH₂). Среди вышеперечисленных систем элементарный гидрид имеет преимущество в виде более высокой объемной емкости (110 водорода·л⁻¹) [20-22]. MgH₂ обладает высокой гравиметрической водородной емкостью – 7,6 весовых процентов, отличной обратимостью де-/регидрогенизации [24-26].

Однако применение гидрида магния для хранения и транспортировки водорода имеет ряд ограничений: (1) для выделения водорода требуется высокая температура; (2) медленная диффузия водорода в процессе дегидрирования гидрида магния [23] и низкая кинетика сорбции водорода (как поглощения, так и десорбции) [20].

1.3 Наноструктуры

Было показано, что для магнийсодержащих материалов для хранения водорода механическое измельчение [27] является эффективным способом

активации магния или улучшения их сорбционных свойств за счет изменения микроструктуры [28] или уменьшения размера частиц [29-31]. Образование частиц меньшего размера с дефектами и трещинами приводит к улучшению кинетики сорбции водорода [30]. Наноструктурирование традиционно достигается путем высокоэнергетического шарового размола.

Было отмечено, что метод шарового размола является экономически эффективным процессом, применяемым к гидридам металлов для получения хороших свойств поверхности [32]. Согласно работе [33], было доказано, что наноструктурирование улучшает термическую и механическую стабильность, кинетику сорбции водорода и термодинамические свойства.

В работе [34] было указано, что одним из самых распространенных методов повышения сорбции водорода гидридом магния является высокоэнергетический шаровой помол. Были синтезированы наноструктурный композит гидрида магния и мишметалла из гидрида магния плюс 6 и 10 масс.% мишметалла путем шарового размола в разное время. Сообщается, что шаровой помол был эффективен для получения наноструктурированного композита с увеличенной свободной поверхностью, уменьшенным размером зерен, увеличенными границами зерен, пористой структурой поверхности с высокими активными участками для адсорбции и десорбции водорода, микродеформациями и дефектами, образованными на поверхности и внутри кристаллов и зерен гидрида магния и мишметалла. Эти дефекты облегчили диффузию водорода в материал, уменьшив энергию активации диффузии, а измененная структура и уменьшенные размеры кристаллитов улучшили кинетику и значительно повлияли на сорбционные свойства водорода. Наноструктурированные поверхностные слои способствуют диссоциации водорода за счет легкого обмена электронами с молекулами водорода, и, следовательно, повышают скорость поглощения водорода [35].

1.4 Наноконфигурация Mg/MgH₂

В последнее время новый метод наноконфинирования привлекает все больший интерес в области хранения энергии для получения наноматериалов и уже применяется на различных металлгидридных системах. Наноконфинирование может быть достигнуто путем сжатия активного материала в пористых структурах, которые являются легкими для обеспечения гравиметрической емкости хранения водорода, с очень высокой площадью поверхности/пористостью для обеспечения высокой диффузии водорода, неактивными для предотвращения ненужных химических реакций, дешевыми и простыми в производстве. Такие структуры могут быть созданы на основе углерода и упорядоченного мезопористого кремния [35].

Благодаря уникальной электрической природе углерода и сильному взаимодействию C–H, материалы на основе углерода оказывают сильное каталитическое влияние на гидриды легких металлов либо за счет наноразмерности, либо за счет тесного контакта с углеродными наноструктурами [36-39]. Также было отмечено, что углеродный каркас не только обеспечивает краевые активные сточки зрения взаимодействия участки для атомов водорода в системе MgH₂, но и препятствует спеканию и росту наночастиц MgH₂ [40].

В работах [33,41] сообщалось о преимуществах наноконфигурации, включая теплоперенос/механическую стабильность, улучшение кинетики сорбции водорода, термодинамических свойств и обратимости. В обзоре [42] отметили, что наноконфинирование играет активную роль в сборе отдельных наночастиц для модельных исследований процессов поглощения водорода материалами. Таким образом, наноконфигурация материалов для хранения водорода с помощью пористых структур может значительно улучшить кинетические и термодинамические свойства материалов накопителей водорода.

1.5 Каталитические добавки в MgH₂

Высокая энергия активации и низкая кинетика десорбции водорода при практических температурах для чистого материала побудили ряд исследований, направленных на поиск различных добавок для улучшения сорбционных свойств магния. Ниже представлен текущий статус исследований по добавлению катализаторов к гидриду магния и обсуждается влияние каталитических добавок на энергию активации, кинетику и термодинамику гидрида магния.

1.5.1 Металлические сплавы

В работе [43] сплав Ti_{0.4}Cr_{0.15}Mn_{0.15}V_{0.3} с ОЦК решеткой в слиточном, закаленном и гидрогенизированном состояниях, подвергался шаровой обработке в течение различного времени. Было обнаружено, что гидрогенизированный ОЦК сплав был лучшим катализатором для десорбции водорода из MgH₂ по сравнению с закаленным сплавом, который, в свою очередь, был лучше, чем слитковый сплав.

Также MgH₂ измельчали с 10 мас.% TiVCr в атмосфере аргона [44]. Были проведены *in situ* XRD эксперименты по десорбции и абсорбции. Было замечено, что TiVCr претерпевает быстрое изменение объема одновременно с поглощением или десорбцией основного материала, что свидетельствует о совместном действии добавки и Mg/MgH₂.

1.5.2 Соединения металлов

Для оптимизации выбора подходящих добавок оксидов переходных металлов Бархордарян и другие [45] предложили четыре фактора, влияющих на эффективность добавки: (а) большое количество структурных дефектов в добавке, так как дефекты могут улучшить каталитическую активность добавки; (б) низкая термодинамическая стабильность; (в) металл в добавке должен иметь высокую валентность; (г) переходный металл должен иметь высокую энергию взаимодействия с водородом.

Sc_2O_3 , TiO_2 , V_2O_5 , Cr_2O_3 , Mn_2O_3 , Fe_3O_4 , CuO , Al_2O_3 и SiO_2 . были использованы для исследования оксидов металлов в качестве добавок к системе MgH_2 [46]. Гидрид магния измельчался в течение 20 ч перед добавлением добавок, и каждая добавка измельчалась с MgH_2 в течение 100 ч. Было обнаружено, что все оксиды улучшают кинетику сорбции: Cr_2O_3 был наиболее эффективен для поглощения, а V_2O_5 и Fe_3O_4 были наиболее эффективны для десорбции, причем все образцы десорбировались за 5 минут при 300 °С. MgH_2 измельчали также с Cr_2O_3 , TiO_2 , Fe_3O_4 , Fe_2O_3 , In_2O_3 и ZnO в течение 20 ч [47]. Оксиды железа улучшали десорбционные свойства, не оказывая значительного влияния на абсорбционные свойства. Индий и цинк были либо неэффективны, либо давали худшие результаты, чем измельченный MgH_2 без добавок. Как Cr_2O_3 , так и TiO_2 дали лучшие кинетические результаты, причем эти два вещества давали схожие результаты при десорбции водорода, а Cr_2O_3 – для абсорбции. Измерения энтальпии новых систем показали, что даже при значительном улучшении кинетики сорбции водорода, энтальпия не отличается от энтальпии недопированного MgH_2 .

Помимо этого также изучались сорбционные свойства MgH_2 , предварительно измельченного в течение 20 часов, а затем измельченного с 2 мол.% наноразмерного Ti , TiB_2 , TiC , TiN и TiO_2 в течение 30 минут [48]. Сравнение проводилось с 1 мол.% Nb_2O_5 . Кинетика поглощения всех образцов с соединениями Ti была схожей: полное поглощение водорода образцами при температуре 300 °С и давлении 50 бар происходило примерно за 20 с. Ранее было установлено, что TiO_2 улучшает поглощение за счет усиленной диссоциации водорода, в то время как десорбция улучшается за счет того, что оксид обеспечивает диффузионный путь для атомарного водорода [49]. Используя совместно рентгеновскую и нейтронную дифракцию, была подтверждена роль TiO_2 как эффективного ограничителя роста зерен и ускорителя диффузии водорода [50].

1.5.3 Композиты из металла и углерода

В работе [51] SiC был объединен с Ni. При 5 масс.% SiC и 10 масс.% Ni кинетика абсорбции при 300 °С под давлением водорода 30 бар была улучшена при комбинированной добавке по сравнению с добавкой только SiC. Аналогичные результаты были получены для десорбции водорода при 300 °С под давлением 0,1 бар. Было установлено, что лимитирующим фактором десорбции водорода является объемное зарождение и рост Mg, а не поверхностная рекомбинация водорода.

Была определена температура десорбции водорода из MgH₂, измельченного с 5 мас. % V, Nb, Ti и графита в течение 2 ч [52]. Добавки V, Nb, Ti были полностью преобразованы в соответствующие гидриды, причем Ti был наиболее эффективным.

В работе [53] были исследованы MgH₂ с 5 мас.% TiO₂, полученных в результате шарового измельчения в течение 10 часов и последующей добавкой 5 масс.% расширенного природного графита и прессования смеси в гранулы. Наблюдалась улучшенная кинетика полученной смеси с хорошей циклической стабильностью по сравнению с чистым гидридом магния.

1.5.4 Примеси металлов

В работе [54] измельчали в шаровой мельнице 5 мол.% Ti, V, Mn, Fe и Ni с MgH₂ в течение 20 часов, чтобы исследовать кинетику и термодинамику смесей. Было замечено, что время десорбции заметно уменьшалось при использовании V как наиболее эффективной добавки, но энтальпия и энтропия оставались неизменными.

Была также получена смесь MgH₂ и 0,1 мол.% TiH₂ измельчением в шаровой мельнице в течение 4 часов под давлением 138 бар водорода, в которой удалось добиться равномерного распределения TiH₂ на частицах MgH₂ размером 5-10 нм. Дальнейшие исследования этой смеси показали улучшение кинетики десорбции водорода и снижение энтальпии и энтропии по сравнению с чистым MgH₂ [55]. Исследование различных каталитических

эффектов примесей Ti и Fe было проведено в работе [56]. Было установлено, что добавка Fe улучшает кинетику, катализируя диссоциацию/рекомбинацию водорода, а добавка Ti (в виде TiH) подавляет рост зерен. Обе добавки не изменяли термодинамические характеристики MgH_2 .

В качестве катализаторов в MgH_2 использовались 5 масс.% наноразмерного никеля и субмикронные порошки никеля [57]. Несмотря на улучшение кинетики сорбции водорода, энтальпийные измерения показали отсутствие изменений в отношении высокой энтальпии MgH_2 .

В работе [58] было показано, что гидриды металлов на основе Mg, такие как системы Mg–Fe и Mg–Co, представляют особый интерес и заслуживают изучения из-за относительно высокой плотности энергии этих систем, а также благоприятного кинетического поведения.

В [59] было указано, что интерметаллические сплавы на основе Ti оказывают значительное влияние на улучшение кинетики дегидрирования и гидрирования гидроксида магния и, в частности, что гидрид магния, допированный $TiMn_2$, демонстрирует значительно улучшенную кинетику гидрирования при комнатной температуре.

2 ОСНОВНЫЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ И МЕТОДЫ

2.1 Основные приближения

Твердое тело – это макроскопическая система, в которой микроскопические взаимодействия частиц являются сложными, поэтому для расчета волновой функции твердого тела необходимо сделать некоторые допущения для упрощения вычислений [60]. Учитывая, что электроны могут взаимодействовать с ядром и что электроны могут взаимодействовать друг с другом полный гамильтониан этой системы может быть записан как:

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

где через \hat{T}_e и \hat{T}_L обозначены операторы кинетической энергии электронов и атомных ядер, слагаемые \hat{V}_{ee} , \hat{V}_{eL} и \hat{V}_{LL} описывают соответственно взаимодействия электронов друг с другом, электронов с ядрами и ядер между собой. Каждое из этих слагаемых запишем в следующем виде:

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

где индексы i, j и I, J относятся, соответственно, к электронам и ядрам, через Z обозначен заряд ядра; e – заряд электрона. Заметим, что выражения (2.2) записаны в нерелятивистской форме и не учитывают наличие спина у электрона и связанные с этим взаимодействия.

В уравнении Шредингера:

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

где $\{\vec{R}\}$ и $\{\vec{r}\}$ – совокупности пространственных и спиновых координат всех ядер и электронов; \hat{H}_t – гамильтониан (1.1), волновая функция связана с координатами всех ядер и электронов в системе, поэтому решение уравнения громоздко, а использование приближений просто необходимо для упрощения проблемы поиска собственных значений и собственных функций электронов в кристалле.

2.1.1 Адиабатическое приближение

Компонентами твердой системы являются положительно заряженное ядро и отрицательно заряженный электрон. Масса электрона намного меньше массы ядра, а скорость электрона намного больше скорости ядра. Можно предположить, что ядро движется очень медленно, когда электрон находится в движении, и что ядро находится в относительном покое. Такое предположение известно как адиабатическое приближение (приближение Борна-Оппенгеймера) [61], и тогда уравнение (2.3) можно разбить на две взаимосвязанные задачи на собственные значения для электрона и ядра, с собственными функциями:

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

Дальнейший вывод дает следующие два уравнения

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

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

где индекс n обозначает набор квантовых чисел, описывающих состояния электронов, а индекс v набор квантовых чисел, описывающих состояния системы ядер.

Состояние атомного ядра в кристалле можно понимать как вибрацию решетки, и проблема сводится к двум взаимосвязанным проблемам – описание электронных состояний и вибраций решетки.

2.1.2 Одноэлектронное приближение

Задача нахождения собственных значений и функций электронов в кристалле через решение уравнения (2.5) является все еще сложной. Уравнение может быть упрощено с помощью одноэлектронного приближения путем рассмотрения обобщенной теории электронной плотности, которая основана на модели Томаса-Ферми [62], согласно которой энергия атома выражается как кинетическая энергия и потенциальная энергия электрон-ядерного взаимодействия, где и кинетическая и потенциальная энергия

выражаются как функции электронной плотности, Поль Дирак [63] рассматривал больше обменных взаимодействий, но применение не было идеальным, и, наконец, теорема Хоэнберга-Козна [64] дает достоверные результаты.

Центральной идеей является использование распределений плотности электронов вместо волновых функций многих тел:

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

Рассмотрим любую систему взаимодействующих электронов во внешнем потенциале, потенциал которого однозначно определяется как константа функции электронной плотности основного состояния. Все свойства системы определяются исключительно электронной плотностью основного состояния.

Точная форма функционала энергии в зависимости от электронной плотности не известна, но она может быть найдена с помощью интерполяционных формул и параметризаций [65]. Поэтому важно найти потенциалы, решив проблему методом самосогласования электронной плотности и кристаллического потенциала.

2.1.3 Зонное приближение

В уравнении Шредингера самосогласованное решение задачи о нахождении одноэлектронной волновой функции остается сложным, поэтому используется зонное приближение, т.е. ищется решение уравнения Шредингера для периодического потенциала в рамках данного вида элементарных ячеек кристаллической решетки. Существует два эквивалентных способа вычисления приближенной волновой функции электрона: (1) разложить желаемую волновую функцию по полной системе функций типа Блоховских, причем функция Блоха определяется теоремой Блоха [66], а затем определить коэффициент разложения (желаемая функция должна удовлетворять соответствующему уравнению Шредингера); (2) разложить волновую функцию электронов в решетке по полной системе

функций в ячейке, удовлетворяющей уравнению Шредингера, а затем найти коэффициент расширения, при этом искомая функция должна удовлетворять соответствующим граничным условиям.

2.2 Метод псевдопотенциала

Основная идея псевдопотенциального подхода заключается в введении слабого псевдопотенциала. Этот потенциал отличается от реального потенциала кристалла и позволяет использовать теорию возмущений. В общем случае вводится следующая волновая функция:

$$\tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} C_{\vec{k}+\vec{G}} e^{i(\vec{k}+\vec{G})\cdot\vec{r}} = \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) + \sum_c \psi_{\vec{k}}^c(\vec{r}) \int \tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}^{c*}(\vec{r}) d^3\vec{r}, \quad (2.8)$$

если подставить уравнение (2.8) в стационарное уравнение Шредингера, то новое уравнение будет выглядеть следующим образом:

$$\hat{H}\tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r}) + \sum_c (E - E_c) \psi_{\vec{k}}^c(\vec{r}) \int \tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}^{c*}(\vec{r}) d^3\vec{r} = E_k \tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2.9)$$

другая форма:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} + W(\vec{r})\right] \cdot \tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r}) = E_k \tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r}). \quad (2.10)$$

Здесь нелокальный оператор псевдопотенциала $W(\vec{r})$, зависящий от энергии, определен соотношением

$$W(\vec{r}) = V(\vec{r}) + V^R(\vec{r}), \quad (2.11)$$

$$V^R(\vec{r}) \tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_c (E - E_c) \psi_{\vec{k}}^c(\vec{r}) \int \tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}^{c*}(\vec{r}) d^3\vec{r}. \quad (2.12)$$

При $E > E_c$ матричные элементы потенциала $V^R(\vec{r})$

$$\int \tilde{\psi}_{\vec{k}}^*(\vec{r}) V^R(\vec{r}) \tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r}) d^3\vec{r} = \sum_c (E - E_c) \left| \int \tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}^{c*}(\vec{r}) d^3\vec{r} \right|^2 \quad (2.13)$$

положительны.

Метод псевдопотенциала описывает только состояние электронов проводимости и требует введения нелокальной потенциальной функции, которая не имеет однозначного определения, поэтому для его расчета часто используются эмпирические модели, которые однако за счет локальности псевдопотенциала позволяют его использовать в рамках первопринципных

расчетов и описывать большую часть физических, механических и химических свойств самых разных простых веществ и сложных соединений.

2.3 Процедура самосогласования электронной плотности

В процессе самосогласования электронной плотности в качестве исходных данных используются порядковые номера химических элементов в периодической таблице Д. И. Менделеева и координаты положений атомов в решетке (рисунок 1). Атомные плотности заряда в нашей работе рассчитывались для следующих электронных конфигураций: Mg $3s^2$, H $1s^1$.

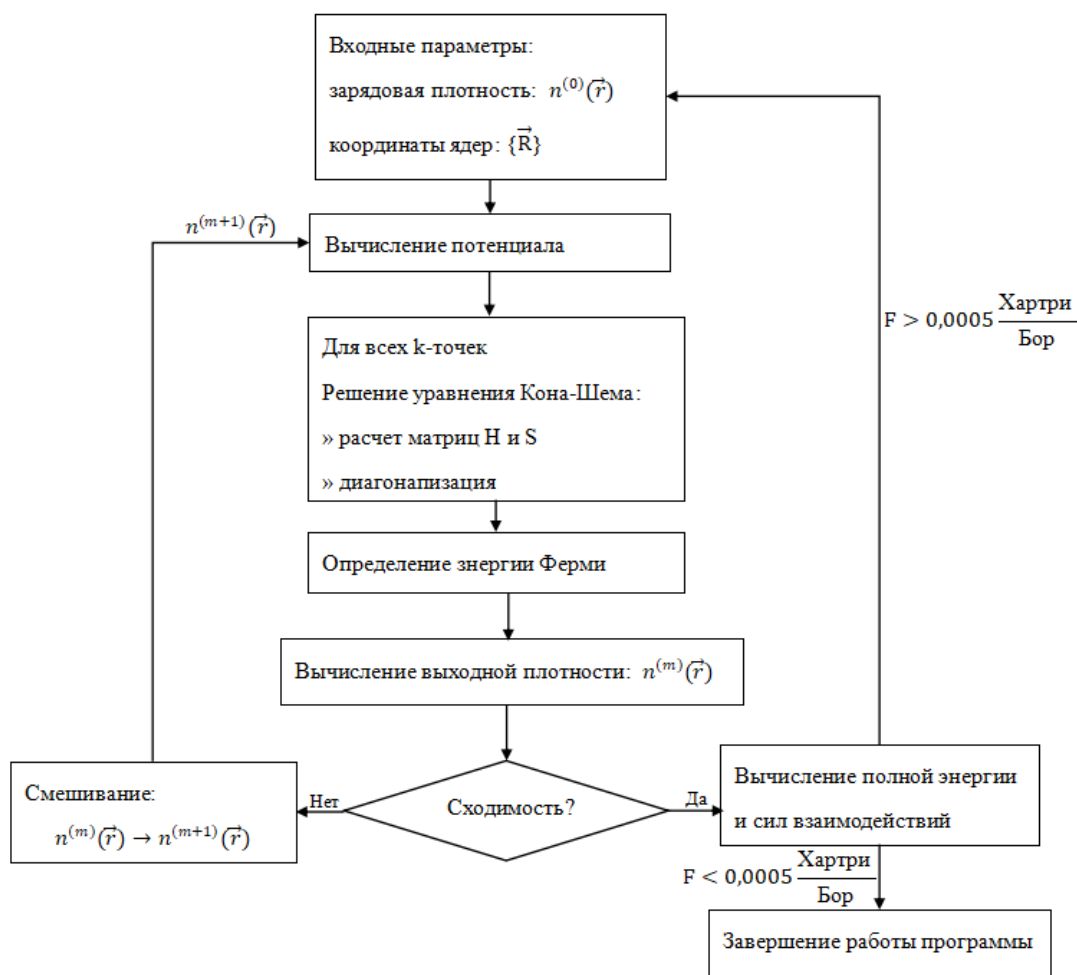


Рисунок 1 – Процедура самосогласования электронной плотности

Вводятся начальные волновые функции изолированных атомов и с помощью принципа суперпозиции плотности заряда для отдельных атомов можно найти начальную плотность заряда, эффективный потенциал в

уравнении (2.14) находится с помощью уравнений (2.16-2.19), а затем решается уравнение Кона-Шема [67].

$$\hat{H}[n]\varphi_i[n] = \varepsilon_i[n]\varphi_i[n], \quad (2.14)$$

здесь $\varphi_i[n]$ – одночастичная волновая функция i -го электрона, $\varepsilon_i[n]$ – полная энергия i -го электрона.

$$\hat{H}_{\text{КШ}}[n]\varphi_i(\vec{r}) = [-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{\text{eff}}(\{\vec{R}\}, \{\vec{r}\})]\varphi_i(\vec{r}), \quad (2.15)$$

здесь \hbar – постоянная Дирака, m – масса частица, ∇ – оператор Лапласа, \vec{R} – пространственные координаты, описывающие положение ядер.

$$\hat{V}_{\text{eff}}(\{\vec{R}\}, \{\vec{r}\}) = \hat{V}_{\text{ext}}(\{\vec{R}\}, \{\vec{r}\}) + \hat{V}_H(\vec{r}) + \hat{V}_{xc}(\vec{r}), \quad (2.16)$$

здесь $\hat{V}_{\text{ext}}(\{\vec{R}\}, \{\vec{r}\})$ – Эффективный потенциал включает в себя потенциал атомных ядер, $\hat{V}_H(\vec{r})$ – кулоновское взаимодействие между электронами (потенциал Хартри), $\hat{V}_{xc}(\vec{r})$ – обменное взаимодействие и электронная корреляция.

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{N_{\text{occ}}}\varphi_i^*(\vec{r})\nabla^2\varphi_i(\vec{r})d\vec{r} - \sum_I Z_I e \int \frac{n(\vec{r}_I)}{|\vec{R}_I - \vec{r}_I|} d\vec{r} + \frac{1}{2} \iint \frac{n(\vec{r}_i)n(\vec{r}_j)}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} d\vec{r}_i d\vec{r}_j + E_{xc}[n],$$

$$E = T_s\{\varphi_i(\vec{r})\}_{i=1}^{N_{\text{occ}}} + \hat{V}_{\text{ext}}[n] + \hat{V}_H[n] + E_{xc}[n], \quad (2.17)$$

$$n(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{N_{\text{occ}}} |\varphi_i(\vec{r})|^2 = \langle \varphi(\vec{r}) | \sum_{i=1}^{N_{\text{occ}}} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) | \varphi(\vec{r}) \rangle,$$

где N_{occ} – число занятых состояний.

$$E_{xc}[n] = \int \varepsilon_{xc}(n)n(\vec{r})d^3r, \quad (2.18)$$

где $\varepsilon_{xc}(n) = -C_x n^{\frac{4}{3}}(\vec{r})$ – обменно-корреляционная энергия, $C_x = \frac{3}{2} \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{\frac{1}{3}}$.

При этом учитывается градиент распределения плотности:

$$E_{xc}[n_{\uparrow}, n_{\downarrow}] = \int \varepsilon_{xc}(n_{\uparrow}, n_{\downarrow}, \nabla_{n_{\uparrow}}, \nabla_{n_{\downarrow}})n(\vec{r})d^3r, \quad (2.19)$$

$$\varphi_{i,\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{K}} C_{i,\vec{k},\vec{G}} \varphi_{i,\vec{G}}(\vec{k}, \vec{r}), \quad (2.20)$$

где $\vec{K} = \vec{G} + \vec{K}$, \vec{G} – вектор обратной решетки кристалла.

Среднее значение энергии системы электронов в кристалле:

$$E = \frac{\int \varphi_{i,\vec{k}}^*(\vec{r}) \hat{H}_{\text{КШ}} \varphi_{i,\vec{k}}(\vec{r}) d^3r}{\int \varphi_{i,\vec{k}}^*(\vec{r}) \varphi_{i,\vec{k}}(\vec{r}) d^3r}, \quad (2.21)$$

Необходимо знать коэффициенты в разложении волновой функции, чтобы решить вопрос об энергии в уравнении (2.21). Уравнение (2.22) решено и может быть сведено к форме (2.23) и (2.24).

$$[\mathbf{H}(\vec{k}) - \bar{E}\mathbf{S}(\vec{k})]\mathbf{C}_{i,\vec{k}} = 0, \quad (2.22)$$

$$\mathbf{H}(\vec{k})\mathbf{C}_{i,\vec{k}} = \bar{E}\mathbf{C}_{i,\vec{k}}, \quad (2.23)$$

$$\bar{E} = \bar{E}\mathbf{S}(\vec{k}). \quad (2.24)$$

Для получения собственных значений энергии \bar{E} каждого волнового вектора \vec{k} требуется диагонализация матрицы гамильтониана. Интегрирование по первой зоне Бриллюэна дает энергию и волновые функции. Во время каждой итерации энергия и волновые функции вычисляются по очереди для всех точек \vec{k} в зоне Бриллюэна в k -пространстве, а затем все эти точки интегрируются численно. Чем большее количество k -точек используется в расчете, тем точнее расчет.

Если \bar{E} известно, то коэффициент расширения $\mathbf{C}_{i,\vec{k}}$ также могут быть найдены. Затем определяется требуемая волновая функция электрона (2.20). Интегрируя все \bar{E} по всем \vec{k} , рассчитывается энергия Ферми. Затем определяются занятые состояния и свободные. Расчеты электронной плотности проводятся только по занятым состояниям.

Уравнение Кона-Шема (2.15) решается итерационно путем самосогласованного расчета, который используется для получения истинной электронной плотности с желаемой точностью: сходимость считается достигнутой, когда входная электронная плотность и выходная плотность (или полные энергии системы) в текущей итерации цикла не будут отличаться на заданную величину (рисунок 1). Если стандартное отклонение между плотностями электронов на входе и выходе в текущей итерации цикла больше требуемого параметра, эффективный потенциал пересчитывается с

использованием вновь найденных значений плотности. В наших расчетах сходимость по полной энергии считалась достигнутой в процессе самосогласования электронной плотности при достижении разности энергий менее чем 10^{-5} эВ. Потенциал атомного ядра, очевидно, зависит от положения всех атомов во время оптимизации атомной структуры, что отражается на каждом шаге алгоритма молекулярной динамики. Во время этого процесса положение ядра меняется. Волновая функция зависит от положения атома в решетке. Как только условие самосогласованности для электронной плотности выполнено, атомы перемещаются на некоторый шаг $\{\vec{R}(t) \rightarrow \vec{R}(t + \Delta t)\}$, и процедура самосогласования повторяется с самого начала для новой конфигурации атомов в решетке. Это продолжается до тех пор, пока силы, действующие на атомы системы, не станут меньше $25 \text{ мэВ/\text{Å}}$.

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

Студенту:

Группа	ФИО
150Б95	Лян Синьюй

Школа	ИЯТШ	Отделение школы (НОЦ)	Отделение экспериментальной физики
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	03.03.02 «Физика»

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

1. <i>Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	– <i>Тариф на электроэнергию – 5,748 руб. за 1 кВт·ч.</i>
2. <i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	– <i>Согласно проектной документации. Районный коэффициент 1.3</i>
3. <i>Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	– <i>Коэффициент отчислений во внебюджетные фонды – 30 %.</i>

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. <i>Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения</i>	– <i>Потенциальные потребители результатов исследования;</i> – <i>проведение анализа конкурентоспособности.</i>
2. <i>Планирование и формирование бюджета научных исследований</i>	– <i>цели и результаты проекта;</i> – <i>организационная структура проекта.</i>
3. <i>Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования</i>	– <i>структура работ в рамках научного исследования;</i> – <i>разработка графика проведения научного исследования;</i> – <i>бюджет научно-технического исследования.</i>

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. *Оценка конкурентоспособности НИ;*
2. *SWOT- анализ;*
3. *Диаграмма Ганта;*
4. *Бюджет затрат научно-технического исследования*
5. *Основные показатели эффективности НИ*

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Верховская М.В.	к.э.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б95	Лян Синьюй		

4 ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ

Темой настоящей ВКР является: Влияние примеси титана на взаимодействие водорода с магнием: расчеты из первых принципов. Работа посвящена первопринципному исследованию влияния примесных атомов титана в гидриде магния на энергию связи Mg-H. Установлено, что добавление примеси титана заметно снижает энергию связи Mg-H в гидриде магния.

В процессе поиска источников финансирования для проведения научного исследования и коммерциализации его результатов, оценка коммерческой ценности работы является необходимым условием. Помимо превышения технических параметров над предыдущими разработками необходимо понимать коммерческую привлекательность научного исследования.

Целью выполнения финансово-экономической части выпускной квалификационной работы является формирование навыков оценки результата научной работы и поиск источников финансирования для проведения научного исследования. Данный раздел, предусматривает рассмотрение следующих задач:

- 1) Оценка коммерческого потенциала разработки;
- 2) Планирование научно-исследовательской работы;
- 3) Расчет бюджета научно-исследовательской работы;
- 4) Определение ресурсной, финансовой, бюджетной эффективности исследования.

4.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Потенциальными потребителями результатов исследований являются организации в сфере материаловедения, хранения водородной энергии и транспорта, физические и химические области, а также экологические науки и др. Одним словом, исследования способствуют разработке более совершенных

материалов для технологий хранения водорода и водородной энергетики. Оно также может способствовать развитию возобновляемых источников энергии, топливных элементов и металлического катализа, среди прочих областей.

Таблица 4 – Карта сегментирования рынка услуг в области хранения и транспортировки водорода

		Вид услуги		
		Технология производства водорода	Хранение водорода	Транспортировка водорода
Сфера услуг	Производство природного газа			
	Машиностроение			
	Производство энергии			

 Росатом  Новатэк  РусГидро  Уралвагонзавод

В качестве конкурентных компаний были рассмотрены: Rosatom, Novatek, RusHydro, Uralvagonzavod.

Росатом, работающий над технологиями производства водорода и термоядерного синтеза

Новатэк – российская компания по добыче и сбыту газа.

РусГидро – российская энергетическая компания, которая занимается исследованиями и разработками в области водородных технологий, включая технологии хранения и транспортировки водорода.

Уралвагонзавод – российская машиностроительная компания, которая занимается исследованиями и разработкой оборудования для хранения и транспортировки водорода.

Поскольку российский водородный рынок все еще находится в стадии становления, конкуренция между этими компаниями не очень острая.

В настоящее время эти компании больше сотрудничают в исследовании и разработке водородных технологий, чтобы способствовать развитию

российской водородной промышленности. В результате наши научные исследования могут быть использованы в сотрудничестве с этими компаниями.

4.2 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научного исследования с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.

4.2.1 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

Детальный анализ конструктивного исполнения необходим, т.к. каждый тип конструктивного исполнения имеет свои достоинства и недостатки. Данный анализ производится с применением оценочной карты. Экспертная оценка производится по техническим характеристикам и экономическим показателям по 5 бальной шкале, где 1 – наиболее низкая оценка, а 5 – наиболее сильная. Общий вес всех показателей в сумме должен составлять 1. B_{Φ} – система гидрида магния с примесными атомами титана. B_{K1} – система гидрида магния.

Целесообразно проводить данный анализ с помощью оценочной карты, для этого были отобраны 2 конкурентные разработки. Расчет показателя конкурентоспособности производился по формуле:

$$K = \sum B_i \cdot V_i, \quad (4.1)$$

где B_i – бал i -го показателя, V_i – вес показателя (в долях единицы).

Таблица 5 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы		Конкурентоспособность	
		B_{Φ}	B_{K1}	K_{Φ}	K_{K1}
Технические критерии оценки ресурсоэффективности					
1. Плотность хранения водорода	0,22	5	4	1,1	0,88
2. Скорость накопления/выпуска водорода	0,13	4	3	0,52	0,39
3. Обратимость	0,05	4	4	0,2	0,2

4. Стоимость	0,15	5	4	0,75	0,6
5. Безопасность	0,07	5	4	0,35	0,28
6. Экологичность	0,07	5	5	0,35	0,35
7. Эффективность моделирования	0,06	3	3	0,18	0,18
8. Возможность повторного использования	0,05	4	4	0,2	0,2
Экономические критерии оценки эффективности					
1. Конкурентоспособность продукта	0,04	4	3	0,16	0,12
2. Уровень проникновения на рынок	0,03	3	3	0,09	0,09
3. Цена	0,08	4	4	0,32	0,32
4. Техническая зрелость	0,05	3	3	0,15	0,15
Итого	1			4,37	3,76

1. Плотность хранения водорода – объем или масса водорода, который может быть сохранен на единицу объема или массы в материале.

2. Скорость накопления/выпуска водорода – скорость, с которой водород адсорбируется и высвобождается из материала для хранения водорода.

3. Обратимость – является ли адсорбция и выделение водорода из материала для хранения водорода обратимым.

4. Стоимость – стоимость подготовки материала.

5. Безопасность – безопасность материала при использовании и хранении.

6. Экологичность – воздействие на окружающую среду при использовании и хранении материала.

7. Эффективность моделирования – время, необходимое для моделирования требуемой системы, чем короче время, тем эффективнее.

8. Возможность повторного использования – количество раз, когда материал может быть использован повторно.

9. Конкурентоспособность продукта – общая конкурентоспособность исследуемого материала по сравнению с другими.

10. Уровень проникновения на рынок – принятие результатов исследования на рынке.

11. Цена – цена материала.

12. Техническая зрелость – степень развития результатов исследования.

Согласно данным таблицы 5, конкурентоспособность разработки системы гидрида магния с примесными атомами титана составляет 4,37 по сравнению с 3,76 для системы гидрида магния (Б_{к1}), что свидетельствует о том, что система гидрида магния с примесными атомами титана (Б_ф) имеет более широкое применение в технологии хранения и транспортировки водорода.

4.2.2 SWOT – анализ

SWOT – Strengths (сильные стороны), Weaknesses (слабые стороны), Opportunities (возможности) и Threats (угрозы) – представляет собой комплексный анализ научно-исследовательского проекта.

Сильные стороны – это факторы, которые характеризуют конкурентоспособную сторону научно-исследовательского проекта. Указывают на отличительное преимущество проекта или ресурсы, являющиеся особенными с точки зрения конкуренции.

Слабые стороны – это недостаток, упущение или ограниченность научно-исследовательского проекта, которые препятствуют достижению его целей.

Возможности включают в себя предпочтительную ситуацию в настоящем или будущем, возникающую в условиях окружающей среды проекта, например, тенденцию, изменение или предполагаемую потребность, которая поддерживает спрос на результаты проекта и позволяет руководству проекта улучшить свою конкурентную позицию.

Угроза – это любая нежелательная ситуация, тенденция или изменение в условиях окружающей среды проекта, которая имеет разрушительный или

угрожающий характер для его конкурентоспособности в настоящем или будущем.

SWOT – анализ можно осуществить и представить в виде интерактивной матрицы работы, таблица 6, 7, 8, 9, а также результирующих таблиц возможностей и угроз НИР, таблицы 13.

Каждый фактор таблицы 6, 7, 8, 9 помечается либо знаком «+» (означает сильное соответствие сильных сторон возможностям), либо знаком «-» (что означает слабое соответствие); «0» – если есть сомнения в том, что поставить «+» / «-».

Таблица 6 – Интерактивная матрица проекта «Сильные стороны и возможности»

		Сильные стороны проекта				
		С1	С2	С3	С4	С5
Возможности проекта	В1	–	+	+	–	–
	В2	+	+	+	–	–
	В3	–	–	–	–	–
	В4	+	+	+	–	–

Таблица 7 – Интерактивная матрица проекта «Слабые стороны и возможности»

		Слабые стороны проекта			
		Сл1	Сл2	Сл3	Сл4
Возможности проекта	В1	+	+	+	0
	В2	+	+	+	+
	В3	–	–	–	–
	В4	–	–	–	–

Таблица 8 – Интерактивная матрица проекта «Сильные стороны и угрозы»

		Сильные стороны проекта				
		С1	С2	С3	С4	С5
Угрозы проекта	У1	+	+	+	0	0
	У2	+	+	+	–	0
	У3	–	–	–	0	0

Таблица 9 – Интерактивная матрица проекта «Слабые стороны и угрозы»

		Слабые стороны проекта			
		Сл1	Сл2	Сл3	Сл4
Угрозы проекта	У1	+	+	+	–
	У2	+	+	+	+
	У3	–	–	–	0

Таблица 10 – SWOT-анализ

	<p>Сильные стороны проекта: С1. Точность моделирования, обеспечивающая надежную теоретическую основу. С2. Понижение температуры сорбции/десорбции. С3. Улучшение устойчивости материала к циклическим процессам гидрирования/дегидрирования.. С4. Безопасность процесса исследования. С5. Упрощенная подготовка данных</p>	<p>Слабые стороны проекта: Сл1. Выводы интерпретируются только на теоретическом уровне и нуждаются в оптимизации путем проведения экспериментов. Сл2. Экспериментальная проверка требует много времени и денег и является сложной. Сл3. Отсутствие оборудования, необходимого для проведения расчетов. Сл4. Длительное время, необходимое для проведения расчетов.</p>
<p>Возможности: В1. Широкие перспективы применения. В2. Новый способ получения материалов с высоким содержанием водорода. В3. Повышение стоимости конкурентных разработок. В4. Эталон для исследований других материалов</p>	<p>В1С2С3. Высокая точность моделирования позволяет получить реалистичные результаты, снизить температуру десорбции, улучшить свойства материала по хранению водорода, что делает его перспективным для широкого спектра применений. В2С1С2С3. Улучшение свойств материалов для хранения водорода, обеспечивая тем самым обновленный подход В4С1С2С3. Улучшение свойств материалов для хранения водорода и обеспечение стандарта для исследований других материалов.</p>	<p>В1Сл1Сл2Сл3. Выводы нуждаются в проверке, а их трудно проверить, и для обоснования выводов не может быть приведено строгих доказательств. В2Сл1Сл2Сл3Сл4. Выводы нуждаются в проверке, их трудно подтвердить, и существует риск ошибки при исследовании новых методов.</p>
<p>Угрозы: У1. Неточные расчеты. У2. Недостаточное финансирование исследовательских проектов. У3. Наличие большей конкуренции.</p>	<p>У1С1С2С3. Неточные расчеты могут сделать полученные результаты неверными, а исследование необоснованным. У2С1С2С3. Недостаточное финансирование проекта может сделать расчеты безусловными и не привести к более точным выводам.</p>	<p>У1Сл1Сл2Сл3. Выводы нуждаются в проверке и их трудно проверить, а неточные расчеты могут привести к выводам, которые невозможно проверить в дальнейшем. У2Сл1Сл2Сл3Сл4. Выводы нуждаются в проверке и их сложнее подтвердить, а недостаточное финансирование еще больше затруднит проверку результатов.</p>

В результатах SWOT-анализа было показано, что исследование первых принципов легирования атомов титана в гидриде магния имеет относительно перспективное будущее, но есть и некоторые препятствующие факторы, сложность исследования, а также время, которое необходимо учитывать. Исследование имеет определенное руководящее значение для теоретического руководства по подготовке материалов для хранения водорода и т.д.

4.3 Планирование научно-технического исследования

В данном разделе составлен перечень этапов и работ в рамках проведения научного исследования и проведено распределение исполнителей по видам работ. Планирование комплекса предполагаемых работ осуществлялось в следующем порядке:

- разработка технического задания;
- выбор направления исследования;
- теоретические и практические исследования;
- обобщение и оценка результатов;
- оформление комплекта документации по ВКР.

Для выполнения научных исследований формируется рабочая группа, в состав которой входят: бакалавр (Б), научный руководитель (НУ) и консультант (К). Составим перечень этапов и работ в рамках проведения НИ и проведем распределение исполнителей по видам работ (таблица 11).

Таблица 11 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Основные этапы	№ работ	Содержание работ	Должность исполнителя
Разработка технического задания	1	Составление и утверждение технического задания	НУ, К, Б
Выбор направления исследования	2	Подбор и изучение материалов по выбранной теме	Б
	3	Выбор направления исследований	НУ, К, Б
	4	Календарное планирование работ по теме	НУ, К, Б
Теоретические и практические исследования	5	Выбор методики для исследований	НУ, К, Б
	6	Ознакомление с методикой исследования и программным обеспечением	Б
	7	Определение параметров расчета	НУ, К, Б
	8	Проведения расчета на ЭВМ	Б
Обобщение и оценка результатов	9	Проверка полученных результатов	Б
	10	Оформление заключение	Б
Оформление комплекта документации по ВКР	11	Составление пояснительной записки	Б

Данная таблица отображает вклад каждого участника исследовательской работы. Наибольшая часть работы приходится на бакалавра (дипломника).

4.3.1 Определение трудоемкости выполнения работ

Трудовые затраты в большинстве случаев образуют основную часть стоимости разработки, поэтому важным моментом является определение трудоемкости работ каждого из участников научного исследования.

С целью определения ожидаемого (среднего) значения трудоемкости используем следующую формулу:

$$t_{ож} = \frac{3t_{min} + 2t_{max}}{5}, \quad (4.2)$$

где $t_{ож}$ – ожидаемая трудоёмкость выполнения работы, чел.дн.; t_{min} – минимально возможная трудоёмкость выполнения работы, чел.дн.; t_{max} –

максимально возможная трудоёмкость выполнения работы, чел.-дн. Оценка трудоёмкости выполнения научного исследования для научного руководителя:

Далее определим продолжительность каждой работы в рабочих днях T_p , учитывая параллельность выполнения работ несколькими исполнителями, по следующей формуле:

$$T_{pi} = \frac{t_{ожi}}{Ч_i} \quad (4.3)$$

где T_{di} – продолжительность одного этапа работы, раб.дн.; $t_{ожi}$ – ожидаемая трудоёмкость выполнения одной работы, чел.-дн.; $Ч_i$ – численность исполнителей, выполняющих одновременно одну и ту же работу на данном этапе, чел.

Произведем длительно работ в рабочих днях.

Ленточный график проведения научных работ изображается в форме диаграммы Ганта. Для построения диаграммы необходимо перевести рабочие дни в календарные дни, для чего воспользуемся следующим соотношением:

$$T_{кд} = T_{рд} \cdot T_K, \quad (4.4)$$

где $T_{кд}$ – продолжительность выполнения этапа в календарных днях; T_K – коэффициент календарности, определяющийся выражением 4.5.

$$T_K = \frac{T_{кал}}{T_{кал} - T_{вд} - T_{пд}}, \quad (4.5)$$

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

Рассчитаем коэффициент календарности по формуле 4.5:

$$T_K = \frac{365}{365 - 91 - 27} = 1,477.$$

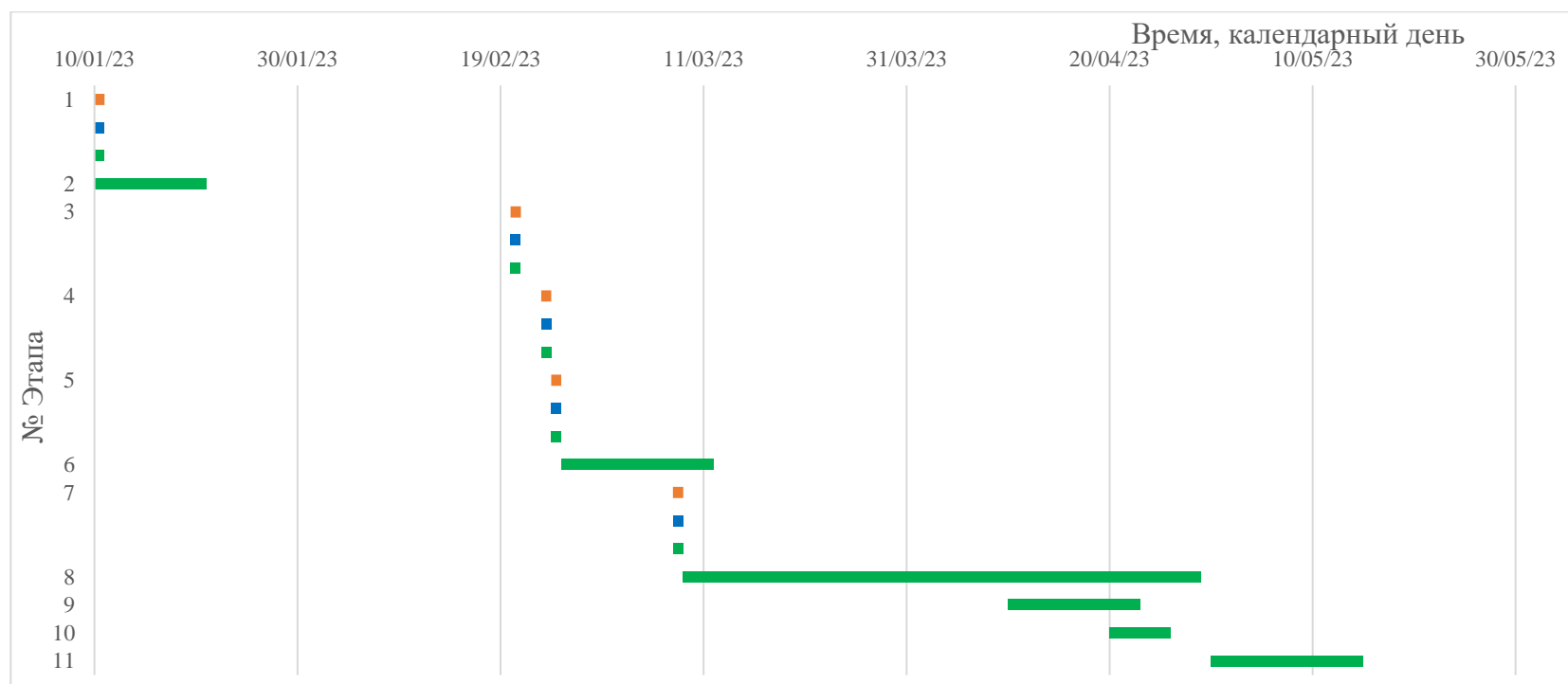
Построим таблицу по результатам расчётов, в которой укажем трудоёмкости работ, название работы, а также укажем длительность работ в рабочих и календарных днях, таблица 12.

Таблица 12 – Временные показатели проведения научного исследования

№	Название	Трудоёмкость			Исполнитель	Т _р , раб. дн	Т _к , кал. дн
		t _{min}	t _{max}	t _{ож}		Исп.	Исп.
		Исп.	Исп.	Исп.		Исп.	Исп.
1	Составление и утверждение технического задания	0,3	1	0,58	НР	0,12	0,17
		0,3	1	0,58	К	0,12	0,17
		0,3	1	0,58	Б	0,12	0,17
2	Подбор и изучение материалов по выбранной теме	5	10	7	Б	7,00	10,34
3	Выбор направления исследований	1	2	1,4	НР	0,47	0,69
		1	2	1,4	К	0,47	0,69
		1	2	1,4	Б	0,47	0,69
4	Календарное планирование работ по теме	1	2	1,4	НР	0,47	0,69
		1	2	1,4	К	0,47	0,69
		1	2	1,4	Б	0,47	0,69
5	Выбор методики для исследований	0,3	1	0,58	НР	0,19	0,29
		0,3	1	0,58	К	0,19	0,29
		0,3	1	0,58	Б	0,19	0,29
6	Ознакомление с методикой исследования и программным обеспечением	7	14	9,8	Б	9,80	14,48
7	Определение параметров расчета	1	2	1,4	НР	0,47	0,69
		1	2	1,4	К	0,47	0,69
		1	2	1,4	Б	0,47	0,69
8	Проведения расчета на ЭВМ	30	40	34	Б	34,00	50,24
9	Проверка полученных результатов	12	17	14	Б	8,20	12,13
10	Оформление заключение	3	4	3,4	Б	3,40	5,02
11	Составление пояснительной записки	8	12	9,6	Б	9,60	14,19

На основе таблицы 12, построим календарный план-график. График построим для максимального по длительности исполнения работ в рамках научно-исследовательского проекта, с разбивкой по месяцам и декадам за период времени дипломирования. Отметим области в зависимости от исполнителей, ответственных за конкретную работу, таблица 13.

Таблица 13 – Календарный план-график (график Ганта) проведения НИОКР. (Оранжевым – научный руководитель, синим цветом показан консультант, зеленым – бакалавр)



Таким образом, в ходе данного этапа работы были определены длительности и обозначены сроки выполнения всех запланированных видов работ. Была построена диаграмма Ганта, наглядно демонстрирующая этапы выполнения проекта участниками.

В результате выполнения подраздела был разработан план-график выполнения этапов работ для руководителя и инженера, позволяющий оценить и спланировать рабочее время исполнителей, а также рассчитано количество дней, в течение которых работал каждый из исполнителей.

4.4 Бюджет научного исследования

4.4.1 Расчет материальных затрат НИИ

В данном разделе составлен полный бюджет научных исследований. Расходы научных исследований состоят из материальных затрат, расходов на специальные оборудования, основной и дополнительной заработной платы, социальные отчисления и накладные расходы.

Для выполнения данной ВКР требуются затраты на:

- приобретаемую со стороны продукцию, необходимую для обработки результатов;
- оплаты соединения с высокопроизводительным сервером через Интернет.

Данные затраты не подходят под определение материальных затрат, поэтому их учет не требуется. В рамках данной работы отсутствуют такие материальные затраты, как:

- приобретение материальных запасов, сырья, комплектующих и составных частей для основных средств производственных подразделений;
- покупка топлива и горюче-смазочных материалов, электроэнергии, тепловой энергии, воды для выполнения технологического процесса;
- закупка работ, товаров и услуг, необходимых для осуществления производственного цикла;

- убытки и недостачи продукции в пределах установленных норм естественной убыли;
- прочие суммы расходов.

4.4.2 Расчет затрат на специальное оборудование для научных работ

В рамках выполнения исследования использовалось имеющееся в собственности ИФПМ СО РАН оборудование, и закупка дополнительного специального оборудования не производилась. В таком случае затраты на специальное оборудование отсутствуют.

Для оборудования нужно рассчитать величину годовой амортизации по следующей формуле (4.6):

$$A_{год} = \frac{C_{перв}}{T_{ни}}, \quad (4.6)$$

здесь $C_{перв}$ – первоначальная стоимость, руб; $T_{ни}$ – время полезного использования, год.

Данная работа не предполагает покупку оборудования, превышающего по стоимости 100 000 рублей. Работа на высокопроизводительном сервере НРС-РНТД не предполагает получение прибыли со стороны пользователя. Учет амортизации этого оборудования заложен в расчет бюджета владельца – Томского Политехнического университета.

4.4.3 Основная заработная плата исполнителей темы

Статья включает основную заработную плату работников, непосредственно занятых выполнением проекта, (включая премии, доплаты) и дополнительную заработную плату. Также включается премия, выплачиваемая ежемесячно из фонда заработной платы в размере 20 –30 % от тарифа или оклада:

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

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

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

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

здесь T_p – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб. дн. (таблица 12); $Z_{дн}$ – среднедневная заработная плата работника, руб.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

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

здесь Z_m – месячный должностной оклад работника, руб.; M – количество месяцев работы без отпуска в течение года: при отпуске в 24 раб. дня $M=11,2$ месяца, 5-дневная неделя; при отпуске в 48 раб. дней $M=10,4$ месяца, 6-дневная неделя; F_d – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн. (таблица 14).

В таблице 14 приведен баланс рабочего времени каждого работника НТИ.

Таблица 14 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Бакалавр	Консультант
Календарное число дней	365	365	365
Количество нерабочих дней			
– выходные дни	52	52	52
– праздничные дни	14	14	14
Потери рабочего времени			
– отпуск	48	48	48
– невыходы по болезни	7	7	7
Действительный годовой фонд рабочего времени	245	245	245

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_m = Z_{тс} \cdot (1 + k_{пр} + k_d) \cdot k_p, \quad (4.10)$$

здесь $Z_{тс}$ – заработная плата по тарифной ставке, руб.; $k_{пр}$ – премиальный коэффициент, равный 0,3 (т.е. 30% от $Z_{тс}$); k_d – коэффициент доплат и надбавок составляет 50%; k_p – районный коэффициент, равный 1,3 (для Томска).

Расчёт основной заработной платы приведён в таблице 15.

Таблица 15 – Расчет основной заработной платы

Исполнитель	$Z_{тс}$, руб	$k_{пр}$	k_d	k_p	Z_m , руб	Z_d , руб	T_p , день	$Z_{осн}$, руб
Бакалавр	8 600	0,3	0,5	1,3	20 124	854	109	93 044
Научный руководитель	12 070				28 244	1 199	3	3 028
Консультант	12 070				28 244	1 199	3	3 028
ИТОГО								99101

4.4.4 Дополнительная заработная плата

Расчет дополнительной заработной платы ведется по следующей формуле:

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

здесь $k_{доп}$ – коэффициент дополнительной заработной платы, равный 0,15.

Общая заработная исполнителей работы представлена в таблице 16.

Таблица 16 – Общая заработная плата исполнителей

Исполнитель	$Z_{осн}$, руб	$Z_{доп}$, руб	$Z_{зп}$, руб
Бакалавр	93 044	13 957	107 001
Научный руководитель	3 028	454	3 483
Консультант	3 028	454	3 483
ИТОГО	99 101	14 865	113 966

4.4.5 Отчисления во внебюджетные фонды

Данные расходы включают обязательные отчисления по установленным законодательством Российской Федерации нормам органам государственного социального страхования (ФСС), пенсионного фонда (ПФ) и медицинского страхования (ФФОМС) от затрат на оплату труда работников. Ставка отчислений во внебюджетные фонды для учреждений, осуществляющих научную и образовательную деятельность, на 2021 год составляет 30% (ПФ – 22%, ФФОМС – 5.1%, ФСС – 2.9%)

Отчисления во внебюджетные фонды:

$$Z_{внеб.} = k_{внеб.} \cdot Z_{осн.} = 99101 \cdot 0.3 \approx 29730.3 \text{руб}, \quad (4.12)$$

где $k_{внеб.}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды ($k_{внеб.} = 0,3$).

4.4.6 Расчет затрат на электроэнергию

Потребляемая мощность анализатора составляет 7 кВт/час. Длительность еженедельной работы на комплексной технологической установке составляет 2 часа. Стоимость электроэнергии в Томске составляет 5.748 рубля за 1 кВт/час. Стоимость электропотребления за 5 месяцев рассчитывается по формуле:

$$C_{эл.об.} = P_{об} \cdot Ц_{э} \cdot t_{об}, \quad (4.13)$$

где $P_{об}$ – мощность, потребляемая оборудованием, кВт; $Ц_{э}$ – тариф на 1 кВт·час; $t_{об}$ – время работы оборудования, час.

Затраты на электроэнергию для технологических целей приведены в таблице 17.

Таблица 17 – Затраты на электроэнергию

Наименование оборудования	Время работы оборудования	Потребляемая мощность $P_{об}$, кВт	Затраты $C_{эл.об.}$, руб.
Ноутбук “Lenovo ThinkPad E490”	1080	0,065	308,2
Итого			308,2

4.4.7 Расчет затрат на научные и производственные командировки и накладные расходы

Затраты на научные и производственные командировки исполнителей определяются в соответствии с планом выполнения темы и с учетом действующих норм командировочных расходов различного вида и транспортных тарифов, а также организационных взносов на конференции. Расчеты по данному пункту представлены в таблице 18.

Таблица 18 – Расчета на научные и производственные командировки

Наименование мероприятия	Оплата, руб
Конференция «Перспективы развития фундаментальных наук XX)	1500
Итого: 1500 руб.	

Накладными расходами учитываются прочие затраты организации, такие как: печать и ксерокопирование проектировочных документов, оплата услуг связи. Накладные расходы определяются:

$$Z_{накл.} = k \cdot (Z_{осн.} + Z_{доп.} + Z_{внеб.}) = 22991 \text{руб.},$$

где k – коэффициент, учитывающий накладные расходы ($k = 0,16$).

4.4.8 Формирование бюджета затрат НИИ

Расчет бюджета затрат в результате проведения НИИ представлен в таблице 19.

Таблица 19 – Бюджет затрат

Наименование статьи	Сумма, руб
Материальные затраты	–
Затраты на специальное оборудование для научных работ	56840
Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	99101
Затраты по доп. заработной плате исполнителей темы	14865
Отчисления во внебюджетные фонды	29730,3
Затраты на электроэнергию	308,2
Затраты на научные производственные командировки	1500
Накладные расходы	22991
Бюджет затрат	225335,5

4.5 Ресурсоэффективность

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

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{финр}^{исп\ i} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{max}} \quad (4.14)$$

Здесь $I_{финр}^{исп\ i}$ – интегральный финансовый показатель разработки;

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

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

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

$$I_{pi} = \sum a_i b_i . \quad (4.15)$$

Здесь I_{pi} – интегральный показатель ресурсоэффективности для i -го варианта исполнения разработки;

a_i – весовой коэффициент i -го варианта исполнения разработки;

b_i – бальная оценка i -го варианта исполнения разработки; устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания;

n – число параметров сравнения.

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности приведен в форме таблице 20.

Таблица 20 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Критерий	Весовой коэффициент параметра	Исп. 1	Исп. 2
1 Простота выполнения исследований	0,30	5	3
2 Удобство в эксплуатации	0,15	4	4
3 Энергосбережение	0,15	3	3
4 Надежность	0,20	4	5
5 Воспроизводимость результатов	0,20	4	4
ИТОГО	1	4,15	3,75

Сравнив значения интегральных показателей ресурсоэффективности, можно сделать вывод, что реализация технологии в первом исполнении является более эффективным вариантом для выполнения работы.

Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения разработки ($I_{исп.i}$) определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле:

$$I_{исп.1} = \frac{I_{p-исп.1}}{I_{финр.1}}, I_{исп.2} = \frac{I_{p-исп.2}}{I_{финр.2}}. \quad (4.16)$$

Сравнение интегрального показателя эффективности вариантов исполнения разработки позволит определить сравнительную эффективность проекта (см. таблицу 21) и выбрать наиболее целесообразный вариант из предложенных. Сравнительная эффективность проекта (\mathcal{E}_{cp}):

$$\mathcal{E}_{cp} = \frac{I_{исп.1}}{I_{исп.2}}. \quad (4.17)$$

Таблица 21 – Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Исп. 1	Исп. 2
1	Интегральный финансовый показатель разработки	1	1
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,15	3,75
3	Интегральный показатель эффективности	4,15	3,75
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1	0,9

Анализируя данные таблицы 21, разработанная методика эффективнее стандартной. Традиционная оценка экономической эффективности полученных результатов невозможны, т.к. они носят чисто научный характер.

4.6 Выводы по главе «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

В ходе выполнения раздела «Финансовый менеджмент» был выполнен анализ конкурентоспособности. Проведён SWOT-анализ проекта, в ходе которого были выявлены потенциальные внутренние и внешние сильные и слабые стороны, возможности и угрозы. Из анализа выяснили, что потенциальных сильных сторон у проекта больше, чем слабостей, что свидетельствует о перспективности исследования. Сильными сторонами можно назвать то, что технология является экономичной, энергоэффективной и экологичной, имеет маленький срок готовых результатов при проведении научного исследования и имеет квалифицированный персонал. К слабым сторонам можно отнести отсутствие прототипа научной разработки, Недостаток финансовых средств, большой срок поставок материалов и комплектующих, используемых при проведении научного исследования.

При планировании научно-исследовательской работы был произведен подсчет бюджета исследования по материальным затратам (0 руб.), затратам на специальное оборудование для научной работы (56840 руб.), затратам по основной заработной плате исполнителей тем (99101 руб.), затратам по дополнительной заработной плате (14865 руб.), затратам на научные и производственные командировки (1500 руб.), отчислениям во внебюджетные фонды (29730,3), затратам на электроэнергию (308,2 руб.) и накладным расходам (22991 руб.). Всего бюджет составил 225335,5 руб.

Проведена оценка результатов ресурсоэффективности, которая составила 4,15 из 5, что говорит о хорошей эффективности реализации технического проекта.

Проведение такого рода оценки коммерческой ценности необходимо, чтобы оценить состояние и перспективы проводимых научных исследований.

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»**

Студенту:

Группа	ФИО
150Б95	Лян Синьйой

ШКОЛА	ИЯТШ	Отделение	Отделение экспериментальной физики
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	03.03.02 «Физика»

Тема дипломной работы: «Влияние примеси титана на взаимодействие водорода с магнием: расчеты из первых принципов»

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
<ul style="list-style-type: none"> • Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения) <p>Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности</p> <ul style="list-style-type: none"> • специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; • организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны. 	<p>Объект исследования – гидрид магния и гидрид магния с примесями титана.</p> <p>Область применения – твердый раствор магния с титаном может быть использован для изготовления перспективных материалов-накопителей водорода для хранения и транспортировки водорода в отрасли водородной энергетики.</p> <p>Приводится перечень НТД, используемой в данном разделе:</p> <p>ГОСТ 12.0.003-2015. Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Опасные и вредные производственные факторы. Классификация.</p> <p>ГОСТ 30494-96. Здания жилые и общественные. Параметры микроклимата в помещениях.</p> <p>ГОСТ 12.1.003-83. Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Шум. Общие требования безопасности (с Изменением N 1).</p> <p>СНиП 23-05-95*. Естественное и искусственное освещение (с Изменением N 1).</p> <p>СП 12.13130.2009. Определение категорий помещений, зданий и наружных установок по взрывопожарной и пожарной опасности (в ред. изм. № 1, утв. приказом МЧС России от 09.12.2010 № 643).</p> <p>ГОСТ 12.1.004-91. Система стандартов безопасности труда. Пожарная безопасность. Общие требования.</p> <p>ГОСТ 12.1.009-76. Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Электробезопасность. Термины и определения.</p> <p>ГОСТ Р12.1.019-2017. ССБТ Электробезопасность</p>

	<p>ГОСТ Р МЭК 61140-2000. Защита от поражения электрическим током. Общие положения по безопасности, обеспечиваемой электрооборудованием и электроустановками в их взаимосвязи.</p> <p>СанПиН 2.6.1.2523-09. Нормы радиационной безопасности НРБ-99/2009.</p> <p>СанПиН 2.2.4.548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.</p> <p>ГОСТ 32548-2013. Вентиляция зданий. Воздухораспределительные устройства. Общие технические условия.</p> <p>СНиП 41-01-2003. Отопление, вентиляция и кондиционирование.</p> <p>ГОСТ 12.1.029-80. Средства и методы защиты от шума.</p> <p>ГОСТ 12.4.026-76*. Система стандартов безопасности труда. Цвета сигнальные и знаки безопасности.</p> <p>СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03. О введении в действие санитарно-эпидемиологических правил и нормативов.</p> <p>ГОСТ 12.1.006-84. Электромагнитные поля радиочастот. Допустимые уровни на рабочих местах и требования к проведению контроля.</p> <p>ГОСТ Р 22.0.02-2016. Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Термины и определения.</p>
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
<p>1. Производственная безопасность</p> <p style="text-align: center;">Анализ показателей шума и вибрации</p> <ul style="list-style-type: none"> • установление соответствие показателей нормативному требованию; <p style="text-align: center;">Анализ показателей микроклимата</p> <ul style="list-style-type: none"> • показатели температурные, скорости движения воздуха, запыленности. <p style="text-align: center;">Анализ освещенности рабочей зоны</p> <ul style="list-style-type: none"> • типы ламп, их количество, соответствие нормативному требованию освещенности; • при расчете освещенности указать схему размещения светильников на потолке согласно проведенному расчету. <p style="text-align: center;">Анализ электробезопасности</p> <ul style="list-style-type: none"> • наличие электроисточников, характер их опасности; • установление класса электроопасности помещения, а также безопасные номиналы тока, напряжения, сопротивления заземления. • при расчете заземления указать схему размещения заземлителя согласно проведенному расчету. <p style="text-align: center;">Анализ пожарной безопасности</p> <ul style="list-style-type: none"> • присутствие горючих материалов, тем самым, присутствие повышенной степени пожароопасности. • категории пожароопасности помещения, марки огнетушителей, их назначение. • Разработать схему эвакуации при пожаре. 	<p>Существует вероятность отклонения от показателей микроклимата в плане микроклимата.</p> <p>Существует вероятность превышения нормативов по уровню шума.</p> <p>Существует вероятность отклонений от гигиенических норм в отношении освещения на рабочем месте.</p> <p>Существует вероятность несоблюдения правил пожарной безопасности в части пожарной безопасности.</p> <p>Возможность несоблюдения норм электробезопасности в части электробезопасности.</p>
<p>2. Экологическая безопасность:</p> <ul style="list-style-type: none"> • защита селитебной зоны • анализ воздействия объекта на атмосферу (выбросы); 	<p>Данное исследование не наносит вреда жилым районам и не вредит атмосфере, гидросфере и литосфере, но есть некоторый</p>

<ul style="list-style-type: none"> • 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>вред для этих районов при строительстве вычислительного оборудования.</p>
<p>3. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:</p> <ul style="list-style-type: none"> • перечень возможных ЧС при разработке и эксплуатации проектируемого решения; • выбор наиболее типичной ЧС; • разработка превентивных мер по предупреждению ЧС; • разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий. 	<p>1) Природная – сильные морозы зимой; Удаленное программное обеспечение используется в чрезвычайных ситуациях в холодные зимние месяцы, когда сотрудники, скорее всего, не имеют доступа к оборудованию для работы с компьютером.</p> <p>2) Техногенная – исключить несанкционированное проникновение посторонних на рабочее место (большая вероятность проведения диверсии). Для предотвращения проникновения на рабочее место посторонних лиц рабочие зоны запираются, а доступ к ним в нерабочее время ограничен, даже для доступа к системе оборудования требуется соответствующий пароль, а сам пароль не виден, что значительно снижает вероятность несанкционированного вмешательства в работу оборудования.</p>

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Сечин А.И.	д.т.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б95	Лян Синьюй		

5 СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ

В рамках выпускной квалификационной работы было проведено моделирование системы $Mg_{16}H_{32}$ гидрида магния и его случая с примесями титана с использованием HPC-PHTD, высокопроизводительного сервера, находящегося в распоряжении НИ ТПУ. Доступ к суперкомпьютеру осуществлялся с компьютера, расположенного в аудитории № 205 учебного корпуса №3. Работа была посвящена предварительному исследованию влияния атомов титана в качестве примесей в гидриде магния на энергию связи Mg-H, расчету параметров решетки гидрида магния, а также энергии связи и расчету энергии связи Mg-H в гидриде магния после добавления примесей титана. Данная работа может быть применена в области хранения и транспортировки водорода, а потенциальными пользователями являются организации в области хранения и транспортировки водородной энергии.

Твердый раствор магния с титаном может быть использован для изготовления перспективных материалов-накопителей водорода для хранения и транспортировки водорода в отрасли водородной энергетики.

5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

В отношении различных возможных опасностей, присутствующих в рабочей среде, таких как микроклимат, шум, освещение, пожарная безопасность, электробезопасность и аварийная безопасность исследовательский проект соответствует этим законам и правилам:

ГОСТ 12.0.003-2015. Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Опасные и вредные производственные факторы. Классификация.

ГОСТ 30494-96. Здания жилые и общественные. Параметры микроклимата в помещениях.

ГОСТ 12.1.003-83. Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Шум. Общие требования безопасности (с Изменением N 1).

СНиП 23-05-95*. Естественное и искусственное освещение (с Изменением N 1).

СП 12.13130.2009. Определение категорий помещений, зданий и наружных установок по взрывопожарной и пожарной опасности (в ред. изм. № 1, утв. приказом МЧС России от 09.12.2010 № 643).

ГОСТ 12.1.004-91. Система стандартов безопасности труда. Пожарная безопасность. Общие требования.

ГОСТ 12.1.009-76. Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Электробезопасность. Термины и определения.

ГОСТ Р 12.1.019-2017. ССБТ Электробезопасность.

ГОСТ Р МЭК 61140-2000. Защита от поражения электрическим током. Общие положения по безопасности, обеспечиваемой электрооборудованием и электроустановками в их взаимосвязи.

СанПиН 2.6.1.2523-09. Нормы радиационной безопасности НРБ-99/2009.

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

ГОСТ 32548-2013. Вентиляция зданий. Воздухораспределительные устройства. Общие технические условия.

СНиП 41-01-2003. Отопление, вентиляция и кондиционирование.

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

ГОСТ 12.4.026-76*. Система стандартов безопасности труда. Цвета сигнальные и знаки безопасности.

СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03. О введении в действие санитарно-эпидемиологических правил и нормативов.

ГОСТ 12.1.006-84. Электромагнитные поля радиочастот. Допустимые уровни на рабочих местах и требования к проведению контроля.

ГОСТ Р 22.0.02-2016. Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Термины и определения.

5.2 Производственная безопасность

В данном разделе представлен анализ всех вредных и опасных факторов, которые могут возникнуть при работе в условиях классной комнаты. Как показано в таблице 22, перечислены все вредные и опасные факторы, характерные для среды классной комнаты.

Таблица 22 – Возможные вредные и опасные факторы

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015 [74])	Нормативные документы
1. Микроклимат	ГОСТ 30494-96. Здания жилые и общественные. Параметры микроклимата в помещениях [75]
2. Шум	ГОСТ 12.1.003-83. Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Шум. Общие требования безопасности (с Изменением N 1) [76]
3. Освещенность рабочей зоны	СНиП 23-05-95*. Естественное и искусственное освещение (с Изменением N 1) [77]
4. Пожароопасность	СП 12.13130.2009. Определение категорий помещений, зданий и наружных установок по взрывопожарной и пожарной опасности (в ред. изм. № 1, утв. приказом МЧС России от 09.12.2010 № 643) [78] ГОСТ 12.1.004-91. Система стандартов безопасности труда. Пожарная безопасность. Общие требования [79]
5. Электробезопасность	ГОСТ 12.1.009-76. Система стандартов безопасности труда (ССБТ) [80] ГОСТ Р 12.1.019-2017. ССБТ Электробезопасность [81] ГОСТ Р МЭК 61140-2000. Защита от поражения электрическим током. Общие положения по безопасности, обеспечиваемой электрооборудованием и электроустановками в их взаимосвязи [82]

Микроклимат: В аудитории, поскольку при работе компьютера выделяется определенное количество тепла, необходимо поддерживать подходящую температуру и влажность для обеспечения нормального функционирования компьютера. Кроме того, компьютерные классы должны быть проветриваемыми, чтобы избежать загрязнения воздуха и высокой концентрации углекислого газа, которые могут повлиять на здоровье человека. Поэтому следует регулярно проверять и обслуживать системы

кондиционирования воздуха, чтобы обеспечить их нормальное функционирование, а также уделять внимание вентиляции в аудитории.

Шум: Компьютеры в аудитории могут создавать определенное количество шума, особенно при работе высокопроизводительных компьютеров, который может быть очень громким и оказывать негативное влияние на здоровье и производительность персонала. Поэтому необходимо принять меры по снижению шума, например, установить в аудитории звукоизолирующие панели или окна, или использовать такое оборудование, как наушники с шумоподавлением, чтобы защитить здоровье персонала.

Освещенность рабочей зоны: освещение в аудитории должно быть соответствующим, не слишком ярким и не слишком темным. Слишком яркий свет может раздражать глаза, влияя на зрение и эффективность работы, а слишком слабый свет может привести к усталости глаз и снижению зрения. Поэтому необходимо правильно организовать освещение в аудитории, чтобы обеспечить правильное и равномерное распределение света, избегая при этом отражений и бликов, чтобы защитить здоровье зрения персонала.

Пожароопасность: Электронное оборудование и электропроводка в аудитории могут представлять пожарную опасность, поэтому необходимо принять меры для предотвращения пожаров. Например, следует регулярно проверять электрические шнуры и розетки, чтобы убедиться, что они не повреждены и не испорчены, а также убрать из класса беспорядок и легковоспламеняющиеся материалы, чтобы избежать пожара. Кроме того, необходимо установить пожарную сигнализацию и средства пожаротушения для своевременного оповещения и тушения пожара, чтобы защитить жизнь и имущество людей.

Электробезопасность: В аудитории электронное оборудование и электропроводка могут создавать угрозы электробезопасности, такие как поражение электрическим током и короткое замыкание. Поэтому необходимо принять меры по обеспечению электробезопасности. Например, следует

регулярно проверять электрические шнуры и розетки, чтобы убедиться, что они не повреждены и не испорчены, а также избегать использования в классе электрических кабелей и оборудования, не отвечающего стандартам безопасности. Кроме того, электрооборудование в аудитории должно проходить техническое обслуживание и ремонт для обеспечения его нормального функционирования, а для предупреждения персонала о проблемах электробезопасности должны быть установлены предупреждающие знаки. Кроме того, следует убедиться, что персонал отключает электропитание, прежде чем подключать или отключать провода и прикасаться к электронному оборудованию, чтобы избежать несчастных случаев, таких как поражение электрическим током и короткое замыкание.

5.2.1 Анализ условий труда на рабочем месте

Рабочее место располагается на 2 этаже в аудитории, помещение представляет собой комнату размером 2 м на 10 м, высотой 3,5 м, с 0 окнами, выходящими на север, в помещении находится (3 единиц технологического оборудования, 3 людей). В зимние месяцы в помещении предусмотрена система отопления. Система отопления обеспечивает достаточный, непрерывный и равномерный нагрев воздуха. Помещения с высокими требованиями к чистоте воздуха должны отапливаться водой, что является безопасной и надежной системой.

В помещении 205 основными источниками шума являются кондиционер, компьютеры (охлаждение в системном блоке, оптический привод DVD-ROM). Согласно спецификации компьютера DNS Office XL, уровень шума составляет 5-10 дБ для блока питания компьютера и 15-20 дБ для охлаждения процессора; остальные элементы охлаждения являются пассивными и их уровень шума не учитывается. Шум от оптических приводов также не учитывается, поскольку они используются в течение очень короткого периода времени. Согласно техническим характеристикам LG S09AWU, максимальный уровень шума,

создаваемый его внутренним блоком, на 28 дБ выше фонового шума. В рассматриваемом зале не требуется дополнительной звукоизоляции, поскольку предельный уровень шума не достигается.

Для защиты рабочей зоны от недостаточного освещения наиболее подходящим является спектр естественного света, но его не всегда достаточно. В основном это связано с режимом работы. Обычно рекомендуется общее освещение и комбинированное освещение. Нормы освещенности рабочего места соответствуют [77].

Воздействие открытых источников тока в рамках данной работы отсутствует. Токи, протекающие в периферийных устройствах компьютера (компьютерная мышь, клавиатура), не представляют значительного риска для здоровья человека. Согласно классификации, данный класс подходит для помещений класса 1 с рабочим напряжением до 1 000 В [80, 81].

В зависимости от характеристик веществ и материалов, находящихся в помещении, помещения относятся к классам А, В, С, D и Е в соответствии с [78]. Рассматриваемое помещение относится к классу С, так как в нем находятся твердые горючие материалы в низкотемпературном состоянии. Возможные причины пожара: 1. работа на открытом электрооборудовании; 2. короткое замыкание электрооборудования; 3. несоблюдение правил пожарной безопасности. Чтобы избежать пожара, оборудование использовалось правильно, персонал был обучен методам пожаротушения, а средства пожаротушения были правильно размещены.

5.2.2 Анализ показателей микроклимата

Микроклимат рабочей среды состоит в основном из температуры, подвижности и влажности. Отклонения от этих параметров могут снизить производительность труда работников, повлиять на состояние здоровья и привести к развитию различных заболеваний. Высокая температура может привести к обезвоживанию, изменениям в сердечно-сосудистой системе,

увеличению частоты дыхания и снижению функции других органов и систем. Высокая влажность может привести к перегреву, а низкие температуры – к переохлаждению. При регулировании погодных условий в производственных помещениях необходимо учитывать время суток, физическую тяжесть работы и избыток тепла в помещении. Оптимальные и допустимые температурно-влажностные условия определены в таблице 23 в соответствии с [83].

Таблица 23 – Оптимальные показатели микроклимата на рабочих местах производственных помещений

Период года	Категория работ по уровню энергозатрат, Вт	Температура воздуха, °С	Температура поверхностей, °С	Относительная влажность воздуха, %	Скорость движения воздуха, м/с
Холодный	Ia (до 139)	22-24	21-25	60-40	Не более 0,1
Теплый	Ia (до 139)	23-25	22-26	60-40	Не более 0,1

Для обеспечения комфортного микроклимата при работе в помещении необходимы меры по контролю высоких и низких температур, такие как системы отопления, вентиляции, кондиционирования воздуха и искусственного освещения. Для поддержания гигиенических норм достаточно использовать естественную вентиляцию или местное кондиционирование воздуха с полностью кондиционированными блоками для обеспечения постоянной температуры, относительной влажности, скорости движения воздуха и его чистоты.

Для расчёта кратности воздухообмена вентилятора в лаборатории объёмом $V = 70 \text{ м}^3$ ($S = 20 \text{ м}^2$, $h = 3,5 \text{ м}$) для обеспечения циркуляции воздуха в помещении использовалась формула [84]:

$$W = V \cdot k, \quad (5.1)$$

где k – нормированная кратность воздухообмена (для лабораторий $k = 3$).

Подставляя данные, можно получить характеристику кратности воздухообмена вентилятора: $W = 70 \cdot 3 = 210 \frac{\text{м}^3}{\text{ч}}$

Таким образом, в аудиторию необходимо установить вентилятор VARP Alpha 210×270 с производительностью 210 м³/ч.

Согласно [85], для поддержания заданного уровня температуры в зимние месяцы требуется система центрального отопления, а для обеспечения адекватного, непрерывного и равномерного нагрева воздуха используется система водяного отопления. Системы вентиляции и кондиционирования воздуха в классных комнатах должны соответствовать требованиям пожарной безопасности. Для защиты исследователей от отклонений микроклимата условия микроклимата могут быть созданы с помощью отопления, вентиляции и кондиционирования воздуха в соответствии с [83-85], особенно для помещений с высокими требованиями к чистоте воздуха, следует использовать системы водяного отопления. Эти меры помогают поддерживать стабильные показатели микроклимата для защиты здоровья и безопасности исследователей.

5.2.3 Анализ показателей шума и вибрации

При работе машин и электромеханических изделий может возникать чрезмерный шум. Для оценки шумной среды можно использовать уровни звука (в децибелах). Согласно [86], допустимый уровень шума на шумных рабочих местах, работах, требующих концентрации внимания, и работах с повышенными требованиями к процессу наблюдения, а также дистанционного управления производственным циклом, составляет 75 дБ. Согласно [87], зоны с уровнем шума 80 дБ должны быть обозначены знаками безопасности.

В аудитории № 205 основными источниками шума являются кондиционер, компьютеры (охлаждение внутри системного блока, оптические приводы DVD-ROM), при этом уровень шума составляет 5-10 дБ от блока питания компьютера, 15-20 дБ от блока охлаждения процессора, другие элементы охлаждения являются пассивными, а шум от оптических приводов

не учитывается, так как они используются в течение очень короткого периода времени. Эти цифры основаны на спецификации компьютера DNS Office XL.

Согласно техническим характеристикам LG S09AWU, максимальный уровень шума внутреннего блока составляет 28 дБ над фоновым шумом, и поскольку предельный уровень шума не превышен, дополнительной звукоизоляции в соответствующем зрительном зале не требуется.

Для достижения гигиенических уровней шума необходимо соблюдать следующие правила при организации работы в помещении: внутренние блоки кондиционеров следует держать подальше от людей, занимающихся творческой деятельностью (программистов) и по возможности не использовать на полную мощность; необходимо своевременно проводить профилактическое обслуживание системных блоков компьютера (очистка от пыли и смазка движущихся частей холодильных агрегатов, замена излишне шумных деталей). Согласно [86,87], повышенный уровень шума можно предотвратить путем уменьшения источников и путей передачи шума, установки экранов и звукопоглощающих устройств, использования средств индивидуальной защиты и т.д.

5.2.4 Анализ освещенности рабочей зоны

Воздействие недостаточного освещения на рабочем месте также считается одним из факторов, влияющих на работоспособность человека. Для промышленных предприятий оптимальное освещение территорий и помещений является важной и сложной технической задачей, обеспечивающей надлежащие гигиенические условия для персонала. Правильно подобранные источники света и их конструкция создают условия для продуктивной работы, в то время как правильное выполнение технических операций, соблюдение правил и мер безопасности также необходимы.

Основной целью расчетов искусственного освещения является определение мощности, необходимой системе электрического освещения для

создания заданной освещенности. В пределах помещения можно выделить два типа систем искусственного освещения – общее освещение и комбинированное освещение, в зависимости от того, как размещены светильники и как распределяется освещенность.

Общее освещение охватывает освещение всей площади помещения, независимо от оборудования, рабочих мест или вспомогательных зон. В зависимости от расположения светильников общее освещение можно разделить на равномерное освещение и местное общее освещение. Равномерное освещение означает, что светильники равномерно распределены в верхних зонах помещения, обеспечивая равномерное освещение всей комнаты. Этот метод обычно используется в помещениях, где расположение рабочей зоны не может быть определено на этапе планирования или требуется гибкая планировка. Локализованное общее освещение, с другой стороны, достигается путем размещения светильников в соответствии с расположением технологического оборудования для создания необходимого уровня освещенности на отдельных поверхностях.

Комбинированная система освещения состоит из двух частей: общего освещения и местного освещения. Общее освещение используется для освещения проходов и зон, где не ведутся работы, чтобы выровнять яркость в пределах прямой видимости работников. Местное освещение обеспечивается светильниками, размещенными непосредственно на рабочем месте. Если рабочие зоны в помещении требуют разного уровня освещения для выполнения различных зрительных задач, то предпочтение следует отдавать местному освещению. Кроме того, местное освещение необходимо, когда рабочие места пространственно отделены друг от друга. Важно отметить, что чисто локальное освещение неприемлемо, поскольку оно может создавать большие различия в освещенности между рабочей поверхностью и окружающей средой, что может негативно сказаться на зрении [77]. Поэтому при проектировании интегрированной системы освещения необходимо

учитывать сочетание общего и локального освещения для достижения наилучшего светового эффекта.

Учитывая специфику рабочего процесса компьютера, можно использовать общую равномерную систему освещения. Для общего освещения можно использовать газоразрядные лампы дневного (ЛД), холодно-белого (ЛХБ), тепло-белого (ЛТБ) и белого цветности (ЛБ).

Предполагая, что размеры компьютерного зала таковы: высота помещения: $H = 350$ см; расстояние светильников от перекрытия: $h_c = 35$ см; можно рассчитать высоту светильника над полом, т.е. высоту подвеса:

$$h_p = H - h_c = 350 - 35 = 315 \text{ см}, \quad (5.2)$$

высота рабочей поверхности от пола составляет: $h_{pn} = 75$ см; теперь необходимо рассчитать высоту светильника над рабочей поверхностью:

$$h = h_n - h_{pn} = 315 - 75 = 260 \text{ см} \quad (5.3)$$

Если для освещения рабочего помещения двухламповыми светильниками ОД при одиночной установке или при непрерывных рядах из одиночных светильников в соответствии с требованиями минимально допустимая высота над полом составляет 3,5 м. Однако полученное расчетное значение $h = 2,6$ м не соответствует требованиям.

Расстояние между соседними светильниками: $L = 3,75$ см; расстояние от крайних светильников до стены: $l = 0,9$ см.

Данное расстояние от крайних светильников до стены является подходящим, так как необходимая величина равна:

$$\frac{L}{3} = \frac{3,75}{3} = 1,25 \text{ см}, \quad (5.4)$$

интегральным критерием оптимальности расположения светильников является величина, равная:

$$\lambda = L/h \quad (5.5)$$

Данная величина должна составлять 1,4 при лучшем и качественном расположении светильников.

Рассчитаем оптимальное расстояние между светильниками:

$$L = \lambda \cdot h = 1,4 \cdot 2,6 = 3,64 \text{ см} \quad (5.6)$$

Это значение полностью применимо к текущему расположению светильников. Общая равномерная искусственная освещенность горизонтальной рабочей поверхности рассчитывается методом коэффициента светового потока:

$$\varphi = \frac{E_k \cdot S \cdot K_s \cdot Z}{N \cdot n} = \frac{200 \cdot 20 \cdot 1,5 \cdot 1,1}{5 \cdot 0,49} = 2793 \text{ Лм} \quad (5.7)$$

Нормируемая минимальная освещенность, согласно [77]: $E_n = 200 \text{ Лм}$ (разряд зрительной работы VI: очень малой точности);
площадь освещаемого помещения: $S = 20 \text{ м}^2$; коэффициент запаса, учитывающий загрязнение светильника, наличие в атмосфере дыма, пыли: $K_s = 1,5$ (помещение с малым выделением пыли); коэффициент неравномерности освещения: $Z = 1,1$ (для люминесцентных ламп);
число ламп в помещении: $N = 5$; коэффициент использования светового потока: $n = 0,49$; индекс помещения:

$$i = \frac{S}{h \cdot (A+B)} = \frac{20}{2,6 \cdot 10} = 0,78, \quad (5.8)$$

коэффициент отражения стен (свежепобеленное состояние стен с окнами без штор): $\rho_c = 50 \%$; коэффициент отражения потолка (свежепобеленное состояние потолка): $\rho_n = 70 \%$.

Расчетное значение светового потока составляет $\varphi = 2793 \text{ Лк}$, наиболее близкой к этому значению люминесцентной лампой является лампа типа ЛХБ с электрической мощностью 65 Вт в системе освещения. Для обеспечения достаточной освещенности рабочей зоны наиболее подходящим, но не всегда достаточным является спектр естественного света. В основном это связано с режимом работы. Поэтому рекомендуется использовать комбинацию общего освещения и подсветки. Норма освещенности на рабочем месте соответствует нормам [77].

5.2.5 Анализ электробезопасности

Согласно [80], электробезопасность – это комплекс организационных и технических мер и инструментов, предназначенных для обеспечения защиты от вредного и опасного воздействия электрических токов, электрических дуг, электромагнитных полей и статического электричества. Когда электрические токи проходят через тело человека, они вызывают тепловые, химические и биологические эффекты, которые могут повлиять на нормальную жизнедеятельность. Работники, работающие в электроустановках, должны пройти специальное обучение, соответствующее характеру их работы.

Поражение электрическим током может произойти, когда человек вступает в контакт с цепями, имеющими источники напряжения и/или тока, которые могут вызвать протекание тока через части тела, находящиеся под напряжением. Как правило, токи свыше 1 миллиампера чувствительны для человеческого тела. Кроме того, в высоковольтных установках поражение электрическим током может произойти даже без контакта с частями под напряжением из-за утечки тока или образования электрической дуги из-за разрыва воздушного зазора.

В рамках текущей работы не производились контакты с открытыми источниками электрического тока. Ток, протекающий в компьютерной периферии (компьютерная мышь, клавиатура), не представляет существенной опасности для здоровья человека. Согласно классификации, данная аудитория подходит под помещения 1 класса, в котором рабочие напряжения не превышают 1 000 В [80,81].

5.2.6 Анализ пожарной безопасности

В зависимости от характеристик веществ и материалов, находящихся в помещении, по взрывопожарной и пожарной опасности помещения подразделяются на категории А, Б, В, Г и Д в соответствии с [78]. Рассматриваемое помещение относится к категории В, так как в нем

содержатся твердые горючие вещества в холодном состоянии. Возможные причины возгорания: работа с открытой электроаппаратурой; короткие замыкания в блоках питания; несоблюдение правил пожарной безопасности.

Профилактические меры, включая организационно-технические, оперативные и плановые мероприятия, принимаются для снижения риска возникновения пожара и минимизации ущерба. Организационно-технические мероприятия включают обучение и аттестацию персонала и использование наглядных пособий для обеспечения пожарной безопасности [79]. Эксплуатационные меры включают проверку оборудования. Управленческие меры включают установление правил работы и соблюдение мер пожарной безопасности. Правила пожарной безопасности должны строго соблюдаться, чтобы предотвратить возникновение пожаров: содержание помещений в соответствии с требованиями пожарной безопасности; надлежащая эксплуатация оборудования (правильное включение оборудования в сеть электропитания, контроль нагрева оборудования); обучение производственного персонала правилам пожарной безопасности; наличие, правильное размещение и использование средств пожаротушения.

В помещениях, содержащих электрооборудование, во избежание поражения электрическим током следует использовать углекислотные или порошковые огнетушители. Эти огнетушители могут тушить возгорания широкого спектра веществ и материалов, а также электрооборудования и горючих жидкостей под напряжением до 1000 вольт. Использование химических и пенных огнетушителей запрещено. Огнетушители следует размещать по мере необходимости в месте, которое необходимо защитить от неблагоприятных факторов (например, прямых солнечных лучей, тепловых потоков, механических воздействий, вибраций, агрессивных сред, повышенной влажности и т.д.), они должны быть хорошо видны и легко доступны. Лучше всего размещать огнетушители в местах наибольшей вероятности возникновения пожара, например, в проходах и возле выходов из

помещений. Однако огнетушители не должны располагаться таким образом, чтобы препятствовать эвакуации людей. В соответствии с требованиями пожарной безопасности [78, 79] на каждом этаже должны быть предусмотрены два огнетушителя ОП-3, переносные порошковые огнетушители, пожарные краны и кнопки пожарной сигнализации.

5.3 Экологическая безопасность

В данном исследовании учитывается тот факт, что титан – это металлический элемент, который широко распространен в земной коре и может вызывать загрязнение окружающей среды. Когда гидрид магния содержит примеси титана, он также может оказывать влияние на окружающую среду.

Производство гидрида магния создает шумовое загрязнение, которое оказывает негативное влияние на жилые районы и здоровье людей. В процессе расчета и моделирования может образовываться определенное количество газовых выбросов, которые могут оказывать воздействие на атмосферу. Производство и использование гидрида магния может привести к выбросу газов и пыли, содержащих титан, что может оказать негативное воздействие на здоровье людей и животных.

В процессе расчета и моделирования может образовываться определенное количество сточных вод, которые могут попасть в водопровод и загрязнить воду. Использование химических веществ, содержащих титан, при подготовке и использовании гидрида магния также может загрязнять воду. В то же время, использование редких металлов и химических веществ может повлиять на литосферу Земли, что приведет к загрязнению и экологическому ущербу. При производстве и использовании гидрида магния образуются отходы и загрязняющие вещества, содержащие титан, которые могут загрязнять почву.

Для снижения воздействия производства и использования гидрида магния на окружающую среду можно принять меры по сокращению выбросов и образования сточных вод, например, использовать компьютеры с низким уровнем выбросов, возобновляемые источники энергии и соответствующие меры по очистке сточных вод, чтобы сточные воды не загрязняли окружающую водную среду. При использовании этих материалов необходимо принимать меры по снижению воздействия на литосферу, например, использовать возобновляемые материалы вместо редких металлов или более экологичные химикаты. Снижение воздействия титановых примесей на окружающую среду может быть достигнуто путем усиления контроля за утилизацией отходов и сбросом загрязняющих веществ, сокращения использования и сброса титановых примесей, проведения экологического мониторинга и оценки, а также своевременного решения проблем загрязнения окружающей среды. Также можно изучить возможность использования других альтернативных материалов для снижения воздействия на окружающую среду.

5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

Чрезвычайная ситуация (ЧС) – это ситуация, возникающая на территории в результате аварии, стихийного бедствия, катастрофы, природного или иного бедствия, которая может привести к гибели или травмированию людей, нанесению ущерба здоровью или окружающей среде, значительному материальному ущербу и нарушению жизнедеятельности людей [88]. Существует два типа чрезвычайных ситуаций: техногенные и природные.

К чрезвычайным ситуациям техногенного характера относятся пожары, взрывы, саботаж и выброс токсичных веществ, а к чрезвычайным ситуациям природного характера – стихийные бедствия. Опасности, связанные с авариями, относятся к внезапным, неконтролируемым источникам энергии,

которые могут привести к травмам или смерти, материальному ущербу и ущербу окружающей среде.

Рассмотрим возможные аварийные ситуации в аудитории № 205 учебного корпуса № 3 ТПУ, а именно: возникновение пожара; удар электрическим током; падение с высоты собственного роста; падение с лестницы. В таблице 24 представлены мероприятия по предотвращению и ликвидации последствий вышеуказанных аварийных ситуаций. Рассмотрены мероприятия по предотвращению и ликвидации этих ситуаций, согласно [82,88].

Таблица 24 – Аварийные ситуации

№	Аварийная ситуация	Мероприятия по предотвращению	Мероприятия по ликвидации последствий аварийной ситуации
1	Падение с высоты соответственного роста	1. Содержание помещения в надлежащем порядке. 2. Ограничение рабочего пространства. 3. Своевременное проведение инструктажа.	1. Осмотреть или опросить пострадавшего; 2. если необходимо – вызвать скорую помощь; 3. остановить кровотечение, если оно имеется; 4. если есть подозрение, что у пострадавшего сломан позвоночник (резкая боль в позвоночнике при малейшем движении), необходимо обеспечить пострадавшему полный покой в положении лежа на спине до оказания квалифицированной медицинской помощи.
2	Падение с лестницы	1. Установка поручней на лестницу. 2. Покрытие ступенек лестницы антискользящим покрытием. 3. Своевременное проведение инструктажа.	1. Вызвать скорую помощь; 2. остановить кровотечение, если оно имеется; 3. если есть подозрение, что у пострадавшего сломан позвоночник (резкая боль в позвоночнике при малейшем движении), необходимо обеспечить пострадавшему полный покой в положении лежа на спине до оказания квалифицированной медицинской помощи.

Продолжение таблицы 24

3	Удар электрическим током	<ol style="list-style-type: none"> 1. Заземление всех электроустановок. 2. Ограничение рабочего пространства. 3. Обеспечение недоступности токоведущих частей аппаратуры. 4. Своевременное проведение инструктажа. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Быстро освободить пострадавшего от действия электрического тока [82]; 2. вызвать скорую помощь; 3. если пострадавший потерял сознание, но дыхание сохранилось, его следует удобно уложить, расстегнуть стесняющую одежду, создать приток свежего воздуха и обеспечить полный покой; 4. пострадавшему надо дать понюхать нашатырный спирт, сбрызнуть лицо водой, растереть и согреть тело; 5. при отсутствии дыхания нужно немедленно делать искусственное дыхание и массаж сердца.
4	Пожар	<ol style="list-style-type: none"> 1. Своевременное проведение инструктажа. 2. Установление средств автоматического пожаротушения в помещениях. 3. Установка датчиков дыма и огня. 4. Обеспечение путей эвакуации и поддержание их в надлежащем состоянии. 4. Контроль работы электроприборов. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Обесточить помещение, прекратить поступление воздуха; 2. немедленно сообщить о пожаре дежурному или на пост охраны; 3. по возможности принять меры по эвакуации людей, тушению пожара и спасению материальных ценностей.

5.5 Выводы по главе «Социальная ответственность»

В данной главе рассматриваются вредные и опасные факторы: микроклимат; шум; освещение; пожароопасные факторы; электроопасные факторы; вентиляция. Рассматриваются причины и способы защиты, аварийные и непредвиденные ситуации, профилактические меры и меры по ликвидации их последствий. Отдельно рассматривается воздействие на окружающую среду. Все средства защиты, профилактика облучения и методы минимизации факторов в различных ситуациях описаны в соответствующих разделах этой главы. Этот класс в учебном корпусе относится к классу пожарной безопасности В [78, 79] и категории электробезопасности 1 [80, 81]. Во избежание несчастных случаев на производстве можно достичь цели снижения вредного воздействия на окружающую среду.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проведен обзор имеющихся в литературе данных об использовании магния в качестве материала-накопителя для хранения и транспортировки водорода. Перечислены основные приближения, используемые при первопринципном исследовании атомной и электронной структур твердого тела. Представлены результаты тестовых расчетов, позволивших выбрать оптимальный набор параметров расчета для исследования системы магний-водород и вычислить параметры решетки магния и гидрида магния. Все расчеты выполнялись в рамках теории функционала электронной плотности методом псевдопотенциала, реализованного в программном обеспечении ABINIT.

В данной работе было изучено зависимость энергии связи водорода в гидриде магния с примесью титана от содержания водорода. При удалении одного атома водорода энергия связи водорода на расстоянии порядка параметра решетки от атома титана существенно не отличается от энергии связи в чистом гидриде магния. При последовательном удалении по одному атому водорода в первой координационной сфере атома титана энергия связи водорода уменьшается с 0,906 эВ до 0,313 эВ, а последовательное удаление двух атомов водорода вдали от атома титана уменьшает энергию связи водорода с 0,906 эВ до 0,035 эВ. То есть добавление титана делает энергию водородной связи ниже, чем в чистом гидриде магния, и можно утверждать, что примесь титана облегчает десорбцию водорода гидридом магния, тем самым облегчая выделение водорода из гидрида магния. Однако в $Mg_{15}TiH_{29}$ энергия связи водорода заметно выше, чем в $Mg_{16}H_{29}$, хотя и все еще ниже, чем в чистом $Mg_{16}H_{32}$.

Влияние примеси титана на параметры решетки гидрида магния и распределение электронной плотности также было исследовано в данной работе. Были получено, что добавление титана приводит к незначительному

уменьшению параметров a и b и небольшому увеличению параметра c системы $Mg_{16-x}Ti_xH_z$. С уменьшением содержания водорода параметр решетки c увеличивается $\sim 1-2\%$, а параметр a понижается на $\sim 1-7\%$.

Показано, что плотность валентных электронов вблизи примесного атома Ti в $Mg_{15}TiH_{32-x}$ заметно выше, чем в $Mg_{16}H_{32-x}$. Объем областей с пониженной электронной плотностью ($\rho < 0,005 \frac{e}{\text{Бор}^3}$) в межатомной области вблизи атома титана заметно меньше в системе $Mg_{15}TiH_{32-x}$, чем в чистом гидриде магния. Таким образом, добавление атома титана повышает ковалентную составляющую связи водород-металл в системе $Mg_{15}TiH_{32-x}$, по сравнению с $Mg_{16}H_{32-x}$.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Прогресс в исследовании материалов для хранения водорода из магния и магниевых сплавов / С. Ву, Х. Сюэ, Ч. Пэн [и др.]. // *Материалы и инженерия редких металлов*. – 2022. – Т. 51, № 2. – С. 727–734.
2. Ли Ю. Синтез, свойства и механизм выделения водорода в материалах для хранения водорода на основе магниевого борогидридно-аммиачного соединения / Ю. Ли; Чжэцзянский университет. – Ханчжоу, 2017. – С. 3–10.
3. Сунь Ю. Механизмы реакций окисления/гидрогенизации магния и магниевых сплавов с газом *in situ* / Ю. Сунь; Университет Яншань. – Циньхуандао, 2020. – С. 1–4.
4. Сиань К. Разработка структуры состава и соответствующего механизма высокочастотных материалов для хранения водорода на основе борогидрида лития и гидрида магния / К. Сиань; Чжэцзянский университет. – Ханчжоу, 2020. – С. 89–93.
5. Carl-Jochen W. Hydrogen energy-Abundant, efficient, clean: a debate over the energy-system-of-change / W. Carl-Jochen // *Int J Hydrog Energy*. – 2009. – Vol. 34, № 14. – P. 1–52.
6. Momirlan M. The properties of hydrogen as fuel tomorrow in sustainable energy system for a cleaner planet / M. Momirlan, T.N. Veziroglu // *Int J Hydrog Energy*. – 2005. – Vol. 30, № 7. – P. 795–802.
7. Khaselev O. A monolithic photovoltaic-photoelectrochemical device for hydrogen production via water splitting / O. Khaselev, J.A. Turner // *Science*. – 1998. – Vol. 280, № 5362. – P. 425–427.
8. Chaubey R. A review on development of industrial processes and emerging techniques for production of hydrogen from renewable and sustainable sources / R. Chaubey, S. Sahu, O.O. James, et al. // *Renew Sust Energy Rev*. – 2013. – Vol. 23. – P. 443–462.

9. Selvam P. Magnesium and magnesium alloy hydrides / P. Selvam, B. Viswanathan, C. Swamy, et al. // *Int J Hydrogen Energy*. – 1986. – Vol. 11, № 3. – P. 169–192.
10. Beychok M. Heat of combustion: edited by Hogan C.M. / M. Beychok – Текст : электронный // *The Encyclopedia of Earth*: [сайт]. – 2012. – URL: https://editors.eol.org/eoearth/wiki/Heat_of_combustion (дата обращения: 08.10.22)
11. Schlapbach L. Technology: Hydrogen-fuelled vehicles / L. Schlapbach // *Nature*. – 2009. – Vol. 460, № 7257. – P. 809–811.
12. Schlapbach L. Hydrogen-storage materials for mobile applications / L. Schlapbach, A. Zuttel // *Nature*. 2001. – Vol. 414, № 6861. – P. 353–358.
13. Durbin D.J. Review of hydrogen storage techniques for on board vehicle applications / D.J. Durbin, C. Malardier-Jugroot // *Int J Hydrog Energy*. – 2013. – Vol. 38, № 34. – P. 14595–14617.
14. Bhatnagar A. Catalytic effect of carbon nanostructures on the hydrogen storage properties of MgH₂–NaAlH₄ composite / A. Bhatnagar, S.K. Pandey, V. Dixit, et al. // *Int J Hydrog Energy*. – 2014. – Vol. 39, № 26. – P. 14240–14246.
15. Sakintuna B. Metal hydride materials for solid hydrogen storage: a review / B. Sakintuna, F. Lamari-Darkrim, M. Hirscher // *Int J Hydrog Energy*. – 2007. – Vol. 32, № 9. – P. 1121–1140.
16. He Z. Hydrogen storage in hierarchical nanoporous silicon–carbon nanotube architectures / Z. He, S. Wang, X. Wang, et al. // *Int J Energy Res*. – 2013. – Vol. 37, № 7. – P. 754–760.
17. Xia Y. Porous carbon-based materials for hydrogen storage: advancement and challenges / Y. Xia, Z. Yang, Y. Zhu // *J Mater Chem A*. – 2013. – Vol. 1, № 33. – P. 9365–9381.
18. Pukazhselvan D. Studies on metal oxide nanoparticles catalyzed sodium aluminum hydride / D. Pukazhselvan, M.S. Hudson, A.S. Sinha, et al. // *Energy*. – 2010. – Vol. 35, № 12. – P. 5037–5042.

19. Cho Y.W. Thermal destabilization of binary and complex metal hydrides by chemical reaction: a thermodynamic analysis / Y.W. Cho, J.H. Shim, B.J. Lee // *Calphad*. – 2006. – Vol. 30, № 1. – P. 65–69.
20. Jain I.P. Hydrogen storage in Mg: a most promising material / I.P. Jain, C. Lal, A. Jain // *Int J Hydrog Energy*. – 2010. – Vol. 35, № 10. – P. 5133–5144.
21. Saita I. Hydriding combustion synthesis of Mg_2NiH_4 / I. Saita, L. Li, K. Saito, et al. // *J Alloy Compd.* – 2003. – Vol. 356–357. – P. 490–493.
22. Pang Y. TiF_4 -doped $Mg(AlH_4)_2$ with significantly improved dehydrogenation properties / Y. Pang, Y. Liu, X. Zhang, et al. // *Int J Hydrog Energy*. – 2013. – Vol. 38, № 30. – P. 13343–13351.
23. Aguey-Zinsou K-F. Hydrogen in magnesium: new perspectives toward functional stores / K-F. Aguey-Zinsou, J-R. Ares-Fernández // *Energy & Environmental Science*. – 2010. – Vol. 3, № 5. – P. 526.
24. Huang Z. Improvement in hydrogen cycling properties of magnesium through added graphite / Z. Huang, Z. Guo, A. Calka, et al. // *Mater. Lett.* – 2007 – Vol. 61, № 14–15. – P. 3163–3166.
25. Huang Z. Noticeable improvement in the desorption temperature from graphite in rehydrogenated MgH_2 /graphite composite / Z. Huang, Z. Guo, A. Calka, et al. // *Mater. Sci. Eng. A*. – 2007. – Vol. 447, № 1–2. – P. 180–185.
26. Huang Z. Effects of iron oxide (Fe_2O_3 , Fe_3O_4) on hydrogen storage properties of Mg-based composites / Z. Huang, Z. Guo, A. Calka, et al. // *J. Alloys Compd.* – 2006. – Vol. 422, № 1–2. – P. 299–304.
27. Schulz R. Nanocrystalline materials for hydrogen storage / R. Schulz, S. Boily, L. Zaluski, et al. // *Innovations Metallic Mater.* – 1995. – P. 529–535.
28. Hanada N. SEM and TEM characterization of magnesium hydride catalyzed with Ni nano-particle or Nb_2O_5 / N. Hanada, E. Hirotohi, T. Ichikawa, et al. // *J. Alloys Compd.* – 2008. – Vol. 450, № 1–2. – P. 395–399.

29. Czujko T. Investigation of the hydrogen desorption properties of Mg + 10 wt.%X (X = V, Y, Zr) submicrocrystalline composites / T. Czujko, R.A. Varin, Ch. Chiu, et al. // *J. Alloys Compd.* – 2006 – Vol. 414, № 1–2. – P. 240–247.
30. Kwon I.-H. Improvement of hydrogen-storage properties of Mg by reactive mechanical grinding with Fe₂O₃ / I.-H. Kwon, J.-L. Bobet, J.-S. Bae, et al. // *J. Alloys Compd.* – 2005 – Vol. 396, № 1–2 – P. 264–268.
31. Huot J. Mechanically alloyed metal hydride systems / J. Huot., G. Liang., R. Schulz // *Appl. Phys. A.* – 2001 – Vol. 72 – P. 187–195.
32. Babu A.R. Magnesium hydrides for hydrogen storage: a mini review / A.R. Babu, N. Devunuri, D.R. Manisha, et al. // *Int J Chem Tech Res.* – 2014. – Vol. 6, № 7. – P. 3451–3455.
33. Prabhukhot P.R. A review on solid state hydrogen storage material / P.R. Prabhukhot, M.M. Wagh, A.C. Gangal // *Adv Energy Power.* – 2016. – Vol. 4, № 2. – P. 11–22.
34. Rahmaninasab M.A. Properties of activated MgH₂/mischmetal nanostructured composite produced by ball-milling / M.A. Rahmaninasab, S. Raygan, H. Abdizadeh, et al. // *Mater Renew Sustain Energy.* – 2018. – Vol. 7, № 15. – P. 1–11.
35. Abe J.O. Hydrogen energy, economy and storage: Review and recommendation / J.O. Abe, A.P.I. Popoola, E. Ajenifuja, et al. // *International Journal of Hydrogen Energy.* – 2019. – Vol. 44, № 29. – P. 15072–15086.
36. Vajo J.J. Altering hydrogen storage properties by hydride destabilization through alloy formation: LiH and MgH₂ destabilized with Si / J.J. Vajo // *J Phys Chem B.* – 2004. – Vol. 108, № 37. – P. 13977–13983.
37. Lai Q. Rational design of nanosized light elements for hydrogen storage: classes, synthesis, characterization, and properties / Q. Lai, T. Wang, Y. Sun, et al. // *Adv Mater Technol.* – 2018. – Vol.3, № 9. – P. 1700298.

38. Vajo J.J. Influence of nano-confinement on the thermodynamics and dehydrogenation kinetics of metal hydrides / J.J. Vajo // *Curr Opin Solid State Mater Sci.* – 2011. – Vol. 15, № 2. – P. 52–61.

39. Zhao-Karger Z. Altered thermodynamic and kinetic properties of MgH₂ infiltrated in microporous scaffold / Z. Zhao-Karger, J. Hu, A. Roth, et al. // *Chem Commun.* – 2010. – Vol. 46, № 44. – P. 8353–8355.

40. Zhang J. Recent progress in magnesium hydride modified through catalysis and nanoconfinement / J. Zhang, S. Yan, H. Qu // *Int J Hydrogen Energy.* – 2018. – Vol. 43, № 3. – P. 1545–1565.

41. de Jongh P.E. Nanosizing and nanoconfinement: new strategies towards meeting hydrogen storage goals / P.E. de Jongh, P. Adelhelm // *ChemSusChem.* – 2010; – Vol. 3, № 12: – P. 1332–1348.

42. Callini E. Nanostructured materials for solid-state hydrogen storage: a review of the achievement of COST Action MP1103 / E. Callini, K. Aguey-Zinsou, R. Ahuja, et al. // *Int J Hydrogen Energy.* – 2016. – Vol. 41, № 32. – P. 14404–14428.

43. Yu X.B. The effect of a Ti-V-based BCC alloy as a catalyst on the hydrogen storage properties of MgH₂ / X.B. Yu, Z.X. Yang, H.K. Liu, et al. // *Int J Hydrogen Energy.* – 2010. – Vol. 35, № 12. – P. 6338–6344.

44. Laversenne L. In operando study of TiVCr additive in MgH₂ composites / L. Laversenne, J. Andrieux, D. Plante, et al. // *Int J Hydrogen Energy.* – 2013. – Vol. 38, № 27. – P. 11937–11945.

45. Barkhordarian G. Catalytic mechanism of transition-metal compounds on Mg hydrogen sorption reaction / G. Barkhordarian, T. Klassen, R. Bormann // *J Phys Chem B.* – 2006. – Vol. 110, No22. – P. 11020–11024.

46. Oelerich W. Metal oxides as catalysts for improved hydrogen sorption in nanocrystalline Mg-based materials / W. Oelerich, T. Klassen, R. Bormann // *J Alloys Compd.* – 2001. – Vol. 315, № 1–2. – P. 237–242.

47. Polanski M. Comparative studies of the influence of different nanosized metal oxides on the hydrogen sorption properties of magnesium hydride / M. Polanski, J. Bystrzycki // *J Alloys Compd.* – 2009. – Vol. 486, № 1–2. – P. 697–701.
48. Pitt M.P. The synthesis of nanoscopic Ti based alloys and their effects on the MgH₂ system compared with the MgH₂ + 0.01Nb₂O₅ benchmark / M.P. Pitt, M. Paskevicius, C.J. Webb, et al. // *Int J Hydrogen Energy.* – 2012. – Vol. 37, № 5. – P. 4227–4237.
49. Wang P. Hydrogenation characteristics of Mg–TiO₂ (rutile) composite / P. Wang, A.M. Wang, H.F. Zhang, et al. // *J Alloys Compd.* – 2000. – Vol. 313, № 1–2. – P. 218–223.
50. Ponthieu M. Structural Properties and Reversible Deuterium Loading of MgD₂–TiD₂Nanocomposites / M. Ponthieu, F. Cuevas, J.F. Fernández, et al. // *The Journal of Physical Chemistry C.* – 2013. – Vol. 117, № 37. – P. 18851–18862.
51. Ranjbar A. Effects of SiC nanoparticles with and without Ni on the hydrogen storage properties of MgH₂ / A. Ranjbar, Z.P. Guo, X.B. Yu, et al. // *Int J Hydrogen Energy.* – 2009. – Vol. 34, № 17. – P. 7263–7268.
52. Gasan H. Effect of V, Nb, Ti and graphite additions on the hydrogen desorption temperature of magnesium hydride / H. Gasan, O.N. Celik, N. Aydinbeyli, et al. // *Int J Hydrogen Energy.* – 2012. – Vol. 37, № 2. – P. 1912–1918.
53. Mirabile Gattia D. Microstructure and kinetics evolution in MgH₂–TiO₂ pellets after hydrogen cycling / D. Mirabile Gattia, G. Di Girolamo, A. Montone // *J Alloys Compd.* – 2014. – Vol. 615. – P.689–692.
54. Liang G. Catalytic effect of transition metals on hydrogen sorption in nanocrystalline ball milled MgH₂–Tm (Tm=Ti, V, Mn, Fe and Ni) systems / G. Liang, J. Huot, S. Boily, et al. // *J Alloys Compd.* – 1999. – Vol. 292, № 1–2. – P. 247–252.
55. Lu J. Hydrogen storage properties of nanosized MgH₂-0.1TiH₂ prepared by ultrahigh-energy-high-pressure milling / J. Lu, Y.J. Choi, Z.Z. Fang, et al. // *J Am Chem Soc.* – 2009. – Vol. 131, № 43. – P. 15843–15852.

56. Amirkhiz B.S. Synergy of elemental Fe and Ti promoting low temperature hydrogen sorption cycling of magnesium / B.S. Amirkhiz, B. Zahiri, P. Kalisvaart, et al. // *Int J Hydrogen Energy*. – 2011. – Vol. 36, № 11. – P. 6711–6722.

57. Wronski Z.S. A new nanonickel catalyst for hydrogen storage in solid-state magnesium hydrides / Z.S. Wronski, G.J.C. Carpenter, T. Czujko, et al. // *Int J Hydrogen Energy*. – 2011. – Vol. 36, № 1. – P. 1159–1166.

58. Reiser A. The application of Mg based metal-hydrides as heat energy storage systems / A. Reiser, B. Bogdanovic, K. Schlichte // *Int. J. Hydrog. Energy*. – 2000 – Vol.25, № 5. – P. 425–430.

59. Zhou C. Effect of Ti Intermetallic catalysts on hydrogen storage properties of magnesium hydride / C. Zhou, Z.Z. Fang, C. Ren, et al. // *J. Phys. Chem. C* – 2013, – Vol. 117, № 25, – P. 12973–12980.

60. Бассани Ф., Парравичини Дж.П. Электронные состояния и оптические переходы в твердых телах: Пер. с англ., под ред. В. Л. Бонч-Бруевича. – Москва: «Наука», 1982. – 392 с.

61. Born M. Zur Quantentheorie der Molekeln / M. Born, R. Oppenheimer // *Annalen der Physik*. – 1927. – Vol. 84. – P. 457–484.

62. Thomas L. H. The calculation of atomic fields / L. H. Thomas // *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*. – 1927. – Vol. 23. – P. 542–548.

63. Dirac. P. A. M. The Quantum Theory of the Electron / P. A. M. Dirac // *Proc. R. Soc. Lond. A*. – 1928. – Vol. 117. – P. 610–624.

64. Hohenberg P. Inhomogeneous Electron Gas / P. Hohenberg, W. Kohn // *Phys. Rev.* – 1964. – Vol. 136, № 3B. – P. 864–871.

65. Кон В. Электронная структура вещества: волновые функции и функционалы плотности / В. Кон // *Успехи физических наук*. – 2002. – Т. 172, № 3. – С. 336–348.

66. Bloch F. Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern / F. Bloch // *Zeitschrift für Physik*. – 1928. – Vol. 52. – P. 555–600.

67. Kohn W. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects / W. Kohn, L. J. Sham // *Physical Review*. – 1965 – Vol. 140, № 4A. – P. A1133–A1138.

68. ABINIT – abinit [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.abinit.org> – 23.05.23.

69. Тао Х. Первопринципные расчеты электронной структуры для стабильности решетки металлического Mg / Х. Тао, Ц. Инь, Ч. Инь[и др.]. // *Китайский журнал цветных металлов*. – 2008. – Т. 18, № 12. – С. 2224–2232.

70. Шеляпина М.Г. Структура, стабильность и динамика многокомпонентных гидридов металлов по данным теории функционала плотности и ядерного магнитного резонанса / М.Г. Шеляпина // *санкт-петербургский государственный университет*. – 2018. – С. 93.

71. Hamann D.R. Optimized norm-conserving Vanderbilt pseudopotentials / D.R. Hamann // *Phys. Rev. B*. – 2013. – Vol. 88, № 8. – P. 085117(1–10).

72. Perdew J.P. Generalized Gradient Approximation Made Simple / J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof // *Phys. Rev. Lett.* – 1996. – Vol. 77, № 18. – P. 3865–3868.

73. Mueller W.M., Blackledge J.P., Libowitz G.G. Metal hydrides. – New York: Academic Press, 1968. – 791 p.

74. ГОСТ 12.0.003-2015. Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Опасные и вредные производственные факторы. Классификация. Режим доступа: <https://docs.cntd.ru/document/1200136071/> (дата обращения: 14.05.23).

75. ГОСТ 30494-96. Здания жилые и общественные. Параметры микроклимата в помещениях. Режим доступа: <http://docs.cntd.ru/document/1200003003> (дата обращения: 14.05.23).

76. ГОСТ 12.1.003-83. Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Шум. Общие требования безопасности (с Изменением N 1) Режим доступа: <http://docs.cntd.ru/document/5200291> (дата обращения: 14.05.23).

77. СНиП 23-05-95*. Естественное и искусственное освещение (с Изменением N 1) Режим доступа: <http://docs.cntd.ru/document/871001026> (дата обращения: 14.05.23).

78. СП 12.13130.2009. Определение категорий помещений, зданий и наружных установок по взрывопожарной и пожарной опасности (в ред. изм. № 1, утв. приказом МЧС России от 09.12.2010 № 643). [Электронный ресурс]. Доступ из сборника НСИС ПБ. – 2011. – № 2 (45).

79. ГОСТ 12.1.004-91. Система стандартов безопасности труда. Пожарная безопасность. Общие требования. Режим доступа: <https://docs.cntd.ru/document/9051953> (дата обращения: 14.05.23).

80. ГОСТ 12.1.009-76. Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Электробезопасность. Термины и определения Режим доступа: <http://docs.cntd.ru/document/5200278> (дата обращения: 14.05.23).

81. ГОСТ Р 12.1.019-2017. ССБТ Электробезопасность Режим доступа: <https://beta.docs.cntd.ru/document/1200161238> (дата обращения: 14.05.23).

82. ГОСТ Р МЭК 61140-2000. Защита от поражения электрическим током. Общие положения по безопасности, обеспечиваемой электрооборудованием и электроустановками в их взаимосвязи. Режим доступа: <https://docs.cntd.ru/document/1200017996> (дата обращения: 14.05.23).

83. СанПиН 2.2.4.548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений Режим доступа: <http://docs.cntd.ru/document/901704046> (дата обращения: 14.05.23).

84. ГОСТ 32548-2013. Вентиляция зданий. Воздухораспределительные устройства. Общие технические условия. Режим доступа: <https://docs.cntd.ru/document/1200110084> (дата обращения: 14.05.23).

85. СНиП 41-01-2003. Отопление, вентиляция и кондиционирование Режим доступа: <http://docs.cntd.ru/document/1200035579> (дата обращения: 14.05.23).

86. ГОСТ 12.1.029-80. Средства и методы защиты от шума. Режим доступа: <http://docs.cntd.ru/document/5200292> (дата обращения: 14.05.23).

87. ГОСТ 12.4.026-76*. Система стандартов безопасности труда. Цвета сигнальные и знаки безопасности. Режим доступа: <http://docs.cntd.ru/document/1200003391> (дата обращения: 14.05.23).

88. ГОСТ Р 22.0.02-2016. Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Термины и определения. Режим доступа: <https://docs.cntd.ru/document/1200139176> (дата обращения: 14.05.23).