

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

Институт Международного образования и языковой коммуникации
Направление подготовки 03.03.02 Физика
Кафедра общей физики

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
Влияние структуры нанотрубок на водород-сорбционную емкость углеродного материала УДК <u>620.18:661.666:661.183</u>

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б20	Ян Ин		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент	Гулидова Л.В.	—		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Конотопский В.Ю.	к.э.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Пустовойтова М.И	к.х.н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Зав. кафедрой	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Общая физика	Лидер А. М.	к.ф.-м.н. доцент		

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ

по основной образовательной программе высшего профессионального образования,
направление подготовки 03.03.02 Физика,
квалификация - бакалавр

Код резу льта та	Результат обучения (компетенции выпускника)	Требования ФГОС, критериев и/или заинтересованных сторон
<i>Общекультурные (универсальные) компетенции</i>		
P1	Способен самостоятельно приобретать новые знания, использовать современные образовательные и информационные технологии, совершенствовать и развивать свой профессиональный уровень, поддерживать здоровый образ жизни	Требования ФГОС (ОК-1, ОК-2, ОК-7, ОК-8, ОК-11, ОК-19) , Критерий 5 АИОР (п. 1.1, 2.6), согласованный с требованиями международных стандартов <i>EUR-ACE</i> и <i>FEANI</i>
P2	Способен к поиску, обработке и интерпретации с использованием современных информационных технологий данных, необходимых для формирования суждений по соответствующим социальным, научным и этическим проблемам как в коллективе, так и индивидуально (на родном и иностранном языке)	Требования ФГОС (ОК-3, ОК-4, ОК 8, ОК-14, ОК-15, ПК-10, ПК-12, ПК-13,), Критерий 5 АИОР (пп. 2.1, 2.2, 2.3), согласованный с требованиями международных стандартов <i>EUR-ACE</i> и <i>FEANI</i>
P3	Способен критически переосмысливать свой накопленный социальный и профессиональный опыт, изменять при необходимости профиль своей профессиональной деятельности, следовать этическим и правовым нормам и нести ответственность за последствия своей инженерной деятельности	Требования ФГОС (ОК-5, ОК-6, ОК-7, ОК-9, ОК-10, ПК-5, ПК-18), Критерий 5 АИОР (пп. 2.4, 2.5), согласованный с требованиями международных стандартов <i>EUR-ACE</i> и <i>FEANI</i>
<i>Профессиональные компетенции</i>		
P4	Способен к овладению и применению базовых знаний в области естественных наук и математики для решения профессиональных задач, к усвоению основных педагогических моделей, форм и приемов педагогического воздействия на личность; закономерностей педагогического	Требования ФГОС (ОК-1, ОК-9, ОК-10, ОК-11, ПК-1, ПК-2, ПК-10), Критерий 5 АИОР (п. 1.1), согласованный с требованиями международных стандартов <i>EUR-ACE</i> и <i>FEANI</i>

P5	Способен применить в проектах по тематике, заданной заинтересованными организациями, экспериментальные методы исследования конденсированного состояния вещества, методы анализа поверхности твердых тел и тонких пленок	Требования ФГОС (ОК-12, ПК-3, ПК-4, ПК-6, ПК-14), Критерий 5 АИОР (п. 1.1, 1.4, 2.2, 2.6), согласованный с требованиями международных стандартов <i>EUR-ACE</i> и <i>FEANI</i>
P6	Способен применить в проектах по тематике, заданной заинтересованными организациями, современную электронику в электрофизических и плазменных установках, а также учесть взаимодействие излучения и плазмы с веществом, современные достижения водородной энергетики и плазменных технологий	Требования ФГОС (<i>ОК-10, ОК-11, ПК-1, ПК-2</i>), Критерий 5 АИОР (п. 1.1), согласованный с требованиями международных стандартов <i>EUR-ACE</i> и <i>FEANI</i>
P7	Способен применить в проектах по тематике, заданной заинтересованными организациями, базовые естественнонаучные и математические знания при получении и исследовании наноматериалов	Требования ФГОС (ОК-12, ПК-3, ПК-4, ПК-6, ПК-14), Критерий 5 АИОР (п. 1.1, 1.4, 2.2, 2.6), согласованный с требованиями международных стандартов <i>EUR-ACE</i> и <i>FEANI</i>
P8	Способен понимать сущность и значение информации в развитии современного информационного общества, к применению на практике полученных знаний при обработке, анализе и синтезе полученных физических данных в соответствии с профилем профессиональной деятельности	Требования ФГОС (<i>ОК-12, ОК-16, ОК-21. ПК-1, ПК-2, ПК-5, ПК-6, ПК-7</i>), Критерий 5 АИОР (п. 1.1), согласованный с требованиями международных стандартов <i>EUR-ACE</i> и <i>FEANI</i>
P9	Способен понимать и использовать на практике теоретические основы планирования и организации физических исследований, представлять результаты и применять на практике методы управления в сфере природопользования	Требования ФГОС (ОК-12, ПК-3, ПК-4, ПК-6, ПК-7, ПК-8, ПК-9, ПК-14), Критерий 5 АИОР (п. 1.1, 1.4, 2.2, 2.6), согласованный с требованиями международных стандартов <i>EUR-ACE</i> и <i>FEANI</i>
P10	Способен формировать суждения о значении и последствиях своей профессиональной деятельности с учетом социальных, правовых, этических и природоохранных аспектов, при необходимости применить ресурсо- и энергосберегающие технологии	Требования ФГОС (<i>ОК-10, ОК-11, ПК-1, ПК-2, ПК-7, ПК-9</i>), Критерий 5 АИОР (п. 1.1), согласованный с требованиями международных стандартов <i>EUR-ACE</i> и <i>FEANI</i>

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

Институт – Международного образования и языковой коммуникации
 Специальность – 03.03.02 «Физика»
 Кафедра – Общей физики

УТВЕРЖДАЮ:

Зав. кафедрой

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

ЗАДАНИЕ

на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

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

Студенту:

Группа	ФИО
150Б20	Ян Ин

Тема работы:

Влияние структуры нанотрубок на водород-сорбционную емкость углеродного материала	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе <i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i>	- образцы углеродного материала, содержащего нановолкна и нанотрубки; - проведение литературного обзора; - проведение геометрической модели с учетом структурных характеристик материала; - анализ полученных данных; - обсуждение результатов; - заключение.
---	--

Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов <i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i>	1. проведение литературного обзора; 2. проведение геометрической модели с учетом структурных характеристик материала; 3. анализ полученных данных; 4. обсуждение результатов; 5. заключение.
--	--

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы

(с указанием разделов)

Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Конотопский В.Ю.
Социальная ответственность	Пустовойтова М.И.

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

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент КОФ ФТИ	Гулидова Л.В.	—		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б20	Ян Ин		

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

Студенту:

Группа	ФИО
150620	Ян Ин

Институт	Международного образования и языковой коммуникации	Кафедра	Общей физики
Уровень образования	бакалавриат	Направление/специальность	03.03.02 Физика

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

1. <i>Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	...
2. <i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	...
3. <i>Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	...

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. <i>Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения</i>	...
2. <i>Планирование и формирование бюджета научных исследований</i>	...
3. <i>Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования</i>	...

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. <i>Оценка конкурентоспособности технических решений</i>
2. <i>Матрица SWOT</i>
3. <i>Альтернативы проведения НИ</i>
4. <i>График проведения и бюджет НИ</i>
5. <i>Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИ</i>

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Конотопский В.Ю.	к.э.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150620	Ян Ин		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
150Б20	Ян Ин

Институт	Международного образования и языковой коммуникации	Кафедра	Общей физики
Уровень образования	бакалавриат	Направление/специальность	03.03.02 Физика

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

1. <i>Описание рабочего места (рабочей зоны, технологического процесса, механического оборудования) на предмет возникновения:</i> – <i>вредных проявлений факторов производственной среды (метеоусловия, вредные вещества, освещение, шумы, вибрации, электромагнитные поля, ионизирующие излучения)</i> – <i>опасных проявлений факторов производственной среды (механической природы, термического характера, электрической, пожарной и взрывной природы)</i> – <i>негативного воздействия на окружающую природную среду (атмосферу, гидросферу, литосферу)</i> – <i>чрезвычайных ситуаций (техногенного, стихийного, экологического и социального характера)</i>	Работа проводилась в лаборатории в подвальном этаже в третьем корпусе Национального исследовательского Томского политехнического университета. Технический процесс заключается в насыщении водородом углеродного материала, содержащего нанотрубки с помощью автоматизированного комплекса Gas Reaction Controller. В процессе возникли следующие вредные факторы: 1. отклонение показателей микроклимата в помещении 2. превышение уровней шума; 3. превышение уровней электромагнитных и ионизирующих излучений 4. недостаточная освещенность рабочей зоны; и опасный фактор – электрический ток. В работе возникают отходы спирта, которые могут вызвать загрязнение гидросферы. Возможно, возникают пожар и взрыв газовых баллонов, и пожар в процессе работы.
---	---

2. <i>Знакомство и отбор законодательных и нормативных документов по теме</i>	1. СН 2.2.4/2.1.8.562 – 96. 2. СанПиН 2.2.4.548 – 96. 3. ГОСТ 12.1.006 – 84 ССБТ. 4. ГОСТ 12.1.045 – 84 ССБТ. 5. СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278 – 03. 6. СанПиН 2.2.2/2.4.1340– 03.
--	---

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. <i>Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности:</i> – <i>физико-химическая природа вредности, её связь с разрабатываемой темой;</i>	В связи с работой насоса в лаборатории возникло превышение уровней шума. По санитарным нормам, допустимым уровнем шума принято считать: 55 децибел (дБ) в дневное время и 40 децибел (дБ)
--	--

– действие фактора на организм человека; – приведение допустимых норм с необходимой размерностью (со ссылкой на соответствующий нормативно-технический документ); – предлагаемые средства защиты (сначала коллективной защиты, затем – индивидуальные защитные средства)	ночью. Одним из средств защита от шума балансировка вращающихся деталей, уменьшение зазоров в зацеплениях механических передач, применение соответствующей смазки
2. Анализ выявленных опасных факторов проектируемой произведённой среды в следующей последовательности – механические опасности (источники, средства защиты); – термические опасности (источники, средства защиты); – электробезопасность (в т.ч. статическое электричество, молниезащита – источники, средства защиты); – пожаровзрывобезопасность (причины, профилактические мероприятия, первичные средства пожаротушения)	Действие электрического тока на живую ткань носит разносторонний и своеобразный характер. Прохождение тока может вызывать у человека раздражение и повреждение различных органов. Пороговый неотпускающий ток составляет 50 Гц (6–16мА). Основные коллективные способы и средства электрозащиты: изоляция токопроводящих частей (проводов) и ее непрерывный контроль; установка оградительных устройств. Индивидуальные основные изолирующие электрозащитные средства способны длительно выдерживать рабочее напряжение электроустановок.
3. Охрана окружающей среды: – защита селитебной зоны – анализ воздействия объекта на атмосферу (выбросы); – анализ воздействия объекта на гидросферу (сбросы); – анализ воздействия объекта на литосферу (отходы); – разработать решения по обеспечению экологической безопасности со ссылками на НТД по охране окружающей среды.	В процессе выполнения работы могут возникать отходы спирта, которые могут вызвать загрязнение гидросферы. Спирт используют для подготовки образцов углеродного материала. После этого процесса, в растворе спирта могут существовать аморфы углерода и наноуглерод. Для охраны поверхностных и подземных вод от загрязнения и истощения, можно обработать отходы спирта методом дистилляции. Полученный спирт после процесса дистилляции можно использовать повторно.
4. Защита в чрезвычайных ситуациях: – перечень возможных ЧС на объекте; – выбор наиболее типичной ЧС; – разработка превентивных мер по предупреждению ЧС; – разработка мер по повышению устойчивости объекта к данной ЧС; – разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий	В связи с использованием водорода в процессе выполнения работы насыщения водородом углеродного материала, содержащего нанотрубки, существуют опасности пожар и взрыв. Чтобы избежать опасность необходимы следующие мероприятия: 1) создание запасов средств индивидуальной защиты и поддержание их в готовности; 2) наличие и поддержание в постоянной готовности системы общего оперативного и локального оповещения и информации о пожаре и взрыве; 3) проектирование, размещение, строительство и эксплуатация объектов инфраструктуры, в том числе и потенциально опасных.

5. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности: – специальные (характерные для проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны	1. Организационные мероприятия обеспечения безопасности. 2. Особенности законодательного регулирования проектных решений.
---	---

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Пустовойтова М.И.	к.х.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б20	Ян Ин		

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

Институт – Международного образования и языковой коммуникации

Специальность – 03.03.02 «Физика»

Уровень образования – Бакалавриат

Кафедра – Общей физики

Период выполнения (осенний / весенний семестр 2015/2016 учебного года)

Форма представления работы:

Бакалаврская работа

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

КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН
выполнения выпускной квалификационной работы

Срок сдачи студентом выполненной работы:	14.06.2016
--	------------

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
08.03.2016	Обзор литературы	
20.03.2016	Объект и методы исследования	
25.04.2016	Расчет и аналитический анализ	
06.05.2016	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	
16.05.2016	Социальная ответственность	

Составил преподаватель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент КОФ ФТИ	Гулидова Л.В.			

СОГЛАСОВАНО:

Зав. кафедрой	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Общей физики	Лидер А.М.	К.ф.-м.н. доцент		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа содержит 92 страниц, 23 рисунка, 9 таблиц, 29 источников литературы.

Ключевые слова: одностенные и двустенные углеродные нанотрубки, водород, сорбция, десорбция, геометрическая модель.

Цель работы – расчет предельной концентрации сорбированного углеродными нанотрубками водорода по геометрической модели сорбции.

В работе проводились расчеты концентрации сорбированного углеродными нанотрубками водорода по геометрической модели с учетом структурных характеристик нанотрубок. Модельный материал содержит закрытые и открытые одностенные и двустенные нанотрубки различной хиральности.

В первой главе описаны структура, сорбционные свойства, методы исследования материала. Вторая глава посвящена моделям сорбции водорода. В третьей главе приведены расчеты водород-сорбционной емкости нанотрубок по геометрической модели. В четвертой и пятой главах описан финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение, социальная ответственность.

В результате исследования получены следующие выводы: сорбционная емкость закрытых и открытых нанотрубок типа «кресло» выше, чем для типа «зигзаг». Наличие в образцах двустенных нанотрубок приводит к уменьшению поглощенного водорода для обоих типов нанотрубок. Данные расчеты подтверждают влияние структуры углеродного материала на его водород-сорбционную емкость.

Содержание

Введение.....	14
Глава 1 Литературный обзор.....	17
1.1 Углеродные нанотрубки.....	17
1.1.1 Структура углеродных нанотрубок	17
1.1.2 Свойства углеродных нанотрубок	20
1.1.3 Сорбция водорода.....	23
1.2 Приборы и методы исследования углеродных материалов-накопителей водорода	26
1.2.1 Сканирующая электронная микроскопия	27
1.2.2 Просвечивающая электронная микроскопия.....	31
1.2.3 Рентгеновская дифракция	35
1.2.4 Измерение сорбционной емкости углеродного материала	38
Глава 2. Модели сорбции водорода углеродными нанотрубками	44
2.1 Феноменологическое термодинамическое описание процесса сорбции. ..	44
2.2 Молекулярная кинетическая теория (теория функционала плотности)	46
2.3 Геометрическая модель	48
Глава 3. Экспериментальные исследования.....	54
3.1 Расчет водород-сорбционной емкости по геометрической модели сорбции.....	54
3.2 Измерение водород-сорбционной емкости углеродных нанотрубок.....	60
Глава 4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	63

4.1 Составление перечня работ.....	63
4.2. Определение трудоемкости работ.....	64
4.3. Построение графика работ.....	68
4.4. Бюджет научно-технического исследования (НТИ)	70
4.4.1 Расчет материальных затрат НТИ.....	70
4.4.2 Расчет затрат на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	71
4.4.3 Основная и дополнительная заработная плата исполнителей темы	71
4.4.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления).....	73
4.4.5 Накладные расходы	73
Глава 5. Социальная ответственность.....	75
Введение.....	75
5.1.Техногенная безопасность	76
5.2. Региональная безопасность.....	79
5.3. Организационные мероприятия обеспечения безопасности	80
5.4. Особенности законодательного регулирования проектных решений.....	81
5.5. Безопасность в чрезвычайных ситуациях	84
Выводы	86
Заключение	87
Список литературы	89

Введение

В 1959 году на ежегодной встрече Американского физического общества Ричард Фейнман опубликовал речь: "Там, внизу, много места", в которой он обосновал основные принципы использования нанотехнологий в медицине. В 1991 году он предположил, что углеродные нанотрубки обладают уникальными электрическими свойствами. В то же время Сумио Ииджима из Японской корпорации NEC впервые обнаружил с помощью высокой разрешающей электронной микроскопии трубчатые структуры с диаметрами от нескольких до десятков нанометров, длиной в несколько микрон, или даже миллиметров, и назвал их "углеродные нанотрубки". После него, T.W. Ebbesen и P.M. Ajayan, также из корпорации NEC, нашли метод получения большого количества многослойных углеродных нанотрубок. В 1993 году исследовательская группа компании IBM и С. Ииджима одновременно сообщили об обнаружении одностенных углеродных нанотрубок. Исследование физических свойств одностенных углеродных нанотрубок началось в 1995 году.

Исследовательская группа Ричарда Смолли открыла метод лазерного испарения с высоким выходом одностенных углеродных нанотрубок. Исследовательская группа Bernier в университете Montpellier во Франции, используя метод электро-дугового испарения смогли также получить одностенные углеродные нанотрубки. В 1998 году в Научно-исследовательском институте металлов Китайской академии наук был использован способ каталитического пиролиза углеводородов для синтеза большого количества

одностенных углеродных нанотрубок.

Наноматериалы являются ультрадисперсными материалами с нанометровым размером зерна (10^{-9} м) [1]. Углеродные нанотрубки имеют уникальные физические и химические свойства, такие как металлическая или полупроводниковая проводимость, высокая механическая прочность, адсорбционная способность и высокая способность поглощать СВЧ излучение. Углеродные нанотрубки могут быть использованы в различных областях науки и техники. Например, использование нанотрубок как упрочняющего наполнителя и проводящего агента может быть получен превосходный автомобильной эффективности охраны, использование как носителя катализатора может значительно улучшить активность и селективность катализатора. Нанотрубки обладают сильными свойствами поглощать СВЧ излучение, что позволяет его использовать для стелс-материалов, электромагнитного экранирования или для поглощения света.

Сорбционная способность является одним из известных свойств нанотрубок. Нанотрубки обладают уникальной структурой поверхности, т.е. вся масса атомов сосредоточена на поверхности нанотрубок. Поэтому нанотрубки имеют высокую удельную площадь поверхности [2]. Кроме того, нанотрубки имеют полости, доступные для сорбции.

Применение углеродных нанотрубок в качестве аккумуляторов водорода является одним из перспективных методов хранения водорода. Углеродные нанотрубки имеют уникальную структуру, что позволяет хранить достаточное количество водорода для дальнейшего использования в качестве топлива [3].

Основной проблемой при изучении углеродных материалов-накопителей водорода остается плохая повторяемость экспериментальных результатов по определению предельной водородной емкости. Для решения установленной проблемы необходимо проводить расчеты с применением разнообразных моделей сорбции водорода углеродными материалами. Наиболее простой является геометрическая модель с учетом структурных характеристик материала. Данная модель не требует больших затрат и применения мощной вычислительной техники, а также сложного математического аппарата, что является несомненным преимуществом, хотя и не устанавливает влияния на процесс сорбции химических и физических воздействий.

Из вышесказанного целью работы является расчет предельной концентрации сорбированного углеродными нанотрубками водорода по геометрической модели сорбции.

В связи с поставленной целью сформулированы следующие задачи:

1. Изучить особенности строения углеродных нанотрубок;
2. Рассчитать предельную концентрацию сорбированного водорода от структурных параметров углеродного материала.

Глава 1 Литературный обзор

1.1 Углеродные нанотрубки

Теория показывает, что структуру боковой поверхности однослойной УНТ можно представить себе как свернутый в трубку один слой графена и заканчивающиеся обычно полусферической головкой, которая может рассматриваться как половина молекулы фуллерена [4]. Нанотрубки являются одним из самых выдающихся открытий современной науки.

Углеродные нанотрубки по количеству слоев подразделяются на одностенные и многостенные. В радиальном направлении трубки очень тонкие, нанометрового масштаба. Пучок из десятков тысяч углеродных нанотрубок соответствует только ширине человеческого волоса, собственно, поэтому их называют углеродными нанотрубками. В осевом направлении они могут достигать от нескольких десятков до сотен микрометров.

Углеродные нанотрубки не всегда прямые, возможно наличие локальных неровностей, которые состоят из смеси пятиугольных и семиугольных колец. Оказывается, наличие пятиугольника приводит к напряжениям между углеродными связями в графеновой плоскости нанотрубок, что приводит к выпиранию наружу. Если пятиугольник просто появляется в верхней части углеродных нанотрубок, то происходит запечатывание торца. А наличие семиугольника приводит к втягиванию поверхности внутрь.

1.1.1 Структура углеродных нанотрубок

Однослойные нанотрубки (single-walled nanotubes, SNWTs) – самый хорошо изученный вид нанотрубок. Одностенные нанотрубки имеют диаметр несколько нм, зато их длина может превышать диаметр в тысячи раз. Структуру однослойных нанотрубок представляет собой графеновую плоскость, свернутую в бесшовный цилиндр. Поверхность состоит из правильных шестиугольников в узлах которых располагаются прочносвязанные друг с другом атомы углерода. Торцы нанотрубок закрыты полусферическими крышками, которые составлены из шести- и пятиугольников, напоминающих по своей структуре половину молекулы фуллерена.

Многослойные нанотрубки (multi-walled nanotubes, MWNTs) состоят из слоев графена, свернутых в форме трубки. Расстояние между слоями равно 0.34 нм, и соизмеримо с расстояниями в графите.

Обычно для описания структуры использует две стандартные модели, а именно: несколько однослойных нанотрубок, вложенных одна в другую - "матрешка", или оборачивание одного листа графена несколько раз вокруг себя - "свиток". Данные модели представлены на Рис.1. Также существует модель «папье-маше», которая представляет собой одну из вышеперечисленных моделей, но с дефектными слоями.

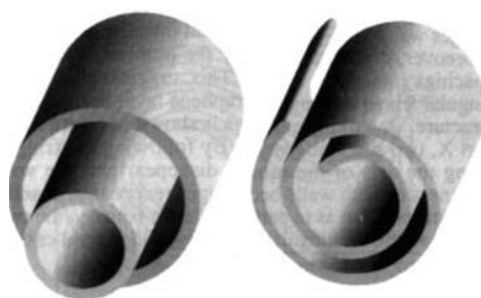


Рис.1 Многослойные нанотрубки (а) «русская матрешка»; (б) «свиток»

Углеродная нанотрубка может иметь многослойную трубчатую конструкцию, при этом замыкаясь без швов.

По форме края одностенные углеродные нанотрубок подразделяют на три типа: кресельные, зигзагообразные и хиральные нанотрубки. Эти типы углеродных нанотрубок, зависит от способа свертки графенового листа в цилиндрическую форму. Соответственно разные углы и направление свертки будут определять типы углеродных нанотрубок.

Хиральность нанотрубок обозначается двумя целыми числами (n, m) , определяющими координаты шестиугольника, который при сворачивания графенового листа, совпадет с шестиугольником в начале координат (рис. 2). Если $n = m$, то это конфигурация «кресло» (англ. «armchair»), если $m = 0$, то конфигурация «зигзаг» (англ. «zigzag»). Эти названия даны по виду кромки торцов нанотрубок с соответствующей конфигурацией (рис. 3).

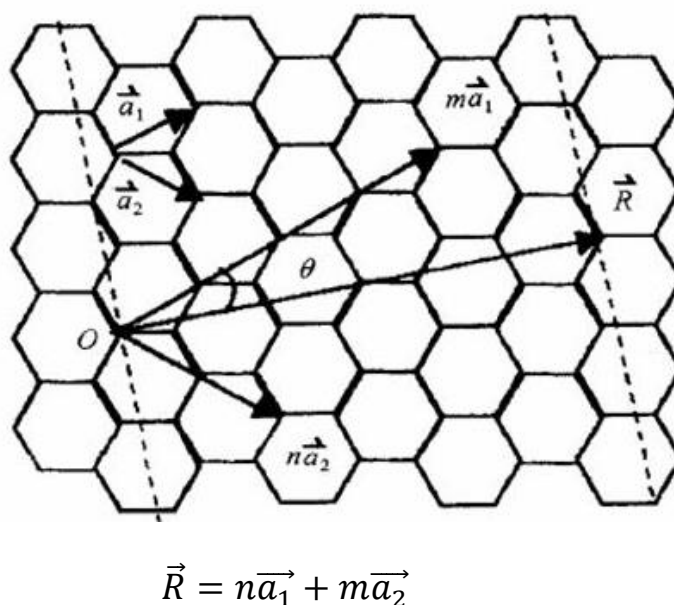


Рис.2 Варианты сворачивания графитовой плоскости

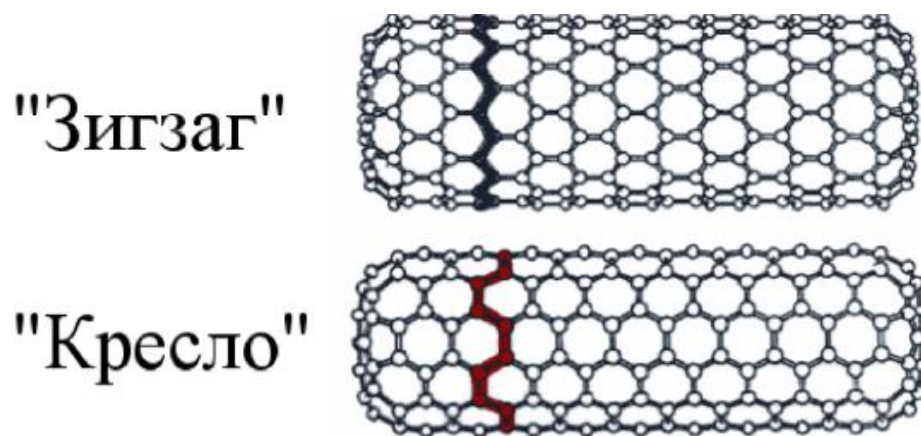


Рис.3 Нанотрубки с конфигурацией «зигзаг» и «кресло»

В процессе сворачивания графен может занимать однослойную или многослойную конфигурацию. Если графен свернулся в один слой, то такая нанотрубка носит название однослойной (ОУНТ, single-walled carbon nanotube ,SWNT), в несколько слоев - многослойные углеродные нанотрубки (МУНТ, multi-walled carbon nanotube , MWNT) (рис.4).

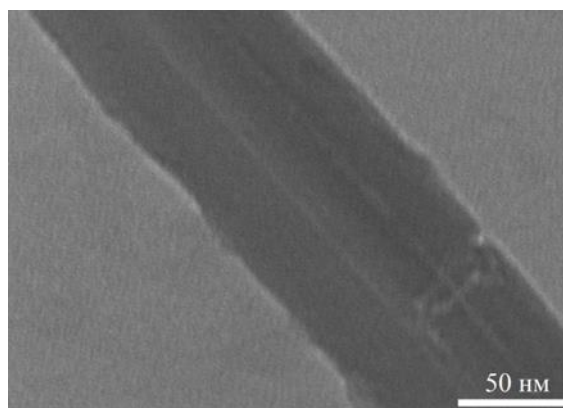


Рис. 4 Увеличенное изображение участка многостенной нанотрубки

1.1.2 Свойства углеродных нанотрубок

На данный момент получают нанотрубки с длиной от десятков до сотен микрон. Данные длины конечно уже являются прорывом для нанотехнологий, но все же еще недостаточны для масштабного использования. Однако длина получаемых нанотрубок постепенно увеличивается и сейчас ученые уже

достигают сантиметровых длин.

Структура углеродной нанотрубки образована слоем атомов углерода, которые соединены друг с другом в гексагональную сетку (соты). Слой углерода толщиной в один атом называется графен, который, при сворачивании в форме цилиндра, и, соединяясь друг с другом, образует углеродные нанотрубки.

Разнообразие форм и структур нанотрубок - однослойные и многослойные, прямые и спиральные – отличаются и целым спектром всевозможных электрических, магнитных, оптических свойств.

Так, например, в зависимости от хиральности, нанотрубки могут быть как проводниками, так и полупроводниками. При внедрении в полость нанотрубок разнообразных веществ можно менять и контролировать их электронные свойства. Пустоты внутри фуллеренов и нанотрубок давно привлекали внимание ученых. Эксперименты показывают, что внедрение инородного атома в фуллерен может изменить его электрические свойства, изолятор превратить в сверхпроводник.

Углеродные нанотрубки имеют целый ряд электрических, тепловых и структурных свойств, которые могут меняться в зависимости от физической конструкции нанотрубки.

Электрические свойства

Структура углеродной нанотрубки определяет ее, как проводник. Когда структура атомов в углеродной нанотрубке минимизирует столкновения между электронами проводимости и атомами, углеродная нанотрубка обладает высокой проводимостью. Сильные связи между атомами углерода также

позволяют углеродной нанотрубке выдерживать более высокие электрические токи, чем медь. Перенос электронов происходит только вдоль оси трубы. По одностенным нанотрубкам можно маршрутизировать электрические сигналы с частотой до 10 ГГц (GHz) при использовании в качестве соединений в полупроводниковых устройствах. Нанотрубки также имеют постоянное сопротивление.

Тепловые свойства

Сила атомных связей в углеродных нанотрубках позволяет им выдерживать высокие температуры. Из-за этого, углеродные нанотрубки очень хорошие тепловые проводники. По сравнению с медными проводами, которые обычно используются в качестве проводников тепла, углеродные нанотрубки могут передавать в 15 раз больше количество ватт на метр и градус Кельвина. Теплопроводность углеродных нанотрубок зависит от температуры трубок и внешней среды.

Прочность и эластичность

Каждый атом углерода в трубке соединен сильной химической связью с тремя соседними атомами. Таким образом, углеродные нанотрубки могут проявлять самый сильный модуль упругости и, следовательно, как ожидается, волокно из них будет также обладать высокой прочностью. Модуль упругости однослойных нанотрубок значительно выше, чем у стали, что делает их очень прочными. Несмотря на это, нажимая на кончик нанотрубки, они сгибаются, при этом, как только сила снимается, нанотрубка возвращается в исходное состояние. Это свойство делает УНТ чрезвычайно полезным в качестве зонда

для сканирующей зондовой микроскопии высокого разрешения. Модуль Юнга ОУНТ составляет около 1 ТПа, но есть сообщение о более высоком значении - 1,8 ТПа [5]. Для различных экспериментальных методов измерения, значения модуля Юнга изменяются в диапазоне от 1,22 Тпа до 1,26 ТПа в зависимости от размера и хиральности ОУНТ [6].

1.1.3 Сорбция водорода

Интерес к водороду в качестве топлива резко возрос с 1990 года, и были сделаны многие достижения в области производства и технологий использования водорода [7]. Технология хранения водорода должна значительно продвигаться вперед в производительности и экономической эффективности, если страна решается на создание транспортной системы на основе водорода. Водород обеспечивает больше энергии, чем бензин. Только тогда, когда вес, объем, количество циклов зарядки-разрядки, расходы на энергию всей системы хранения топлива считаются, то недостатки водорода становятся очевидными. Новые подходы, позволяющие более компактно, легко и энергетически эффективно хранить водород, необходимы для того, чтобы масштабно и повсеместно использовать водородные транспортные средства.

Водород может быть размещен на борту транспортных средств в виде сжиженного газа или в контейнерах высокого давления, в виде металлических гидридов, или газовой адсорбции. Водород также может быть сгенерирован на борту путем реакции разложения водородсодержащих газов[8].

Несмотря на то, что каждый метод обладает требуемыми

характеристиками, ни один подход не удовлетворяет всем требованиям эффективности, размера, веса, стоимости и безопасности для транспортировки или полезности использования. Необходимая емкость материалов по водороду для систем хранения на борту автомобиля должна составлять не меньше 6,5 масс%.

Адсорбция газа по своей природе является безопасным и потенциально с высокой плотностью энергии способом хранения водорода, что может быть более выгодно энергетически, чем химическая сорбция, гидриды металлов и хранение сжатого газа. Свойства хранения водорода в материалах с высокой площадью поверхности, например "активированных углей", были тщательно изучены [9]. Тем не менее, активированные угли являются неэффективными в системах хранения водорода, так как только небольшая часть пор по размерам достаточно малы, чтобы сильно взаимодействовать с молекулами в газовой фазе водорода.

Углеродные нанотрубки и углеродные нановолокна были представлены весьма перспективными кандидатами на поглощение водорода *Диллоном* и его коллегами [10]. Они впервые измерили адсорбционную способность водорода специально приготовленной сажи, содержащей только приблизительно от 0,1 до 0,2% по массе ОУНТ при 133 К, из которой они, в дальнейшем, провели перерасчет адсорбции водорода для чистых однослойных нанотрубок, она составила от 5 до 10% по массе (вес адсорбированного водорода делится на вес ОУНТ плюс водород, адсорбированный ОУНТ). Они также предсказали, что ОУНТ с диаметром от 1,63 до 2 нм приблизились бы к цели по плотности

поглощения водорода 6,5масс%.

Авторы [11] сообщили о том, что 8 масс% водорода адсорбируется ОУНТ при криогенной температуре 80 К и давлении 12 МПа.

Чамберс [12] утверждал, что нанотрубки, бамбукоподобные углеродные волокна и волокна елочной формы способны адсорбировать свыше 11, 45, и 67 масс% водорода, соответственно, при комнатной температуре и при давлении 12 МПа. *Чен* и его команда [13] показали, что высокое поглощение H_2 от 20% до 14% по массе может быть достигнуто для литий-легированных и калий-легированных многослойных углеродных нанотрубок, соответственно, в образцах массой один миллиграмм при давлении окружающей среды. В калий-легированных МУНТ может происходить адсорбция водорода при комнатной температуре, но они являются химически неустойчивыми, в то время как литий-легированные МУНТ химически стабильны, но требуют повышенных температур (от 473 К до 673К) для обеспечения максимальной адсорбции и десорбции H_2 .

Лю [14] измерил водородную емкость ОУНТ синтезированных методом дугового разряда, с относительно большим количеством образца (около 500 мг) при температуре окружающей среды при умеренно высоком давлении. ОУНТ с предполагаемой чистотой 50% по массе сорбировали водорода 4,2 масс%. Кроме того, 80% адсорбированного водорода был освобожден при комнатной температуре. Эти результаты указывают на то, что ОУНТ весьма перспективны для адсорбции водорода даже при комнатной температуре.

1.2 Приборы и методы исследования углеродных материалов-накопителей водорода

Углеродные материалы обладают уникальной структурой, а соответственно и свойствами. Поэтому огромное количество исследователей проявляют большой интерес к структуре углеродных нанотрубок и возможностью применения всевозможных методов для исследования их свойств.

Рентгеновский дифракционный (дифракция рентгеновских лучей, XRD) анализ широко используется для исследования состава материалов, атомной или молекулярной структуры. XRD можно использовать для идентификации нано фазы. А также установить изменение параметров кристаллической решетки, оценить размеры частиц по области когерентного рассеяния, выявить микронапряжения в материале.

С помощью сканирующего электронного микроскопа (СЭМ) можно получить четкое изображение поверхности образцов благодаря высокому разрешению (3,5 нм). Кроме того, СЭМ используются для морфологического анализа поверхности излома. Целью такого анализа является установление причин разрушения. Метода СЭМ имеет большее увеличение, может непрерывно регулироваться в диапазоне увеличения от 20 до 100 десятков тысяч раз. У сканирующей микроскопии есть большие перспективы для исследования всей поверхности образца, возможность трехмерного изображения, наблюдение тонкой структуры различных образцов с неровной поверхностью.

Просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) часто используется

для исследования кристаллических наноматериалов, наблюдения морфологии и дисперсии наночастиц, оценивания диаметра зерна наночастиц. Метод ПЭМ—это стандартный используемый метод в исследовании характеристик углеродных нанотрубок. ПЭМ часто используют для измерения длин и диаметров углеродных нанотрубок. Наблюдение торцов многостенных нанотрубок может помочь в установлении их типа. ПЭМ высокого разрешения позволяет увидеть количество стенок в таких структурах, отследить изменение торцов до и после окислительных реакции, установить наличие дефектов, а также их тип.

Исследование углеродных нанотрубок являются международной широко популярной научной проблемой. Использование рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, термо-гравиметрического анализа позволяет узнать химического состав поверхности углеродных нанотрубок. С углубленным изучением углеродных нанотрубок, методы определения характеристик будет более разнообразными, целенаправленными и позволят улучшить многочисленные исследовательские работы в этом направлении.

1.2.1 Сканирующая электронная микроскопия

Сканирующий электронный микроскоп (СЭМ) (англ. Scanning Electron Microscope, SEM) —прибор, предназначенный для получения изображений поверхности исследуемого материала с высоким (до 0,4 нм) пространственным разрешением. С помощью данного оборудования можно получить информацию о составе, строении и некоторых других свойствах

приповерхностных слоёв. Принцип работы основан на взаимодействии электронного пучка с исследуемым объектом.

Современный сканирующий электронный микроскоп может работать в широком диапазоне от 10 крат до 1 000 000 крат, что приблизительно в 500 раз превышает предел увеличения лучших оптических микроскопов.

Сегодня возможности растровой электронной микроскопии используются практически во всех областях науки и промышленности, от биологии до наук о материалах. Современный рынок насчитывает множество фирм-производителей различных типов и конструкции СЭМ, которые включают в себя разнообразные типы детекторов.

В сканирующем микроскопе, электронный пучок формируется из вольфрамового катода термоэлектронной пушки. В качестве катода, как правило, используется вольфрам, поскольку он имеет самую высокую температуру плавления, поэтому легко нагревается до температур достаточных для эмиссии электронов.

Электронный пучок, который обычно имеет энергию в диапазоне от 0,2 кэВ до 40 кэВ, сжимается одной или двумя конденсаторными линзами до 0,4 - 5 нм в диаметре. Пучок проходит через пару отклоняющих катушек, как правило, до конечной линзы, которые отклоняют луч в осях X и Y, так что он сканирует в растровом режиме, формируя прямоугольную площадку поверхности образца, состоящую из нескольких тысяч параллельных линий.

Вторичное излучение, возникающее при бомбардировке поверхности электронами (вторичная эмиссия электронов, ожэ-электронная эмиссия и др.),

регистрируется различными детекторами и преобразуется в видеосигналы, после чего выводится изображение на экран монитора ЭВМ сканированного участка образца.

Выбор регистрируемого вторичного излучения обусловлен задачей исследования. Основной режим работы СЭМ – регистрация вторичных электронов, так как в этом режиме достигается максимальное разрешение.

Увеличение СЭМ можно устанавливать в диапазоне от 10 до 500000 раз. В отличие от оптических микроскопов, увеличение изображения СЭМ не является функцией объектива. СЭМ могут иметь конденсатор и объективы, но их функция заключается в фокусировки пучка, а не изображения образца. Если электронная пушка может генерировать пучок с достаточно малым диаметром, СЭМ может обойтись без конденсатора или объективов, хотя можно и не достичь очень высокого разрешения.

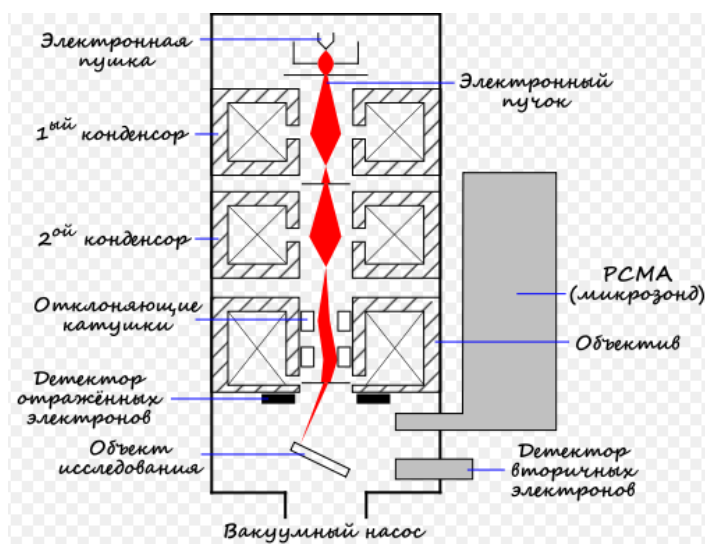


Рис.5 Схема сканирующего электронного микроскопа, оснащённого детектором рентгеновского излучения

Сканирующий электронный микроскоп включает детектор, который

способен отобрать и проанализировать излучение. По причине взаимодействия электронного зонда с образцом происходит изменение энергии частицы. В процессе взаимодействия пучка и частицы производится излучение [15]. Разработанные методики позволяют исследовать не только свойства поверхности образца, но и визуализировать информацию о свойствах подповерхностных структур.

В нашем случае удалось получить изображение участков образцов, порошкообразного углеродного материала, спрессованного в таблетку.

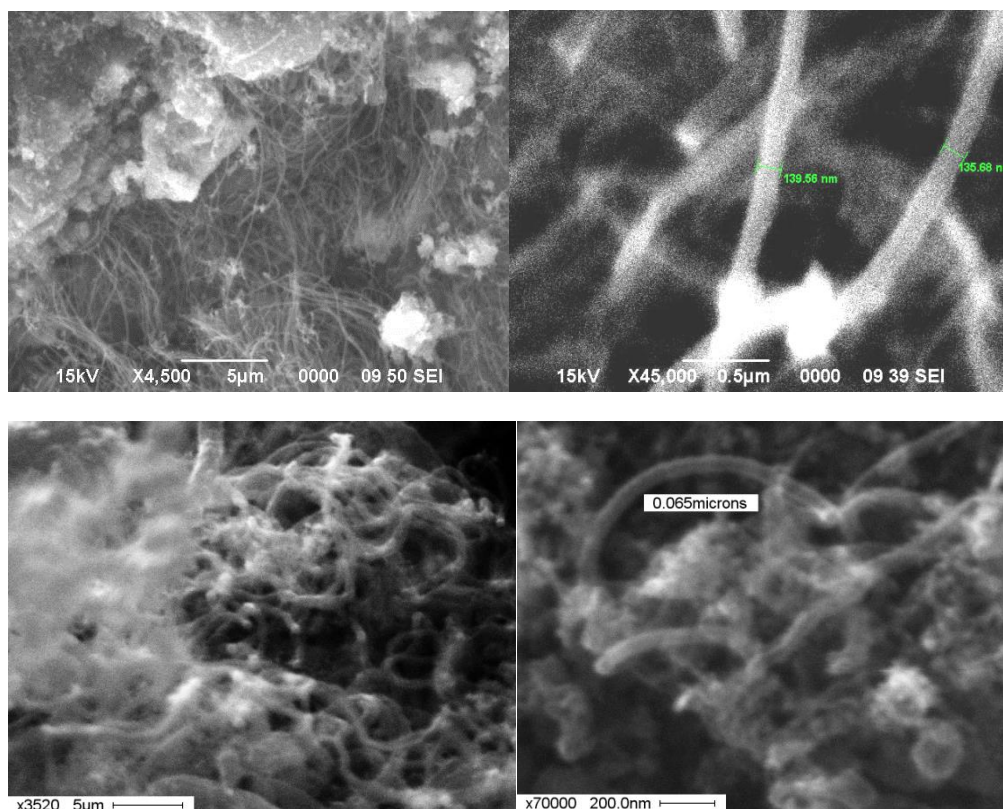


Рис.6 Микрофотографии образцов углеродного материала, содержащего нанотрубки, полученные на сканирующем микроскопе

Как можно наблюдать из Рисунка 6 углеродные нанотрубки распределены по всему объему образца, но при этом не обладают упорядоченностью. Большинство из них спутаны в пучки, состоящие из

десятков-сотен нанотрубок. Также удалось определить внешние диаметры нанотрубок, они составляют 20-150 нм, но некоторые достигают 500 нм, что может быть обусловлено наличием волокон в материале.

1.2.2 Просвечивающая электронная микроскопия

Просвечивающий электронный микроскоп (ПЭМ, англ. TEM - Transmission electron microscopy) позволяет получить изображение тончайших или порошкообразных образцов путём пропускания через него пучка электронов. Для исследования структуры образца необходимо подготовить пластину или срез толщиной не больше 0.1 мкм. Пучок электронов, прошедший через образец, попадает на детектор. Прошедший через образец пучок электронов увеличивается магнитными линзами и формирует изображение на флуоресцентном экране, фотоплёнке или сенсорном приборе с зарядовой связью (на ПЗС-матрице) [16].

Современные ПЭМ имеют режимы работы, позволяющие изучать элементный состав образцов, ориентацию кристаллов, фазовый сдвиг электронов и т.п.

ПЭМ всегда состоит из следующих основных частей: вакуумная система, источник электронов, серия электромагнитных линз, устройства формирования изображения, а также устройства для ввода, вывода и перемещения образца под электронным пучком. Электромагнитные линзы и пластины позволяют оператору манипулировать электронным пучком так, как требуется для того или иного режима работы, на устройстве формирования изображения получают

результатирующие выходные данные.

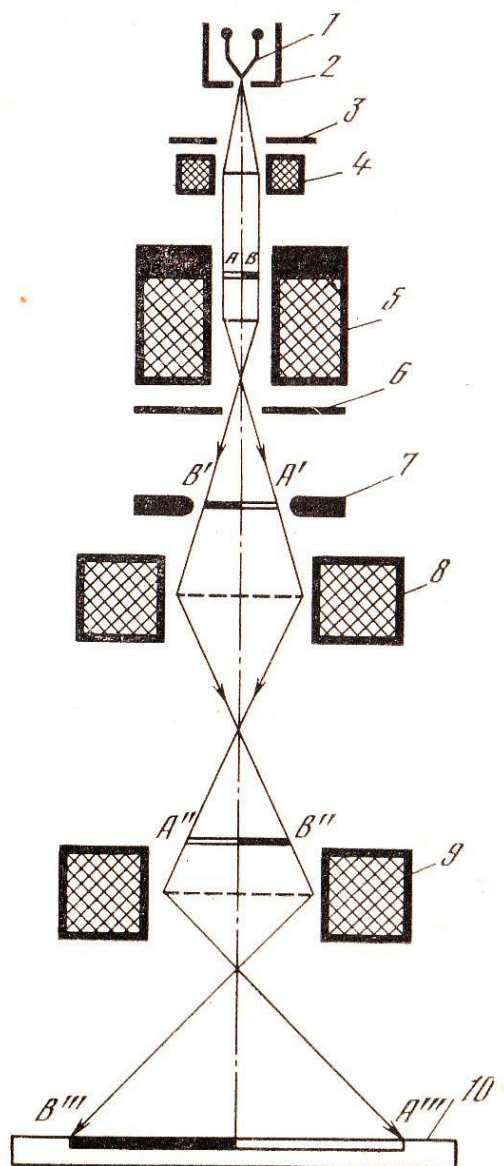


Рис.7 принцип работы и основные структурные элементы просвечивающего электронного микроскопа: 1 - катод, 2 - управляющий электрод, 3 - анод, 4 - конденсорная линза, 5 - объективная линза, 6 - апертурная диафрагма, 7 - селекторная диафрагма, 8 - промежуточная линза, 9 - проекционная линза, 10- экран [17].

Метод ПЭМ применяется для определения внутренне структуры

материала, в том числе порошков. ПЭМ – один из наиболее высокоинформативных методов исследования, используемых в материаловедении, физике твердого тела, биологии и других науках. Электронный пучок формируется источником, после чего проходит через конденсатные линзы. После этого пучок попадает на исследуемый образец, размещенный вблизи объективной линзы. Фокусное расстояние линз меняется за счет изменения тока в катушке промежуточной линзы. Ввиду этого, чтобы точнее видеть структуры образца на экране, необходимо сфокусироваться на плоскость исследуемого образца. Если микроскоп будет фокусироваться на заднюю фокальную плоскость объективной линзы, дифрактограмма соответствует части образца, который освещается электронами. Выбор пучка, создающего изображение, осуществляется при помощи апертурной диафрагмы, расположенной в задней фокальной плоскости объективной линзы. Светлопольное изображение формируется только прямым (т.е. прошедшим) пучком. Темнопольное изображение получается за счет пропускания диафрагмой одного из дифрагированных пучков. Из процесса рассеяния и поглощения, можно определить интенсивности пучков, исходящих от образца. Кроме того, структура и состав образца, толщины, длины волны излучения тоже влияют на интенсивности пучков. Из дифракционной картины электронов, узнаем симметрию кристаллической решетки и структуры дефектов изучаемого материала. Сопоставление микрофотографий с картинками электронной дифракции дает возможность соотносить элементы микроструктуры с той или иной кристаллической или аморфной фазой,

идентифицированной на электронограмме. Метод ПЭМ позволяет решать следующие задачи: – характеристика структуры образца в объеме и на поверхности; – определение качественного фазового состава образца; – определение ориентационных соотношений между элементами структуры образца.

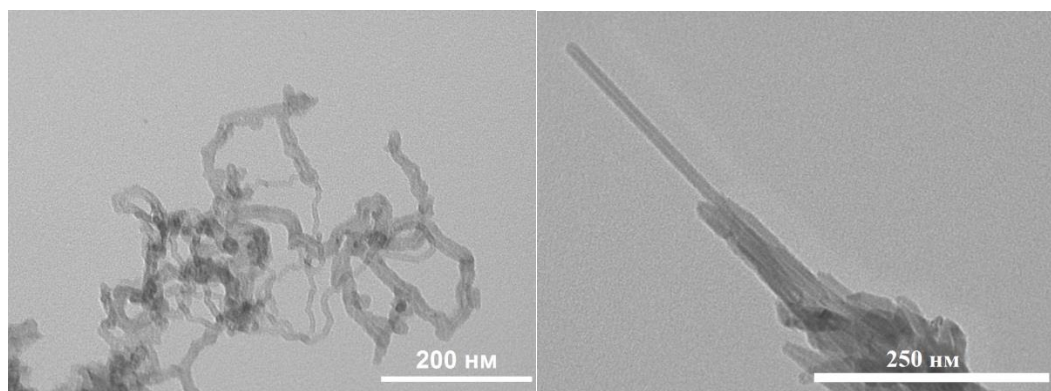


Рис.8 Микрофотографии углеродного материала, полученные на просвечивающем микроскопе.

Как можно наблюдать из Рисунка 8 исследуемый материал содержит столбчатые структуры диаметром около 10 нм, а также большое количество весьма изогнутых, деформированных трубок. Такое разнообразие может зависеть от условий синтеза материала, а также способов подготовки образцов для просвечивающей микроскопии. При наличии фотографий более высокого разрешения можно определить количество слоев. Из Рисунка 1.9 можно только приблизительно оценить количество стенок в нанотрубке. Поскольку расстояние между слоями около 0,34 нм, а диаметр атома углерода $67 \cdot 10^{-12}$ м, соответственно нанотрубка может содержать около 70 стенок.

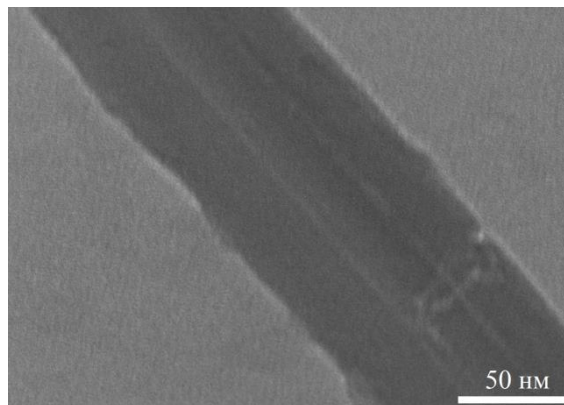


Рис.9 Увеличенное изображение участка многостенной нанотрубки

1.2.3 Рентгеновская дифракция

Рентгеновский дифракционный анализ порошка (XRD) является, пожалуй, наиболее широко используемым аналитическим методом для исследования характеристик материалов [18]. Он является методом неразрушающего контроля, который позволяет получить статистическую оценку характеристик образца макроскопических размеров.

Трехмерная структура кристаллических материалов, определяется повторением элементарной ячейки, содержащей атомы, образующие кристаллическую решетку. Когда сфокусированный пучок рентгеновских лучей взаимодействует с этими атомами, часть пучка поглощается образцом, часть преломляется, а часть рассеивается. Дифракция рентгеновских лучей каждого материала разная, в зависимости от того, какие атомы составляют кристаллическую решетку и как они расположены.

Когда рентгеновский луч попадает в образец и происходит дифракция, мы можем измерить расстояние между плоскостями атомов, составляющих образец, применяя закон Брэгга, названный в честь Уильяма Лоуренса Брэгга,

который первым предложил его в 1921 году. Закон Брэгга имеет следующий вид:

$$n\lambda = 2d \sin\theta,$$

где n - целое число, порядок дифрагированного луча, λ - длина волны рентгеновского луча падающего, d - расстояние между соседними плоскостями атомов, θ - угол дифракции. Характерный набор d -расстояний соответствует определенному набору материалов, присутствующих в образце. При правильной интерпретации, сравнения со стандартными справочными моделями, это позволяет идентифицировать материал. Для графитоподобных материалов это расстояние составляет 3,4 нм.

Рентгеновские дифрактометры состоят из трех основных элементов: рентгеновская трубка, держатель образца и детектора рентгеновского излучения.

Рентгеновский луч формируется в электронно-лучевой трубке. Для эмиссии электронов с поверхности вольфрамовой нити ее нагревают. Увеличивая напряжение, электроны ускоряются и бомбардируют мишень. Когда у электронов есть достаточная энергия, то происходит выбивание квантов рентгеновского излучения.

Излучение, которое летит под большим телесным углом, направляют в одну сторону. Для этого в каркасе используют бериллиевые окна, прозрачные для рентгеновского излучения. Стекла выпускают часть рентгеновского излучения некоторого диапазона длин волн. Далее ставят монохроматор, который вырезает нужный диапазон. После этого ставится коллиматор. Он

обрезает пучок до определённого диаметра. Затем излучение, распространяясь в воздухе, теряет энергию, но воздух почти «прозрачен» для луча, вследствие чего потери очень малы. Рентгеновские лучи отражаются и преломляются от образца, при этом отклоняясь от своего первоначального положения. Лучи падают на детектор, где формируется дифракционная картина.

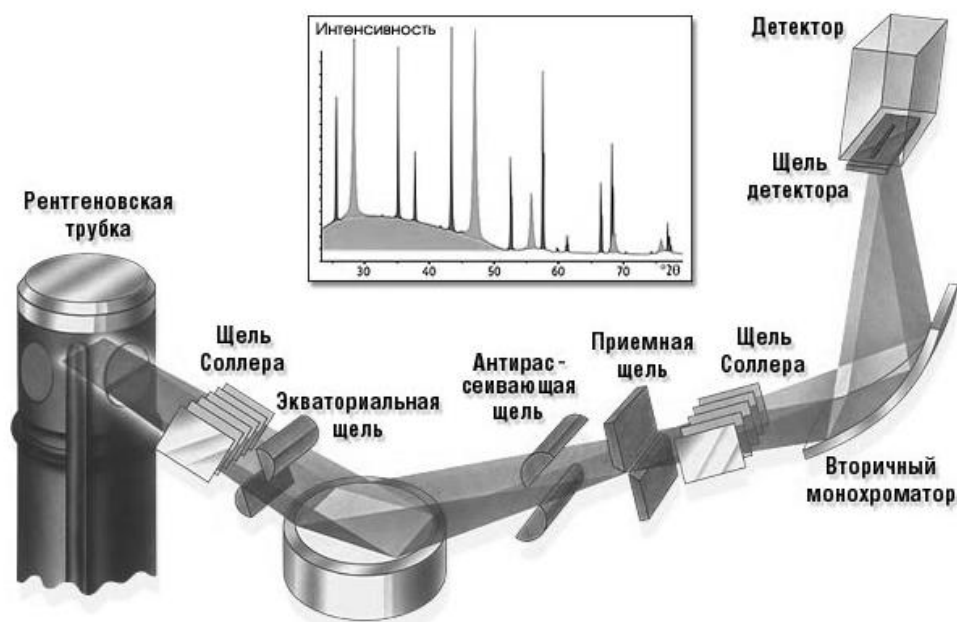


Рис.10 Принципиальная схема дифрактометра.

Рентгеновская трубка, детектор располагаются на гониометре. Он позволяет изменять угол падения излучения к поверхности образца. Одно плечо гониометра задает угол облучения образца рентгеновскими лучами, а другое определяет угол брэгговского отражения (детектируемый сигнал). Детектором непрерывно регистрируется интенсивность рентгеновского излучения [19]. Геометрия в рентгеновском дифрактометре такова, что образец вращается на пути коллимированного пучка рентгеновских лучей под углом θ , а детектор вращается на угол 2θ . Для типичных порошков данные собираются при 2θ от 5° до 70° .

Рентгеновская дифракция имеет широкий спектр применения в материаловедении, химии, геологии, экологии, криминалистике и фармацевтической промышленности для характеристики материалов. Аморфные материалы легко распознаются по отсутствию рефлексов в рентгенограмме. Техника также используется для изучения частиц в жидких суспензиях или поликристаллических твердых (сыпучих или тонкопленочных) материалов.

1.2.4 Измерение сорбционной емкости углеродного материала

Автоматизированный комплекс Gas Reaction Controller позволяет получить количественный анализ концентрации, поглощенного материалом водорода, а также установить влияние параметров насыщения на сорбционную емкость материалов. Процесс насыщения водородом осуществляется по схеме, представленной на рисунке.

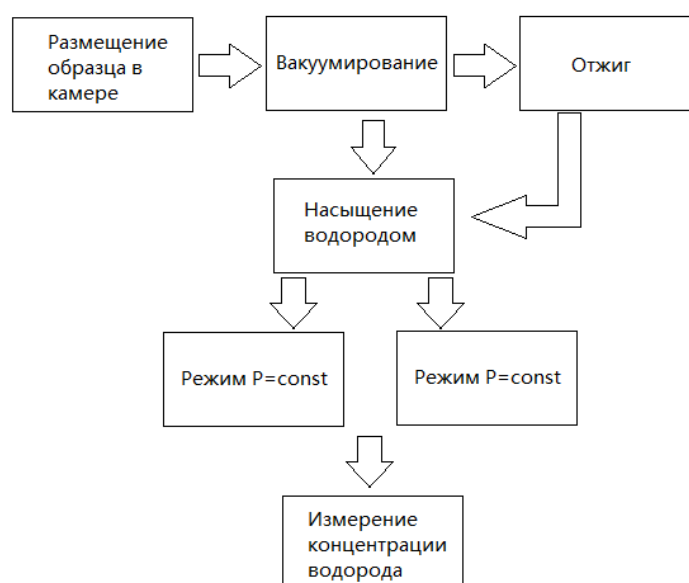


Рис.11 Схема процесса насыщения водородом

Изначально помещаем образец в камеру для дальнейшей дегазации.

Затем, если есть такая необходимость, проводится отжиг материала. После достижения достаточного вакуума напускаем определённый газ в реакционную камеру, которая содержит образец. Контролируем давление газа и температуру. Выбранный режим позволяет поддерживать давление и температуру постоянной или медленно изменять. Количество поглощенного образцом газа определяется системой путем расчета количества оставшегося газа. GRC можно использовать для исследования обратного процесса, а именно, десорбции газа. В качестве реакционного газа может быть выбран водород, азот или другой газ, который будет реагировать с твердым телом. Компьютер является неотъемлемой частью системы GRC. Компьютер считывает все аналого-цифровые данные от автоматизированного комплекса. Предоставленный программный пакет LabView выполняет не только автоматическое функционирование системы GRC, но и обеспечивает структурированное управление данными.

Некоторые материалы реагируют с водородом и азотом и образуют новые соединения при соответствующих условиях. Количество поглощенного газа может достигать больших значений. Например, материал LaNi_5 поглощает около 1000 см^3 водорода и образует гидрид LaNi_5H_6 . В этом случае чтобы восстановить водород в процессе реакции необходимо нагревать до высоких температур. Поэтому проводятся интенсивные исследования для применения этого замечательного материала в системах хранения водорода. Ведутся работы для использования теплоты образования в этой реакции. Построение графиков зависимости концентрации от давления (PCI) дает информацию о соотношении между давлением газа и количеством атомов газа в твердой фазе при данной

температуре. Из кривой PCI, можно получить важную информацию о характере реакции. Система GRC предназначена для выполнения таких измерений автоматически. Молярное количество газа можно найти из его объема, давления и температуры. Хотя закон идеального газа дает хорошее приближение для широкого диапазона температур и давления, предоставленная программа GrcLV использует вириального разложения уравнение для большей точности. Принцип работы системы GRC можно легко понять, обратившись к графику [20] .

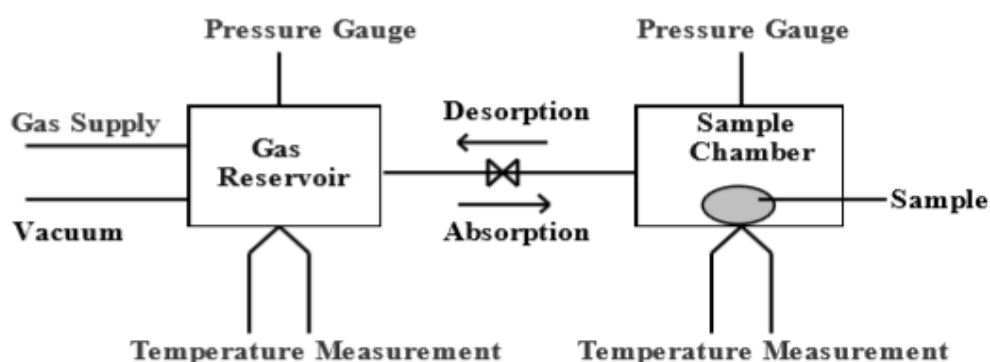


Рис.12 Основная схема процесса накопления водорода материалом

Система GRC сначала напускает соответствующее количество газа в резервуар и определяет его молярное количество N_0 от его давления и температуры. Затем система открывает клапаны между резервуаром и реакционной камерой и передает требуемое количество газа из резервуара в реакционную камеру. После завершения реакции, система вычисляет общее молярное количество газа N_g в камере с образцом и в резервуаре. Молярное количество газа поглощаемого твердым телом в процессе реакции N_s задается

$$N_s = N_0 - N_g, \quad (1)$$

Здесь предполагается, что начальная сумма атомов газа в твердом теле равна нулю. Если это не так, то уравнение (1) должен быть изменено, чтобы

$$N_s = N_{s0} + (N_0 - N_g), \quad (2)$$

где N_{s0} начальное молярное количество газа в твердой фазе. Программа управления GrcLV изначально предполагает $N_{s0} = 0$, но отслеживает значения N_{s0} в последующих шагах, таких как десорбция при различных температурах. Значение может быть сброшено до нуля, если следующим шагом будет вакуумирование. Поскольку молярное количество газа, по существу, определяется законом идеального газа

$$N = P V / RT \quad (3)$$

Точность системы ограничивается точностью измерения давления и температуры. Когда температура хорошо регулируется, измерение давления является ограничивающим фактором. В измерения поглощения, точность давления 0,1 кПа и объем участие около 50 см³. Таким образом, точность измерения составляет 0,1 фунтов на квадратный дюйм x 50 см³ / 15 фунтов на квадратный дюйм = 0,3 см³ STP. При измерении десорбции, давление газа значительно большей объем 500 см³ измеряется с помощью более чувствительный датчик с точностью 0,01 фунтов на квадратный дюйм, что приводит к той же точностью до 0,01 фунтов на квадратный дюйм x 500 см³ / 15 фунтов на квадратный дюйм = 0,3 см³ STP. Для образцов, которые поглощают большое количество газа (например, до 150 см³ H₂ газа в грамм LaNi₅), его количество может быть определено с высокой точностью. Тем не менее, точность измерения PCI самом деле, может быть ограничено медленной кинетикой. GrcLVS сообщает прореагировавшего количества газа в виде абсолютного значения в ccstp а также массового процента до образца.

Абсолютное значение в ccstp V связана с N_s просто $V = 22413,6 \times N_s$ (4)

относительная величина газа к массе (масса, вес) дается

$$\omega t = \frac{N_s M_G}{m} \times 100\% , \quad (5)$$

где m –масса образец и M_G –молярная масса газа (например, $1,0079 \times 2$ для водорода).

Для решения этих задач необходимо исследовать взаимодействие водорода с материалами, используя автоматические режимы работы GRC:

1. SOAK. Сначала в камеру с образцом впускается водород с предназначенным давлением и определенной температурой. Затем выдерживаем образец при данных давлении и температуры необходимое время. В это время на компьютер записывается количество поглощенного водорода от давления и температуры. Благодаря использованию данных режимов изучается кинетика сорбции водорода.

2. RELEASE. В работе этого режима (используется сразу после режима SOAK) давление водорода в камере с образцом, который уже сорбировал водород, постепенно уменьшается. Также используется компьютер и программное обеспечение, которое позволяет построить зависимость количества десорбционного водорода от времени (это часть изучения кинетики десорбции водорода). Многократное использование режимов SOAK и RELEASE без извлечения образца из вакуумной камеры позволяет исследовать максимально возможное количество циклов сорбции и десорбции водорода в материалах-накопителях.

3. PCI. В данном режиме есть возможность получения зависимости

количества абсорбированного или десорбированного водорода от давления в реакционной камере при постоянной температуре. Данный режим позволяет получить информацию о характере реакций сорбции-десорбции водорода, а именно скорость реакции, и ее гистерезис.

4. Monitor. При данном режиме проводится регулярная запись значений температуры и давления в базу данных.

Режим необходим при осуществлении нагрева образца перед насыщением водородом , а также для вакуумного отжига материалов.

Глава 2. Модели сорбции водорода углеродными нанотрубками

2.1 Феноменологическое термодинамическое описание процесса сорбции.

Прогресс в использовании водорода в качестве экологически чистого топлива зависит от решения проблемы безопасного и дешевого способа для его хранения. Организация оптимального процесса сорбции, синтез адсорбента с необходимой селективностью по отношению к водороду, а также выяснение механизма адсорбции и каталитического процесса требуют теоретического описания.

Целью работы является создание феноменологического термодинамического описания процесса сорбции и осуществление поиска аналитического решения, обеспечивающего создание материала, являющегося способным удерживать водород в течение длительного времени с большим объемным наполнением.

Описание процесса адсорбции на молекулярном уровне был разработан в течение двух параллельных направлениях, а именно: первое направление включает в себя термодинамическую теорию адсорбции Гиббса; второе направление включает в себя потенциальную теорию адсорбции Поляни, которая используется для описания физической адсорбции. Хорошо известно, что коэффициенты диффузии и энергия активации процесса диффузии зависит от отношения диаметра молекулы водорода ($d = 0.289 \text{ nm}$) и диаметр входных пор (М.М. Дубинина, Д.П. Тимофеева).

Структура и свойства адсорбента сильно влияют на его основные

характеристики, то есть способность адсорбции, скорость адсорбции и т.д. Согласно М.М. классификации Дубинина, все виды адсорбентов делятся на следующие структурные группы:

- адсорбенты с микропорами, размеры которых сравнимы с диаметром молекулы. В таких порах, адсорбционные потенциалы растут из-за того, что поля адсорбционных сил, создаваемых стенками поры накладываются друг на друга, дифференциальная теплота адсорбции возрастает и возрастает значение адсорбции;

- адсорбенты с большими порами, где нет роста адсорбционного потенциала;

- адсорбенты с переходными порами.

С помощью аналитического метода и с использованием феноменологического термодинамического описания процесса, был сделан вывод о возможности накопления водорода в порах адсорбента и его долгосрочном удержании при технически приемлемых параметрах окружающей среды.

Если поры адсорбента по своим размерам сопоставимы с молекулами адсорбата, процесс адсорбции приобретает активированный характер. В этом случае существенным становится наличие потенциального барьера на входе в поры. Наличие потенциального барьера, с одной стороны, осложняет микропроцесс заправки сорбента, но, с другой стороны, является фактором затормаживания десорбции.

Феноменологическое термодинамическое описание создано для

процесса сорбции адсорбентов о которых идет речь. С научной точки зрения модель позволяет получить оправданные оптимальные результаты для сорбционной емкости аккумулятора водорода и его условия заполнения. Было предложено создать оптимальный аккумулятор водорода, с капиллярами равными или меньше диаметра молекулы водорода. Для осуществления процесса заполнения, была предложена следующая технология.

Адсорбент должен быть помещен в технологическую камеру и вакуумируют до 10^{-3} - 10^{-5} Па. Чистый водород (степень чистоты водорода 99,999%) нагревали до 300°C должен подаваться в камеру до тех пор, пока атмосферное давление устанавливается в технологической камере. Затем четыре часа адсорбент, проведение в атмосфере водорода осуществляется. После этого, температура должна быть снижена, а давление снято. Анализ библиографических данных доказывает объективность подхода, предложенного.

В настоящее время существующие технологии по выращиванию цеолитов, углеродных нанотрубок и наносфер с заданными размерами пор, которые могут обеспечить достаточно приемлемую сорбцию. Создание сорбционного вещества с высоким потенциальным барьером обеспечивает долговременное хранение водорода в аккумуляторе водорода с приемлемой рабочей температурой.

2.2 Молекулярная кинетическая теория (теория функционала плотности)

В 1998 году авторы из Германии и Испании [21] используют метод

Монте-Карло (Grand Canonical Monte Carlo Simulation Method), чтобы рассчитать количество адсорбированного водорода различными углеродными материалами (при условии, что в физической адсорбции молекулы водорода не диссоциируют) при условиях 300K и 6МПа . В модели площадь поверхности параллельной пластины 2600 м²/г и адсорбционная емкость составляет 0,7 масс%. Эти результаты эксперимента похожи на эксперимент с активированным углем с удельной площадью поверхности 2290 м²/г - количество адсорбированного водорода 0,6 масс% .

В 1999 году в Университете Питтсбурга [22] был использован метод потенциала Slivera-Goldman, чтобы имитировать действие Н-Н, метод потенциала Crowell-Brown чтобы имитировать действие С-Н и подсчитать с помощью интегральных уравнений квантовых эффектов адсорбцию массивами и отдельными ОУНТ, трещинами и порами. МУНТ представляли собой плотно упакованный массив таким образом, что эффективная площадь поверхности уменьшается и не способствует адсорбции водорода. Адсорбционная емкость одиночных нанотрубок больше, чем трещин и пор активированного угля, при 77 К, 20 МПа достигла около 8,0 масс%.

В 2000 году в Южной Корее в Чонбукском университета [23,24] с использованием метода функционала плотности (DF), приближения сильной связи (ТВА) и градиента приближения (GGA) были вычислены сорбционные свойства ОУНТ по водороду. По функционалу плотности и приближению сильной связи (DFTBA) длины связей составили: С-Н - 0.110 нм и Н-Н - 0,074 нм; вычисление по функционалу плотности и градиенту приближения (DFGGA)

соответствующие энергии связи для C-H (-4,53 эВ) и H-H (-4,47 эВ). Расчет проводился для (10,10) ОУНТ. Максимальная емкость адсорбции должна превышать 14,3масс%, то есть, отношение H / C больше чем 2.

2.3 Геометрическая модель

Основной проблемой при изучении углеродных материалов-накопителей водорода остается плохая повторяемость экспериментальных результатов по определению предельной водородной емкости. Для решения установленной проблемы необходимо проводить расчеты с применением разнообразных моделей сорбции водорода углеродными материалами. Наиболее простой является геометрическая модель с учетом структурных характеристик материала. Данная модель не требует больших затрат и применения мощной вычислительной техники, а также сложного математического аппарата, что является несомненным преимуществом, хотя и не устанавливает влияния на процесс сорбции химических и физических воздействий.

Одной из примечательных характеристик нанотрубок является их высокая сорбционная способность. Нанотрубки имеют поверхностную структуру, высокую удельную поверхность нанотрубок и внутри нанотрубок имеются полости, доступные для сорбции, поэтому нанотрубки перспективный материал-аккумулятор водорода.

Нанотрубки, не подвергнутые специальной обработке, закрыты на концах. Вследствие этого, во внутренние полости трубок газовые примеси не проникают. Существует три различные области для возможной сорбции

молекул водорода закрытыми нанотрубками: межтрубные каналы (англ. «interstitial channels» — IC) - место внутри жгутов между отдельными трубками; канавки на поверхности жгутов (англ. «grooves» — G), то есть, область, которая образуется двумя смежными трубками на внешней поверхности жгута, и поверхности отдельных трубок, которые составляют внешнюю поверхность жгута (англ. «bundle surface site» — S) [25].

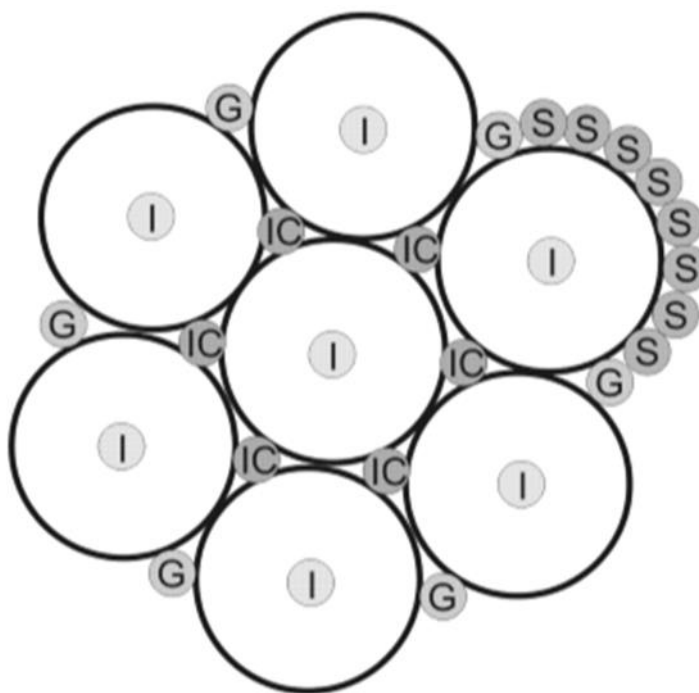


Рисунок .13 Места локализации примеси водорода на жгуте нанотрубок

Поверхностное накопление

Произведем расчет сорбции водорода пучка, состоящего из одностенных углеродных нанотрубок, учитывая только поверхностное накопление.

Количество молекул углерода, составляющих нанотрубки, в 1 г порошка (массовая доля нанотрубок в образце составляет 90%):

$$N_c = \frac{m \cdot N_A \cdot 0.9}{\mu_c} \quad (6)$$

Где m - масса порошка нанотрубок;

N_A - число Авогадро

μ_c - молярная масса углерода

Для создания конкретной геометрической модели, также предположим, что нанотрубка имеет конфигурацию «зигзаг». Если принять средний диаметр нанотрубок равным $19.5 \text{ \AA}$, то по окружности трубки укладывается 26 шестигранников. Рассмотрим структуру образующей трубку графеновой поверхности (рис.14)

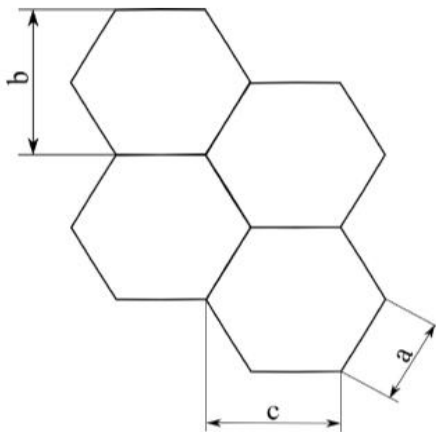


Рис.14 Структура графеновой поверхности

Длина связи С-С (расстояние a на рис.14) для нанотрубок известна, выразим остальные параметры через a :

$$b = 2a \sin \frac{\pi}{3} \quad (7)$$

Где a - длина связи С-С

$$c = 3a/2 \quad (8)$$

При такой конфигурации суммарная длина всех нанотрубок в образце будет определяться следующей формулой:

$$l_{\text{унт}}^{\Sigma} = \frac{N_c}{2 \cdot 26} \cdot h \quad (9)$$

где N_c — количество молекул углерода, составляющих нанотрубки,

h — «продольный» параметр решетки.

На рис.15 в качестве примера приведен жгут, состоящий из 37 нанотрубок, и указаны возможные места сорбции примеси водорода.

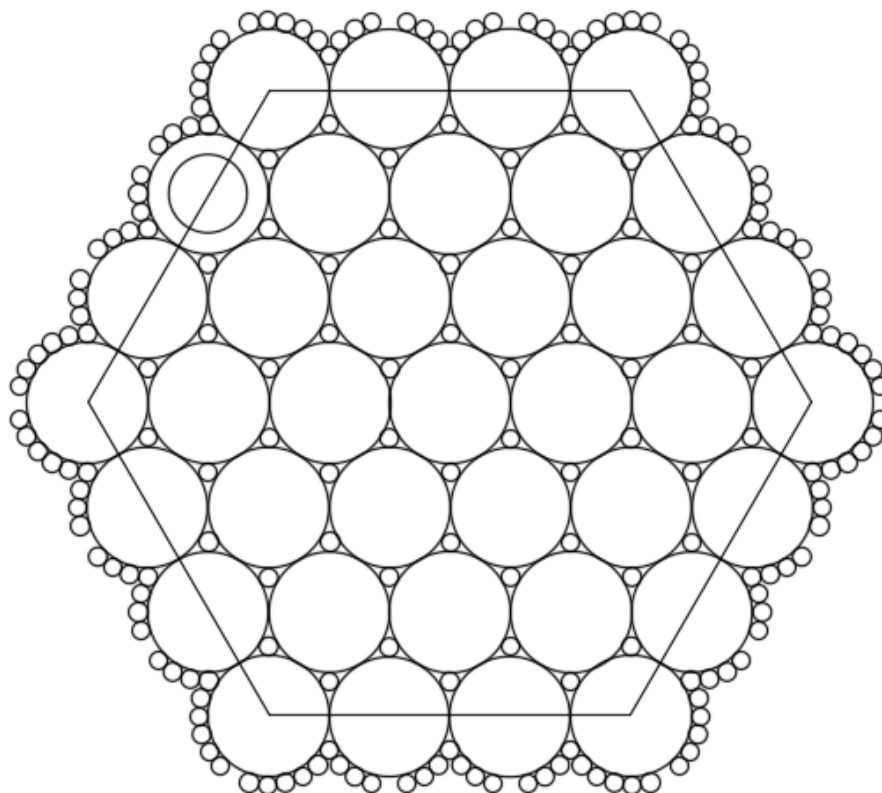


Рис.15 Схематичное изображение примеси водорода в жгуте из 37 нанотрубок

В поперечном сечении жгута, состоящего из 37 нанотрубок диаметром 1,95 нм каждая, существует 18 позиций для сорбции примеси водорода в канавках, на поверхности жгута (позиции G).

Из рис. 15 видно, что внутри нанотрубки (ОУНТ) способно уместиться 33 молекулы водорода. Исходя из параметров системы жгутов УНТ, рассчитаны удельные коэффициенты сорбции H_2 (в массовых долях) в образце УНТ для

трёх случаев сорбции: в полостях между нанотрубками ($K_{H_2}^{IC}$), на поверхности жгутов ($K_{H_2}^S$), и в желобках на поверхности жгутов нанотрубок ($K_{H_2}^G$)

$$n_{H_2}^S = \frac{\ell_{УНТ}^{\Sigma} \times \frac{132}{37}}{0.296 \times 10^{-9}} \quad (10)$$

$$K_{H_2}^S = \frac{n_{H_2}^S \times \mu_{(H_2)}}{N_A} \quad (11)$$

$$n_{H_2}^G = \frac{\ell_{УНТ}^{\Sigma} \times \frac{18}{37}}{0.296 \times 10^{-9}} \quad (12)$$

$$K_{H_2}^G = \frac{n_{H_2}^G \times \mu_{(H_2)}}{N_A} \quad (13)$$

$$n_{H_2}^{IC} = \frac{\ell_{УНТ}^{\Sigma} \times \frac{54}{37}}{0.296 \times 10^{-9}} \quad (14)$$

$$K_{H_2}^{IC} = \frac{n_{H_2}^{IC} \times \mu_{(H_2)}}{N_A} \quad (15)$$

где, 0.296×10^{-9} — диаметр атома водорода

Объемное накопление

Для открытия концов нанотрубки должны быть подвергнуты окислительной обработке [26], после чего их внутренняя поверхность будет являться еще одним участком возможной сорбции примеси (I) [27].

Из рис.16 видно что, внутри нанотрубки (ОУНТ) способно уместиться 33 молекул водорода, а внутри ДУНТ способно уместиться 27 молекул водорода, исходя из параметров системы жгутов УНТ, рассчитаны удельные коэффициенты сорбции H_2 (в массовых долях) в образце УНТ для четырёх случаев сорбции: внутри нанотрубок (только поверхностное накопление) ($K_{H_2}^I$), на поверхности жгутов ($K_{H_2}^S$), в желобках на поверхности жгутов нанотрубок ($K_{H_2}^G$) и в полостях между нанотрубками ($K_{H_2}^{IC}$): а%ОУНТ, б%ДУНТ

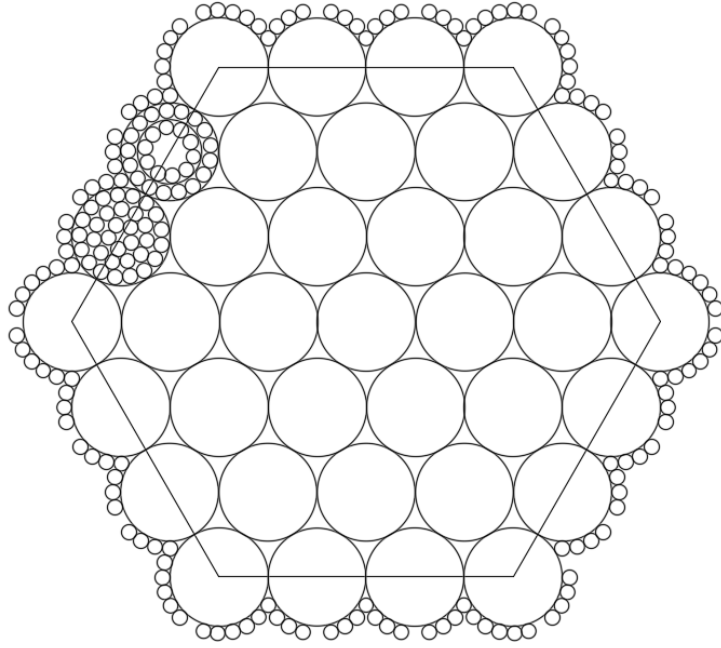


Рис.16 Схематичное изображение примеси водорода в жгуте из 37 нанотрубок

$$n_{H_2}^I = \frac{\rho_{\text{УНТ}}^{\Sigma} \times (a\% \times 33 + b\% \times 27)}{0.296 \times 10^{-9}} \quad (16)$$

$$K_{H_2}^I = \frac{n_{H_2}^I \times \mu(H_2)}{N_A} \quad (17)$$

$$C_{H_2}(\text{ОУНТ/ДУНТ}) = \frac{m_{H_2}}{m_{CNT}} = \frac{K_{H_2}^I + K_{H_2}^S + K_{H_2}^G + K_{H_2}^{IC}}{1} \quad (18)$$

Глава 3. Экспериментальные исследования

3.1 Расчет водород-сорбционной емкости по геометрической модели сорбции

Первоначально, для расчета сорбции всем образцом необходимо определить диаметр трубок. Чтобы сорбционная емкость была максимальной, необходимо задействовать области между соприкасающимися нанотрубками в жгуте. Для этого определим минимальный диаметр нанотрубок в жгуте для возможной сорбции водорода областями между нанотрубками. Схема для расчета приведена на Рис.17

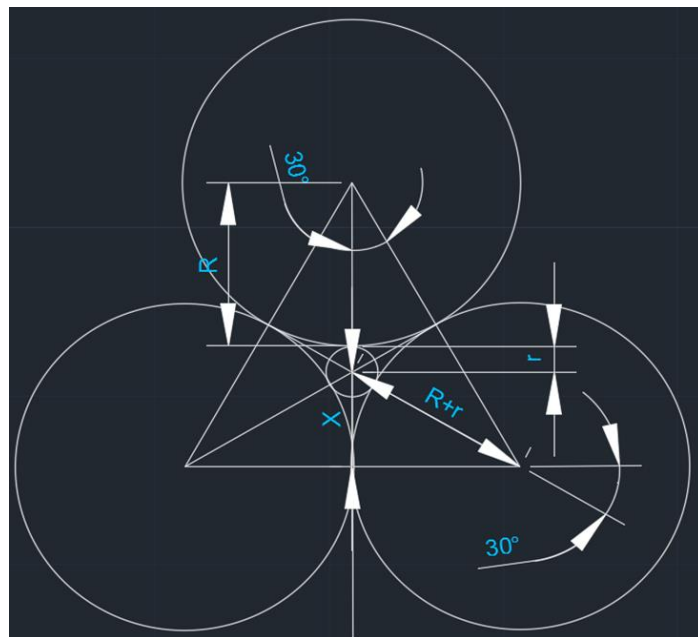


Рис.17 Схема для расчета минимального диаметра УНТ

$$\begin{cases} (R + r) \sin 30^\circ = X \\ R + r + x = \sqrt{3}R \end{cases}$$

$$\begin{cases} R = \frac{3 \times r}{(2 \times \sqrt{3}) - 3} \\ r = \frac{2.96 \text{ \AA}}{2} \end{cases}$$

$$R = 9.57 \text{ \AA}$$

$$D = 19.13 \text{ \AA}$$

Таким образом, для возможной сорбции одной молекулы водорода полостью между нанотрубками, необходимо, чтобы диаметр трубок не был меньше чем 1,9 нм.

Расчет сорбционной способности закрытых УНТ

Выше были представлены расчеты сорбционной способности УНТ с различной структурой и соотношением одностенных и многостенных нанотрубок, а также объемная и поверхностная (один монослой) концентрация водорода. Расчеты проводились с условием, что все нанотрубки открыты, то есть отсутствуют полусферические крышечки, закрывающие торцы нанотрубок. Их наличие препятствует объемному заполнению нанотрубок водородом. Полусферические крышечки способны также сорбировать водород своей поверхностью, как показано на рис.18 Рассчитаем сорбционную емкость закрытых полусферических торцов нанотрубок.

У каждой УНТ есть два торца, которые могут присоединить по 84 молекулы водорода, но это количество не достаточное, чтобы оказать влияние на сорбционную способность УНТ.

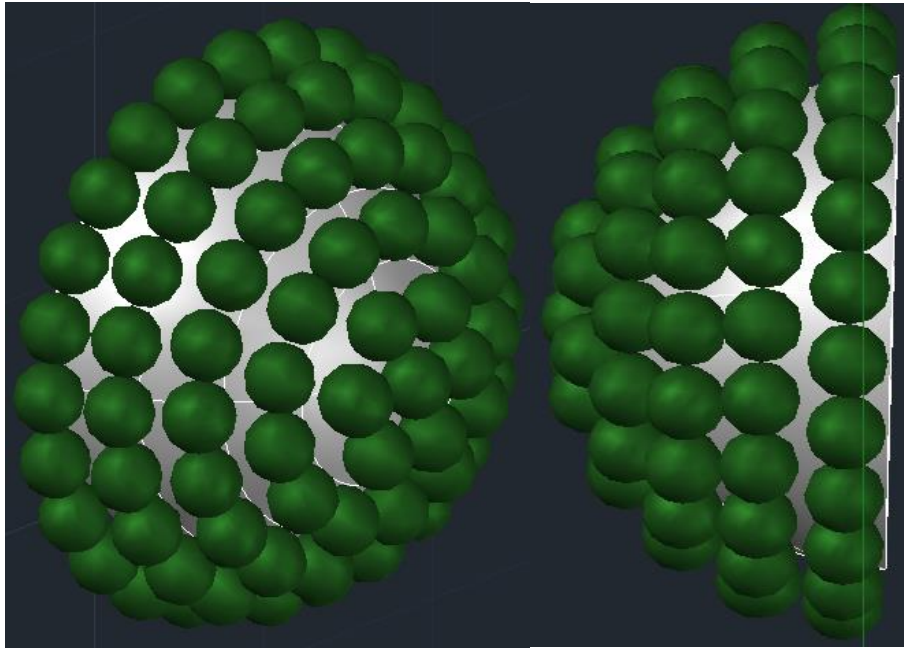


Рис.18 3D модель для торцов УНТ

$$n_{H_2}^P = 84 \times 2 = 168$$

$$K_{H_2}^P = \frac{n_{H_2}^P \times \mu_{(H_2)}}{N_A} \times 37 = 2.06512 \times 10^{-20}$$

N_A - число Авогадро, $N_A \approx 6.022 \cdot 10^{23}$

$\mu_{(H_2)}$ - молярная масса углерода, $\mu_{(H_2)}= 2$

Количество молекул углерода, составляющих нанотрубки, в 1 г порошка (массовая доля нанотрубок в образце составляет 90%) по формуле (6).

m - масса порошка нанотрубок, $m=1г$;

N_A - число Авогадро, $N_A \approx 6.022 \cdot 10^{23}$;

μ_c - молярная масса углерода, $\mu_c=12$.

Концентрация всех атомов углерода составила $N_c = 4.52 \cdot 10^{22}$

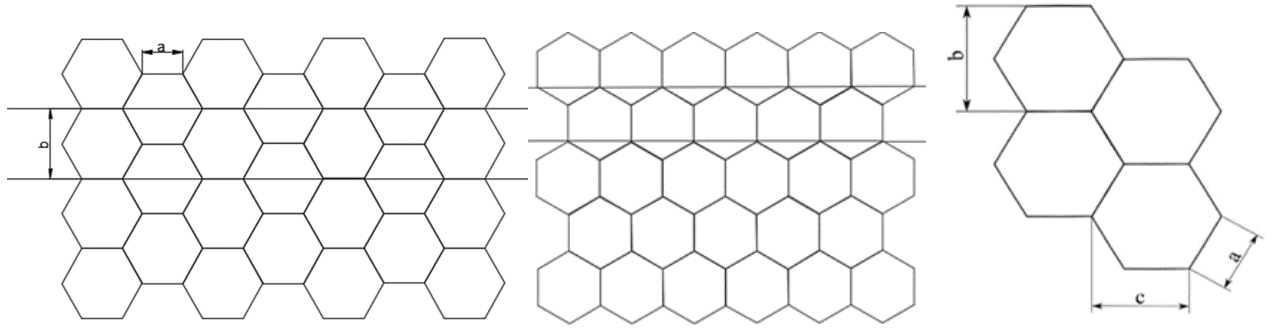


Рис. 19 Структура графеновой поверхности (слева - кресло, справа - зигзаг) и параметры гексагонов.

Длина связи С-С в нанотрубке составляет 1.42 Å [28] ($a=1.42$ Å), а параметры b и c рассчитывались по формуле (7),(8):

$$b=2a\sin\frac{\pi}{3}=2.46 \text{ Å} \quad c=3a/2=2.13 \text{ Å}$$

Для углеродных нанотрубок типа «зигзаг» $h=c$, h - «продольный» параметр решетки, по формуле (9), а суммарная длина нанотрубок $l_{\text{ннт}}^{\Sigma}=1.86 \times 10^{21}$ Å.

По формуле (10)— (15) рассчитываем концентрации:

$$n_{H_2}^S = \frac{\ell_{\text{ннт}}^{\Sigma} \times \frac{132}{37}}{0.296 \times 10^{-9}} = \frac{1.86 \times 10^{21} \times 10^{-10} \times \frac{132}{37}}{0.296 \times 10^{-9}} = 0.2242 \times 10^{22}$$

$$K_{H_2}^S = \frac{n_{H_2}^S \times \mu(H_2)}{N_A} = \frac{0.2242 \times 10^{22} \times 2}{6.02 \times 10^{23}} = 0.0075 = 0.75\%$$

$$n_{H_2}^G = \frac{\ell_{\text{ннт}}^{\Sigma} \times \frac{18}{37}}{0.296 \times 10^{-9}} = \frac{1.86 \times 10^{21} \times 10^{-10} \times \frac{18}{37}}{0.296 \times 10^{-9}} = 0.03057 \times 10^{22}$$

$$K_{H_2}^G = \frac{n_{H_2}^G \times \mu(H_2)}{N_A} = \frac{0.03057 \times 10^{22} \times 2}{6.02 \times 10^{23}} = 0.00102 = 0.102\%$$

$$n_{H_2}^{IC} = \frac{\ell_{\text{ннт}}^{\Sigma} \times \frac{54}{37}}{0.296 \times 10^{-9}} = \frac{1.86 \times 10^{21} \times 10^{-10} \times \frac{54}{37}}{0.296 \times 10^{-9}} = 0.09171 \times 10^{22}$$

$$K_{H_2}^{IC} = \frac{n_{H_2}^{IC} \times \mu(H_2)}{N_A} = \frac{0.09171 \times 10^{22} \times 2}{6.02 \times 10^{23}} = 0.00306 = 0.306\%$$

$$C=K^s+K^G+K^{IC}+K^P=1.158\%+2.06512 \times 10^{-20}$$

Для типа «кресло» $h=b$, h — «продольный» параметр решетки, по формуле (9):

$$l_{\text{УНТ}}^{\Sigma} = \frac{N_c}{2 \cdot 26} \cdot b = 2.15 \times 10^{21} \text{ \AA}$$

Соответствующие емкости рассчитывались по формуле (10)— (15):

$$n_{H_2}^S = \frac{\ell_{\text{УНТ}}^{\Sigma} \times \frac{132}{37}}{0.296 \times 10^{-9}} = \frac{2.15 \times 10^{21} \times 10^{-10} \times \frac{132}{37}}{0.296 \times 10^{-9}} = 0.2592 \times 10^{22}$$

$$K_{H_2}^S = \frac{n_{H_2}^S \times \mu(H_2)}{N_A} = \frac{0.2592 \times 10^{22} \times 2}{6.02 \times 10^{23}} = 0.0087 = 0.87\%$$

$$n_{H_2}^G = \frac{\ell_{\text{УНТ}}^{\Sigma} \times \frac{18}{37}}{0.296 \times 10^{-9}} = \frac{2.15 \times 10^{21} \times 10^{-10} \times \frac{18}{37}}{0.296 \times 10^{-9}} = 0.03534 \times 10^{22}$$

$$K_{H_2}^G = \frac{n_{H_2}^G \times \mu(H_2)}{N_A} = \frac{0.03534 \times 10^{22} \times 2}{6.02 \times 10^{23}} = 0.001179 = 0.1179\%$$

$$n_{H_2}^{IC} = \frac{\ell_{\text{УНТ}}^{\Sigma} \times \frac{54}{37}}{0.296 \times 10^{-9}} = \frac{2.15 \times 10^{21} \times 10^{-10} \times \frac{54}{37}}{0.296 \times 10^{-9}} = 0.106 \times 10^{22}$$

$$K_{H_2}^{IC} = \frac{n_{H_2}^{IC} \times \mu(H_2)}{N_A} = \frac{0.106 \times 10^{22} \times 2}{6.02 \times 10^{23}} = 0.00354 = 0.354\%$$

$$C=K^s+K^G+K^{IC}+K^P=1.3419\%+2.06512 \times 10^{-20}$$

Расчет сорбционной способности открытых УНТ для типа «зигзаг»

Суммарная длина всех открытых УНТ типа «зигзаг» в образце составила

$$l_{\text{УНТ}}^{\Sigma} = 1.86 \times 10^{21} \text{ \AA}.$$

Результаты, полученные по формуле (10)—(18), представлены в Таблице

1. Исходя из результатов, можно видеть, что изменение соотношения ОУНТ и ДУНТ в материале приводит к значительным изменениям сорбционной емкости. Это связано со структурой нанотрубок. Вследствие того, что внутри ОУНТ нет дополнительных слоев, препятствующих заполнению водородом нанотрубки,

сорбционная емкость будет выше, чем в случае для ДУНТ.

Для типа «кресло» суммарная длина всех нанотрубок в образце составила

$$l_{\text{УНТ}}^{\Sigma} = \frac{N_c}{2 \cdot 26} \cdot b = 2.15 \times 10^{21} \text{ \AA}.$$

Полученные по формуле (10)—(18) результаты для нанотрубок типа «кресло» представлены в Таблице 1.

Таблица .1 Концентрация водорода (масс%) для всех типов УНТ

ОУНТ/ДУНТ	Поверхностное (C _{H2} ,масс%) зигзаг	Объёмное (C _{H2} ,масс%) зигзаг	Поверхностное (C _{H2} ,масс%) кресло	Объёмное (C _{H2} ,масс%) кресло
0×100	1,16	6,80	1,34	7,86
10×90		6,93		8,01
20×80		7,05		8,15
30×70		7,18		8,30
40×60		7,30		8,44
50×50		7,43		8,60
60×40		7,55		8,73
70×30		7,68		8,88
80×20		7,80		9,02
90×10		7,93		9,17
100×0		8,05		9,30
Закрытые	1,16+2,07×10 ⁻²⁰		1,34+2,07×10 ⁻²⁰	

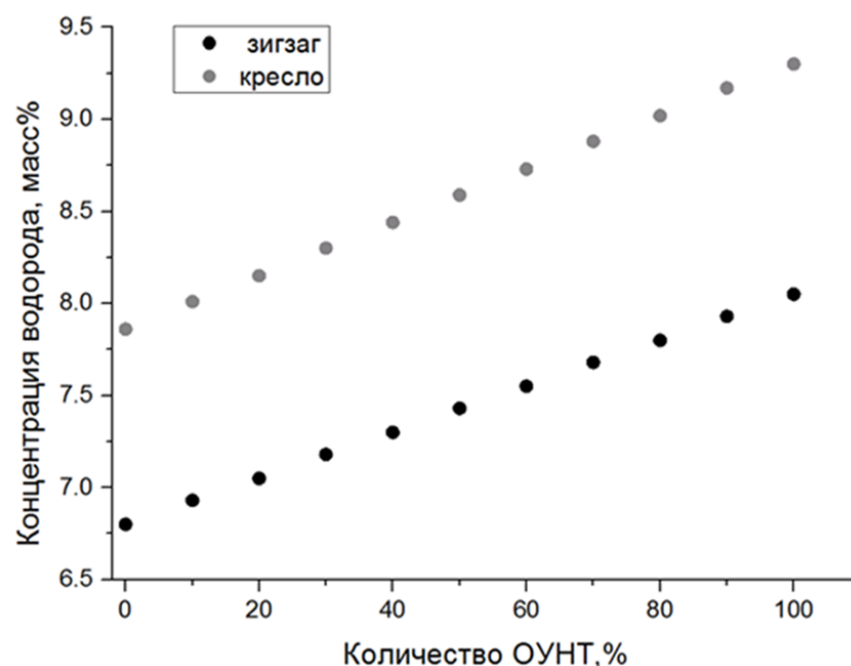


Рис.20 График зависимости концентрации поглощенного образцом водорода от количества ОУНТ в материале.

Как можно видеть из таблицы концентрация сорбированного водорода для закрытых нанотрубок типа кресло выше, чем для типа зигзаг. В случае объемного накопления концентрация водорода также больше для нанотрубок типа «кресло». Наличие в образцах двустенных нанотрубок приводит к уменьшению поглощенного водорода для обоих типов нанотрубок. Данные расчеты подтверждают влияние структуры углеродного материала на его водород-сорбционную емкость.

3.2 Измерение водород-сорбционной емкости углеродных нанотрубок

Измерение сорбционной емкости углеродных нанотрубок проводилось при комнатной и отрицательной температуре и давление водорода 0,8МПа.

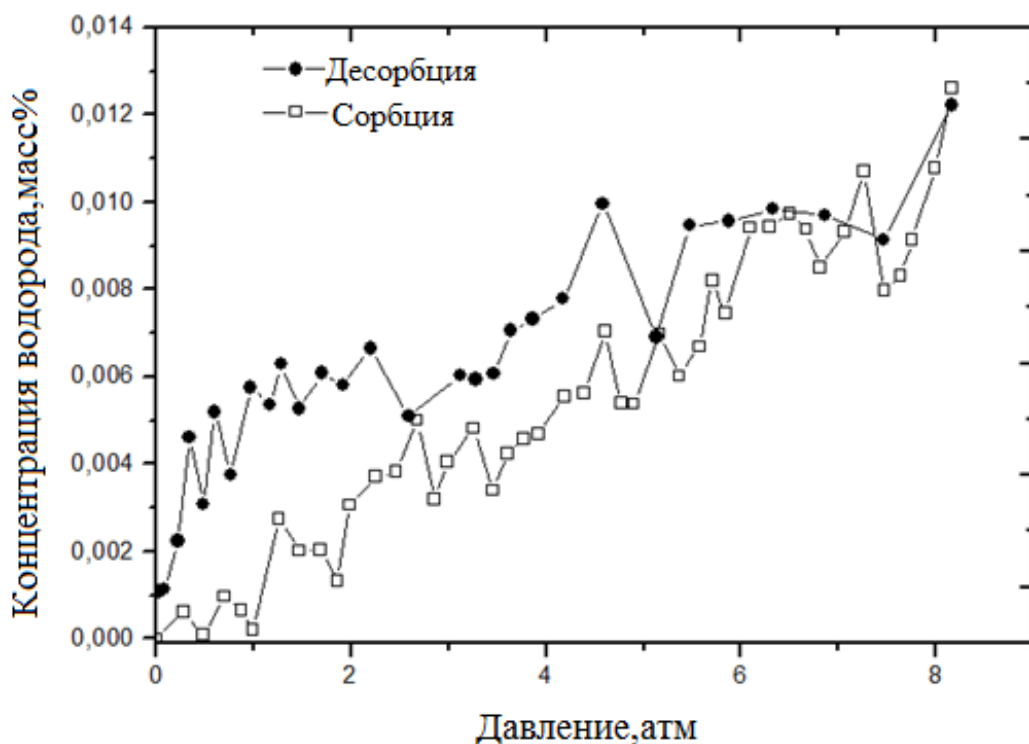


Рис.21 График зависимости концентрации водорода от давления в камере при комнатной температуре

Из полученного графика.21 видно, что максимальное количество сорбируемого водорода составляет примерно 1,2 масс% при давлении 8 атм. Десорбция водорода из образца углеродного материала осуществлялась также при комнатной температуре. Как можно наблюдать, водород десорбировался не в полном объеме, некоторое его количество – около 0,2 масс% осталось в образце.

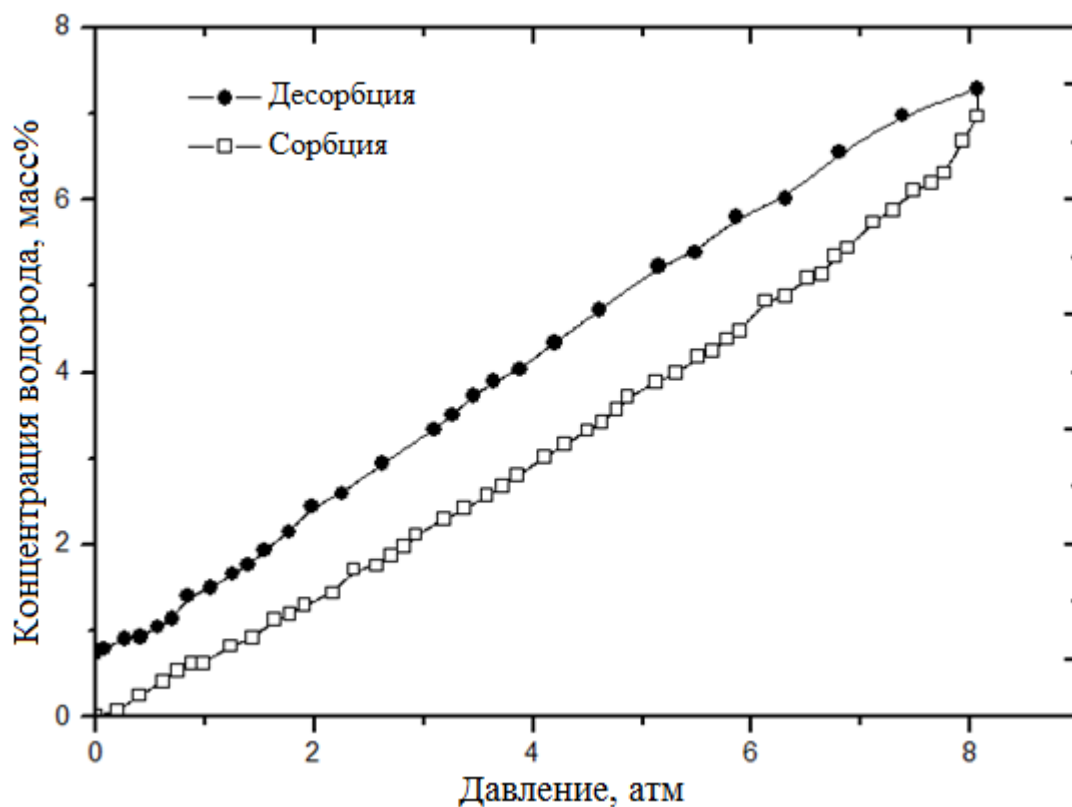


Рис.22 График зависимости концентрации водорода от давления в камере при отрицательной температуре

Из полученного графика.22 следует, что максимальное количество сорбируемого водорода составляет примерно 7 масс% при давлении 8 атм. Десорбция водорода из образца углеродного материала осуществлялась также при отрицательной температуре. Как можно наблюдать, водород десорбировался не в полном объеме, некоторое его количество – менее 1 масс% осталось в образце.

Глава 4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

Планирование комплекса работ на создание проекта

4.1 Составление перечня работ

Трудоемкость выполнения ВКР оценивается экспертным путем в человеко-днях и носит вероятностный характер, т.к. зависит от множества трудно учитываемых факторов.

Разделим выполнение дипломной работы на этапы, представленные в таблице 2:

Таблица. 2 Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Основные этапы	№ работы	Содержание работы	Должность исполнителя
Разработка задания на НИР	1	Составление и утверждение задания НИР	Научный руководитель
Проведение НИР			
Выбор направления исследования	2	Изучение поставленной задачи и поиск материалов по теме	Научный руководитель Студент-дипломник,
	3	Выбор моделей и способов анализа	Научный руководитель
	4	Календарное планирование работ	Научный руководитель
Теоретические и экспериментальные исследования	5	Разработка моделей для исследования	Руководитель, консультант, студент-дипломник
	6	Поиск методов решения	Студент-дипломник
	7	Реализация моделей	Студент-дипломник

Обобщение и оценка результатов	8	Анализ полученных результатов, выводы	Студент-дипломник, консультант
	9	Оценка эффективности полученных результатов	Руководитель, консультант, студент-дипломник
Оформление отчета по НИР	10	Составление пояснительной записки	Студент-дипломник

4.2. Определение трудоемкости работ

Расчет трудоемкости осуществляется опытно-статистическим методом, основанным на определении ожидаемого времени выполнения работ в человеко-днях по формуле:

$$t_{ожі} = \frac{3t_{mini} + 2t_{maxi}}{5}, \quad (2.1)$$

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

t_{mini} - минимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы (оптимистическая оценка: в предположении наиболее благоприятного стечения обстоятельств), чел.-дн.;

t_{maxi} - максимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы (пессимистическая оценка: в предположении наиболее неблагоприятного стечения обстоятельств), чел.-дн.

Рассчитаем значение ожидаемой трудоёмкости работы:

работа 1:

$$t_{ож1} = \frac{3t_{min1} + 2t_{max1}}{5} = \frac{3 \cdot 6 + 2 \cdot 12}{5} = 8,4$$

работа 2:

$$t_{ож2} = \frac{3t_{min2} + 2t_{max2}}{5} = \frac{3 \cdot 16 + 2 \cdot 20}{5} = 17,6$$

работа 3:

$$t_{ож3} = \frac{3t_{min3}+2t_{max3}}{5} = \frac{3 \cdot 3 + 2 \cdot 6}{5} = 4,2$$

работа 4:

$$t_{ож4} = \frac{3t_{min4}+2t_{max4}}{5} = \frac{3 \cdot 4 + 2 \cdot 7}{5} = 5,2$$

работа 5:

$$t_{ож5} = \frac{3t_{min5}+2t_{max5}}{5} = \frac{3 \cdot 7 + 2 \cdot 18}{5} = 11,4$$

работа 6:

$$t_{ож6} = \frac{3t_{min6}+2t_{max6}}{5} = \frac{3 \cdot 5 + 2 \cdot 7}{5} = 7,8$$

работа 7:

$$t_{ож7} = \frac{3t_{min7}+2t_{max7}}{5} = \frac{3 \cdot 8 + 2 \cdot 11}{5} = 9,2$$

работа 8:

$$t_{ож8} = \frac{3t_{min8}+2t_{max8}}{5} = \frac{3 \cdot 7 + 2 \cdot 9}{5} = 7,8$$

работа 9:

$$t_{ож9} = \frac{3t_{min9}+2t_{max9}}{5} = \frac{3 \cdot 3 + 2 \cdot 6}{5} = 4,2$$

работа 10:

$$t_{ож10} = \frac{3t_{min10}+2t_{max10}}{5} = \frac{3 \cdot 8 + 2 \cdot 12}{5} = 9,6$$

Для установления продолжительности работы в рабочих днях используем формулу:

$$T_{pi} = \frac{t_{ожi}}{ч_i}, \quad (2.2)$$

где T_{pi} - продолжительность одной 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.

работа 1:

$$T_{p1} = \frac{t_{ож1}}{ч_1} = \frac{8,4}{1} = 8,4$$

работа 2:

$$T_{p2} = \frac{t_{ож2}}{ч_2} = \frac{17,6}{2} = 8,8$$

работа 3:

$$T_{p3} = \frac{t_{ож3}}{ч_3} = \frac{4,2}{1} = 4,2$$

работа 4:

$$T_{p4} = \frac{t_{ож4}}{ч_4} = \frac{5,2}{1} = 5,2$$

работа 5:

$$T_{p5} = \frac{t_{ож5}}{ч_5} = \frac{11,4}{3} = 3,8$$

работа 6:

$$T_{p6} = \frac{t_{ож6}}{ч_6} = \frac{7,8}{1} = 7,8$$

работа 7:

$$T_{p7} = \frac{t_{ож7}}{ч_7} = \frac{9,2}{1} = 9,2$$

работа 8:

$$T_{p8} = \frac{t_{ож8}}{ч_8} = \frac{7,8}{2} = 3,9$$

работа 9:

$$T_{p9} = \frac{t_{ож9}}{ч_9} = \frac{4,2}{3} = 1,4$$

работа 10:

$$T_{p10} = \frac{t_{ож10}}{ч_{10}} = \frac{9,6}{1} = 9,6$$

Для удобства построения календарного план-графика, длительность этапов в рабочих днях переводится в календарные дни и рассчитывается по следующей формуле:

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k, \quad (2.3)$$

где T_{ki} - продолжительность выполнения одной работы, календ. дн.;

T_{pi} - продолжительность одной работы, раб. дн.;

k - коэффициент календарности, предназначен для перевода рабочего времени в календарное.

Коэффициент календарности рассчитывается по формуле:

$$k = \frac{T_{кг}}{T_{кг} - T_{вд} - T_{пд}}, \quad (2.4)$$

где $T_{кг}$ - количество календарных дней в году;

$T_{вд}$ - количество выходных дней в году;

$T_{пд}$ - количество праздничных дней в году.

Определим длительность этапов в рабочих днях и коэффициент календарности:

$$k = \frac{T_{кг}}{T_{кг} - T_{вд} - T_{пд}} = \frac{365}{365 - 104 - 14} = 1,48,$$

тогда длительность этапов в рабочих днях, следует учесть, что расчетную величину продолжительности работ T_k нужно округлить до целых чисел.

Результаты расчетов приведены в таблице 3

Таблица. 3 Временные показатели проведения ВКР

№ раб.	Исполнители	Продолжительность работ						
		t_{min} чел-дн	t_{max} чел-дн	$t_{ож}$ чел-дн	T_p раб-дн	T_k кал-дн	$y_i, \%$	$\Gamma_i, \%$
1	Научный руководитель	6	12	8,4	8,4	13	12,96	12,96
2	Научный руководитель, Студент-дипломник	16	20	17,6	8,8	14	13,58	26,54
3	Научный руководитель	3	6	4	4,2	7	6,48	33

4	Научный руководитель	4	7	5	5,2	8	8,02	41,5
5	Руководитель, консультант, студент- дипломник	7	18	11,4	3,8	6	5,86	46,91
6	Студент- дипломник,	5	7	8	7,8	12	12,04	58,95
7	Студент- дипломник,	8	11	9	9,2	14	14,20	73,15
8	Студент- Дипломник консультант,	7	9	8	5,9	9	9,10	82,25
9	Руководитель, консультант, студент-дипл омник	3	6	4,2	1,9	3	2,93	85,20
10	Студент- дипломник	8	12	10	9,6	15	14,81	100,00
ИТОГО						101		

4.3. Построение графика работ

Наиболее удобным и наглядным видом календарного плана работ является построение ленточного графика проведения НИР в форме диаграмм Ганта.

Диаграмма Ганта – горизонтальный ленточный график, на котором работы по теме представляются протяженными во времени отрезками, характеризующимися датами начала и окончания выполнения данных работ.

График строится в рамках таблицы 4 с разбивкой по месяцам и неделям (7 дней) за период времени дипломирования. При этом работы на графике выделяются различной штриховкой в зависимости от исполнителей, ответственных за ту или иную работу.

Таблица .4 Календарный план проведения НИР

Этап	Вид работы	Исполнители	t _к	Февраль	Март	Апрель	Май	Июнь
1	Составление и утверждение задания НИР	Научный руководитель	13	■				
2	Изучение поставленной задачи и поиск материалов и поиск материалов по теме	Научный руководитель, Студент-дипломник	14		■ ■			
3	Выбор моделей и способов анализа	Научный руководитель	7		■			
4	Календарное планирование работ	Научный руководитель	8		■			
5	Разработка моделей для исследования	Руководитель, консультант, студент-дипломник	6		■ ■ ■			
6	Поиск методов решения	Студент-дипломник,	12			■		
7	Реализация моделей	Студент-дипломник,	14			■		
8	Анализ полученных результатов, выводы	Студент-Дипломник, консультант,	9				■ ■	
9	Оценка эффективности полученных результатов	Руководитель, консультант, студент-дипломник	3				■ ■ ■	
10	Составление пояснительной записки	Студент-дипломник	15					■



- научный руководитель;



- консультант;



- студент-дипломник.

4.4. Бюджет научно-технического исследования (НТИ)

При планировании бюджета НТИ должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов расходов, связанных с его выполнением.

4.4.1 Расчет материальных затрат НТИ

Расчет материальных затрат осуществляется по следующей формуле:

$$З_m = (1+k_T) \cdot \sum_{i=1}^m C_i N_{расхi}, \quad (4.1)$$

где m – количество видов материальных ресурсов, потребляемых при выполнении научного исследования;

$N_{расхi}$ – количество материальных ресурсов i -го вида, планируемых к использованию при выполнении научного исследования (шт., кг, м, m^2 и т.д.);

C_i – цена приобретения единицы i -го вида потребляемых материальных ресурсов (руб./шт., руб./кг, руб./м, руб./ m^2 и т.д.);

k_T – коэффициент, учитывающий транспортно-заготовительные расходы.

Транспортные расходы принимаются в пределах 15-25% от стоимости материалов.

Таблица . 5 Материальный затраты

Наименование	Единица измерения	Количество	Цена за ед., руб.	Затраты на материалы, ($З_m$), руб.
Бумага	лист	150	2	345
Интернет	М/бит (пакет)	1	350	402,5

Ручка	шт.	1	20	23
Тетрадь	шт.	1	10	11,5
CNT	г	1	600	690
Спирт	л	0,3	180	62,1
Итого				1534,1

4.4.2 Расчет затрат на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ

В данную статью включают все затраты, связанные с приобретением специального оборудования (приборов, контрольно-измерительной аппаратуры, стендов, устройств и механизмов), необходимого для проведения работ по конкретной теме.

При приобретении спецоборудования необходимо учесть затраты по его доставке и монтажу в размере 15% от его цены.

Таблица.6 Расчет бюджета затрат на приобретение спецоборудования для научных работ

Наименование оборудования	Время использования оборудования, час	Цена использования оборудования, тыс. руб/час	Общая стоимость оборудования, тыс. руб.
Gas Reaction Controller	8	6	55,2
Итого:			55,2

4.4.3 Основная и дополнительная заработная плата исполнителей темы

В состав основной заработной платы включается премия, выплачиваемая ежемесячно из фонда заработной платы в размере 20 –30 % от тарифа или оклада. Расчет основной заработной платы сводится в табл.7

Таблица.7 Расчет основной заработной платы

№ п/ п	Наименование Этапов	Исполнители по категориям	Трудоемкость, чел. - дн.	Зарботная плата, приходящаяся на один чел.-дн., тыс. руб.	Всего заработная плата по тарифу (окладам), тыс. руб
1	Составление и утверждение задания НИР	Научный руководитель	8	1,2	10,8
2	Изучение поставленной задачи и поиск материалов по теме	Научный руководитель, Студент- дипломник	18	1,5	30,2
3	Выбор моделей и способов анализа	Научный руководитель	4	1,2	5,4
4	Календарное планирование работ	Научный руководитель	5	1,2	6,7
5	Разработка моделей для исследования	Научный руководитель, консультант, студент-диплом ник	11	2,7	33,3
6	Поиск методов решения	Студент-дипло мник	8	0,3	2,7
7	Реализация моделей	Студент-дипло мник	9	0,3	3,0
8	Анализ полученных результатов, выводы	Студент-дипло мник, консультант	8	1,5	13,4
9	Оценка эффективности полученных результатов	Руководитель, консультант, студент-диплом ник	4	2,7	12,1
10	Составление пояснительной записки	Студент-дипло мник	10	0,3	3,4
Итого					121

$$З_{\text{зн}} = З_{\text{осн}} + З_{\text{доп}}, \quad (4.3)$$

где $З_{\text{осн}}$ – основная заработная плата;

$Z_{\text{доп}}$ – дополнительная заработная плата (12-20 % от $Z_{\text{осн}}$).

$$Z_{\text{доп}} = 121000 \cdot 0.15 = 18150 \text{ руб.}$$

4.4.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется исходя из следующей формулы:

$$Z_{\text{внеб}} = K_{\text{внеб}} \cdot (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}), \quad (4.4)$$

где $K_{\text{внеб}}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.).

На 2014 г. в соответствии с Федеральным законом от 24.07.2009 №212-ФЗ установлен размер страховых взносов равный 30%. На основании пункта 1 ст.58 закона №212-ФЗ для учреждений, осуществляющих образовательную и научную деятельность в 2014 году водится пониженная ставка – 30%.

$$Z_{\text{внеб}} = 121000 \cdot 1.15 \cdot 1.3 \cdot 0.3 = 54268,5 \text{ руб.}$$

4.4.5 Накладные расходы

Величина накладных расходов определяется по формуле:

$$Z_{\text{накл}} = (\sum \text{статей}) \cdot K_{\text{нр}}, \quad (4.5)$$

где $K_{\text{нр}}$ – коэффициент, учитывающий накладные расходы.

Величину коэффициента накладных расходов можно взять в размере 16%. Таким образом, наибольшие накладные расходы при первом исполнении равны: $Z_{\text{накл}} = 174670,1 \cdot 0,16 = 27947,22 \text{ руб.}$

4.4.6 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

Таблица.8 Расчет бюджета затрат НТИ

Наименование статьи	Сумма, руб.	Примечание
Материальные затраты НТИ	1534,1	Пункт 4.1
Затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	55200	Пункт 4.2
Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	81000	Пункт 4.3
Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	9720	Пункт 4.4
Отчисления во внебюджетные фонды	27216	Пункт 4.5
Накладные расходы	27947,22	16 % от суммы ст. 1-5
Бюджет затрат НТИ	202617,32	Сумма ст. 1- 6

Глава 5. Социальная ответственность

Введение

Безопасность работника в условиях любого современного предприятия обеспечивается правовой, социально-экономической, организационно-технической, санитарно-гигиенической, лечебно-профилактической защитой. Защита человека – основа охраны труда. Организационные мероприятия по охране труда должны быть основаны на административных, и правоохранительных мерах по предотвращению воздействия на человека вредных и опасных факторов производственной среды.

Работа проводилась на кафедре Общей физики на физико-техническом институте Национального исследовательского Томского политехнического университета. Для выполнения выпускной квалификационной работы на тему «Разработка методики насыщения водородом углеродного материала, содержащего нанотрубки» проводилось исследование цикла сорбции - десорбции водорода на установке: автоматизированный комплекс Gas Reaction Controller. Основная работа заключается в определении влияния температуры на параметры насыщения водородом углеродного материала, содержащего нанотрубки. Следовательно, для разработки комплекса мероприятий технического, организационного, режимного и правового характера, минимизирующих негативные последствия проектируемой деятельности, особое внимание было уделено безопасности и гигиенам труда при осуществлении работ на автоматизированный комплекс Gas Reaction Controller.

5.1.Техногенная безопасность

Исследование цикла сорбции – десорбции проводилось с помощью автоматизированного комплекса Gas Reaction Controller, работа которого производится за счет питания от сети переменного тока напряжением 220 В. В процессе проведения работы на установке Gas Reaction Controller, следовательно,возможно воздействие вредных факторов таких, а именно:

- а) превышение уровней шума;
- б) повышение температуры окружающей среды;
- в) отклонение показателей микроклимата в помещении;
- г) превышение уровней электромагнитных и тепловых излучений;
- д) недостаточная освещенность рабочей зоны.

Для удобства работы в помещении необходима нормировка параметров микроклимата [СанПиН 2.2.4.548–96]. Необходимо применение защитных мероприятий по способам и средствам защиты от высоких и низких температур, системы отопления, вентиляции и кондиционировании воздуха и т.п.

Оптимальные нормы микроклимата, соответствующих Категории работ по уровню энергозатрат в лаборатории (меньше 139Вт) показаны на таблице 9

Таблица. 9 – Оптимальные величины показателей микроклимата на рабочих местах

Период года	Температура воздуха, °С	Температура поверхностей, °С	Относительн ая влажность воздуха, %	Скорость движения воздуха, м/с
-------------	----------------------------	------------------------------------	---	--------------------------------------

Холодный	22-24	21-25	60-40	0,1
Теплый	23-25	22-26	60-40	0,1

Для нормализации микроклимата, мы можем принимать следующие средства: дистанционное управление и наблюдение; рациональная тепловая изоляция оборудования; защита работающих различными видами экранов и рациональная вентиляция и отопление.

В моем рабочем месте, температура воздух и влажность являются допустимыми, только нужна рациональная вентиляция. И выбрана естественная вентиляция.

В связи с работой насоса в лаборатории возникло превышение уровней шума. Основное физиологическое воздействие шума заключается в том, что повреждается внутреннее ухо, возможны изменения электрической проводимости кожи, биоэлектрической активности головного мозга, сердца и скорости дыхания, общей двигательной активности, а также изменения размера некоторых желез эндокринной системы, кровяного давления, сужение кровеносных сосудов, расширение зрачков глаз. Работающий в условиях длительного шумового воздействия испытывает раздражительность, головную боль, головокружение, снижение памяти, повышенную утомляемость, понижение аппетита, нарушение сна.[29]. По санитарным нормам, допустимым уровнем шума принято считать: 55 децибел (дБ) в дневное время и 40 децибел (дБ) ночью. Одним из средств защита от шума балансировка вращающихся деталей, уменьшение зазоров в зацеплениях механических передач, применение соответствующей смазки.

Одной из условий, препятствующих работе в лаборатории, является недостаточная освещенность рабочей зон. Недостаточное освещение влияет на функционирование зрительного аппарата, то есть определяет зрительную работоспособность, на психику человека, его эмоциональное состояние, вызывает усталость центральной нервной системы, возникающей в результате прикладываемых усилий для опознания четких или сомнительных сигналов. Для промышленных предприятий оптимальная освещенность территории и помещений является важной и непростой технической задачей, решение которой обеспечивает нормальные гигиенические условия для работающего персонала [СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278–03]. В России норма освещения помещений лаборатории научно-технические устанавливает следующее: средняя горизонтальная освещенность примерно 400лк. Чтобы улучшить условие освещения можно использовать искусственное освещение.

При воздействии паяльника, источника питания, компьютера, микроконтроллера и осциллографа в лаборатории на человека еще воздействует электромагнитное и тепловое излучения. Их могут разрушать здоровье человека. Защита расстоянием от теплового и электромагнитного излучения – достаточно простой и надежный способ защиты.

При работе с компьютером допустимые уровни электромагнитных полей (ЭМП) указаны в СанПиН 2.2.2/2.4.1340–03: временный допустимый уровень ЭМП, соответствующий напряженности электрического поля в диапазоне частот 5 Гц – 2 кГц, равно 25 В/м.

Кроме вредных факторов производственной среды, а также существует

воздействие следующего опасного производственного фактора – электрический ток.

Действие электрического тока на живую ткань носит разносторонний и своеобразный характер. Прохождение тока может вызывать у человека раздражение и повреждение различных органов. Пороговый неотпускающий ток составляет 50 Гц (6–16мА). Основные коллективные способы и средства электрозащиты: изоляция токопроводящих частей (проводов); экранирование источника излучения и рабочего места, индивидуальные основные изолирующие электрозащитные средства способны длительно выдерживать рабочее напряжение электроустановок, установление санитарно-защитной зоны; поглощением или уменьшение образования зарядов статического электричества;

5.2. Региональная безопасность

При выполнении проектных работ или эксплуатации оборудования действующим природоохранным законодательством предусмотрены мероприятия по охране окружающей среды.

В процессе выполнения работы могут возникать отходы спирта, которые могут вызвать загрязнение гидросферы. Спирт используют для подготовки образцов углеродного материала. После этого процесса, в растворе спирта могут существовать аморфы углерода и наноуглерод.

Для охраны поверхностных и подземных вод от загрязнения и истощения, можно обработать отходы спирта методом дистилляции.

Полученный спирт после процесса дистилляции можно использовать повторно.

Для охраны литосферы можно проводить эксперимент в пластиковом чулане.

5.3. Организационные мероприятия обеспечения безопасности

Также обосновываются организационные мероприятия, обеспечивающие безопасную эксплуатацию электроустановок- Gas Reaction Controller. При напряженности не выше 5 кВ/м присутствие людей в рабочей зоне разрешается в течение 8 часов.

Для обеспечения безопасности перед началом работы необходимо правильно надеть спецодежду, подготовить для работы необходимый инструмент и приспособления, приготовить рабочий стол. Также необходимо проверить отсутствие внешних повреждений электрооборудования, наличие и исправность контрольных, измерительных и сигнальных приборов, компьютера, тумблеров, переключателей и т.п. При выявлении неисправностей, не допускается проводить ремонт самостоятельно, необходимо доложить руководителю лаборатории. Наладка прибора и его ремонт осуществляется только сервис – инженерами.

Также перед проведением работ на установке Gas Reaction Controller необходимо проверить целостность газовых баллонов, прочность их крепления, отсутствие утечки газа. Вентиль и резьба должны быть исправны. Манометры редуктора должны быть проверены и исправны. Редуктор должен соответствовать газу в баллоне.

Запрещается приступать к работе, если выявлены неисправности любого используемого оборудования, если истек срок очередного освидетельствования баллона, истек срок проверки манометра, если персонал не прошел в установленном порядке обучение и проверку знаний безопасности труда.

Работа с установкой Gas Reaction Controller должна производиться в чистом помещении, свободном от пыли, паров, кислот и щелочей, агрессивных газов и других вредных примесей, вызывающих коррозию. Недопустимо наличие открытого огня около прибора.

- После окончания работы с установкой необходимо:
- Закрыть вентили газовых баллонов;
- Убедиться, что все клапаны контроллера закрыты;
- Выйти из программы, отключить питание компьютера;
- Отключить установку Gas Reaction Controller и насос от электросети;
- Проверить целостность газовых баллонов, их закрепление, отсутствие утечки газа.

5.4. Особенности законодательного регулирования проектных решений

Инженер должен знать и вести комплексную инженерную деятельность в бизнесе, учитывая 3 уровня социальной ответственности. Он должен нести социальную ответственность за принимаемые решения по исполнению федерального законодательства и нормативных правовых актов в области безопасности жизнедеятельности, защиты окружающей среды и чрезвычайных

ситуаций.

Первый уровень – требование общества, нижний, базовый – обязательная составляющая социальной ответственности – это соблюдение законов (налоговое законодательство, трудовой и гражданский кодексы). Будущий руководитель берёт на себя обязательства по исполнению федерального законодательства и нормативных правовых актов, регулирующих управление в области безопасности жизнедеятельности, защиты окружающей среды и чрезвычайных ситуаций.

Второй уровень, добровольный, представляет собой реализацию социально ответственного поведения ради экономической выгоды.

Третий уровень охватывает те виды социально ответственного поведения, которые не имеют своей целью получение экономических выгод. Это более высокий уровень осознания положения и роли организации в обществе.

В этой работе к использованию установки Gas Reaction Controller допускаются лица не моложе 18 лет, не имеющие медицинские противопоказания, прошедшие обучение безопасности труда и инструктаж на рабочем месте.

К самостоятельной работе допускаются работники после специального обучения и проверки знаний норма и правил работы с электроустановками, правил безопасности работы с газовыми баллонами, приобретенных навыков и безопасных способов выполнения работы на установке Gas Reactoin Controller, имеющие не менее II группы по электробезопасности и получившие допуск к работе с газовыми баллонами.

Повторная проверка знаний норм и правил электробезопасности, правил безопасной работы с газовыми баллонами проводится с работниками не реже 1 раза в 12 месяцев, повторный инструктаж на рабочем месте – не реже 1 раза в 3 месяца.

По данной теме рассматриваются законодательные и нормативные документы:

- инструкция № 2-07 по охране труда при работе с баллонами, работающими под давлением;
- инструкция № 2-14 по охране труда при работе с электрооборудованием напряжением до 1000 В;
- инструкция № 2-25 по охране труда при выполнении работ на установке Gas Reaction Controller;
- СН 2.2.4/2.1.8.562–96. Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории жилой застройки;
- СанПиН 2.2.4.548-96 Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений;
- ГОСТ 12.1.006–84.ССБТ. Электромагнитные поля радиочастот. Допустимые уровни на рабочих местах и требования к проведению контроля
- ГОСТ 12.1.045-84 Электростатические поля. Допустимые уровни на рабочих местах и требования к проведению контроля;
- СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-03. Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещенному освещению жилых и общественных зданий;

– СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы.

5.5. Безопасность в чрезвычайных ситуациях

Одними из наиболее вероятных и разрушительных видов ЧС являются пожар или взрыв. Пожарная безопасность представляет собой единый комплекс организационных, технических, режимных и эксплуатационных мероприятий по предупреждению пожаров и взрывов [СП 12.13130.2009].

Водород является легковоспламеняющимся и взрывоопасным газом. Следовательно, в процессе выполнения работы насыщения водородом углеродного материала, содержащего нанотрубки, существуют опасности пожар и взрыв.

Чтобы избежать опасности пожара и взрыва, можно принять следующие мероприятия:

А. Организационные мероприятия:

1) планирование защиты населения и территорий от пожара и взрыва на уровне предприятия;

2) эвакуация работающих;

3) создание запасов средств индивидуальной защиты и поддержание их в готовности;

4) наличие и поддержание в постоянной готовности системы общего оперативного и локального оповещения и информации о пожаре и взрыве.

Б. Инженерно-технические меры:

- 1) проектирование, размещение, строительство и эксплуатация объектов инфраструктуры, в том числе и потенциально опасных;
- 2) инженерное обеспечение защиты населения – строительство защитных сооружений (средств коллективной защиты);
- 3) создание санитарно-защитных зон вокруг потенциально опасных объектов.

В лаборатории обязательно показан план эвакуации: Заранее разработанный план (схема), в котором указаны пути эвакуации, эвакуационные и аварийные выходы, установлены правила поведения людей, порядок и последовательность действий в условиях чрезвычайной ситуации (рис. 23).



Рис. 23 План эвакуации при пожаре

Выводы

В данной работе рассмотрены безопасность и гигиена труда при осуществлении разработка методики насыщения водородом углеродного материала, содержащего нанотрубки с помощью автоматизированного комплекса Gas Reaction Controller. Были выявлены вредные и опасные факторы рабочей зоны, причины и средства защиты, рассмотрены чрезвычайные ситуации и поведение в них.

Социальная ответственность представляет диалектическую взаимосвязь между лицом (работодателем) и обществом (работником), характеризующаяся взаимными правами и обязанностями по выполнению социальных норм и наложением воздействия в случае ее нарушения. На основе рассмотрения безопасности в процессе выполнения работы, было ясно, что студенты – будущий руководитель должен нести социальную ответственность за принимаемые решения.

Заключение

Сорбционная способность является одним из известных свойств нанотрубок. Нанотрубки обладают уникальной структурой поверхности, т.е. вся масса атомов сосредоточена на поверхности нанотрубок. Поэтому нанотрубки имеют высокую удельную площадь поверхности. Кроме того, нанотрубки имеют полости, доступные для сорбции различных веществ.

Применение углеродных нанотрубок в качестве аккумуляторов водорода является одним из перспективных методов хранения водорода. Углеродные нанотрубки имеют уникальную структуру, что позволяет хранить достаточное количество водорода для дальнейшего использования его в качестве топлива

Для решения основной проблемы при изучении углеродных материалов-накопителей водорода, а именно плохой повторяемости экспериментальных результатов, необходимо проводить расчеты с применением разнообразных моделей сорбции водорода. Наиболее простой является геометрическая модель с учетом структурных характеристик материала. Данная модель не требует больших затрат и применения мощной вычислительной техники, а также сложного математического аппарата, что является несомненным преимуществом, хотя и не устанавливает влияния на процесс сорбции химических и физических воздействий.

В результате проведенных расчетов можно сделать выводы о том, что концентрация сорбированного водорода для закрытых нанотрубок типа «кресло» выше, чем для типа «зигзаг». Такой же эффект наблюдается и в

случае открытых нанотрубок. С увеличением количества двустенных нанотрубок в материале снижается концентрация сорбированного водорода.

Данные расчеты подтверждают влияние структуры углеродного материала на его водород-сорбционную емкость.

Список литературы

1. Чжао Цзин, Лю Тао. Углеродные нанотрубки (УНТ) – Наиболее перспективным материалом новой эпохи // Пекинский университет. Институт химии и молекулярной инженерии /–2006. –С.12; [На китайском]
2. Harris P. J. F. Carbon nanotubes and related structures // New materials for the Twenty-first Century, Cambridge University Press, Cambridge / –1999. –P. 277;
3. Xu X., Fan M., Towler B. F. Hydrogen adsorption and storage // Elsevier Inc / – 2011. –P.157-245;
4. А. В. Елецкий, Углеродные нанотрубки и их эмиссионные свойства // Успехи Физических Наук /–2002 . –Т. 172.–№ 4. –С. 401;
5. Jin-Yuan Hsieh, Jian-Ming Lu. Theoretical variations in the Young's modulus of single-walled carbon nanotubes with tube radius and temperature: a molecular dynamics study // Nanotechnology / –Vol. 17. –№ 15. –P. 3920-3924;
6. Mildred S. Dresselhaus, Gene Dresselhaus, Phaedon Avouris. Carbon Nanotubes (2001). P.883-891;
7. Wen Lu, Jong-Beom Baek, Liming Dai. Carbon Nanomaterials for Advanced Energy Systems: Advances in Materials Synthesis and Device Applications. –2015. P.414-418;
8. Dillon, A. C.; Bekkedahl, T. A.; Cahill, A. F.; Jones, K. M.; Heben, M. J. "Carbon Nanotube Materials for Hydrogen Storage" // In Proceedings of the U.S. DOE Hydrogen Program Review Coral Gables / –1995. –P. 521;
9. Schwarz, J. A. "Activated Carbon Based Storage System" // In Proceedings of the

- 1992 DOE/NREL Hydrogen Program Review Honolulu / –1992. – P. 271;
10. A. C. Dillon et al., Hydrogen storage in carbon single-wall nanotubes // Nature / –1997. –386.–P.377;
11. Y. Ye et al, Hydrogen adsorption and cohesive energy of single-walled carbon nanotubes // Applied Physics Letters / –Vol. 74. –№ 16. – 1999. –P. 2307;
12. Chambers, A., C. Park, R. T. K. Baker and N. M. Rodriguez, Hydrogen Storage in Graphite Nanofibers // Journal of Physical Chemistry B/– 1998. – P.4253;
13. P. Chen, X. Wu, J. Lin, K. L. Tan, High H₂ Uptake by Alkali-Doped Carbon Nanotubes Under Ambient Pressure and Moderate Temperatures// Science / –1999.–285. – P.91;
14. C. Liu, Y. Y. Fan, M. Liu, Hydrogen Storage in Single-Walled Carbon Nanotubes at Room Temperature // Science / –Vol.286. –№5. –1999. –P.1127;
15. Гоулдстейн Дж., Ньюбери Д., Эчлин П., Джой Д., Фиори Ч., Лифшин Ф. Растровая электронная микроскопия и рентгеновский микроанализ // МИР / –1984. –С.303 ;
16. Просвечивающий электронный микроскоп [Электронный ресурс] URL: [https://ru.wikipedia.org/wiki/ Просвечивающий _электронный_микроскоп](https://ru.wikipedia.org/wiki/Просвечивающий_электронный_микроскоп)
17. Физические основы электронной микроскопии высокого разрешения [Электронный ресурс] URL: <http://www.myshared.ru/slide/371624/>
18. Pandian M S. X-ray Diffraction Analysis: Principle, Instrument and Application // Pondicherry University Puducherry, INDIA / –2014. –P.34;
19. X-ray Powder Diffraction (XRD) [Электронный ресурс] URL: http://serc.carleton.edu/research_education/geochemsheets /techniques /XRD.html

20. Gas Reaction Controller Ultra High Pressure Operation Manual 10.2008.
21. Rzepka M, Lamp P, de la Casa-Lillo M A. Physisorption of Hydrogen on Microporous Carbon and Carbon Nanotubes // J Phys Chem B /—1998. —102. —P.10894;
22. Wang Q, Johnson J K. Molecular simulation of hydrogen adsorption in single-walled carbon nanotubes and idealized carbon slit pores // J Chem Phys /—1999. —110(1). —P.577;
23. Lee S M, Lee Y H. Hydrogen storage in single-walled carbon nanotubes // Appl Phys Lett / —2000. —76(20). —P.2877;
24. Lee S M, Park K S, Choi Y C et al. Hydrogen adsorption and storage in carbon nanotubes // Synthetic Metals / —2000. —113. —P.209;
25. G. Stan, M. Bojan, S. Uptake of gases in bundles of carbon nanotubes // Phys. Rev. B /— 2000. — P. 2173;
26. D. B. Mawhinney, V. Naumenko, A. Kuznetsova, J. T. Yates Jr, J. Liu, R. E. Smalley, Surface defect site density on single walled carbon nanotubes by titration // Chem. Phys. Lett /— 2000. —P. 213;
27. A. Kuznetsova, D. B. Mawhinney, V. Naumenko, J. T. J. Yates, J. Liu, R. E. Smalley, Enhancement of adsorption inside of single-walled nanotubes: opening the entry ports // Chem. Phys. Lett /— 2000. —P. 292;
28. M. F. Budyka, T. S. Zyubina, A. G. Ryabenko, S. H. Lin, A. M. Mebel, Bond lengths and diameters of armchair single wall carbon nanotubes // Chem. Phys. Lett/— 2005. — P. 266;
29. Вредные воздействия шума на организм человека [Электронный ресурс] URL:

http://ftek.mpei.ac.ru/bgd/_private/shum/deistv_shuma_3/3_B_deist_shum.htm