

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
Структура и физические свойства углерода r_{42}/t под высоким давлением

УДК 661.666-022.532:53:62-987

Обучающийся

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б91	Сунь Чжицзюнь		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОЭФ	Чистякова Надежда Владимировна	к.ф.-м.н.		

Консультант (при наличии)

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

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

По разделу «Социальная ответственность»

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

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

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

Томск – 2023 г.

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОСВОЕНИЯ ООП/ОПОП

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

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



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

Инженерная школа ядерных технологий

Направление подготовки (ООП/ОПОП) 03.03.02 Физика

Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

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

ЗАДАНИЕ на выполнение выпускной квалификационной работы

Обучающийся:

Группа	ФИО
150B91	Сунь Чжицзюнь

Тема работы:

Структура и физические свойства углерода P_{42}/t под высоким давлением	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	27.01.2023, 27-79/с

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

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе <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>	Объектом исследования являются структурные и механические свойства углерода $P_{42}/m-40$
Перечень разделов пояснительной записки подлежащих исследованию, проектированию и разработке <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>	Обзор углеродных материалов Метод расчёта из первых принципов Результаты расчетов Финансовый менеджмент, ресурс эффективность и ресурсосбережение Социальная ответственность Заключение $P_{42}/m-40$
Перечень графического материала <i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i>	-
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы <i>(с указанием разделов)</i>	
Раздел	Консультант

Названия разделов, которые должны быть написаны на иностранном языке:
-

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

Задание выдал руководитель / консультант (при наличии):

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОЭФ	Чистякова Н.В.	к.ф.-м.н.		

Задание принял к исполнению обучающийся:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б91	Сунь Чжицзюнь		



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

Инженерная школа ядерных технологий

Направление подготовки (ООП/ОПОП) 03.03.02 Физика

Уровень образования бакалавриат

Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

Период выполнения _____ (осенний / весенний семестр 2022/2023 учебного года)

КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН выполнения выпускной квалификационной работы

Обучающийся:

Группа	ФИО
150Б91	Сунь Чжицзюнь

Тема работы:

Структура и физические свойства углерода p42/т под высоким давлением
--

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

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
01.11.2022	Литературный обзор по теме ВКР	15
30.04.2023	Методы исследования	5
01.06.2023	Результаты экспериментальных исследований. Обработка результатов.	50
01.06.2023	Финансовый менеджмент, ресурс эффективность и ресурсосбережение	15
01.06.2023	Социальная ответственность	15

СОСТАВИЛ:

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОЭФ	Чистякова Н.В.	к.ф.-м.н.		

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП/ОПОП

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

Обучающийся

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б91	Сунь Чжицзюнь		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа содержит 77 страниц, 8 рисунков, 19 таблиц, 69 литературных источников.

Ключевые слова: отношение напряжения-деформации, новые углеродные материалы и метод расчёта из первых принципов.

Объектом исследования является углерода $P4_2/m-40$

Цель работы – стабильность, механические и электронные свойства углерода $P4_2/m-40$. Изучить поведение этого нового типа структур в ответ на стресс.

Для достижения цели были поставлены следующие задачи:

1. Рассчитать дисперсия фононов и коэффициенты тензора упругости (C_{ij})
2. Рассчитать модуль упругости (B) углерода $P4_2/m-40$.
3. Рассчитать структура энергетических зон и плотность состояний проекции (DOS).
4. Изучить отношение напряжения-деформации этой структуры в разных кристаллических направлениях при условиях нагрузки на растяжение и сдвиг.

В результате исследования установлено, что:

- 1) $P4_2/m-40$ углерод обладает стабильностью
- 2) Материал $P4_2/m-40$ углерод является полупроводником с косвенным запрещенным зазором 3,60 эВ,
- 3) Его идеальная прочность при растяжении и сдвиге составляет соответственно 88,0 ГПа и 81,2 ГПа, что указывает на то, что он является сверхтвёрдым углеродным материалом.

Область применения: Углерод $P4_2/m-40$ расширяет спектр сверхтвёрдых материалов и его превосходные электронные и механические свойства позволяют использовать его в наноэлектронике и наномашиностроении.

В будущем планируется: продолжить исследование структуры и свойств углеродных материалов со сверхвысокой твердостью

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	10
ГЛАВА 1. Обзор углеродных материалов	11
1.1 Обзор углерода	11
1.2 Состояние исследований трехмерной углеродной структуры	13
ГЛАВА 2 Метод расчёта из первых принципов	18
2.1 Теория функционала плотности	18
2.2 Оценка стабильности кристаллической структуры	20
2.3 Электронная локальная функция	21
2.4 Жесткость и прочность	22
2.5 Способ расчета напряженно-деформированного состояния	24
ГЛАВА 3. Результаты расчетов	27
3.1 Структура и стабильность углерода $P4_2/m-40$	27
3.2 Электронные свойства углерода $P4_2/m-40$	28
3.3 Механические свойства углерода $P4_2/m-40$	29
3.4 Выводы	33
ГЛАВА 4. Финансовый менеджмент, ресурс эффективность и ресурсосбережение	35
4.1 Потенциальные потребители результатов исследования	36
4.2 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научного исследования с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.	39
4.2.1 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	39
4.2.2 SWOT – анализ	41
4.3 Планирование научно-технического исследования	43
4.3.1 Определение трудоемкости выполнения работ	44
4.3.2 Разработка графика проведения научного исследования	45
4.4 Бюджет научного исследования	47
4.4.1 Расчет материальных затрат НТИ	47
4.4.2 Расчет затрат на специальное оборудование для научных работ	47

4.4.3 Основная заработная плата исполнителей темы.....	48
4.4.4 Отчисления во внебюджетные фонды	50
4.4.5 Формирование бюджета затрат НТИ	50
4.5 Ресурсоэффективность	51
4.6 Выводы по главе «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»	52
ГЛАВА 5. Социальная ответственность	54
5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности ...	56
5.1.1 Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя) правовые нормы трудового законодательства	56
5.1.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя	57
5.2 Производственная безопасность	57
5.2.1. Анализ показателей шума.....	58
5.2.2 Анализ показателей микроклимата.....	59
5.2.3 Анализ электробезопасности	60
5.2.4 Анализ показателей освещенности рабочей зоны	62
5.2.5 Анализ пожарной безопасности и разработка порядка действия в случае возникновения ЧС	63
5.3 Экологическая безопасность	65
5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях	66
5.5 Выводы по разделу	67
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	69
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....	71

ВВЕДЕНИЕ

В последние годы в области материаловедения трехмерные углеродные материалы привлекли широкое внимание. Самым известным трехмерным углеродным материалом является алмаз, обладающий выдающимися физико-химическими свойствами и обширными перспективами применения. Кроме алмаза, также было теоретически предсказано и успешно синтезировано несколько новых трехмерных углеродных материалов. Эти материалы обладают уникальной структурой и характеристиками, такими как сверхтвердость и высокая теплопроводность, и имеют широкий потенциал применения в областях наноэлектроники, электрооптики и других. Исследования и разработка новых трехмерных углеродных материалов имеют важное значение для продвижения в этой области и их практического использования. В работе, с помощью методом расчёта из первых принципов, были рассчитаны реакция нового трехмерного углеродного материала на напряжение при сложной деформации.

Цель работы:

Оценить стабильность, механические и электронные свойства углерода $P4_2/m-40$. Изучить поведение этого нового типа структур в ответ на стресс.

Для достижения цели были поставлены следующие задачи:

1. Рассчитать дисперсия фононов и коэффициенты тензора упругости (C_{ij})
2. Рассчитать модуль упругости (B) углерода $P4_2/m-40$.
3. Рассчитать структура энергетических зон и плотность состояний проекции (DOS).
4. Изучить отношение напряжения-деформации этой структуры в разных кристаллических направлениях при условиях нагрузки на растяжение и сдвиг.

ГЛАВА 1. Обзор углеродных материалов

1.1 Обзор углерода

Углерод является ключевым элементом жизненной системы на Земле. Углерод является важной составной частью органических веществ внутри биологических организмов и тесно связан с производством и жизнью человека. Без этого жизнь не может существовать. Углерод является одним из самых распространенных элементов на Земле. В мире существуют различные материалы, состоящие из углерода.

Они обладают различными специальными свойствами. Согласно истории развития углеродных материалов, можно выделить четыре этапа. Во-первых, древесный уголь, как самый ранний обнаруженный и используемый углеродный материал, является пористым твердым топливом, получаемым путем неполного сжигания деревьев или пиролиза в условиях изолированного воздуха. В 19 веке были открыты кокс и технический углерод, которые использовались в качестве традиционного промышленного углерода. Кокс в основном использовался в металлургической промышленности, такой как выплавка стали, углеродистых кирпичей и алюминия. Технический углерод — это разновидность аморфного углерода. Он является продуктом сгорания или пиролиза углеродсодержащих веществ при недостатке воздуха. Его можно использовать в шинах, пластмассах, косметике и других областях.

С развитием промышленности, в середине двадцатого века, на мировой арене начали появляться углеродные материалы. Например: алмаз, линейный углерод, углеродное волокно, активированный уголь, стекло углерод, алмазная пленка, расширяемый графит, кристаллы карбида кремния, углеродные композиционные материалы и т.д.

В последние годы открытие фуллерена в 1985 году [1], открытие углеродных нанотрубок в 1991 году [2] и открытие графена в 2004 году [3]

вызвали огромный резонанс. Область материалов начала выходить на пик исследований углеродных материалов.

Из-за долгой истории и широкого применения углеродных материалов исследованиям и разработке новых углеродных материалов уделяется большое внимание. Элемент углерод считается одним из самых богатых основных элементов на земле, и он входит в состав многих видов органического вещества, неорганических соединений и элементарных субстанций. У атома углерода есть 6 электронов, и расположение электронов в основном состоянии - $1s^2 2s^2 2p^2$. У углерода есть много форм гибридизации орбиталей: sp 、 sp^2 、 sp^3 . s-орбиталь углерода и p-орбиталь углерода в возбужденном образуют sp -гибридизация с углом 180° . Например, типичная цепочка атомов углерода. sp^2 -гибридизация происходит при смешивании одной s-орбиталь и двух p-орбиталей углерода. Образуются три гибридные орбитали с осями, расположенными в одной плоскости и направленными к вершинам треугольника под углом 120° . Типичной структурой гибридизации является графен. sp^3 -гибридизация происходит при смешивании одной s- и трех p-орбиталей, образуя четыре равноценные по форме и энергии sp^3 -гибридные орбитали. Типичной структурой гибридизации является алмаз. Кроме того, в некоторых специальных структурах углерод также обладает уникальными методами связывания, такими как бериллий из шестикординированного углерода Be_2C [4]. Таким образом, углерод может образовывать множество материалов с различными уникальными структурами, а различные особые свойства позволяют использовать его во многих областях, таких как энергетика, электроника, авиация и машиностроение.

Открытие фуллерена, углеродных нанотрубок и графена заполнило пробелы в системе углеродных материалов. В системе углеродных материалов, в зависимости от различных размеров, их можно разделить на нулевые фуллерены [1], одномерные углеродные нанотрубки [2], двумерный

графен [3] и трехмерный алмаз [5]. C_{60} является типичным представителем углеродного материала нулевой размерности фуллерена, который состоит из 12 углеродных пятичленных колец и 20 углеродных шестичленных колец. Он такой же формы, как футбольный мяч, и показал большие перспективы применения в области оптики, косметологии, биомедицины, аккумуляторов и т.д. Углеродные нанотрубки (CNTs) - очень известный класс одномерного углерода. Он обладает такими преимуществами, как сверхвысокая проводимость, большой модуль упругости и соотношение длины к диаметру. Превосходные свойства углеродных нанотрубок успешно используются в катализе, энергетике, батареях, конденсаторах, биомедицине, сенсорике и других областях. Графен — это двумерный одноатомный углеродный материал, состоящий из углеродного шестичленного кольца. Структура имеет форму сот и обладает очень сильным π -сопряженным эффектом, поэтому он обладает очень превосходными термодинамическими свойствами, электронными свойствами и механическими свойствами. Например, его большая удельная поверхность, превосходная прочность, высокая электрическая и теплопроводность, а также высокая подвижность электронов имеют очень важные перспективы применения в областях электроники, энергетике, биомедицины, доставки лекарств, трения и теплопроводности. Ниже будет краткое введение в трехмерный углеродный материал.

1.2 Состояние исследований трехмерной углеродной структуры

Трехмерным углеродным материалом, наиболее известным, является алмаз, также известный как бриллиант [5]. Алмаз — это материал, который существует в природе и состоит полностью из атомов углерода sp^3 -гибридизации. Алмаз имеет гранецентрированную кубическую структуру. В 1953 году Трейси Холл впервые успешно получила алмаз при высокой температуре и давлении [6]. Алмаз обладает многими преимуществами, такими как высокий модуль упругости, высокая твердость, сверхвысокая

теплопроводность, высокий коэффициент пропускания, особенно широкая запрещенная зона, очень низкая диэлектрическая проницаемость, а также высокая подвижность электронов и дырок и другие электрические характеристики. Эти особенности делают алмаз многообещающим материалом для широкозонных полупроводников, используемых во многих приложениях, включая высокоэнергетическую и высокочастотную электронику, обнаружение излучения и электронную эмиссию.

В 2011 году команда Су Гана использовала теоретические методы для прогнозирования совершенно нового трехмерного углеродного материала [7]. Для создания этой структуры используется тетраэдрическая структурная единица, состоящая из четырех атомов углерода, которая заменяет каждый атом углерода в гранецентрированной кубической структуре алмаза. Т-углерод состоит из sp^3 -углерода и имеет плотность 1,5 г/см³, что гораздо меньше, чем у алмаза и графита. Исследования показывают, что Т-углерод обладает высокой стабильностью с точки зрения геометрии, энергии, термодинамики и динамики. Также были прогнозированы электронные и механические свойства Т-углерода. Он имеет прямую запрещенную зону 3,0 эВ и является полупроводниковым материалом. Расчетная твердость по Виккерсу Т-углерода составляет 61,1 ГПа, что сопоставимо с алмазом (93 ГПа), что делает его сверхтвердым углеродным материалом. В 2017 году команда из Университета Сиань Цзяотон и Наньянского технологического университета успешно синтезировала Т-углерод методом лазерной обработки многовакансного углеродного нанотрубок в растворе метанола [8]. Т-углерод обладает большим потенциалом применения в областях фотокатализа, электронной оптики, адсорбции, накопления энергии, а также в авиационной и космической промышленности, что приводит к широкому теоретическому и экспериментальному исследованию новых типов углеродных материалов.

В 2017 году команда Лю Бинбин использовала структурные характеристики молекул алмаза и этилена для прогнозирования сверхтвердого

углеродного материала C14-diamond со свойствами металла [15]. C14-diamond состоит из атомов углерода sp^2 -гибридизации и sp^3 -гибридизации, и пространственная группа C14-diamond – CMMM. Его плотность составляет $3,37 \text{ г/см}^3$, что аналогично плотности алмаза. Его плотность составляет $3,37 \text{ г/см}^3$, что аналогично плотности алмаза. Чтобы продемонстрировать потенциальные перспективы применения C14-diamond, они спрогнозировали геометрическую структуру и механические свойства C14-diamond. Результаты расчета DFT показывают, что C14-diamond обладает лучшей стабильностью, чем ранее описанные аналоги металлического углерода. Несмотря на присутствие sp^2 гибридных атомов углерода в своей структуре, C14-diamond по-прежнему обладает высокой твердостью ($55,8 \text{ ГПа}$), что составляет около 40% от твердости алмаза и выше, чем у всех предыдущих аналогов металлического углерода. Его высокая твердость и свойства металла могут быть использованы в области электронных устройств.

Хотя графен является двумерным углеродным материалом, его фрагменты могут быть соединены специальными структурными единицами в трехмерную графеновую сеть, образуя новый тип углеродного материала с особыми свойствами. С момента успешного синтеза трехмерной углеродной сетки в форме сот [10] в 2016 году все больше и больше людей вкладываются в исследования трехмерной структуры графена и трехмерных углеродных материалов, состоящих из различных структурных единиц соединения. Углеродные соты основаны на наиболее стабильной конфигурации углерода sp^2 и используют плоские фрагменты для формирования трехмерной сотовой структуры графена. Его сотовая структура не только имеет потенциал использоваться как устройство для запоминающих устройств большой емкости с высокой адгезией, но также, благодаря своей одномерной природе вдоль оси соты, может проявлять уникальные свойства после заполнения различными веществами (например, магнитными, электрическими), или может быть использована в качестве уникального композитного материала.

Его перспективы применения широки и включают области нанoeлектроники, наномеханики, адсорбции, разделения, зондирования, накопления энергии, катализа, аккумуляторных материалов и т.д.

В 2021 году Лян Хуэй и её коллеги провели исследование низкосимметричной связующей структуры аллогенного углеродного тела под названием “*Pbam*-32 carbon” [11,35]. При больших растяжениях и сдвигах структура проявляет механические свойства, которые "одновременно прочны и износостойки", благодаря механизму постепенного ослабления и разрыва связей. При экстремальных напряжениях ковалентная связь этой специальной связующей структуры изменяется медленно, что снижает её хрупкость и повышает ударную вязкость. Из-за этих свойств, материалы такого типа будут высоко востребованы в областях техники, таких как авиакосмическая, автомобильная и строительная промышленность.

Кроме описанных выше трехмерных углеродных материалов, существуют другие теоретически предсказанные трехмерные аналоги углерода с различными структурами и свойствами, такие как *superprismane* [12], *O20*[13], *T18*[13], *6,82D*[14], *TD-C8* [16] и *Ort-C8*[16] и т.д., которые привлекают большое внимание. Они обладают уникальными электронными, оптическими и механическими свойствами и т.д. Трехмерные углеродные материалы с гибридизацией sp^3 и высокой плотностью обычно обладают высокой твердостью и теплопроводностью, что делает их очень перспективными для применения в нанoeлектронике, электронной механике, электронной оптике и других областях.

Исходя из последних достижений в исследовании алмазоподобных углеродных материалов, мы выбрали тетраэдрическую структуру углерода с 40 атомами внутри клетки и пространственной группой $P4_2/m$, которую обнаружил профессор Хэ Чаою [35]. Для оценки стабильности углерода $P4_2/m$ -40 мы рассчитали дисперсию фононов и упругие константы. Мы провели

широкий анализ, чтобы проверить реакцию этой новой структуры на напряжения и связанные с ней структурные характеристики. Затем мы рассчитали механические и электронные свойства. Было обнаружено, что этот материал проявляет высокую несжимаемость и жесткость при близости к равновесию, что указывает на то, что он является необычайно твердым и прочным материалом. Кроме того, он может быть применен в области полупроводников. Понимание структуры и механических свойств углерода $P4_2/m-40$ может предоставить информацию для проектирования и синтеза других материалов с аналогичными свойствами, а также поможет найти ковалентные материалы с превосходными механическими характеристиками. Таким образом, данное исследование открывает новый путь для изучения углеродных изомеров, отличных от традиционных сверхтвердых материалов, и может привести к новым открытиям в области материалов.

ГЛАВА 2 Метод расчёта из первых принципов

Исследовательская работа в рамках этой диссертации основана на теории функционала плотности для контроля и понимания свойств материалов в атомном масштабе. Метод расчета первого принципа используется для моделирования макроскопических свойств материала и изучения его микроскопического рабочего механизма. Цель состоит в том, чтобы прояснить взаимосвязь между структурой и свойствами материалов, а также предложить новые идеи для теоретического прогнозирования и экспериментального синтеза новых материалов. В этой главе представлена руководящая идеология и физические основы теории функционала плотности, а также расчета из первых принципов напряжений-деформаций на основе теории функционала плотности.

2.1 Теория функционала плотности [17-22]

Теория функционала плотности (DFT) — это квантовомеханическая теория, используемая для расчета электронной структуры атомов, молекул и твердых тел. Она базируется на идее, что общая энергия системы может быть выражена как функция электронной плотности, а не как волновая функция отдельного электрона. В DFT электронная плотность является основной переменной, используемой для описания электронной структуры системы. Путем решения уравнения Шредингера, основанного на электронной плотности, DFT может точно описывать электронные свойства материала, такие как энергетическая структура электронных зон, полная энергия и молекулярные орбитали.

Первый принципиальный метод — это алгоритм решения уравнения Шредингера, основанный на законах квантовой механики и взаимодействии между ядром и электроном. Этот метод предоставляет надежный способ прогнозирования свойств материала без необходимости учета эмпирических параметров. Он широко применяется во многих дисциплинах, таких как конденсированное состояние материи, и доказал свою высокую надежность

при прогнозировании свойств материалов. Метод начинается с уравнения Шредингера и обменивается корреляционной функцией для определения энергии основного состояния и электронной структуры системы, а также получения соответствующих физических свойств системы. Однако, уравнение Шредингера сложно решить на практике из-за большого количества электронов и ядер в твердых телах, а также из-за взаимодействия между частицами. Поэтому требуется аппроксимация, чтобы упростить уравнение и сделать его выполнимым в вычислительном смысле.

Во-первых, в соответствии с уравнением Шредингера о фиксированном состоянии микросистемы, многочастичной системы:

$$H\psi(\mathbf{R}_i, \mathbf{r}_n) = E\psi(\mathbf{R}_i, \mathbf{r}_n) \quad (2.1.1)$$

По словам М. Борн и Дж. Е. Оппенгеймер предложил знаменитое приближение Борна-Оппенгеймера (также известное как адиабатическое приближение), в котором электроны движутся с высокой скоростью, в то время как ядро слегка вибрирует вблизи своего положения равновесия, и движение электронов к ядру является адиабатическим. Получите решение уравнения:

$$\Psi_n(\vec{r}, \vec{R}) = \sum_n \chi_n(\vec{R}) \psi_n(\vec{r}, \vec{R}) \quad (2.1.2)$$

Хартри приводит уравнение для одноэлектронной системы:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V_{eN}(\vec{r}_i) + \int d\vec{r}' \frac{e^2 \sum_{i' (\neq i)} |\phi_{i'}(\vec{r}')|^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}'|} \right] \phi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \phi_i(\vec{r}) \quad (2.1.3)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{eN}(\vec{r}_i) - e^2 \int d\vec{r} \frac{\rho(\vec{r}') - \rho^{HF}(\vec{r}, \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right] \phi(\vec{r}) = \varepsilon \phi(\vec{r}) \quad (2.1.4)$$

Уравнение одиночных электронов Хартри-Фока в замкнутой оболочке, полученное вариационным методом:

$$E[\rho] = T[\rho] + \frac{1}{2} \iint d\vec{r} d\vec{r}' \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + E_{xc}[\rho] \quad (2.1.5)$$

Получите системную энергию:

$$E_{KS}[\rho] = T_s[\rho] + \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + \int d\vec{r} V_{ext}(\vec{r}) \rho(\vec{r}) + E_{ll} + E_{xc}[\rho] \quad (2.1.6)$$

$E_{xc}[\rho]$ - энергия обменной корреляции, которая описывает энергию, генерируемую обменным и корреляционным взаимодействием между электронами. Но это не может быть решено точно. Найдите для него $E_{xc}[\rho]$ вариационное экстремальное значение, чтобы получить одночастичное уравнение Кона-Шэма

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{eff}(\vec{r}) \right] \psi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\vec{r}) \quad (2.1.7)$$

$$V_{eff}(\vec{r}) = V_{ext}(\vec{r}) + \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d\vec{r}' + \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\delta \rho(\vec{r})} \quad (2.1.8)$$

При решении уравнения Кона-Шама необходимо найти подходящее выражение энергии обменной корреляции, чтобы точно рассчитать электронную структуру.

В настоящее время широко используются два основных типа обменной корреляционной энергии: приближение локальной плотности (LDA) и обобщенное градиентное приближение (GGA). Оба этих метода получают выражение энергии обменной корреляции путем изучения электронно-газовой модели.

$$\text{LDA:} \quad E_{xc} = \int \rho(\vec{r}) \varepsilon_{xc}[\rho(\vec{r})] d\vec{r} \quad (2.1.9)$$

$$\text{GGA:} \quad E_{xc} = \int \rho(\vec{r}) \varepsilon_{xc}[\rho(\vec{r}), |\nabla \rho(\vec{r})|] d\vec{r} \quad (2.1.10)$$

LDA - простой метод, предполагающий равномерность электронной плотности в каждой точке пространства. GGA основан на LDA, но учитывает градиент электронной плотности. Этот метод может лучше описывать изменения электронной плотности, что позволяет получать более точные результаты в сложных системах.

2.2 Оценка стабильности кристаллической структуры

Перед анализом различных свойств материала необходимо сначала оценить его структурную стабильность, включая термодинамическую, кинетическую и механическую стабильность. Только после того, как структура станет стабильной, мы сможем проводить дальнейшие расчеты свойств. Оценка термодинамической стабильности определяет стабильность

кристаллической структуры материала при заданной температуре и давлении. Динамическая стабильность связана со стабильностью кристаллической структуры материала при небольших перемещениях атомов. Ее цель - гарантировать, что кристаллическая структура материала остается стабильной и что при небольших возмущениях не происходит фазового перехода или структурных изменений. Для расчета механических свойств необходимо учитывать механическую стабильность, основанную на термодинамической и динамической стабильности материала.

Термодинамическая стабильность материала можно определить с помощью принципа минимальной энергии. Кинетическая стабильность может быть определена путем вычисления фононного спектра материала с использованием метода суперячеек. Высокая стабильность подразумевает, что спектр фононов не имеет виртуальных частот в зоне Бриллюэна. Механическую стабильность можно определить по чувствительности материала к внешним нагрузкам, и для этого обычно используют упругие константы. Постоянная упругости также может использоваться для описания физических величин, таких как объемный модуль, модуль сдвига, модуль Юнга и коэффициент Пуассона, и помогает анализировать прочность и твердость материалов. Для кристаллических систем с различной симметрией, постоянные упругости должны удовлетворять неравенствам определения конкретных характеристик решетки (чем выше симметрия кристалла, тем меньше число независимых постоянных упругости).

2.3 Электронная локальная функция

Далее вводятся диаграмма функции локализации электронов (Electron Localization Function) и диаграмма плотности деформационного заряда (Deformation Charge Density). ELF позволяет визуализировать теорию отталкивания валентных электронных пар и описать характеристики связи и распределения электронов в материале. Его значения строго ограничены в интервале от 0 до 1, где $ELF = 1$ соответствует высокой степени локализации

электронов, $ELF = 1/2$ соответствует распределению электронных пар в электронном газе, а $ELF = 0$ соответствует делокализации электронов. DCD показывает разницу между плотностью заряда после связывания и плотностью атомного заряда в определенной точке и используется для анализа распределения заряда между двумя атомами. В этой статье программный пакет VASP используется для расчета и вывода результатов в CHGCAR, а электронное распределение строится и анализируется с помощью программного обеспечения VESTA.

Для расчетов в этой главе был использован программный пакет VASP (Vienna ab simulation package) [36], который основан на теории функционала плотности. В программном пакете VASP используются псевдопотенциалы проектора с увеличенными волнами (Projector Augmented - Wave pseudopotentials) [37]. Для обмена корреляционным потенциалом использовались функции LDA и GGA. Для достижения сходимости по энергии установлено значение отсечки энергии равное 800 эВ, сходимость по энергии составляет 1×10^{-5} эВ, а сходимость по силе составляет 0,001 эВ/Å. Константа упругости (C_{ij}) была рассчитана с использованием метода деформаций-напряжений, а модуль упругости был получен с помощью метода Фойгта-Ройсса-Метода усреднения Хилла[38]. Для определения квазистатической идеальной прочности различных направлений кристаллов использовался метод напряженно-деформированного состояния.

2.4 Жесткость и прочность

Прочность и твердость являются важными параметрами механических свойств материалов. Прочность определяет способность материала сопротивляться пластической деформации и разрушению под воздействием внешних сил или сопротивляться повреждению. В зависимости от характера внешней силы, прочность может быть определена как предел текучести, прочность на изгиб, прочность на растяжение, прочность на сжатие и т.д. С другой стороны, твердость — это комплексный показатель, который отражает

эластичность, пластичность, прочность и ударопрочность материала. По своей сути, это показатель сопротивления материала деформации или проникновению. Более твердые материалы обычно более устойчивы к царапинам, износу и разрывам, что делает их более прочными и долговечными. Они могут быть получены с помощью экспериментальных измерений или теоретического моделирования. Понимание прочности и твердости материалов имеет важное значение для выбора правильного материала и проектирования безопасных и надежных конструкций. В целом, материалы с высокой твердостью обладают высокой прочностью.

Существует множество методов измерения прочности и твердости. Среди них обычно используют тест на твердость по Роквеллу, тест на твердость по Бринеллю, тест на твердость по Виккерсу и т.д. В научных исследованиях твердость по Виккерсу обычно используется для характеристики твердости материала. В эксперименте используется алмазный четырехугольный пирамидальный индентор с относительной поверхностью кристалла 136° , который нажимается на поверхность образца с определенной нагрузкой и выдерживается в течение определенного времени, после чего образуется ромбовидное углубление. Затем измеряется длина диагонали квадратного углубления на поверхности образца, и по формуле вычисляется твердость материала по Виккерсу.

Для испытания твердости поверхности материала используйте алмазный четырехугольный пирамидальный индентор для прижатия материала с определенным испытательным усилием F , затем уберите это усилие после указанного времени. Значение твердости выражается средним давлением вдавливания, а символом маркировки является H_v . Как правило, материал с твердостью по Виккерсу более 40 ГПа считается сверхтвердым. Формула для расчета твердости по Виккерсу следующая (F - нагрузка, d - среднее значение диагонали следа):

$$H_v = \frac{F}{S} = \frac{F}{4 S_{O'AB}} = \frac{F}{4 \times \frac{1}{2} \times a \times \frac{a}{2 \sin(68^\circ)}} = \frac{F}{\frac{a^2}{\sin 68^\circ}} = \frac{2F \sin(\frac{136^\circ}{2})}{d^2} = 1.854 \frac{F}{d^2} \quad (2.4.1)$$

Где F-нагрузка, d-среднее значение по диагонали в углублении

Из-за сложности экспериментального измерения твердости в настоящее время мы обычно используем большое количество эмпирических формул, обобщенных нашими предшественниками, для расчета твердости материалов. В этом эксперименте будут использоваться эмпирические формулы, относящиеся к объемному модулю и модулю сдвига материала.

$$H_v = 0.92k^{1.137}G^{0.708} \quad (2.4.2)$$

$$H_v = 1.887k^{1.171}G^{0.591} \approx 1.887(k^2G)^{0.585} \quad (2.4.3)$$

Где $k = G/B$, G-модуль сдвига, B-объемный модуль.

2.5 Способ расчета напряженно-деформированного состояния

Механическое поведение материалов в экспериментах обычно отличается от их поведения в условиях равновесия, поэтому важно использовать теоретическое моделирование, чтобы понять их характеристики. Один из широко используемых методов теоретического моделирования для оценки "идеальной прочности" материалов — это "метод первых принципов напряжения-деформации". Метод включает расчет кривой напряжения-деформации материала при различных условиях деформации [28-30], определение точки, в которой материал переходит от упругой деформации к пластической деформации, соответствующей предельному значению напряжения при деформации, когда разрушается определенная кристаллическая фазовая структура, определяемая как значение прочности кристалла направления, и выбор наиболее ранней разрушенной поверхности кристалла / направления кристаллов для определения идеального значения прочности материала. Метод первых принципов напряжения-деформации очень важен, поскольку он учитывает упругость, пластичность, изотропность и анизотропность материала, а также обеспечивает микроскопическое объяснение механизма разрушения кристаллической структуры. Кроме того, этот метод имеет большое значение для качественной оценки твердости материала, теоретического проектирования и экспериментального синтеза

новых сверхтвердых материалов. Он был использован для моделирования идеальной прочности многих материалов, включая прочные ковалентные кристаллы [31-33] и металлы [34]. Предоставляя количественное измерение идеальной прочности, метод первых принципов напряжения-деформации может помочь исследователям проектировать более прочные и надежные конструкции и разрабатывать новые материалы с выдающимися механическими свойствами.

Этот текст предназначен для введения различных условий нагружения в теоретическую модель с целью оценки механических свойств материалов в разных условиях. Особенно обсуждаются два условия нагружения: одноосное растяжение и чистый сдвиг. В одноосном растяжении сила направлена перпендикулярно плоскости приложения силы, в то время как чистое напряжение сдвига происходит вдоль поверхности скольжения, где происходит деформация.

"Метод первых принципов напряженно-деформированного состояния" - это широко используемый метод теоретического моделирования, который может точно описать поведение материалов в широком диапазоне деформаций в ответ на напряжение и связанные с этим структурные деформации. Этот метод включает в себя построение кривой напряжения-деформации, чтобы показать реакцию материала на напряжение при различных условиях нагрузки. Основная идея, лежащая в основе этого метода, заключается в том, чтобы применить простую деформацию к кристаллической структуре, рассчитать изменения энергии и объема каждой структуры после каждой деформации как функцию, а затем получить соответствующее напряжение путем дифференцирования энергии по отношению к деформации.

В этом методе вектор решетки постепенно деформируется вдоль направления приложенной деформации, и положение атомов в элементарной ячейке полностью расслабляется на каждом шаге до тех пор, пока не будет удовлетворена остаточная составляющая тензора напряжений Хеллмана-

Фейнмана, которую можно пренебречь из-за ее малости, или силой, действующей на каждый атом. При деформации сдвига по Виккерсу на каждом этапе исходная структура берется из расслабленной структуры в конце предыдущей деформации, и весь процесс деформации повторяется.

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту:

Группа	ФИО
150Б91	Сунь Чжицзюнь

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

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

1. <i>Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	<i>Затраты на сырьё, материалы, комплектующие изделия, специальное оборудование, основную и дополнительную заработную плату исполнителей, отчисления на социальные нужды, накладные расходы</i>
2. <i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	<i>В соответствии с ГОСТ 14.322-83 «Нормирование расхода материалов» и ГОСТ Р 51541-99 «Энергосбережение. Энергетическая эффективность»</i>
3. <i>Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	<i>1. Налоговый кодекс Российской Федерации 2. ФЗ №212 от 24.07.2009 в ред. от 19.12.2016</i>

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. <i>Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения</i>	<i>Определение потенциальных потребителей результатов исследования, анализ конкурентных технических решений.</i>
2. <i>Планирование и формирование бюджета научных исследований</i>	<i>Планирование этапов разработки программы, определение трудоемкости.</i>
3. <i>Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования</i>	<i>Сравнительный анализ интегральных показателей эффективности, формирование бюджета НИИ. Расчет уравнений эффективности НИИ. Расчет уравнений сравнительной эффективности НИИ.</i>

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

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

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН	Верховская Марина Витальевна	к.э.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б91	Сунь Чжицзюнь		

ГЛАВА 4. Финансовый менеджмент, ресурс эффективность и ресурсосбережение

Темой настоящей ВКР является: Структура и физические свойства углерода $P4_2/m-40$. Исследуются его взаимосвязь между напряжением и деформацией при различных условиях нагрузки и соответствующие закономерности деформации конструкции, так и их свойства и стабильности.

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

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

- Оценка коммерческого потенциала разработки;
- Планирование научно-исследовательской работы;
- Расчет бюджета научно-исследовательской работы;
- Определение ресурсной, финансовой, бюджетной эффективности исследования [45].

4.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Потенциальными потребителями результатов исследований являются организации в сфере авиастроения, инструмента и механической обработки. В каждой сфере необходимо изготовление материалов менее затратными способами, добиваясь новых свойств и качеств. Это означает, что потребители

– крупные коммерческие и некоммерческие организации отраслевой принадлежности.

Для определения группы потребителей, которых может заинтересовать результаты данных научных исследований, необходимо провести сегментирование рынка.

Выбранные основные характеристики потребителей сегмента:

Месторасположение – регионы с развитыми отраслями тяжелой промышленности (авиастроение, машиностроение).

Отношение к услуге – готовность внедрять новые технологии в технологический процесс.

Закупочные принципы – компании, проводящие централизованный закуп услуг.

Так как исследования представленных в работе механических свойств для весьма рынка сверхтвердых материалов (СМ) ранее никем не проводилось, результаты будут интересны большинству организаций, вне зависимости от их месторасположения. Проведенные исследования позволяют выявить наиболее подходящих поставщиков напечатанного материала для изготовления конечных изделий, а также получить данные для производства изделий с необходимыми свойствами, что позволит компаниям повысить свою эффективность на интенсивно развивающемся рынке СМ. Карта сегментирования рынка по модификации поверхностей представлена в таблице 4.1.

Таблица 4.1 – Карта сегментирования рынка услуг в области СМ

		Вид услуги			
		Использование материала для деталей оборудования	Использование материала для теплоизоляции	Использование материала для производства инструментов	
Сфера услуг	инструмент				
	Механическая обработка				
	Авиастроение				
	«Кеннаметалл»		«Мицубиси Материалс Корпорейшн»		«Авиадвигатель»

В качестве конкурентных компаний были рассмотрены: «Кеннаметалл», «Мицубиси Материалс Корпорейшн», ПАО «Авиадвигатель».

«Кеннаметалл» является производителем промышленного режущего инструмента и абразивных материалов в Соединенных Штатах. Ее сверхтвердые материалы широко используются в области механической обработки, такой как токарная обработка, фрезерование, сверление и т.д.

«Мицубиси Материалс Корпорейшн» — Это японская компания, которая производит и продает различные сверхтвердые материалы, включая PCBN и PDC, для резки, шлифования и прецизионной обработки.

ПАО «Авиадвигатель» - разработка газотурбинных технологий и двигателей.

Исходя из карты сегментирования рынка услуг в области СМ, результаты научных исследований можно предоставить в рамках сотрудничества с компаниями из сегмента производства деталей авиастроения и/или космической промышленности, учитывая не высокую конкуренцию.

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

4.2.1 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

В связи с необходимостью производства сплавов на основе титана, промышленность по изготовлению данных материалов начала стремительно набирать обороты область производства сложных конструкционных материалов методами СМ, при помощи которых можно было бы снизить стоимость получения необходимых соединений.

Детальный анализ конструктивного исполнения необходим, т.к. каждый тип конструктивного исполнения имеет свои достоинства и недостатки. Данный анализ производится с применением оценочной карты. Экспертная оценка производится по техническим характеристикам и экономическим показателям по 5 бальной шкале, где 1 – наиболее низкая оценка, а 5 – наиболее сильная. Общий вес всех показателей в сумме должен составлять 1. Б_Р –углерод *P4₂/m-40* Б_Т – Синтетический Т-углерод.

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

$$K = \sum i B_i V_i,$$

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

Таблица 4.2 – Оценочная карта сравнения конкурентных технических решений

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы		Конкурентоспособность	
		Б _Р	Б _Т	К _{КР}	К _{КТ}
Технические критерии оценки ресурсоэффективности					
1. Энергопотребление	0.1	5	3	0.5	0.3
2. Операционная сложность	0.1	4	4	0.4	0.4
3. Безопасность	0.1	4	4	0.4	0.4
4. Стоимость производства	0.1	5	3	0.5	0.3
5. Простота в эксплуатации	0.1	5	4	0.5	0.4
6. Выход продукции	0.1	3	4	0.3	0.4
Экономические критерии оценки эффективности					
1. Конкурентоспособность продукта	0.1	5	3	0.5	0.3
2.Уровень проникновения на рынок	0.1	4	4	0.4	0.4
3.Наличие сертификации разработки	0.1	3	3	0.3	0.3
4. Стоимость производства	0.1	3	4	0.3	0.4
Итого:	1	41	36	4.1	3.6

Исходя из данных таблицы 2[46], конкурентоспособность разработки научного исследования механических свойств изделий из углерода $P4_2/m-40$ (Б_Р) составила 4.1, против 3.6 исследования механических свойств изделий из Т-углерод (Б_Т). Полученные данные свидетельствуют о превосходстве научно-технической разработки (Б_Р) по критериям: энергопотребление, стоимость производства, Простота в эксплуатации, Конкурентоспособность продукта. В исследования механических свойств изделий из углерода $P4_2/m-40$ (Б_Р) получить больший объем информации об экспериментальных данных, в отличии от конкурирующего принципа и метода исследования механических свойств изделий (Б_Т). Данный метод (Б_Р) имеет более широкую область применения в промышленности.

4.2.2 SWOT – анализ

SWOT – Strengths (сильные стороны), Weaknesses (слабые стороны), Opportunities (возможности) и Threats (угрозы) – представляет собой комплексный анализ научно-исследовательского проекта.[47]

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

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

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

Угроза – это любая нежелательная ситуация, тенденция или изменение в условиях окружающей среды проекта, которая имеет разрушительный или угрожающий характер для его конкурентоспособности в настоящем или будущем.

SWOT-анализ можно осуществить и представить в виде интерактивной матрицы работы, таблица 2, а также результирующих таблиц возможностей и угроз НИР, таблицы 3.

Каждый фактор таблицы 2 помечается либо знаком «+» (означает сильное соответствие сильных сторон возможностям), либо знаком «-» (что означает слабое соответствие); «0» – если есть сомнения в том, что поставить «+» / «-».

Таблица 4.3 – Интерактивная матрица проекта

Сильные стороны проекта					
Возможности проекта		C1	C2	C3	C4
	B1	+	+	+	0
	B2	+	+	+	-
	B3	-	-	-	0

Таблица 4.4 – SWOT-анализ

	Сильные стороны проекта: C1. Актуальность. C2. Высокая твердость и высокая прочность C3. полезно в суровых условиях эксплуатации C4. Заявленная экономичность и энергоэффективность технологии.	Слабые стороны проекта: Сл1. Высокая стоимость. Сл2. объем производства невелик Сл3. На стадии лабораторных исследований коммерциализация продвигается медленно. Сл4. На стадии лабораторных исследований коммерциализация продвигается медленно.
Возможности: В1. Появление дополнительного спроса на новый продукт. В2. Новые области применения	Результаты анализа интерактивной матрицы проекта полей «Сильные стороны и возможности»: 1. Спрос на высокоэффективные материалы растет, и ожидается, что в будущем основными материалами станут новые углеродные материалы. 2. Применение в новых областях, таких как биомедицина и охрана окружающей среды.	Результаты анализа интерактивной матрицы проекта полей «Слабые стороны и возможности»: 1. Необходимо финансирование на модернизацию, что возможно реализовать в условиях вуза. 2. Расширение круга потребителей путем модернизации системы.
Угрозы: У1. Нормативные ограничения У2. Развитая конкуренция технологий производства. У3. Медленный инновационный прогресс	Результаты анализа интерактивной матрицы проекта полей «Сильные стороны и угрозы»: 1. Благодаря возможностям системы своевременному финансированию продвижение на рынок может стать успешным.	Результаты анализа интерактивной матрицы проекта полей «Слабые стороны и угрозы»: 1. Относительно высокая стоимость, и ограниченный круг потребителей может вызвать низкий спрос со стороны заказчиков. 2. Некоторые страны или регионы могут ограничивать

	2. Повышение конкурентоспособности после модернизации разработки.	или запрещать использование новых углеродных материалов, что может ограничить развитие их рынка.
--	---	--

Результаты SWOT-анализа учитываются при разработке структуры работ, выполняемых в рамках научно-исследовательского проекта. Приведённый анализ показал, что существует множество областей применения этой технологии и имеются хорошие возможности для коммерциализации с учетом интересов партнеров и успешных исследований. В то же время он все еще находится на стадии лабораторных исследований, и коммерциализация продвигается медленно. Процесс приготовления сложен, стоимость высока, а объем производства невелик.

4.3 Планирование научно-технического исследования

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

- разработка задания;
- теоретические исследования;
- составление порядка эксперимента, выбор технических режимов;
- изготовление исследуемых образцов;
- изготовление подготовка исследуемых образцов к исследованиям;
- экспериментальные исследования;
- оценка результатов экспериментов;
- оформление отчёта по ВКР;
- подготовка к защите ВКР.

Порядок составления этапов и работ, распределение исполнителей по данным видам работ приведен в таблице 4.5.

Таблица 4.5 – Распределение исполнителей и этапы выполняемых работ

Основные этапы	№ раб	Содержание работ	Должность исполнителя
Разработка технического задания	1	Составление и утверждение технического задания	Руководитель темы
Выбор направления исследований	2	Подбор и изучение материалов по теме	Руководитель, Инженер (дипломник)
	3	Выбор методов исследования	Руководитель, Инженер
	4	Выбор направления исследований	Руководитель, Инженер
	5	Календарное планирование работ по теме	Руководитель, Инженер
Теоретические и экспериментальные исследования	6	Проведение теоретических расчетов и Структура исследования	Руководитель, Инженер
	7	Измерение фонов спектра	Инженер
	8	Измерение зоны проводимости и валентной зоны, плотность состояний	Инженер
	9	Измерение идеальной прочности на растяжение и сдвиг.	Инженер,
Обобщение и оценка результатов	10	Оценка эффективности полученных результатов и участие в конференции	Руководитель, Инженер
	11	Определение целесообразности проведения ОКР	Руководитель, Инженер

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

4.3.1 Определение трудоемкости выполнения работ

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

Для определения ожидаемого (среднего) значения трудоемкости $t_{ож}$ используем следующую формулу:

$$t_{ож} = \frac{3t_{\min i} + 2t_{\max i}}{5}$$

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

$t_{\text{min } i}$ – минимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы, чел.-дн.;

$t_{\text{max } i}$ – максимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы, чел.-дн.

Проведем расчет ожидаемой трудоемкости для научного руководителя:

$$t_{\text{ожи}} = \frac{3 \cdot 20 + 2 \cdot 30}{5} = 56 \text{ чел. – дн.}, \quad (4.3.1)$$

И для инженера:

$$t_{\text{ожи}} = \frac{3 \cdot 70 + 2 \cdot 155}{5} = 143 \text{ чел. – дн.}, \quad (4.3.2)$$

4.3.2 Разработка графика проведения научного исследования

Для определения календарных дней выполнения работы необходимо воспользоваться следующей формулой

$$T_{k_i} = T_{p_i} * k_{\text{кал}},$$

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

T_{p_i} – продолжительность выполнения i -й работы в рабочих днях;

$k_{\text{кал}}$ – коэффициент календарности.

Для построения графика проектных работ необходимо рассчитать коэффициент календарности по следующей формуле:

$$k_{\text{кал.инж}} = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}}} = \frac{365}{365 - 104 - 14} = 1,48$$

$$k_{\text{кал.рук}} = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}}} = \frac{365}{365 - 66 - 14} = 1,28$$

Предполагается что и руководитель, и инженер работают по 6-дневной рабочей неделе. По производственному календарю на 2021 год суммарное количество выходных и праздничных дней составляет: при шестидневной рабочей неделе – 66 дней.

где $T_{\text{кал}}$ – число календарных дней в году;

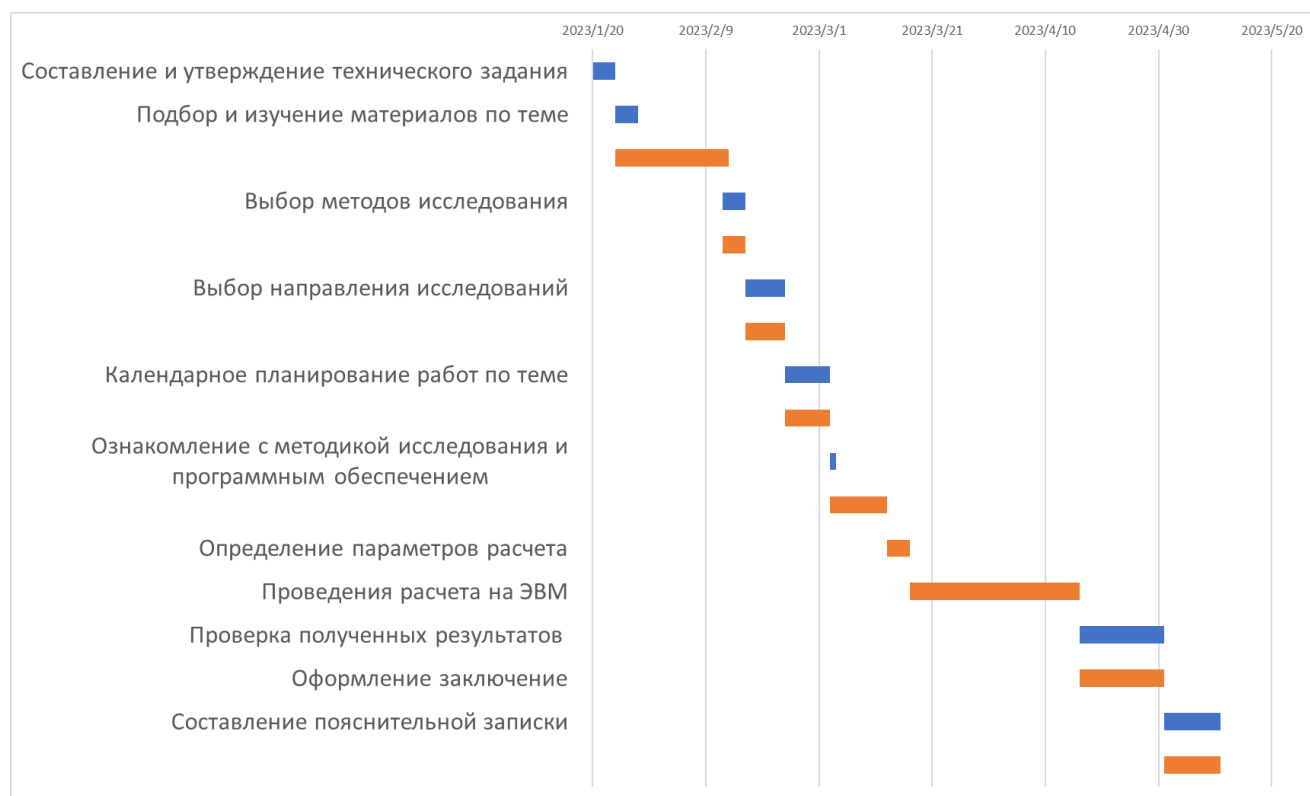
$T_{\text{вых}}$ – число выходных дней в году;

$T_{\text{пр}}$ – число праздничных дней в году.

$$T_{k_i} = T_{p_i} * k_{\text{кал}} = 3,72 \approx 4 \text{ кал. дн.}$$

Календарный план-график проведения НИОКР по теме представлен в таблице 4.6.

Таблица 4.6 – Календарный план-график (график Ганта) проведения НИОКР



– Руководитель

– Инженер

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

4.4 Бюджет научного исследования

4.4.1 Расчет материальных затрат НТИ

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

Работа полностью теоретическая, поэтому в материальные затраты включаются затраты на канцелярские принадлежности, диски, картриджи и т.п.

Таблица 4.7 – Материальные затраты

Материал	Единица измерения	Количество	Цена за ед., руб.	Затраты на материалы, руб.
Бумага	Упаковка	0,5	200	100
Шариковые ручки	Шт.	5	40	200
Итого				300

4.4.2 Расчет затрат на специальное оборудование для научных работ

Для осуществления исследования по тематике данной ВКР необходимо наличие персонального компьютера или ноутбука.

Таблица 4.8 – Расчет бюджета затрат на приобретение спецоборудования для научных работ

Наименование оборудования	Кол-во единиц оборудования	Цена единицы оборудования, тыс. руб.	Общая стоимость оборудования, тыс. руб.
Персональный компьютер (ноутбук)	1	35	35
Итого:			35

4.4.3 Основная заработная плата исполнителей темы

Статья включает основную заработную плату работников, непосредственно занятых выполнением проекта, (включая премии, доплаты) и дополнительную заработную плату.

Основная заработная плата работников вычисляется по формуле:

$$З_{зп} = З_{осн} + З_{доп}$$

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

Основная заработная плата одного работника:

$$З_{осн} = З_{дн} \cdot T_p$$

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

Среднедневная заработная плата рассчитывалась по формуле:

$$З_{дн} = \frac{З_{м} \cdot М}{F_{д}}$$

где $З_{м}$ – месячный должностной оклад работника, руб; $М$ – количество месяцев работы без отпуска в течение года; $F_{д}$ – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн.

Таблица 4.9 – Баланс рабочего времени исполнителей

Показатели рабочего времени	Руководитель	Инженер
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней	52/14	104/14
- выходные дни		
- праздничные дни		
Потери рабочего времени	48/5	24/10
- отпуск		
- невыходы по болезни		
Действительный годовой фонд рабочего времени	246	213

Расчет основной заработной платы представлен в таблице 4.9.1[48]

Таблица 4.9.1 – Расчет основной заработной платы

Исполнители	$З_{б}$, руб.	k_p	$З_{м}$, руб	$З_{дн}$, руб.	T_p , раб.дн.	$З_{осн}$, руб.
Руководитель	39 000	1,3	76050	3151	56	176456
Инженер	17500	1,3	22750	1110	143	164280
Итого $З_{осн}$						340736

4.4.4 Дополнительная заработная плата

Расчет дополнительной заработной платы ведется по следующей формуле:

$$З_{доп} = k_{доп} \cdot З_{осн} \quad (4.10)$$

где, $k_{доп}$ – коэффициент дополнительной заработной платы (на стадии проектирования принимается равным 0.12-0.15).

Дополнительная заработная плата руководителя:

$$З_{доп} = 0.13 \cdot 176456 = 22\,939,28 \text{ руб.}$$

Дополнительная заработная плата инженера:

$$З_{доп} = 0.13 \cdot 164280 = 21\,356,4 \text{ руб.}$$

Суммарная дополнительная заработная плата равна 44295,68 рубль.

4.4.4 Отчисления во внебюджетные фонды

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

Отчисления во внебюджетные фонды:

$$З_{внеб.} = k_{внеб.} \cdot З_{осн.} = 192329 \cdot 0.3 \approx 57698.7 \text{ руб}$$

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

4.4.5 Формирование бюджета затрат НТИ

Расчет бюджета затрат в результате проведения НТИ представлен в таблице 4.10.

Таблица 4.10 – Бюджет затрат

Наименование статьи	Сумма, руб
---------------------	------------

Материальные затраты	300
Затраты на специальное оборудование для научных работ	35000
Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	340736
Затраты по доп. заработной плате исполнителей темы	44295,68
Отчисления во внебюджетные фонды	57698.7
Бюджет затрат	477734,7

4.5 Ресурсоэффективность

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

Интегральный показатель финансовой эффективности научного исследования получают в ходе оценки бюджета затрат трёх вариантов исполнения научного исследования. Для этого наибольший интегральный показатель реализации технической задачи принимается за базу расчёта, с которым соотносятся финансовые значения по всем вариантам исполнения.

Интегральный финансовый показатель разработки определяется по следующей формуле:

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп}i} = \frac{\Phi_{Pi}}{\Phi_{\text{max}}},$$

где Φ_{Pi} – стоимость i -го варианта исполнения; Φ_{max} – максимальная стоимость исполнения научно-исследовательского проекта.

Интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов исполнения объекта исследования можно определить по формуле:

$$I_{pi} = \sum a_i \cdot b_i,$$

В таблице 4.11 представлена сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта. Данный проект сравнивается с методикой качественного анализа материалов, заложенной в программе как базовая.

Таблица 4.11 – Сравнительная оценка характеристик

Критерии	Весовой коэффициент	Бальная оценка разработки
1. Безопасность	0,25	5
2. Надежность	0,25	5
3. Соответствует требованиям потребителей	0,20	4
4. Предполагаемый срок эксплуатации	0,20	4
5. Энергосбережение	0,10	3
Итого:	1,00	4,4

Для разрабатываемого проекта интегральный показатель ресурсоэффективности:

$$I_{pi} = 0,25 \cdot 5 + 0,25 \cdot 5 + 0,20 \cdot 4 + 0,20 \cdot 4 + 0,10 \cdot 3 = 4,4$$

Полученное значение интегрального показателя свидетельствует о достаточно хорошей эффективности реализации технического проекта.

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

1. Были определены потенциальные потребители итогового продукта. Наиболее заинтересованными оказались фирмы по Механическая обработка и Авиастроение.

2. Проведен SWOT-анализ продукта. Анализ показал, что существует множество областей применения этой технологии и имеются хорошие

возможности для коммерциализации с учетом интересов партнеров и успешных исследований.

3. Помимо прочего, продемонстрировано, что в календарных днях длительность работ для руководителя составляет 56 дней, а для студента – 143 дней. Временные показатели в календарном плане-графике показывают, что наиболее продолжительной работой является «Подбор изучение материалов по теме» После формирования бюджета затрат на проектирование суммарные капиталовложения составили 477734,7 рублей.

4. Таким образом, капиталовложения в размере 477734,7 рублей дают возможность провести исследования полученного композитного соединения, а также проведения всего перечня необходимых тестов

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
150Б91	Сунь Чжицзюнь

ШКОЛА	<u>Инженерная школа ядерных технологий</u>	Отделение	<u>экспериментальная физика</u>
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	03.03.02 «Физика»

Тема дипломной работы: «Структура и физические свойства углерода r_{42}/t под высоким давлением.»

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
- Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения) Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности - специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; - организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.	1. Описание рабочего места на предмет возникновения опасных ситуаций: Работа выполнена в рабочем кабинете университета. В процессе выполнения работы возникли следующие факторы: ☐ вредных проявлений факторов производственной среды (метеоусловия, освещение, электромагнитные поля, шум) ☐ опасных проявлений факторов производственной среды (электрической, пожарной природы) ☐ негативные воздействия на окружающую среду: бумаги ☐ чрезвычайных ситуаций (сильные морозы, диверсия);
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности: - приводятся данные по оптимальным и допустимым значениям микроклимата и звукового давления; - приводятся данные по допустимым значениям электромагнитных полей и средства защиты. ☐ - рассчитывается освещенность на рабочем месте;	
2. Анализ выявленных опасных факторов проектируемой произведённой среды в следующей последовательности: ☐ - Приведение классификации помещения по электробезопасности, допустимые безопасные для человека значения напряжения, тока; меры защиты от поражения электрическим током. ☐ - Приведение классификации пожароопасности помещений, указывается класс пожароопасности; - Представлен план эвакуации из лаборатории.	
3. Охрана окружающей среды: - Приведение меры охраны окружающей среды от отходов бумаги	
4. Защита в чрезвычайных ситуациях: ☐ - Приведение возможных чрезвычайных ситуаций (сильные морозы, диверсия); ☐ - Разработка меры по предупреждению чрезвычайных ситуаций; ☐ - Разработка действий в результате возникшей чрезвычайной ситуации и меры по ликвидации ее последствий	
5. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности: ☐ - Приведение перечени ГОСТов, СНиПов и др.	

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Сечин. А. И.	Д.Т.Н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б91	Сунь Чжицзюнь		

ГЛАВА 5. Социальная ответственность

Объектом исследования является углерод $P4_2/m-40$.

Исследование выполнялось в компьютерном зале. Размеры помещения: высота 8 м, ширина 10 м, длина 3 м, площадь 80 м². Рабочее оборудование: персональный компьютер.

В процессе проведения исследования выполняли следующее: структура и свойства с помощью первого принципа и взаимосвязь между напряжением и деформацией при различных условиях нагрузки и соответствующие закономерности деформации конструкции.

С целью оценки степени безопасности исследования структуры и физической свойств углерода $P4_2/m-40$ в данном разделе ВКР необходимо рассмотреть правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности; потенциальные вредные и опасные факторы и способы снижения их воздействия; экологическую безопасность научного проекта, а также вопросы безопасности в чрезвычайных ситуациях.

5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

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

Организации должны соблюдать требования трудового кодекса Российской Федерации от 30.12.2001 № 197-ФЗ [49].

Согласно данному документу, нормальная продолжительность рабочего времени не может превышать 40 часов в неделю, в данном случае продолжительность рабочей недели составляет шесть дней. Как следствие, применяется следующий режим работы: с понедельника по пятницу 7 часов в день, в субботу 5 часов в день. Оплата труда производится в размере не ниже уровня МРОТ, и нормы труда установлены в соответствии с уровнем техники, технологии, организации производства и труда.

Компенсации и гарантии регламентируются в трудовом кодексе Российской Федерации [49], в локальных нормативных актах, в коллективном договоре и трудовом договоре.

5.1.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя

Рабочее место располагается в В206 аудитории корпуса Тан Аоцин Цзилиньского университета, компьютерный зал представляет собой комнату размером 5 м на 6 м, высотой 3 м, в компьютерном зале находится 4 окна (с видимым светом), постоянно 8 человека.

При проведении работ работник находится в положении стоя или сидя. Следовательно, при организации рабочего места лаборанта требуется соблюдение нормативов ГОСТ 12.2.032-78 [50] и ГОСТ 12.2.033-78 [51].

Компьютерный зал оснащен отоплением и вентиляцией. Для отделки помещений используют диффузно-отражающие материалы. Поверхность пола соответствует следующим требованиям: ровность, удобство для очистки, наличие антистатических свойств, отсутствие выбоин. В помещении держат аптечку первой медицинской помощи и огнетушитель. Расположение рабочего стола обеспечивает удобство работы за ним и дает возможность осмотра, а также ремонта находящегося на нем оборудования.

5.2 Производственная безопасность

Для идентификации потенциальных факторов использован ГОСТ 12.0.003-2015 [52]. Перечень выявленных возможных опасных и вредных факторов представлен в таблице 5.1.

Таблица 5.1 – Возможные опасные и вредные факторы

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015)	Этапы работ			Нормативные документы
	Разработ ка	Изготовл ение	Эксплуат ация	
1. Анализ уровня шума		+		ГОСТ 12.1.003-2014 [53] СН 2.2.4/2.1.8.562-96 [54] ГОСТ 12.1.029-80. ССБТ [55]

2. Анализ показателей микроклимата	+	+		ГОСТ 12.1.005-88 [56] ГОСТ 12.1.007-76.ССБТ [57] СанПиН 1.2.3685-21 [58] ГОСТ 12.4.011-89 [59]
3. Анализ электробезопасности	+	+	+	ГОСТ 12.1.038-82 [60] ГОСТ Р 12.1.019-2009 [61]
4. Анализ освещенности рабочей зоны	+	+		СанПиН 1.2.3685-21 [58]

5.2.1. Анализ показателей шума

Гигиенические нормативы по шуму устанавливаются национальным законодательством [53].

В таблице 5.2 показаны допустимые уровни шума, представленные в Санитарных нормах [54].

Таблица 5.2 – Предельно допустимые уровни звука и эквивалентные уровни звука на рабочих местах для трудовой деятельности разных категорий тяжести и напряженности в дБА

Категория напряженности трудового процесса	Категория тяжести трудового процесса				
	легкая физическая нагрузка	средняя физическая нагрузка	тяжелый труд 1 степени	тяжелый труд 2 степени	тяжелый труд 3 степени
Напряженность легкой степени	80	80	75	75	75
Напряженность средней степени	70	70	65	65	65
Напряженный труд 1 степени	60	60	-	-	-
Напряженный труд 2 степени	50	50	-	-	-

Работа исследователя в компьютерном зале относится к категории работ с легкой степенью напряжённости и с легкой физической нагрузкой. Для рабочих мест таких работников предельно допустимый уровень шума составляет 80 дБА.

Длительное воздействие шума является причиной возникновения определенных заболеваний нервной системы.

С воздействием шума, превышающего норму, связано повышение артериального давления, снижение слуха, и т. п. [62].

Показатели уровня шума в компьютерном зале соответствуют нормативам.

При превышении норм по шуму нужно принимать меры по снижению уровня шума и защите работников от его воздействия в соответствии с [55], используя в том числе такие меры, как:

- применение противозумных наушников;
- оборудование акустических экранов;

Кроме того, необходимо рационально размещать рабочие места, а также создавать шумозащищенные зоны.

5.2.2 Анализ показателей микроклимата

Показателями микроклимата производственных помещений называются температура и относительная влажность воздуха, скорость движения воздуха [62].

В таблице 5.3 обозначены оптимальные и допустимые показатели микроклимата в рабочей зоне производственного помещения для категории работ «Легкая Ia» по ГОСТ 12.1.005-88 [56].

Таблица 5.3 – Требования к микроклимату помещения для категории работ «Легкая Ia»

Период года	Температура, °С					Относительная влажность, %		Скорость движения, м/с	
	оптимальная	допусти мая				оптимальная	допустимая на рабочих местах постоянных и непостоянных, не более	оптимальная, не более	допустимая на рабочих местах постоянных и непостоянных
		верхняя граница		нижняя граница					
		на рабочих местах							
		посто- янных	не- посто- янных	пос- тоян- ных	не- посто- янных				
Холод- ный	22- 24	25	26	21	18	40-60	75	0,1	Не более 0,1
Теплый	23- 25	28	30	22	20	40-60	55 (при 28°С)	0,1	0,1-0,2

Влажность воздуха влияет на терморегуляцию организма: с высокой влажностью связано затруднение терморегуляции, слишком низкая влажность приводит к пересыханию слизистой оболочки дыхательных путей.

Движение воздуха в значительной степени отражается на самочувствии человека: результатом движения воздуха меньше нормы является головная боль; вследствие движения воздуха больше нормы возможны переохлаждение и простудные заболевания.

Если температуры окружающего воздуха высокие, то это может приводить к перегреву, обмороку, тепловому удару, обезвоживанию. Если температура окружающего воздуха на рабочем месте слишком низкая, то это может приводить к простудным заболеваниям, снижению иммунитета, замерзанию [63].

Для обеспечения соответствия показателей микроклимата требуемым оптимальным и допустимым нормам следует проводить измерение показателей микроклимата в соответствии с требованиями, представленными в СанПиН 1.2.3685-21 [58].

Чтобы поддерживать требуемые параметры микроклимата в рабочей зоне, используют защиту от источников теплового излучения, систему вентиляции, кондиционирование воздуха, отопление, влажную уборку, увлажнение воздуха.

По температуре воздуха в помещении аудитория В206 соответствует нормам (23°C). В производственных помещениях, где допускаемые нормативные величины локального микроклимата поддерживать не представляется возможным, необходимо проводить мероприятия по защите работников от возможного перегревания и охлаждения. Это достигается разными способами: использование систем местного кондиционирования воздуха; уменьшение длительности рабочей смены и др.

5.2.3 Анализ электробезопасности

Электрический ток рассматривается в качестве повышенного источника опасности. В таблице 5.4 выделены предельно допустимые значения электрического тока при неаварийном режиме работы электрооборудования [60].

Таблица 5.4 – Предельно допустимые значения напряжений прикосновения и токов

Род тока	U , В	I , мА
	не более	
Переменный, 50 Гц	2,0	0,3
Переменный, 400 Гц	3,0	0,4
Постоянный	8,0	1,0

Основными источниками поражения электрическим током являются поврежденная проводка, розетка, выключатель и открытые металлические участки электроприборов.

К основным причинам воздействия тока на человека относятся ситуации: 1) человек случайно прикасается или приближается на опасное расстояние к токоведущим частям; 2) в результате повреждения изоляции или ошибочных действий персонала на металлических частях оборудования появляется напряжение; 3) напряжение появляется на отключённых токоведущих частях, где работают люди, в связи с ошибочным включением установки; 4) провод замыкается на землю, в результате чего появляется шаговое напряжение на поверхности земли [64].

ГОСТ 12.1.038-82 устанавливает предельно допустимые уровни напряжений и токов [68]. Помещение, в котором проводилась дипломная работа, относится к категории без повышенной опасности. Это сухие помещения с относительной влажностью не выше 75% и температурой не ниже +5 °С. В этих помещениях пол, стены и все предметы находятся в сухом состоянии. В связи с этим к оборудованию предъявляются следующие требования: экран видеомонитора должен находиться на расстоянии не менее 50 см от пользователя; защитное заземление - это преднамеренное

электрическое соединение с землей или ее эквивалентом металлических нетоковедущих частей, которые могут оказаться под напряжением.

Цель защитного заземления - уменьшить до безопасного уровня напряжение относительно земли на металлических частях оборудования, которые не находятся под напряжением, но могут оказаться под напряжением из-за нарушения изоляции электроустановок. В результате короткого замыкания на корпус заземленного оборудования уменьшается напряжение прикосновения и, как следствие, ток, проходящий через тело человека при его прикосновении к корпусам. Максимально допустимые значения сопротивления заземления растеканию тока, установленные правилами устройства электроустановок, составляют для установок до 1000В: 4 Ом - при суммарной мощности генераторов или трансформаторов, питающих данную сеть, не более 100 кВА. Наиболее допустимое значение постоянного тока - 0,1 А. Наиболее допустимое значение напряжения - 36В [69].

Электробезопасность включает следующие технические и организационные средства и мероприятия, предназначенные для обеспечения защиты людей от воздействия тока:

- выполнение электроустановок в соответствии с требованиями электробезопасности;
- использование электрического разделения;
- применение системы защитных проводов; применение электрического разделения сети [65].

5.2.4 Анализ показателей освещенности рабочей зоны

Нормы освещения лабораторий по [58] представлены в таблице 5.5.

Таблица 5.5 – Нормируемые показатели естественного, искусственного и совмещенного освещения в лабораториях

Рабочая поверхность и плоскость нормирования КЕО и освещённости (Г – горизонтальная, В – вертикальная) и высота плоскости над полом, м	Естественное освещение КЕО ϵ_n , %		Совмещённое освещение КЕО ϵ_n , %		Искусственное освещение				
	при верхнем или комбинированном освещении	при боковом освещении	при верхнем или комбинированном освещении	при боковом освещении	Освещенность, лк		Показатель диска форта, М, не более	Коэффициент пульсации и освещённости, КЕО ϵ_n , %, не более	
					при комбинированном освещении	при общем освещении			
				все го	от общего				
Г-0.8	2.4	1.9	2.0	0.5	397	255	367	37	37

В результате неблагоприятных условий освещения может утомляться зрительный анализатор, снижаться работоспособность, могут появляться профессиональные заболевания [66].

С неблагоприятными условиями освещения связано повышенное утомление и развитие близорукости. Неблагоприятные условия освещения вызывают повышенное утомление и апатию.

Длительное пребывание в условиях недостаточного освещения способствует световому голоданию и снижению интенсивности обмена веществ в организме.

Для правильного освещения в компьютерном зале необходимо верно выбирать вид освещения, количество и расположение ламп, тип осветительных приборов. Компьютерный зал должна быть освещена верхним общим освещением.

Используемое в компьютерном зале освещение обеспечивает достаточную освещенность рабочей поверхности, освещенность стабильная, без блескости и без теней.

5.2.5 Анализ пожарной безопасности и разработка порядка действия в случае возникновения ЧС

Пожар может возникнуть из-за неисправности работы технического оборудования, короткого замыкания, а также неисправности проводки и т.д. При возникновении аварийных ситуаций происходит резкое выделение тепловой энергии, которая может явиться причиной возникновения пожара. В помещении могут присутствовать горючие материалы, что повышает степень пожароопасности.

Мероприятия по пожарной безопасности делятся на пожарную профилактику и тушение пожаров. Меры пожарной профилактики могут быть следующие: строительно-планировочные, технические, организационные. Строительно-планировочные меры определяются огнестойкостью зданий и сооружений (выбор материалов конструкций по степени огнестойкости). В зависимости от степени огнестойкости определяются наибольшие дополнительные расстояния от выходов для эвакуации при пожарах.

Технические меры включают соблюдение противопожарных норм для систем отопления, освещения, электрического обеспечения и т.д., использование разнообразных защитных систем и соблюдение параметров технологических процессов и режимов работы оборудования. Организационные меры представляют собой проведение инструктажа персонала по пожарной безопасности и соблюдение мер пожарной безопасности. Для предупреждения возникновения пожара необходимо соблюдать правила пожарной безопасности: правильная эксплуатация оборудования, правильное содержание зданий и территорий, обучение персонала правилам противопожарной безопасности и издание инструкций и плакатов.

В помещении для тушения возгораний предусмотрено использование углекислотного огнетушителя ОУ-3 для тушения возгораний классов А, В и электроустановок до 220 В при температуре воздуха -40 °С до +50 °С. Помещение соответствует нормам пожаробезопасности.

В случае, если пожар не удастся устранить своими силами, персонал необходимо эвакуировать из здания. Помещение оснащено аварийными выходами, обеспечено средствами пожаротушения и сигнализацией оповещения о пожаре. Схема эвакуации при пожаре представлена на рисунке 5.1.

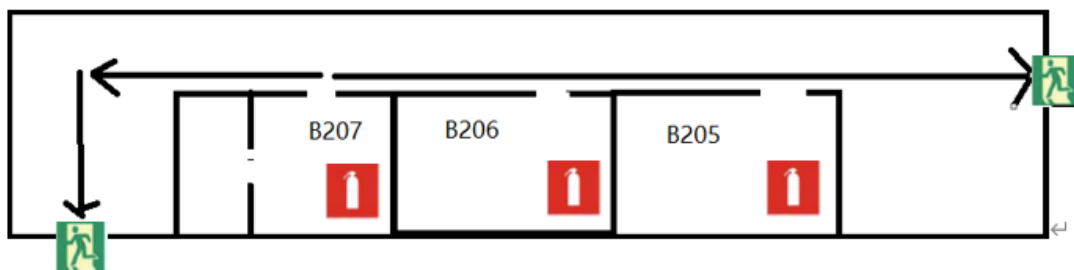


Рисунок 5.1 – План эвакуации рабочих помещений.

5.3 Экологическая безопасность

При написании ВКР вредных выбросов в атмосферу, почву и водные источники не производилось, радиационного заражения не произошло, чрезвычайные ситуации не наблюдались, поэтому не оказывались существенные воздействия на окружающую среду, и никакого ущерба окружающей среде не было нанесено.

Объект исследования является теоретическим, но разрабатывается в компьютере. Поэтому с точки зрения влияния на окружающую среду рассмотрим влияние компьютерной техники, использованной при его разработке.

Компьютерная техника потребляет сравнительно небольшое количество электроэнергии, поэтому по затратам на электроэнергию оно не оказывает существенной опасности для окружающего мира.

Компьютеры, утратившие потребительские свойства относятся к IV классу опасности (малоопасные отходы). Обезвреживание и размещение отходов I–IV классов опасности проводятся организациями, имеющими лицензию на осуществление этой деятельности. При неправильной утилизации компьютера может значительно пострадать экология, поэтому предлагается следующий порядок утилизации:

1) Удаление всех опасных компонентов;

2) удаление всех крупных пластиковых частей. Оставшиеся после разборки части отправляют в большой измельчитель, и все дальнейшие операции автоматизированы.

3) измельченные в гранулы остатки компьютеров подвергаются сортировке. Сначала с помощью магнитов извлекаются все железные части. Затем приступают к выделению цветных металлов, которых в ПК значительно больше.

Все полученные в ходе переработки материалы могут вторично использоваться в различных производственных процессах.

5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

Под чрезвычайными ситуациями понимаются опасные события или явления, в результате чего нарушается безопасность жизнедеятельности.

К основным причинам возникновения чрезвычайных ситуаций относятся две категории: 1) внешние – стихийные бедствия, неожиданное прекращение подачи электроэнергии, воды, технологических продуктов и т. д.; 2) внутренние – сложность технологий, недостаточная квалификация персонала, проектно-конструкторские недоработки, физический и моральный износ оборудования, низкая трудовая и технологическая дисциплина и т. п.

Наиболее характерной ЧС для помещения, оборудованных ЭВМ, является пожар. Причинами возникновения данного вида ЧС являются: возникновением короткого замыкания в электропроводке, возгоранием устройств ПК из-за неисправности аппаратуры, возгоранием устройств искусственного освещения, возгоранием мебели по причине нарушения правил пожарной безопасности, а также неправильного использования дополнительных бытовых электроприборов и электроустановок. [67]

Следующие меры относятся к противопожарным мерам в помещении:

1) Помещение должно быть оборудовано: средствами тушения пожара (огнетушителями, ящиком с песком, стендом с противопожарным инвентарем); средствами связи; должна быть исправна электрическая проводка осветительных приборов и электрооборудования.

2) Каждый сотрудник должен знать место нахождения средств пожаротушения и средств связи; помнить номера телефонов для сообщения о пожаре и уметь пользоваться средствами пожаротушения.

Аудитория В206 обеспечена средствами пожаротушения в соответствии с нормами и имеет: пенный огнетушитель ОП-10 – 2 шт.; углекислотный огнетушитель ОУ-5 – 2 шт. Также в случае эвакуации в 2 корпусе имеются аварийные маршруты и выходы.

Для предотвращения возникновения пожара необходимо проводить следующие профилактические работы, направленные на устранение возможных источников возникновения пожара: периодическая проверка проводки, отключение оборудования при покидании рабочего места, проведение с работниками инструктажа по пожарной безопасности.

5.5 Выводы по разделу

В результате проведенных исследований в рамках раздела «Социальная ответственность» были изучены правовые нормы трудового законодательства при проведении исследования свойств и структуры углерода $P4_2/m-40$.

Проанализированы основные вредные и опасные факторы, которые могут возникать в процессе исследований, при разработке и эксплуатации проекта: показатели микроклимата, уровень шума, освещенность рабочей зоны, значения опасности электрической цепи, потенциальные опасности пожара. Были описаны мероприятия по снижению уровней воздействия данных факторов.

Рассмотрен характер воздействия проектируемого решения на окружающую среду. В процессе выполнения исследования было выявлено, что отходы, полученные в ходе исследований, не оказывали влияние на

гидросферу и литосферу. Во избежание загрязнения окружающей среды отходы утилизировались в строгом соответствии с соответствующими документами.

Проанализированы природные и технические чрезвычайные ситуации, которые могут возникнуть в компьютерном зале. Для предотвращения чрезвычайных ситуаций были разработаны превентивные меры, а также разработаны процедуры для обработки чрезвычайных ситуаций.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С первой главы этой статьи можно узнать о том, как развиваются углеродные материалы и о том, что из-за их богатых связующих свойств и широкого спектра применений в данной работе выбран углерод как основной и $P4_2/m-40$ углерод как типичный представитель углеродных материалов. В работе проводится исследование механических свойств данного материала и анализируется его механическое поведение и закономерности структурных изменений, связанные с этим. Во второй главе описываются теоретические основы и методы расчета, используемые для определения напряженно-деформированного состояния материала по первому принципу, включая основные идеи теории функционала плотности и методы обработки, связанные с ними.

в третьей главе статьи были исследованы стабильность, фононная структура и упругие константы углерода $P4_2/m-40$. Результаты показали, что этот материал обладает высокой устойчивостью. С помощью расчетов электронной структуры было установлено, что углерод $P4_2/m-40$ имеет косвенную запрещенную зону шириной 3,6 эВ, что делает его полупроводниковым материалом. Кроме того, этот материал обладает очень высоким модулем Юнга (884,1 ГПа) и высокой твердостью по Виккерсу (59,9 ГПа), что сопоставимо с алмазом. Углерод $P4_2/m-40$ расширяет спектр сверхтвердых материалов и его превосходные электронные и механические свойства позволяют использовать его в нанoeлектронике и наномашиностроении.

Согласно данному тексту, проектирование углеродных материалов все еще остается сложной задачей. Несмотря на значительный прогресс в развитии теоретических методов моделирования и программного обеспечения, надежность первого принципа при проектировании структуры материала и прогнозировании свойств улучшилась. В результате было теоретически

спроектировано более ста новых трехмерных углеродных материалов. Однако экспериментально подтвержденных углеродных материалов очень мало, и необходимо улучшить сочетание теоретических методов с экспериментальными методами. В конечном итоге, целью теоретического проектирования новых углеродных материалов является создание большего количества материалов-кандидатов для практического применения. В будущем, сотрудничество с исследовательскими группами, способными синтезировать и проектировать новые углеродные материалы, может значительно способствовать развитию углеродных материалов и их использованию в различных областях, таких как катализ, адсорбция, электроника, сенсорные системы и батареи.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1]. Kroto, H. W., Heath, J. R., O'Brien, S. C., Curl, R. F., Smalley, R. E. C60: Buckminsterfullerene[J]. *Nature*. 1985, 318: 162-163
- [2]. Li, Y., Huang, X., Zeng, L., Li, R., Tian, H., Fu, X., Wang, Y., Zhong, W.-H. A review of the electrical and mechanical properties of carbon nanofiller-reinforced polymer composites[J]. *J. Mater. Sci.* 2018, 54: 1036-1076
- [3]. Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S. V., Grigorieva, I. V., Firsov, A. A. Electric field effect in atomically thin carbon films[J]. *Science*. 2004, 306: 666-669.
- [4]. Li, Y., Liao, Y., Chen, Z. Be₂C monolayer with quasi-planar hexacoordinate carbons: A global minimum structure[J]. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 2014, 53: 7248-7252.
- [5]. Wort, C. J. H., Balmer, R. S. Diamond as an electronic material[J]. *Mater. Today*. 2008, 11: 22-28
- [6]. Bundy, F. P., Hall, H. T., Strong, H. M., Wentorf, R. H. Man-made diamonds[J]. *Nature*. 1955, 176: 51-55
- [7]. Sheng, X. L., Yan, Q. B., Ye, F., Zheng, Q. R., Su, G. T-carbon: a novel carbon allotrope[J]. *Phys. Rev. Lett.* 2011, 106: 155703.
- [8]. Zhang, J., Wang, R., Zhu, X., Pan, A., Han, C., Li, X., Dan, Z., Ma, C., Wang, W., Su, H., Niu, C. Pseudo-topotactic conversion of carbon nanotubes to T-carbon nanowires under picosecond laser irradiation in methanol[J]. *Nat. Commun.* 2017, 8: 683.
- [9]. Li, Q. Crystal structures design of new B-C-N-O superhard materials under high pressure [D]. Jilin University, 2011.
- [10]. Krainyukova, N. V., Zubarev, E. N. Carbon honeycomb high capacity storage for gaseous and liquid species[J]. *Phys. Rev. Lett.* 2016, 116: 055501.
- [11]. Liang, H. Creeplike Stress Response in New Light-Element Strong Covalent Solids [D]. Jilin University, 2021.

- [12]. Nulakani, N. V. R., Subramanian, V. Superprismane: A porous carbon allotrope[J]. Chem. Phys. Lett. 2019, 715: 29-33.
- [13]. Liu, Y., Jiang, X., Fu, J., Zhao, J. New metallic carbon: Three dimensionally carbon allotropes comprising ultrathin diamond nanostripes[J]. Carbon. 2018, 126: 601-610.
- [14]. Feng, X., Mu, H., Xiang, Z., Cai, Y. Theoretical investigation of negatively curved 6.82D carbon based on density functional theory[J]. Comput. Mater. Sci. 2020, 171: 109211.
- [15]. Wu, X., Shi, X., Yao, M., Liu, S., Yang, X., Zhu, L., Cui, T., Liu, B. Superhard three-dimensional carbon with metallic conductivity[J]. Carbon. 2017, 123: 311-317.
- [16]. Yang, X. Designs and properties studies of novel carbon materials by first principles calculations [D]. Lanzhou University, 2021.
- [17]. Morrison I, Bylander D M, Kleinman L. Bands and bonds of B12As2 [J]. Physical Review B, 1992, 45 (4): 1533.
- [18]. Xie, X., Lu, D. Solid band theory [M]. Fudan University Press, 1998.
- [19]. Xu, G., Li, L., Wang, D. Quantum chemistry [M]. Science Press, 2001.
- [20]. Kohn W, Becke A, Parr R. Density functional theory of electronic structure [J]. Journal of Physical Chemistry, 1996, 100: 12974-12980.
- [21]. Kohn W. Nobel Lecture: Electronic structure of matter-wave functions and density functionals [J]. Reviews of Modern Physics, 1999, 71: 1253-1266.
- [22]. Dreizler R, Gross E. Density functional theory. An approach to the quantum many-body problem [M]: Berlin etc, 1990.
- [23]. Kohn W, Sham L. Self-consistent equations including exchange and correlation effects [J]. Physical Review, 1965, 140: A1133-A1138.

- [24]. Perdew J, Burke K, Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple [J]. *Physical Review Letters*, 1996, 77: 3865-3868.
- [25]. Perdew J, Wang Y. Pair-distribution function and its coupling-constant average for the spin-polarized electron gas [J]. *Physical Review B*, 1992, 46: 12947-12954.
- [26]. Tian Y, Xu B, Zhao Z. Microscopic theory of hardness and design of novel superhard crystals [J]. *International Journal of Refractory Metal and Hard Materials*, 2012, 33: 93-106.
- [27]. Chen X, Niu H, Li D, et al. Modeling hardness of polycrystalline materials and bulk metallic glasses [J]. *Intermetallics*, 2011, 19 (9): 1275-1281.
- [28]. Roundy D, Krenn C R, Cohen M L, et al. Ideal shear strengths of fcc aluminum and copper [J]. *Physical Review Letters*, 1999, 82 (13): 2713.
- [29]. Pan Z, Sun H, Chen C. Colossal shear-strength enhancement of low-density cubic BC₂N by nanoindentation [J]. *Physical Review Letters*, 2007, 98 (13): 135505
- [30]. Pan Z, Sun H, Zhang Y, et al. Harder than diamond: superior indentation strength of wurtzite BN and lonsdaleite [J]. *Physical Review Letters*, 2009, 102 (5): 055503.
- [31]. Zhang Y, Sun H, Chen C. Strain dependent bonding in solid C₃N₄: High elastic moduli but low strength [J]. *Physical Review B*, 2006, 73 (6): 064109.
- [32]. Zhang Y, Sun H, Chen C. Ideal tensile and shear strength of β -C₃N₄ from first-principles calculations [J]. *Physical Review B*, 2007, 76 (14): 144101.
- [33]. Zhou W, Sun H, Chen C. Soft bond-deformation paths in superhard γ -boron[J]. *Physical Review Letters*, 2010, 105 (21): 215503.
- [34]. Ogata S, Li J, Yip S. Ideal pure shear strength of aluminum and copper [J]. *Science*, 2002, 298 (5594): 807-811.

- [35]. Shi X, He C, Pickard C J, et al. Stochastic generation of complex crystal structures combining group and graph theory with application to carbon[J]. Physical Review B, 2018, 97(1): 014104.
- [36]. Kresse G, Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set [J]. Physical review B, 1996, 54 (16): 11169.
- [37]. Kresse G, Joubert D. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method [J]. Physical review B, 1999, 59 (3): 1758.
- [38]. Hill R. The elastic behaviour of a crystalline aggregate [J]. Proceedings of the Physical Society. Section A, 1952, 65 (5): 349.
- [39]. Cheng, G. Raman and Brillouin scattering [M]. Science Press, 2008.
- [40]. Wu Z, Zhao E, Xiang H, et al. Crystal structures and elastic properties of superhard IrN₂ and IrN₃ from first principles [J]. Physical Review B, 2007, 76 (5): 054115.
- [41]. Zhang Y, Sun H, Chen C. Atomistic deformation modes in strong covalent solids [J]. Physical Review Letters, 2005, 94 (14): 145505.
- [42]. Zhang Y, Sun H, Chen C. Structural deformation, strength, and instability of cubic BN compared to diamond: A first-principles study [J]. Physical Review B, 2006, 73 (14): 144115.
- [43]. Telling R H, Pickard C J, Payne M C, et al. Theoretical strength and cleavage of diamond [J]. Physical Review Letters, 2000, 84 (22): 5160.
- [44]. Zhang Y, Sun H, Chen C. Structural deformation, strength, and instability of cubic BN compared to diamond: A first-principles study [J]. Physical Review B, 2006, 73 (14): 144115.
- [45]. Скворцов Ю. В. Организационно-экономические вопросы в дипломном проектировании: Учебное пособие. – М.: Высшая школа, 2006. – 399 с.

- [46]. Кузьмина Е. А., Кузьмин А. М. Методы поиска новых идей и решений "Методы менеджмента качества" №1 2003 г
- [47]. Кузьмина Е. А., Кузьмин А. М. Функционально-стоимостный анализ. Экскурс в историю. "Методы менеджмента качества" №7 2002 г.
- [48]. Основы функционально-стоимостного анализа: Учебное пособие / Под ред. М.Г. Карпунина и Б.И. Майданчика. - М.: Энергия, 1980. - 175 с.
- [49]. Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 № 197-ФЗ (ред. от 02.12.2019).
- [50]. ГОСТ 12.2.032-78. ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования (дата введения: 01.01.1979).
- [51]. [ГОСТ 12.2.033-78](#) ССБТ. Рабочее место при выполнении работ стоя. Общие эргономические требования (дата введения: 01.01.1979).
- [52]. ГОСТ 12.0.003-2015. ССБТ. Опасные и вредные производственные факторы. Классификация (дата введения: 01.03.2017).
- [53]. ГОСТ 12.1.003-2014. ССБТ. Шум. Общие требования безопасности (дата введения: 01.11.2015).
- [54]. СН 2.2.4/2.1.8.562-96. Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории застройки (утв. Постановлением Госкомсанэпиднадзора РФ от 31 октября 1996 г.).
- [55]. ГОСТ 12.1.029-80. ССБТ. Средства и методы защиты от шума. Классификация (дата введения: 01.07.1981).
- [56]. [ГОСТ 12.1.005-88](#). ССБТ. Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны (дата введения: 01.01.1989).
- [57]. ГОСТ 12.1.007-76. ССБТ. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности (дата введения: 01.01.1977).

[58]. [СанПиН 1.2.3685-21 «Гигиенические нормативы и требования к обеспечению безопасности и \(или\) безвредности для человека факторов среды обитания»](#) (утв. Постановлением № 2 от 28 января 2021 г.).

[59]. ГОСТ 12.4.011-89. ССБТ. Средства защиты работающих. Общие требования и классификация (дата введения: 01.07.1990).

[60]. ГОСТ 12.1.038-82 ССБТ. Электробезопасность. Предельно допустимые уровни напряжений прикосновения и токов (дата введения: 01.07.1983).

[61]. ГОСТ Р 12.1.019-2009 ССБТ. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты (дата введения: 01.01.2011).

[62]. Микроклимат на рабочем месте [Электронный ресурс] // Управление Федеральной службы по надзору в сфере защиты прав потребителей и благополучия человека по Кемеровской области – Кузбассу. – 2016. – URL: <http://42.rospotrebnadzor.ru/content/874/54136/> (дата обращения: 20.03.2023).

[63]. Мушников, В. С. Условия труда работающих: влияние нагревающего микроклимата промышленных помещений на организм человека: Методическая разработка / В. С. Мушников, В. В. Вьюхин, В. И. Лихтенштейн, Л. Г. Турчанинов. – Екатеринбург: УрФУ, 2019. – 22 с.

[64]. Назаренко, О. Б. Безопасность жизнедеятельности: учебное пособие / О. Б. Назаренко. – Томск: Изд-во ТПУ, 2010. – 144 с.

[65]. Куликов, Г. Б. Безопасность жизнедеятельности: учебник / Г. Б. Куликов. – М.: МГУП, 2010. – 408 с.

[66]. Михалёва, К. А. Влияние параметров световой среды на здоровье человека / К. А. Михалёва [Электронный ресурс] // Городской округ Верхотурский. – 2017. – URL: <http://adm-verhotury.ru/social/helth/media/2017/10/16/vliyanie-parametrov-svetovoj-sredyi-na-zdorove-cheloveka/> (дата обращения: 20.03.2023).

[67]. ГОСТ 12.1.019–2017 ССБТ. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты.

[68]. ГОСТ 12.1.019-2017. Система стандартов безопасности труда. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты.

[69]. ГОСТ Р 54149-2010. Нормы качества электрической энергии в системах электроснабжения общего назначения.