



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
Исследование композиционного материала на основе Mg-MOF методом позитронной аннигиляции in situ при высокотемпературных воздействиях

УДК 669.721.5:669.788.081-978

Обучающийся

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0Б91	Ашихмин Назар Алексеевич		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент ОЭФ	Лаптев Роман Сергеевич	канд.тех.наук		

### КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент ОСГН, ШБИП	Былкова Татьяна Васильевна	канд.экон.наук, доцент		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент ООД, ШБИП	Антоневич Ольга Алексеевна	канд.биол.наук, доцент		

### ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП/ОПОП, должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент ОЭФ, ИЯТШ	Склярова Е.А.	канд.пед.наук, доцент		

## ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОСВОЕНИЯ ООП/ОПОП

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

	требований информационной безопасности.
<b>ОПК(У)-7</b>	Способен использовать в своей профессиональной деятельности знание иностранного языка.
<b>ОПК(У)-8</b>	Способен критически переосмысливать накопленный опыт, изменять при необходимости направление своей деятельности.
<b>ОПК(У)-9</b>	Способен получить организационно-управленческие навыки при работе в научных группах и других малых коллективах исполнителей.
<b>Профессиональные компетенции</b>	
<b>ПК(У)-1</b>	Способностью использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин
<b>ПК(У)-2</b>	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
<b>ПК(У)-3</b>	Готовность применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований
<b>ПК(У)-4</b>	Способность применять на практике профессиональные знания и умения, полученные при освоении профильных физических дисциплин
<b>ПК(У)-5</b>	Способность пользоваться современными методами обработки, анализа и синтеза физической информации в избранной области физических исследований
<b>ПК(У)-6</b>	Способность понимать и использовать на практике теоретические основы организации и планирования физических исследований
<b>ПК(У)-7</b>	Способность участвовать в подготовке и составлении научной документации по установленной форме
<b>ПК(У)-8</b>	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  
 \_\_\_\_\_ Склярова Е.А.  
 (Подпись) (Дата)                      (ФИО)

### ЗАДАНИЕ на выполнение выпускной квалификационной работы

Обучающийся:

Группа	ФИО
0Б91	Ашихмин Назар Алексеевич

Тема работы:

Исследование композиционного материала на основе Mg-MOF методом позитронной аннигиляции in situ при высокотемпературных воздействиях
<i>Утверждена приказом директора (дата, номер)</i>

Срок сдачи обучающимся выполненной работы:	
--	--

#### ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<b>Исходные данные к работе</b> <i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к функционированию (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.)</i>	Объект исследования: композиционный материала на основе Mg-MOF  Методы исследования: in situ позитронная спектроскопия методом доплеровского уширения аннигиляционной линии
<b>Перечень разделов пояснительной записки подлежащих исследованию, проектированию и разработке</b> <i>(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)</i>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Обзор литературных источников.</li> <li>2. Метод in situ ДУАЛ</li> <li>3. Проведение испытаний Mg, MOF, Mg-MOF при комнатной температуре и высокотемпературной среде</li> <li>4. Анализ полученных данных</li> <li>5. Раздел «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение».</li> <li>8. Раздел «Социальная ответственность».</li> <li>9. Заключение.</li> </ol>
<b>Перечень графического материала</b> <i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i>	
<b>Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы</b> <i>(с указанием разделов)</i>	
<b>Раздел</b>	<b>Консультант</b>
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Былкова Татьяна Васильевна
Социальная ответственность	Антоневич Ольга Алексеевна

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

**Задание выдал руководитель:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент ОЭФ	Лаптев Роман Сергеевич	канд.тех.наук		

**Задание принял к исполнению обучающийся:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0Б91	Ашихмин Назар Алексеевич		

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:

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>
0Б91	Ашихмин Назар Алексеевич

Тема работы:

Исследование композиционного материала на основе Mg-MOF методом позитронной аннигиляции in situ при высокотемпературных воздействиях
--

Срок сдачи обучающимся выполненной работы:

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
27.11.22	Аналитический литературный обзор	20
29.01.23	Проведение экспериментальной части исследования	25
25.02.23	Анализ результатов	30
29.05.23	Социальная ответственность	10
29.05.23	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	10
30.05.23	Заключение	5

**СОСТАВИЛ:**

**Руководитель ВКР**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент ОЭФ	Лаптев Р.С.	канд.тех.наук		

**СОГЛАСОВАНО:**

**Руководитель ООП/ОПОП**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент ОЭФ, ИЯТШ	Склярова Е.А.	к.п.н., доцент		

**Обучающийся**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0Б91	Ашихмин Назар Алексеевич		

## РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа содержит 76 с., 15 рис., 17 табл., 67 источников.

Ключевые слова: *in situ* позитронная аннигиляция, материал-накопитель водорода, гидриды, дефектная структура, Mg-MOF, MIL-101.

Объектом исследования является композиционный материал-накопитель водорода Mg-MOF-MIL-101

Цель работы – исследовать композиционный материала на основе Mg-MOF методом позитронной аннигиляции *in situ* при высокотемпературных воздействиях.

В ходе работы проводились *in situ* позитронная спектроскопия материалов до и после термического воздействия.

В результате работы проведены исследования композиционного материала Mg-MOF. Исследования показали, что изменения дефектной структуры при нагреве в вакууме сопоставимы с изменениями структуры чистого магния. Следовательно, MOF не оказывает существенно влияния на внутреннюю дефектную структуру Mg, а преимущественно агломерируется на поверхности частиц магния.

## Оглавление

Введение.....	10
Глава 1. Литературный обзор.....	14
1.1 Mg как материал накопитель .....	14
1.2 Улучшение кинетики при помощи MOF.....	18
1.3 Позитронная аннигиляция как метод исследования структурных процессов в материалах-накопителях.....	21
Глава 2. Приборы и методика in situ ДУАЛ.....	28
2.1 Реактор и система ДУАЛ.....	28
2.2 Обработка in situ данных ДУАЛ .....	33
Глава 3. Экспериментальные результаты.....	35
3.1 Mg in situ .....	35
3.3 Аннигиляция позитронов в МОС.....	37
3.4 Изменение дефектного состава композита на основе Mg+MOF .	38
Глава 4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение.....	41
4.1 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения .....	42
4.2 Определение возможных альтернатив проведения научных исследований .....	45
4.3 Планирование научно-исследовательских работ .....	45
4.4 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой эффективности исследования .....	53
Глава 5. Социальная ответственность.....	57
5.1 Правовые норма трудового законодательства.....	57



5.2 Эргономические требования к правильному расположению и компоновке рабочей зоны .....	58
5.3 Методические рекомендации при работе в аналитических лабораториях .....	59
5.4 Производственная безопасность .....	60
5.5 Вредные производственные факторы, связанные с аномальными микроклиматическими параметрами воздушной среды на местонахождении работающего .....	61
5.6 Факторы, связанные с чрезмерно высокой или низкой температурой материальных объектов производственной среды .....	62
5.7 Отсутствие или недостаток необходимого естественного и искусственного освещения .....	63
5.8 Вредные производственные факторы, связанные с акустическими колебаниями в производственной среде .....	64
5.9 Производственные факторы, связанные с электрическим током, вызываемым разницей электрических потенциалов .....	65
5.10 Экологическая безопасность .....	66
5.11 Безопасность в аварийных и чрезвычайных ситуациях .....	66
Выводы по главе «Социальная ответственность» .....	68
Заключение .....	69
Список используемых источников .....	70

## Введение

Хранение водорода является ключевой проблемой для обеспечения устойчивого энергетического будущего. Одной из перспективных технологий является использование материалов-накопителей водорода, среди которых одним из наиболее перспективных является магний.

Магний обладает высокой способностью к накоплению водорода и является легким, дешевым и экологически чистым материалом. Однако, для широкого применения магния как материала-накопителя водорода необходимо разработать методы синтеза и модификации, обеспечивающие высокую кинетику накопления и выделения водорода, а также стабильность и долговечность материалов.

Поглощение водорода зависит от многих факторов, таких как начальное структурно-фазовое состояние [1,2], условия среды и др. Помимо этого, данный процесс оказывает непосредственное влияние на физико-механические свойства материала [3], свойства кристаллической решетки [4], дефектную структуру [5].

Из этого следует, что, понимание появления и взаимодействия дефектов под действием водорода представляет практический интерес у исследователей-материаловедов в области водородной энергетики.

Для создания новых перспективных материалов в указанных отраслях промышленности необходимо исследовать процессы, сопровождающие изменение дефектной структуры в агрессивных эксплуатационных условиях таких как повышенная температура и водородная среда *in situ*.

Для изучения электронной структуры и дефектов в материалах используют методы аннигиляции позитронов, которые обладают высокой чувствительностью к дефектам, обладающим свободным объемом. Изменения в характеристиках электрон-позитронной аннигиляции могут указывать на изменения в дефектной и электронной структуре. Дефекты в кристаллах оказывают влияние на различные свойства материалов:

диффузионные, магнитные, оптические, электрические, фотоэлектрические и другие. Таким образом, для разработки принципиально новых материалов с повышенными сорбционными характеристиками, необходимо иметь полное представление о поведении различных дефектов в процессе эксплуатации.

Высокая чувствительность методов позитронной аннигиляции обусловлена свойством позитрона притягиваться к локальным атомным образованиям в кристалле со структурными дефектами, которые называются позитронно-чувствительными областями. Вакансии, вакансионные кластеры и другие локальные свободные объемы являются дефектами такого типа.

На сегодняшний день в качестве источников позитронов для метода ПАС выделяют следующие типы:

- Радиоактивные изотопы материалов. Такие как:  $^{22}\text{Na}$ ,  $^{58}\text{Co}$ ,  $^{64}\text{Cu}$ ,  $^{44}\text{Ti}$ ;
- Позитронные пучки на ускорителях.

Самым распространённым источником являются  $^{22}\text{Na}$ ,  $^{44}\text{Ti}$ . Данные источники в экспериментах исполнены в виде капсулы с раствором солей, оболочка которых состоит из плёнки на основе синтетического полиэфирного волокна (Mylar) или полиамида (Kapton) для натрия и чистый титан для источника из титановой соли. Эти материалы хорошо применимы в случаях с проведением *ex situ* исследований, но малопригодны для исследований *in situ*. В случае радиоактивных растворов  $^{22}\text{Na}$ , материалы капсулы не предназначены для работы в агрессивных условиях, таких как воздействие растворов кислот, высоких температур или присутствия водорода. Повреждение капсулы создает условия для утечки источника и радиоактивного заражения окружающей среды, что недопустимо при исследовании даже в оборудованных лабораториях. А в случае же с использованием  $^{44}\text{Ti}$  невозможно исследование в среде водорода, поскольку титан подвержен сильному водородному охрупчиванию, что вновь чревато радиоактивным загрязнением. Использование интенсивных позитронных пучков также имеет свои трудности при их применении для *in situ*

исследований взаимодействия вещества с водородом. Из-за того, что облучение пучком позитронов происходит в вакуумной среде, образцы находятся в газовой среде под давлением, нет возможности проводить *in situ* исследования.

Одним из источников позитронов, который способен находиться в агрессивных условиях является изотоп  $^{64}\text{Cu}$ . Для получения этого источника, необходимо облучить медную фольгу потоком тепловых нейтронов. Благодаря малому периоду полураспада, который составляет 12,7 ч., источник может быть утилизирован без угрозы радиоактивного загрязнения, в то же время – это свойство материала усложняет его использование. Также, для получения данного источника необходимо иметь интенсивный источник тепловых нейтронов, например, ядерный реактор. Недостатком источника также является и невозможность его применения в других методах, кроме как, угловая корреляция аннигиляционного излучения и спектроскопия доплеровского уширения. Помимо всего перечисленного, быстрое изменение активности источника позитронов влияет на некоторые характеристики спектров аннигиляции позитронов, которые необходимо учитывать [16].

В качестве материалов-накопителей наиболее интересными являются следующие материалы: магний, легированный различными материалами, повышающими скорость гидрирования, при этом понижая температуру дегидрирования, и повышающие показатели многократного использования материала. Такими являются металлоорганические каркасные структуры (MOF), углеродные нанотрубки (УНТ) и прочие.

Таким образом, цель данного исследования: изучение композиционного материала на основе Mg-MOF методом позитронной аннигиляции *in situ* при высокотемпературных воздействиях. При этом будут рассмотрены изменения структуры и свойств материала в зависимости от среды и температуры. Полученные результаты позволят более глубоко понять механизмы происходящих процессов и разработать более эффективные методы управления свойствами композиционных материалов.

Для выполнения поставленной цели необходимо выполнить следующие задачи:

- провести предварительный анализ структуры и свойств материалов накопителей Mg, MOF;

- проанализировать результаты эксперимента и сопоставлять их с теоретическими моделями, выявляя закономерности и тенденции в поведении материалов при высокотемпературных воздействиях, сделать выводы о структурных изменениях, происходящих в материалах при высоких температурах, и о возможности использования композиционных материалов на основе Mg-MOF в качестве перспективного материала-накопителя водорода.

## Глава 1. Литературный обзор

### 1.1 Mg как материал накопитель

Быстрое истощение запасов традиционного ископаемого топлива и общественные экологические проблемы привели к развитию чистой и устойчивой энергетики. Водород считается многообещающим альтернативным источником энергии для замены долгосрочного использования ископаемого топлива, при этом не происходит выбросов  $\text{CO}_2$ . Однако технологии хранения водорода с высокой плотностью и низкой стоимостью еще предстоит решить. Основываясь на научных работах следует, что твердотельные материалы для хранения могут хранить атомарный водород в соединениях на основе металлов, что приводит к относительно более высокой плотности энергии и большей безопасности по сравнению с хранением сжатого газа и низкотемпературным хранением жидкости, которые хранятся с молекулярным водородом. Эти твердотельные накопители состоят из гидридов металлов, некоторых комплексных гидридов и химических гидридов [19 – 27].

Материалы на основе Mg интенсивно изучались для хранения водорода из-за выдающихся достоинств, таких как высокая емкость хранения водорода (7,68 масс.% для  $\text{MgH}_2$ ), низкая стоимость (2–3 доллара/кг ) и изобилие ресурсов в земной коре и море [28, 29, 30]. На рисунке 1а представлена плотность энергии  $\text{MgH}_2$  по сравнению с другими материалами, используемыми в качестве материалов накопителей.

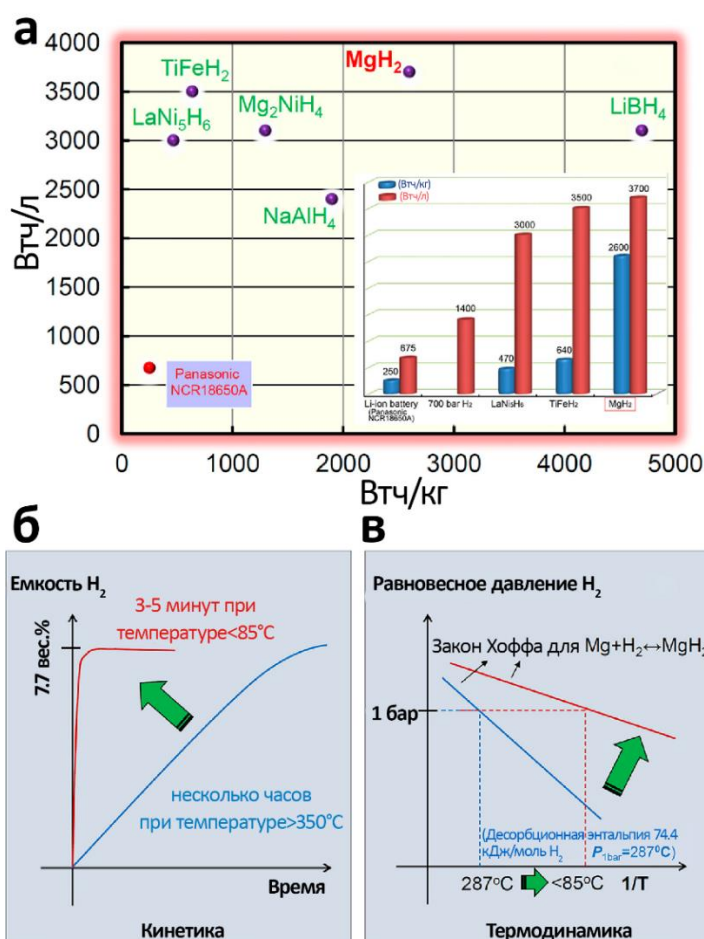


Рисунок 1 – Плотность энергии  $MgH_2$  и их сравнение с литий-ионной батареей NCR 18650A, сжатым водородом 70 МПа и некоторыми другими материалами для хранения водорода (а), схематическая иллюстрация кинетических (б) и термодинамических (в) требований к хранению водорода и текущее состояние материалов для хранения водорода  $Mg-MgH_2$ [31]

$MgH_2$  имеет высокую энергетическую плотность в размере 2600 Вт·ч/кг или 3700 Вт·ч/л (рассчитано по меньшей теплотворной способности водорода), что является заметным преимуществом перед другими материалами. Однако, из-за неудовлетворительной кинетики и требования высокой температуры для достижения равновесного давления водорода 0,1 МПа, материалы на основе Mg ограничены в своем применении как хранилище водорода.

Как упоминалось выше, проблемы кинетики и неправильной термодинамики для материалов, используемых для хранения водорода на

основе Mg, препятствуют их возможному применению в качестве таковых, [31 – 35]. Очевидно, что современным материалам для хранения водорода на основе магния требуются порядка нескольких часов для завершения реакции поглощения водорода при температуре более 623К и давлении водорода более 3 МПа [36] (рис. 1б). Однако для хранения водорода в процессе гидрирования желательно чтобы время повторного наполнения соответствовало

3–5 минутам и максимальная температура подачи 358 К, что является проблемой для обычных материалов для хранения водорода на основе Mg. Что касается термодинамики, то температура выделения водорода под давлением 1 бар составляет 560 К в соответствии с энтальпией десорбции (-74 кДж/моль H<sub>2</sub>) и энтропией (-135 Дж/(К·моль) H<sub>2</sub>) в материалах на основе Mg (рис. 1в). Это необходимо изменить, чтобы выделение водорода происходило при температуре ниже 358 К.

Известно, что неправильная термодинамика может быть связана с сильной связью Mg–H для материалов для хранения водорода на основе Mg. Термодинамическую устойчивость можно охарактеризовать энтальпией образования ( $\Delta H$ ) и энтропией ( $\Delta S$ ) гидрида металла, а кинетический барьер – энергией активации реакции ( $E_a$ ). Кроме того, энтальпия и энтропия образования также могут быть получены из уравнения Вант-Гоффа, а энергия активации реакции может быть определена уравнением Аррениуса или Киссинджера [37], [38]. На рисунке 2 показаны термодинамика и кинетика реакций гидрирования/дегидрирования, а также графики Вант-Гоффа реакции дегидрирования для различных систем Mg–MgH<sub>2</sub>. Сделан вывод, что уменьшение размера и наличие катализаторов положительно влияют на кинетику, в то время как на термодинамику сорбции/десорбции для систем Mg–MgH<sub>2</sub> у исследователей результаты расходятся. Чтобы непосредственно понять взаимосвязь между термодинамикой и размером частиц, было представлено множество уравнений Вант-Гоффа для систем Mg–MgH<sub>2</sub>. Из



рисунка 2(б) видно, что при уменьшении диаметра с 5 до 300 нм явного изменения термодинамических свойств в реакциях десорбции не происходит.

В работе [32] основное внимание уделялось влиянию уменьшения размеров и легирования добавками (переходными металлами, оксидами металлов, галогенидами и другими) на термодинамику и кинетику десорбции водорода. Установлено отсутствие явных изменений термодинамических свойств в реакции десорбции с катализатором и наноструктурами в масштабе до 5 нм [39]. Расчеты ab-initio Хартри-Фока и теории функционала плотности предполагают, что и Mg, и MgH<sub>2</sub> становятся менее стабильными с уменьшением размера кластера, но MgH<sub>2</sub> более дестабилизируется, чем Mg, при уменьшении размера кластера ниже 19 атомов Mg [40]. То есть размер кристаллитов MgH<sub>2</sub> 0,9 нм соответствует температуре десорбции всего 473 К.

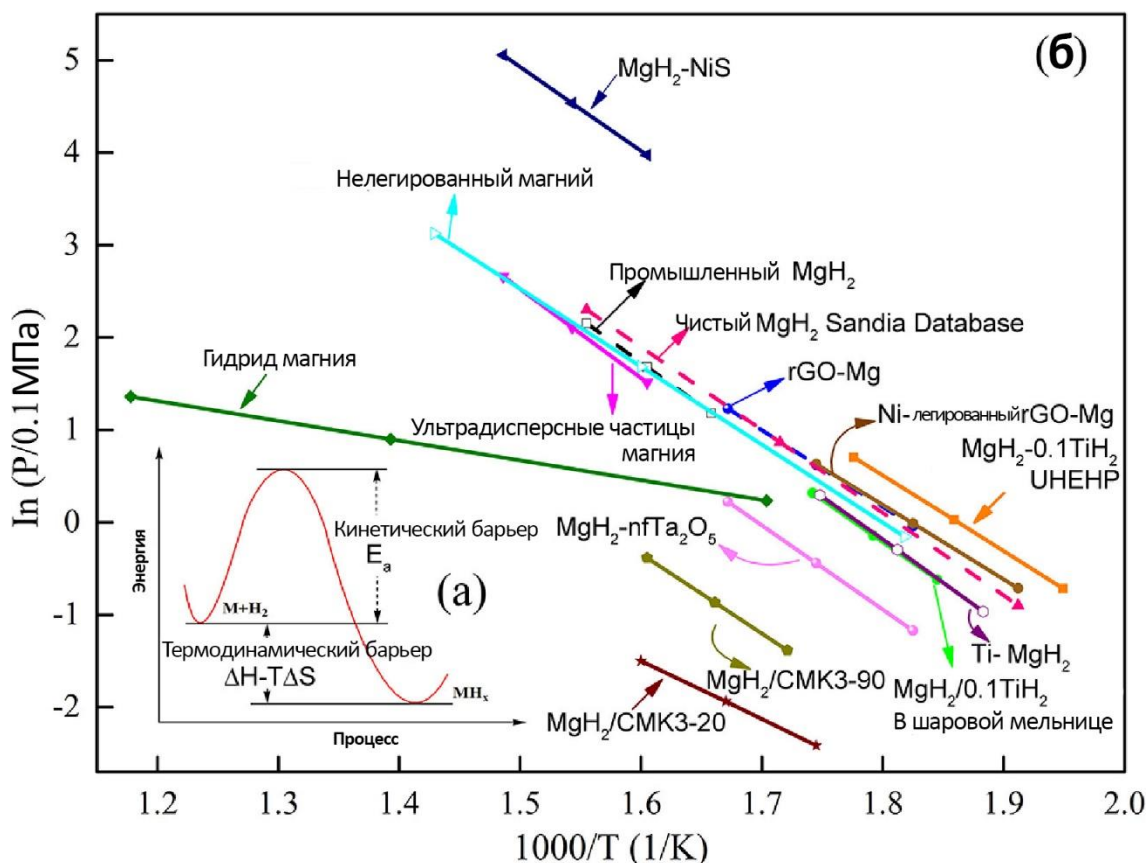


Рисунок 2 – Схематическая иллюстрация термодинамического и кинетического барьера для реакций де-/гидрирования гидридов металлов и (б) графики Вант-Гоффа реакции десорбции для различных систем Mg–MgH<sub>2</sub> [38, 37]

Так как термодинамические свойства остаются практически неизменными, многие исследователи сфокусировали свое внимание на улучшении кинетического аспекте процессов гидрирования и дегидрирования в кинетическом аспекте. Сейчас самая актуальная тема – это глубокое понимание кинетического механизма и количественная оценка скорости этих процессов. Использование кинетических моделей для анализа поведения гидрирования и дегидрирования является важным и эффективным способом выявления кинетического механизма.

## **1.2 Улучшение кинетики при помощи MOF**

В настоящее время хорошо известно, что заключение гидридов металлов в нанопористый материал ускоряет кинетику десорбции водорода [40–44], а в некоторых случаях изменяет термодинамику процесса [45–49]. Однако вопрос о том, могут ли такие гибридные накопительные материалы иметь практическое применение, остается открытым.

Известно, что благодаря исключительным структурным свойствам, металлорганические каркасные структуры могут стать предпочтительным выбором в качестве базы для гидридообразующих порошков металла:

- высокая пористость, что обеспечивает более высокие сорбционные способности водорода под высоким давлением по сравнению с другими пористыми материалами;
- большая удельная площадь поверхности, обеспечивающая адекватные опорные площадки для гидридообразующих металлических порошков [7].

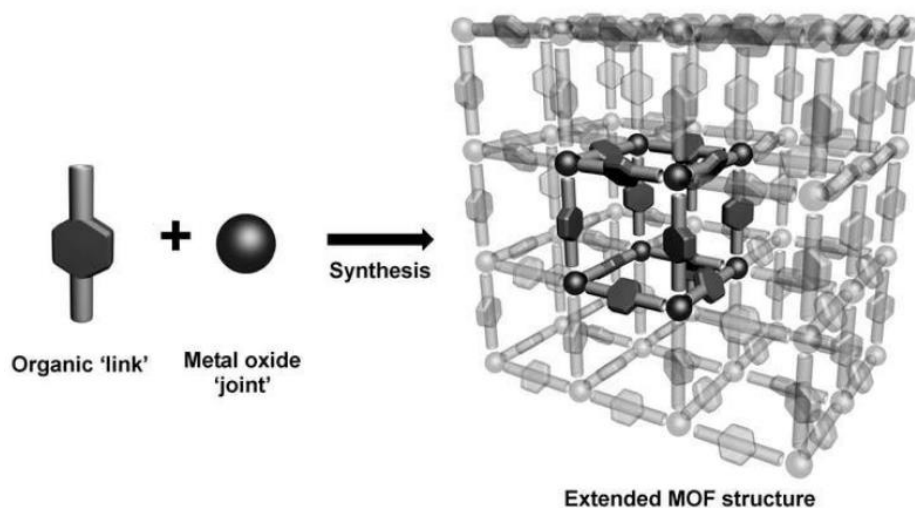


Рисунок 3 – Представление кристаллической структуры MOF.

MOF состоят из неорганических подединиц (вторичных строительных блоков: переходные материалы, лантаниды и кислород), соединенных между собой органическими лигандами (карбоксилаты, имидазолаты и т.д.), образуют упорядоченные нанопористые кристаллические гибридные сети (рисунок 3). Широкий выбор металлических центров и органических лигандов позволяет создавать MOF с настраиваемыми кристаллическими свойствами и пористостью. Среди первых гибридов, изученных для хранения водорода, MOF-5 имеет емкость около 7 вес.% при специфической поверхности от 4000 до 5000 м<sup>2</sup>/г. Недавно были синтезированы гибриды с конкретной поверхностью до 6000 м<sup>2</sup>/г [8].

Однако, следует учитывать несколько аспектов при использовании однофазных MOF в качестве абсорбентов. Например, узкие микропоры могут увеличить силы захвата молекул адсорбата, что положительно сказывается на их захвате. Такие поры могут ограничивать массоперенос и уменьшать характеристики де-/адсорбции материала. Обычно, абсорбенты на основе MOF обладают большим количеством пустот в решетках. Тем не менее, некоторые из этих пор не используются в полной мере из-за слабых дисперсионных сил внутри пор, которые не могут удерживать мелкие молекулы адсорбата Н<sub>2</sub>. Наноструктурирование значительно изменяет

физико-химические свойства частиц. Термодинамические свойства во время реакции с водородом могут быть изменены благодаря значительному вкладу поверхностной энергии. Кинетика реакции с водородом также увеличивается из-за двух основных факторов: усиления поверхностной кинетики и уменьшения пути диффузии внутри частиц [8].

В качестве претендента на материал который позволит улучшить сорбционные свойства был выбран MIL-101 (Cr). Он имеет трехмерную каркасную структуру, состоящую из агрегатов тримерного хрома (III) ( $\text{Cr}_3\text{O}$ ), соединенных с лигандами 1,4-бензолдикарбоксилата (bdc), с диаметром внутренней полости до 3,4 нм и большой площадью поверхности Ленгмюра, составляющей  $5900 \pm 300 \text{ м}^2/\text{г}$ . Структура MIL-101 (Cr) стабильна до  $275 \text{ }^\circ\text{C}$  [1].

Типичный синтез включает раствор, содержащий нитрат хрома (III)  $\text{Cr}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$  (400 мг,  $1 \cdot 10^{-3}$  моль),  $1 \cdot 10^{-3}$  моль плавиковой кислоты, бензол-1,4-дикарбоновая кислота  $\text{H}_2\text{BDC}$  (164 мг,  $1 \cdot 10^{-3}$  моль) в 5 мл  $\text{H}_2\text{O}$ ; смесь переносят в тефлоновую линию в гидротермальном автоклаве, которую нагревают в течение 6 часов при  $210^\circ\text{C}$  и затем медленно охлаждают до комнатной температуры в течение 8 часов. Затем смесь выделяли из автоклава и твердое вещество отделяли от раствора центрифугированием (4200 ед/мин в течение 50 мин). Внутри пор присутствует значительное количество терефталевой кислоты, смешанной с кристаллитами MIL. Остаточные реагенты и, в конечном итоге, растворитель необходимо удалить, особенно из пор, чтобы получить материал с максимально возможной пористостью. Эта процедура промывки и сушки называется активацией. Для удаления большей части карбоновой кислоты продукт дважды повторно диспергировали и перемешивали в течение 6 ч в N,N'-диметилформамиде (20 мл), два раза в метаноле (10 мл, 2 ч) и один раз в воде (10 мл, 2 ч) с отделением от соответствующего промывочного раствора центрифугированием. Конечный продукт сушили при комнатной температуре [6].

Образцы активированного MIL-101 имеют большие объемы пор и площадь поверхности [6]. Поверхность по БЭТ составила 2690 м<sup>2</sup>/г. Термогравиметрический анализ синтезированного MIL-101(Cr) показали, что до 120 °С происходит потеря веса до 8%, что связано с задержкой воды в порах. Между 120 и 350°С теряется 9% материала. Это может соответствовать потере некоординированной терефталевой кислоты изнутри пор. Каркас MIL-101 начинает разлагаться при температуре выше 350°С. Активированный MIL-101(Cr) показал потерю веса 7% до 300°С.

Из работ [7] по повышению проницаемость для газов в полисульфоновых мембран (PSF). Повышенная проницаемость для газов в материалах MIL-101/PSF-MMM обусловлена не изменениями свободного объема в PSF, а дополнительным большим свободным объемом внутри частиц наполнителя MIL-101.

Хотя в настоящее время в литературных источниках и обзорных статьях имеется много примеров, показывающих, что наноудержание резко улучшает кинетику десорбции гидрида, ясно, что это составляет только половину. Для достижения успешного хранения материала также требуется обратимость. В результате могут быть определены некоторые основные характеристики оптимального материала для обратимого хранения, которые могут помочь в будущей разработке материалов для хранения наногидридов.

### **1.3 Позитронная аннигиляция как метод исследования структурных процессов в материалах-накопителях**

Позитронная аннигиляционная спектроскопия (ПАС) – совокупность методов, использующих позитроны в качестве зонда для неразрушающих исследований электронной и пространственной структур образцов в конденсированном и газообразном состояниях, в нано- и субнанометровых диапазонах. Методы ПАС являются одним из наиболее чувствительных и надежных методов оценки дефектов самой низкой, размерности порядка 200

нм. Основное внимание уделяем исследованиям с пучками медленных позитронов и модификациям обычных методов наблюдения позитронной аннигиляции с использованием радиоактивных изотопов (выделяется узкая полоса энергетического спектра, соответствующая энергиям медленных позитронов), позволяющим наблюдать распределение дефектов по глубине образца [46].

Три основных подхода к анализу позитронной спектроскопии включают (рисунок ...):

- метод временного распределения аннигиляционных фотонов (ВРАФ);
- метод доплеровского уширения аннигиляционной линии (ДУАЛ);
- метод углового распределения аннигиляционных позитронов.

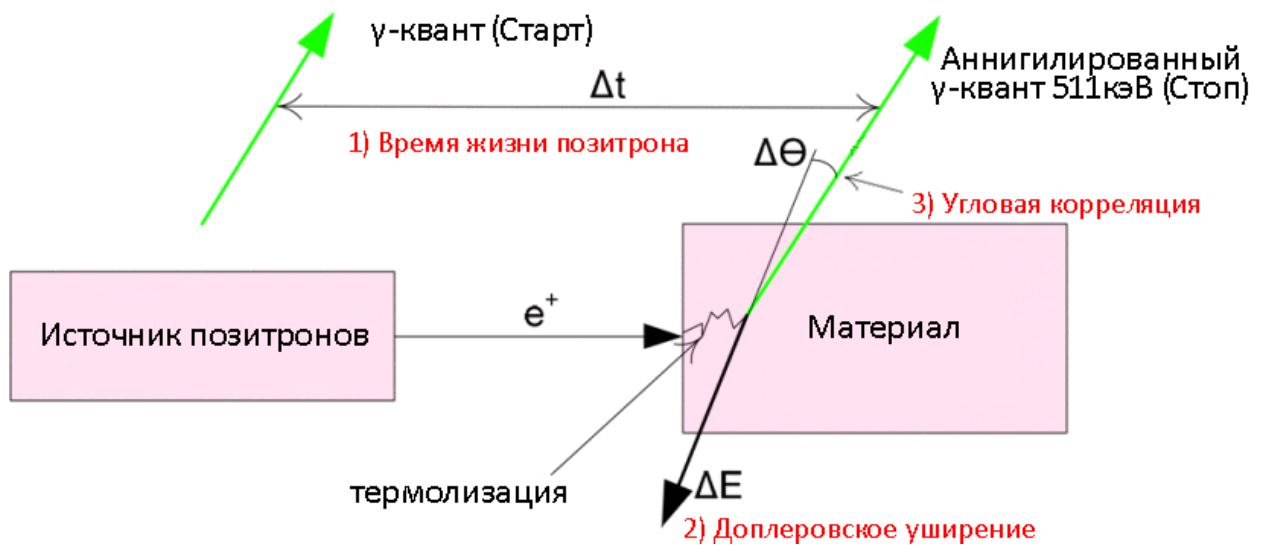


Рисунок – Принципы трех основных методов спектроскопии аннигиляции позитронов: 1) ВРАФ; 2) ДУАЛ 3) измерение угловых корреляций

В методе ВРАФ позитроны из радиоактивного источника (РИ) направляются в материал, где происходит аннигиляция с электронами, и затем измеряется скорость счета запаздывающих совпадений между регистрацией

γ-кванта и фотона, испускаемого при аннигиляции позитронов. Метод ДУАЛ

основывается на измерении распределения энергии аннигиляционных фотонов с помощью эффекта Доплера, который вызывает уширение  $\Delta E$ , и позволяет получить информацию об импульсном распределении электрона. В методе углового распределения аннигиляционных позитронов также получают информацию об импульсном распределении, используя законы сохранения импульса и энергии [4].

Когда позитроны, высвобождаемые РИ, взаимодействуют с веществом, происходит быстрое термолизирование за счет упругих и неупругих процессов. При взаимодействии позитронов, испускаемых радиоизотопным источником, с веществом происходит быстрое термолизирование за счёт упругих и неупругих процессов. Аннигиляция таких позитронов при столкновении с электронами сопровождается высвобождением одного или нескольких  $\gamma$ -квантов. Аннигиляция, происходящая при столкновении фотона и античастицы, приводящая к образованию одного фотона возможна только при наличии третьего тела (ядер, электронов), принимающего импульс отдачи. Для аннигиляции свободных позитронов и электронов должно появиться как минимум два  $\gamma$ -кванта. Сечение аннигиляции позитронов стремительно падает при повышении количества гамма-квантов. При возрастании этого числа на единицу сечение аннигиляции уменьшается  $> 2$  порядков благодаря постоянной структуры  $a=1/127$ . Эффективное сечение свободного позитрона и электрона рассчитано Дираком, и в нерелятивистском приближении это сечение возрастает при уменьшении относительной скорости сталкивающихся частиц [46].

$$\sigma_{2\gamma} = \sigma_D = \pi r_0^2 \frac{c}{v} \quad (1)$$

где  $r_0$  – радиус электрона,  $c$  – скорость света в вакууме.

При  $v \rightarrow 0$  сечение  $\sigma_D$  становится бесконечно большим. Однако скорость аннигиляции  $\lambda_D$  позитрона стремится к конечному пределу.

$$\lambda_D = \sigma_D v n_e = \pi r_0^2 c n_e \quad (2)$$

в котором  $n_e$  – концентрация электронов.

При аннигиляции электрон-позитронной пары выполняются закон сохранения импульса и энергии, которые при двойной гамма-аннигиляции имеют вид:

$$k_1 + k_2 = p = 2mv \quad (3)$$

$$k_1c + k_2c = E = 2mc^2 \quad (4)$$

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (5)$$

$k_1$  и  $k_2$  – импульсы гамма-квантов;

$E$  – энергия электрон-позитронной пары;

$v$  – скорость движения центра масс пары в лабораторной системе отсчета.

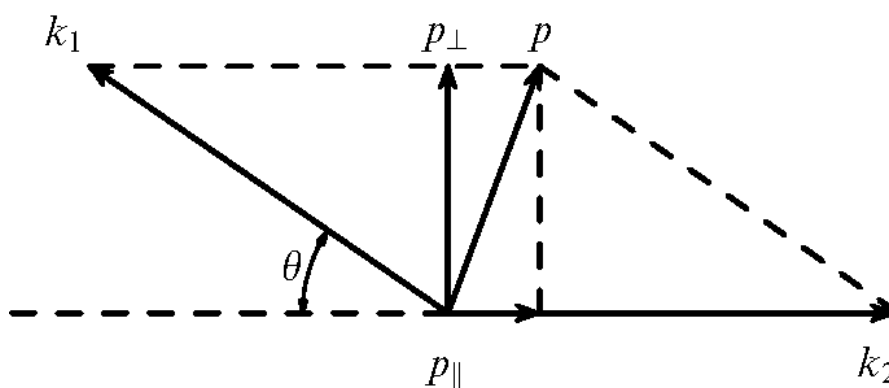


Рисунок 6 – Схема разлета  $\gamma$ -квантов при аннигиляции электрон-позитронной пары.

Из (3) и (4) следует, что если центр масс пары в лабораторной системе отсчета неподвижен ( $v = 0$ ), то оба  $\gamma$ -кванта разлетаются в противоположных направлениях (угол  $\theta = 0$ ) с одинаковой энергией, то уравнение (4) будет иметь значение 511кэВ.



В случае, если  $v \neq 0$  угол между  $k_1$  и  $k_2$  отличается от  $180^\circ$ , а их энергия уже не равна  $0,511$  МэВ. Если импульс пары  $p \ll m_0 c$ , то угол  $\theta$  (рис. б) определяется соотношением:

$$\sin \theta \approx \frac{p_0}{m_0 c} \quad (6)$$

Изменение энергии гамма-кванта (доплеровский сдвиг) дается выражением:

$$\Delta E_\gamma \approx \frac{p_0 c}{2} \quad (7)$$

Следовательно, в результате ЭПА измерение отклонения  $\theta$  угла разлета квантов от  $180^\circ$  или доплеровского смещения аннигиляционной линии

( $0,511$  МэВ)  $\Delta E_\gamma$  позволяет в принципе определить импульс позитрон-электронной пары в лабораторной системе отсчета.

Метод ЭПА может применяться для изучения дефектов кристаллического строения в металлах благодаря тому, что позитроны могут быть захвачены в локализованном состоянии в области дефекта. Вакансии или вакансионные кластеры, имеют более низкую электронную плотность, чем бездефектный кристалл, поскольку они не содержат ионных остовов. Это создает глубокую потенциальную яму для позитрона в районе дефекта.

Когда имеют место дефекты в кристаллической решетке, энергия связи позитрона с ними обычно находится на уровне нескольких электронвольт. Образование электростатического потенциала вокруг дефектов приводит к возникновению связанного состояния позитрона. Перекрытие волновой функции локализованного позитрона с электронами остова уменьшается, что сужает спектральную линию и уменьшает импульс сигнала Доплера.

Краевая дислокация является неглубокой ловушкой для позитронов, их энергия связи с дислокацией невысока. При повышенных температурах

позитроны освобождаются из ловушки на дислокационной линии или захватываются другими связанными с дислокацией дефектами, в основном - вакансиями [8].

Существует множество методов и схем, основанных на электрон-позитронной аннигиляции. Один из них основан на доплеровском уширении аннигиляционной линии.

Эффект Доплера есть изменение частоты (длины волны), наблюдаемое при движении источника излучения относительно приемника. Частота излучения увеличивается, если источник приближается к наблюдателю. Частота электромагнитных волн, которую воспринимает наблюдатель, относительно которого он движется со скоростью  $v$ , может быть найдена из уравнения:

$$v = v_0 \left(1 + \frac{v}{c} \cos \theta\right) \quad (8)$$

Неравномерности кристаллической структуры и тепловые колебания решетки являются важными факторами, приводящими к расширению спектральных линий в твердых активных материалах. Чем выше температура кристалла, тем сильнее проявляются колебания. Активные ионы находятся в переменных полях, которые модулируют энергетические уровни и, следовательно, вносят свой вклад в расширение спектральной линии.

Однородное и неоднородное уширение – это два вида уширения. Уширение называется однородным, если линии каждого отдельного атома и системы в целом уширяются одинаково. Естественное уширение и столкновительное уширение являются примерами однородного уширения. Форму однородно уширенных линий можно описать функцией Лоренца.

Если резонансные частоты отдельных атомов не совпадают и распределяются в некоторой полосе частот, возникает неоднородное уширение. Это приводит к уширению линии системы в целом при существенно меньшем уширении линии отдельных атомов. Доплеровское уширение и уширение за счет неоднородностей среды являются примерами

неоднородного уширения. Форму линии при неоднородном уширении можно описать функцией Гаусса [5]. Метод измерения ДУАЛ основан на измерении энергетического распределения аннигиляционных фотонов в веществе путем измерения энергетического сдвига относительно номинального значения 0,511 МэВ.

## Глава 2. Приборы и методика *in situ* ДУАЛ

### 2.1 Реактор и система ДУАЛ

В качестве источника позитронов используется радиоактивный изотоп  $^{64}\text{Cu}$ . Радиоизотопный источник на основе  $^{64}\text{Cu}$  хорошо подходит для исследований методом ДУАЛ, так как почти в одно время с позитроном испускается реперный  $\gamma$ -квант, имеющий энергию 1,157 МэВ. РИ на основе  $^{64}\text{Cu}$  имеет выход позитронов, составляющий около 18% [9]. Это значение ниже, чем у стандартных источников (таблица). Поэтому для эффективного использования источника с  $^{64}\text{Cu}$  необходимы более высокие активности (> 3 МБк), чем в стандартных источниках позитронов.

Таблица 2.1 – Радионуклиды, наиболее часто использующиеся в исследованиях методами электрон-позитронной аннигиляции

Изотоп	Период	Максимальная энергия полураспада позитронов, МэВ	Доля распадов, %
$^{22}\text{Na}$	2,603 лет	0,504	90,50
$^{44}\text{Ti}$	47,3 лет	1,467	98
$^{64}\text{Cu}$	12,703 ч	0,652	17,9

Для получения источника позитронов на основе  $^{64}\text{Cu}$  необходимо облучить медную фольгу потоком тепловых нейтронов. Для этого используется реактор ИРТ-Т.

Экспериментальные устройства реактора ИРТ-Т обеспечивают проведение широкого круга исследований. Реактор имеет 10 горизонтальных экспериментальных каналов (ГЭК) (рисунок ИРТ) для вывода пучков нейтронов и облучение образцов: 8 радиальных (к центру активной зоны) каналов диаметром 100 мм из нержавеющей стали и два касательных диаметром 150 мм. Касательный канал ГЭК-1 имеет один выход. Он изготовлен из сплава алюминия САВ-1. Касательный канал ГЭК-4 изготовленный из нержавеющей стали, проходит через весь бак и имеет два выхода в физический зал и в радиационный павильон. Торцы радиальных

ГЭК примыкают к корпусу активной зоны с зазорами 3 мм. Максимальное значение плотности потока быстрых нейтронов ( $E > 0,821$  МэВ) на торце ГЭК равно  $1,8 \cdot 10^{12}$  (н/см<sup>2</sup>)/МВт. Со стороны физического зала ГЭКи перекрываются шиберами, обеспечивающими биологическую защиту от нейтронного и гамма-излучения. Управление шиберами производится с пультов, установленных в соответствующих секторах физического зала. Горизонтальные каналы № 3, 5, оборудованы пневмотранспортными устройствами, позволяющими облучать образцы в пеналах, подаваемых на позицию облучения (в ГЭКи) из экспериментальных установок, находящихся в смежных с физическим залом лабораториях.

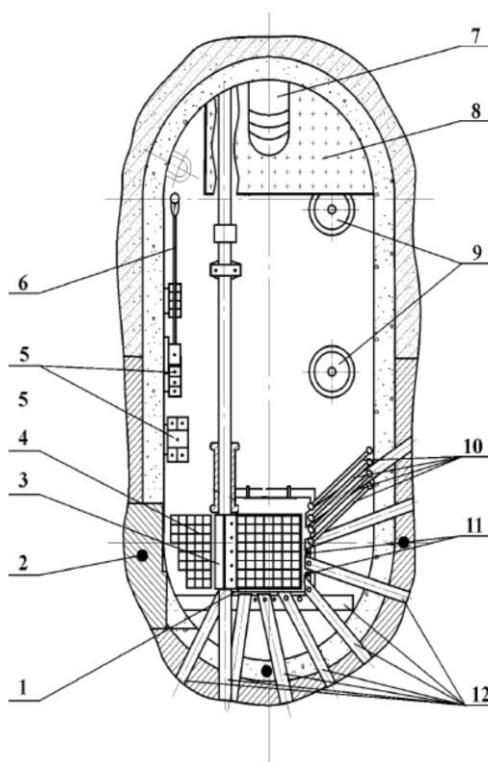


Рисунок 7 – Поперечный разрез реактора: 1 – корпус активной зоны; 2 – каналы для измерения температуры бетона; 3 – большой бериллиевый блок; 4 – внутренняя тепловая сборка; 5 – временное хранилище ТВС; 6 – устройство для транспортировки ТВС; 7 – трубопровод напорный; 8 – распределительная емкость; 9 – клапаны естественной циркуляции; 10 – вертикальные экспериментальные каналы с пневмотранспортным устройством; 11 – вертикальные экспериментальные каналы; 12 – горизонтальные экспериментальные каналы

В эксперименте по облучению медной фольги использовался вертикальный сухой канал. Использовали медную фольгу толщиной 10 мкм и массой 1 мг, которая была очищена до чистоты 99,99%. Чтобы повысить чувствительность эксперимента, была выбрана как можно более тонкая фольга, чтобы увеличить долю позитронов, аннигилирующих в исследуемом материале. Изотоп  $\text{Cu } 64$  испускает позитроны с конечной энергией 0,657 МэВ, поэтому источник с использованием этой фольги может обеспечить вклад не менее 45% (без учета обратного рассеяния).

Для очистки фольги от поверхностных загрязнений и растворенных газов ее протравливали в растворе  $\text{HCl}$ , а затем отжигали в вакууме при температуре  $700^\circ\text{C}$  в течение 3 часов.

Облучение проводилось в течение 3 часов, после чего образец выдерживался вне поля нейтронов еще 2 часа. Активность образца в начале эксперимента составляла примерно 60 МБк.

Для изучения механизма дефектообразования в "реальном времени» (*in situ*) разработана система для комплексного исследования металл-водородных систем, в том числе в режиме *in situ*. Система состоит из управляемого газового реактора с уникальной реакционной камерой, радиоизотопного источника позитронов и комплекса аннигиляционной спектроскопии позитронов, структурная схема которого представлена на рисунке ....

Использование системы позволяет *in situ* исследовать дефектную структуру твердых тел в процессах сорбции/десорбции водорода при температурах до  $900^\circ\text{C}$  и давлении до 50 бар [12].

Источник позитронов бомбардирует образец, вследствие чего образуются  $\gamma$ -кванты, которые разлетаются в стороны и попадают на полупроводниковый детектор, который питается от высоковольтного источника питания. Чтобы уменьшить количество шумов и добиться наилучшего энергетического разрешения используется криостат с жидким азотом. Далее сигнал идёт на зарядово-чувствительные предусилители с

регулируемой полосой пропускания частот. После этого сигнал регистрируется многоканальным амплитудным анализатором рисунок 8.

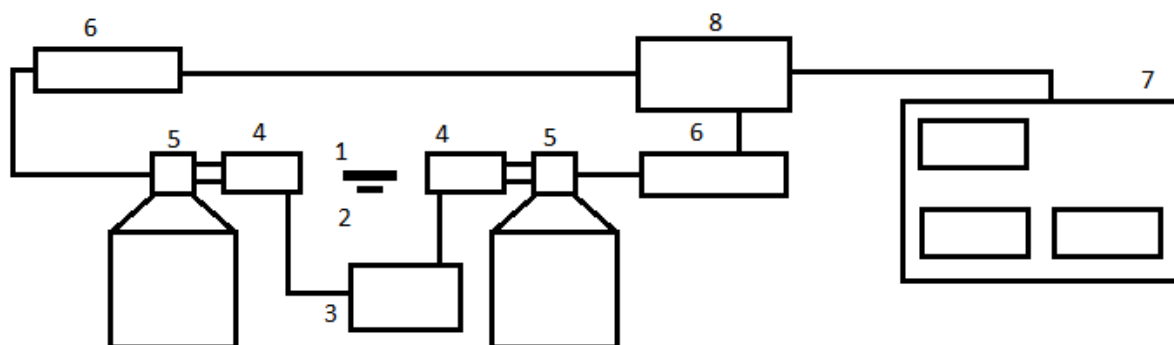


Рисунок 8 – спектрометр для анализа доплеровского уширения аннигиляционной линии с двумя детекторами. Образец (1); источник позитронов (2); высоковольтный источник питания (3); полупроводниковый детектор (4); криостат (5) с жидким азотом; зарядово-чувствительные предусилители с регулируемой полосой пропускания частот (6). многоканальный амплитудный анализатор (7).

В состав комплекса входят специально разработанный автоматизированный аппарат типа Sieverts и спектрометрический модуль, которые обеспечивают взаимодействие твердых частиц с газами при различных условиях (температура, давление, время). Дополнительно к автоматизированной системе, газовый реактор содержит вакуумную камеру для высокого давления (до 50 бар), высокотемпературную печь для контролируемого нагрева до 900° С, роторный насос для создания вакуума в экспериментальной камере, источник водорода высокой чистоты для исследования взаимодействия водорода с твердыми частицами, компрессор для управления вакуумной системой и компьютер для управления газовым реактором.

Для данного исследования применялось два полупроводниковых детектора по схеме совпадений, для уменьшения фона, а также чтобы наблюдать высоко-импульсную часть спектра от аннигиляции позитронов с электронами глубоких оболочек.

Полупроводниковый детектор – это устройство для обнаружения ионизирующих излучений, использующее кристалл полупроводника в качестве главного элемента. Когда заряженные частицы проходят через кристалл, они вызывают появление электронно-дырочных пар, которые движутся к электродам прибора под воздействием внешнего напряжения, создавая электрический импульс во внешней цепи. Этот импульс усиливается и регистрируется для последующего анализа. Схема полупроводникового детектора представлена на рисунке 9.

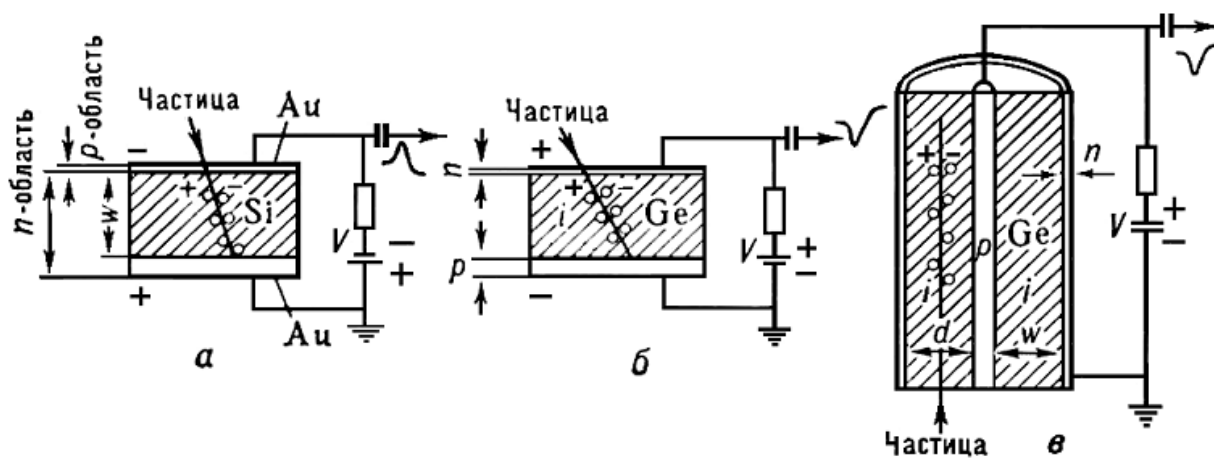


Рисунок 9 – Полупроводниковые детекторы: штриховкой выделена чувствительная область; n – область полупроводника с электронной проводимостью, p – с дырочкой, i – с собственной проводимостями; а – кремниевый поверхностно-барьерный детектор; б – дрейфовый германий-литиевый планарный детектор; в – германий-литиевый коаксиальный детектор.

Для обнаружения заряженных частиц используют детекторы из сверхчистого германия (HpGe), которые имеют чувствительную область толщиной 5 мм. Это позволяет регистрировать протоны и  $\alpha$ -частицы с энергиями около 40 МэВ и 160 МэВ соответственно. Для обеспечения оптимальной работы германиевые детекторы всегда охлаждаются до азотных температур в сосудах Дьюара.



Два детектора используются в паре и расположены коллинеарное с образцом (рисунок ...). Оба аннигилирующих фотона измеряются. Пусть  $E_1$  и  $E_2$  энергии измеряемые детекторами 1 и 2.

Сумма энергии  $E_1 + E_2 = 2mc^2 - E_b$ , где  $E_b$  – энергия связи электронов и позитронов в твердом теле. Разность энергий  $E_1 - E_2 = cp_x$ , где  $p_x$  - компонента импульса позитронно-электронной пары в направлении детекторов. Оба фотона обнаруживаются, и данные хранятся в двумерном массиве. Позитроны, появившиеся в этих процессах, могут быть накоплены и затем использованы.

## 2.2 Обработка *in situ* данных ДУАЛ

В ходе исследований были получены спектры для следующих образцов: Mg при комнатной температуре, Mg при высокотемпературном нагреве до 500°C, MOF при высокотемпературном нагреве, композит Mg-MOF при высокотемпературном нагреве. Анализ с периодичностью записи данных о регистрируемых сигналах в 5 минут. В ходе работы требовалось установить зависимость характеристик спектров от времени таких как:

- S-параметр
- W-параметр
- Интенсивность (пиковую величину спектра, характерной для энергии 511кэВ)

Горизонтальная ось (энергии) была получена искусственно и для удобства, чтобы примерно ориентировать какой пик с каким физическим процессом связан.

Физический смысл S и W-параметров можно описать, как долю процессов аннигиляции позитронов с валентными и остовными электронами, соответственно, от общего количества аннигиляционных событий.

По полученным данным выстроена зависимость для S и W параметров в зависимости от времени

Сам спектрометр (как прибор) не знает, какой энергии фотон в него прилетел. Он считает амплитуду электрического импульса, который этот фотон создал. Внутри компьютера есть шкала из 1950 делений (каналы). Каждый канал соответствует определенной величине амплитуды импульса, который зарегистрировал детектор.

И таким образом он накапливает спектр – в каждый канал. В канале находится такое количество отсчетов, сколько импульсов с этой амплитудой он зарегистрировал.

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

Студенту:

Группа 0Б91		ФИО Ашихмин Назар Алексеевич	
Школа	Инженерная школа ядерных технологий	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. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Среднерыночные цены РФ для определения стоимости материальных ресурсов. Нормативные документы НИ ТПУ, ФЗ «О минимальном размере оплаты труда» для определения оплата труда исполнителей проекта.
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	Накладные расходы – 16%. Районный коэффициент – 30%. Премияльный коэффициент составляет 30% от оклада. Коэффициент доплат и надбавок 20% от оклада.
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	Отчисления во внебюджетные фонды – 30%

### Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	Оценить потенциальных потребителей исследования, проанализировать конкурентные решения, представить SWOT – анализ. Предложить возможные альтернативы проведения НИ.
2. Планирование и формирование бюджета научных исследований	Представить план этапов работ, определить трудоёмкость и построить календарный график, сформировать бюджет НИ.
3. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	Определить интегральные показатели финансовой эффективности и ресурсоэффективности разработки. Рассчитать сравнительную эффективность проекта.

### Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. Оценочная карта для сравнения конкурентных технических разработок; 2. SWOT-анализ; 3. Морфологическая матрица для научного исследования; 4. Перечень этапов, работ и распределение исполнителей; 5. Временные показатели проведения научного исследования; 6. График Ганта; 7. Материальные затраты; 8. Количество дней эксплуатации оборудования; 9. Расчет затрат на спецоборудование для научных работ; 10. Баланс рабочего времени; 11. Расчет заработной платы; 12. Сравнительная эффективность разработки.

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

### Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент ОСГН, ШБИП	Былова Татьяна Васильевна	канд.экон.наук		

### Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0Б91	Ашихмин Назар Алексеевич		

## **Глава 4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение**

Коммерческая привлекательность научного исследования определяется многими характеристиками: улучшенными техническими параметрами, будет ли продукт востребован рынком, какова будет его цена, каков бюджет научного проекта, какой срок потребуется для выхода на рынок и так далее. В данной работе было проведено исследование композиционного материала на основе Mg-MOF в качестве перспективного материал-накопителя водорода. Данное исследование является достаточно перспективным для применения в будущем. Поэтому цель главы 4 – оценка конкурентоспособности технологии в отношении финансового планирования, ресурсоэффективности и ресурсосбережения.

Для выполнения цели необходимо поэтапно выполнить следующие задачи:

- 1) Оценить коммерческий потенциал и перспективность научного исследования, провести SWOT-анализ.
- 2) Определить возможные альтернативы проведения научного исследования.
- 3) Провести календарное планирование, составить план-график научного исследования.
- 4) Произвести расчет бюджета научного исследования.
- 5) Показать финансовую, ресурсосберегающую эффективность исследования.

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

##### **Потенциальные потребители результатов исследования.**

Поскольку материалы-накопители на основе Mg-MOF имеют относительно низкие температуры десорбции и весьма внушительные объемы накапливаемого водорода, то потенциальными потребителями готовой продукции будут являться производители подводного судостроения и промышленной погрузочной техники. Также это будет интересно научному сообществу, различным исследовательским группам, а это университеты, научные центры и производства (например, Концерн «Росэнергоатом», «Русатом Оверсиз» и др.), также это могут быть международные лаборатории, занимающиеся материалов-накопителей водорода, т.к. создаваемые материалы являются перспективным способом хранения водорода.

**Анализ конкурентных технических решений.** Поскольку рынки прибывают в постоянном движении, необходимо проводить анализ конкурирующих разработок, которые есть на рынке. Такой анализ позволит вносить коррективы в научное исследование, чтобы успешно выйти на рынок и в дальнейшем повышать спрос, а также противостоять конкурентам.

Для выполнения данного анализа учета технических и экономических особенностей исследования материала-накопителя водорода на основе Mg-MOF воспользуемся оценочной картой, которая приведена в таблице 1.

В качестве конкурентов рассматривались материалы:

1. Mg, как перспективный материал-накопитель, накапливающий в себе до 7,6 вес.% H<sub>2</sub>. (K1)
2. Mg с углеродными нанотрубками (Mg-УНТ), как материал-накопитель, с менее высоким содержанием H<sub>2</sub>, но с более высокой кинетикой выхода H<sub>2</sub>. (K2)

Позиция разработки и конкурентов оценивается по каждому показателю экспертным путем по пятибалльной шкале, где 1 – наиболее слабая позиция, а 5 – наиболее сильная. Веса показателей, определяемые экспертным путём, в сумме должны составлять 1.

Таблица 4.1 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических разработок

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		Б <sub>ф</sub>	Б <sub>к1</sub>	Б <sub>к2</sub>	К <sub>ф</sub>	К <sub>к1</sub>	К <sub>к2</sub>
1	2	3	4	5	6	7	8
<b>Технические критерии оценки ресурсоэффективности</b>							
1. Простота получения	0,06	4	5	2	0,24	0,3	0,12
2. Объем сорбируемого водорода	0,22	4	5	4	0,88	1,1	0,88
3. Циклическая стойкость	0,14	3	4	4	0,42	0,56	0,56
4. Условия десорбции	0,19	5	2	4	0,95	0,38	0,76
5. Коррозийная стойкость	0,08	4	4	3	0,32	0,32	0,24
6. Безопасность технологии получения	0,11	4	5	4	0,44	0,55	0,44
7. Скорость сорбции	0,17	4	4	3	0,68	0,68	0,51
8. Условия хранения	0,03	5	3	4	0,15	0,09	0,12
<b>Итого</b>	<b>1</b>				<b>4,08</b>	<b>3,98</b>	<b>3,63</b>

Итоги, показанные в оценочной карте сравнения конкурентных технических разработок, позволяют сделать вывод, что Mg-MOF превосходит своих конкурентов по многим критериям, в частности, по условиям десорбции водорода и условиям хранения. Это показывает преимущество на фоне Mg и Mg с УНТ.

**SWOT-анализ.** Представим в таблице 4.2 результаты SWOT-анализа.

Таблица 4.2 – SWOT-анализ

	<p><b>Сильные стороны проекта:</b>                  С1. Низкие температуры десорбции Н<sub>2</sub> из материала.                  С.2 Востребованный материал, в области накопителей водорода, который в ближайшем будущем перспективный источник энергии.                  С.3 Инновационная методика исследования.                  С.4 Относительно высокая точность измерений.</p>	<p><b>Слабые стороны проекта:</b>                  Сл1. Предварительная подготовка материалов.                  Сл2. Длительность процесса исследования.                  Сл3. Высокая стоимость проведения исследования.                  Сл4. Большое количество людей по всему миру занимается исследованием материалов-накопителей.</p>
<p><b>Возможности:</b>                  В1. Использование информации лабораторий, полученной при проведении предыдущих опытов на базе ТПУ.                  В2. Использование финансовых средств ТПУ при проведении исследований.                  В3. Использование комплексного оборудования ТПУ и исследовательского реактора ИРТ-Т.                  В4. Сотрудничество с научными группами из других городов.</p>	<p>Благодаря высокой материальной и информационной базы ТПУ, а также профессионализма сотрудников, возможно проведение высоко точного исследования и заключения наиболее точных результатов исследования. Получение информации о самой природе возникающих дефектов в структуре материалов, благодаря инновационной методике исследования, которую освоили только сотрудники ТПУ.</p>	<p>Можно совместными усилиями и опытом определить наиболее перспективные материалы. Необходимо запрашивать выделение части бюджета ТПУ, чтобы проводить исследования, из-за требующихся больших затрат.</p>
<p><b>Угрозы:</b>                  У1. Отказ от финансирования.                  У2. Трудности в возможности использовании оборудования, которое может быть задействовано в других исследованиях.                  У3. Трудность с покупкой зарубежном и заменой неисправного оборудования.</p>	<p>Вероятность отказа в финансировании довольно низкая, т.к. тема материалов-накопителей на данный момент очень актуальна и активно развивается. При невозможности приобрести оборудование за рубежом, можно использовать приближенные аналоги оборудования.</p>	<p>При отказе в финансировании маловероятно продолжение исследования. Малая известность исследователей и длительность исследования, особенно при большой очереди на оборудование может неблагоприятно повлиять на возможность получения патента.</p>

## 4.2 Определение возможных альтернатив проведения научных исследований

Для определения возможных альтернатив проведения научного исследования воспользуемся морфологическим подходом. Рассмотрим два варианта исполнения данной научно-исследовательской работы (таблица 4.3).

Таблица 4.3 – Морфологическая матрица для научного исследования

Характеристика	Вариант исполнения 1	Вариант исполнения 2	Вариант исполнения 3
Анализ наличия дефектов	Позитронная аннигиляционная спектроскопия	Позитронная аннигиляционная спектроскопия	Позитронная аннигиляционная спектроскопия
Количество образцов подвергнутых исследованию	6 образцов из которых: 3 в вакуумной среде и 3 в среде водорода	3 образа из которых: 3 в среде водорода	3 образцов из которых: 2 в вакуумной среде и 1 в среде водорода

Приведенные варианты исполнения позволят прийти к одинаковым результатам, однако для понимания всех физических процессов и для более точного обоснования все же провести на порядок больше измерений чем во втором и третьем вариантах исполнения.

Зная природу возникновения дефектов в материалах по отдельности, мы можем с большей точностью опираясь на теорию утверждать о верности гипотезы, что композиты на основе Mg-MOF обладают наилучшей кинетикой выхода водорода.

Во всех предложенных вариантах отсутствуют измерения для чистого Mg при комнатной температуре, т.к. можно обратиться к уже проведенным неоднократно исследованиям этого материала.

## 4.3 Планирование научно-исследовательских работ

**Структура работ в рамках научного исследования.** Для выполнения научной исследовательской работы была сформирована рабочая



группа, в состав которой входили: научный руководитель, исполнитель и оператор оборудования. Ниже в таблице 4.4 перечислены основные этапы работ в рамках проведения научного исследования.

Таблица 4.4 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Основные этапы	№ работы	Содержание работ	Должность исполнителя
Разработка технического задания	1	Составление и утверждение технического задания	Научный руководитель
Подготовка к исследованию	2	Подбор и изучение материалов по теме	Исполнитель
	3	Календарное планирование работ по теме	Научный руководитель, исполнитель
Теоретическое и экспериментальные исследования	4	Проведение теоретических расчетов параметров порошка	Исполнитель
	5	Подготовка образцов Mg-MOF	Оператор
	6	Проведение исследования методом позитронной аннигиляционной спектроскопии образцов в условиях вакуума	Оператор
	7	Проведение исследования методом позитронной аннигиляционной спектроскопии образцов в условиях наводороживания	Оператор
	8	Сопоставление результатов эксперимента с теоретическими	Научный руководитель, исполнитель
Обобщение и оценка результатов	9	Выводы по результатам исследования и написание отчета о проведенном исследовании в виде ВКР	Исполнитель

**Определение трудоемкости выполнения работ.** Рассчитаем трудоемкость выполнения работ для 3-х различных исполнителей, которые были приведены в таблице 4.5. Используемые сокращения в таблице: нч – научный руководитель, оп – оператор, ис – исполнение.

Таблица 4.5 – Временные показатели проведения научного исследования

Название работы	Трудоемкость работы									Исполнители			Длительность работы в рабочих днях $T_{pi}$			Длительность работы в календарных днях $T_{ki}$		
	$t_{min}$ , чел-дни			$t_{max}$ , чел-дни			$t_{ож}$ , чел-дни											
	Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3	Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3	Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3	Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3	Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3	Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3
Составление и утверждение технического задания	3	3	3	7	7	7	4,6	4,6	4,6	нч	нч	нч	4,6	4,6	4,6	6,8	6,8	6,8
Подбор и изучение материалов по теме	30	30	30	60	60	60	42	42	42	ис	ис	ис	42	42	42	62,1	62,1	62,1
Календарное планирование работ по теме	3	3	3	6	6	6	4,2	4,2	4,2	нч ис	нч ис	нч ис	2,1	2,1	2,1	3,1	3,1	3,1
Проведение теоретических расчетов параметров порошка	10	10	10	30	30	30	14	14	14	ис	ис	ис	14	14	14	31,0	31,0	31,0
Подготовка образцов Mg-MOF	14	7	7	28	14	14	19,6	9,8	9,8	оп	оп	оп	19,6	9,8	9,8	29,0	14,5	14,5
Проведение исследования методом позитронной аннигиляционной спектроскопии образцов в условиях вакуума	15	7	7	40	25	25	21	10,2	10,2	оп	оп	оп	21	10,2	10,2	50,2	28,1	28,1
Проведение исследования методом позитронной аннигиляционной спектроскопии образцов в условиях наводороживания	15	7	7	40	25	25	21	10,2	10,2	оп	оп	оп	21	10,2	10,2	50,2	28,1	28,1
Сопоставление результатов эксперимента с теоретическими	10	30	30	15	60	60	12	42	42	нч ис	нч ис	нч ис	6	21	21	8,9	31,0	31,0
Выводы по результатам исследования и написание отчета о проведенном исследовании в виде ВКР	30	60	60	60	90	90	42	72	72	ис	ис	ис	42	72	72	62,1	106,4	106,4
<b>Итого</b>																<b>255</b>	<b>275</b>	<b>275</b>

Если перевести полученные календарные дни по 3 исполнениям в недели, то выходит, что на выполнение работы по 1 исполнению потребуется 37 недель, по 2 – 40 недель и по 3 – 40 недель. Работа по выпускной квалификационной работе планировалась начаться 12.09.22 и закончиться 28.05.23, что составляет суммарно 37 недель.

Под такие сроки выполнения подходит лишь 1 вариант исполнения. Не смотря на то что образцов необходимо обработать меньше во 2 и 3 исполнениях, времени затрачивается больше, так как, не имея собственных результатов исследования трудно говорить с высокой точностью, поэтому для интерпретации данных необходимо гораздо больше времени.

**Разработка графика проведения научного исследования.** Ниже представлен график Ганта по выбранному исполнению 1. Данные по выполнению работ брались из таблицы 5. Используемые сокращения в таблице: нч – научный руководитель, оп – оператор, ис – исполнитель, исп – исполнение.

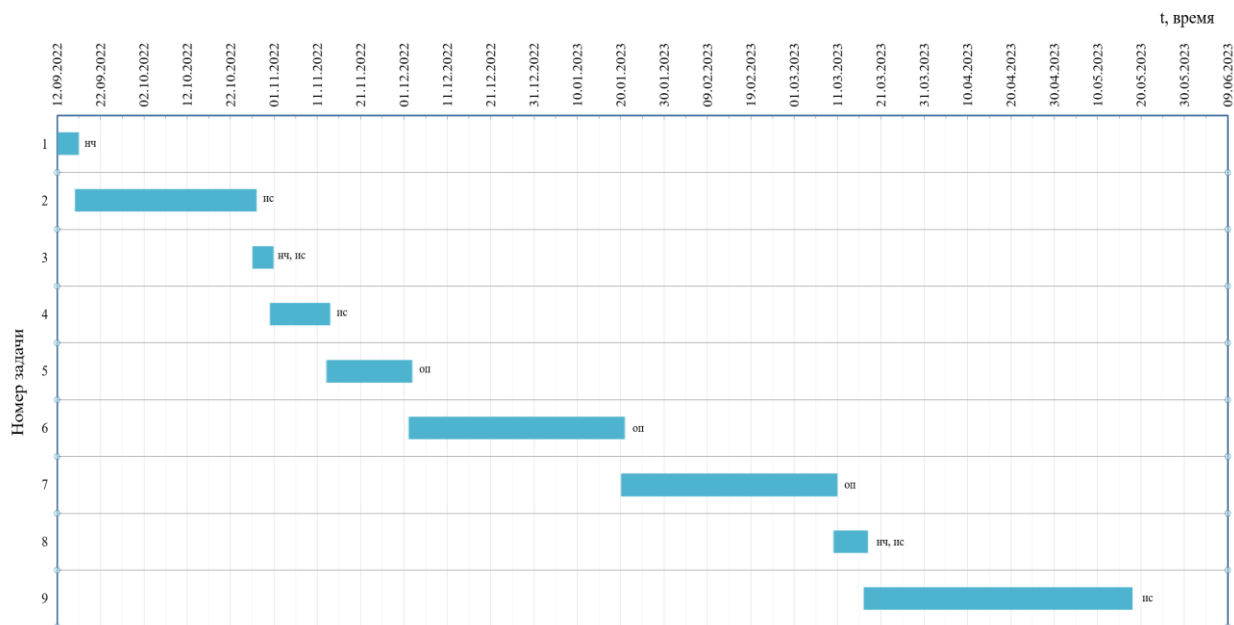


Рисунок 4.1 – График Ганта

**Бюджет научно-технического исследования (НТИ).** Представим расчет материальных затрат НТИ в таблице 4.6.

Таблица 4.6 – Материальные затраты

Наименование	Единица измерения	Количество			Цена за ед., руб.			Затраты на материалы, (З <sub>м</sub> ) руб.		
		Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3	Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3	Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3
Жидкий азот	л.	70	30	30	200			14000	6000	6000
Медь	гр.	80	60	40	4,5			360	270	180
Порошок магния	гр.	80	40	40	2,3			184	92	92
Металл-органическое соединение хрома	гр.	20	10	15	4,2			84	42	63
<b>Итого</b>								<b>14628</b>	<b>6404</b>	<b>4335</b>

Для расчета амортизации представим количество дней эксплуатации оборудования из таблицы 4.7. В данной таблице представлено оборудование, используемое в экспериментах, на протяжении разного количества времени исходя из исполнения.

Таблица 4.7 – Количество дней эксплуатации оборудования

Наименование оборудования	Время эксплуатации, дни		
	Исполнение 1	Исполнение 2	Исполнение 3
Сосуд Дьюар	42	21	21
Детектор из особо чистого германия (ОЧГ)	42	21	21
Gas Reaction Controller LP 100	42	21	21
ПВЭМ	146	170	170
Пакет программ (SP 16К, Origin Pro, ПО для оборудования, Microsoft Office 2016, разработанные ПО)	146	170	170

Представим расчет затрат на специальное оборудование, используемое в работе (таблица 4.8). При приобретении не учитывали доставку и установку, т.к. данное оборудование долгое время находится в исследовательской лаборатории. Стоимость учитывалась исходя из информации, полученной по запросу в компаниях изготовителях. Амортизационные отчисления считаются следующим образом: стоимость оборудования делится на срок полезного использования, а амортизационная стоимость на время эксплуатации: произведение амортизации на время эксплуатации.

Таблица 4.8 – Расчет затрат на спецоборудование для научных работ

Наименование оборудования	Кол-во ед.	Стоимость оборудования, руб.	Срок полезного использования, год	Амортизация в год, руб	Амортизация на время эксплуатации, руб		
					Исп.1	Исп.2	Исп.3
Сосуд Дьюар	2 шт.	45 000	6	7 500	864	432	432
Детектор из особо чистого германия (ОЧГ)	2 шт.	3 000 000	5	600 000	69 042	34 521	34 521
Gas Reaction Controller LP 100	1 шт.	1 600 000	20	80 000	9 206	4 603	4 603
ПВЭМ	1 шт.	50 000	10	5 000	2 000	2 329	2 329
Пакет программ (SP 16К, Origin Pro, ПО для оборудования, Microsoft Office 2016, разработанные ПО)	1 шт.	12 000	1	12 000	4 800	5 590	5 590
<b>Итого</b>					<b>85 912</b>	<b>47 475</b>	<b>47 475</b>

**Основная заработная плата исполнителей темы.** Для этого необходимо рассчитать действительный годовой фонд рабочего времени для участников исследования. Расчетные данные представлены в таблице 4.9.

Согласно количеству выходных и праздничных дней, в 2022/23 годах, т.к. в этот период проводился проект.

Таблица 4.9 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Исполнитель	Оператор
Календарное число дней	365	365	365
Количество нерабочих дней	117	117	117
- выходные дни	91	91	91
- праздничные дни	27	27	27
Потери рабочего времени			
- отпуск	24	24	24
- невыходы по болезни	0	0	0
Действительный годовой фонд рабочего времени	224	224	224

Проведены расчеты основной ( $Z_{осн}$ ), дополнительной ( $Z_{доп}$ ) заработных плат, а также отчисления во внебюджетные фонды. Коэффициент дополнительной заработной платы  $k_{доп}$  равен 13% от основной заработной платы. Премияльный коэффициент составляет 30% от оклада. Коэффициент надбавок и доплат 20% от оклада (в НИИ – за расширение сфер обслуживания, за профессиональное мастерство). Районный коэффициент для города Томска составляет 30%. Оклад исполнителя приравнивался к минимальному размеру оплаты труда и составил 16 242 руб.  $Z_{тс}$  – заработная плата по тарифной ставке, руб.  $Z_{м}$  – месячный должностной оклад работника, руб. Среднедневная заработная плата будет рассчитываться как среднемесячная заработная плата на количество месяцев работы без отпуска в течение года, с отпуском в 24 рабочих дня  $M = 11,2$  месяца, пятидневная рабочая неделя. Для научного руководителя был взят понижающий коэффициент, т.к. он не полностью был задействован в проекте, а 1/8 часть дня. Поэтому коэффициент составил 0,85.

Отчисления во внебюджетные фонды ( $Z_{внбсб}$ ) рассчитывался согласно главы 34 НК РФ и составил 30%. Расчет заработной платы представлен в таблице 4.10.

Таблица 4.10 – Расчет заработной платы

Исполнители	Разряд	З <sub>тс</sub> , руб.	k <sub>пр</sub>	k <sub>д</sub>	k <sub>р</sub>	З <sub>м</sub> , руб.	З <sub>дн</sub> , руб.	Т <sub>р</sub> , раб. дн.			З <sub>осн</sub> , руб.			З <sub>доп</sub> , руб.			З <sub>внеб</sub> , руб.		
								1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3
Руководитель (научный руководитель)	к.т.н.	37700	0,3	0,3	1,3	78416	3599	3	3	3	10797	10797	10797	1404	1404	1404	3660	3660	3660
Исполнитель (студент)	студент	16242				33783	1551	130	161	161	201630	249711	249711	26212	32462	32462	68353	84652	84652
Оператор (лаборант)	Инже- нер (низ- шей кате- гории)	19200				39936	1833	129	129	129	236457	236457	236457	30739	30739	30739	80159	80159	80159
<b>Итого: (З<sub>осн</sub> + З<sub>доп</sub> + З<sub>внеб</sub>)</b>																			
Исполнение 1						Исполнение 2						Исполнение 3							
<b>659 411 руб.</b>						<b>730 041 руб.</b>						<b>730 041 руб.</b>							

Не попавшие в предыдущие статьи расходов были посчитаны как накладные расходы. К этим расходам относятся: печать документов, электроэнергия, оплата услуг связи и интернета. Величину коэффициента накладных расходов можно взять в размере 16%. Накладные расходы считались, как сумма статей 1÷5 (таблица 4.11) умноженная на коэффициент расходов.

Таблица 4.11 – Расчет бюджета затрат НТИ

Наименование статьи	Сумма, руб		
	Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3
Материальные затраты НТИ	14 628	6 404	4 335
Затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	85 912	47 475	47 475
Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	448 884	496 965	496 965
Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	58 355	64 605	64 605
Отчисления во внебюджетные фонды	152 172	168 471	168 471
Накладные расходы	149862	154589	154237
<b>Бюджет затрат НТИ</b>	<b>1031405</b>	<b>1063936</b>	<b>1061515</b>

#### 4.4 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой эффективности исследования

За максимальную стоимость исполнения научно-исследовательского проекта возьмем стоимость исследования композиционного материала на основе Mg-MOF в качестве материала-накопителя водорода, которая примерно составила 1031405 руб.

Однако из-за того, что в исследуемых вариантах исполнения меняется количество исследуемых образцов, то интегральные показатели ресурсоэффективности будут отличаться. Позиция каждого исполнения оценивается по каждому показателю экспертным путем по пятибалльной шкале, где 1 – наиболее слабая позиция, а 5 – наиболее сильная. Веса показателей, определяемые экспертным путём, в сумме должны составлять 1.

Рассчитаем интегральный показатель ресурсоэффективности используя таблицу 4.12.



Таблица 4.12 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Критерий \ Объект исследования	Весовой коэффициент параметра	Исп.1	Исп.2	Исп.3
Точность полученных данных	0,4	5	4	4
Время обработки данных	0,3	5	3	3
Скорость получения данных	0,2	4	5	5
Время подготовки образцов	0,1	4	5	5
<b>Итого:</b>	<b>1</b>			

Полученные результаты по ресурсоэффективности сведены в таблице 4.12.

Таблица 4.12 – Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,97	1	0,99
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности	4,7	4	4
3	Интегральный показатель эффективности	4,85	4	4,04
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1,21		1,19

Оценка сравнительной эффективности показала, что разработка в первом варианте исполнения эффективнее остальных предложенных вариантов на 21 % и 19%. Разработка в первом варианте исполнения требует меньше ресурсов.

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА  
«СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»**

Студенту:

<b>Группа</b> 0Б91		<b>ФИО</b> Ашихмин Назар Алексеевич	
<b>Школа</b>	<b>Инженерная школа ядерных технологий</b>	<b>Отделение (НОЦ)</b>	<b>Отделение экспериментальной физики</b>
<b>Уровень образования</b>	Бакалавриат	<b>Направление/специальность</b>	03.03.02 Физика

Тема ВКР:

<b>Исследование композиционного материала на основе Mg-MOF методом позитронной аннигиляции in situ в процессе сорбции водорода</b>	
<b>Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:</b>	
<p><b>Введение</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика) и области его применения.</li> <li>– Описание рабочей зоны (рабочего места) при разработке проектного решения/при эксплуатации</li> </ul>	<p><i>Объект исследования:</i> материал-накопитель водорода на основе Mg-MOF.  <i>Область применения:</i> энергетика, авиация, химическое производство.  <i>Рабочая зона:</i> лаборатория  <i>Размеры помещения:</i> 6x8 м.  <i>Количество и наименование оборудования рабочей зоны:</i> газовый контроллер, генератор водорода, компрессор, вакуумный насос, печь, камера с термодатчиком, образец, детекторы из ОЧГ, предохранители, сцинтилляционные детекторы, питание предохранителя, высоковольтный блок, сетевой коммутатор, персональный компьютер.  <i>Рабочие процессы, связанные с объектом исследования, осуществляющиеся в рабочей зоне:</i> подготовка образцов, установка и контроль параметров, замеры результатов, сбор и обработка данных.</p>
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
<p><b>1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства;</li> <li>– организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>– Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 25.02.2022).</li> <li>– ГОСТ 12.2.049-80 ССБТ Оборудование производственное. Общие эргономические требования.</li> <li>– ГОСТ Р 50923-96. Дисплей. Рабочее место оператора. Общие эргономические требования и требования к производственной среде. Методы измерения.</li> <li>– ГОСТ 22269-76 Рабочее место оператора. Взаимное расположение элементов рабочего места.</li> <li>– ПНД Ф 12.13.1-03. Методические рекомендации. Техника безопасности при работе в аналитических лабораториях (общие положения).</li> </ul>
<p><b>2. Производственная безопасность</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– Анализ выявленных вредных и опасных производственных факторов</li> </ul>	<p><b>Вредные факторы:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– Производственные факторы, связанные с отсутствием или недостатком необходимого искусственного освещения;</li> <li>– Вредные производственные факторы, связанные с акустическими колебаниями в производственной среде;</li> <li>– Вредные производственные факторы, связанные с аномальными микроклиматическими параметрами воздушной среды на местонахождении работающего.</li> </ul> <p><b>Опасные факторы:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– Производственные факторы, связанные с электрическим током, вызываемым разницей электрических потенциалов;</li> <li>– Производственные факторы, связанные с чрезмерно высокой температурой материальных объектов;</li> </ul> <p><b>Средства коллективной и индивидуальной защиты от выявленных факторов:</b> изоляция электропроводов,</p>

	разделение электрической сети с помощью трансформаторов, диэлектрические перчатки, очки, халат, теплоизоляция.
<b>3. Экологическая безопасность</b>	<b>Воздействие на литосферу:</b> утилизация вышедших из строя электроприборов. <b>Воздействие на атмосферу:</b> утилизация вышедших из строя электроприборов.
<b>4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях</b>	<b>Возможные ЧС:</b> – пожар; – авария электроэнергетических систем; <b>Наиболее типичная ЧС:</b> – пожар
<b>Дата выдачи задания для раздела по линейному графику</b>	

**Задание выдал консультант:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Антоневич Ольга Алексеевна	к.б.н.		

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0Б91	Ашихмин Назар Алексеевич		

## **Глава 5. Социальная ответственность**

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

Работа посвящена исследованию композиционного материала-накопителя на основе Mg-MOF-101. Основная работа по разработке теории физических процессов в материале проводилась в 3 корпусе Томского политехнического университета в лабораторных условиях.

В разделе рассмотрены опасные и вредные факторы. Опасным производственным фактором, согласно [68], называется такой производственный фактор, воздействие которого в определенных условиях приводят к травме или другому внезапному, резкому ухудшению здоровья. Вредным производственным фактором называется такой производственный фактор, воздействие которого на работающего в определенных условиях приводит к заболеванию или снижению трудоспособности.

### **5.1 Правовые норма трудового законодательства**

Продолжительность рабочего времени, а именно начало и его окончание определена по соглашению сторон работодателя и работника в соответствии с главой 16 ст. 102 ТК РФ «Работа в режиме гибкого рабочего времени» [50].

Выполнение работ связано с воздействием вредных и (или) опасных факторов производственной среды, в связи с чем, работникам бесплатно выдаются средства индивидуальной защиты и смывающие средства, в

соответствии с главой 36 ст. 221 ТК РФ «Обеспечение работников средствами индивидуальной защиты» Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 27.12.2018) [50].

Поступающие на работу допускаются к исполнению своих обязанностей только после вводного инструктажа о соблюдении мер безопасности, инструктажа на рабочем месте и после собеседования по вопросам техники безопасности. Проведение всех видов инструктажа регистрируется в журнале. Работа в лаборатории с химическими реактивами, проводится только в вытяжных шкафах, также происходит осмотр оборудования, наведение порядка на рабочем месте, применение индивидуальных средств защиты по ПНД Ф 12.13.1-03 Методические рекомендации. Техника безопасности при работе в аналитических лабораториях (общие положения) [51].

При проведении социальной оценки условий труда на рабочем месте, работник вправе обращаться к эксперту, проводящей специальную оценку условий труда с предложениями по осуществлению на его рабочем месте идентификации потенциально вредных и (или) опасных производственных факторов и за получением разъяснений по вопросам проведения специальной оценки условий труда на его рабочем месте Федеральный закон от 28 декабря 2013 г. N 426-ФЗ «О специальной оценке условий труда» [52].

## **5.2 Эргономические требования к правильному расположению и компоновке рабочей зоны**

Стол в рабочей зоне исследователя должен быть устойчивым, иметь однотонное неметаллическое покрытие, не обладающее способностью накапливать статическое электричество. Рабочий стул должен иметь дизайн, исключающий онемение тела из-за нарушения кровообращения при продолжительной работе на рабочем месте. Рабочее место должно соответствовать техническим требованиям и санитарным нормам. При

выполнении работ в положении стоя рабочее место и оборудование должны гарантировать прямое и свободное положение корпуса тела, работающего или наклон его вперед не более чем на 15°. Для обеспечения удобного подхода к столу или оборудованию должно быть предусмотрено пространство для стоп. В помещении должен быть организован воздухообмен. При работе с органами управления установки, все органы управления должны быть в зоне досягаемости моторного поля согласно ГОСТ 12.2.033-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ стоя [53].

Персонал допускается к работе только в средствах индивидуальной защиты. Необходимо знать специфические свойства применяемых веществ и соблюдать установленные правила работы с ними ПНД Ф 12.13.1-03 Методические рекомендации. Техника безопасности при работе в аналитических лабораториях (общие положения) [54].

### **5.3 Методические рекомендации при работе в аналитических лабораториях**

Согласно ПНД Ф 12.13.1-03. Методические рекомендации. Техника безопасности при работе в аналитических лабораториях (общие положения) [54] при работе в лабораториях необходимо соблюдение следующих требований:

- На работу в лаборатории принимаются лица не моложе 18 лет, прошедшие медицинское освидетельствование для решения вопроса о возможности работы в лаборатории.
- Вновь поступающие на работу допускаются к исполнению своих обязанностей только после прохождения вводного инструктажа о соблюдении мер безопасности, инструктажа на рабочем месте и после собеседования по вопросам техники безопасности.
- Периодический инструктаж должен проводиться на рабочем месте дважды в год.

– Все работающие в лаборатории должны быть обеспечены необходимой спецодеждой и средствами индивидуальной защиты.

Работа в лаборатории выполнялась в соответствии с нормативными документами [55,56].

## 5.4 Производственная безопасность

Вредные и опасные факторы лабораторного помещения перечислены в таблице 5.1.

Таблица 5.1 – Опасные и вредные факторы на каждом из этапов работ

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015 [50])	Нормативные документы
1. Вредные производственные факторы, связанные с аномальными микроклиматическими параметрами воздушной среды на местонахождении работающего	ГОСТ 30494-2011 Здания жилые и общественные. Параметры микроклимата в помещениях [2] СанПиН 1.2.3685–21 «Гигиенические нормативы и требования к обеспечению безопасности и (или) безвредности для человека факторов среды обитания»
2. Факторы, связанные с чрезмерно высокой или низкой температурой материальных объектов производственной среды	ГОСТ 12.2.003-91 ССБТ. Оборудование производственное. Общие требования безопасности [19]
3. Отсутствие или недостаток необходимого естественного и искусственного освещения	СП 52.13330.2016 Естественное и искусственное освещение [3]
4. Вредные производственные факторы, связанные с акустическими колебаниями в производственной среде	ГОСТ 12.1.003–2014 ССБТ Шум. Общие требования безопасности. ГОСТ 12.1.029-80 ССБТ. Средства и методы защиты от шума. Классификация. СП 51.13330.2011. Защита от шума. Актуализированная редакция СНиП 23- 03-2003.
5. Производственные факторы, связанные с электрическим током, вызываемым разницей электрических потенциалов	ГОСТ 12.1.038-82 ССБТ. Электробезопасность. Предельно допустимые уровни напряжений прикосновения и токов; ГОСТ 12.1.019-2017 ССБТ. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты;

## 5.5 Вредные производственные факторы, связанные с аномальными микроклиматическими параметрами воздушной среды на местонахождении работающего

Показателями, характеризующими факторы, связанные с аномальными микроклиматическими параметрами воздушной среды на местонахождении работающего, являются [51]:

- температура воздуха;
- относительная влажность воздуха;
- скорость движения воздуха;
- интенсивность теплового излучения.

Каждый из параметров микроклимата оказывает влияние на человека, а в совокупности они могут усиливать негативное влияние на организм в случае отклонения этих параметров микроклимата.

Для всех работ существуют свои категории и соответствующие им оптимальные и допустимые значения характеристик микроклимата. Данная работа анализ данных полученных для композита Mg-MOF с помощью ПЭВМ относится к категории легкой физической работы (1б).

Оптимальные значения для температуры, скорости движения воздуха и влажности приведены в таблице 5.2.

Таблица 5.2 – Оптимальные параметры микроклимата (категория 1б)

Период года	Температура, °С	Относительная влажность, %	Скорость движения воздуха, м/с
Холодный	21-23	40-60	0,1
Теплый	22-24	40-60	0,1

Отопление лаборатории и корпуса в целом водяное с применением радиаторов, что обеспечивает постоянное и равномерное нагревание воздуха в холодное время года. В рабочем помещении имеется как естественная вентиляция, так и принудительная. Для обеспечения оптимальных и допустимых показателей микроклимата в холодный период года следует



применять средства защиты рабочих мест от остекленных поверхностей оконных проемов, чтобы не было охлаждения. В теплый период года необходимо предусмотреть защиту от попадания прямых солнечных лучей.

## **5.6 Факторы, связанные с чрезмерно высокой или низкой температурой материальных объектов производственной среды**

В результате неполадок такого электрического оборудования, как высокотемпературная печь ATS 3210 и автоматизированная установка Gas Reaction Controller, которые являются объектом производственной среды, связанные с чрезмерно высокой температурой, способная вызвать ожоги тканей организма человека.

Конструкция производственного оборудования и (или) его размещение должны исключать контакт его горючих частей с пожаровзрывоопасными веществами, если такой контакт может явиться причиной пожара или взрыва, а также исключать возможность соприкосновения работающего с горячими частями или нахождение в непосредственной близости от таких частей, если это может повлечь за собой травмирование, перегрев работающего. Если назначение производственного оборудования и условия его эксплуатации (например, использование вне производственных помещений) не могут полностью исключить контакт работающего с горячими его частями, то эксплуатационная документация должна содержать требование об использовании средств индивидуальной защиты по ГОСТ 12.2.003-91 ССБТ. Оборудование производственное. Общие требования безопасности [57].

Конструкция производственного оборудования должна исключать опасность, вызываемую разбрызгиванием горячих обрабатываемых и (или) используемых при эксплуатации материалов и веществ. Если конструкция не может полностью обеспечить исключение такой опасности, то эксплуатационная документация должна содержать требования об использовании средств защиты, не входящих в конструкцию [57].

## 5.7 Отсутствие или недостаток необходимого естественного и искусственного освещения

Нехватка естественного света оказывает пагубное влияние на нервную систему человека, что может привести к психическим заболеваниям, при нехватке искусственного света человек ощущает апатию и депрессию.

Недостаток освещенности рабочего места пагубно сказывается на зрении человека, его концентрации и т.д. В темных помещениях человек испытывает усталость и сонливость, так как организм стремится уйти в сон. Также недостаточная освещенность ведет к развитию близорукости и дальнозоркости.

Основные требования и значения нормируемой освещенности рабочих поверхностей изложены в СП 52.13330.2016 и приведены в таблице 5.3. Выбор освещенности осуществляется в зависимости от размера объема различения (толщина линии, риски, высота буквы), контраста объекта с фоном, характеристики фона [63].

Таблица 5.3 – Требования к освещению рабочего места

Характеристика зрительной работы	Искусственное освещение					Естественное освещение	
	Освещенность, лк			Сочетание нормируемых		КЕО, ед, %	
	При системе комбинированного освещения		При системе общего освещения	Величин показателя ослепленности и коэффициента пульсации		При верхнем или комбинированном освещении	При боковом освещении
Всего	В том числе от общего	Р		К <sub>п</sub> , %			
Средней точности	500	200	200	40	20	4	1,5

## **5.8 Вредные производственные факторы, связанные с акустическими колебаниями в производственной среде**

Превышение уровня шума возникает при работе механических и электромеханических изделий.

Для оценки шумовой обстановки допускается использовать числовую характеристику, называемую уровнем звука (измеряется в дБ). В соответствии с СП 51.13330.2011 «Защита от шума» допустимый уровень шума при работе, требующей сосредоточенности, работе с повышенными требованиями к процессам наблюдения и дистанционного управления производственными циклами на рабочих местах в помещениях с шумным оборудованием, составляет 75 дБ. Зоны с уровнем звука 80 дБ должны быть обозначены знаками безопасности согласно ГОСТ 12.4.026-2015 «Система стандартов безопасности труда. Цвета сигнальные и знаки безопасности».

В лаборатории основными источниками шума является ноутбук и вакуумный насос.

В соответствии со спецификацией на ноутбуке, уровень шума охлаждающего устройства процессора 15-20 дБ, остальные элементы являются пассивными и их уровень шума не учитывается. Шум, вызванный работой вакуумного насоса не превышает 75 дБ, т.к. нет необходимости работать больше номинальной мощности.

В рассматриваемой аудитории дополнительная звукоизоляция не требуется, так как предельное значение уровня шума не достигается.

Для доведения уровня шума до санитарных норм следует придерживаться следующих правил при организации труда в помещении:

- внутренний блок кондиционера следует располагать вдали от людей, занимающихся творческой деятельностью (программисты), и не использовать на полную мощность, если позволяют климатические условия;

– своевременно осуществлять профилактику системных блоков компьютеров (очистка от пыли и смазывание движущихся частей охлаждающих установок, замена излишне шумных комплектующих).

Защита от повышенных уровней шума и вибрации осуществляется методами его снижения в источнике образования и на пути распространения, устройством экранов и звукопоглощающих облицовок, средствами индивидуальной защиты согласно [53, 64].

## **5.9 Производственные факторы, связанные с электрическим током, вызываемым разницей электрических потенциалов**

При исследовании композиционных материалов на основе Mg-MOF возникает необходимость работы на электрооборудовании, таком как, ПЭВМ, высокотемпературная печь ATS 3210 и автоматизированная установка Gas Reaction Controller вследствие чего возникает вероятность прохождения электрического тока через тело человека. Опасное и вредное воздействия на людей электрического тока проявляются в виде электротравм (судороги, остановка сердца, остановка дыхания, ожоги и др.) и заболеваний. Результат воздействия тока на человека зависит от величины силы тока, его рода и частоты, продолжительности воздействия и множества других факторов. Причиной поражения электрическим током в условиях лаборатории могут стать случайное прикосновение к токоведущим частям или появление напряжения на металлических частях оборудования.

Напряжение прикосновения и токи при нормальном (неаварийном) режиме электроустановки, не должны превышать 8 В и 1 мА, соответственно (постоянный ток) или 2 В, 0,3 мА (переменный ток частотой 50 Гц) согласно 12.1.038-82 ССБТ. Электробезопасность. Предельно допустимые уровни напряжений прикосновения и токов [58].

Для обеспечения защиты от прямого прикосновения необходимо применение таких технических способов и средств основной защиты, как:

основная изоляция, защитное отключение, безопасное расположение токоведущих частей, средства индивидуальной защиты по ГОСТ 12.1.019-2017 ССБТ. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты [59].

### **5.10 Экологическая безопасность**

На рабочем месте предполагаемым источником загрязнения окружающей среды могут оказаться воздействующие на литосферу отходы при поломке предметов вычислительной техники и оргтехники. Вышедшая из строя ПЭВМ и сопутствующая оргтехника. Для оказания наименьшего влияния на окружающую среду, необходимо проводить специальную процедуру утилизации ПЭВМ и оргтехники, при которой более 90% отправится на вторичную переработку и менее 10% будут отправлены на свалки. При этом она должна соответствовать процедуре утилизации ГОСТ Р 53692-2009 «Ресурсосбережение. Обращение с отходами. Этапы технологического цикла отходов». В ходе деятельности организация также создает бытовой мусор (канцелярские, искусственные источники освещения), который должен быть утилизирован в соответствии с определённым классом опасности или переработан, чтобы не оказывать негативное влияние на состояние литосферы. Накапливаемые отходы складываются в стальной бак на входе в производственное помещение и затем утилизируются.

### **5.11 Безопасность в аварийных и чрезвычайных ситуациях**

Чрезвычайная (аварийная) ситуация – обстановка на определенной территории, сложившаяся в результате аварии, опасного природного явления, катастрофы, стихийного или иного бедствия, которые могут повлечь или повлекли за собой человеческие жертвы, ущерб здоровью людей или окружающей природной среде, значительные материальные потери и

нарушение условий жизнедеятельности людей [66]. Есть два основных вида чрезвычайных ситуаций: техногенная и природная.

К техногенным ситуациям можно отнести пожары, взрывы, диверсии. К природным – природные катаклизмы.

К опасностям несчастного случая относится внезапный и неуправляемый источник энергии: двигающийся предмет, неуправляемое движение или энергия.

Возможные аварийные ситуации:

- возникновение пожара;
- авария электроэнергетических систем;

Наиболее вероятной чрезвычайной ситуацией являются пожары. Для предотвращения пожаров необходимо выполнять следующее:

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;
5. Контроль работы электроприборов.

В случае возникновения пожара необходимо вовремя провести следующие мероприятия:

1. Обесточить помещение, прекратить поступление воздуха;
2. Вызвать пожарных или вызвать экстренные службы по номеру телефона (112);
3. Немедленно сообщить о пожаре дежурному или на пост охраны;
4. По возможности принять меры по эвакуации людей, тушению пожара и спасению материальных ценностей.

В данном разделе рассмотрены потенциальные аварийные и чрезвычайные ситуации, которые могут возникнуть при работе в

лаборатории учебного корпуса № 3. Рассмотрены мероприятия по предотвращению и ликвидации этих ситуаций, согласно [58, 66].

### **Выводы по главе «Социальная ответственность»**

Значение всех производственных факторов на изучаемом рабочем месте соответствует нормам, которые также были продемонстрированы в данном разделе, за исключением фактора, обладающего свойствами психофизиологического воздействия на организм человека. Для минимизации влияния данного фактора на организм человека, достаточно соблюдать меры, приведенные в МР 2.2.9.2311–07 «Профилактика стрессового состояния работников при различных видах профессиональной деятельности [62].

Категория помещения по электробезопасности согласно ПУЭ соответствует первому классу – «помещения без повышенной опасности» [51]. Согласно правилам по охране труда при эксплуатации электроустановок персонал должен обладать I группой допуска по электробезопасности. Присвоение группы I по электробезопасности производится путем проведения инструктажа, который должен завершаться проверкой знаний в форме устного опроса и (при необходимости) проверкой приобретенных навыков безопасных способов работы или оказания первой помощи при поражении электрическим током [7]. Категория тяжести труда в лаборатории по СанПиН 1.2.3685-21 "Гигиенические нормативы и требования к обеспечению безопасности и (или) безвредности для человека факторов среды обитания" относится к категории Ib (работы, производимые сидя, стоя или связанные с ходьбой и сопровождающиеся физическим напряжением) [53]. Помещение лаборатории категории помещения группы А, возможный класс пожара В. Рассмотренный объект, оказывающий незначительное негативное воздействие на окружающую среду, относится к объектам III категории [54].

## Заключение

В ходе проделанной работы по исследованию композиционного материала на основе Mg-MOF методом позитронной аннигиляции *in situ* при высокотемпературных воздействиях было установлено, что:

1. При высокотемпературном воздействии на MOF до 150 °C происходит повышение S-параметра, что свидетельствует об увеличении сводного объема дефектной структуры. Соответствующие изменения термодинамических параметров свидетельствуют о десорбции газов, абсорбированных из атмосферы. Таким образом, можно сделать вывод, что абсорбированный газ был захвачен в том числе дефектами свободного объема. В диапазоне 120 и 350°C происходит повышение давления, что характерно при потере некоординированной терефталевой кислоты, локализованной в порах. Каркас MIL-101 начинает разлагаться при температуре выше 350°C.

2. Динамика изменения дефектной структуры композита на основе Mg-MOF при нагреве в вакууме качественно сопоставим с динамикой изменения дефектной структуры чистого магния. Из этого следует, что MOF не изменяет дефектную структуру Mg.

3. При качественном сравнении материала Mg и Mg-MOF при высокотемпературном воздействии, в композитном материале не происходит расплавления и спекания порошка.

Полученные в данной работе экспериментальные данные являются первым этапом *in situ* исследований дефектной структуры композита на основе Mg-MOF и должны быть учтены при дальнейших исследованиях, в том числе в среде водорода.



## СПИСОК ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Gelezunas V.L., Conn P.K., Price R.H. The Diffusion Coefficients for Hydrogen in  $\beta$ -Zirconium // J. Electrochem. Soc. 1963. Т. 110, № 7. С. 799.
2. Kim S.S., Kwon S.C., Suk Kim Y. The effect of texture variation on delayed hydride cracking behavior of Zr–2.5%Nb plate // J. Nucl. Mater. 1999. Т. 273, № 1. С. 52–59.
3. Beachem C.D. A new model for hydrogen-assisted cracking (hydrogen “embrittlement”) // Metall. Mater. Trans. B. 1972. Т. 3, № 2. С. 441–455.
4. Hydrogen in Metals I / под ред. Alefeld G., Völkl J. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1978. Т. 28.
5. Hautojarvi P. и др. Vacancy recovery and vacancy-hydrogen interaction in niobium and tantalum studied by positrons // Phys. Rev. B. 1985. Т. 32, № 7. С. 4326–4331.
6. Laptev R. S. et al. Gas-phase hydrogenation influence on defect behavior in titanium-based hydrogen-storage material //Progress in Natural Science: Materials International. – 2017. – V. 27. – №. 1. – P. 105-111.
7. Murashkina T. L. et al. Structure and defects evolution at temperature and activation treatments of the TiCr<sub>2</sub> intermetallic compound of Laves phase C36-type //International Journal of Hydrogen Energy. – 2019. – V. 44. – №. 21. – P. 10732-10743.
8. Ян И. Влияние структуры нанотрубок на водородсорбционную емкость углеродного материала. – 2016. (дата обращения: 23.10.2021).
9. Измайлова Е. А. Адсорбция энантиомеров аланина из водных растворов на углеродных нанотрубках : дис. – Воронежский гос. ун-т, 2020.
10. Тарасов Б. П., Гольдшлегер Н. Ф. Сорбция водорода углеродными наноструктурами //Альтернативная энергетика и экология. – 2002. – №. 3. – С. 20-38.

11. Исследование процесса имплантации ионов в полупроводниках методом пучковой позитронной аннигиляционной спектроскопии [сайт]. URL: <http://prokopep.narod.ru/book2/html/glava9.htm>)
12. Positron Annihilation Spectroscopy Complex for Structural Defect Analysis in Metal–Hydrogen Systems [сайт]. URL: <https://doi.org/10.3390/ma15051823>
13. Кэбин Э. Ядерная электроника для пользователей // Ядерная физика в Интернете. Проект кафедры общей ядерной физики физического факультета МГУ. 2007. Режим доступа: <http://nuclphys.sinp.msu.ru/electronics>
14. Wu H. B., Lou X. W. D. Metal-organic frameworks and their derived materials for electrochemical energy storage and conversion: Promises and challenges // *Science Advances*. – 2017. – Vol. 3., №. 12. – P. 9252.
15. Malouche A. Metal doped MIL-101 (Cr) for hydrogen storage : дис. – Université Paris-Est Créteil Val de Marne (UPEC), 2019.
16. Makkonen-Craig S. et al. <sup>64</sup>Cu production, ligands and biomedical applications. – 2006.
17. Светцов В. И., Оптическая и квантовая электроника: учебное пособие, 2004
18. Freni A. et al. Comparative analysis of promising adsorbent/adsorbate pairs for adsorptive heat pumping, air conditioning and refrigeration // *Applied Thermal Engineering*. – 2016. – Т. 104. – С. 85-95.
19. Férey G. et al. A chromium terephthalate-based solid with unusually large pore volumes and surface area // *Science*. – 2005. – Т. 309. – №. 5743. – С. 2040-2042.
20. Тарасов Б. П., Лотоцкий М. В., Яртысь В. А. Проблема хранения водорода и перспективы использования гидридов для аккумуляции водорода // *Российский химический журнал*. – 2006. – Т. 50. – №. 6. – С. 34-48.
21. Siegman, A. E. (1986). *Lasers*. University Science Books. p. 1184.
22. P.E. Mijnders Positron confinement in embedded lithium nanoclusters // [www.researchgate.net](http://www.researchgate.net). 2002. №10.1103/PhysRevB.65.085416.

23. Makkonen-Craig, S.  $^{64}\text{Cu}$  production, ligands and biomedical applications. Pro gradu dissertation, University of Helsinki, 2006.
24. Krause-Rehberg, R.; Leipner, H.S. Positron Annihilation in Semiconductors; Springer Series in Solid-State Sciences; Springer-Verlag: Berlin, 1999; Vol. 127.
25. Kudiiarov, V.N.; Syrtanov, M.S.; Bordulev, Yu.S.; Babikhina, M.N.; Lider, A.M.; Gubin, V.E.; Murashkina, T.L. The Hydrogen Sorption and Desorption Behavior in Spherical Powder of Pure Titanium Used for Additive Manufacturing. *Int. J. Hydrog. Energy* 2017, 42, 15283–15289, doi:10.1016/j.ijhydene.2017.04.248.
26. Krause-Rehberg, R.; Leipner, H.S. Positron Annihilation in Semiconductors; Springer Series in Solid-State Sciences; Springer-Verlag: Berlin, 1999; Vol. 127.
27. Laptev, R.S.; Bordulev, Y.S.; Kudiiarov, V.N.; Lider, A.M.; Garanin, G.V. Positron Annihilation Spectroscopy of Defects in Commercially Pure Titanium Saturated with Hydrogen. *Adv. Mater. Res.* 2014, 880, 134–140, doi:10.4028/www.scientific.net/AMR.880.134.
28. M. Clement, J. M. M. de Nijs, P. Balk, H. Schut, и A. van Veen Analysis of positron beam data by the combined use of the shape and wing-parameters // AIP Publishing, 1996 American Institute of Physics. S0021-8979(96)02912-X, *Journal of Applied Physics* 79, 9029 (1996). No. 12, 15 июнь 1996.
29. Ouyang L.Z., Huang J.M., Wang H., Wen Y.J., Zhang Q.A., Sun D.L., Zhu M. *Int. J. Hydrogen Energy*, 38 (2013), pp. 2973-2978.
30. Ouyang L.Z., Zhong H., Li Z.M., Cao Z.J., Wang H., Liu J.W., Zhu X.K., Zhu M.J. *Power Sources*, 269 (2014), pp. 768-772.
31. Huang J., Duan R., Ouyang L., Wen Y., Wang H., Zhu M. *Int. J. Hydrogen Energy*, 39 (2014), pp. 13564-13568.
32. Huang M., Ouyang L., Wang H., Liu J., Zhu M. *Int. J. Hydrogen Energy*, 40 (2015), pp. 6145-6150.

33. Zhong H., Wang H., Liu J., Sun D., Fang F., Zhang Q., Ouyang L., Zhu M.J. *Alloys Compd.*, 680 (2016), pp. 419-426.
34. A. Zaldívar-Cadena, I. Díaz-Peña, J. Cabañas-Moreno. *Magnes. Alloys*, 1 (2013), pp. 292-296.
35. L. Schlapbach, A. Züttel *Nature World Scientific* (2011), pp. 353-358.
36. Xia G., Tan Y., Chen X., Sun D., Guo Z., Liu H., Ouyang L., Zhu M., Yu X. *Adv. Mater.*, 27 (2015), pp. 5981-5988.
37. S.I. Orimo, Y. Nakamori, J.R. Eliseo, A. Züttel, C.M. Jensen *Chem. Rev.*, 107 (2007), pp. 4111-4132.
38. HY Shao, LQ He, HJ Lin, HW Li, *Energy Technol.*, 6 (2018) 445–458.
39. Li J., Li B., Shao H., Li W., Lin H. *Catalyst*, 8 (2018), p. 89.
40. Shao H., Xin G., Zheng J., Li X., E. Akiba *Nano Energy*, 1 (2012), pp. 590-601.
41. E.S. Cho, A.M. Ruminski, S. Aloni, Y.-S. Liu, J. Guo, J.J. Urban *Nat. Commun.*, 7 (2016), p. 10804
42. Zhang H., Zheng X., Tian X., Liu Y., Li X. *Prog. Nat. Sci. Mater.*, 27 (2017), pp. 50-57
43. N. Mushnikov, A. Ermakov, M. Uimin, V. Gaviko, P. Terent'ev, A. Skripov, A. Tankeev, A. Soloninin, A. Buzlukov *Phys. Met. Metallogr.*, 102 (2006), pp. 421-431
44. H.E. Kissinger *Anal. Chem.*, 29 (1957), pp. 1702-1706.
45. Wang H., Lin H., Cai W., Ouyang L., Zhu M.J. *Alloys Compd.*, 658 (2016), pp. 280-300.
46. Shao H., M. Felderhoff, F. Schuth *Int. J. Hydrogen Energy*, 36 (2011), pp. 10828-10833.
47. R.W.P. Wagemans, J.H. van Lenthe, P.E. de Jongh, A.J. van Dillen, K.P. de Jong *J. Am. Chem. Soc.*, 127 (2005), pp. 16675-16680.
48. Li Q., Chou K., Lin Q., Jiang L., F. Zhan *Int. J. Hydrogen Energy*, 29 (2004), pp. 843-849.

49. Liu J., Zhang X., Li Q., Chou K., Xu K. Int. J. Hydrogen Energy, 34 (2009), pp. 1951-1957.

50. ГОСТ 12.0.003-2015 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Опасные и вредные производственные факторы. Классификация: дата введения 2017-03-01. – URL: <https://docs.cntd.ru/document/1200136071/> (дата обращения: 15.05.2023). – Текст: электронный.

51. ГОСТ 30494-2011 Здания жилые и общественные. Параметры микроклимата в помещениях: дата введения 2013-01-01. – URL: <https://docs.cntd.ru/document/1200095053> (дата обращения: 15.05.2023). – Текст: электронный.

52. СП 52.13330.2016 Естественное и искусственное освещение: дата введения 2017-05-08 – URL: <https://docs.cntd.ru/document/456054197> (дата обращения: 15.05.2023). – Текст: электронный.

53. СанПиН 1.2.3685-21 Гигиенические нормативы и требования к обеспечению безопасности и (или) безвредности для человека факторов среды обитания: дата введения 2021-01-28. – URL: <https://docs.cntd.ru/document/573500115> (дата обращения: 15.05.2023). – Текст: электронный.

54. 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): дата введения 2009-05-01. – URL: <https://docs.cntd.ru/document/1200071156> (дата обращения: 15.05.2023). – Текст: электронный.

55. ГОСТ 12.1.004-91 Система стандартов безопасности труда. Пожарная безопасность. Общие требования: дата введения 1992-07-01. – URL: <https://docs.cntd.ru/document/9051953> (дата обращения: 15.05.2023). – Текст: электронный.

56. ГОСТ 12.1.009-2017 Система стандартов безопасности труда. Электробезопасность. Термины и определения: дата введения 2019-01-01. –

- URL: <https://docs.cntd.ru/document/1200161311> (дата обращения: 15.05.2023).  
– Текст: электронный.
57. ГОСТ 12.1.019-2017 Система стандартов безопасности труда. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты: дата введения 2019-01-01. – URL: <https://docs.cntd.ru/document/1200161238> (дата обращения: 15.05.2023). – Текст: электронный.
58. ГОСТ Р 58698-2019 (МЭК 61140:2016). Защита от поражения электрическим током. Общие положения для электроустановок и электрооборудования: дата введения 2020-06-01. – URL: <https://docs.cntd.ru/document/1200170001> (дата обращения: 15.05.2023). – Текст: электронный.
59. СП 2.2.3670-20 Санитарно-эпидемиологические требования к условиям труда: дата введения 2020-12-01. – URL: <https://docs.cntd.ru/document/573230583> (дата обращения: 15.05.2023). – Текст: электронный.
60. СанПиН 2.6.1.2523-09 Нормы радиационной безопасности НРБ-99/2009: дата введения 2009-07-07. – URL: <https://docs.cntd.ru/document/902170553> (дата обращения: 15.05.2023). – Текст: электронный.
61. ГОСТ 32548-2013 Вентиляция зданий. Воздухораспределительные устройства. Общие технические условия: дата введения 2015-01-01. – URL: <https://docs.cntd.ru/document/1200110084> (дата обращения: 15.05.2023). – Текст: электронный.
62. Вихревые воздуходувки ООО «Инверс-Инжиниринг»: официальный сайт. – URL: <https://varp.pro/vozduhoduvki/vihrevye/varp-alpha-420x170> (дата обращения: 15.05.2023). – Текст: электронный.
63. СНиП 41-01-2003 Отопление, вентиляция и кондиционирование: дата введения 2004-01-01. – URL: <http://docs.cntd.ru/document/1200035579> (дата обращения: 15.05.2023). – Текст: электронный.

64. СП 51.13330.2011 Защита от шума. Актуализированная редакция СНиП 23-03-2003: дата введения 2011-05-20. – URL: <https://docs.cntd.ru/document/1200084097> (дата обращения: 15.05.2023). – Текст: электронный.

65. ГОСТ 12.4.026-2015 Система стандартов безопасности труда. Цвета сигнальные и знаки безопасности: дата введения 2017-03-01. – URL: <https://docs.cntd.ru/document/1200136061> (дата обращения: 15.05.2023). – Текст: электронный.

66. ГОСТ Р 22.0.02-2016 Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Термины и определения: дата введения 2017-01-01. – URL: <https://docs.cntd.ru/document/1200139176> (дата обращения: 15.05.2023). – Текст: электронный.

67. ГОСТ 12.0.003-2015 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Опасные и вредные производственные факторы: дата введения 2017-03-01. – URL: <https://docs.cntd.ru/document/1200136071> (дата обращения: 15.05.2023). – Текст: электронный.