

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
<i>Особенности образования комплексов гелий-вакансия в альфа цирконии: расчеты из первых принципов</i>

УДК 621.039.534.36:669.296.058:539.172.1

Обучающийся

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б91	Чэнь Исинь		

Руководитель ВКР

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

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент	Верховская М.В.	К.Э.Н.		

По разделу «Социальная ответственность»

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

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

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

Томск – 2023 г.

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОСВОЕНИЯ ООП/ОПОП

Код компетенции	Наименование компетенции
Универсальные компетенции	
УК(У)-1	Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач.
УК(У)-2	Способен определять круг задач в рамках поставленной цели и выбирать оптимальные способы их решения, исходя из действующих правовых норм, имеющихся ресурсов и ограничений.
УК(У)-3	Способен осуществлять социальное взаимодействие и реализовать свою роль в команде.
УК(У)-4	Способен осуществлять деловую коммуникацию в устной и письменной формах на государственном и иностранном (-ых) языке.
УК(У)-5	Способен воспринимать межкультурное разнообразие общества в социально-историческом, этическом и философском контекстах.
УК(У)-6	Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни.
УК(У)-7	Способен поддерживать должный уровень физической подготовленности для обеспечения полноценной социальной и профессиональной деятельности.
УК(У)-8	Способен создавать и поддерживать безопасные условия жизнедеятельности, в том числе при возникновении чрезвычайных ситуаций.
УК(У)-9	Способен проявлять предприимчивость в профессиональной деятельности, в т.ч. в рамках разработки коммерчески перспективного продукта на основе научно-технической идеи.
Общепрофессиональные компетенции	
ОПК(У)-1	Способен применять естественно-научные и общеинженерные знания, методы математического анализа и моделирования в инженерной деятельности, связанной с проектированием и конструированием, технологиями производства оптоэлектроники, оптических и оптико-электронных приборов и комплексов
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
150Б91	Чэнь Исинь

Тема работы:

<i>Особенности образования комплексов гелий-вакансия в альфа цирконии: расчеты из первых принципов</i>	
<i>Утверждена приказом директора (дата, номер)</i>	<i>№ 27-79/с от 27.01.2023</i>

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

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p>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></p>	<p>Атом гелий и гелий-вакансионный комплекс в решетке α-циркония.</p>
<p>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></p>	<p>Изучить современное состояние вопроса об особенностях взаимодействия гелия и гелий-вакансионного комплекса с цирконием. Ознакомиться с теорией функционала электронной плотности и метода псевдопотенциала. Провести оптимизацию значений параметров кристаллической решетки и релаксацию положений атомов чистого циркония и твердого раствора Zr-He при концентрации гелия и вакансий ~ 6 ат.%. Рассчитать энергии внедрения гелия и образования гелий-вакансионного комплекса в цирконии при концентрации гелия и вакансий ~ 6 ат.%. Вычислить плотность электронных состояний и орбитальные заселенности Гамильтониана в</p>

	<p>чистом цирконии и системы Zr-He при концентрациях атомов гелия и вакансий в решетке циркония ~ 6 ат.%. Рассчитать упругие характеристики системы Zr-He при концентрации гелия и вакансий ~ 6 ат.%. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение. Социальная ответственность. Провести анализ результатов и выявить особенности образования комплекса гелий-вакансия в решетке α-циркония.</p>
Перечень графического материала <i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i>	
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы <i>(с указанием разделов)</i>	
Раздел	Консультант
Социальная ответственность	Сечин А.И.
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Верховская М.В.
Названия разделов, которые должны быть написаны на иностранном языке:	
-	

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

Задание выдал руководитель / консультант (при наличии):

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

Задание принял к исполнению обучающийся:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б91	Чэнь Исинь		

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	Чэнь Исинь

Тема работы:

Особенности образования комплексов гелий-вакансия в альфа цирконии: расчеты из первых принципов

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

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
18.11.2022	Изучить современное состояние вопроса об особенностях взаимодействия гелия и гелий-вакансионного комплекса с цирконием.	15
16.12.2022	Ознакомиться с теорией функционала электронной плотности и метода псевдопотенциала.	15
25.12.2022	Провести оптимизацию значений параметров кристаллической решетки и релаксацию положений атомов чистого циркония и твердого раствора Zr-He при концентрации гелия и вакансий ~ 6 ат. %.	5
10.03.2023	Расчитать энергии внедрения гелия и образования гелий-вакансионного комплекса в цирконии при концентрации гелия и вакансий ~ 6 ат. %.	10
12.05.2023	Вычислить плотность электронных состояний и орбитальные заселенности Гамильтониана в чистом цирконии и системы Zr-He при концентрациях атомов гелия и вакансий в решетке циркония ~ 6 ат. %.	10
19.05.2023	Расчитать упругие характеристики системы Zr-He при концентрации гелия и вакансий ~ 6 ат. %.	10
06.06.2023	Финансовый менеджмент, ресурс эффективность и ресурсосбережение	15
06.06.2023	Социальная ответственность	15
06.06.2023	Провести анализ результатов и выявить особенности образования комплекса гелий-вакансия в решетке α -циркония.	5

СОСТАВИЛ:**Руководитель ВКР**

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

Консультант (при наличии)

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата

СОГЛАСОВАНО:**Руководитель ООП/ОПОП**

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

Обучающийся

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б91	Чэнь Исинь		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 96 с., 8 рис., 31 табл., 69 источников.

Ключевые слова: гелий, вакансии, цирконий, электронная структура, расчеты из первых принципов.

Объектом исследования является гелий-вакансионный комплекс в решетке α -циркония.

Цель работы – установление на основе расчетов из первых принципов особенностей образования комплексов гелий-вакансия в решетке α -циркония.

В ходе работы проводились: выбор параметров расчета и построение расчетных моделей для системы Zr-He с и без вакансий; расчет энергии внедрения гелия в решетку циркония; вычисление плотности электронных состояний и орбитальной заселенности Гамильтониана в чистом цирконии и системе Zr-He при концентрациях атомов гелия и вакансий в решетке циркония ~ 6 ат.%; расчет упругих характеристики системы Zr-He.

В результате исследования выявлено, что в окрестности вакансии энергии внедрения гелия значительно ниже чем в междоузлиях решетки циркония без вакансии, то есть гелию энергетически выгодно образовывать комплексы гелий-вакансия в решетке циркония. Установлено также из первых принципов, что присутствие гелий-вакансионных комплексов в решетке α -циркония значительно занижает упругих характеристик циркония, способствуя образованию дислокаций и понижая сопротивление циркония к растягивающим и касательным напряжениям.

Основные конструктивные, технологические и технико-эксплуатационные характеристики: расчетные суперячейки системы Zr-He, состоящие из 16 атомов циркония и одного атома He; система с вакансией рассматривалась с помощью расчетной суперячейки системы Zr-He, в которой один атом Zr отсутствовал.

Степень внедрения: нет.

Область применения: результаты исследований могут быть использованы для разработки материалов ядерной энергетики в качестве первичной информации при интерпретации результатов экспериментальных исследований физических и механических свойств конструкционных материалов на основе циркония.

Экономическая эффективность/значимость работы в выявлении особенностей взаимодействия примеси гелия с вакансиями в решетке α -циркония, что позволит разработать методы защиты материалов ядерной энергетики от радиационных дефектов, повысив их срок службы.

В будущем планируется исследование более сложных гелий-вакансионных комплексов, состоящих из нескольких атомов гелия и вакансий в решетке α -циркония.

Оглавление

ВВЕДЕНИЕ.....	12
1 ПРИМЕСИ В КОНСТРУКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛАХ	15
1.1 Поведение примесных атомов в металлах.....	15
1.2 Атомы гелия в металлах и сплавах	17
1.3 Геливое охрупчивание металлов и сплавов	18
2 ОСНОВНЫЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ И МЕТОДЫ РАСЧЕТА.....	23
2.1 Теория функционала плотности и уравнение Кон-Шема.....	23
2.2 Метод псевдопотенциала	25
2.3 Обменно-корреляционная энергия.....	27
2.3 Зонная структура и плотность электронных состояний	29
3 ГЕЛИЙ И ГЕЛИЙ-ВАКАНСИОННЫЙ КОМПЛЕКС В ЦИРКОНИИ.....	32
3.1 Детали расчета.....	32
3.2 Атом He и вакансия в решетке α -Zr	34
3.3 Электронная структура α -Zr с гелием и вакансией	36
3.4 Влияние вакансии и примеси He на механические свойства циркония....	42
4 ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ.....	45
4.1 Потенциальные потребители результатов исследования	46
4.2 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научного исследования с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.....	48
4.2.1 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	48
4.2.2 SWOT – анализ.....	50
4.3 Планирование научно-технического исследования	55
4.3.1 Определение трудоемкости выполнения работ.....	56
4.4 Бюджет научного исследования	62
4.4.1 Расчет материальных затрат НТИ.....	62

4.4.2	Расчет затрат на специальное оборудование для научных работ.....	63
4.4.3	Основная заработная плата исполнителей темы	64
4.4.4	Дополнительная заработная плата	65
4.4.5	Отчисления во внебюджетные фонды.....	66
4.4.6	Расчет затрат на электроэнергию	66
4.4.7	Расчет затрат на научные и производственные командировки и накладные расходы	67
4.4.8	Формирование бюджета затрат НИИ.....	67
4.5	Ресурсоэффективность	68
	Выводы по главе.....	70
5	СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ.....	71
5.1	Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	73
5.1.1	Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя) правовые нормы трудового законодательства.....	73
5.1.2	Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя	74
5.2	Производственная безопасность.....	74
5.2.1	Анализ опасных и вредных производственных факторов.....	75
5.2.1.1	Анализ показателей шума.....	75
5.2.1.2	Анализ показателей микроклимата.....	76
5.2.1.3	Анализ электробезопасности.....	79
5.2.1.4	Анализ показателей освещенности рабочей зоны.....	80
5.3	Экологическая безопасность.....	81
5.4	Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....	83
	Выводы по разделу.....	84
	ЗАКЛЮЧЕНИЕ	86
	СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	88

ВВЕДЕНИЕ

В 21-м веке, когда производственные и информационные технологии развиваются стремительно, глобальное потепление, выработка и хранение энергии являются важными темами для обсуждения в современном обществе. Источники энергии, такие как нефть, уголь и природный газ, которые мы используем в повседневной жизни, не только ограничены по количеству, но и невозобновляемы. В процессе использования энергии могут выделяться некоторые токсичные и вредные газы, такие как CO, CO₂ и SO₂. Эти токсичные и вредные газы серьезно нарушают экологический баланс, вызывая кислотные дожди и смог. Чтобы защитить наш общий дом – Землю и способствовать устойчивому развитию человеческого общества, люди все больше осознают необходимость разработки новых возобновляемых и чистых источников энергии.

Возобновляемые источники энергии, такие как солнечная и ветровая энергия, ограничены факторами географического положения, окружающей среды и сезона, что делает их нестабильными в использовании и разработке. В отличие от них ядерная энергетика позволяет стабильно вырабатывать огромное количество энергии в соответствии с потребностями населения и не оказывать разрушающего воздействия на экологическую обстановку. По сравнению с традиционной тепловой энергией ядерные электростанции не выделяют вредных газов и потребляют меньше ископаемого топлива, чем тепловая электростанция того же размера. Следовательно ядерная энергия может стать основным источником энергии необходимой для удовлетворения будущих промышленных потребностей. Однако как процесс распада тяжелых элементов, так и процессы ядерного синтеза требуют крайне сложных условий реакции и технологий, а безопасность ядерной реакции должна быть необходимым условием для “ядерной свободы”.

Топливный элемент является основным компонентом ядерного реактора, который долго работает при высоких температурах и давлении в

сильном радиационном поле. Надежность конструкции топливного элемента напрямую влияет на безопасную эксплуатацию ядерного реактора. Если в процессе работы реактора произойдет повреждение конструкции топливного элемента, то могут повыситься эксплуатационные затраты при обслуживании реактора или даже произойти незапланированная остановка реактора. Следовательно, необходимо изучить поведение эволюции структуры и свойств, а также механизмы разрушения конструкционных материалов топливных элементов, чтобы обеспечить безопасную эксплуатацию ядерного реактора. В связи с этим, в последние десятилетия активно изучаются конструкционные материалы, способные выдерживать высокие дозы облучения. Основным конструкционным материалом активных зон реакторов на тепловых нейтронах с водным теплоносителем являются циркониевые сплавы, обладающие низким сечением захвата нейтронов, высокой радиационной и коррозионной стойкостью, хорошей теплопроводностью [1].

Устойчивость циркония к воздействию газов при комнатной температуре исключительно высока, но при высоких температурах он легко взаимодействует с кислородом, азотом, водородом, галоидами и другими газами [2]. При эксплуатации конструкционные материалы на основе циркония подвергаются воздействию агрессивной среды, в результате чего возникает деградация свойств материала и нарушается целостность изделия. Нароботка примесей происходит в результате (n, p) -, (n, α) -ядерных реакций при бомбардировке металлов нейтронами [3]. Накопление в приповерхностной области металла атомов гелия приводит к радиационной ползучести, образованию твердого раствора с высокой концентрацией примеси и, как следствие, вызывает гелиевое охрупчивание, а также газовое набухание материала, так как они располагаются в дефектах структуры: в вакансиях, дислокациях, на границах зерен, междоузлиях. Все это значительно ухудшает эксплуатационные свойства металлов и сплавов [1–8]. Именно поэтому необходимо изучать влияние атомов гелия на свойства конструкционных материалов ядерных реакторов.

Целью данной работы является установление на основе расчетов из первых принципов особенностей образования комплексов гелий-вакансия в решетке α -циркония.

Для достижения данной цели были поставлены следующие задачи:

1. Изучить современное состояние вопроса об особенностях взаимодействия гелия и гелий-вакансионного комплекса с цирконием.

2. Ознакомиться с теорией функционала электронной плотности и метода псевдопотенциала.

3. Провести оптимизацию значений параметров кристаллической решетки и релаксацию положений атомов чистого циркония и твердого раствора Zr–He при концентрации гелия и вакансий ~ 6 ат. %.

4. Рассчитать энергии внедрения гелия и образования гелий-вакансионного комплекса в цирконии при концентрации гелия и вакансий ~ 6 ат. %.

5. Вычислить плотность электронных состояний и орбитальные заселенности Гамильтониана в чистом цирконии и системы Zr–He при концентрациях атомов гелия и вакансий в решетке циркония ~ 6 ат. %.

6. Рассчитать упругие характеристики системы Zr–He при концентрации гелия и вакансий ~ 6 ат. %.

7. Провести анализ результатов и выявить особенности образования комплекса гелий-вакансия в решетке α -циркония.

1 ПРИМЕСИ В КОНСТРУКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛАХ

1.1 Поведение примесных атомов в металлах

Наличие точечных дефектов оказывает значительное влияние на конструкционные свойства циркониевых сплавов. Присутствие различных примесных атомов может приводить к значительным изменениям механических свойств, таких как увеличение твердости, уменьшение пластичности, что приводит к более быстрому разрушению материалов. Такими точечными дефектами могут быть водород и гелий. Водород в циркониевых сплавах появляется за счет радиолиза воды при повышенных температурах. Гелий же появляется в результате ядерных реакций (n, α) при облучении нейтронами сплавов циркония. Скопление таких дефектов в материалах приводит к их охрупчиванию и более быстрому выходу ТВЭЛа из эксплуатации. Поэтому понимание причин появления таких изменений свойств как на теоретическом, так и на экспериментальном уровне является основным для дальнейшего продумывания способов улучшения конструкционных свойств. Одним из таких способов является легирование материалов различными элементами, являющихся стабилизаторами, повышающими устойчивость материала к различным внешним воздействиям. В [9] авторами работы изучено влияние элементов сплава Sn, Fe, Cr, Ni, Nb на содержание водорода в α -Zr и гидриды циркония. Было обнаружено, что атомы Cr, Fe и Ni притягивают растворенные атомы H, а между атомами O и атомами H нет явного взаимодействия. Вышеперечисленные элементы сплава делают фазу гидроксида циркония нестабильной в порядке $\text{Sn} > \text{Fe} > \text{Cr} > \text{Ni} > \text{Nb}$. То есть, замещенные атомы Sn, Cr и Fe могут значительно повысить предел растворимости водорода, а замещенные атомы Ni и Nb повышают предел растворимости незначительно.

В работе [10] изучены механизмы диффузии 14 замещающих элементов сплава в Zr. Они указывают на то, что радиус атома является основным фактором, влияющим на механизм диффузии примесей.

В работе [11] изучено влияние элементов сплава, расположенных в разных положениях структуры, на диффузию водорода. Стоит отметить, что легирование циркониевого сплава элементами при высоких температурах ($600 \text{ K} < T < 1200 \text{ K}$) на диффузию водорода не влияют. Как уже было отмечено выше, примесные элементы также оказывают большое влияние на свойства сплава циркония. Известно, что в сплав циркония всегда неизбежно содержит некоторые примесные элементы (такие как водород, гелий, углерод, азот, кислород и т.д.). В процессе радиолитического распада постоянно образующиеся атомы водорода в структурных материалах, смешиваясь с родными примесями, оказывают большое влияние на механические свойства и механические свойства сплава циркония. В работе [12] обнаружено что атомы водорода, скапливаясь, образуют кластеры, а также снижают подвижность пустот. Помимо этого, они обнаружили, что атомы водорода располагаются в тетраэдрических междоузлиях циркония. В работе [13] изучено влияние концентрации кислорода на энергию растворения водорода в сплаве циркония. Они обнаружили, что при определенном давлении растворимость водорода в сплаве циркония сначала увеличивается с увеличением содержания кислорода, но, когда соотношение кислорода и циркония достигает 0,177, растворимость водорода начинает постепенно снижаться. В работе [14] используется метод расчета Монте-Карло (Kinetic Monte Carlo method) для изучения коэффициентов диффузии углерода. Результаты моделирования показали, что при температуре 50°C диффузия углерода в чистом цирконии сильно ограничена. Помимо этого, примесные элементы также оказывают большое влияние на другие базовые материалы. В работе [15] было изучено поведение примесных элементов в иттрии. Они обнаружили, что диффузия примесных атомов происходит изотропно как в иттрии, так и других материалах. В работах [16-18] изучено влияние примесных атомов кислорода и водорода на механические свойства ванадия и сплавов на его основе. Было обнаружено, что пластичность сплава ванадия снижается с увеличением концентрации кислорода, а наличие кислородных примесей ослабляет

границы зерен, приводя к дополнительному охрупчиванию. Очевидно, что примесные атомы имеют различное воздействие на различные сплавы. Поэтому понимание поведения примесных атомов в сплавах является важной задачей для исследователей.

1.2 Атомы гелия в металлах и сплавах

Поведение дефектов, в частности, атомов гелия, всегда было предметом исследования радиационной стойкости материалов ядерной энергетики. В международном масштабе профессор Кю Сю из Института атомных реакторов Киотского университета в Японии проводит исследования радиационной стойкости с использованием просвечивающего электронного микроскопа, позитронной спектроскопии и спектроскопии Доплеровского уширения, метода термостимулированного газовыделения и других методов для комплексного изучения миграции атомов гелия и механизма образования пузырьков гелия в металлах и сплавах на их основе. Помимо этого, в Киотском университете исследователи имитировали процесс взаимодействия атомов гелия с радиационными пустотами [19, 20]. Также проводили исследование по улучшению радиационной стойкости вольфрамового сплава с помощью добавления второй фазы TiC, по результатам которого обнаружили значительное увеличение радиационной стойкости. В работе [21] при облучении нейтронами сплавов W-5Re и W-3Os при температуре 750 °C было обнаружено, что после облучения 1,54 сна выделяются Re и Os, которые подавляют формирование кольцевых дислокаций и микропор. В работах [22-24] как теоретически, так и экспериментально изучены микроскопические механизмы распределения, диффузии и агрегации атомов гелия в металлическом вольфраме и вольфрамовых сплавах. Большое количество исследований показывает, что содержание элемента Re оказывает большое влияние на свойства материалов для плазменных материалов [25, 26]. В работах [27, 28] W и W-Re сплавы были облучены нейтронами при температуре около 500-600°C дозой облучения 0,15-1 сна. Было получено, что

облучение низкой дозой (менее $0,37$ сна) приводит к тому, что закалка сплава W-Re меньше, чем у чистого W; при высокой дозе облучения закалка материала строго зависит от содержания элемента Re. В работе [29] также изучены материалы W с добавкой других металлических элементов. Обнаружено, что содержание элементов сплава $n \leq 5\%$ эффективно повышает температуру рекристаллизации вольфрама. Тяжелый сплав вольфрам-никель-железо является двухфазным композитным материалом благодаря добавке металлов Ni и Fe. По сравнению с чистым W, он может эффективно подавлять формирование кристаллических примесей и хрупких фаз, делая его более прочным на растяжение, пластичным, теплопроводным, коррозионно- и радиационностойким [30, 31].

Помимо повреждений от высокоэнергетических частиц, которые порождают микроскопические дефекты, ядерные реакции превращения нейтрона (n, α) и ядерные реакции синтеза дейтерия-третия также порождают атомы гелия. Образовавшиеся атомы гелия диффундируют на поверхность тяжелого сплава W, формируя гелиевые пузырьки, что серьезно влияет на физические и химические свойства поверхности материала такие как теплопроводность механические свойства и т. д. создавая катастрофические проблемы для безопасной эксплуатации оборудования [32, 33].

1.3 Геливое охрупчивание металлов и сплавов

Из-за своей низкой растворимости, атомы гелия захватываются различными дефектами, находящимися в кристаллических решетках материалов, что приводит к образованию гелиевых пузырьков. В работе [34] установлено, что при температурах $T \geq 0,45T_M$ (T_M – температура плавления материала) гелий вызывает высокотемпературное охрупчивание, которое ухудшает свойства растяжения, ползучести и усталости при низких концентрациях. Эффект вызывается пузырьками He на границах зерен материала, которые приводят к зарождению зернограничных трещин и преждевременному хрупкому разрушению под напряжением. Степень

разложения зависит от температуры, концентрации гелия и скорости образования, напряжения, а также состава и микроструктуры материала. Последние зависимости открывают путь для разработки сплавов, устойчивых к охрупчиванию. В диапазоне от комнатной температуры примерно до $0,5T_M$ высокие концентрации гелия могут влиять на упрочнение под действием облучения и ухудшать пластичность при растяжении и усталостную долговечность.

В работе [35] было исследовано влияние термической (температура отжига 1473 К) и механической (растяжением) обработки нержавеющей стали SUS304 на образование на рост гелиевых пузырьков в них. В образцах, к которым прикладывались растягивающие напряжения от 0,2 до 4 МПа за время отжига порядка двух секунд, наблюдались пузырьки гелия диаметром до 100 нм. Установлено, что размер пузырьков был больше для образцов с более высоким растягивающим напряжением. Считается, что при повышенных температурах атомы гелия в зернах диффундируют и образуют пузырьки на границах зерен и в матрице материала, после чего растягивающее напряжение вызывает рост пузырьков из-за поглощения вакансий [35].

Аналогично в работе [36] исследовалось влияние температуры отжига на размер пузырьков в нержавеющей стали. Установлено, что с увеличением температуры отжига с 923 К до 1173 К увеличиваются средние размеры пузырьков с 2 нм до 12,6 нм. Отмечено, что гелиевые пузырьки появились в температурном диапазоне от 823 К до 873 К, так как уменьшилась плотность дислокаций. Это свидетельствовало о том, что пузырьки гелия образовывались при температурах отжига дефектов. В работе [37] установлено, что с ростом температуры отжига поликристалла ниобия с 293 К до 1573 К уменьшается концентрация гелия с 33 ат.% до 4 ат.%.

Важно исследовать места образования пузырьков гелия на границах зерен, поскольку образование пузырьков гелия там может вызвать охрупчивание границ зерен. Установлено, что большая часть пузырьков гелия образовывается на зернограницных дислокациях. Причем местами их

образования являются узлы и оба конца зернограницных дислокаций, что подобно тому, что наблюдается и в дислокациях внутри зерна. В результате было подтверждено, что пузырьки гелия не образуются случайно, даже на границах зерен, а образуются преимущественно в узлах дислокации, где свободная энергия пузырьков гелия будет небольшой [36].

В работе [38] с помощью просвечивающей электронной микроскопии была исследована микроструктура стали 12X18H10T, имплантированной гелием до 10^{-3} ат.%. Дополнительное старение стали с гелием при температуре 823 К привело к бурному развитию дислокационной структуры, а старение при 1173 К – к росту выделений вторичных карбидов TiC и гелиевых пузырьков с размерами 30...190 нм. Показано, что имплантированные гелием стальные образцы при температурах 823 К и 1173 К показали более высокие прочностные характеристики по сравнению с необлученной сталью. Однако пластичность необлученного образца может достигать порядка 95%, средняя пластичность же стареющих образцов составила примерно 52,5%.

В работе [39] были измерены времена жизни позитронов в палладии, имплантированном гелием, без и с предварительно введенными дислокациями посредством холодной обработки. Установлено, что дислокации обеспечивают дополнительные места захвата, где атомы гелия могут агломерировать и зарождать пузыри, что приводит к увеличению плотности зарождающихся пузырьков. В хорошо отожженных образцах присутствует достаточное количество вакансий для ослабления давления пузырьков. Это приводит к более высокой подвижности пузырьков и, как следствие, к их более быстрому росту. С другой стороны, в образцах, содержащих дислокации, гелиевые пузырьки растут достаточно медленно и обладают низкой подвижностью.

Помимо экспериментальных исследований, также опубликован и ряд теоретических работ, посвященных миграции атома гелия в различных металлах. Энергетические барьеры для миграции атомов He между тетраэдрическими и октаэдрическими междоузлиями ГПУ решетки Sc были

исследованы авторами работы [40]. Установлено, что атом He может напрямую перепрыгивать с одного тетраэдрического (T) междоузлия на другой перпендикулярно базальной плоскости с низкой энергией миграции около 0,03 эВ. Кроме того, механизм миграции He при низкой температуре в ГПУ Sc аналогичен таковому в ОЦК Fe и W, но отличается от процесса миграции в ГЦК Al. Скачки $T-BO-T$ и $T-O-T$ для междоузельных атомов He могут наблюдаться при более высоких температурах (BO – базальное октаэдрическое междоузлие, O – октаэдрическое междоузлие).

Понимание поведения отдельных атомов He в металлических решетках – основа для понимания особенностей взаимодействия гелия с металлами. Во-первых, необходимо знать энергию атомов гелия в различных местах решетки, поскольку эти параметры определяют растворимость гелия и пути его миграции по решетке. Если предположить модель кристалла и выбрать потенциал взаимодействия между атомом металла и гелия, можно вычислить соответствующую энергию. Таблица 1.1 содержит некоторые расчетные данные из работы [41].

Таблица 1.1. Энергия образования атомов гелия (E^F), энергия миграции (E^M) и энергия рассеяния атомов гелия (E^D)

Материал	E^F , эВ	E^M , эВ	E^D , эВ
Ni	4,52	0,43	0,5
		0,1	
		0,35	
Cu	2,03	0,45	2,15
V	4,61	0,13	3,20
Fe	5,36	0,17	3,93
Mo	4,91	0,23	4,19
	4,97	0,3	4,2
W	5,47	0,24	4,39
	5,91	0,29	5,07

Расчеты показывают, что атом гелия в металле обладает более высокой энергией, чем свободный атом гелия, что указывает на то, что гелий в основном не растворяется в металле (например, при 1200°C, низкой растворимости < 10 ppm >). Атомы He находятся в междоузлиях решетки, энергия образования в этом случае составляет 4 – 5 эВ. Для помещения He в вакансию требуется меньше энергии (~ 1 эВ). Энергия миграции гелия является низкой (0,1 – 0,7 эВ). Так что, как только образуется атом He, он легко перемещается и захватывается вакансиями.

2 ОСНОВНЫЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ И МЕТОДЫ РАСЧЕТА

2.1 Теория функционала плотности и уравнение Кон-Шема

Расчет многоэлектронных систем представляет собой комплексную задачу, поскольку необходимо решать большое количество дифференциальных уравнений второго порядка для нахождения волновой функции каждого микрообъекта в системе, которую в общем виде решить не удастся. В связи с этим используется несколько приближений для упрощения нахождения собственных функций в уравнении Шрёдингера. Первое из них – адиабатическое приближение, смысл которого заключается в разбиении задачи о поиске волновых функций электронов и ядер на две отдельные, но взаимозависимые задачи вследствие разности масс электронов и ядер. Второе приближение – зонное, которое связано с тем, что кристаллическая структура является периодической, что позволяет решать уравнение Шрёдингера для ограниченного количества частиц в рамках некоторой элементарной ячейки. Данное условие накладывает свойство периодичности на волновую функцию и на потенциал. Третье приближение – одноэлектронное, в котором волновая функция всех электронов заменяется на электронную плотность. Для реализации данного приближения были разработаны подходы. Наиболее популярный метод – метод Кона-Шема. В рамках данного метода сложная задача многих тел (возникающая из-за взаимодействия электронов во внешнем электростатическом потенциале) сводится к задаче об электронах, движущихся в эффективном потенциальном поле без взаимодействия. Это эффективное потенциальное поле учитывает внешнее потенциальное поле, а также эффекты кулоновского отталкивания между электронами, а также обменные и корреляционные взаимодействия. Работа с обменно-корреляционными взаимодействиями является сложной задачей, и точного решения для энергии обменно-корреляционных взаимодействий не существует.

Уравнение Кона-Шема имеет следующий вид:

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{eff}(\mathbf{r})\right]\psi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i\psi_i(\mathbf{r}), \quad (2.1)$$

где $V_{eff}(\mathbf{r})$ – эффективное потенциальное поле, которое включает внешнее потенциальное поле, а также эффекты кулоновского отталкивания между электронами, и обменные и корреляционные взаимодействия. Оно может быть выражено как

$$V_{eff}(\mathbf{r}) = V_{ext}(\mathbf{r}) + \int \frac{n(r')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' + V_{xc}(\mathbf{r}), \quad (2.2)$$

где $V_{ext}(\mathbf{r})$ – потенциальная энергия взаимодействия с внешним полем, $\int \frac{n(r')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'$ – член Хартри, описывающий кулоновское отталкивание между электронами, и $V_{xc}(\mathbf{r})$ – обменно-корреляционный потенциал, который содержит все многочастичные взаимодействия.

Решение уравнения Кона-Шэма требует самосогласованного подхода. Сначала предполагается начальная плотность электронов $n(\mathbf{r})$, затем рассчитывается соответствующее эффективное потенциальное поле $V_{eff}(\mathbf{r})$ и находятся волновые функции $\psi_i(\mathbf{r})$ в уравнении Кона-Шэма. В свою очередь, если на входе и на выходе итерации процедуры самосогласования не выполняется равенство между волновыми функциями с определенной точностью, то начинается новый цикл вычислений. Этот процесс повторяется до тех пор, пока расчеты не сойдутся.

Уравнение Кон-Шэма представляет собой практичный и эффективный инструмент для теории функционала плотности (ТФП), позволяющий использовать ее в широком спектре приложений в физике и химии. Суть ТФП заключается в использовании в качестве носителя всей информации в основном состоянии молекулы (атома) электронной плотности, а не волновой функции одного электрона, тем самым превращая многоэлектронную систему в решаемую одноэлектронную задачу [42]. Расчет ТФП использует электронную плотность вместо волновой функции в качестве основной изучаемой величины. Само собой разумеется, что внешний потенциал в принципе определяет все свойства системы: это нормальный подход к квантово-механическим задачам, когда решается уравнение Шрёдингера для

собственных состояний системы. Соответствие между электронной плотностью и внешним потенциалом описывается согласно теореме Кона–Хоэнберга. Теорема Хоэнберга-Кона представляет два важных вывода: первая теорема утверждает, Плотность может использоваться вместо потенциала в качестве основной функции, однозначно характеризующей систему; вторая теорема доказывает, что энергия основного состояния получается после вариации энергии системы по электронной плотности.

2.2 Метод псевдопотенциала

Компонентами твердой системы являются положительно заряженное ядро и отрицательно заряженный электрон. Масса электрона намного меньше массы ядра, а скорость электрона намного больше скорости ядра. Можно предположить, что ядро движется очень медленно, когда электрон находится в движении, и что ядро находится в относительном покое. Такое предположение известно как адиабатическое приближение (приближение Борна-Оппенгеймера) [43], и тогда уравнение (2.3) можно разбить на две взаимосвязанные задачи на собственные значения для электрона и ядра, с собственными функциями:

Метод псевдопотенциала – это метод аппроксимации, используемый для упрощения описания многоэлектронных систем, особенно валентных электронов в атомах и твердых телах. Основная идея метода псевдопотенциала заключается в замене сильного притягивающего потенциала, создаваемого ядром и внутренними электронами, на более слабый эффективный потенциал, или псевдопотенциал, что позволяет устранить быстрые колебания волновой функции валентного электрона и уменьшить вычислительные затраты и время расчета. Предположим, что гамильтониан N -электронной системы имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^N V(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \quad (2.3)$$

где $V(r)$ – это внешний потенциал, создаваемый ядром и внутренним электроном, который можно записать как

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} + \sum_{n,l,m} |\phi_{nlm}(\mathbf{r})|^2 \epsilon_{nl}, \quad (2.4)$$

где $\phi_{nlm}(\mathbf{r})$ – волновая функция внутреннего электрона, а ϵ_{nl} – соответствующий уровень энергии. Этот внешний потенциал очень силен для валентного электрона, что приводит к многочисленным осцилляциям волновой функции валентного электрона вблизи ядра. Чтобы избежать этих осложнений, мы можем заменить $V(r)$ более слабым псевдопотенциалом $V_{ps}(r)$, превратив волновую функцию валентного электрона в псевдоволновую функцию $\phi_{nlm}(\mathbf{r})$, удовлетворяющую следующим условиям:

1. За пределами некоторого радиуса усечения r_c псевдоволновая функция и истинная волновая функция равны, т.е. $\tilde{\phi}_{nlm}(\mathbf{r}) = \phi_{nlm}(\mathbf{r})$.

2. Для $r < r_c$ в пределах радиуса усечения r_c псевдоволновая функция не имеет узлов и имеет ту же логарифмическую производную, что и реальная волновая функция, т.е. $\tilde{\phi}_{nlm}(\mathbf{r}) = \phi_{nlm}(\mathbf{r})$.

3. Для $r < r_c$ псевдоволновая функция и реальная волновая функция имеют одно и то же собственное значение энергии, т.е. $\hat{H}_{ps}\tilde{\phi}_{nlm}(\mathbf{r}) = \epsilon_{nl}\tilde{\phi}_{nlm}(\mathbf{r}) = \hat{H}\tilde{\phi}_{nlm}(\mathbf{r})$.

Таким образом, мы можем описать движение валентного электрона в терминах более простого гамильтониана \hat{H}_{ps} , где

$$\hat{H}_{ps} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^N V_{ps}(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'_j|}. \quad (2.5)$$

Псевдопотенциал $V_{ps}(r)$ включает псевдопотенциалы, построенные из атомных расчетов, такие как: сохраняющий норму псевдопотенциал, ультрамягкий псевдопотенциал, метод присоединенных плоских волн и т.д., и псевдопотенциалы, полученные из теоретических моделей псевдопотенциалы, такие как псевдопотенциал Томаса-Ферми, псевдопотенциал Цунгера-Стокса и т.д.. Преимущество метода псевдопотенциалов заключается в том, что он значительно снижает вычислительные усилия и сложность расчета, позволяя эффективно использовать простые группы базисов, такие как группы базисов плоских волн, для описания волновых функций валентных электронов.

Недостатком метода псевдопотенциалов является то, что он требует выбора подходящего псевдопотенциала для обеспечения точности и переносимости расчета, а также учета некоторых эффектов, которыми можно пренебречь в ряде случаев, таких как релятивистские эффекты, спин-орбитальная связь, нелинейные ядерные поправки и т.д. Применение метода псевдопотенциала в основном описывает свойства, связанные с валентными электронами в атомах и твердых телах, такие как структура, энергетические спектры, плотность состояний, оптические свойства и т.д.

2.3 Обменно-корреляционная энергия

Обменно-корреляционная энергия – это энергия, возникающая в результате обменных и корреляционных взаимодействий между электронами в многоэлектронной системе. Обменные взаимодействия – это отталкивающие взаимодействия между электронами с одинаковым спином, которые приводят к уменьшению энергии системы и, таким образом, увеличивают стабильность системы. Корреляция – это динамическое взаимодействие между электронами, которое делает движение электронов не независимым, а зависящим от положения и спина других электронов. Энергия обменной корреляции играет важную роль в теории функционала плотности, которая представляет собой обобщение, относящееся к плотности электронов, что

$$E_{xc}[n] = \int n(\mathbf{r})\epsilon_{xc}(n(\mathbf{r}))d\mathbf{r}, \quad (2.6)$$

где $n(\mathbf{r})$ – плотность электронов, а $\epsilon_{xc}(n(\mathbf{r}))$ – плотность энергии обменно-корреляционного взаимодействия на электрон. Точная форма обменной корреляционной энергии неизвестна, поэтому для ее расчета необходимо использовать некоторые приближенные методы. Некоторые распространенные приближения – это приближение локальной плотности (ПЛП), обобщенное градиентное приближение (ОГП) и неоднородная функция обобщения (НФО).

В приближении локальной плотности рассматривается однородный электронный газ для расчета обменной энергии системы (обменная энергия

однородного электронного газа может быть решена точно) и подгоняется к свободному электронному газу для решения корреляционной энергии. Обобщенное градиентное приближение – это приближение, в котором обменно-корреляционный функционал, помимо электронной плотности, использует информацию о ее неоднородном распределении, т.е. учитывается градиент этой плотности. Общая форма ОГП может быть записана как

$$E_{xc}^{GGA}[n] = \int n(\mathbf{r}) \epsilon_{xc}^{GGA}(n(\mathbf{r}), |\nabla n(\mathbf{r})|) d\mathbf{r}, \quad (2.7)$$

где $\epsilon_{xc}^{GGA}(n(\mathbf{r}), |\nabla n(\mathbf{r})|)$ – обменная корреляционная энергия на электрон, которая является функцией электронной плотности и градиента электронной плотности. Различные методы ОГП используют различные функциональные формы и параметры для построения $\epsilon_{xc}^{GGA}(n(\mathbf{r}), |\nabla n(\mathbf{r})|)$, некоторые из распространенных методов ОГП: PW86, PW91, PBE, B88 и LYP.

Приближение в форме Пердью-Бурке-Эрнцерхофа (ПБЭ)– это обобщенно градиентное приближение, которое было предложено Пердью, Бурке и Эрнцерхофом в 1996 году для построения простого и обобщенного обобщения обменно-корреляционной энергии [44]. Плотности обменной энергии ϵ_x^{PBE} и корреляционной энергии ϵ_c^{PBE} в приближении PBE даются в виде:

$$\epsilon_x^{PBE}(n, \nabla n) = \epsilon_x^{LDA}(n) F_x^{PBE}(s), \quad (2.8)$$

$$\epsilon_c^{PBE}(n, \nabla n) = \epsilon_c^{LDA}(n) \left[1 + \kappa - \frac{\kappa}{1 + \frac{\mu s^2}{\kappa}} \right], \quad (2.9)$$

где $\epsilon_x^{LDA}(n)$ и $\epsilon_c^{LDA}(n)$ – плотности обменной и корреляционной энергии в приближении локальной плотности, $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$ – безразмерный параметр градиента, $F_x^{PBE}(s)$ – волновой вектор Ферми, $F_x^{PBE}(s)$ – коэффициент усиления обмена, а κ и μ – эмпирические параметры. Конкретная функциональная форма и выбор параметров обобщающей функции ПБЭ основаны на сочетании физических принципов и экспериментальных данных, что позволяет обобщающей функции ПБЭ удовлетворять некоторым важным точным условиям, таким как предел однородного электронного газа, атомный предел, неравенство Либа-Оксфорда и т.д. Обобщающая функция ПБЭ лучше

описывает, по сравнению с ППП, образование химических связей, изменения молекулярной структуры, высокие и низкие температуры, а также изменения в структуре молекул.

2.3 Зонная структура и плотность электронных состояний

В твердых телах электроны могут двигаться по зонам определенных энергий, а между различными зонами могут существовать области запрещенных энергий или запрещенные зоны, т.е. энергетические диапазоны, в которых электроны не могут находиться. Когда прикладывается электрическое или магнитное поле, на электрон действует сила Ампера или Лоренца, которая изменяет его траекторию. Для перехода электрона с одной зоны на другую ему требуется определенное количество энергии. Если энергии для перехода недостаточно, то электрон остается в прежнем состоянии, то есть, он будет отражен обратно в свое исходное энергетическое состояние. Это явление называется брэгговским отражением и является важным проявлением флуктуационной природы электронов в кристаллах. При брэгговском отражении предполагается периодическое потенциальное поле $V(x) = V(x + a)$, где a – постоянная решетки, что соответствует одномерному кристаллу. Если на это потенциальное поле падает электрон с волновым вектором k и энергией E , то его можно разложить на две плоские волны: одна распространяется вправо с волновым вектором k , а другая влево с волновым вектором $-k$. Из-за периодичности потенциального поля обе плоские волны являются частными случаями блоховской волновой функции, т.е.

$$\psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x), \quad (2.10)$$

$$\psi_{-k}(x) = e^{-ikx} u_{-k}(x), \quad (2.11)$$

где $u_k(x) = u_k(x + a)$ – периодическая функция. Поскольку обе волновые функции удовлетворяют уравнению Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi, \quad (2.12)$$

то они могут быть линейно наложены для получения новой волновой функции

$$\psi(x) = A\psi_k(x) + B\psi_{-k}(x), \quad (2.13)$$

где A и B – комплексные коэффициенты. Эта волновая функция описывает движение электрона в потенциальном поле и может рассматриваться как суперпозиция падающей и отраженной волн. Для того чтобы обеспечить периодичность волновой функции в решетке, нам необходимо выполнить следующие условия

$$\psi(x) = \psi(x + a), \quad (2.14)$$

Подставляя в вышеприведенное уравнение и используя свойства периодических функций, получаем

$$Ae^{ika} + Be^{-ika} = A + B. \quad (2.15)$$

Группировка слагаемых приводит к

$$A(e^{-ika} - 1) = B(e^{-ika} - 1). \quad (2.16)$$

Если мы определим коэффициент отражения как $r = \frac{B}{A}$, то вышеприведенное уравнение можно записать как

$$r = \frac{e^{ika} - 1}{e^{-ika} - 1}. \quad (2.17)$$

Когда $k = \frac{n\pi}{a}$ (где n - целое число), знаменатель равен нулю и коэффициент отражения бесконечен, т.е. происходит полное отражение. Это условие для брэгговского отражения, которое означает, что электроны не могут проходить через области потенциального поля, где существуют запрещенные зоны. Брэгговское отражение может быть использовано для объяснения ряда оптических и электрических свойств твердых тел, таких как отражение, поглощение, дисперсия и т.д. Анализ структуры энергетических зон в настоящее время очень часто используется в первопринципных расчетах в различных областях. Прежде всего, конечно, можно определить, является ли система металлом, полупроводником или изолятором. В случае собственных полупроводников можно также определить, является ли энергетический разрыв прямым или непрямым: если нижняя точка зоны проводимости и верхняя точка валентной зоны находятся в одной и той же k -точке, то это прямой энергетический разрыв, в противном случае – не прямой. Ширина энергетической зоны играет важную роль в анализе энергетического спектра.

Чем шире зона, тем меньше эффективная масса электронов, и тем больше нелокализованность и больше протяженность атомных орбиталей, составляющих зону. Если форма приблизительно параболическая, то зону обычно называют *sp*-подобной. И наоборот, более узкая энергетическая зона указывает на то, что собственные состояния, соответствующие этой зоне, состоят в основном из атомных орбиталей, локализованных в определенной точке решетки, и что электроны на этой зоне очень локализованы и имеют относительно большие эффективные массы.

Плотность состояний позволяет определить число электронных состояний, которые могут быть заняты на единицу объема в единичном диапазоне энергий, т.е.

$$D(E) = \frac{1}{V} \sum_{n,k} \delta(E - E_{nk}), \quad (2.18)$$

где V – объем, δ – функция Дирака, n – главное квантовое число, k – импульс кристалла, и E_{nk} – энергия электрона. Теория плотности состояний может быть использована для расчета физических величин, таких как теплоемкость, намагниченность, коэффициенты переноса в твердых телах, которые тесно связаны со структурой энергетической зоны и обычно могут быть получены интегрированием по пространству волновых векторов k . Форма плотности состояний отражает распределение электронов по различным энергетическим зонам, например, вблизи запрещенной зоны плотность состояний равна нулю, в то время как на крайних участках энергетической зоны наблюдаются пики плотности состояний. Величина плотности состояний также влияет на силу взаимодействия между электроном и внешним полем, например, в областях с более высокой плотностью состояний электрон легче возбуждается или поглощается.

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

Студенту:

Группа	ФИО
150Б91	Чэнь Исинь

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

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

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Затраты на сырьё, размер окладов, затраты на электроэнергию, амортизационные расходы
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	– Согласно проектной документации. Районный коэффициент 1.3
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	– Отчисления во внебюджетные фонды 30%

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

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

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

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

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

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

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б91	Чэнь Исинь		

4 ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ

Цель данного раздела ВКР заключается в оценке перспективности разработки и планировании финансовой и коммерческой ценности конечного продукта, предлагаемого в рамках НИ. Коммерческая ценность определяется не только наличием более высоких технических характеристик над конкурентными разработками, но и тем, насколько быстро разработчик сможет ответить на следующие вопросы: будет ли продукт востребован на рынке, какова будет его цена, каков бюджет научного исследования, какое время будет необходимо для продвижения разработанного продукта на рынок.

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.

Цель данной ВКР – Используя пакет программ для расчетов на основе первых принципов (vasp), исследуется влияние атомов гелия на свойства конструкционных материалов ядерных реакторов. Анализируется гелиевое охрупчивание при накоплении атомов гелия в металле, вычисляется анизотропия модуля Юнга.

4.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Потенциальными потребителями результатов исследований являются организации полупроводниковой, энергетической и информационной сферы. В каждой области материалы должны производиться экономичным способом для достижения новых свойств и качеств. Это означает, что потребителями являются крупные коммерческие и некоммерческие организации, связанные с отраслью.

Для выявления групп потребителей, которым могут быть интересны результаты этих научных исследований, необходимо сегментировать рынок.

Ключевые характеристики сегментированных потребителей:

Местоположение – регион с развитой электронной промышленностью (полупроводники, энергетика и информация).

Отношение к сервису – готовность внедрять новые технологии в техпроцессы.

Принципы закупок – Компания осуществляет централизованные закупки.

Поскольку исследование, представленное в работе, обеспечивает технологию для новых материалов, результаты будут интересны большинству организаций, независимо от того, где они расположены. Для выявления групп потребителей, которые могут быть заинтересованы в данных композитных материалах, необходимо сегментировать рынок. В таблице 4.1 показана диаграмма сегментации рынка по модификации поверхности.

Таблица 4.1 – Карта сегментирования рынка услуг в области наноматериалов

		Вид услуги		
		Используйте материал в качестве смазки	Используйте этот материал в качестве подложки для крупных интегральных схем и упаковочного материала.	Используйте этот материал в качестве чип-конденсатора.
Сфера	Электронный компонент			
	Интегральная схема			
	машиностроение			
	ЛТЛ «Электронные материалы Фуцзянь Хуацин»		ЛТД «Электронные технологии Джиари Фэнтай»	
				ЛТД «Химическая интеграция (Сямынь) Полупроводниковая технология»

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

Продукт: Электронный материал AlN: Fe, легированный Fe на основе AlN, имеет характеристики AlN и разбавленного магнитного полупроводника.

Целевой рынок: компании, производящие полупроводниковую электронику, и компании, производящие новые материалы.

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_Ф – высокоинтенсивная модификация внутренней поверхности отверстий пучками ионов азота низкой энергии. Б_{к1} – нанесение защитных покрытий.

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

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

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 _Ф	Б _{к1}	Б _{к2}	К _Ф	К _{к1}	К _{к2}
1	2	3	4	5	6	7	8
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
1. Классы материалов для использования	0,2	5	4	3	1	0,8	0,6
2. Удобство в эксплуатации	0,25	5	5	3	1,25	1,25	0,75
3. Уровень шума работы установки	0,1	4	4	2	0,4	0,4	0,2
4. Качество изделий	0,1	4	4	3	0,4	0,4	0,3
5. Простота в эксплуатации	0,1	4	4	4	0,4	0,4	0,4
6. Скорость создания изделий	0,1	5	4	2	0,5	0,4	0,2
Экономические критерии оценки эффективности							
1. Цена изготавливаемой продукции	0,15	4	3	2	0,6	0,45	0,3
Итого:	1	31	28	17	4,55	4,1	2,75

$$K_{\Phi} = 0,2 \cdot 5 + 0,25 \cdot 5 + 0,1 \cdot 4 + 0,1 \cdot 4 + 0,1 \cdot 4 + 0,1 \cdot 5 + 0,15 \cdot 4 = 4,55$$

$$K_{K1} = 0,2 \cdot 4 + 0,25 \cdot 5 + 0,1 \cdot 4 + 0,1 \cdot 4 + 0,1 \cdot 4 + 0,1 \cdot 4 + 0,15 \cdot 3 = 4,1$$

$$K_{K2} = 0,2 \cdot 3 + 0,25 \cdot 3 + 0,1 \cdot 2 + 0,1 \cdot 3 + 0,1 \cdot 4 + 0,1 \cdot 2 + 0,15 \cdot 2 = 2,75$$

где, конкурентами является K1 – композитный материал на основе AlN, а K2 – композитный материал на основе GaN. Соответственно Бк1 – это балльная оценка конкурентоспособности по заявленным критериям AlN и Бк2 – это балльная оценка конкурентоспособности по заявленным критериям GaN.

Проведенный анализ конкурентных технических решений показал, что вариант №1 является предпочтительным.

4.2.2 SWOT – анализ

Для оценивания актуальности проекта часто применяется методика SWOT – анализа, которая позволяет рассмотреть его перспективы, слабые и сильные стороны. SWOT – является аббревиатурой, которая раскрывает аспекты данного вида анализа, а именно:

- Сильные стороны (Strengths) - преимущества проекта
- Слабости (Weaknesses) - недостатки проекта
- Возможности (Opportunities) - факторы внешней среды, использование которых создаст преимущества проекту на рынке
- Угрозы (Threats) - факторы, которые могут потенциально ухудшить положение проекта на рынке

Основная задача данного типа анализа систематизировать все данные об имеющемся проекте и на основе наглядно представленной информации принимать решения о дальнейшем развитии проекта, а в нашем случае научного исследования

Таблица 4.3 – SWOT – анализ

	<p>Сильные стороны научно - исследовательского проекта С1 Возможность изготовления высокотехнологичного композита с необходимыми свойствами С2 Использование нового метода изготовления композита снижает количество пор в материале С3 Экологически безопасное производство С4 Высокие технологические свойства материала С5 Применение для создания деталей сложных геометрических форм</p>	<p>Слабые стороны научно – исследовательского проекта Сл1. Высокие требования к исходным материалам для изготовления Сл2. Необходимость изготовления большего количества оборудования для промышленных нужд Сл3. Требования к расчету параметров для получения необходимых свойств</p>
<p>Возможности В1 Высокая потребность современных отраслей промышленности в новых материалах В2 Улучшение плотности самого композита В3 Возможность изготовления деталей, которые ранее изготавливались «классическими» методами и замена этих методов</p>		
<p>В4 Увеличение количества производимого композита и сокращение затрат на производство В5 Добавление возможных примесей для получения новых свойств</p>		

Угрозы У1 Наличие других исследовательских групп, занимающимися схожими разработками У2 Возможность сокращения бюджета исследования, за счет отданного предпочтения «классическим» проверенным методам.		
---	--	--

По завершению первого этапа SWOT – анализа были обозначены и сформулированы четыре необходимых области. Второй этап заключается в выявлении соответствия сильных и слабых сторон научно – исследовательского проекта внешним условиям окружающей среды. Анализ несоответствий поможет привнести необходимые корректировки в научно – исследовательский проект.

Таблица 4.4 – Интерактивная матрица сильных сторон с учетом возможностей

Сильные стороны проекта						
Возможности проекта		C1	C2	C3	C4	C5
	B1	+	+	+	+	+
	B2	+	-	-	+	+
	B3	+	-	-	+	+
	B4	+	-	-	-	-
	B5	+	-	-	+	-

При проведении анализа таблицы учета сильных сторон и возможностей, можно выделить следующие коррелирующие комбинации: B1C1C2C3C4C5, B2C1C3C4C5, B3C1C4C5, B4C1, B5C1C4C5.

Результаты SWOT-анализа учитываются при разработке структуры работ, выполняемых в рамках научно-исследовательского проекта.

Таблица 4.5 – Интерактивная матрица слабых сторон с учетом возможностей

Слабые стороны проекта				
Возможности проекта		Сл1	Сл2	Сл3
	B1	+	+	+
	B2	+	-	+
	B3	-	+	-
	B4	-	-	-
	B5	-	-	-

При проведении анализа таблицы учета слабых сторон и возможностей, можно выделить следующие коррелирующие комбинации: В1Сл1Сл2Сл3, В2Сл1Сл3, В3Сл2.

Таблица 4.6 – Интерактивная матрица сильных сторон с учетом угроз

Сильные стороны проекта						
Угрозы проекта		С1	С2	С3	С4	С5
	У1	+	-	+	-	-
	У2	+	-	-	-	-

При проведении анализа таблицы учета «сильных сторон проекта с учетом угроз», выявлены следующие комбинации: У1С1, У1С3, У2С1.

Таблица 4.7 – Интерактивная матрица слабых сторон с учетом угроз

Слабые стороны проекта				
Угрозы проекта		Сл1	Сл2	Сл3
	У1	+	+	-
	У2	+	+	-

При реализации 3 этапа в результате рассмотрения 4 матриц составляется окончательная матрица SWOT – анализа.

Таблица 4.8 – Итоговая матрица SWOT - анализа

	<p>Сильные стороны научно - исследовательского проекта</p> <p>С1 Возможность изготовления высокотехнологичного композита с необходимыми свойствами</p> <p>С2 Использование нового метода изготовления композита снижает количество пор в материале</p> <p>С3 Экологически безопасное производство</p> <p>С4 Высокие технологические свойства материала</p> <p>С5 Применение для создания деталей сложных геометрических форм</p>	<p>Слабые стороны научно – исследовательского проекта</p> <p>Сл1. Высокие требования к исходным материалам для изготовления</p> <p>Сл2. Необходимость изготовления большего количества оборудования для промышленных нужд</p> <p>Сл3. Требования к расчету параметров для получения необходимых свойств</p>
<p>Возможности</p> <p>В1 Высокая потребность современных отраслей промышленности в новых материалах</p> <p>В2 Улучшение плотности самого композита</p> <p>В3 Возможность изготовления деталей, которые ранее изготавливались «классическими» методами и замена этих методов</p> <p>В4 Увеличение количества производимого композита и сокращение затрат на производство</p> <p>В5 Добавление возможных примесей для получения новых свойств</p>	<p>В1С1С2С3С4С5 – современные производства нуждаются в создание новых, более совершенных композитов. К данным композитам также предъявляется ряд серьезных требований, которые согласуются с сильными сторонами проекта.</p> <p>В2С4С4 – увеличение плотности позитивно сказывается на параметрах материала при применении в механических конструкциях</p> <p>В3С1С5 – данная возможность появляется благодаря лучшим свойствам материала, что позволяет занять область рынка, которая раньше принадлежала другим методам.</p> <p>В4С1 – для достижения свойств материала, полученного методом искрового разряда, другим производствам требуется затратить большее количество ресурсов.</p> <p>В5С1С4 – возможности исходного композита открывают широкую область возможных модификаций.</p>	<p>В1Сл1Сл2Сл3 - к композиционным материалам предъявляются высокие требования. Однако из – за новизны метода требуется создание производственной базы для создания больших партий композита.</p> <p>В2Сл1Сл3 – подобные возможности открываются только при условии закрепления исходного композитного материала на рынке.</p> <p>В3Сл2 – Нежелание или невозможность переоснащения может помешать выпуску нового композита.</p>
<p>Угрозы</p> <p>У1 Наличие других исследовательских</p>	<p>У1С1С3 – наличие конкурирующих научных групп, занимающимися схожей тематикой создает угрозы того,</p>	<p>У1Сл1Сл2 – подобные исследования требуют постоянного</p>

<p>групп, занимающихся схожими разработками U2 Отдайте предпочтение «классическим» проверенным методам, сократите бюджет исследований</p>	<p>что будет создан композит со свойствами лучшим, чем у данного U2C1 – угроза непринятия нового метода за счет длительного существования старого, консервативного подхода к производству</p>	<p>финансирования на ранних этапах U2C1Cл2 – Совершенствование данного метода перед консервативными</p>
---	---	---

В результате рассмотрения матрицы SWOT – анализа можно сделать вывод, что основные угрозы проекту следует ожидать со стороны внешнего вида. Он имеет ряд преимуществ, связанных с физическими свойствами заданного композита, что позволяет ему занять место на рынке по сравнению с другими. Однако новое производство требует нового дорогостоящего оборудования для его производства, что и является основной трудностью его реализации.

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 5.

Таблица 4.9 – Распределение исполнителей и этапы выполняемых работ

Основные этапы	№ раб	Содержание работ	Должность исполнителя
Разработка технического задания	1	Составление и утверждение технического задания	Руководитель
Выбор направления исследований	2	Подбор и изучение материалов по теме	Руководитель, инженер
	3	Проведение патентных исследований	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 обоснований	Руководитель, инженер
	7	Составление порядка эксперимента, выбор технических режимов	Руководитель, инженер, сотрудник-техник
	8	Изготовление исследуемых образцов	Инженер
	9	Подготовка исследуемых образцов к проведению экспериментов	Инженер
	10	Проведение экспериментов	Руководитель, инженер, сотрудник-техник
	11	Сопоставление результатов экспериментов с теоретическими исследованиями и подготовка к участию в конференции	Руководитель, инженер
Обобщение и оценка результатов	12	Оценка эффективности полученных результатов и участие в конференции	Руководитель, лаборант
	13	Определение целесообразности проведения ОКР	Руководитель, лаборант

Данная таблица отображает вклад каждого участника исследовательской работы. Наибольшая часть работы приходится на инженера.

4.3.1 Определение трудоемкости выполнения работ

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

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

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

где $t_{ож}$ – ожидаемая трудоёмкость выполнения работы, чел.дн.; t_{\min} – минимально возможная трудоёмкость выполнения работы, чел.дн.; t_{\max} – максимально возможная трудоёмкость выполнения работы, чел.-дн. Оценка трудоёмкости выполнения научного исследования для научного руководителя:

$$t_{ож} = \frac{3 \cdot 43 + 2 \cdot 91}{5} = 62.2 \text{ чел.-дн.}$$

Трудоёмкость выполнения научного исследования для сотрудника – техника:

$$t_{ож} = \frac{3 \cdot 6 + 2 \cdot 18}{5} = 10.8 \text{ чел.-дн.}$$

Трудоёмкость выполнения научного исследования для лаборанта:

$$t_{ож} = \frac{3 \cdot 61 + 2 \cdot 129}{5} = 88.2 \text{ чел.-дн.}$$

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

$$T_{p_i} = \frac{t_{ож_i}}{Ч_i}, \quad (4.3)$$

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

Произведем длительно работ в рабочих днях.

Расчёт продолжительности работы выполнения научного исследования для научного руководителя:

$$T_{pд} = \frac{t_{ож}}{K_{вн}} \cdot K_{д} = \frac{62.2 \text{ чел.-дн.}}{1} \cdot 1 = 62.2 \text{ раб.дни}$$

Продолжительность работы выполнения научного исследования для сотрудника-техника:

$$T_{РД} = \frac{10.8 \text{ чел.} - \text{дн.}}{1} \cdot 1 = 10.8 \text{ раб.дни}$$

Продолжительность работы выполнения научного исследования для лаборанта:

$$T_{РД} = \frac{88.2 \text{ чел.} - \text{дн.}}{1} \cdot 1 = 88.2 \text{ раб.дни}$$

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

$$T_{КД} = T_{РД} \cdot T_{К}, \quad (4.4)$$

где $T_{КД}$ – продолжительность выполнения этапа в календарных днях; $T_{К}$ – коэффициент календарности, определяющийся выражением 4.4.

$$T_{К} = \frac{T_{кал}}{T_{кал} - T_{ВД} - T_{ПД}}, \quad (4.5)$$

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

Рассчитаем коэффициент календарности по формуле 4.5:

$$T_{К} = \frac{365}{365 - 66} = 1.22$$

Построим таблицу по результатам расчётов, в которой укажем трудоёмкости работ, название работы, а также укажем длительность работ в рабочих и календарных днях, таблица 4.10

Таблица 4.10. Временные показатели проведения научного исследования

Название работы	Трудоёмкость работ									Длит. работ в раб. дни Трд			Длит. работ в кален. дни Ткд		
	t _{min} , чел.-дн			t _{max} , чел.-дн			t _{ож} , чел.-дн			НР	СТ	ЛАБ	НР	СТ	ЛАБ
	НР	СТ	ЛАБ	НР	СТ	ЛАБ	НР	СТ	ЛАБ						
Составление и утверждение технического задания	2	-	-	4	-	-	2.8	-	-	2.8	-	-	3.4	-	-
Подбор и изучение материалов по теме	10	-	10	21	-	30	14.4	-	18	14.4	-	18	17.6	-	21.96
Проведение патентных исследований	5	-	7	8	-	15	6.2	-	10.2	6.2	-	10.2	7.6	-	12.4
Выбор направления исследований	3	-	5	4	-	7	3.4	-	5.8	3.4	-	5.8	4.2	-	7.1
Календарное планирование работ по теме	2	-	3	3	-	4	2.4	-	3.4	2.4	-	3.4	2.9	-	4.2
Проведение теоретических расчетов и обоснований	4	-	7	6	-	10	4.8	-	8.2	4.8	-	8.2	5.9	-	10
Составление порядка эксперимента, выбор технических режимов	1	1	2	3	3	4	1.8	1.8	2.8	1.8	1.8	2.8	2.2	2.2	3.4
Изготовление исследуемых образцов	-	-	2	-	-	3	-	-	2.4	-	-	2.4	-	-	2.9
Подготовка образцов к проведению экспериментов	-	-	7	-	-	12	-	-	9	-	-	9	-	-	11
Проведение экспериментов	5	5	5	15	15	15	9	9	9	9	9	9	11	11	11
Сопоставление результатов экспериментов с теоретическими исследованиями; подготовка к конференции*	5	-	7	10	-	12	7	-	9	7	-	9	8.5	-	11
Оценка эффективности полученных результатов; участие в конференции**	3	-	3	10	-	10	5.8	-	5.8	5.8	-	5.8	7.1	-	7.1
Определение целесообразности проведения ОКР	3	-	3	7	-	7	4.6	-	4.6	4.6	-	4.6	5.6	-	5.6
Итого	43	6	61	91	18	129	62.2	10.8	88.2	62.2	10.8	88.2	75.9	13.2	107.6

На основе таблицы 6, построим календарный план-график. График построим для максимального по длительности исполнения работ в рамках научно-исследовательского проекта, с разбивкой по месяцам и декадам за период времени дипломирования. Отметим области в зависимости от исполнителей, ответственных за конкретную работу, таблица 4.11.

Таблица 4.11 – Календарный план-график (график Ганта) проведения НИОКР

№ работ	Вид работ	Исполнители	Т _{кi} , кал. дн.	Продолжительность выполнения работ														
				январь	февраль			март			апрель			май			июнь	
				3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2
1	Составление и утверждение технического задания	Руководитель темы	4.88															
2	Подбор и изучение материалов по теме	Руководитель	25.6															
		Инженер	36.6															
3	Проведение патентных исследований	Руководитель	9.8															
		Инженер	18.3															
4	Выбор направления исследований	Руководитель	4.9															
		Инженер	8.5															
5	Календарное планирование работ по теме	Руководитель	3.7															
		Инженер	4.9															
6	Проведение теоретических расчетов и обоснований	Руководитель	7.3															
		Инженер	12.2															
7	Составление порядка	Руководитель	3.7															
		Инженер	4.9															

	эксперимента, выбор технических режимов	Сотрудник-техник	3.7	■															
8	Изготовление исследуемых образцов	Инженер	3.7			■													
9	Построение 3Д моделей	Инженер	14.6		■														
10	Проведение экспериментов	Руководитель	18.3																
		Инженер	18.3																
		Сотрудник-техник	18.3																
11	Сопоставление результатов экспериментов с теоретическими исследованиями;*	Руководитель	12.2																
		Инженер)	14.6																
12	Оценка эффективности полученных результатов;**	Руководитель	12.2																
		Инженер	12.2																
13	Определение целесообразности проведения ОКР	Руководитель	8.5																
		Инженер	8.5																

■ - Руководитель темы ■ - Инженер ■ - Сотрудник-техник

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

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

4.4 Бюджет научного исследования

4.4.1 Расчет материальных затрат НИИ

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

В статью расходов входят затраты на приобретение материалов, комплектующих изделий, необходимых для выполнения работ по данному научному исследованию. В таблице 4.12 приведены расходы по данной статье.

Таблица 4.12 – Сырье, материалы, комплектующие изделия

Наименование	Марка, размер	Кол-во	Цена за единицу, руб.	Сумма, руб.
Al порошок	кг	1	2165	2165
Fe порошок	кг	1	1445	1445
Канцелярские товары	шт.			1900
Спирт	500 мл	2	400	800
шлифовальный инструмент	Число	1	670	670
Халат	М	1	750	750
Набор лабораторных инструментов	Малый	1	1300	1300
пробоотборная трубка	2ml	200	400	400
Всего за материалы				9430
Транспортно-заготовительные расходы (3-5%)				377.2
Итого по статье				9807.2

Согласно полученным данным, порошковое сырье имеет максимум.

4.4.2 Расчет затрат на специальное оборудование для научных работ

В рамках выполнения исследования использовалось имеющееся в собственности XRD, оборудование SEM, и закупка дополнительного специального оборудования не производилась. В таком случае затраты на специальное оборудование отсутствуют. Однако в ходе эксплуатации оборудования средства были затрачены в соответствии с амортизационными отчислениями. Расчет амортизации производится на находящееся в использовании оборудование. В итоговую стоимость проекта входят отчисления на амортизацию за время использования оборудования в статье накладных расходов.

$$H_A = \frac{1}{n}, \quad (4.6)$$

где n – срок полезного использования в количестве лет.

Амортизация:

$$A_M = \sum \frac{I \cdot H_A}{12}$$

где I – итоговая сумма, тыс. руб.; – время использования, мес. M

Таблица 4.13 – Амортизационные расходы

№	Наименование оборудования	Ст-ть, руб.	Срок полезного исп., лет	H_A , %	Время исп., мес.	Амортизационные расходы, руб
2	DX-2700B XRD	8897550	7	14	1	103805
3	ZHF-500Электродуговая печь для получения фуллеренов	1186340	10	10	2	19772
4	HTACHB Regulus8100 SEM & BRUKER QUANTAX 200 EDS	593170000	10	10	0,1	494308
Итого:						617885

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:

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

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

Основная заработная плата одного работника:

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

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

Среднедневная заработная плата рассчитывалась по формуле:

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

где Z_m – месячный должностной оклад работника, руб.; M – количество месяцев работы без отпуска в течение года; F_d – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн.

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_m = Z_{тс} \cdot k_p \quad (4.10)$$

Здесь $Z_{тс}$ – заработная плата по тарифной ставке, руб.;

В таблице 4.14 представлен годовой баланс рабочего времени для 6-дневной рабочей недели, в таблице 4.15 представлен расчет основной заработной платы.

Таблица 4.14 – Баланс рабочего времени

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

Таблица 4.15 – Расчёт основной заработной платы

Исполнители	Оклад, руб/мес	Среднедневная ставка, руб/раб. день	Затраты времени, раб. дни	Фонд, з/платы, руб
Научный руководитель	39000	1695.65	62.2	133864.5
Сотрудник-техник	17000	938.12	10.8	10131.72
Инженер	17000	938.12	88.2	82742.4
Итого				226738.62

По данным таблицы 4.15 получены данные по затратам на заработную плату сотрудников за весь период ВКР.

4.4.4 Дополнительная заработная плата

Расчет дополнительной заработной платы ведется по следующей формуле:

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

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

Дополнительная заработная плата руководителя:

$$Z_{доп} = 17402.38 \text{ руб.}$$

Дополнительная заработная плата сотрудника-техника:

$$Z_{доп} = 1317.12 \text{ руб.}$$

Дополнительная заработная плата инженера:

$$Z_{доп} = 10756.51 \text{ руб.}$$

Суммарная дополнительная заработная плата равна 29475.96 рубль.

4.4.5 Отчисления во внебюджетные фонды

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

Отчисления во внебюджетные фонды:

$$Z_{внеб.} = k_{внеб.} \cdot Z_{осн.} = 226738.62 \cdot 0.3 \approx 68021.58 \text{ руб} \quad (4.12)$$

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

4.4.6 Расчет затрат на электроэнергию

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

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

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

Затраты на электроэнергию для технологических целей приведены в таблице 4.16.

Таблица 4.16 – Затраты на электроэнергию

Наименование оборудования	Время работы оборудования	Потребляемая мощность $P_{об.}$, кВт	Затраты $C_{эл.об.}$, руб.
Персональный компьютер	646	0.3	1113,96
Комплексная технологическая установка	50	20	5350
Итого			6463,96

4.4.7 Расчет затрат на научные и производственные командировки и накладные расходы

Затраты на научные и производственные командировки исполнителей определяются в соответствии с планом выполнения темы и с учетом действующих норм командировочных расходов различного вида и транспортных тарифов, а также организационных взносов на конференции. Расчеты по данному пункту представлены в таблице 4.17.

Таблица 4.17 – Расчет на научные и производственные командировки

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

Величина накладных расходов определяется по следующей формуле:

$$Z_{\text{накл}} = k_{\text{пр}} \cdot (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}} + Z_{\text{внеб}}) \quad (4.14)$$

$$Z_{\text{накл}} = 0.16 * (226738.62 + 68021.58 + 29475.96) = 51877.78 \text{ руб}$$

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

4.4.8 Формирование бюджета затрат НИИ

Расчет бюджета затрат в результате проведения НИИ представлен в таблице 4.18.

Таблица 4.18 – Бюджет затрат

Наименование статьи	Сумма, руб
Материальные затраты	9807.2
Амортизация	617885
Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	226738.62
Затраты по доп. заработной плате исполнителей темы	29475.96
Отчисления во внебюджетные фонды	68021.58
Затраты на электроэнергию	6463.96
Затраты на научные производственные командировки	1500
Накладные расходы	51877.78
Бюджет затрат	1011770.1

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:

$$I_{\text{ФИНР}}^{\text{ИСП}i} = \frac{\Phi_{Pi}}{\Phi_{\text{max}}}, \quad (4.15)$$

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:

$$I_{pi} = \sum a_i \cdot b_i, \quad (4.16)$$

В таблице 4.19 представлена сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта. Данный проект сравнивается с методикой качественного анализа материалов, заложенной в программе как базовая.

Характеристики имеют схожие критерии, так как методики реализованы для одного прибора. Каждая из представленных методик реализована для определённой задачи.

Пример расчёта интегрального показателя ресурсоэффективности:

$$I_p = 0.25 \cdot 5 + 0.15 \cdot 4 + 0.2 \cdot 4 + 0.2 \cdot 4 + 0.2 \cdot 5 = 4.45$$

Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения разработки определяется на основании интегрального показателя

ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по следующей формуле:

$$I_{исп} = \frac{I_{pi}}{I_{финр}}, \quad (4.17)$$

Таблица 4.19 – Сравнительная оценка характеристик

Критерии	Весовой коэффициент параметра	Данный проект	Базовая методика качественного анализа материалов
Способствует росту производительности труда	0.25	5	5
Соответствует требованиям потребителей	0.15	4	4
Энергосбережение	0.2	4	3
Надежность	0.2	4	4
Материалоемкость	0.2	5	4
Интегральный показатель ресурсоэффективности		4.45	4.25

Сравнительная эффективность проекта определяется по следующей формуле:

$$\mathcal{E}_{ср} = \frac{I_{д.п.}}{I_{исп}}, \quad (4.18)$$

В таблице 4.20 представлена сравнительная эффективность данного проекта с базовой методикой качественного анализа материалов.

Таблица 4.20 – Сравнительная эффективность

Показатели	Данный проект	Базовая методика качественного анализа материалов
Интегральный финансовый показатель	1	1
Интегральный показатель ресурсоэффективности	4.45	4.25
Интегральный показатель эффективности	4.45	4.25
Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1.05	0.95

Анализируя данные таблицы 4.20, разработанная методика эффективнее стандартной. Традиционная оценка экономической эффективности полученных результатов невозможны, т.к. они носят чисто научный характер.

Выводы по главе

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

При планировании научно-исследовательской работы был произведен подсчет бюджета исследования по материальным затратам (9807 руб.), затратам на специальное оборудование для научной работы (617885 руб.), затратам по основной заработной плате исполнителей тем (226738 руб.), затратам по дополнительной заработной плате (29475), затратам на научные и производственные командировки (1500 руб.), отчислениям во внебюджетные фонды (68022), затратам на электроэнергию (6464 руб.) и накладным расходам (51878 руб.). Всего бюджет составил 1011770 руб.

Проведена оценка результатов ресурсоэффективности, которая составила 4,45 из 5, что говорит о хорошей эффективности реализации технического проекта.

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

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»**

Студенту:

Группа	ФИО
150Б91	Чэнь Исинь

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

Тема ВКР:

Особенности образования комплексов гелий-вакансия в альфа цирконии: расчеты из первых принципов	
Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
<p>Введение</p> <ul style="list-style-type: none"> – Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика) и области его применения. – Описание рабочей зоны (рабочего места) при разработке проектного решения/при эксплуатации 	<p><i>Объект исследования:</i> Особенности образования комплексов гелий-вакансия в альфа цирконии: расчеты из первых принципов.</p> <p><i>Область применения:</i> ядерная энергетика.</p> <p><i>Рабочая зона:</i> Исследовательский центр вычислительного программного обеспечения и методов (Цзилинский университет, КНР).</p> <p><i>Размеры помещения:</i> 8 м x 5 м x 3 м.</p> <p><i>Количество и наименование оборудования рабочей зоны:</i> Компьютеры.</p> <p><i>Рабочие процессы, связанные с объектом исследования, осуществляющиеся в рабочей зоне:</i> свойства электронной структуры альфа-циркония, а также механические свойства</p>
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
<p>1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности при эксплуатации:</p> <ul style="list-style-type: none"> – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны. 	<p>Специальные: должностная инструкция работника. Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 № 197-ФЗ (ред. от 02.12.2019). ГОСТ 12.2.032-78. ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования (дата введения: 01.01.1979). ГОСТ 12.2.033-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ стоя. Общие эргономические требования (дата введения: 01.01.1979).</p>
<p>2. Производственная безопасность при эксплуатации:</p> <ul style="list-style-type: none"> – Анализ выявленных вредных и опасных производственных факторов 	<p><i>Вредные производственные факторы:</i> шум на рабочем месте, отклонение показателей микроклимата, недостаточная освещенность рабочей зоны.</p> <p><i>Опасные производственные факторы:</i> электрический ток.</p> <p><i>Требуемые средства коллективной и индивидуальной защиты от выявленных факторов:</i> противозумные наушники, вентиляция, кондиционирование воздуха, перчатки, респираторы.</p>
<p>3. Экологическая безопасность при эксплуатации</p>	<p><i>Воздействие на селитебную зону:</i> отсутствует.</p> <p><i>Воздействие на литосферу:</i> отсутствует.</p> <p><i>Воздействие на гидросферу:</i> отсутствует.</p> <p>остатки МХепе, растворенного в сульфите натрия.</p> <p><i>Воздействие на атмосферу:</i> отсутствует. .</p>
<p>4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях при эксплуатации</p>	<p><i>Возможные ЧС при разработке и эксплуатации проектируемого решения:</i> Поражение электрическим током;</p> <p><i>Наиболее типичная ЧС:</i> Поражение электрическим током;</p>
Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	

Задание выдал консультант:

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

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б91	Чэнь Исинь		

5 СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ

Исследование связано с комплексами гелий–вакансия в цирконии. Исследования проводятся в области ядерной энергетики. Размеры помещения: высота 8 м, ширина 5 м, длина 3 м, площадь 120 м³. Рабочее оборудование - компьютер.

В ходе исследования была проведена следующая работа: с помощью программы расчета из первых принципов была изучена электронная структура, а также механические свойства альфа-цирконии в присутствии гелий-вакансионных комплексов.

Для оценки степени безопасности исследований по расчетам первых принципов природы в данном разделе диссертации необходимо было рассмотреть правовые и организационные аспекты безопасности; экологическую безопасность научного проекта, а также безопасность в случае возникновения чрезвычайных ситуаций.

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 [48].

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 [48], в локальных нормативных актах, в коллективном договоре и трудовом договоре.

5.1.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя

Рабочее место находится в аудитории В211 Исследовательского центра вычислительного программного обеспечения и методов (Цзилинский университет, КНР), кабинет представляет собой помещение размером 8 м на 5 м, высотой 3 м с 2 окнами (с видимым светом), в лаборатории постоянно находятся 12 человек.

При проведении лабораторных работ работник лаборатории находится в положении стоя или сидя. Следовательно, при организации рабочего места лаборанта требуется соблюдение нормативов ГОСТ 12.2.032-78 [49] и ГОСТ 12.2.033-78 [50].

Лаборатория оснащена 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

Исследование выполнялось в Исследовательского центра вычислительного программного обеспечения и методов (Цзилинский университет, КНР) (ауд. В211 2 корпус). Для проведения исследования использовался компьютер.

Для идентификации потенциальных факторов использован ГОСТ 12.0.003-2015 [51]. 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. Превышение уровня шума		+		ГОСТ 12.1.003-2014 [52] СН 2.2.4/2.1.8.562-96 [53] ГОСТ 12.1.029-80. ССБТ [54]
2. Отклонение показателей микроклимата	+	+		ГОСТ 12.1.005-88 [55] ГОСТ 12.1.007-76. ССБТ [56] СанПиН 1.2.3685-21 [57] ГОСТ 12.4.011-89 [58]
3. Повышенное значение напряжения в электрической цепи, замыкание которой может произойти через тело человека	+	+	+	ГОСТ 12.1.038-82 [59] ГОСТ Р 12.1.019-2009 [60]
4. Недостаточная освещенность рабочей зоны	+	+		СанПиН 1.2.3685-21 [57]

5.2.1 Анализ опасных и вредных производственных факторов

5.2.1.1 Анализ показателей шума

Гигиенические нормативы по шуму устанавливаются национальным законодательством [52].

В таблице 5.2 показаны допустимые уровни шума, представленные в Санитарных нормах [53].

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 инженера в лаборатории 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. [61].

Показатели уровня шума в лаборатории соответствуют нормативам.

При превышении норм по шуму нужно принимать меры по снижению уровня шума и защите работников от его воздействия в соответствии с [54], используя в том числе такие меры, как:

- применение противошумных наушников;
- оборудование акустических экранов;

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

5.2.1.2 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 [55].

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.

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							
	постоянных	непостоянных	постоянных	непостоянных					
Холодный	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

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].

В лаборатории существует опасность, что скорость движения воздуха недостаточна, и исследователи не могут работать в этой среде в течение длительного периода времени.

На предприятиях, производственная деятельность которых связана с вредными веществами, должны быть разработаны нормативно-технические документы по безопасности труда при производстве, применении и хранении вредных веществ, а также выполнены комплексы организационно-технических, санитарно-гигиенических и медико-биологических мероприятий.

Необходимо аккуратно работать с порошками, при проветривании помещения, необходимо убирать порошки от прямого воздействия поступающего воздуха. Уменьшению запыленности помещений могут служить также следующие меры: соблюдение герметичности оборудования; недопущение скопления оседающей пыли на оборудовании; ежедневная

текущая очистка помещений и регулярная генеральная уборка пыли с использованием централизованной системы пневмоуборки. Для предотвращения попадания вредных веществ в организм работника рекомендуется использовать респираторы, противогазы, маски; очки; перчатки; специальная противопылевая одежда; защитные пасты и мази [58]. Контролем содержания вредных примесей в воздухе и на рабочих местах занимается санитарная лаборатория.

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 [57].

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

В лабораториях материаловедения требуется выполнение санитарно-гигиенических, медико-биологических и организационно-технических мероприятий:

- вентиляция и очистка воздуха;
- кондиционирование воздуха;
- локализация вредных факторов;
- отопление;
- автоматический контроль и сигнализация;
- дезодорация воздуха;
- использование оборудования и препаратов для дезинфекции, оградительных устройств, знаков безопасности;
- применение перчаток и респираторов в качестве средств защиты рук и органов дыхания [58].

5.2.1.3 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 [59].

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].

Электрический ток оказывает на человека следующие виды воздействия:

1) термическое – приводит к ожогам, нагреву кровеносных сосудов и других органов, вследствие чего в них появляются функциональные расстройства;

2) электролитическое – для электролитического действия тока характерно разложение крови и других органических жидкостей, что приводит к нарушениям их физико-химического состава;

3) механическое – повреждения (разрыв, расслоение и др.) различных тканей организма в результате электродинамического эффекта;

4) биологическое – может являться причиной нарушения и полного прекращения деятельности органов дыхания и кровообращения [65].

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].

5.2.1.4 Анализ показателей освещенности рабочей зоны

Нормы освещения лабораторий по [57] представлены в таблице 5.5.

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

Рабочая поверхность и плоскость нормирования КЕО и освещенности (Г – горизонтальная, В – вертикальная) и высота плоскости над полом, м	Естественное освещение КЕО e_n , %		Совмещенное освещение КЕО e_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 освещенности, КЕО e_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 лаборатории необходимо верно выбирать вид освещения, количество и расположение ламп, тип осветительных приборов. Лаборатория должна быть освещена верхним общим освещением.

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

5.3 Экологическая безопасность

В процессе проведения исследования выполняли анализ электронной структуры и механических свойств альфа-циркония с вакансиями-примесями гелия.

Защита атмосферы. Одним из возможных вредных факторов для окружающей среды при проведении исследования может быть нежелательное испарение используемых продуктов. Для проектирования электрокатализаторов на основе альфа-циркония с вакансиями-примесями гелия, работающих на электролиз воды, использовали программный пакет VASP, основанный на теории функционала плотности. Средства защиты атмосферного воздуха от выбросов включают использование энергоэффективных компьютеров и электронных устройств, регулярное обслуживание и очистку, снижение потребления энергии и выбросов; использование возобновляемых источников энергии, таких как солнечная и ветровая энергия, вместо ископаемого топлива, снижение углеродного

следа. Испарения, появляющиеся при проведении исследования, не превышают ПДК [67].

Защита гидросферы. Для исследования влияния атомов гелия на положение и стабильность в цирконии, а также на электронную структуру и механические свойства системы с вакансиями, примесями гелия и вакансиями-примесями гелия, использовали различные концентрации и конфигурации атомов гелия в цирконии. Для этого рассчитывали энергию образования, барьер диффузии, распределение зарядовой плотности, плотность состояний электронов, упругие константы и другие физические величины. Для очистки сточных вод от органических растворителей используют методы экстракции, ректификации, абсорбция, обратный осмос и ультрафильтрация и др. Превышение ПДК может оказать пагубное влияние на употребляющих такую воду людей, скот и растения. Концентрация в воде отходов, образовавшихся в процессе исследования, настолько мала, что вреда окружающей среде не принесет.

Защита литосферы. Попадая в литосферу, порошковые материалы могут менять микробиологическую и ферментативную активность почв, активно вступая во взаимодействие с живыми организмами, обитающими в этой среде. Утилизация отходов должна осуществляться в соответствии с действующим законодательством. Твердые отходы, а также порошковые системы собираются в специальные сборники и увозятся для уничтожения. Утилизация одноразовых средств индивидуальной защиты должна проходить в специальные герметичные контейнеры.

Таким образом, можно сказать, что в работе применены малоотходные технологии, исключая попадание в атмосферу, гидросферу и литосферу вредных веществ в количестве, превышающем ПДН.

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.

В лаборатории наиболее вероятно возникновение чрезвычайных ситуаций (ЧС) техногенного характера. ЧС техногенного характера называются ситуации, которые возникают в результате производственных аварий и катастроф на объектах; пожаров, взрывов на объектах; загрязнения атмосферы отравляющими веществами. Следствием ЧС техногенного характера могут быть внезапное обрушение зданий и сооружений, нарушение работы энергетических сетей, коммунального жизнеобеспечения, очистных сооружений, технологических линий и т. д.

В случае возникновения ЧС на предприятии, в лаборатории необходимо выполнить следующий комплекс мероприятий: 1) эвакуация; 2) укрытие людей в защитных сооружениях; 3) обеспечение индивидуальными средствами защиты; 4) организация медицинской помощи пострадавшим.

В качестве наиболее распространенной вероятной ЧС в лаборатории выделяют пожар.

Помещение лаборатории по степени пожароопасности относится к классу П-П, так как в нем т. к. в нём присутствует выделение пыли и волокон во взвешенном состоянии [68].

Причины возникновения пожара могут быть электрического и неэлектрического характера.

Причины возникновения пожара электрического характера: короткое замыкание, перегрузки по току, искрение и электрические дуги, статическое электричество и т. п.

Причины возникновения пожара неэлектрического характера: халатное неосторожное обращение с огнем (курение, оставленные без присмотра нагревательные приборы, использование открытого огня); самовоспламенение и самовозгорание веществ.

Для устранения причин возникновения пожаров в помещении лаборатории должны проводиться следующие мероприятия: а) сотрудникам лаборатории необходимо пройти противопожарный инструктаж; б) необходимо знание сотрудниками расположения средств пожаротушения и умение ими пользоваться; в) требуется обеспечить правильный тепловой и электрический режим работы оборудования; г) пожарный инвентарь и первичные средства пожаротушения необходимо содержать в исправном состоянии и располагать на видном и легко доступном месте.

Если в организации возник пожар, то после его ликвидации определяется возможность дальнейшего использования оборудования и имеющихся коммуникаций. В лаборатории исследовательское оборудование, трубопроводы, электрооборудование проверяются на соответствие их состояния нормам пожарной безопасности. В случае отсутствия повреждений можно продолжать работу [69].

Выводы по разделу

В результате проведенных исследований в рамках раздела «Социальная ответственность» были изучены правовые нормы трудового законодательства при проведении исследования свойств электрокатализатора на основе Мхене, работающих на электролиз воды.

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 лаборатории. Для предотвращения чрезвычайных ситуаций были разработаны превентивные меры, а также разработаны процедуры для обработки чрезвычайных ситуаций. Таким образом, при проведении лабораторных исследований могут применяться требования и меры, указанные в работе, а также порядок действий при чрезвычайных ситуациях также может быть задействован на производстве.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе были изучены особенности взаимодействия гелия и гелий-вакансионных комплексов с цирконием. Кратко описаны методы и приближения, используемые для изучения атомной и электронной структуры твердых тел в рамках теории функционала электронной плотности. Были проведены первопринципные исследования электронной структуры и упругих характеристик чистого α -Zr и твердого раствора He в Zr с вакансиями и без них (концентрация гелия и вакансий около 6 ат.%). Была рассчитана энергии внедрения гелия в междоузлие и в вакансию в решетке α -циркония. Проанализирована плотность электронных состояний и орбитальные заселенности Гамильтониана в кристалле (СОНР) для чистого циркония и систем Zr-He и Zr-vac-He.

В результате было выявлено, что наименьшие энергии внедрения наблюдаются для междоузельного атома He – в базальном октаэдрическом междоузлии, а для атома He в окрестностях вакансии – в тетраэдрическом междоузлии. Показано, что в окрестности вакансии энергии внедрения гелия значительно ниже чем в междоузлиях решетки циркония без вакансии, то есть гелию энергетически выгодно образовывать комплексы гелий-вакансия в решетке циркония.

Анализ электронной структуры системы Zr-He с вакансиями и без них показал, что вакансия оказывает слабое влияние на плотность электронных состояний, а примесные атомы He значительно изменяют плотность электронных состояний, образуя также плоскую энергетическую зону 1s состояний при энергиях ~ 17 эВ ниже уровня Ферми для систем без вакансий и при ~ 12 эВ ниже уровня Ферми для системы Zr-He с атомом гелия в центре вакансии. Когда атом гелия смещается из центра вакансии эта зона опускается по энергиям на ~ 2 эВ. Для системы Zr-He с вакансией вблизи уровня Ферми имеются высокие пики плотности электронных состояний с заметным вкладом

состояний гелия. В этой области значения $-CONP$ для гибризованных состояний Zr-He отрицательны, что соответствует формированию антисвязывающих гибризованных состояний у атомов He и Zr. Показано, что несмотря на более слабое антисвязывающее взаимодействие гибризованных состояний атомов He и Zr при формировании комплекса вакансии и гелий в ее центре, энергетически более выгодно расположение атома гелия в ближайшем к вакансии междоузлии, где помимо сильного антисвязывающего взаимодействия есть и сильное связывающее взаимодействие состояний атомов He и Zr. Установлено, что для системы Zr-He без вакансии, преимущественно антисвязывающий характер взаимодействия состояний Zr и He значительно повышает энергию внедрения гелия, по сравнению с его энергией внедрения в вакансию.

В работе выявлено, что присутствие вакансий в решетке α -циркония незначительно снижает модуль Юнга, модуль сдвига и объемный модуль, в то время как комплекс гелий-вакансия значительно занижает упругих характеристик циркония, способствуя образованию дислокаций и понижая сопротивление циркония к растягивающим и касательным напряжениям. Выявлено, что вакансии в решетке циркония практически не влияют на анизотропия модуля Юнга, а гелий-вакансионный комплекс ее значительно понижает.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Yan C. Effects of ion irradiation on microstructure and properties of zirconium alloys – A review / C. Yan, W. Rongshan, W. Yanli, W. Xitao, B. Guanghai // *Nuclear Engineering and Technology*. – 2015. – Vol. 47. – P. 323–331.
2. Воеводин В.Н. Конструкционные материалы ядерной энергетики – вызов 21 века // *Вопросы атомной науки и техники*. – 2007. – №7. – С. 10–22.
3. Chae S. Spectroscopic and microstructural characterization of 18 MeV He⁺ ions irradiated pure Al / S. Chae, Y. Kim, M. Rafique // *Optik*. – 2016. – Vol. 127. – P. 9152–9160.
4. Choi S.I. Radiation-induced dislocation and growth behavior of zirconium and zirconium alloys / S.I. Choi, J.H. Kim // *Nuclear Engineering and Technology*. – 2013. – Vol. 45. – P. 385–392.
5. Afzal N. Impact of variable energy hydrogen ions on structural and mechanical properties of Zircaloy-4 / N. Afzal, M. Rafique, A. Abbasi, M. Saleem, J. Lee, R. Ahmad // *Physica Scripta*. – 2018. – P. 115303.
6. Wang J. Modification of SRIM-calculated dose and injected ion profiles due to sputtering, injected ion buildup and void swelling / J. Wang, M. Toloczko, N. Bailey, F. Garner, J. Gigax, L. Shao // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B*. – 2016. – Vol. 387. – P. 20–28.
7. Zeng J. First-Principles Study of the Structural Stability and Electronic and Elastic Properties of Helium in α -Zirconium / J. Zeng, H. Zhang, X. Zhou, J. Liang, L. Sheng, S. Peng // *Advances in Condensed Matter Physics*. – 2014. – Vol. 2014. – P. 1–8.
8. Varvenne C. Vacancy clustering in zirconium: An atomic-scale study / C. Varvenne, O. Mackain, E. Clouet // *Acta Materialia*. – 2014. – Vol. 78. – P. 65–77.
9. Christensen M. Effect of alloying elements on the properties of Zr and the Zr–H system / M. Christensen, W. Wolf, C.M. Freeman, E. Wimmer, R.B. Adamson, L. Hallstadius, P.E. Cantonwine, E.V. Mader // *Journal of Nuclear Materials*. – 2014. – Vol. 445, No 1. – P. 241–250.

10. Lu H.-J. First-principles investigation on diffusion mechanism of alloying elements in dilute Zr alloys / H.-J. Lu, H. Wu, N. Zou, X.-G. Lu, Y.-L. He, D. Morgan // *Acta Materialia*. – 2018. – Vol. 154. – P. 161–171.
11. Yu J. Influence of Alloying Elements and Effect of Stress on Anisotropic Hydrogen Diffusion in Zr-Based Alloys Predicted by Accelerated Kinetic Monte Carlo Simulation / J. Yu, C. Jiang, Y. Zhang // *The Minerals, Metals & Materials Series*. – 2019. – P. 1815–1826.
12. Maxwell C.I. Molecular dynamics study of hydrogen-vacancy interactions in α -zirconium / C.I. Maxwell, E. Torre, J. Pencer // *Journal of Nuclear Materials*. – 2018. – Vol. – 511. – P. 341–352.
13. Yamanaka S. Effect of Oxygen on Hydrogen solubility in Zirconium / S. Yamanaka, T. Tanaka, M. Miyake // *Journal of Nuclear Materials*. – 1989. – Vol. 167. – P. 231–237.
14. Xu Y. Carbon diffusion in bulk hcp zirconium: A multi-scale approach / Y. Xu, J. Roques, C. Domain, E. Simoni // *Journal of Nuclear Materials*. – 2016. – Vol. 473. – P. 61–67.
15. Borodin V.A., Vladimirov P.V. Vacancies and interstitials in yttrium // *Journal of Physics Condensed Matter*. – 2019. – Vol. 31. – 185401.
16. Chen J. The Synergetic Effects of Hydrogen and Oxygen on the Strength and Ductility of Vanadium Alloys / J. Chen, Y. Xu, Y. Deng, L. Yang, S. Qiu // *Plasma Science & Technology*. – 2003. – Vol. 5. – P. 2051–2056.
17. Chen J.M. The hydrogen-induced ductility loss and strengthening of V-base alloys / J.M. Chen, S.Y. Qiu, T. Muroga, Y. Xu, T. Nagasaka, Y. Chen, Y. Deng, Z.Y. Xu // *Journal of Nuclear Materials*. – 2004. – Vol. 334. – P. 143–148.
18. Chen J. Effects of oxygen, hydrogen and neutron irradiation on the mechanical properties of several vanadium alloys / J. Chen, Q. Shaoyu, Y. Lin, X. Zengyu, D. Ying, X. Ying // *Journal of Nuclear Materials*. – 2002. – Vol. 302. – P. 135–142.
19. Xu Q. Dynamic simulation of multiplier effects of helium plasma and neutron irradiation on microstructural evolution in tungsten / Q. Xu, N. Yoshida, T.

Yoshiie // *Materials Transactions*. – 2005. – Vol. 46. – P. 1255–1260.

20. Xu Q. Coincidence Doppler broadening of positron annihilation radiation for detection of helium in irradiated Ni and Cu / Q. Xu, T. Ishizaki, K. Sato, T. Yoshiie, S. Nagata // *Materials Transactions*. – 2006. – Vol. 47. – P. 2885–2887.

21. Li M. Impact of heat treatment on tensile properties of 97W-2Ni-1Fe heavy alloy / D. Ruprecht, G. Kracker, T. Hoeschen, R. Neu // *Journal of Nuclear Materials*. – 2018. – Vol. 512. – P. 1–7.

22. Wang K. Study on Microstructure of He⁺-irradiation Induced Defects in Tungsten / K. Wang, L. Liu, A.H. Deng, L. Wang, Y. Wang, X.B. Lu, M. Gong // *Journal of Sichuan University (Natural Science Edition)*. – 2016. – Vol. 53, No 3. – P. 601-605.

23. Li Y.-H. Strain-induced variation of electronic structure of helium in tungsten and its effects on dissolution and diffusion / Y.H. Li, H.B. Zhou, S. Jin, Y. Zhang, G.H. Lu // *Computational Materials Science*. – 2014. – Vol. 95. – P. 536–539.

24. Hasegawa A. Property change mechanism in tungsten under neutron irradiation in various reactors / A. Hasegawa, T. Tanno, S. Nogami, M. Satou // *Journal of Nuclear Materials*. – 2011. – Vol. 417, No 1-3. – P. 491-494.

25. Wu Y. Progress in the study of the irradiation damage behavior of W and its alloys for nuclear fusion reactors // *Acta Metallica*. – 2019. – Vol. 55, No 08. – P. 939-950.

26. Lv G. Progress in the study of tokamak plasma-wall interactions in magnetic confinement fusion / G. Lv, G. Luo, J. Li // *China Advances in Materials*. – 2010. – Vol. 29, No 07. – P. 42-48.

27. Noda T. Evaluation of transmutation and low induced radioactivity and requirements for candidate structural materials // *Journal of Nuclear Materials*. – 1996. – Vol. 233. – P. 1475–1480.

28. Fujitsuka M. Effect of neutron irradiation on thermal diffusivity of tungsten-rhenium alloys // *Journal of Nuclear Materials*. – 2000. – Vol. 283. – P. 1148–1151.

29. Tanno T. Effects of transmutation elements on the microstructural evolution and electrical resistivity of neutron-irradiated tungsten / T. Tanno, A. Hasegawa, J.C. He, M. Fujiwara, S. Nogami, M. Satou, T. Shishido, K. Abe // Journal of Nuclear Materials. – 2009. – Vol. 386, No 88. – P. 218-221.

30. Hasegawa A. Neutron Irradiation Behavior of Tungsten / A. Hasegawa, M. Fukuda, T. Tanno, S. Nogami // Materials Transactions. – 2013. – Vol. 54. – P. 466–471.

31. Jiao Z. Microstructure characterization of W-Ni-Fe heavy alloys with optimized metallographic preparation method / Z. Jiao, R. Kang, Z. Dong, J. Guo // International Journal of Refractory Metals & Hard Materials. – 2019. – Vol. 80. – P. 114-122.

32. Tang D. Research on the preparation and shielding properties of W-Ni-Fe alloy material by liquid phase sintering / D. Tang, S. Zou, L. Yan // Powder Metallurgy. – 2018. – Vol 61, No 1. – P. 28-35.

33. Valles G. Temperature dependence of underdense nanostructure formation in tungsten under helium irradiation / G. Valles, I. Martin-Bragado, K. Nordlund, A. Lasa, C. Björkas, E. Safi, J.M. Perlado, A. Rivera // Journal of Nuclear Materials. – 2017. – Vol. 490. – P. 108-114.

34. Ullmaier H. The influence of helium on the bulk properties of fusion reactor structural materials // Nuclear Fusion. – 1984. – Vol. 24. – P. 1039–1083.

35. Kawano S. Effect of weld cycle and restraint stress on helium bubble formation in stainless steels // Journal of Nuclear Materials. – 2000. – Vol. 283–287. – P. 1220–1223.

36. Ishiyama Y. Post-irradiation annealing effects on microstructure and helium bubbles in neutron irradiated type 304 stainless steel / Y. Ishiyama, M. Kodama, N. Yokota, K. Asano, T. Kato, K. Fukuya // Journal of Nuclear Materials. – 1996. – Vol. 239. – P. 90–94.

37. Roth J. Temperature dependence of He trapping in niobium // Journal of Nuclear Materials. – 1976. – Vol. 63. – P. 120–125.

38. Максимкин О.П. Влияние старения на мартенситное превращение

при деформации стали 12X18H10T, облученной альфа-частицами / О.П. Максимкин, К.В. Цай, О.В. Тиванова, Н.С. Сильнягина // Вопросы атомной науки и техники. – 2009. – №2. – С. 114–123.

39. Rajaraman R. Suppression of helium bubble growth in palladium by prior cold working / R. Rajaraman, G. Amaraddra, B. Vismanathan, C.S. Sundar, K.P. Gopinathan // J. Nucl. Mater. – 1996. – Vol. 231. – P. 55–62.

40. Yang L. Ab initio study of stability and migration of H and He in hcp-Sc / L. Yang, S.M. Peng, X.G. Long, F. Gao, H.L. Heinisch, R.J. Kurtz, X.T. Zu // J. Phys.: Cond. Matter. – 2011. – Vol. 23. – P. 035701.

41. Zu X.T. Properties of helium defects in bcc and fcc metals investigated with density functional theory / X.T. Zu, L. Yang, F. Gao, S.M. Peng, H.L. Heinisch, X.G. Long, R.J. Kurtz // Phys. Rev. B. – 2009. – Vol. 80. – P. 054104.

42. Hohenberg P. Inhomogeneous Electron Gas / P. Hohenberg, W. Kohn // Phys. Rev. – 1964. – Vol. 136. – Iss. 3B. – P. 864–871.

43. Немошкаленко В.В. Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Электронные состояния в неидеальных кристаллах / В.В. Немошкаленко, Ю.Н. Кучеренко. – Киев.: Наук. думка, 1986. – 296 с.

44. Perdew J.P. Generalized gradient approximation made simple / J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof // Phys. Rev. Lett. – 1996. – Vol. 77. – P. 3865–3868.

45. Svyatkin L.A. Influence of vacancy on helium interaction with α -Zirconium / L.A. Svyatkin, D.V. Terentjeva, R.S. Laptev // Journal of Physics: Conference Series: Prospects of Fundamental Sciences Development. – 2021. – Vol. 1989. – P. 012039.

46. Domain C. Atomic-scale Ab-initio study of the Zr-H system: I. Bulk properties. / C. Domain, R. Besson, A. Legris // Acta Materialia. – 2002. – Vol. 50, No 13. – P. 3513–3526.

47. Yoyo H. Band structure diagram paths based on crystallography / H. Yoyo, P. Giovanni, K. Yu, O. Fumiyasu, T. Isao // Computational Materials Science. – 2017. – Vol. 128. – P. 140–184.

48. Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 19.12.2022, с изм. от 2023-04-11) (с изм. и доп., вступ. в силу с 2023-03-01). – URL: <https://normativ.kontur.ru/document?moduleId=1&documentId=442654> (дата обращения: 13.03.2023). – Текст: электронный.

49. ГОСТ 12.2.032-78. ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования: дата введения 1979-01-01). – URL: <https://docs.cntd.ru/document/1200003913> (дата обращения: 13.03.23). – Текст: электронный.

50. ГОСТ 12.2.033-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ стоя. Общие эргономические требования (дата введения: 1979-01-01). – URL : <https://docs.cntd.ru/document/1200005187> (дата обращения: 13.03.23). – Текст: электронный.

51. ГОСТ 12.0.003-2015. ССБТ. Опасные и вредные производственные факторы. Классификация (дата введения: 2017-03.01). – URL: <https://docs.cntd.ru/document/1200136071> (дата обращения: 13.03.23). – Текст: электронный.

52. ГОСТ 12.1.003-83 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Шум. Общие требования безопасности (с Изменением N 1) (дата введения: 2015-11-01). – URL: <http://docs.cntd.ru/document/5200291> (дата обращения: 13.03.23). – Текст: электронный.

53. 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 1996-10-31). – URL: <https://docs.cntd.ru/document/901703278> (дата обращения: 13.03.23). – Текст: электронный.

54. ГОСТ 12.1.029-80. ССБТ. Средства и методы защиты от шума. Классификация (дата введения: 1981-07-01). – URL : <https://docs.cntd.ru/document/5200292> (дата обращения: 13.03.23). – Текст: электронный.

55. ГОСТ 12.1.005-88. ССБТ. Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны (дата введения: 1989-01-01). – URL: <https://docs.cntd.ru/document/1200003608> (дата обращения: 13.03.23). – Текст: электронный.

56. ГОСТ 12.1.007-76. ССБТ. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности (дата введения: 1977-01-01). – URL: <https://docs.cntd.ru/document/5200233> (дата обращения: 13.03.23). – Текст: электронный.

57. СанПиН 1.2.3685-21 «Гигиенические нормативы и требования к обеспечению безопасности и (или) безвредности для человека факторов среды обитания» (утв. Постановлением № 2 от 2021-01-28). – URL: <https://docs.cntd.ru/document/573500115> (дата обращения: 13.03.23). – Текст: электронный.

58. ГОСТ 12.4.011-89. ССБТ. Средства защиты работающих. Общие требования и классификация (дата введения: 1990-07-01). – URL: <https://docs.cntd.ru/document/1200000277> (дата обращения: 13.03.23). – Текст: электронный.

59. ГОСТ 12.1.038-82 ССБТ. Электробезопасность. Предельно допустимые уровни напряжений прикосновения и токов (дата введения: 1983-07-01). – URL: <https://docs.cntd.ru/document/5200313> (дата обращения: 13.03.23). – Текст: электронный.

60. ГОСТ Р 12.1.019-2009 ССБТ. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты (дата введения: 2011-01-01). – URL: <https://docs.cntd.ru/document/1200080203> (дата обращения: 13.03.23). – Текст: электронный.

61. Влияние шума на организм человека [Электронный ресурс] // Управление Федеральной службы по надзору в сфере защиты прав потребителей и благополучия человека по Карачаево-Черкесской республике. – 2011. – URL: <http://09.rospotrebnadzor.ru/content/vliyanie-shuma-na-organizm-cheloveka> (дата обращения: 20.03.2023).

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. СанПиН 2.1.3684-21 «Санитарно-эпидемиологические требования к содержанию территорий городских и сельских поселений, к водным объектам, питьевой воде и питьевому водоснабжению, атмосферному воздуху, почвам, жилым помещениям, эксплуатации производственных, общественных помещений, организации и проведению санитарно-противоэпидемических (профилактических) мероприятий (с изменениями на 2022-02-14). – URL: <https://docs.cntd.ru/document/573536177#7DI0K8> (дата обращения: 25.03.23). – Текст: электронный.

68. ФЗ «Технический регламент о требованиях пожарной безопасности» от 22.07.2008 № 123-ФЗ (с изменениями от 2021-04-30). – URL: <https://docs.cntd.ru/document/902111644> (дата обращения: 25.03.23). – Текст: электронный.

69. ВНЭ 5-79. Правила пожарной безопасности при эксплуатации предприятий химической промышленности (утв. Министерством химической промышленности 25 июля 1979 г.). – URL: <https://docs.cntd.ru/document/1200036946> (дата обращения: 25.03.23). – Текст: электронный.