TOMSK POLYTECHNIC UNIVERSITY ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

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

Школа Инженерная школа ядерных технологий
Направление подготовки 03.03.02 «Физика»
Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ВОДОРОДА С АЛЬФА-ЦИРКОНИЕМ В ПРИСУТСТВИИ ПРИМЕСИ НИОБИЯ: РАСЧЕТЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

УДК 669.296:669.788.001.24

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б51	Цзя Хаоцзюнь		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Руководитель ОЭФ	Лидер А.М.	д.т.н., доцент		

Консультант

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

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

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

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель	Скачкова Л. А.			

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Руководитель ОЭФ	Лидер А.М.	д.т.н., доцент		

Томск – 2019 г.

Запланированные результаты обучения по программе

Код результата	**Результат обучения (выпускник способен)**	**Требования ФГОС, критериев и/или заинтересованных сторон**
Общекультурные компетенции		
Р1	Использовать основные этапы и закономерности исторического развития общества, основы философских, экономических, правовых знаний для формирования мировоззренческой, гражданской позиций и использования в различных сферах жизнедеятельности	Требования ФГОС3+ (*ОК-1, ОК-2, ОК-3, ОК-4*)
Р2	К самоорганизации и самообразованию, работать в коллективе, к коммуникации в устной и письменной формах, в том числе на иностранном языке, толерантно воспринимать социальные, этические и культурные различия, использовать методы и средства физической культуры, приёмы первой помощи и методы защиты в условиях ЧС.	Требования ФГОС3+ (*ОК-5,ОК-6,ОК-7, ОК-8, ОК-9*)
Общепрофессиональные компетенции		
Р3	Использовать в профессиональной деятельности базовые естественнонаучные знания, современные концепции и ограничения естественных наук, использовать фундаментальные знания разделов общей и теоретической физики, математики для создания моделей и решения типовых профессиональных задач, в том числе с использованием знаний профессионального иностранного языка.	Требования ФГОС3+ (*ОПК-1, ОПК-2, ОПК-3, ОПК-7)*
Р4	Понимать сущность и значение информации, соблюдать основные требования информационной безопасности, использовать методы, способы, средства получения и хранения информации, решать стандартные задачи на основе информационной и библиографической культуры.	Требования ФГОС3+ (ОПК-4,ОПК-5, ОПК-6)
Р5	Получить организационно-управленческие навыки при работе в научных группах, критически переосмысливать накопленный опыт, изменять при необходимости профиль своей профессиональной деятельности, нести ответственность за последствия своей инженерной деятельности.	Требования ФГОС3+ (ОПК-8, ОПК-9)
Профессиональные компетенции		

Р6	Научно-исследовательская деятельность Проводить научные теоретические и экспериментальные исследования в областях: материаловедения, атомной и ядерной физики, водородной энергетики, физики плазмы с помощью современной приборной базы с использованием специализированных знаний физики и освоенных профильных дисциплин.	Требования ФГОС3+ (*ПК-1, ПК-2)*
Р7	Научно-инновационная деятельность Применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований, а также профессиональные знания и умения в результате освоения профильных дисциплин для проведения физических исследований в инновационных областях науки, используя современные методы обработки, анализа и синтеза информации.	Требования ФГОС3+ (*ПК-3*,ПК-4, ПК-5)
Р8	Организационно-управленческая Использовать на практике теоретические основы организации и планирования физических исследований, участвовать в подготовке и составлении научной документации по установленной форме, понимать и применять на практике методы управления в сфере природопользования	Требования ФГОС3+ (ПК-6, ПК-7, ПК-8)
Р9	Педагогически-просветительская Проектировать, организовывать, анализировать педагогическую деятельность, владеть последовательностью изложения материала с использованием междисциплинарных связей физики с другими дисциплинами, участвовать в информационно-образовательных мероприятиях по пропаганде и распространению научных знаний	Требования ФГОС3+ (ПК-9)

TOMSK POLYTECHNIC UNIVERSITY ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

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

Школа Инженерная школа ядерных технологий
Направление подготовки 03.03.02 «Физика»
Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

УТВЕРЖДАЮ:
Руководитель ООП
_____ _____ 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**
150Б51	Цзя Хаоцзюнь

Тема работы:

Взаимодействие водрода с альфа-цирконием в присутствии примеси ниобия: расчеты из первых принципов

Утверждена приказом директора (дата, номер)	

Срок сдачи студентом выполненной работы:	

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе *(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).*	Поведение водорода в решеке α-циркония в присутствии примеси ниобия.

Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов *(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).*	– Обзор литературных источников; – Оптимизация атомной структуры и релаксация решетки системы цирконий-ниобий при различной концентрации ниобия в цирконии; – Оптимизация атомной структуры и релаксация решетки системы цирконий-ниобий-водород; – Расчет энергии связи водорода с цирконием в присутствии ниобия; – Вычисление распределения электронной плотности в системе цирконий-ниобий-водород; – Анализ полученных результатов; – Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение; – Социальная ответственность; – Заключение.
Перечень графического материала *(с точным указанием обязательных чертежей)*	– Расчетные ячейки и оптимизированные структуры систем Zr-Nb и Zr-Nb-H; – Распределение электронной плотности в системе Zr-Nb-H.

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы

(с указанием разделов)

Раздел	Консультант
Социальная ответственность	Скачкова Лариса Александровна
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Конотопский Владимир Юрьевич

Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:

1. Водород в Zr-Nb сплавах
2. Методика расчета
3. Результаты и обсуждение
4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение
5. Социальная ответственность

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	

Задание выдал руководитель / консультант (при наличии):

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Руководитель ОЭФ	Лидер А.М.	д.т.н., доцент		
Ассистент	Святкин Л. А.	к.ф.-м.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б51	Цзя Хаоцзюнь		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА

«ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту:

Группа	ФИО
150Б51	Цзя Хаоцзюнь

Школа	Инженерная школа ядерных технологий	**Отделение (НОЦ)**	Отделение экспериментальной физики
Уровень образования	Бакалавр	**Направление/специальность**	03.03.02 Физика

Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:	
1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	*Принять по ценам периода выполнения работы*
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	_____
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	*Районный коэффициент 30%, Отчисления во внебюджетные фонды - 30%*
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	_____
2. Планирование и формирование бюджета научных исследований	*Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет.*
3. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	*Вытолнить.*
Перечень графического материала *(с точным указанием обязательных чертежей)***:**	
1. Оценка конкурентоспособности технических решений *2. Альтернативы проведения НИ* *3. График проведения и бюджет НИ* *4. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИ*	

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., доцент		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б51	Цзя Хаоцзюнь		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
150Б51	Цзя Хаоцзюнь

Школа	Инженерная школа ядерных технологий	**Отделение (НОЦ)**	Отделение экспериментальной физики
Уровень образования	Бакалавр	**Направление/специальность**	03.03.02 Физика

Взаимодействие водорода с альфа-цирконием в присутствии примеси ниобия: расчеты из первых принципов	
Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	—Техническим средством является персональная электронно-вычислительная машина (ПЭВМ). Методы технологии компьютерного моделирования имеют высокую безопасность для исследователей, но при выполнении работ с помощью ПЭВМ также возможно взаимодействуют с некоторыми вредными факторами: Микроклимат Электромагнитное излучение Недостаточная освещенность Недостаточное освещение Поражение электрическим током Возникновения пожара; Работа компьютера осуществляется за счет питания от сети переменного тока напряжением 220 В.
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности: – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.	– СанПиН 2.2.4.548-96 Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений. – СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы.

	– ГОСТ 12.0.003-2015 Система стандартов безопасности труда. Опасные и вредные производственные факторы. Классификация. – СП 52.13330.2011 Естественное и искусственное освещение. Актуализированная редакция СНиП 23-05-95*. – ГОСТ 12.1.009-76 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Электробезопасность. Термины и определения. – ГОСТ Р 22.0.02-2016 Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Термины и определения.
2. Производственная безопасность: 2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов 2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия	2. Характеристика факторов изучаемой производственной среды, описывающих процесс взаимодействия человека с окружающей производственной средой: Микроклимат Электромагнитное излучение Недостаточная освещенность Недостаточное освещение Поражение электрическим током Возникновения пожара;
3. Экологическая безопасность:	3. Факторы рабочего места, влияющие на окружающую среду: Выброс в атмосферу рабочего газа; Выброс в атмосферу химических веществ;
4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:	4. Защита в чрезвычайных ситуациях: − Возникновение возгорания; − Поражение оператора установки электрическим током; − разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий. указать наиболее типичную ЧС.

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель ООД ШБИП	Скачкова Лариса Александровна			

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б51	Цзя Хаоцзюнь		

Школа Инженерная школа ядерных технологий

TOMSK POLYTECHNIC UNIVERSITY ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

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

Уровень образования бакалавриат
Направление подготовки 03.03.02 «Физика»
Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики
Период выполнения _____

Форма представления работы:

бакалаврская работа

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

КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН
выполнения выпускной квалификационной работы

Срок сдачи студентом выполненной работы:	

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
01.03.2018	Аналитический обзор литературы.	15
03.09.2018	Исследование атомной структуры системы Zr-Nb.	10
30.12.2018	Исследование атомной структуры системы Zr-Nb-H.	10
11.03.2019	Расчет энергии связи водорода в решетке циркония с примесью ниобия.	5
22.04.2019	Изучение распределения валентной электронной плотности в системах Zr-Nb и Zr-Nb-H.	10
01.05.2019	Анализ результатов.	15
25.05.2019	Социальная ответственность.	15
25.05.2019	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение.	15
25.05.2019	Заключение.	5

Составил преподаватель:

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

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Руководитель ОЭФ	Лидер А.М.	д.т.н., доцент		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа содержит 57 страниц, 7 рисунков, 13 таблиц, 18 литературных источников, 0 приложений.

Ключевые слова: система цирконий-ниобий-водород, параметры решётки, энергия связи, распределение электронной плотности, расчеты из первых принципов.

Объектом исследования является поведение атома водорода в решетке α-циркония, содержащую примесь ниобия.

Цель работы – теоретическое исследование особенностей взаимодействия водорода с α-цирконием в присутствии примеси ниобия. Все расчеты проводились в рамках теории функций электронной плотности методом проекционных присоединенных волн, реализованным в пакете программ VASP.

В процессе исследования проводились**:** оптимизация атомной структуры и релаксация решетки систем Zr-Nb и Zr-Nb-H; расчеты энергии связи водорода в решетке α-циркония с примесью ниобия; изучение распределения электронной плотности систем Zr-H и Zr-Nb-H

В результате исследования установлено, что внедрение 3 ат.% ниобия в цирконий приводит к увеличению энергии связи водорода с решеткой циркония на величину ~ 0,5 эВ за счет увеличения доли ковалентной составляющей связи металл-водород. При увеличении концентрации атомов водорода и ниобия в решетке циркония с 3 ат.% до 6 ат.% наблюдается уменьшение энергии связи водорода с цирконием на величину ~ 0,6 эВ.

Основные конструктивные, технологические и технико-эксплуатационные характеристики: при внедрении в решетку циркония атомы ниобия замещают атомы циркония. Энергия внедрения гелия в цирконий составляет ~ 0,9 эВ при концентрации ~ 3 ат.% и ~ 0,7 эВ при концентрации ~ 6 ат.%.

Степень внедрения: результаты работы представлены на международной научной конференции «Перспективы развития фундаментальных наук».

Область применения: результаты исследований могут быть использованы для прогнозирования поведения сплавов циркония с ниобием при насыщении их водородом в активной зоне ядерных ракторов.

Экономическая эффективность/значимость работы заключается в первопринципном исследовании влияния примеси ниобия на взаимодействие водорода с цирконием, что может быть использовано для разработки мер защиты оболочек тепловыделяющих элементов ядерных реакторов от их водородного охрупчивания.

В будущем планируется изучение влияния примеси ниобия на процесс диффузии водорода в α-цирконии.

Оглавление

Введение 15

Глава I Водород в Zr-Nb сплавах 19

1.1 Система Zr-Nb 19

1.2 Диффузия водорода 21

1.3 Сплавы на основе циркония в ядерной промышленности 21

Глава II Методы расчета 23

2.1 Метод псевдопотенциала 23

2.2 Приближение локальной плотности и обобщенно градиентное приближение 24

2.3 Метод проекционных присоединенных волн 25

2.4 Применение теории функционала электронной плотности 26

Глава III Результаты и обсуждение 29

3.1 Расчетные ячейки 29

3.2 Параметры решетки и энергии связи 31

3.3 Распределение электронной плотности 34

Глава IV Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение Введение 36

4.1 Организация и планирование работ 36

4.1.1 Продолжительность этапов работ 36

4.2 Расчет сметы затрат на выполнение проекта 40

4.2.1 Расчет затрат на материалы 40

4.2.2 Расчет заработной платы 41

4.2.3 Расчет затрат на социальный налог 41

4.2.4 Расчет затрат на электроэнергию 42

4.2.5 Расчет амортизационных расходов 42

4.2.6 Непосредственно учитываемые расходы 43

4.2.7 Расчет прочих расходов 43

4.2.8 Полная стоимость исследования 43

Вывод 44

Глава V Социальная ответственность 45
Введение 45
5.1 Техногенная безопасность 45
5.2 Анализ вредных и опасных факторов 46
5.2.1 Электромагнитные поля 46
5.2.2 Шум 47
5.3 Организационные мероприятия обеспечения безопасности 48
5.4 Особенности законодательного регулирования проектных решений 49
5.5 Безопасность в чрезвычайных ситуациях 50
5.6 Расчет воздухообмена в жилых и общественных помещениях 53
Вывод 53
Список литературы 56

Введение

Цирконий – это блестящий, серо-белый, мягкий, пластичный и ковкий металл, твердый при комнатной температуре, хотя он может быть твердым и хрупким при меньшей чистоте [1,2]. В форме порошка цирконий является легковоспламеняющимся, но твердая форма гораздо менее подвержена воспламенению. Цирконий обладает высокой устойчивостью к коррозии щелочами, кислотами, соленой водой и другими реагентами [1]. Однако он будет растворяться в соляной и серной кислотах, особенно когда присутствует фтор [2]. Сплавы с цинком являются магнитными при температуре менее 35 К [2].

Температура плавления циркония составляет 1855 °C, а точка кипения составляет 4371°C [3]. Цирконий имеет электроотрицательность 1,33 по шкале Полинга. Из *d*-элементов с известными электроотрицательностями цирконий имеет пятую, самую низкую электроотрицательность после гафния, иттрия, лантана и актиния [1]. При комнатной температуре цирконий имеет гексагональную плотноупакованную кристаллическую структуру (α-Zr), которая при 863 °C переходит в β-Zr, объемноцентрированную кубическую кристаллическую структуру. Цирконий существует в β-фазе до температуры плавления [2].

Ниобий представляет собой блестящий, серый, пластичный парамагнетик в группе 5 периодической таблицы с электронной конфигурацией самых внешних оболочек, нетипичных для группы 5. (Это можно наблюдать в окрестности рутения (44), родия (45) и палладия (46)). Измерения теплового расширения ниобия с объёмно-центрированной кубической кристаллической структурой (от абсолютного нуля до точки плавления) с высоким разрешением вдоль трех кристаллографических осей показывает анизотропию, которая несовместима с кубической структурой [1]. Поэтому ожидается дальнейшие исследования и открытия в этой области.

Ниобий становится сверхпроводником при криогенных температурах. При атмосферном давлении он имеет самую высокую критическую температуру

элементарных сверхпроводников при 9,2 К [5]. Ниобий имеет наибольшую глубину проникновения магнитного поля любого элемента [5]. Кроме того, это один из трех элементарных сверхпроводников II типа, наряду с ванадием и технецием. Сверхпроводящие свойства сильно зависят от чистоты металла ниобия. Когда он очень чистый, он сравнительно мягкий и пластичный, но примеси упрочняют его. Ниобий имеет низкое сечение захвата тепловых нейтронов, поэтому его используют в ядерной промышленности [6].

Используемые в атомной промышленности циркониевые сплавы включают, главным образом, сплавы Zr-Nb различного химического состава, микроструктуры и восприимчивости к водородному охрупчиванию и окислению. Гипотетические ядерные аварии могут создать реальную опасность для сплавов Zr и стабильности деталей, изготовленных из этих сплавов. Водородное охрупчивание может проявляться в появлении гидридных фаз, что приводит к существенной потере пластичности, увеличению вязкоупругого перехода, иногда при уменьшении механической прочности. Окисление может препятствовать проникновению водорода, но при высоких температурах растрескивание оксидного слоя может образовывать легкие каналы диффузии водорода.

Задача контролирования и предсказания свойств веществ на основании знания только их химического состава давно привлекает исследователей. Однако еще в 1929 году П. Дирак писал, что, хотя теоретический фундамент для этого уже создан, решение уравнений еще крайне сложно. Проводимые нами расчеты основаны на использовании метода функционала электронной плотности с разложением волновых функций по плоским волнам и описанием электронной структуры атомов с помощью псевдопотенциалов, а также параметров кристаллической структуры (параметры решетки, положения атомов в кристалле), энергий различных фаз, фононного спектра, зонной структуры, тензоров пьезоэлектрических и упругих модулей.

Исследование системы цирконий-ниобий за последние несколько десятилетий представляло научный интерес, поскольку не только цирконий и

ниобий считаются наиболее перспективными материалами, но также широко используются в различных областях из-за высокого сродства циркония и ниобия [3]. Хорошо известно, что добавление ниобия к цирконию оказывает существенное влияние на его микроструктуру и стабильность, а также на понимание взаимодействия кристаллических структур Zr (ГПУ, ОЦК) и Nb (ОЦК) с различными кристаллическими структурами, так что их свойства можно контролировать и надежно прогнозировать.

Сплав Zr-1%Nb используются для изготовления оболочек топливных элементов ядерного реактора из-за их механических и защитных устойчивых свойств и низкого поперечного сечения рассеяния нейтронов [6,7]. В процессе эксплуатации реактора в оболочках топливных элементов будет накапливаться водород, возникающий преимущественно в результате диссоциации воды в системе охлаждения реактора. Накопление водорода будет приводить к осаждению гидридов и вызывать охрупчивание материалов, их вздутие и другие нежелательные эффекты. Исследования последних десятилетий показали, что переходные металлы обычно обладают сильной способностью поглощать водород. В условиях работы вблизи поверхности оболочки будет наблюдаться увеличение количества водорода из системы охлаждения. Водород будет диффундировать в материал и при определенных условиях, таких как более низкие температуры и внешняя нагрузка, гидриды будут осаждаться в материале и вызывать охрупчивание, вздутие и другие нежелательные эффекты.

Целью данной работы является теоретическое исследование особенностей взаимодействия водорода с α-цирконием в присутствии примеси ниобия. Все расчеты выполняются в рамках теории функционала электронной плотности методами псевдопотенциала и разложения волновых функций по плоским волнам, которые реализованы в пакете программ VASP [8].

Для достижения этой цели были поставлены следующие задачи:

1. Ознакомиться с особенностями взаимодействия водорода с цирконием.
2. Изучить метод псевдопотенциала и особенности его применения.

3. Провести оптимизацию атомной структуры и релаксацию решетки системы Zr-Nb при концентрации ниобия ~ 3 и 6 ат.%.

4. Провести оптимизацию атомной структуры и релаксацию решетки системы Zr-Nb-H при концентрации ниобия и водорода ~ 3 ат.% и 6 ат.%.

5. Рассчитать энергии связи водорода в решетке циркония с ниобием.

6. Вычислить распределение валентной электронной плотности в системах Zr-H и Zr-Nb-H при концентрации водорода и ниобия ~ 3 ат.%.

7. Выявить особенности взаимодействия водорода с α-цирконием в присутствии примеси ниобия.

Глава I Водород в Zr-Nb сплавах

1.1 Система Zr-Nb

Цирконий (химический символ – Zr) – элемент побочной подгруппы четвёртой группы пятого периода периодической системы химических элементов Д. И. Менделеева, с атомным номером 40. Простое вещество цирконий-блестящий металл серебристо-серого цвета. Обладает высокой пластичностью, устойчив к коррозии. Существует в трех полиморфных модификациях: α, β и ω. При нормальных условиях α-модификация имеет гексагональную плотноупакованную решетку. При повышении температуры α-модификация Zr переходит в модификацию с объемноцентрированной кубической решеткой (β-фаза) при 870°C. В условиях высоких давления возникает метастабильная гескагональная ω-фаза, которая не является плотноупакованной и имеет три атома на элементарную ячейку [1].

Таблица 1.1 – Основная информация о цирконии [3]

Атомный вес	91,224
Атомный номер	40
Электронная конфигурация	[Kr] $4d^2\,5s^2$
Атомный радиус	1,60 Å

Ниобий – элемент побочной подгруппы пятой группы пятого периода периодической системы химических элементов Д. И. Менделеева, атомный номер – 41. Обозначается символом Nb (лат. *Niobium*). Простое вещество ниобий – блестящий металл серебристо-серого цвета с кубической объёмноцентрированной кристаллической решёткой типа α-Fe, параметр решетки a = 3,294 Å. Для ниобия известны изотопы с массовыми числами от 81 до 113 [3].

Таблица 1.2 – Основная информация о ниобии [5]

Атомный вес	92,906
Атомный номер	41
Электронная конфигурация	[Kr] $4d^4\ 5s^1$
Атомный радиус	1,46 Å

При разных температурах и атомных процентах у системы Zr-Nb разные состояния. На рисунке 1 показана фазовая диаграмма бинарного сплава Zr-Nb [6]. α(ГПУ) + β(ОЦК) и β-Zr+β-Nb фазовые области существуют при более низких температурах, а β-фаза стабильна во всех составах сплава Zr-Nb при высоких температурах [6]. Свойства сплава зависят от состава и структуры фазы. Следовательно, для того, чтобы понять свойства сплавов Zr-Nb, необходимо знать соотношение между атомами Zr и Nb и строение фазы сплава.

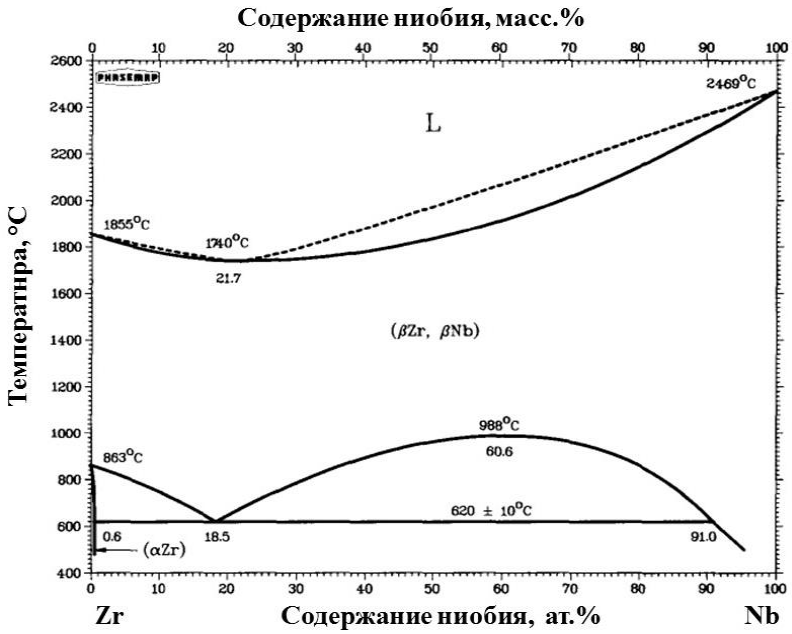


Рисунок 1 – Диаграмма фазовых состояний системы Zr-Nb [6]. На оси абсцисс показано содержание ниобия в атомных (внизу) и массовых (сверху) процентах в цирконии.

1.2 Диффузия водорода

Циркониевые сплавы используются в качестве материала для покрытия оболочек топливных элементов ядерного реактора из-за их механических и защитных устойчивых свойств вместе с их низким поперечным сечением рассеяния нейтронов [9,10]. В условиях работы вблизи поверхности оболочки будет наблюдаться увеличение количества водорода из системы охлаждения. Водород будет диффундировать в материал и при определенных условиях, таких как более низкие температуры и внешняя нагрузка, гидриды будут осаждаться в материале и вызывать охрупчивание, вздутие и другие нежелательные эффекты. Используя диаграмма фазовых состояний в настоящее время можно моделировать накопление осадков в металлах, например, в зависимости от концентрации водорода, температуры и внешней нагрузки, но этот метод основан на вводе параметров, таких как энергия активации дифузии [11,12].

1.3 Сплавы на основе циркония в ядерной промышленности

Циркониевые сплавы используются в атомной промышленности для топлива облицовка, топливные каналы, направляющие трубки управляющего стержня,сетка прокладки, топливные контейнеры. Циркониевые сплавы с оловом в качестве второго легирующего элемента в основном используется в ядерной промышленности. Циркониевый сплав содержит 98,23% Zr и Sn, Fe, Cr и Hf, и это классический сплав циркония для ядерной промышленности в западных реакторах под давлением. Другими популярными группами являются сплавы Zr-Nb и Zr-Sn.

Циркониевые сплавы, такие как Zr-1%Nb и Zr-2,5%Nb широко используются в ядерной промышленности в качестве основных конструкционных материалов водоохлаждаемых ядерных реакторов. Циркониевые сплавы, такие как Zr-Nb, также используются в качестве конструкционных материалов оболочек тепловыделяющих элементов легководных реакторов.

В дополнение к бинарным сплавам на основе циркония используются тройные и четвертичные сплавы разработаные для облицовочных труб. Некоторые из них Zr-1%Nb-1%Sn и Сплавы Zr-1%Nb-1%Sn-0.1%Fe. Эти сплавы показали высокую производительность в ядерном реакторе. Было установлено, что они способствуют более высокой степени выгорания топлива. По сравнению с текущим поколением материалов Zr, большинство недавно разработанных сплавов имеют более высокие значения Nb и ниже Sn для повышения коррозионной стойкости.

Глава II Методы расчета

2.1 Метод псевдопотенциала

Теория псевдопотенциала (ПП) - это обобщение метода ортогонализованных плоских волн (ОПВ). Теория псевдопотенциала дает возможность уточнения расчетов методом ОПВ и объясняет, почему расчеты методом почти свободных электронов могут давать хорошее согласие с реальными зонными структурами.

Основная идея метода псевдопотенциала – введение слабого потенциала, отличающего от реального кристаллического потенциала, который характеризуется амплитудой рассеяния электронов проводимости. Волновая функция электрона испытывает осцилляции вблизи ядра атома, уменьшая электронную плотность.

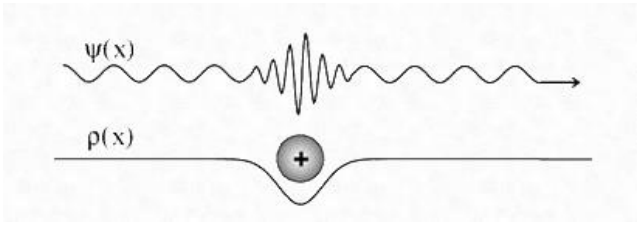


Рисунок 2 – Осцилляции волновой функции ψ(x) и ρ(x) плотности электронов вблизи ядра атома

Метод псевдопотенциала в теории металлов включает три предположения [13]: 1). Рассматривают самосогласованное поле. 2). Считают, что электронные состояния разделяются на внутренние оболочки с сильно локализованными волновыми функциями и состояния зоны проводимости. 3). Используют теорию возмущений для расчета движения электронов в зоне проводимости.

Обычно вводят псевдоволновые функции:

$$\tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} C_{\vec{k}+\vec{G}} e^{i(\vec{k}+\vec{G})\cdot\vec{r}} = \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) + \sum_{c} \psi_{\vec{k}}^{c}(\vec{r}) \int \tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}^{c^*}(\vec{r}) d^3\vec{r} \ . \qquad (2.1)$$

Но из-за его сильного внутреннего потенциала внутри атома нет колебаний. Он заменяется обычным статическим уравнением Шредингера:

$$\hat{H}\tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r}) + \sum_{c} (E - E_c) \psi_{\vec{k}}^{c}(\vec{r}) \int \tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}^{c^*}(\vec{r}) d^3\vec{r} = E_k \tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r}) \ . \qquad (2.2)$$

И может быть представлена в следующем виде:

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}+W(\vec{r})]\cdot\tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r})=E_k\tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r}), \tag{2.3}$$

где $W(\vec{r})$ – нелокальный оператор псевдопотенциала, который зависит от энергии и определен соотношением

$$W(\vec{r})=V(\vec{r})+V^R(\vec{r})\ . \tag{2.4}$$

$$V^R(\vec{r})\tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r})=\sum_c(E-E_c)\psi_{\vec{k}}^c(\vec{r})\int\tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r})\psi_{\vec{k}}^{c^*}(\vec{r})d^3\vec{r}\ . \tag{2.5}$$

Матричный элемент потенциала $V^R(\vec{r})$ в соответствии с формулой

$$\int\tilde{\psi}_{\vec{k}}^*(\vec{r})V^R(\vec{r})\tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r})d^3\vec{r}=\sum_c(E-E_c)\left|\int\tilde{\psi}_{\vec{k}}(\vec{r})\psi_{\vec{k}}^{c^*}(\vec{r})d^3\vec{r}\right|^2\ . \tag{2.6}$$

Кроме того, потенциал зависит от уровня необходимой энергии. Поскольку многие из основных теорем не относятся к спаду, мы можем поместить энергию валентных электронов во все формулы, чтобы получить ту же энергию, которая нам нужна. Обычно это энергия Ферми. Тогда собственное значение оператора больше не будет совпадать с точным собственным значением исходного гамильтониана, исключая уровень с энергией Ферми. Используя этот метод, можно найти набор волновых векторов, энергия которых равна энергии Ферми, а затем построить поверхность Ферми.

2.2 Приближение локальной плотности и обобщенно градиентное приближение

Основная проблема теории функционала электронной плотности заключается в том, что точные функционалы для обмена и корреляции неизвестны, за исключением газа свободного электрона. Однако существуют приближения, которые позволяют точно вычислить некоторые физические величины [14]. В физике наиболее широко используемой аппроксимацией является приближение локальной плотности (ПЛП), где функционал зависит только от плотности в координате, где оценивается функционал:

$$E_{XC}=\int\rho(\mathbf{r})\varepsilon_{xc}[\rho(\mathbf{r})]d\mathbf{r}\ . \tag{2.7}$$

Для систем с неравномерно распределенной плотностью заряда необходимо учитывать влияние градиента плотности на энергию обменной корреляции.

Высокоточные формулы для плотности корреляционной энергии были построены по квантовым симуляциям Монте-Карло из модели «желе». Недавно был предложен простой функционал корреляции из первых принципов. Несмотря на то, что оба варианта не связаны с методом Монте-Карло, они обеспечивают совместимую точность [15].

Приближение ПЛП предполагает, что плотность везде одинакова. Из-за этого приближение ПЛП имеет тенденцию недооценивать обменную энергию и переоценивать корреляционную энергию [16]. Ошибки, вызванные обменными и корреляционными частями, в определенной степени компенсируют друг друга. Чтобы исправить эту тенденцию, принято распространяться в терминах градиента плотности, чтобы учесть неоднородность истинной плотности электронов. Это позволяет корректировать, основываясь на изменении плотности вдали от координаты. Эти разложения называются обобщенными градиентными приближениями (ОГП) и имеют следующий вид:

$$E_{XC} = \int \rho(\mathbf{r})\varepsilon_{xc}[\rho(\mathbf{r}),|\nabla\rho(\mathbf{r})|]d\mathbf{r}\,. \qquad (2.8)$$

Используя приближение ОГП, были достигнуты очень хорошие результаты для молекулярных геометрий и энергий основного состояния. Потенциально более точными, чем функционалы ОГП, являются мета-ОГП-функционалы, как естественное развитие приближения ОГП. Функционал мета-ОГП в теории функционала электронной плотности в своем первоначальном виде включает вторую производную от плотности электронов (лапласиан), тогда как ОГП включает только плотность и ее первую производную в обменно-корреляционном потенциале.

2.3 Метод проекционных присоединенных волн

Метод проекционных присоединенных волн (ППВ) представляет собой трансформацию гладкой псевдоволновой функции к полноэлектронной

волновой функции.

Одно важное преимущество метода псевдопотенциала состоит в том, что, использовав для определения параметров псевдопотенциала различные экспериментальные измерения, можно затем описать влияние электронов проводимости на большое число макроскопических свойств металла в терминах псевдопотенциала.

Метод ППВ корректирует псевдоволновую функцию полностью электронным методом, тем самым обнуляя мультипольный момент. Идея метода ППВ состоит в том, чтобы разделить волновую функцию на две части: частичную волновую функцию, которая расширяется в пределах радиуса атома, и внешнюю волновую функцию, которая находится вне сфер, окружающих атомы. Внешняя волновая функция может быть разложена на основе плоских волн или другого базиса. Эти функции должны совпадать на границах сферы и их производные также должны совпадать.

Но этот метод требует большого числа плоских волн и сильно затрудняет вычисление. Тогда водят компенсационную плотность с большей степенью угасании, что незначительно увеличивает размер атома.

2.4 Применение теории функционала электронной плотности

В общем, теория функционала плотности находит все более широкое применение в химических и материальных науках для интерпретации и прогнозирования сложного поведения системы в атомном масштабе. В частности, для изучения систем с параметрами синтеза и обработки применяются методы вычисления теории функционала электронной плотности (ТФП). В таких системах экспериментальные исследования часто обременены несогласованными результатами и неравновесными условиями. Примерами современных применений ТФП являются изучение влияния легирующих примесей на поведение фазовых превращений в оксидах, магнитное поведение в разбавленных магнитных полупроводниковых материалах и исследование магнитного и электронного поведения в сегнетоэлектриках и разбавленных

магнитных полупроводниках [14] Также было показано, что ТФП имеет хорошие результаты в прогнозировании чувствительности некоторых наноструктур к загрязнителям окружающей среды, таким как SO_2 или акролеин [16], а также предсказание механических свойств [17].

На практике теория Кона-Шэма может быть применена несколькими различными способами в зависимости от того, что исследуется. В расчетах твердых состояний приближения локальной плотности все еще широко используются вместе с плоскими волновыми базисными множествами, поскольку подход электронного газа более подходит для электронов, делокализованных через бесконечное твердое тело. Однако в молекулярных расчетах необходимы более сложные функционалы, и для химических применений было разработано огромное количество функционально-корреляционных функций. Некоторые из них несовместимы с однородным приближением электронного газа, однако они должны уменьшаться до ПЛП в пределе электронного газа. Среди физиков, вероятно, наиболее широко используемым функционалом является пересмотренная обменная модель Пердью-Бюрке-Эрнцерхофа (прямая обобщенно-градиентная параметризация свободного электронного газа без свободных параметров); однако это не достаточно калориметрично точно для газофазных молекулярных расчетов. В сообществе химиков один популярный функционал известен как BLYP (от имени Becke для части обмена и Lee, Yang и Parr для корреляционной части). Еще более широко используется BLYP, который является гибридным функционалом, в котором обменная энергия, в данном случае от обменного функционала Бекке, сочетается с точной энергией теории Хартри-Фока. Наряду с компонентами обмена и корреляционными эффектами три параметра определяют гибридный функционал, определяя, в какой мере смешивается точный обмен. Регулируемые параметры в гибридных функционалах обычно устанавливаются на «набор тренировок» молекул. К сожалению, хотя результаты, полученные с этими функционалами, как правило, достаточно точны для большинства приложений, нет систематического способа их

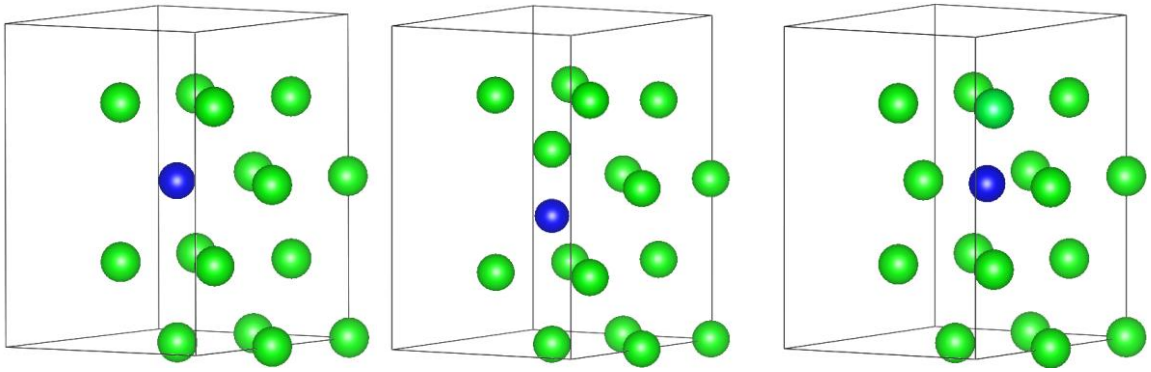
улучшения (в отличие от некоторых традиционных методов на основе волновой функции, таких как конфигурационное взаимодействие или связанная теория кластеров). Следовательно, в текущем подходе ТФП невозможно оценить погрешность вычислений, не сравнивая их с другими методами или экспериментами.

Глава III Результаты и обсуждение

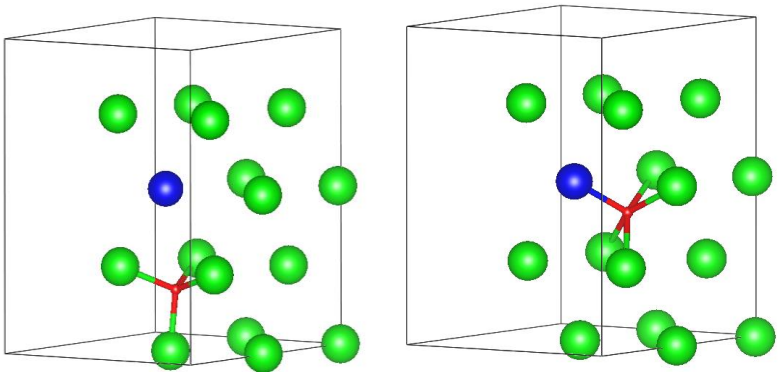
3.1 Расчетные ячейки

Самосогласование полной энергии кристалла выполнялось в рамках теории функционала электронной плотности (ТФП) методом оптимизированного сохраняющего норму псевдопотенциала Вандербильта, реализованным в пакете программ VASP [8]. Энергия обрезания при разложении по базису плоских волн составляла 650 эВ. Обменно-корреляционные эффекты рассматривались с использованием обобщенного градиентного приближения в форме Пердью–Бурке–Ернцерхофа. В работе самосогласование электронной плотности считалось достигнутым, когда сходимость полной энергии кристалла составляла ~ 0,02 мэВ.

На рисунке 3 представлены расчётные ячейки системы $Zr_{15}Nb$ с указанием положений, занимаемых атомами Nb в ГПУ решетке Zr. Светло-зеленый, темно-зеленый и светло-красный шарики соответствуют атомам Zr, Nb и H, соответственно. Литерами O и T обозначены октаэдрические и тетраэдрические междоузлия, соответственно. В рассмотренных случаях концентрация атомов Nb в решетке Zr составляет X = Nb/Zr ~ 6 %. На рисунке 4 представлены расчётные ячейки систем $Zr_{35}Nb$ и $Zr_{36}H$ с указанием положений, занимаемых атомами Nb и H в ГПУ решетке Zr. Это соотношение атомов циркония и ниобия (и водорода) соответветствует относительной концентрации ниобия (и водорода) X = Nb/Zr ~ 3%.

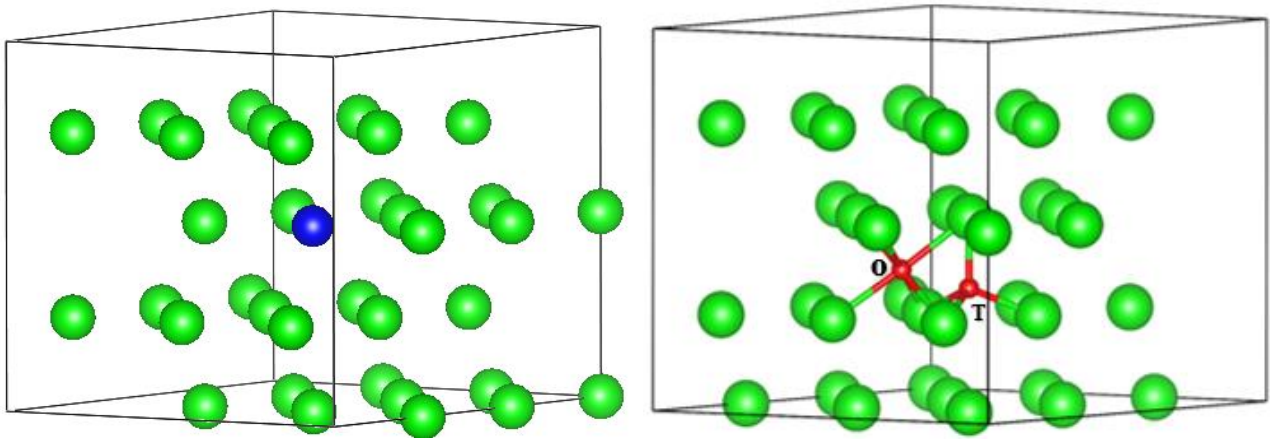


а) $Zr_{15}Nb$ б) $Zr_{16}Nb^{T}$ в) $Zr_{16}Nb^{O}$



г) $Zr_{15}Nb^{T}$ д) $Zr_{15}Nb^{O}$

Рисунок 3 – Расчетные ячейки твердых растворов $Zr_{15}Nb$, $Zr_{16}Nb^{T}$, $Zr_{16}Nb^{O}$, $Zr_{15}Nb^{T}$ и $Zr_{15}Nb^{O}$ с ГПУ структурой. Литерами *O* и *T* обозначены октаэдрические и тетраэдрические междоузлия, соответственно



а) $Zr_{35}Nb$ б) $Zr_{36}H^{O}$ и $Zr_{36}H^{T}$

Рисунок 4 – Расчетные ячейки твердых растворов $Zr_{35}Nb$, $Zr_{36}H^{O}$ и $Zr_{36}H^{T}$, с ГПУ структурой. Литерами *O* и *T* обозначены октаэдрические и тетраэдрические междоузлия, соответственно

На рисунке 5 представлена расчётная ячейка системы $Zr_{35}NbH$ с указанием положений, занимаемых атомами Nb и H в ГПУ решетке Zr. Светло-зеленый, темно-зеленый и светло-красный шарики соответствуют атомам Zr, Nb и H, соответственно. В системе $Zr_{35}Nb$ вблизи Nb можно выделить три возможных тетраэдрических междоузлия (T1, T2 и T3) и одно октаэдрические (O) междоузлие.

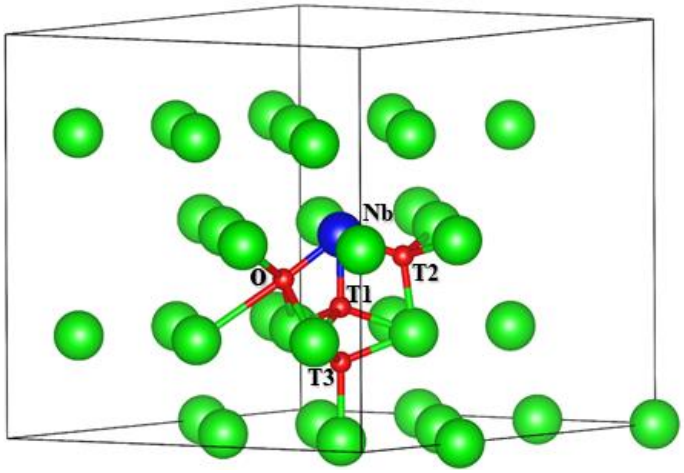


Рисунок 5 – Расчетная ячейка твердого раствора $Zr_{35}NbH$ с указанием рассмотренных в настоящей работе междоузлий, занимаемых атомом водорода вблизи ниобия. Литерами *O* и *T* обозначены октаэдрические и тетраэдрические междоузлия, соответственно

3.2 Параметры решетки и энергии связи

Чтобы выяснить влияние примеси Nb на атомный объем Zr, были вычислены постоянные решеток с различными координациями атомов Nb. Результаты расчетов приведены в таблице 3.1. В работе также рассчитаны энергии связи водорода в решетке циркония с ниобием:

$$\Delta E_H = E\left(Zr_xNb_y\right) + \frac{z}{2}E(H_2) - E(Zr_xNb_yH_Z), \qquad (3.1)$$

где E(Zr), $E(Zr_xNb_y)$, $E(Zr_xNb_yH_z)$ и $E(H_2)$ – полные энергии чистого Zr (приходящаяся на один атом металла), твердых растворов Zr_xNb_y и $Zr_xNb_yH_z$, молекулы водорода H_2. Результаты расчетов представлены в таблице 3.1.

Любая система в основном состоянии имеет наименьшую полную энергию. Рассмотрев несколько возможных структур системы Zr-Nb, было

установлено, что при концентрации ~ 6 ат.% ниобию энергетически наиболе выгодно занимать вакантный узел в решетке циркония (твердый раствор $Zr_{15}Nb$). Энергия внедрения атома Nb в решетку циркония в этом случае составляет ~ 0,7 эВ. Отметим, что при концентрации ~ 3 ат.% энергия внедрения Nb в вакантный узел решетки циркония составляет ~ 0,9 эВ. Из таблицы 3.1 видно, что замещение атома циркония ниобием незначительно уменьшает параметры решетки (на величину ~ 0,03 Å). Расчеты энергии внедрения ниобия в цирконий показали, что для размещения атома Nb в междоулие решетки циркония (различные конфигурации твердых растворов $Zr_{16}Nb$ и $Zr_{36}Nb$) требуется энергии более 3 эВ. Это говорит о явной неустойчивости этих конфигураций по отношению конфигурациям, в которых атом ниобия замещает один из атомов циркония. В связи с этим, в дальнейшем при изучении взаимодействия водорода с цирконием в присутствии ниобия мы ограничились рассмотрением только конфигурации $Zr_{35}NbH$.

Из анализа результатов расчета в таблице 3.1 выявлено, что наличие примеси ниобия усиливает связь водорода с цирконием на величину ~ 0,5 эВ. Отметим, что уменьшение концентрации атомов водорода и ниобия в решетке циркония с 6 ат.% до 3 ат.% приводит к увеличению энергии связи водорода с цирконием на величину ~ 0,6 эВ. При концентрации ~ 3 ат.% атому водорода энергетически наиболее выгоднее размещаться в тетраэдрических междоузлиях решетки.

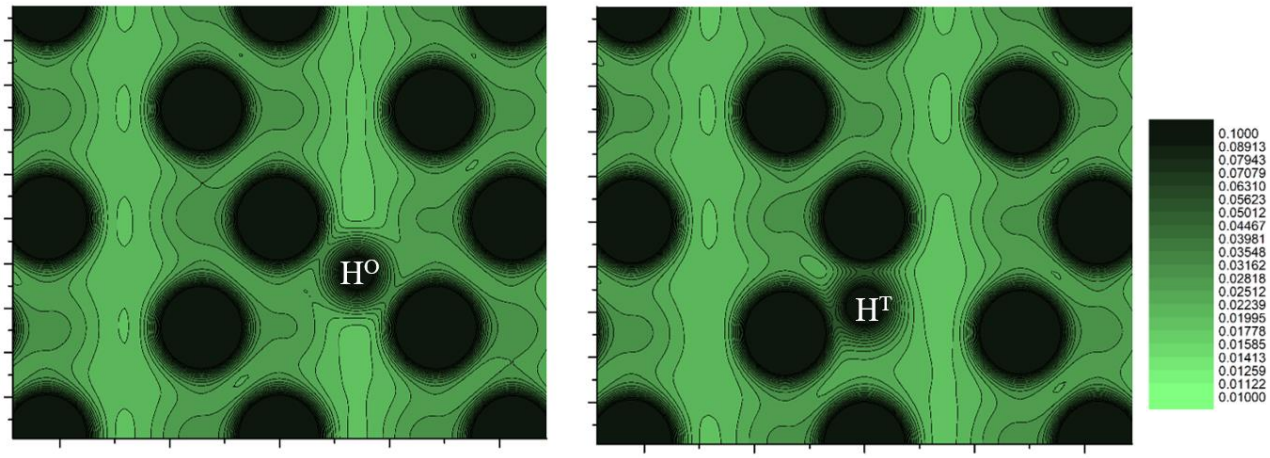
Таблица 3.1 – Параметры решетки чистых Zr, Nb и систем Zr-Nb и Zr-Nb-H, энергия связи водорода с цирконием и избыточный объем, вносимый атомами водорода в решетку α-циркония.

Система	*a*, Å	*c*, Å	ΔE_H, эВ	ΔV_H,Å^3
Nb	3,295	-	-	-
Другие расчеты	3,30[6]	3,30[6]	-	-
Zr	3,236	5,171	-	-
Другиерасчеты	3,230[18]	5,180[18]		-
$Zr_{15}Nb$	3,211	5,171	-	-
$Zr_{16}H^T$	3,211	5,141	-	0,004
$Zr_{16}H^O$	3,189	5,650	-	0,001
$Zr_{15}NbH^T$	3,248	5,196	2,117	0,002
$Zr_{15}NbH^O$	3,247	5,178	2,168	0,004
Zr_{36}	3,243	5,196	-	-
$Zr_{36}H^T$	3,236	5,337	2,347	0,003
$Zr_{36}H^O$	3,241	5,340	2,247	0,001
$Zr_{35}Nb$	3,244	5,166	-	-
$Zr_{35}NbH^O$	3,241	5,341	2,733	0,001
$Zr_{35}NbH^{T1}$	3,230	5,393	2,781	0,003
$Zr_{35}NbH^{T2}$	3,243	5,186	2,774	0,002
$Zr_{35}NbH^{T3}$	3,226	5,186	2,797	0,003

Так как растворение водорода в цирконии приводит преимущественно к увеличению параметров решетки, то в работе был вычислен избыточный объем, вносимый атомом водорода в решетку циркония (Таблица 3.1). Из анализа результатов следует, что избыточный объем, вносимый атомом водорода в чистый цирконий и в цирконий с ниобием, практически одинаковый и лежит в диапазоне от 0,001 до 0,004 Å^3.

3.3 Распределение электронной плотности

На рисунках 6 и 7 представлено расчитанное в настоящей работе распредление электронной плотности в системах Zr-H и Zr-Nb-H. Из рисунка 6 видно, что атомы водорода и циркония охватываются множеством изолиний распределения электронной плотности, что свидетельствует о заметной доли ковалентной составляющей связи Zr-H.

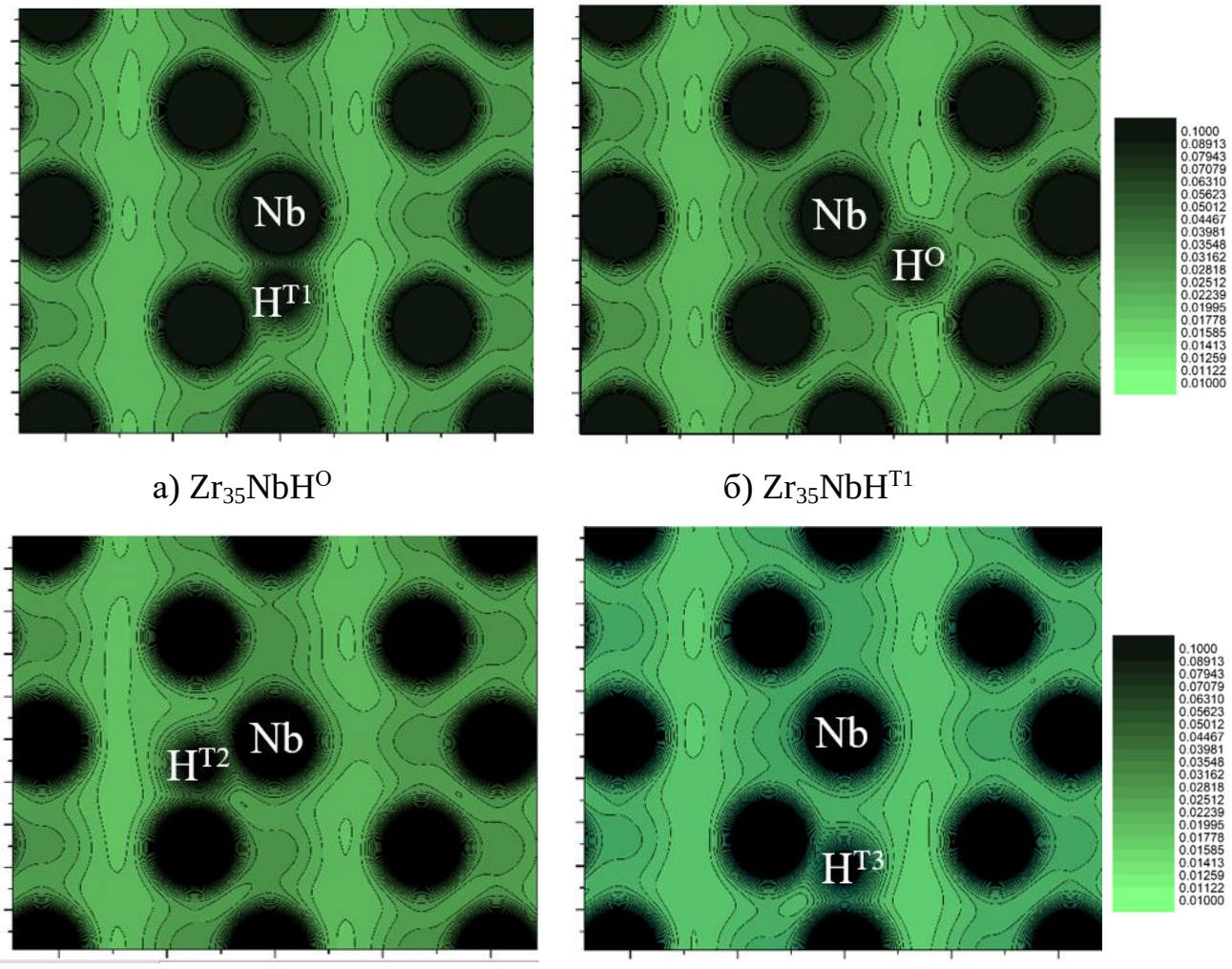


а) $Zr_{36}H^{O}$ б) $Zr_{36}H^{T}$

Рисунок 6 – Распределение электронной плотности для $Zr_{36}H^{O}$ и $Zr_{36}H^{T}$ в в плоскости $(11\bar{2}0)$, проходящей через атомы циркония и водорода. Шкала градации цвета задается в электрон/Бор^3.

Сравнивая картины распределения электронной плотности на рисунках 6 и 7 можно сделать вывод, что внедрение Nb в решетку Zr с атомами водорода приводит к значительному перераспределению электронной плотности металла. Необходимо отметить, что атомы Nb и H имеют более сильное взаимодействие, чем атомы Zr и H. Об этом свидетельствует более высокий уровень электронной плотности между атомами H и атомом Nb: эти атомы заключены в общие изолинии распределения электронной плотности. Уровень электронной плотности между атомами Nb и H на 36% выше, чем между атомами Zr и H. Это свидетельствует о формировании связи металл-водород, значительная часть которой приходится на ковалентную составляющую. В тетраэдрическом междоузлии атом H сильнее связан с атомами Nb, чем в октаэдрическом

междоузлии, так как в первом случае атомы H и Nb заключены в большее количество общих изолиний. Это коррелирует с результатами расчетов энергии связи водород в решетке циркония с ниобием: $E_H(T) > E_H(O)$. По сравнению с системой $Zr_{36}H^O$ и системой $Zr_{35}NbH^O$, атом водорода связывается только с атомами ниобия в системе $Zr_{36}H^O$, а не с соседними атомами циркония в системе $Zr_{36}H^O$.



а) $Zr_{35}NbH^O$ б) $Zr_{35}NbH^{T1}$

в) $Zr_{35}NbH^{T2}$ г) $Zr_{35}NbH^{T3}$

Рисунок 7 – Распределение электронной плотности для $Zr_{35}NbH^O$, $Zr_{35}NbH^{T1}$, $Zr_{35}NbH^{T2}$ и $Zr_{35}NbH^{T3}$ в плоскости $(11\bar{2}0)$, проходящей через атомы циркония, ниобия и водорода. Шкала градации цвета задается в электрон/Бор^3.

Таким образом, обобщая все полученные данные, мы можем заключить, что добавление атома Nb в систему $Zr_{36}H$ усиливает энергию связи водорода в решетке циркония за счет более сильного взаимодействия водорода с ниобием.

Глава IV Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение Введение

4.1 Организация и планирование работ

В процессе поиска источников финансирования для проведения научного исследования и коммерциализации его результатов, оценка коммерческой ценности работы является необходимым условием. При этом разработчики должны представить настоящее состояние и перспективы проводимых ими научных исследований. Помимо превышения технических параметров над предыдущими разработками необходимо понимать коммерческую привлекательность научного исследования.

Целью раздела «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» является проектирование и создание конкурента способных разработок, технологий, отвечающих современным требованиям в области ресурсоэффективности и ресурсосбережения.

В следующей таблице 4.1 перечислены люди и имена, вовлеченные в работу.

При проведении исследований в выпускной работе необходимо строить рабочие группы для того,что достигнуть и выполнить конкретную цель. Для разных видов работ установите соответствующую должность исполнителя.

4.1.1 Продолжительность этапов работ

Существует два способа расчета продолжительности этапа работы.

Первый метод - это технология и экономика: этот метод применим к полностью разработанной нормативно-правовой базе для трудоемкости процесса планирования, что, в свою очередь, обусловлено их высокой воспроизводимостью в стабильной среде. Поскольку подрядчики часто не имеют соответствующих стандартов, мы отказываемся от использования этого метода.

Таблица 4.1 – Перечень работ и продолжительность их выполнения

Этапы работы	**Исполнители**	**Загрузка исполнителей**
Постановка целей и задач, получение исходных данных	НР	НР – 100%
Составление и утверждение ТЗ	НР	НР – 100%
Подбор и изучение материалов по тематике	НР, И	НР – 50% И – 100%
Разработка календарного плана	НР, И	НР – 100% И – 30%
Обсуждение литературы	НР, И	НР – 30% И– 100%
Выбор структурной схемы устройства	НР, И	НР – 100% И –50%
Выбор принципиальной схемы устройства	НР, И	НР – 100% И – 80%
Обработка данных первопринципных расчетов	НР	НР – 80% И – 80%
Анализ данных расчета первых принципов	НР, И	НР – 20% И – 100%
Оформление расчетно-пояснительной записки	НР, И	НР – 40% И – 80%
Оформление графического материала	НР, И	НР – 100% И – 80%
Подведение итогов	НР, И	НР – 60% И– 100%

Второй метод – опытно-статистический метод, который может быть реализован двумя способами: 1) аналоговый, 2) экспертный. Аналоговый метод возможен только при наличии устаревшего симулятора в поле зрения исполнителя. В большинстве случаев его можно применять только локально - для отдельных элементов (этап работы). Так что выбирайте экспертный метод для оценки. Экспертные методы пригодны для использования при отсутствии информационных ресурсов, а эксперты в конкретных предметных областях проводят необходимые количественные оценки на основе своего профессионального опыта.

Рассчитайте время, необходимое для каждого шага работы, по следующей формуле:

$$t_{\text{ож}} = \frac{t_{min}+4t_{prob}+t_{max}}{6} \quad (4,1)$$

где t_{min} – минимальная продолжительность работы, дн.;

t_{max} – максимальная продолжительность работы, дн.;

t_{prob} – наиболее вероятная продолжительность работы, дн.

$$\mathrm{Т_{рд}} = \frac{t_{ож}}{\mathrm{К_{ВН}}} \cdot \mathrm{К_{д}} \quad (4.2)$$

где $t_{ож}$ – продолжительность работы, дн.;

$K_{вн}$ – коэффициент выполнения работ, $K_{вн}$ = 1,2;

$K_{Д}$ – коэффициент, учитывающий дополнительное время на компенсацию непредвиденных задержек и согласование работ, $K_{Д}$ =1,1

Расчет продолжительности этапа в календарных днях ведется по формуле:

$$T_{КД} = T_{РД} \cdot T_{К} \quad (4,3)$$

где $T_{КД}$ – продолжительнгороость выполнения этапа в календарных днях;

$T_{К}$ – коэффициент календарности, решение по формуле:

$$\mathrm{Т_{К}} = \frac{\mathrm{Т_{КАЛ}}}{\mathrm{Т_{КАЛ}} - \mathrm{Т_{ВД}} - \mathrm{Т_{ПД}}} = \frac{365}{365-52-10} = 1{,}205 \quad (4{,}4)$$

где $T_{КАЛ}$ – календарные дни ($T_{КАЛ}$ = 365);

$T_{ВД}$ – выходные дни по кадровым вопросам.

$T_{ПД}$ – праздничные дни по кадровым вопросам.

Рассчитайте время, необходимое для работы на каждом этапе из таблицы 4.2, и сделайте следующие выводы:

Этап	Исполнители	Продолжительность работ, дни			Трудоемкость работ по исполнителям чел.- дн.			
					$T_{РД}$		$T_{КД}$	
		t_{min}	t_{max}	$t_{ож}$	НР	И	НР	И
1	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**	**7**	**8**	**9**
Постановка целей и задач, получение исходных данных	НР	2	4	2,8	2,566	0,256	3,131	0,313
Составление и утверждение ТЗ	НР	3	6	4,2	1,155	3,85	1,4091	4,697
Подбор и изучение материалов по тематике	НР, И	7	10	8,2	2,255	7,516	2,751	9,170
Разработка календарного плана	НР, И	3	4	3,4	3,116	-	3,802	-
Обсуждение литературы	НР, И	2	3	2,4	2,2	-	2,684	-
Выбор структурной схемы устройства	НР, И	7	14	9,8	8,983	4,491	10,959	5,479
Выбор принципиальной схемы устройства	НР, И	4	10	6,4	5,866	4,693	7,157	5,725
Обработка данных первопринципных расчетов	НР	30	36	32,4	11,88	23,76	28,55	30,41
Анализ данных расчета первых принципов	НР, И	10	15	12	11	8,8	13,42	10,736
Оформление расчетно-пояснительной записки	НР, И	5	6	5,4	1,98	3,96	2,4156	4,8312
Оформление графического материала	НР, И	15	20	17	3,116	12,46	3,802	15,209
Подведение итогов	НР, И	3	4	3,4	3,116	-	3,802	4,487
Итого:				**108,6**	**74,44**	**73,34**	**92,77**	**91,94**

4.2 Расчет сметы затрат на выполнение проекта

Стоимость создания проекта включает в себя все затраты, необходимые для реализации каждой из задач, которые составляют эту разработку.Расчет сметной стоимости ее выполнения производится по следующим статьям затрат: материалы и покупные изделия;заработная плата;социальный налог;расходы на электроэнергию(без освещения);амортизационные отчисления;командировочные расходы;оплата услуг связи.

4.2.1 Расчет затрат на материалы

Во-первых, расходы включают материальные затраты, приобретенные продукты, полуфабрикаты и другие материальные ценности, которые непосредственно потребляются при работе объекта проектирования. Для покупки большого количества предметов, например цены листа сплава Э110, мы используем метод взвешивания. Цена за единицу товара принимается за среднюю рыночную цену. Хотя цена на оптовую торговлю будет намного ниже, чем средняя рыночная цена, мало влияет на небольшое количество протестированных образцов.

Таблица 4.3 – Расчет затрат на материалы

Наименование	Единица измерения	Количество	Цена за ед., руб.	Затраты на материалы,(Зм), руб.
Zr-Nb Сплавы	Шт.	20	100	2000
Бумага	Лис.	150	2	300
Интернет	М/бит	6	350	2100
Ручка	Шт.	3	20	60
Тетрадь	Шт.	5	20	100
Итого			522	4560

4.2.2 Расчет заработной платы

$$ЗПдн-т = \frac{МО}{\frac{298}{12}} = \frac{МО}{24{,}83}$$

Расчеты затрат на полную заработную плату приведены в таблице 5.6. Затраты времени по каждому исполнителю в рабочих днях с округлением до целого взяты из таблицы 4.2. Для учета в ее составе премий, дополнительной зарплаты и районной надбавки используется следующий ряд коэффициентов: $К_{ПР}$ = 1,1; $К_{доп.ЗП}$ = 1,188; $К_р$ = 1,3. Таким образом, для перехода от тарифной (базовой) суммы заработка исполнителя, связанной с участием в проекте, к соответствующему полному заработку (зарплатной части сметы) необходимо первую умножить на интегральный коэффициент $К_и$ = 1,1* 1,188*1,3 = 1,699. Вышеуказанное значение $К_{доп.ЗП}$ применяется при шестидневной рабочей неделе, при пятидневной оно равно 1,113, соответственно в этом случае $К_и$ = 1,62.

Таблица 4.4 – Затраты на заработную плату

Исполнитель	Оклад, руб./мес.	Среднедневная ставка, руб./раб.день	Затраты времени, раб.дни	Коэффициент	Фонд з/платы, руб.
НР	26624	1054,41	74	1,699	132566,7
И	15 470	736,7	73	1,62	87122,1
Итого:					**219688,8**

4.2.3 Расчет затрат на социальный налог

Затраты на единый социальный налог (ЕСН), включающий в себя отчисления в пенсионный фонд, на социальное и медицинское страхование, составляют 30 % от полной заработной платы по проекту, т.е. $С_{соц.} = С_{зп}$*0,3. Итак, в нашем случае $С_{соц.}$ = 219688,8* 0,3 = 65906,7 руб.

4.2.4 Расчет затрат на электроэнергию

Накладные расходы учитывают прочие затраты организации, не попавшие в предыдущие статьи расходов: печать и ксерокопирование материалов исследования, оплата услуг связи, электроэнергии, почтовые и телеграфные расходы, размножение материалов и т.д. В нашем случае подсчитаем затраты электроэнер. Одноставочный тариф на электроэнергию 5,748 руб./кВт.час (в ТПУ).

Результаты расчета нормы амортизации в таблице 4.6

Таблица 4.5 – Затраты на электроэнергию

№	Наименование оборудования	Мощность, кВТ/час	Время эксплуатации, час	Расход электроэнергии, руб.
11.	Компьютер	7	80	3218,88
	Итого			3218,88

4.2.5 Расчет амортизационных расходов

В учете затрат учитывается не только счет за электроэнергию оборудования, но и амортизация оборудования. Используется формула.

$$С_{АМ} = \frac{Н_А * Ц_{ОБ} * t_{рф} * n}{F_Д} = 304{,}54 \text{рубс}$$

где $Н_А$ – годовая норма амортизации;($Н_А$=12,5% по приложению 1)

$Ц_{ОБ}$ – балансовая стоимость единицы оборудования с учетом ТЗР, =220000руб.

$F_Д$ – действительный годовой фонд времени работы соответствующего оборудования.(301*24=7224 ч)

$t_{рф}$ – фактическое время работы оборудования в ходе выполнения проекта, задается исполнителем проекта=80 час;

n – число задействованных однотипных единиц оборудования=1.

4.2.6 Непосредственно учитываемые расходы

Стоимость этой части в основном зависит от двух аспектов.

1) Стоимость посещения научной конференции;
2) USB жесткий диск цена

Регистрационный взнос для участия в научной конференции составляет 1000 рублей, а конференция длится 3 дня. Купил три usb мобильных жестких диска, одна цена 380 руб.

$$Снр = 3 * 380 + 1000 = 2140 \text{ руб.}$$

4.2.7 Расчет прочих расходов

Пункт «Прочие расходы» отражает стоимость выполненого проекта, которые не учтены в предыдущих статьях.Они должны равняться 10% всех предыдущих затрат, т.е.

$$Спроч. = (Смат + Сзп + Ссоц + Сэл. + Сам + Снр) \cdot 0{,}1$$

$$Спроч. = (4560 + 219688{,}8 + 65906{,}7 + 3218{,}88 + 304{,}54 + 2140) \cdot 0{,}1$$

$$= 29572{,}89 \text{Руб.}$$

4.2.8 Полная стоимость ислледования

Консолидировать и суммировать расходы по вышеуказанным разделам. Все затраты на этот эксперимент представлены в таблице 4.6 ниже.

Таблица 4.6 Смета затрат на разработку проекта

Статья затрат	**Условное обозначение**	**Сумма, руб.**
Материалы и покупные изделия	$С_{мат}$	4560
Основная заработная плата	$С_{зп}$	219688,8
Отчисления в социальные фонды	$С_{соц}$	65906,7
.Расходы на электроэнергию	$С_{эл.}$	3218,88
Амортизационные отчисления	$С_{ам}$	304,54
Непосредственно учитываемые расходы	$С_{нр}$	2140
Прочие расходы	$С_{проч}$	29572,89
Итого:		**325301,81**

Исследование стоило всего 325301,81 рублей.Этот эксперимент не имеет рыночного значения, только для изучения защиты материалов из сплава циркония в ядерных реакторах.Следовательно, оценка его экономической эффективности невозможно.

Вывод

Полученные в ходе исследования результаты, при затрате 325301,81 рублей на реализацию, могут быть использованы для дальнейших исследований систем металл-водород, а также в целях разработки защитных методик подготовки образцов для снижения вероятности водородного охрупчивания металлов и сплавов. Работа имеет большую практическую ценность и в полной мере способствует решению многих фундаментальных научных задач. Данная оценка коммерческой ценности необходима, чтобы представлять состояние и перспективы проводимых научных исследований. Однако в рамках данной работы количественная оценка ее экономической эффективности невозможна.

Глава V Социальная ответственность

Введение

Исследовательская работа на тему исследование влияния примеси ниобия на взаимодействие водорода с цирконием. Сплав Zr-Nb используется для изготовления оболочек тепловыделяющих элементов ядерных реакторов. Таких, как установка по насыщению водородом, измерениию параметров распространения рэлеевской волны и т.д. Основной задачей в данной работе является понимание взаимодействия Nb с Zr-H на микроскопическом уровне очень важно для исследования системы Zr-Nb-H и диффузии водорода.

Поэтому рассмотрение безопасности и гигиены труда при осуществлении работ по наводороживанию с помощью стенда измерения параметров ультразвука особенно важно при проведении данного исследования.

5.1 Техногенная безопасность

Работа стенда измерения параметров ультразвука осуществляется за счет питания от сети переменного тока напряжением 220 В. При проведении работ на стенде измерения параметров ультразвука возможно воздействие вредных факторов таких, как:

- микроклимат,
- электромагнитные поля,
- шум,
- освещение,

Также возможно воздействие следующих опасных производственных факторов:

- электрическое напряжение;
- воздействие высокой температуры;

Воздействие электрического напряжения на человека связано с протеканием через него тока. Прохождение тока может вызывать у человека раздражение и повреждение различных органов. Пороговый неотпускающий ток составляет 50 Гц (6-16мА). Защита от воздействия электрического тока

осуществляется путем проведения организационных, инженерно-технических и лечебной- профилактических мероприятий.

При рассмотрении воздействия высокой температуры на организм человека важно отметить, что запрещается открывать крышку нагретой печи, дотрагиваться до камеры, а также необходимо одевать спецодежду, во избежание получения термических ожогов при работе с установкой, в которую помещен исследуемый образец.

При утечках газа из баллона возможно возгорание. Перед работой необходимо проверить целостность газовых баллонов, прочность их закрепления, отсутствие утечки газа. Вентиль и резьба должны быть исправно, манометр должен быть проверен и исправлен, редуктор должен соответствовать газу в баллоне.

При вредном воздействие ПЭВМ на организм человека происходит нагрузка на зрение, заболевание кожи лица, нервные и психические заболевания и т.д. Допустимая напряжённость электрического поля: 25 В/м (5Гц-2кГц) и 2,5 В/м (2-400 кГц). Для защиты от электромагнитных полей используются различные фильтры. Ориентация светопроемов должна быть северо-восточной или северной. Источники искусственного освещения: люминесцентные лампы типа ЛБ и ДРЛ. Оптимальные параметры микроклимата. При работе с ПЭВМ уровень звука не должен превышать значений, установленных для данных видов работ.

Для удобства работы в помещении необходима нормировка параметров микроклимата. Необходимо применение защитных мероприятий по способам и средствам защиты от высоких и низких температур, системы отопления, вентиляции и кондиционировании воздуха, искусственное освещение и т.п.

5.2 Анализ вредных и опасных факторов

5.2.1 Электромагнитные поля

Для анализа результатов работы необходимо работать с компьютером. Источниками электромагнитного излучения являются электрические сигналы цепей при работе компьютера. Нарушения в организме человека при

воздействии электромагнитных полей незначительных напряжений носят обратимый характер. При воздействии полей, имеющих напряженность выше предельно допустимого уровня, развиваются нарушения со стороны нервной и сердечно-сосудистой систем, органов пищеварения и некоторых биологических показателей крови. Наиболее мощным источником электромагнитных полей в помещении являются катушки отклоняющих систем, находящихся около цокольных частей электронно-лучевых трубок мониторов.

Нормы напряженности электромагнитного поля на расстоянии 50 см вокруг монитора по электрической составляющей, соответствующие, приведены в таблице 5.1.

Таблица 5.1 – Нормы напряженности поля

Наименование параметров	Допустимые значения
Напряженность электромагнитного поля на расстоянии 50 см. Вокруг ВДТ по электрической составляющей должна быть не более: − в диапазоне частот от 5 Гц до 2 кГц − в диапазоне частот 2—400 кГц	25 В/м 2,5 В/м
Плотность магнитного потока должна быть не более: − в диапазоне частот от 5 Гц до 2 кГц − в диапазоне частот 2 – 400 кГц	250 нТл 25 нТл
Поверхностный электростатический потенциал не должен превышать	500 В

Для выполнения норм предельно допустимой напряженности электромагнитного поля расстояние от глаз до монитора должно быть 60 -70 см, но не менее 50 см. Увеличение расстояния в 2 раза приводит к 32-кратному уменьшению плотности мощности на низких частотах на оператора.

5.2.2 Шум

В работе основными источниками шума являются генератор сигналов.

По санитарным нормам, допустимым уровнем шума принято считать: 55 децибел (дБ) в дневное время и 40 децибел (дБ) ночью. Уровень шума генератора сигналов составляет 15–20 дБА. Длительное воздействие шума на организм человека приводит к следующим последствиям:

а) снижается производительность труда;

б) ослабляется память, внимание, острота зрения и чувствительность к предупредительным сигналам;

в) снижается чувствительность слуха.

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

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

2. пользоваться МФУ во время перерывов в работе (при отсутствии срочности);

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

5.3 Организационные мероприятия обеспечения безопасности

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.

Запрещается приступать к работе, если выявлены неисправности любого используемого оборудования, если персонал не прошел в установленном порядке обучение и проверку знаний безопасности труда.

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

5.4 Особенности законодательного регулирования проектных решений

К работе на стенде измерения параметров ультразвука 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 стенде измерения параметров ультразвука, 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

Проведение всех видов инструктажа должно оформляться в Журнале

регистрации инструктажа установленного образца, с обязательными подписями получившего и проводившего инструктаж, с указанием даты проведения инструктажа, наименования и номеров инструкции на виды работ, по которым проводится инструктаж.

По данной теме рассматриваются законодательный и нормативные документы:

− инструкция № 2-25 по охране труда при выполнении работ на установке Gas Reaction Controller;

− инструкция № 2-14 по охране труда при работе с электрооборудованием напряжением до 1000 В ;

− инструкция № 2-07 по охране труда при работе с баллонами, работающими под давлением.

Документы по воздействию ПЭВМ:

− инструкция № 2-08 по охране труда при работе с ПЭВМ и ВДТ;

− СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03. Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организация работы;

− ГОСТ Р 50948-01. Средства отображения информации индивидуального пользования. Общие эргономические требования и требования безопасности;

− ГОСТ Р 50949-01. Средства отображения информации индивидуального пользования. Методы измерений и оценки эргономических

параметров и параметров безопасности;

− ГОСТ Р 50923-96. Рабочее место оператора.

Общие эргономические требования и требования к производственной среде. Методы измерения.

Микроклимат:

− ГОСТ 30494-96 Здания жилые и общественные помещения. Параметры микроклимата в помещении;

− ГОСТ 12.1.005 Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны;

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

5.5 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

При обнаружении неисправной работы стенда измерения параметров

ультразвука необходимо прекратить работу, выйти из программы, отключить питание компьютера, отключить генератор сигналов, частотомер, стенд измерения параметров ультразвука от электросети и известить об этом руководителя.

При возникновении возгорания необходимо немедленно прекратитьработу, отключить электрооборудование, позвонить в подразделение пожарной охраны по телефону 01 или 010, сообщить о случившемся руководителю подразделения и приступить к тушению огня первичными средствами пожаротушения.

При поражении работника электрическим током необходимо как можно скорее освободить пострадавшего от воздействия электрического тока, проверить состояние пострадавшего и вызвать при необходимости скорую помощь. До приезда скорой помощи оказать пострадавшему необходимую первую помощь или, при необходимости, организовать доставку пострадавшего в ближайшее лечебное учреждение, о произошедшем несчастном случае поставить в известность руководителя структурного подразделения.

Еще вероятная чрезвычайная ситуация (ЧС) – это пожар.

Пожарная профилактика основывается на устранении благоприятных условий возгорания. В рамках обеспечения пожарной безопасности решаются четыре задачи: предотвращение пожаров и возгорания, локализация возникших пожаров, защита людей и материальных ценностей, тушение пожара. Предотвращение пожара достигается путем исключения легко воспламеняемых предметов и источников возгорания, а также поддержанием среды в условиях, препятствующих возгоранию.

В современных ЭВМ очень высокая плотность размещения элементов электронных схем. В непосредственной близости друг от друга располагаются соединительные провода, коммутационные кабели, элементы электронных микросхем. При протекании по ним электрического тока выделяется определенное количество теплоты, что может привести к повышению температуры до 80 – 100 °С. При этом возможно плавлении изоляции, и как следствие короткое замыкание, которое сопровождается искрением и ведет к недопустимым перегрузкам элементов микросхем. Для отвода избыточной теплоты в ЭВМ используют внутренние вентиляторы.

Напряжение к электроустановкам подается по кабельным линиям, которые так же представляют особую пожарную опасность. Пожарная опасность

производственных зданий и помещений определяется особенностями выполняемых в них технологических процессов.

Возникновение пожара в рассматриваемом помещении обуславливается следующими факторами:

− наличие легко воспламеняемых элементов: документы, двери, столы и т.п.;

− наличие кислорода, как окислителя процессов горения. Пожар может возникнуть из-за:

− неисправности электропроводки, розеток и выключателей, которые могут привести к короткому замыканию или пробою изоляции;

− использования поврежденных электроприборов;

− использования в помещении электронагревательных приборов с открытыми нагревательными элементами;

− попадания молнии в здание;

− неаккуратного обращения с огнем и несоблюдения мер пожарной безопасности.

Согласно классификации производств по пожарной опасности (ППБ-03), в зависимости от характеристики используемых в производстве веществ и их количества помещения делятся на категории А, Б, В, Г, Д. Данное помещение относится к категории В, поскольку горючие вещества и материалы находятся в твердом состоянии без выделения пыли.

Для тушения пожара имеются пожарные стволы, внутренние пожарные водопроводы, огнетушители и сухой песок.

Вода используется для тушения пожаров в помещениях программистов только в случае опасности повреждения или полного выхода из строя дорогостоящего оборудования. При этом, по возможности, необходимо защитить компьютеры от попадания влаги.

Для тушения пожаров на начальных стадиях широко применяются огнетушители. Поэтому в отделах с ПЭВМ применяются главным образом

углекислотные огнетушители, достоинством которых является высокая эффективность тушения пожара и сохранность электронного оборудования.

Благодаря диэлектрическим свойствам углекислого газа можно использовать эти огнетушители даже в том случае, когда не удается обесточить электроустановку сразу.

Для предотвращения возникновения пожара с работниками здания проводятся специальные семинары, на которых происходит знакомство с основами противопожарной безопасности и обучение работе с первичными средствами пожаротушения.

5.6 Расчет воздухообмена в жилых и общественных помещениях

В жилых и общественных помещениях постоянным вредным выделением является выдыхаемая людьми углекислота (CO2). Определение потребного воздухообмена производится по количеству углекислоты, выделяемой человеком и по допустимой концентрации её.

Потребный воздухообмен в жилых и общественных помещениях определяется по формуле:

$$L = \frac{G}{x_в - x_н}, \quad (5.1)$$

При выполнении работы на установке по насыщению водородом образцов работает один человек.

Выделяемое количество CO2 одним человеком = 23 л/ч.

Допустимая концентрация вредности в воздухе рабочей зоны помещения (согласно ГОСТ 12.1.005-88) хв=1 л/м3.

Допустимая концентрация вредности в воздухе больших городов (ГН 2.1.6.1338-03) хн=0,5 л/м3.

Определим потребный воздухообмен для помещения по формуле (5.1):

L=23/(1-0,5)=46 м^3/ч.

Вывод: в ходе рассмотрения безопасности и гигиены труда при осуществлении работ по наводороживанию с помощью стенда измерения параметров ультразвука, были выявлены вредные и опасные факторы рабочей

зоны, причины и средства защиты, рассмотрены чрезвычайные ситуации и поведение в них. Также был произведен расчет воздухообмена в помещении рабочей зоны с стендами измерения параметров ультразвука, в котором работает один человек. Рассчитанный воздухообмен помещения равен 46 $м^3$/ч.

Заключение

Добавление атомов Nb в систему Zr–H заметно влияет на ее микроструктуру, а также стабильность, в связи с чем понимание особенностей взаимодействия атомов ниобия и водорода в решетке циркония на микроскопическом уровне очень важно для контроля и предсказывания свойств системы Zr-Nb-H и изучения процессов диффузии H в сплавах Zr с Nb. Данная работа представляет первопринципное исследование атомной структуры и распределения электронной плотности систем Zr-Nb-H и Zr-H, энергии связи водорода в решетке циркония с примесью ниобия.

В работе установлено, что атомы Nb в решетке циркония замещают атомы Zr. Энергия внедрения гелия в цирконий в этом случае составляет ~ 0,9 эВ при концентрации ~ 3 ат.% и ~ 0,7 эВ при концентрации ~ 6 ат.%. Замещение атома циркония ниобием незначительно уменьшает параметры решетки (на величину ~ 0,03 Å). Выявлено, что внедрение ниобия в решетку циркония приводит к увеличению энергии связи водорода с решеткой циркония на величину ~ 0,5 эВ за счет увеличения доли ковалентной составляющей связи металл-водород. Это также подтверждается расчетами распределения электронной плотности в системах Zr-H и Zr-Nb-H: уровень электронной плотности между атомами ниобия и водорода заметно выше, чем между атомами циркония и водорода, что свидетельствует о более сильном связывании водорода с ниобием по сравнению с цирконием.

При увеличении концентрации атомов водорода и ниобия в решетке циркония с 3 ат.% до 6 ат.% наблюдается уменьшение энергии связи водорода с цирконием на величину ~ 0,6 эВ. При концентрации ~ 3 ат.% атому водорода энергетически наиболее выгоднее размещаться в тетраэдрических междоузлиях решетки α-циркония.

Список литературы

1. Emsley, John. Nature's Building Blocks. Oxford: Oxford University Press. pp. 506–510.

2. David R. Zirconium. // CRC of Chemistry and Physics. – Vol. 7. – P. 1034–1048.

3. Цирконий [Электронный ресурс]. – Режим доступа: https://ru.wikipedia.org/wiki/Цирконий

4. Considine, Glenn D. (2005). Zirconium. // Van Nostrand's Encyclopedia of. – 2005– Vol. 7. – P. 1034–1048.

5. Ниобий [Электронный ресурс]. – Режим доступа: https://ru.wikipedia.org/wiki/Ниобий.

6. Cometto, D.J. and Hehemann, R.F. Transformation characteristics of Zr-Nb alloys. // U.S. Atomic Energy Commission Interim Report. –1959– Vol. 2, – P. 47–64.

7. Rogers, B.A. and Atkins, D.F. Zirconium-Columbium Diagram // Phys. Rev. 1955– Vol. 7. – P. 1034–1048.

8. Kresse G. and Furthmuller J., // Comput. Mater. Sci., 1996, 6, 15–50.

9. Wang F. and Gong H.R., First principles study of various Zr-H phases with low H concentrations // Int. Jour. Hydr. Ener. 2012. – 37. – 12393

10. Ponzoni L.M.E, Mieza J.I., De Las Heras E., and Domizzi G., Comparison of delayed hydride cracking behavior of two zirconium alloys, // Int. Nucl. Mater, 2013. – 439. – 238

11. Abriata J.P. and Bolcich J.C. The Nb-Zr (Niobium- Zirconium) system. // Bulletin of Alloy Phase Diagrams. – 1982 – Vol.3 – No.1– P. 88–97.

12. Born M., Oppenheimer R. Zur Quanten theorie der Molekeln // Annalen der Physik. – 1927. – Vol. 84. – P. 457–484.

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

14. Цидильковский И.М. Электроны и дырки в полупроводниках. Энергетический спектр и динамика. М.: «Наука» 1972г.— С. 12–91.

15. Харрисон У. Псевдопотенциалы в теории металлов. – М.: Мир, 1968. – 366 с.

16. Burke K., Wagner L.O. DFT in a nutshell // International Journal of Quantum Chemistry. – *2013*. – Vol. 113., № 2. – P. 96–108.

17. Prescriptions for the design and selection of density functional approximations: More constraint satisfaction with fewer fits / J.P. Perdew, A. Ruzsinszky, T. Jianmin, N. Staroverov Viktor, Scuseria Gustavo, I. Csonka. Gábor // Journal of Chemical Physics. – 2005. – Vol. 123., № 6. – P. 123–129.

18. Svyatkin L.A., Koroteev Yu.M., Chernov I.P. Mutual influence of hydrogen and vacancies in α-zirconium on the energy of their interaction with metal. // Physics of the Solid State. – 2017. – Vol. 60. – Issue 1. – P. 10–19.