

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

---

Институт – Физико-технический  
Направление 14.04.02– Ядерные физика и технологии  
Кафедра – Техническая физика

### МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
<b>ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗОТОПНОГО ЭФФЕКТА ПРОЦЕССА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ИЗ ВОДНОГО РАСТВОРА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ</b>

УДК 661.42:546.33.065.5:537.612

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0AM5A	Макаревич Семён Васильевич		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор каф.ТФ ФТИ	Мышкин Вячеслав Федорович	д-р ф.-м. н, профессор		

### КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент каф. «менеджмент»	Верховская Марина Витальевна	к. экон. н		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент каф.ПФ ФТИ	Гоголева Татьяна Сергеевна	к.ф.-м.н		

### ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Зав. кафедрой	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор каф.ТФ ФТИ	Шаманин Игорь Владимирович	д-р ф.-м. н, профессор		

Томск – 2017 г.

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

---

Институт – Физико-технический  
Направление 14.04.02 – Ядерные физика и технологии  
Кафедра – Техническая физика

УТВЕРЖДАЮ:  
Зав. кафедрой ТФ

И.В.Шаманин  
(Подпись)      (Дата)      (Ф.И.О.)

**ЗАДАНИЕ**  
**на выполнение выпускной квалификационной работы**

В форме:

Магистерской диссертации

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

Студенту:

Группа	ФИО
0AM5A	Макаревич Семёну Васильевичу

Тема работы:

Исследование изотопного эффекта процесса кристаллизации из водного раствора в магнитном поле

Утверждена приказом директора (дата, номер)

Срок сдачи студентом выполненной работы:

**ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:**

<b>Исходные данные к работе</b>	
<i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i>	<i>Объект исследования – кристаллы NaCl; Предмет исследования – процесс кристаллизации NaCl в магнитном поле; Опасные факторы – вероятность порезаться осколками химического стекла, возможность попадания пересыщенного раствора соли на слизистую оболочку глаз.</i>

<p><b>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</b></p> <p><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></p>	<p><b>Разделы записки:</b></p> <p><i>Введение</i></p> <p><i>1) Обзор литературы</i></p> <p><i>2) Практическая часть</i></p> <p><i>3) Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение</i></p> <p><i>4) Социальная ответственность</i></p> <p><i>Заключение</i></p> <p><i>Список использованной литературы</i></p>
--	--

<p><b>Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы</b></p> <p><i>(с указанием разделов)</i></p>
---

Раздел	Консультант
Экспериментальная часть	Профессор каф. ТФ ФТИ Мышкин Вячеслав Федорович
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Доцент каф. «менеджмент» Верховская Марина Витальевна
Социальная ответственность	Ассистент каф. ПФ ФТИ Гоголева Татьяна Сергеевна

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

**Задание выдал руководитель:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор каф. ТФ ФТИ	Мышкин Вячеслав Федорович	д.ф.-м.н.		

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0AM5A	Макаревич Семён Васильевич		

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

Студенту:

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>
0AM5A	Макаревич Семён Васильевич

<b>Институт</b>	<b>Физико-технический</b>	<b>Кафедра</b>	<b>Техническая физика</b>
<b>Уровень образования</b>	Магистратура	<b>Направление/ специальность</b>	14.04.02 Ядерные физика и технологии/ Изотопные материалы и технологии

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

1. <i>Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	Затраты на специальное оборудование определяются согласно стоимости оборудования по прейскурантам или по договорной цене. Зарботная плата рассчитывается исходя из тарифной ставки и коэффициентов, зависящих от различных условий: организация, регион. Страховые отчисления определяются согласно Федеральному закону от 24.07.2009 №212-ФЗ. Прочие накладные расходы определяются исходя из суммы полной заработной платы исполнителя технического проекта.
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>	Оценку потенциала и перспективности реализации ТП можно провести с помощью карты сегментирования рынка
2. <i>Планирование процесса управления НИИ: структура и график проведения, бюджет</i>	Иерархическая структура работ Организационная структура проекта Календарный план-график проведения НИИ по теме
3. <i>Оценка ресурсной, финансовой, социальной, бюджетной эффективности научного исследования</i>	Оценка научно-технического эффекта

**Перечень графического материала:**

<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Матрица SWOT</li> <li>2. Иерархическая структура работ</li> <li>3. Организационная структура работ</li> <li>4. Календарный план-график проведения НИИ по теме</li> <li>5. Бюджет НИИ</li> <li>6. Матрица ответственности</li> <li>7. Оценка научно-технического эффекта</li> </ol>
--

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

**Задание выдал консультант:**

<b>Должность</b>	<b>ФИО</b>	<b>Ученая степень, звание</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
Доцент каф. Менеджмент	Верховская М.В.	к.ЭКОН.Н.		

**Задание принял к исполнению студент:**

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
0AM5A	Макаревич С.В.		

## ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа 0AM5A	ФИО Макаревич Семён Васильевич
-----------------	-----------------------------------

Институт	ФТИ	Кафедра	ТФ
Уровень образования	Магистр	Направление/специальность	14.04.02 «Ядерная физика и технологии»/ «Изотопные технологии и материалы»

### Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

<p>1. Описание рабочего места (рабочей зоны) на предмет возникновения:</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- вредных проявлений факторов производственной среды (микроклимат, освещение, шумы, вибрации, электромагнитные поля, ионизирующее излучение);</li> <li>- опасных проявлений факторов производственной среды (электрической, пожарной и взрывной природы).</li> </ul>
<p>2. Знакомство и отбор законодательных и нормативных документов по теме</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- электробезопасность;</li> <li>- пожаровзрывобезопасность;</li> <li>- требования охраны труда при работе с вакуумным насосом.</li> </ul>

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

<p>1. Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности:</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- действие фактора на организм человека;</li> <li>- приведение допустимых норм с необходимой размерностью (со ссылкой на соответствующий нормативно-технический документ);</li> <li>- предлагаемые средства защиты (коллективные и индивидуальные).</li> </ul>
<p>2. Анализ выявленных опасных факторов проектируемой произведённой среды в следующей последовательности</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- электробезопасность (в т.ч. статическое электричество, средства защиты);</li> <li>- пожаровзрывобезопасность (причины, профилактические мероприятия).</li> </ul>

<b>Дата выдачи задания для раздела по линейному графику</b>	
---	--

**Задание выдал консультант:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент каф. ПФ ФТИ	Гоголева Т.С.	к.ф.-м.н.		

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0AM5A	Макаревич Семён Васильевич		

## ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ООП

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)
<b>Профессиональные компетенции</b>	
P1	Способность проводить математическое моделирование процессов и объектов на базе стандартных пакетов автоматизированного проектирования и исследований.
P2	Готовность к проведению физических экспериментов по заданной методике, составлению описания проводимых исследований и анализу результатов.
P3	Способность использовать информационные технологии при разработке новых установок, материалов и приборов, к сбору и анализу информационных исходных данных для проектирования приборов и установок.
P4	Готовность к разработке проектной и рабочей технической документации, оформление законченных проектно-конструкторских работ.
P5	Готовность к проведению предварительного технико-экономического обоснования проектных расчетов установок и приборов.
P6	Готовность к эксплуатации современного физического оборудования и приборов, к освоению технологических процессов в ходе подготовки производства новых материалов, приборов, установок и систем.
P7	Готовность к монтажу, наладке, испытанию и сдаче в эксплуатацию опытных образцов приборов, установок, узлов, систем и деталей.
P8	Готовность разрабатывать способы применения ядерно-энергетических, плазменных, лазерных, СВЧ и мощных импульсных установок, электронных, нейтронных и протонных пучков, методов экспериментальной физики в решении технических, технологических и медицинских проблем.
P9	Использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования.
P10	Способность понимать сущность и значение информации в развитии современного информационного общества, сознавать опасности и угрозы, возникающие в этом процессе, соблюдать основные требования информационной безопасности, в том числе защиты государственной тайны.

## Реферат

Выпускная квалификационная работа объемом 92 страницы, 19 рисунков, 16 таблиц, 32 источника, 19 формул.

Ключевые слова: кристаллизация, водный раствор, NaCl, рентгенодифракционный анализ, спин, магнитное поле.

Объектом исследования являются кристаллы NaCl выращенные под воздействием постоянного магнитного поля из водного раствора.

Цель работы – экспериментальное определение изменения изотопного эффекта в магнитном поле при кристаллизации NaCl из водных растворов.

В процессе исследования в рамках ВКР проводились:

1. Обзор литературы;
2. Экспериментальные исследования изменения изотопного эффекта процесса кристаллизации NaCl из водного раствора в магнитном поле;
3. Анализ результатов, оценка оптимальных условий для формирования кристаллов с разным изотопным составом во внешнем постоянном магнитном поле.

В результате исследования установлено, что:

1. в постоянном магнитном поле скорость образования кристаллов NaCl из водного раствора разными изотопами хлора отличаются;
2. в постоянном магнитном поле изменяется коэффициент поверхностного натяжения насыщенного раствора NaCl;
3. кристаллы, формирующиеся из водных растворов, содержат разный изотопный состав, который может быть, как равномерно распределен по кристаллу, так и находиться в виде отдельных кластеров с повышенным содержанием изотопа  $^{37}\text{Cl}$ .

Результаты исследований по изменению изотопного эффекта в постоянном магнитном поле при кристаллизации NaCl из водных растворов могут быть использованы в дальнейшем при разработке инновационного метода разделения изотопов.

## Оглавление

Реферат	7
Введение	10
1 Обзор научно-технической литературы	12
1.1 Параметр решетки обогащенных по изотопам кристаллов	12
1.2 Методы выращивания кристаллов	14
1.2.1 Выращивание кристаллов из растворов	14
1.2.2 Выращивание кристаллов из расплавов	17
1.2.3 Кристаллизация из газовой (паровой) фазы	18
1.3 Влияние магнитного поля на рост кристалла из водных растворов	21
1.4 Методы анализа модифицированных по изотопам материалов	22
2 Экспериментальные исследования влияния магнитного поля на структуру кристаллов	25
2.1 Особенности кристаллизации в магнитном поле	25
2.2 Разработка экспериментальной установки	26
2.3 Методика (порядок) проведения эксперимента	28
2.4 Результаты рентгенодифракционного анализа	31
Выводы. Заключение	38
3 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	39
3.1 Техничко-экономическое обоснование ВКР	39
3.2 Планирование НИР	40
3.3 Бюджет научно-технического исследования	46
3.4 Ресурсоэффективность	51
4 Социальная ответственность	56
4.1 Анализ опасных и вредных производственных факторов при работе в лаборатории	57
4.2 Мероприятия по снижению уровней опасного и вредного воздействия и устранению их влияния на работников	58

4.3	Требования безопасности при выполнении работ в химических лабораториях	62
4.4	Требования безопасности при работе с механическими вакуумными насосами	65
4.5	Электробезопасность	66
4.6	Пожарная и взрывная безопасность	68
	Список публикаций	71
	Список использованных источников	73
	Приложение А	75

## Введение

Более чем 70 элементов, из 92 стабильных, имеют два и более изотопов. Изотопы одного элемента отличаются количеством нейтронов в ядре и атомной массой. Известно, что изотопы значительно отличаются по ядерно-физическим свойствам. При этом все остальные свойства изотопов одного элемента также отличаются, хотя и незначительно.

Известно, что материалы заданного изотопного состава обладают лучшими потребительскими параметрами, чем их природные аналоги. Например, лучшая теплопроводность моноизотопных полупроводников позволяет изготавливать микросхемы меньшего размера и увеличить степень интеграции элементов. Кварцевые световоды, содержащие 50%  $^{28}\text{Si}$  и 50%  $^{30}\text{Si}$  имеют меньшее пропускание, чем световод из природного кварца. Применение специально формируемых смесей изотопов также актуально для конструкционных материалов, используемых: например, в поле радиоактивного излучения.

Также бурно расширяется использование изотопов в медицине и изучении биохимических процессов. Например, изотоп  $^{25}\text{Mg}$  способен ускорять скорость биохимических процессов. Считается перспективным применение парамагнитного изотопа  $^{25}\text{Mg}$  в медицинских целях.

Разработаны множество методов разделения практически всех изотопов. Значительная часть из них апробированы в промышленных технологиях. Однако, широкому использованию обогащенных по изотопам материалов препятствует их высокая стоимость. Поэтому исследования по поиску и разработке инновационных энергоэффективных методов разделения изотопов различных элементов являются *актуальными*.

Магнитное поле, имеющее малое энергетическое действие на материалы, из-за спиновых эффектов, способно оказывать значительное влияние на физико-химические процессы. Это воздействие может изменять параметры процесса, а

также полностью блокировать один из путей достижения конечного состояния в этом процессе.

Водный раствор хлорида натрия является очень хорошим для отработки методов магнитного управления процессом кристаллизации. Это высокая растворимость в воде, хорошая способность к кристаллизации при испарении воды. Также следует учитывать изотопный состав соли: натрий моноизотопен, хлор содержит изотопы  $^{35}\text{Cl}$  и  $^{37}\text{Cl}$  в соотношении 3 : 1.

Исследования, в рамках выпускной квалификационной работы, связаны с формированием кристаллов в магнитном поле и направлены на научное обоснование инновационной технологии сепарации изотопов хлора. Такие исследования имеют высокий мировой научный уровень, а получаемые результаты очень востребованы.

Цель исследований – экспериментальное определение изменения изотопного эффекта в постоянном магнитном поле при кристаллизации  $\text{NaCl}$  из водных растворов.

Поставленная цель будет решена в рамках следующих задач:

1. Обзор научно-технической литературы;
2. Экспериментальные исследования по изменению распределения изотопного состава кристаллов  $\text{NaCl}$ , формируемых из водного раствора при воздействии постоянным магнитным полем;
3. Анализ результатов, оценка оптимальных условий для формирования кристаллов  $\text{NaCl}$  с разным распределением изотопов с учетом протекания парамагнитных явлений во внешнем магнитном поле.

# 1 Обзор научно – технической литературы

## 1.1 Параметр решетки обогащенных по изотопам кристаллов

При исследовании структуры твердых тел было обнаружено, что замена водорода на дейтерий приводит к значительному изменению параметра решетки. Знак изотопического эффекта, как правило, соответствует уменьшению параметра решетки при замене водорода на дейтерий в водородосодержащих соединениях. Однако в некоторых случаях изотопный эффект оказывался обратным. Температурная зависимость изотопического эффекта в величине параметров кристаллической решетки связана с различием коэффициентов линейного расширения соединений, содержащих водород или дейтерий. Чаще всего дейтерирование вызывает рост коэффициентов расширения. У некоторых веществ, испытывающих при изменении температуры полиморфные превращения, изотопическое замещение вызывает сдвиг температуры этих превращений, а иногда изменяет и характер такого превращения [1].

Первая попытка обнаружить различия в структурах твердых тел, отличающихся изотопным составом, предпринята путем рентгеноструктурных исследований льда из легкой и тяжелой воды описаны результаты [2].

Сравнивались параметры решетки изотопных модификаций гидрида лития LiH и LiD. В структуре льда водород находится в составе группы атомов, образующей молекулу воды. Замена изотопа, вызывая небольшие изменения расстояний между ядрами внутри такой группы, мало сказывается на расстояниях между молекулами (параметрах кристаллической решетки). В отличие от льда, в гидриде лития атомы H (D) занимают заданное положение в узлах решетки. Поэтому замена изотопов H-D вызывает более заметное, чем у льда, изменение размеров элементарной ячейки.

Еще большее изменение параметров решеток при замене водорода дейтерием было обнаружено у гидридов серы и селена, у гидрида гафния [3].

Несколько меньшие различия в молярных объемах оказались у металлоподобных дейтерида и гидрида урана и лантана [4-5].

Первыми из изотопов металлов методами рентгеноструктурного анализа изучались изотопы лития ( ${}^6\text{Li}$  и  ${}^7\text{Li}$ ) [6]. В результате обработки рентгенограмм изотопов лития, регистрируемых при различных температурах, оказалось, что при комнатной температуре параметры решеток обоих изотопов не отличаются в пределах точности измерения. При температуре 4,2К различие в параметрах решеток изотопов составляют  $a_{\text{Li}6}=3,480\text{Å}$ ,  $a_{\text{Li}7}=3,478\text{Å}$  [7].

Одной из причин изотопических эффектов в параметрах решетки твердых тел является различие нулевых колебаний. Равновесное расстояние между двумя соседними частицами в кристаллической решетке в первом приближении определяется положением минимума кривой потенциальной энергии взаимодействия между этими частицами. Частица даже при абсолютном нуле не находится в покое на дне потенциальной ямы, а испытывает нулевые колебания. Учет нулевых колебаний, являющихся чисто квантовым эффектом, приводит к зависимости расстояния между взаимодействующими частицами от их массы. Чем больше энергия колеблющихся частиц, тем больше из-за несимметричности потенциальной кривой среднее расстояние между этими частицами. Частота нулевых колебаний, а следовательно, и их энергия обратно пропорциональны корню из массы, т.е. больше у атомов «легких» элементов, чем у «тяжелых». Учет нулевых колебаний приводит к выводу, что молярный объем (параметр решетки) «тяжелого» изотопа должен быть при абсолютном нуле меньше, чем у «легкого». Все эти закономерности имеют место у решеток с простыми Ван-дер-Ваальсовскими силами связи (изотопы водорода, неона, гелия)

## 1.2 Методы выращивания кристаллов

### 1.2.1 Выращивание кристаллов из растворов

Для начала кристаллизации в растворе необходимо создать необходимое пересыщение, т.е. коэффициент равный отношению концентрации соли к концентрации, при которой в равновесных условиях начинается кристаллизация. Используются следующие методами кристаллизации.

**Изогидрическая кристаллизация.** Растворимость большинства веществ уменьшается с понижением температуры. Поэтому при охлаждении горячих растворов возникает пересыщение, обуславливающее выделение кристаллов.

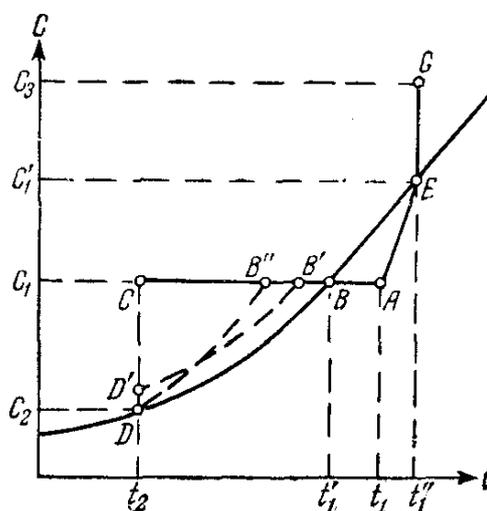


Рисунок 1.1 - Диаграмма растворимости

На диаграмме растворимости (рис. 1) охлаждение горячего ненасыщенного раствора, имеющего температуру  $t_1$  и концентрацию  $C_1$  (точка А), до конечной температуры  $t_2$  условно можно изобразить линией АС, которая пересекает кривую растворимости в точке В, характеризующей насыщенное состояние раствора при температуре  $t_1'$ . Если кристаллизация раствора начинается только после его охлаждения до температуры  $t_2$ , при которой и заканчивается полное снятие пересыщения, то процесс кристаллизации изобразится линией CD, а конечное состояние раствора — точкой D на кривой растворимости, соответствующей равновесной концентрации  $C_2$  [9].

В том случае, если раствор не способен к образованию сколько-нибудь заметного пересыщения, процесс его охлаждения и кристаллизации изобразится линией ABD. В зависимости от скорости охлаждения раствора и его способности образовывать пересыщение реальный процесс может протекать также по линиям AB'D'D или AB''D [10].

**Изотермическая кристаллизация.** Перевод исходного раствора, характеризуемого точкой А (рис.1), в пересыщенное состояние можно осуществить и за счет частичного удаления растворителя при выпаривании раствора при постоянной температуре кипения.

Изменение концентрации исходного ненасыщенного раствора при выпаривании изобразится линией AEG, которая показывает, что с повышением концентрации раствора соответственно возрастает и его температура кипения. Только после перехода раствора в насыщенное состояние при концентрации  $C_1'$  (точка E) температура уже больше не меняется и остается равной  $t_1''$  [9].

Приведенное на рис.1 изображение процесса кристаллизации по линии AEG на диаграмме растворимости является условным, и точка G характеризует лишь общее пересыщение раствора, которое может быть получено при удалении из него определенной части растворителя. В большинстве случаев кристаллизация раствора при выпаривании протекает при постоянной концентрации, очень близкой к состоянию насыщения для данной температуры  $t_1''$  [10]. В тех случаях, когда растворимость соли почти не меняется при изменении температуры, кристаллизация охлаждением становится неэффективной и применяется изотермическая кристаллизация. Кривая растворимости, например NaCl (см. рис.2) показывает, что при охлаждении насыщенного раствора из него выпадает лишь очень небольшое количество соли, поэтому кристаллизация NaCl проводится всегда выпариванием.

**Кристаллизация высаливанием.** При добавлении к раствору вещества, понижающего растворимость выделяемой соли, можно вызвать пересыщение раствора и кристаллизацию. Вещества, добавляемые в раствор, обычно имеют одинаковый ион с кристаллизуемой солью. Высаливающее вещество лучше

вводить в раствор в виде насыщенного раствора, так как при добавлении твердого высаливателя на нем может осаждаться кристаллизующая соль, что вызовет замедление или даже прекращение растворения осадителя [10].

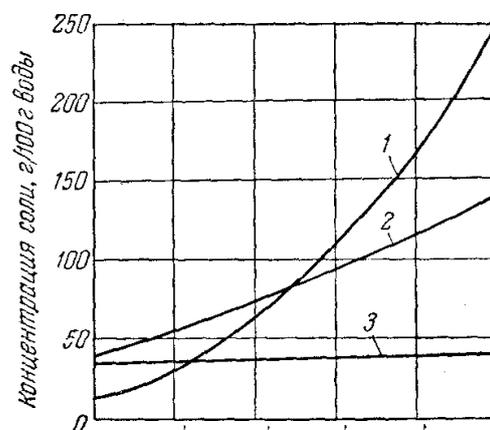


Рисунок 1.2 - Кривые растворимости в воде KNO<sub>3</sub> - 1, Ba(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> - 2 и NaCl - 3.

Недостатком этого способа является сравнительно высокая стоимость органических растворителей, регенерация которых требует проведения дополнительных операций (например, ректификации и дистилляции) и связана с некоторой потерей реагента.

#### — *Кристаллизация вымораживанием*

Такой метод используется преимущественно для выделения отдельных компонентов из естественных рассолов – рапы соляных озер и морских заливов. При охлаждении рапы соляных озер из насыщенных рассолов вымерзает дигидрат хлористого натрия NaCl 2H<sub>2</sub>O. Так как дигидрат не содержит примесей, то его вымораживание из рассола является одним из методов получения чистой поваренной соли [11].

#### — *Кристаллизация в результате химической реакции*

Выделение кристаллической фазы из раствора можно осуществить за счет пересыщения, возникающего в результате химических реакций. Такой метод используется в аналитической практике и ряде химических производств.

При очистке природных и сточных вод чаще всего проводят кристаллизацию карбонатов, сульфатов и гидроокисей металлов, обладающих незначительной растворимостью. Использование, при очистке кристаллизации

труднорастворимых соединений, обусловлено главным образом одной причиной - полнотой осаждения примесей [11]. Следует, отметить, что в определенных условиях остаточные пересыщения при кристаллизации труднорастворимых соединений могут быть значительными. Описанная картина связана с особой способностью таких веществ образовывать устойчивые пересыщенные растворы.

### **1.2.2 Выращивание кристаллов из расплавов**

В настоящее время более половины технически важных кристаллов выращивают из расплава. Этими методами выращивают элементарные полупроводники и металлы, оксиды, галогениды, халькогениды, вольфраматы, ванадаты, ниобаты и другие вещества. В ряде случаев из расплава выращиваются монокристаллы, в состав которых входит пять и более компонентов. Наличие альтернативных методов выращивания кристаллов из расплава позволяет на основании сравнительного анализа их основных технологических характеристик правильно выбрать тот или иной метод получения кристаллов с различными свойствами [12].

Веществами, наиболее подходящими для выращивания из расплава, являются те, которые плавятся без разложения, не имеют полиморфных переходов и характеризуются низкой химической активностью. При кристаллизации из расплава важно учитывать процессы, влияющие на состав расплава (термическая диссоциация, испарение, взаимодействие расплава с окружающей средой), процессы на фронте кристаллизации, процессы теплопереноса в кристалле и расплаве, процессы массопереноса (перенос примесей, обусловленный конвекцией и диффузией в расплаве).

Один из наиболее широко используемых промышленных методов получения полупроводниковых и других монокристаллов это метод Чохральского. Разработан в 1918 году. Преимущество метода вытягивания из расплава по сравнению с другими методами заключается в том, что кристалл

растет в свободном пространстве без контакта со стенками тигля, при этом достаточно легко можно менять диаметр растущего кристалла и визуально контролировать рост. Методами вытягивания из расплава в настоящее время выращивают большинство полупроводниковых (кремний, арсенид галлия, фосфид и арсенид индия и др.) и диэлектрических материалов, синтетических кристаллов драгоценных камней [12]. Технологические особенности проведения процесса определяются свойствами выращиваемого материала и требованиями, как по геометрическим параметрам, так и по физико-химическим свойствам, предъявляемыми к монокристаллу.

В общем случае выращивание монокристаллов полупроводников методом Чохральского можно проводить как в вакууме, так и в атмосфере инертного газа, находящегося под различным давлением. Метод Чохральского может осуществляться как в контейнерном, так и бесконтейнерном вариантах [13].

Наиболее существенным недостатком метода Чохральского является значительная химическая неоднородность выращиваемых кристаллов, выражающаяся в монотонном изменении состава последовательных слоев кристалла вдоль направления роста.

### **1.2.3 Кристаллизация из газовой (паровой) фазы**

Выращивание кристаллов из газовой фазы может осуществляться с помощью следующих процессов:

- сублимации-конденсации,
- химического транспорта (реакций переноса),
- химических реакций (разложения или восстановления газообразных химических соединений)

*Метод сублимации – конденсации:* применяется для выращивания конгруэнтно испаряющихся полупроводниковых соединений (CdS, CdSe, PbTe, PbS и др.), имеющих достаточно высокое значение давления паров  $\sim 1$  мм рт.ст.

Выращивание кристаллов проводят в замкнутых или проточных системах, в вертикальной или горизонтальной модификации, с или без затравки.

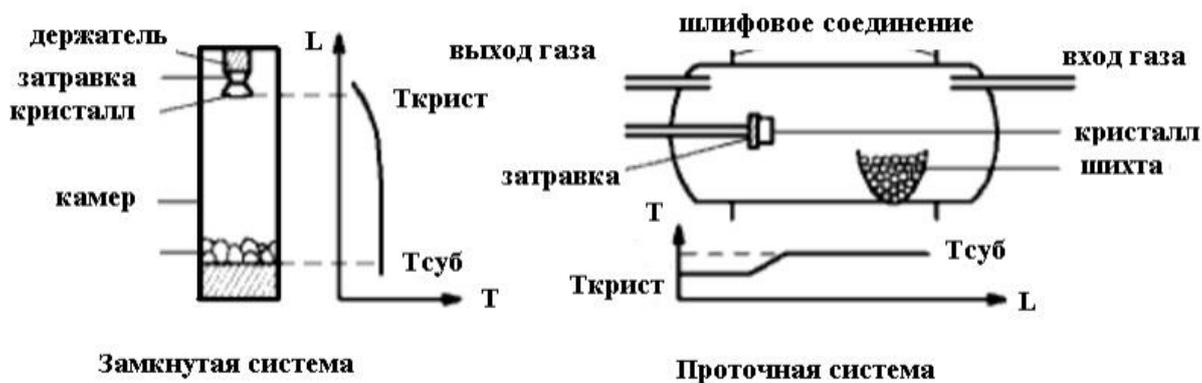


Рисунок 1.3 – Системы выращивания кристаллов методом сублимации - конденсации

**Метод химических реакций:** Источник состоит из газообразных молекул сложного состава, содержащих атомы кристаллизующегося вещества. Источником материала для роста кристалла служат легколетучие химические соединения, которые подаются в реакционную камеру. Эти соединения подвергаются термической диссоциации или восстановлению на поверхности роста (примеры:  $\text{SiCl}_4 + 2\text{H}_2 = \text{Si} + 4\text{HCl}$  – реакция восстановления,  $\text{SiH}_4 = \text{Si} + 2\text{H}_2$  – термическая диссоциация).

Процессы кристаллизации происходят в 2 последовательные стадии:

1. выделения молекул вещества на поверхности роста в результате протекания химической реакции;
2. встраивание атомов (молекул) в решетку кристалла.

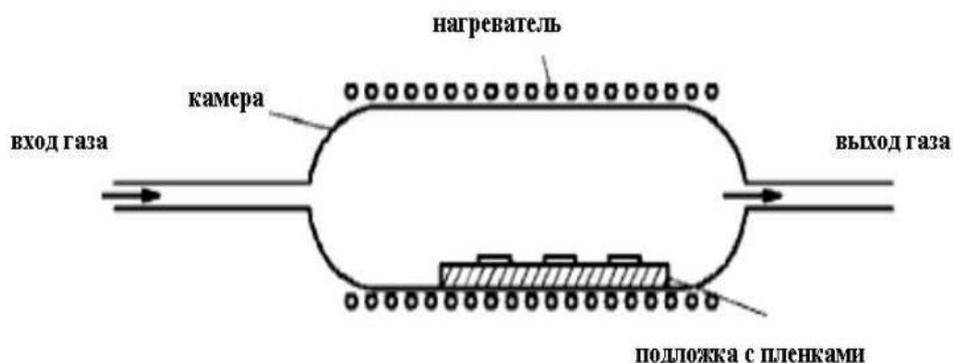


Рисунок 1.4 – Метод химических реакций

**Метод химического транспорта:** В основе метода лежат химические реакции. Рост кристаллов происходит в результате реакций разложения газообразных молекул (пример  $\text{GeI}_4 = \text{Ge} + 2\text{I}_2$ ).

Сущность метода заключается в следующем: при взаимодействии газообразного реагента ( $\text{I}_2$ ) с твердым нелетучим веществом ( $\text{Ge}$ ) при определенных значениях температуры и давления паров могут образовываться разные по составу летучие соединения. При неизменных условиях – наступает равновесное состояние. Если изменить температуру системы, то состояния равновесия нарушится и состав компонент изменится. Таким образом, выбирая условия, при которых в области источника идет реакция образования летучего соединения ( $\text{GeI}_4$ ), а в области кристаллизации – его разложение с выделением твердой фазы ( $\text{Ge}$ ).

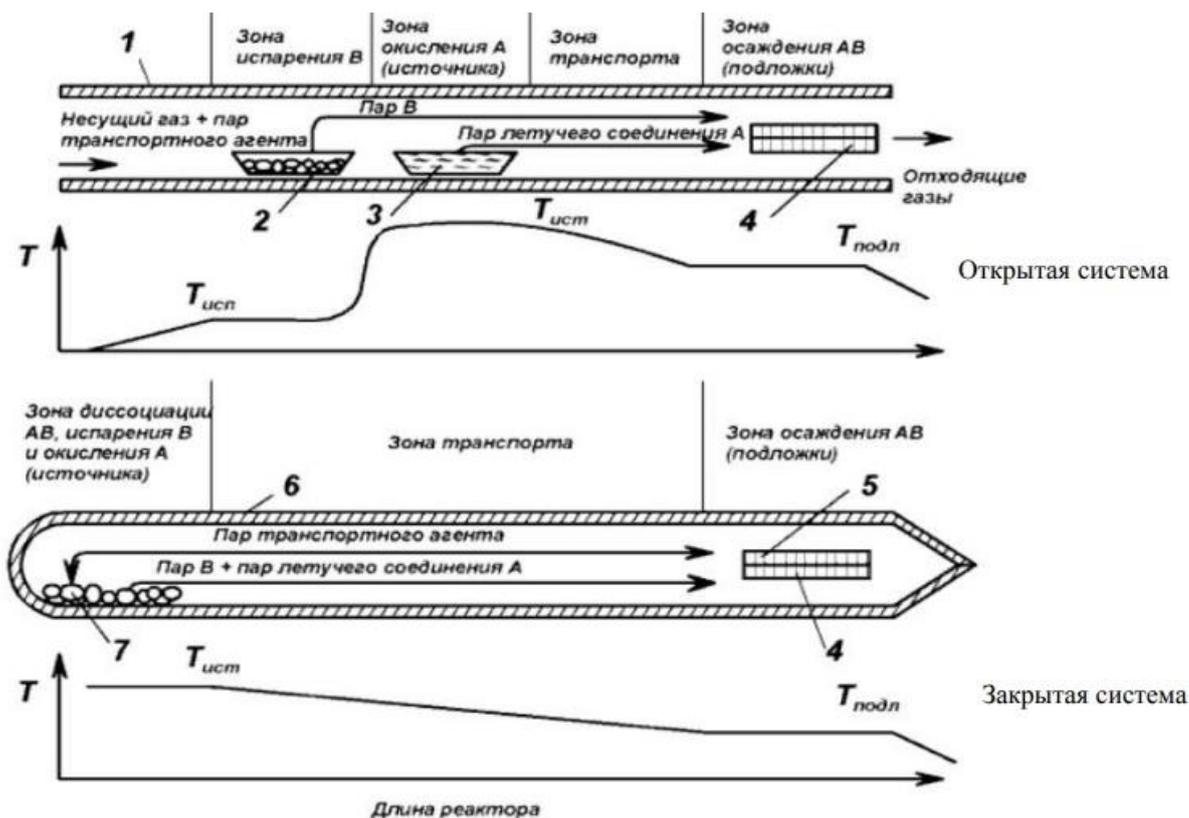


Рисунок 1.5 - Системы выращивания кристаллов методом химического транспорта

### 1.3 Влияние магнитного поля на рост кристалла из водных растворов

Установлено, что при кристаллизации органических соединений и неорганических солей из водных растворов под действием магнитного поля число зародышей увеличивается в несколько раз, возрастая пропорционально напряженности магнитного поля. Также стоит отметить, что на формирование кристаллообразований оказывает влияние постоянное магнитное поле. Ориентация кристаллов в магнитных полях происходит с момента возникновения кристаллических центров и сохраняется в процессе роста кристаллов вплоть до образования поликристаллических агрегатов. Таким образом, ориентирующее действие магнитного поля проявляется в системе на совершенно различных уровнях дисперсности – атомном, молекулярном и макроскопическом [14-17].

Наблюдаемое влияние магнитного поля на кинетику процесса кристаллизации, по мнению многих исследователей, связано либо с уменьшением работы образования зародыша, либо со структурными изменениями в исходной фазе, возникающими в результате ориентирующего действия магнитного поля [18].

Также установлено [19], что в низкотемпературной области магнитное поле уменьшает энергию активации у переохлажденного бестола (эфир). Уменьшение энергии активации примерно соответствует величине работы поворота молекулы в магнитном поле, и экспоненциальный член скорости образования зародышей в формуле  $\exp(-U/kT)$  оказывается большим, чем при кристаллизации в обычных условиях. В высокотемпературной области для того же бестола действие магнитного поля дает обратный эффект.

После магнитной обработки водных растворов солей, их кристаллизация протекает иначе. Влияние магнитного поля в этом случае объясняется изменением структуры растворов и гидратных слоев вокруг частиц, образующих кристалл [20].

## 1.4 Методы анализа модифицированных по изотопам материалов

*Анализ изотопного состава* – определение содержания разных изотопов в элементе или его соединении. Анализ смесей радиоактивных изотопов – достаточно простая задача, решаемая методами радиометрии и ядерной спектроскопии. Анализ стабильных изотопов – более сложная проблема. Анализ необходим в случае применения стабильных изотопных индикаторов, для контроля разделения и концентрирования изотопов, при определении геологического возраста и генезиса пород изотопными методами и т.п. Химические различия изотопов слишком малы для возможности их применения в изотопном анализе. Пользуются зависимостью разных физических свойств от изотопного состава или, реже, специфическими ядерными реакциями, возникающими при воздействии ионизирующего излучения на данный изотоп.

Наиболее универсальный и распространенный способ – применение масс-спектрометра с электрической регистрацией интенсивностей ионных пучков изотопов, разделенных в электрических и магнитных полях после ионизации образца электронным ударом или др. методами. В обычных серийных приборах можно определить изотопный состав с точностью  $\pm 0,1\%$  в образце, где содержание данного элемента не превышает долей мг.

Более грубы различные спектральные методы, основанные на изотопных смещениях энергетических уровней атомов и молекул. Спектр смеси изотопов представляет наложение спектров отдельных изотопов с соотношениями интенсивностей, отвечающими изотопному составу. Чаще всего применяют полосатые молекулярные спектры в видимой или УФ области или колебательные ИК-спектры. Пользуются также вращательными микроволновыми спектрами в области 104-105 МГц и спектрами ядерного магнитного резонанса [21].

Ядерный магнитный резонанс (ЯМР) – резонансное поглощение электромагнитных волн, обусловленное квантовыми переходами атомных ядер между энергетическими состояниями с разными ориентациями спина ядра. Для

большинства ядер в магнитных полях 103-104 Э ЯМР наблюдается в диапазоне частот 1 – 10 МГц. Спектры ЯМР используются для исследования структуры твёрдых тел и сложных молекул.

Очень малые содержания изотопа можно определить с большой чувствительностью, но не очень большой относительной точностью, методом активационного анализа, например,  $^{17}\text{O}$  по характерному позитронному излучению  $^{18}\text{F}$ , образовавшегося при облучении пробы дейтронами по реакции  $^{17}\text{O}(d,n)^{18}\text{F}$ . Отношение Н:Д можно также находить по поглощению медленных нейтронов, для которых сечение захвата протонами во много раз больше, чем дейтронами.

Спектральные и масс-спектрометрические методы имеют то преимущество, что они не требуют такой тщательной очистки образца, как при измерении физических констант, и часто позволяют находить не только суммарное содержание данного изотопа, но и соотношение концентраций молекул с разным изотопным замещением в образце, например,  $\text{C}_6\text{D}_6, \text{C}_6\text{D}_5, \dots, \text{C}_6\text{H}_6$  в дейтеробензоле [21].

**Рентгendifракционные методы** широко используются для исследования фазного состава, структуры и анализа несовершенств кристаллов. Они основаны на дифракции различных типов волн на периодической решетке кристалла.

Любое вещество в конденсированном состоянии имеет то или иное атомарное упорядочение. Это либо ближний порядок – в случае жидкостей и аморфных тел, или же дальний порядок – в случае поликристаллов и монокристаллов. В последнем случае атомы вещества образуют естественную трехмерную дифракционную решетку для рентгеновских лучей, так как размер атомов имеет порядок длины волны рентгеновского излучения (около 1 Å).

Существуют дифракционные условия, при которых, в случае упругого рассеяния рентгеновского излучения, возникают интерференционные максимумы при определенных углах рассеяния в зависимости от длины волны  $\lambda$  и расстояния между плоскостями трехмерной атомарной решетки  $d$ . Эти условия

носят имя Лауэ и Вульфа-Брегга. Наиболее просто выводится условие Вульфа-Брегга

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

На кристалл, под углом  $\theta$  к атомной плоскости, падает монохроматическое рентгеновское излучение, с длиной волны  $\lambda$  (рис. 3). Длина волны определяется материалом анода рентгеновской трубки и обычно соответствует характеристической  $K\alpha$  линии анода. Монохроматизация излучения осуществляется либо  $K\beta$ -фильтром, либо кристаллическим монохроматором [22-26].

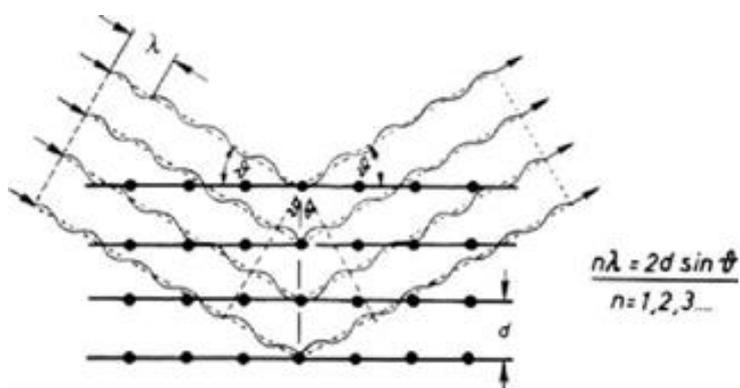


Рисунок 1.6 – Условие дифракции Вульфа-Брегга.

## **2 Экспериментальные исследования влияния магнитного поля на структуру кристаллов**

### **2.1 Особенности кристаллизации в магнитном поле**

Величина магнитного поля определяет частоты резонансов прецессии спинов атомов в растворе и на поверхности роста кристаллов. Температура раствора определяет частоту столкновения атомов и поверхности. Чем больше разность указанных частот, тем больше вероятность оседания выбранного изотопа на поверхность кристалла. Поэтому магнитное поле способно изменить скорость кристаллизации из водных растворов за счет формирования различия в скоростях спиновой динамики двух изотопов одного элемента. При использовании раствора соли с бинарной смесью изотопов формируется на границе роста кристалла градиенты концентраций двух изотопов. При установлении стационарного состояния относительные скорости кристаллизации двух изотопов будут меньше, чем до наступления стационарного состояния. Поэтому для увеличения изотопного эффекта необходимо попеременно формировать преимущественные условия кристаллизации для разных изотопов. При этом возможно формирование обогащённых по разным изотопам слоев кристаллов.

Так как не представляется возможным заранее оценить резонансные условия для кристаллизации одного из изотопов, логично проводить процесс кристаллизации периодически воздействуя на ячейку постоянным магнитным полем. В промежутках между периодами воздействия магнитным полем происходят периоды кристаллизации без воздействия магнитным полем с известным в литературе изотопным эффектом. При этом необходимо проводить значительный объем экспериментальных исследований. Одновременная кристаллизация в нескольких ячейках, на которые синхронно (одновременно) действуют магнитные поля разной напряженности, находящихся при общих

равных условиях (температура, давление, концентрация раствора) позволяет уменьшить необходимое количество экспериментальных исследований.

Очевидно, что кроме величины магнитного поля необходимо оптимизировать скорость кристаллизации и режим воздействия магнитным полем. Скорость кристаллизации зависит от степени пересыщения и температуры раствора, от давления газовой смеси над раствором, а также парциального давления паров растворителя.

## 2.2 Разработка экспериментальной установки

В вакуум-кристаллизаторах процесс кристаллизации осуществляют без подвода теплоты в результате адиабатического испарения части растворителя при понижении давления, т.е. за счет самоиспарения. При этом на растворение испарителя расходуется физическая теплота раствора, что приводит к его охлаждению до температуры кипения при остаточном давлении. В этом случае пересыщение достигается вследствие как повышения концентрации раствора, за счет испарения растворителя, так и за счет понижения температуры.

Для проведения исследований при выполнении выпускной квалификационной работы по исследованию изотопного эффекта процесса кристаллизации из водного раствора в магнитном поле, была разработана экспериментальная установка, схема которой представлена на рисунке 2.1.

Экспериментальная установка содержит следующие узлы:

1. Две колбы Бунзена с пересыщенным раствором NaCl;
2. Вакуумный насос, откачивающий воздух до 2 мм рт.ст.;
3. Вакууметр, регистрирующий давление создаваемое в колбах;
4. Натекатели, предназначенные для напуска сухого атмосферного воздуха в откачиваемые колбы;
5. Постоянный магнит с остаточной намагниченностью  $B = 1,0 - 1,2$  Тл;
6. Хронометр для регистрации времени проведения эксперимента и времени воздействия магнитным полем на раствор;

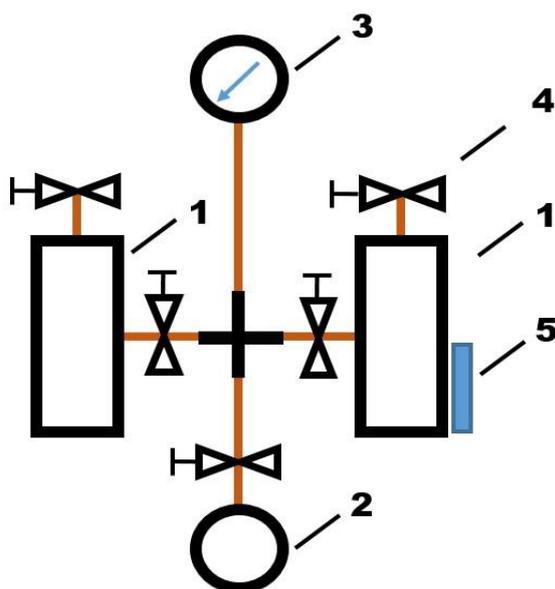


Рисунок 2.1 – Схема экспериментальной установки. 1 – колбы Бунзена с раствором; 2 – вакуумный насос; 3 – вакуумметр; 4 – натекатель; 5 – магнит

В замкнутой камере процессом, ограничивающим скорость удаления водяных паров с камеры кристаллизатора, является диффузия молекул воды по трубопроводу. Формирование газового потока над испаряющейся поверхностью позволяет значительно увеличивать скорость испарения растворителя. При выполнении экспериментальных исследований в откачиваемые колбы Бунзена напускали сухой атмосферный воздух. Для этого на входы колб устанавливались поплавковые ротаметры марки «РМ-06». Для выравнивания скоростей натечки, колбы поочередно откачивали до давления 20 мм рт.ст и регистрировали время заполнения до давления 500 мм рт.ст. Скорость натечки устанавливали на уровне 3,5 мл в сек., которую регулировали с помощью игольчатого натекателя установленного на ротаметре.

В условиях проведения экспериментов количество испарившегося растворителя составляло 8-10% общей массы раствора.

### **2.3 Методика (порядок) проведения эксперимента**

Из литературы известно, что магнитное поле влияет как на скорость кристаллизации из водных растворов, так и скорости растворения кристаллов в

воде. Формирование любых химических связей, а также рост слоев кристалла, возможен только при синглетном состоянии спинов. Кристалл NaCl имеет преобладающий ионный характер связи. При этом известно, что связи, удерживающие даже ионный кристалл, носит частично ковалентный характер.

Для исследований периодически создавали пересыщенный раствор NaCl и отстаивали его для удаления нерастворимых механических примесей. Для проведения исследований отбирали верхнюю часть отстоянного раствора в чистый сосуд.

При выращивании кристаллов выполняли следующую последовательность действий:

1. Предварительная подготовка пересыщенного раствора;
2. Заливка раствора в колбы Бунзена в одинаковом количестве;
3. Откачка воздуха из колб до 20 мм рт.ст. в течении 20-30 минут;
4. Снижение давления до 2 мм рт.ст. (наблюдение за процессом формирования кристаллов);
5. Отбор кристаллов с поверхности и со дна колбы;
6. Выдержка отобранных кристаллов в сушильном шкафу при температуре 70 °C;
7. Подготовка проб для рентгенодифракционного анализа

Получены образцы при проведении экспериментальных исследований №1 при следующих условиях. Кристаллы выращивали одновременно в двух колбах Бунзена из водного раствора NaCl, на одну из которых действовали полем магнита (размер – 3\*4 см) с остаточной намагниченностью 1,0-1,2 Тл. При испарении воды из колб кристаллы NaCl образовывались как на дне колбы, так и на поверхности пересыщенного раствора.

*Образец №1(4.04.2017):* выращивался в течении 10 мин, объем раствора 400 мл

*Образец №2(5.04.2017):* выращивался в течении 30 мин, объем раствора 400 мл, кристаллы отобраны с поверхности;

*Образец №3(17.04.2017):* кристаллы выращивались с 9.00 до 20.00, количество раствора 200 мл в каждой колбе:

3.1 - кристаллы отобраны со дна колбы без магнитного поля;

3.2.1 - колба с магнитным полем, кристаллы отобраны с поверхности раствора

3.2.2 - со дна колбы;

3.2.3 - кристаллы с поверхности раствора, выросшие вдоль стенки.

*Образец №4(18.04.2017):* выращивались с 13.00 до 12.00, количество раствора 200 мл:

4.1 - кристаллы отобраны со дна колбы без магнитного поля;

4.2 - кристаллы отобраны со дна колбы с магнитным полем.

*Образец № 5(20.04.2017):* кристаллы выращивали 200 мл, с 8.10 до 20.00, количество раствора 200 мл:

5.1 - кристаллы отобраны со дна колбы без магнитного поля;

5.2.1 - кристаллы выросшие на поверхности раствора вдоль стенки колбы, на которую действовало магнитное поле;

5.2.2 - кристаллы со дна колбы.

При проведении экспериментальных исследований № 2 использовали магниты размером 6\*12 см, магнитное поле которых на расстоянии 6 мм составляло 20-70 мТл. Условия, при которых были получены образцы в экспериментальных исследованиях № 2.

*Образец № 1(02.05.2017):* кристаллы выращивались с 15.20 по 17.00. Во время эксперимента меняли постоянное магнитное поле в пределах 25-70 мТл, кристаллы отобраны со дна колбы;

*Образец № 2(03.05.2017):* кристаллы выращивались в течении дня, на раствор воздействовали полем магнита 36 мТл. Проба отобрана с поверхности раствора;

*Образец № 3(05.05.2017):* кристаллы выращивались в течении дня. Воздействие магнитного поля (70 мТл) на насыщенный раствор, было начато через полтора часа после начала эксперимента.

*Образец № 4 и 5(11.05.2017):* для проведения эксперимента было использовано два раствора в одинаковом количестве, но подготовленных разными способами. Для четвертого образца использовался пересыщенный раствор NaCl, который отстаивался в сосуде без магнитного поля в течении 6 дней. Тот же раствор и время отстаивания в сосуде использовались для пятого образца, но отстаивание проходило под воздействием постоянного магнитного поля (30-35 мТл).

В процессе эксперимента на каждую колбу действовали постоянным полем магнита (54-56 мТл). Магниты были установлены через 1 ч 10 мин после начала опыта. Кристаллы для анализа были отобраны со дна колб.

*Образец № 6:* для анализа взята поваренная соль, из которой получали пересыщенный раствор используемый для получения предыдущих образцов при проведении экспериментальных исследований № 2.

При откачивании воздуха из колб Бунзена происходит образование пузырей в растворе, с их последующим всплытием в течении эксперимента. Пузыри образуются как в колбе со внешним постоянным магнитным полем, так и без магнитного поля. Однако, в постоянном магнитном поле размеры и количество пузырей растворенных газов, а также продолжительность их выхода из рассола в 1,5 раз больше. При этом площадь сцепления пузыря с дном колбы в магнитном поле составляет 0,8 от диаметра пузыря, без поля 0,6. Это может быть обусловлено тем, что в постоянном магнитном поле изменяется коэффициент поверхностного натяжения насыщенного раствора NaCl.

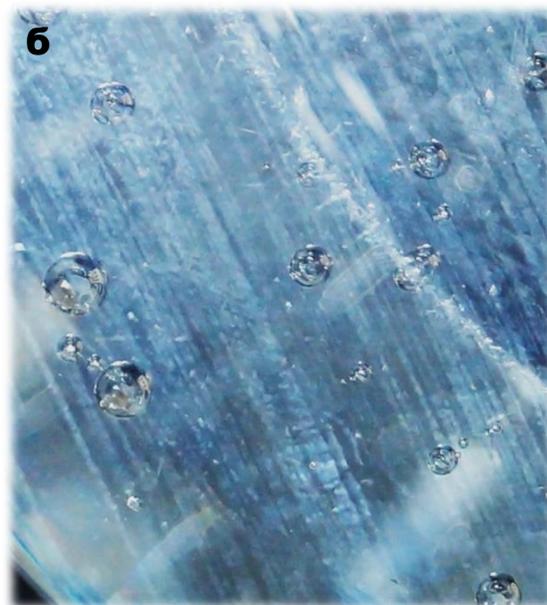
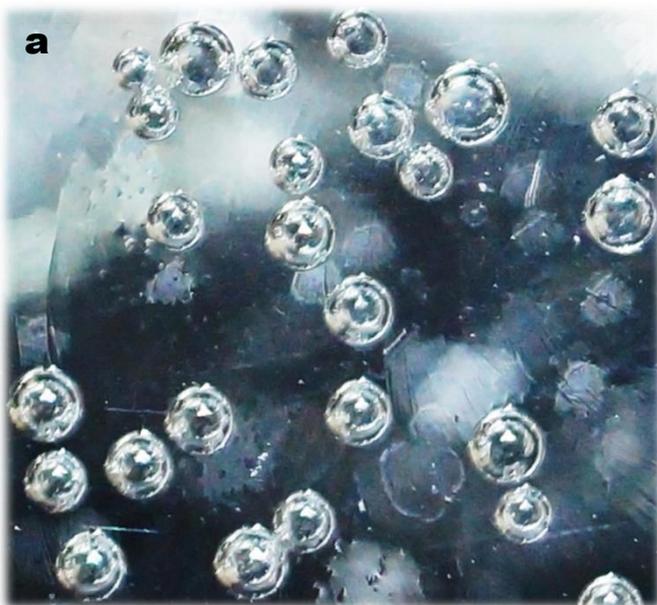


Рисунок 2.2 - образующиеся пузыри на дне колб: а - колба с магнитным полем, б - без магнитного поля

## 2.4 Результаты рентгенодифракционного анализа

Рентгенодифракционный анализ образцов, полученных во время экспериментов № 1, проводился с использованием рентгеновского дифрактометра XRD-7000S с вертикальным высокоточным гониометром с детектором на  $\text{Cu}$  излучении. Измерения дифрактограмм осуществлялись в диапазоне  $2\theta = (20^{\circ}-90^{\circ})$  при скорости сканирования 10 град/с, с шагом сканирования 0,0143 град.

Получаемые спектры рентгеновской дифракции приведены ниже на рисунках. По горизонтальной шкале приведены углы дифракции. По вертикальной шкале – интенсивность дифрагированного потока в логарифмическом масштабе.

На рисунке 2.3 представлен общий вид рентгенограммы порошков  $\text{NaCl}$  полученных при различных параметрах. Красным цветом обозначены рефлекс фаз  $\text{NaCl}$  взятых из базы PCPDF. Ниже приведены дифракционные пики с высоким разрешением по углу для всех отобранных проб.

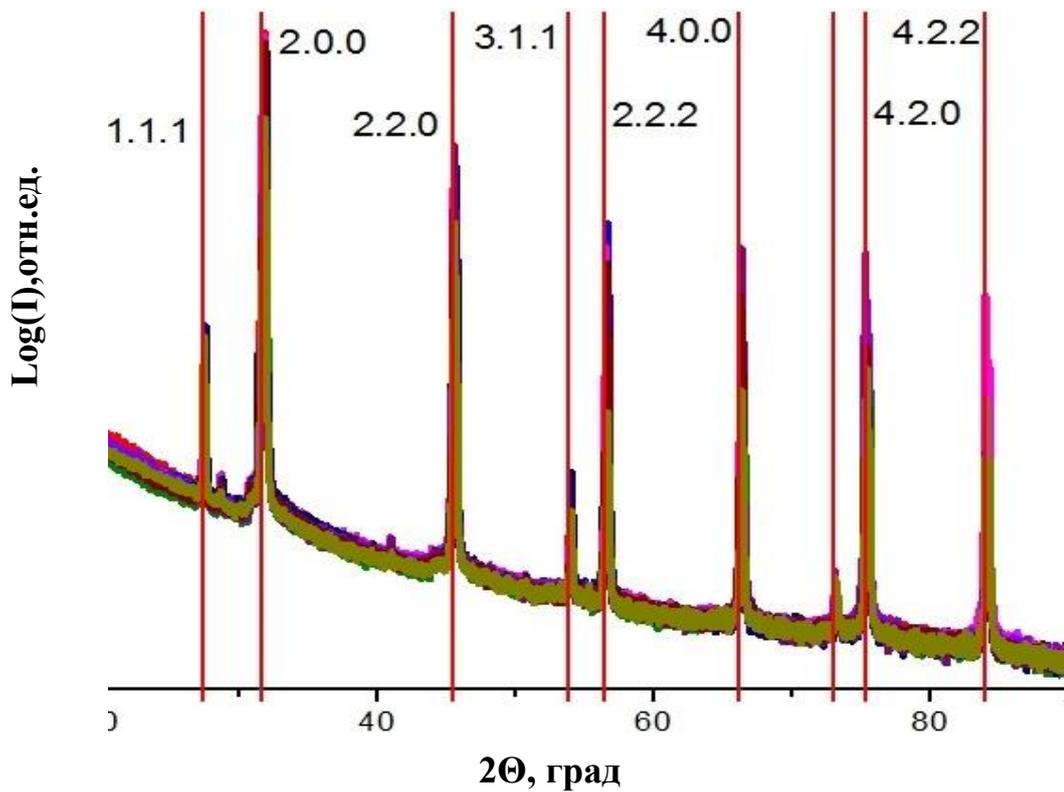


Рисунок 2.3 - спектр дифракции на кристаллах NaCl

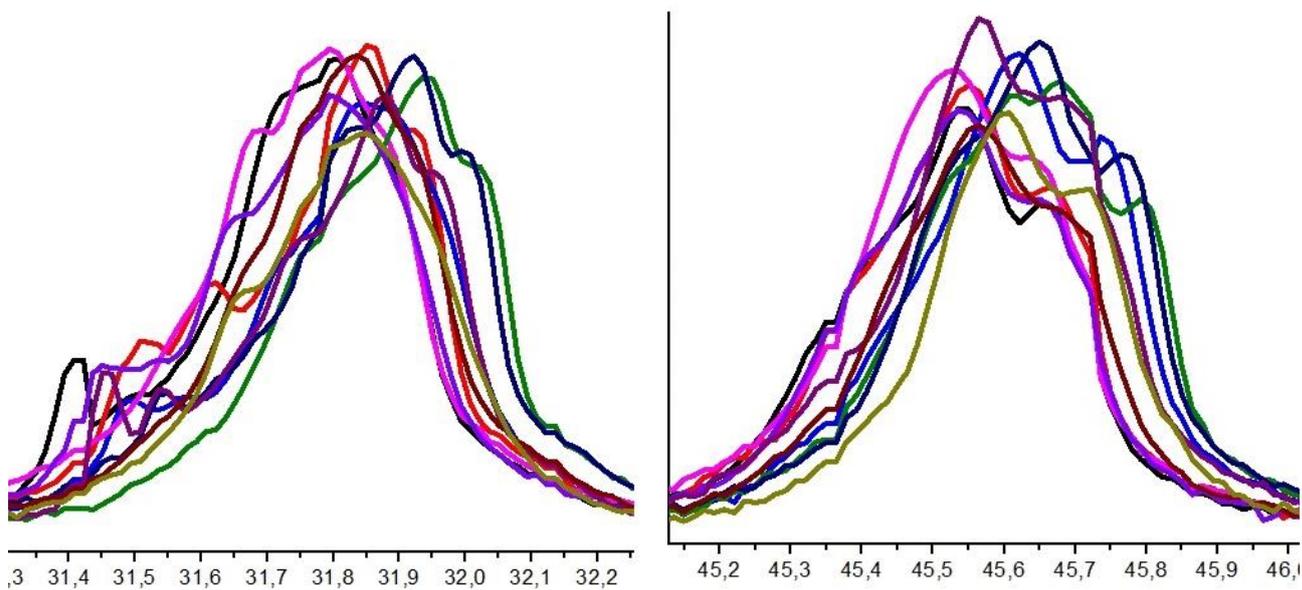


Рисунок 2.4 – первый и второй дифракционные пики с высоким разрешением по углу

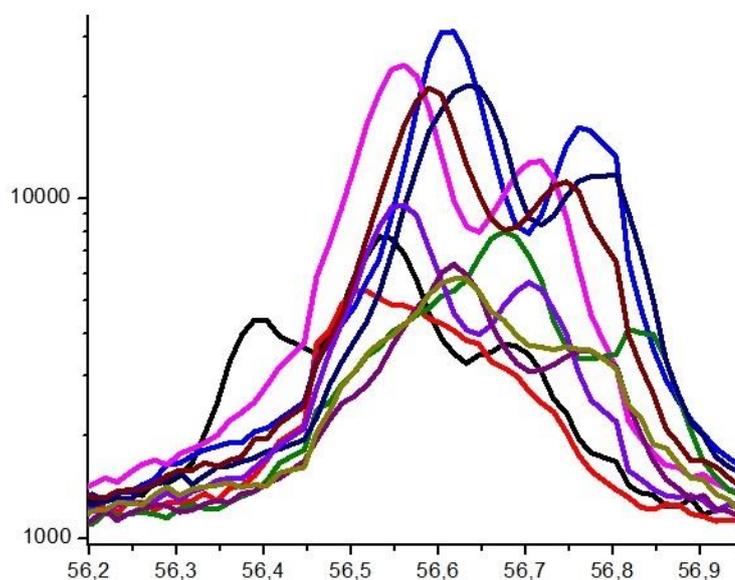


Рисунок 2.5 – третий дифракционный пик с высоким разрешением по углу

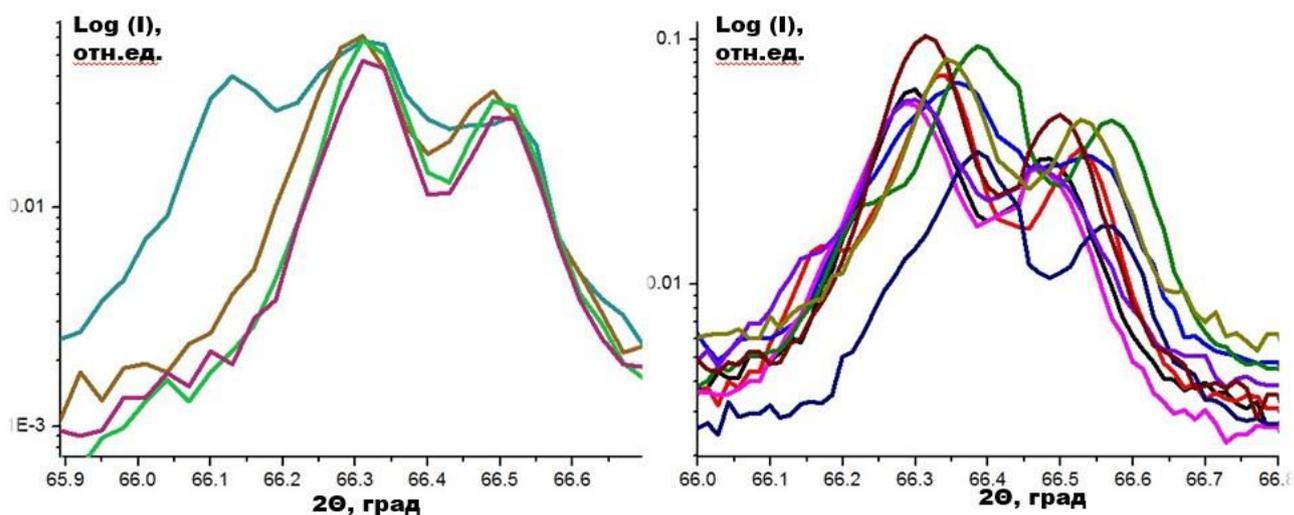


Рисунок 2.6 - четвертые дифракционные пики с высоким разрешением по углу. Слева данные соответствуют кристаллам полученным при атмосферном давлении (ранее), справа – результаты получены в вакууме

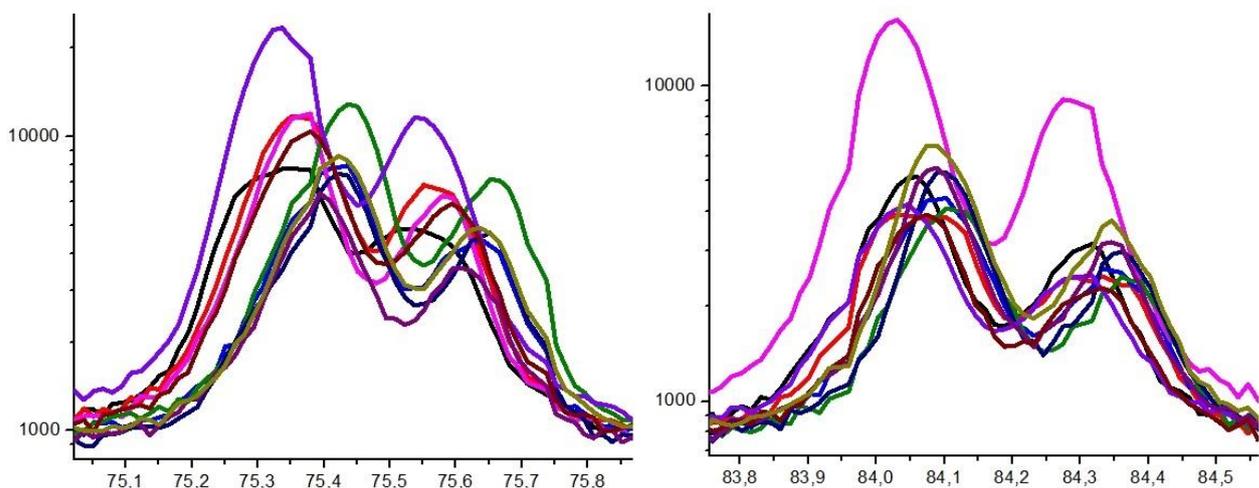


Рисунок 2.7 – пятый и шестой дифракционные пики с высоким разрешением по углу

Рентгенодифракционный анализ образцов, полученный во время экспериментальных исследований № 2, проводился с использованием рентгеновского дифрактометра ARL X'TRA (Швейцария) с полупроводниковым Si (Li) Пельтье детектором на Cu излучении. Измерения дифрактограмм осуществлялись в диапазоне  $2\theta = (20^{\circ}-90^{\circ})$  при скорости сканирования 0.02 град/с. Шаг сканирования 0,02 град. Интенсивность дифрагированного потока представлена в логарифмическом масштабе.

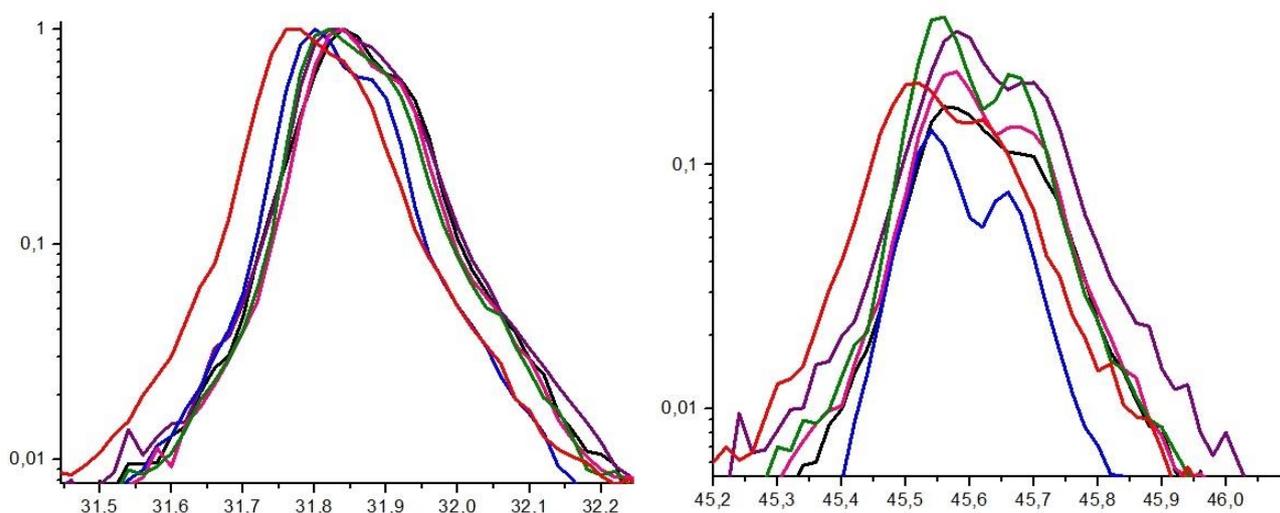


Рисунок 2.8 – первый и второй дифракционные пики

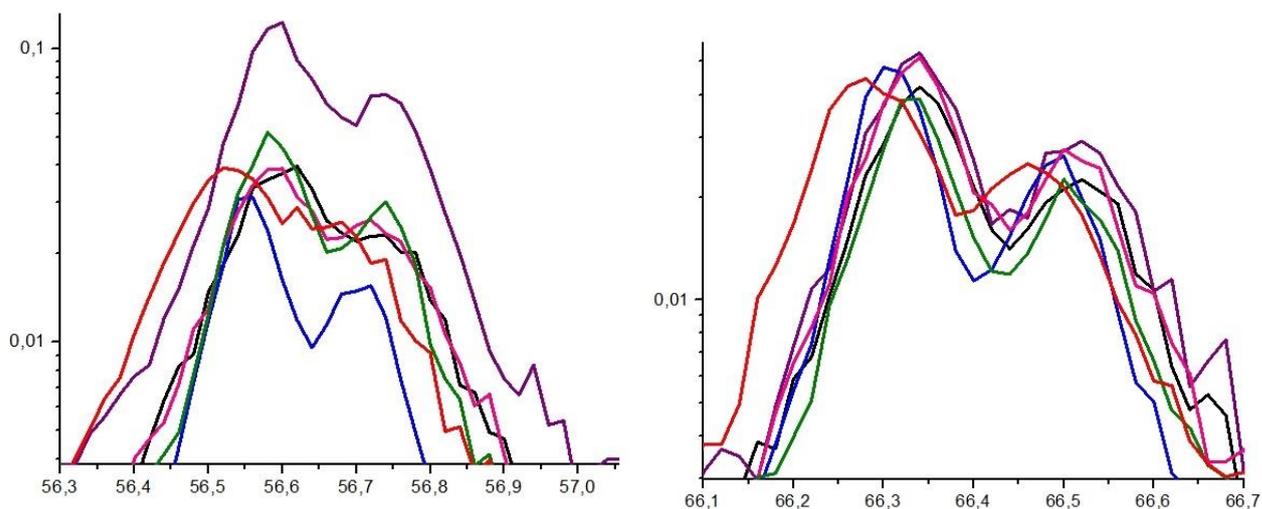


Рисунок 2.9 – третий и четвертый дифракционные пики

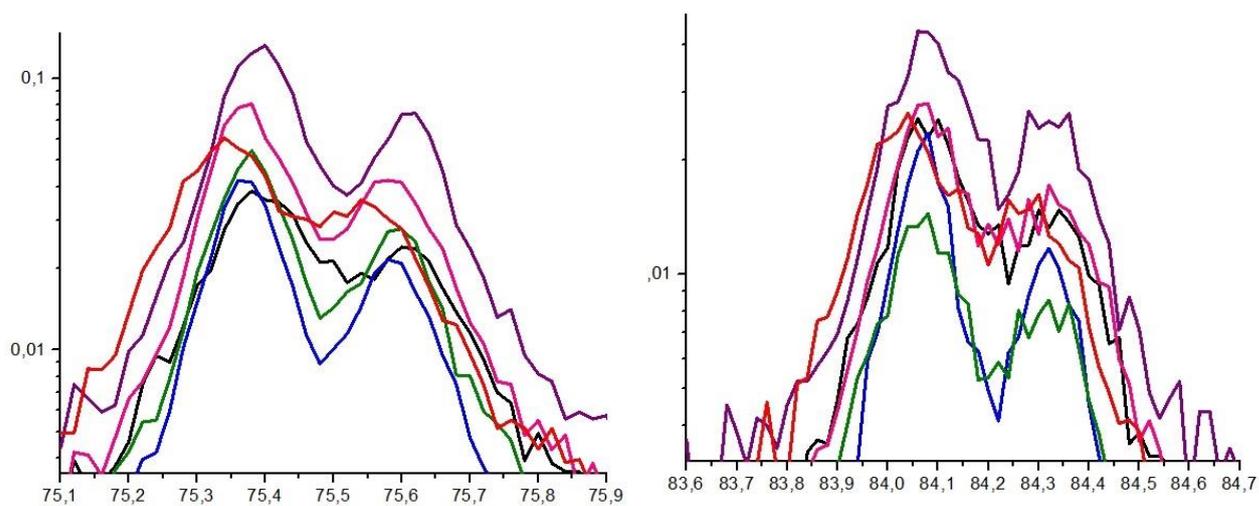


Рисунок 2.10 – пятый и шестой дифракционные пики

Из дифракционных спектров видно, что кристаллы NaCl характеризуются несколькими пиками на разных углах дифракции. Эти пики возникают на разных отражающих кристаллографических плоскостях. Относительные интенсивности разных дифракционных пиков отличаются.

Из полученных графиков видно, что угловое положение дифракционных пиков для разных образцов не совпадает. Это можно объяснить разным изотопным составом формирующихся кристаллов. Наличие третьего пика на представленных графиках (левее) обусловлено присутствием в кристалле областей, которые имеют высокое содержание <sup>37</sup> хлора. (обогащенные по изотопам области).

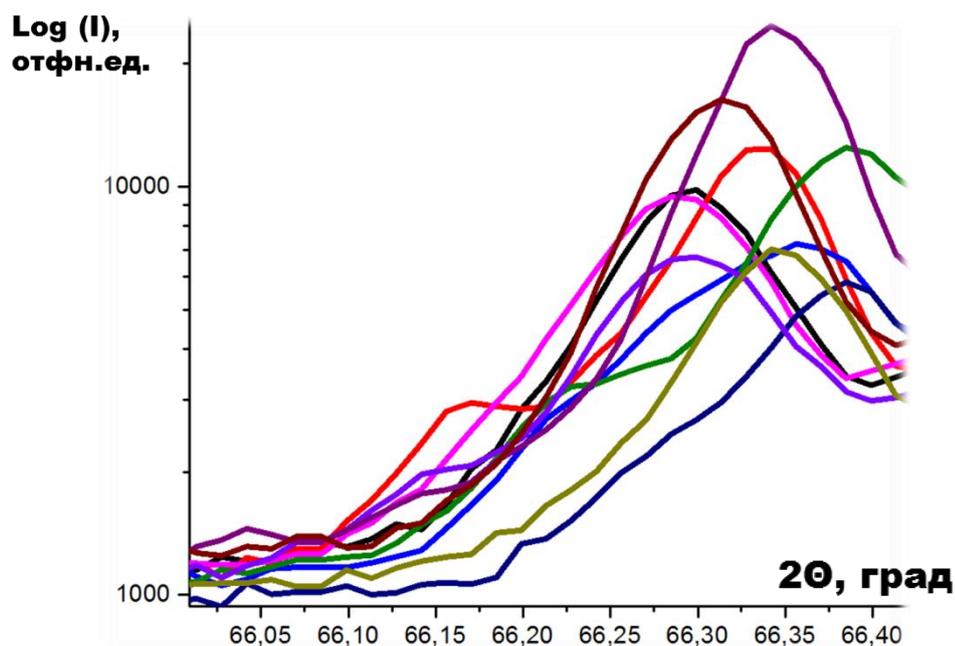


Рисунок 2.11 - 4 дифракционный пик с высоким разрешением по углу

Известно, что получение монохроматического рентгеновского излучения составляет трудно решаемую задачу. Попытки уменьшения ширины спектра рентгеновского излучения неизбежно приводят к уменьшению интенсивности потока. Поэтому зачастую рентгеновские источники даже в приборах мировых производителей содержат несколько линий, например,  $K_{\alpha 1}$  и  $K_{\alpha 2}$ . По всей видимости, раздвоение пиков на больших углах дифракции обусловлены наличием двух длин волн в области 1,54 Å. Эти линии на малых углах дифракции не разрешаются. При этом компоненты, соответствующие двум длинам волн имеют отношение интенсивностей, отличное от других пиков. Анализ положений пиков, показывает наличие колебаний углового положения пиков от образца к образцу. Это можно объяснить лишь вкладом потоков, рассеянных на микрокристаллах с разным изотопным составом.

Поверхность кристалла не заряжена. Сорбция одного из ионов на поверхности растущего кристалла облегчает дальнейший процесс кристаллизации. Такой путь не может быть селективным по изотопам, так как в формировании кристалла участвует спаренная электронная орбиталь ионов.

В растворе любой соли кроме диссоциированных ионов, присутствуют не диссоциированные молекулы. Поэтому логично предположить, что изотопный

эффект при формировании кристалла обусловлен не отдельными ионами, а нейтральными молекулами соли. При этом время между первым контактом молекулы с поверхностью кристалла и временем формирования ковалентных связей в магнитном поле зависит от его величины и различается для разных изотопных модификаций. Время выхода разных изотопных модификаций молекул из клетки на поверхности кристалла не зависит от величины магнитного поля. Этот процесс препятствует росту кристалла. Поэтому в магнитном поле должна наблюдаться разная скорость роста кристаллов разного изотопного состава.

## **3 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение**

### **3.1 Техничко-экономическое обоснование ВКР**

Данная работа направлена на исследование изотопного эффекта в процессе кристаллизации из водного раствора в магнитном поле. Производятся экспериментальные исследования по изменению изотопного эффекта при формировании кристаллов NaCl из водного раствора во внешнем постоянном магнитном поле. Анализ результатов, оценка оптимальных условий для формирования кристаллов NaCl с разным распределением изотопов.

Научно-исследовательская работа (НИР) – это комплекс разнородных процессов труда, направленных на решение определённых научных и технических проблем. Для того, чтобы затраты на НИР давали полную отдачу, необходимо при планировании, организации и проведении НИР, обеспечить её максимальную эффективность в отношении качества и времени выполнения работ. Целью планирования НИР является организация научного исследования, определение требуемого количества исполнителей по теме и сметы затрат по выполнению работ.

Разные исследования, в зависимости от задач, поставленных перед исполнителями, классифицируются следующим образом:

- а) Теоретические или фундаментальные.
- б) Поисковые.
- в) Прикладного характера

Теоретические – это такие работы, которые проводятся в малоисследованных областях науки. Итогом их является установление общих закономерностей протекания тех или иных процессов.

Поисковые – это работы, проводимые с целью выявления каких-либо законов и закономерностей.

Целью прикладной НИР является техническое и экономическое

обоснование нового технологического процесса.

## **3.2 Планирование НИР**

В настоящее время наука в значительной степени определяет темпы технического прогресса и роста народного благосостояния. Только рациональное использование выделяемых для науки средств, концентрация их на приоритетных направлениях, совершенствование координации деятельности научно-исследовательских учреждений, быстрое внедрение научных и исследовательских разработок и проектов может ускорить научно-технический прогресс (НТП). Это обуславливает необходимость планирования и организации научно-исследовательских работ (НИР).

Однако важно не только разработать ту или иную научную тему, но и провести её анализ с точки зрения экономических требований, т.е. определить затраты на разработку, продолжительность работ, рассмотреть вопрос об экономической эффективности НИР.

Экономическая часть дипломной работы включает в себя рассмотрение следующих вопросов:

- 1) Планирование НИР.
- 2) Смета затрат.

### **3.2.1 Планирование этапов и работ по выполнению НИР**

Работа по теме включает в себя следующие этапы:

- 1) Обзор литературы по теме.
- 2) Сбор и обработка расчетных данных.
- 3) Подготовительный этап
- 4) Проведение экспериментов.
- 5) Анализ результатов экспериментов.
- 5) Оформление отчёта.

Для выполнения научных исследований сформирована рабочая группа, в состав которой входят научный руководитель и дипломник.

Для оптимизации работ удобно использовать классический метод линейного планирования и управления. Результатом такого планирования является составление линейного графика выполнения всех работ. Расчет параметров линейного графика требует определения продолжительности работ. При отсутствии нормативов времени на проведение отдельных видов работ используются вероятностные оценки. Порядок составления этапов и работ приведен в таблице 3.2.1.1.

Таблица 3.2.1.1 – Перечень категорий, этапов, работ и распределение исполнителей

Категория	Этап	Содержание работ	Должность исполнителя
Разработка ТЗ на ВКР	1	Составление и утверждение технического задания	руководитель
Выбор направления исследования	2	Изучение проблемы и подбор литературы о влиянии магнитного поля на рост кристаллов из водных растворов	дипломник
	3	Изучение литературы и выбор методов решения проблемы	дипломник
	4	Календарное планирование работ по теме	дипломник
Теоретические и экспериментальные исследования	5	Разработка экспериментальной установки и методики для исследования изменения изотопного эффекта при кристаллизации в из водного раствора магнитном поле	руководитель, дипломник
	6	Экспериментальные исследования влияния магнитного поля на структуру кристаллов	руководитель, дипломник
	7	Анализ и обработка результатов рентгенодифракционного анализа	дипломник
	8	Оценка оптимальных условий для формирования кристаллов с разным изотопным составом в магнитном поле	руководитель, дипломник
Обобщение и оценка результатов	9	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение, социальная ответственность	дипломник
	10	Подготовка к защите диссертации	дипломник

### 3.2.2 Определение трудоемкости выполнения НИР

Трудоемкость выполнения НИР оценивается экспертным путем в человеко-днях и носит вероятностный характер, т.к. зависит от множества трудно учитываемых факторов. Для определения, ожидаемого (среднего) значения трудоемкости работ  $t_{ож}$  используется следующая формула:

$$t_{ожi} = \frac{3t_{мини} + 2t_{макси}}{5}, \quad (3.2.2.1)$$

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

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

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

Исходя из ожидаемой трудоемкости работ, определяется продолжительность каждой работы в рабочих днях  $T_p$ , учитывающая параллельность выполнения работ несколькими исполнителями. Такое вычисление необходимо для обоснованного расчета заработной платы, так как удельный вес зарплаты в общей сметной стоимости научных исследований составляет около 65 %.

$$T_{pi} = \frac{t_{ожi}}{Ч_i}, \quad (3.2.2.2)$$

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[28].

### 3.2.3 Разработка графика проведения научного исследования

Показатель технической готовности темы характеризует отношение

продолжительности работ, выполненных на момент исчисления этого показателя, к общей запланированной продолжительности работ, при этом следует учесть, что дипломник выступает в качестве основного исполнителя.

Для удобства построения графика, длительность каждого из этапов работ из рабочих дней следует перевести в календарные дни. Для этого необходимо воспользоваться следующей формулой:

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k_{\text{кал}}, \quad (3.2.3.1)$$

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

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

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

Коэффициент календарности определяется по следующей формуле:

$$k_{\text{кал}} = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}}}, \quad (3.2.3.2)$$

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

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

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

Рассчитанные значения в календарных днях по каждой работе  $T_{ki}$  округлены до целого числа.

$$k_{\text{кал}} = \frac{365}{365 - 52 - 14} \approx 1.22.$$

Все рассчитанные значения сведены в таблицу 3.2.3.1.

Календарный план-график в виде диаграммы Ганта – горизонтальный ленточный график, на котором работы по теме представляются протяженными во времени отрезками, характеризующимися датами начала и окончания выполнения данных работ.

Таблица 3.2.3.1 – Временные показатели проведения НИР

Этап	$t_{\min}$	$t_{\max}$	$t_{\text{ож}}$	Исполнители	$T_p$ , раб.дн.	$T_k$ , кал.дн
1	2	3	2,4	руководитель	2,4	4
2	6	9	7,2	дипломник	7,2	11
3	7	10	8,2	дипломник	8,2	12
4	3	5	3,8	дипломник	3,8	6
5	12	15	13,2	руководитель, дипломник	6,6	10
6	14	18	15,6	руководитель, дипломник	7,8	12
7	6	9	7,2	дипломник	7,2	11
8	7	10	8,2	руководитель, дипломник	4,1	6
9	11	14	12,2	дипломник	12,2	18
10	8	11	9,2	дипломник	9,2	14
Итого			87,2		68,7	104

Календарный план-график в виде диаграммы Ганта – горизонтальный ленточный график, на котором работы по теме представляются протяженными во времени отрезками, характеризующимися датами начала и окончания выполнения данных работ.

График строится на основе данных из таблицы 3.2.3.1 с разбивкой по месяцам и декадам (10 дней) за период времени дипломирования. Работы на графике выделены различным цветом в зависимости от исполнителей, ответственных за ту или иную работу. Календарный план-график в виде диаграммы Ганта приведен в таблице 3.2.3.2.

Таблица 3.2.3.2 – Календарный план-график (диаграмма Ганта) проведения ВКР

Вид работ	Исполнители	Тк, кал. дн.	Продолжительность выполнения работ, неделя											
			март			апрель			май			июнь		
			1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3
1. Составление и утверждение ТЗ	н.р.	4		■										
2. Изучение проблемы и подбор литературы о влиянии магнитного поля на рост кристаллов из водных растворов	д.	11		■	■									
3. Изучение литературы, выбор методов решения проблем	д.	12			■	■	■							
4. Календарное планирование работ по теме	д.	6					■							
5. Разработка экспериментальной установки и методики для исследования изменения изотопного эффекта при кристаллизации в из водного раствора магнитном поле	н.р.+д.	10						■	■					
6. Экспериментальные исследования влияния магнитного поля на структуру кристаллов	н.р.+д.	12						■	■					
7. Анализ и обработка результатов рентгенодифракционного анализа	д.	11								■				
8. Оценка оптимальных условий для формирования кристаллов с разным изотопным составом в магнитном поле	н.р.+д.	6									■	■		
9. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение, социальная ответственность	д.	18										■	■	
10. Подготовка к защите диссертации	д.	14												■
			<div style="display: flex; justify-content: space-around; align-items: center;"> <div style="width: 15px; height: 15px; background-color: black; border: 1px solid black;"></div> - научный руководитель                 <div style="width: 15px; height: 15px; background-color: blue; border: 1px solid black;"></div> - дипломник             </div>											

### 3.3 Бюджет научно-технического исследования

При планировании бюджета НТИ должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов расходов, связанных с его выполнением. В процессе формирования бюджета НТИ используется следующая группировка затрат по статьям:

- материальные затраты НТИ;
- затраты на использование специального оборудования;
- основная заработная плата исполнителей темы;
- дополнительная заработная плата исполнителей темы;
- отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления);
- контрагентные расходы;
- накладные расходы.

#### 3.3.1 Расчет материальных затрат НТИ

Данная статья включает стоимость всех анализов, проводимых на рентгеновском дифрактометре XRD-7000sv лаборатории НИ ТПУ.

Расчет материальных затрат осуществляется по следующей формуле:

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

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;

$C_i$  – цена приобретения единицы  $i$ -го вида потребляемых материальных ресурсов;

$k_T$  – коэффициент, учитывающий транспортно-заготовительные расходы.

$$Z_m = (1 + 0,12) \cdot 1700 \cdot 18 = 34,272 \text{ руб.}$$

### 3.3.2 Расчет затрат на специальное оборудование для научных работ

Данная статья включает в себя все затраты, связанные с использованием специального оборудования (вакуумный механический насос), необходимого для проведения работ. В данной работе использовалось уже имеющееся оборудование. В таком случае считаем затраты на электроэнергию при использовании специального оборудования.

Рассчитаем расход электроэнергии вакуумного насоса мощностью 8 кВт

$$P_{э} = 8 \text{ кВт} \cdot 48 \text{ дн.} \cdot 10 \text{ ч} \cdot 5,8 \text{ руб. кВт} \cdot \text{ч} = 22727 \text{ руб.}$$

### 3.3.3 Основная заработная плата исполнителей темы

Данная статья включает в себя затраты на оплату труда работников, непосредственно участвующих в выполнении НИР (включая премии, доплаты), и дополнительную заработную плату:

$$З_{зп} = З_{осн} + З_{доп},$$

где  $З_{осн}$  – основная заработная плата, руб.;

$З_{доп}$  – дополнительная заработная плата, руб.

Основную заработную плату можно рассчитать по следующей формуле:

$$З_{осн} = З_{дн} \cdot T_{раб},$$

где  $З_{дн}$  – среднедневная заработная плата работника, руб.;

$T_{раб}$  – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб.дн.

Среднедневная заработная плата работника рассчитывается по формуле:

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

где  $З_{м}$  – месячный должностной оклад работника, руб.;

$M$  – количество месяцев работы без отпуска в течение года;

$F_d$  – расчетный годовой фонд рабочего времени персонала (в рабочих днях),  
представлен в таблице 3.3.3.1.

Таблица 3.3.3.1 – Расчетный годовой фонд рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Дипломник
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней		
- выходные дни	52	52
- праздничные дни	14	14
Потери рабочего времени:		
- отпуск	56	48
- невыходы по болезни	–	–
Действительный годовой фонд рабочего времени	243	251

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_m = Z_{mc} \cdot k_p = 36800 \cdot 1,3 = 47840 \text{ руб.},$$

где  $Z_{mc}$  – заработная плата по квалификационной группе, руб. (для профессора  $Z_{mc}$  составляет 36800руб);

$k_p$  – районный коэффициент, равный 1,3.

На примере расчета основной заработной платы руководителя, проводим расчеты для дипломника, затем сводим все результаты в таблицу 3.3.3.2.

Таблица 3.3.3.2 – Результаты расчета основной заработной платы

Исполнители	$Z_{тс}$ , Руб	$K_p$	$Z_m$ , Руб	$Z_{дн}$ , руб.	Граб раб.дн.	$Z_{осн}$ , руб.
Руководитель	36800	1,3	47840	1514	8	12112
Дипломник	1750	1,3	2275	109	60,7	6616
Итого $Z_{осн}$ , руб.						18728

### 3.3.4 Дополнительная заработная плата исполнителей темы

Дополнительная заработная плата включает оплату за непроработанное время (очередной и учебный отпуск, выполнение государственных обязанностей, выплата вознаграждений за выслугу лет и т.п.) и рассчитывается исходя из 10-15% от основной заработной платы, работников, непосредственно участвующих в выполнение темы:

$$Z_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} \times Z_{\text{осн}} ,$$

где  $Z_{\text{доп}}$  – дополнительная заработная плата, руб.;

$k_{\text{доп}}$  – коэффициент дополнительной зарплаты ( $k_{\text{доп}}=0,13$ );

$Z_{\text{осн}}$  – основная заработная плата, руб.

$$Z_{\text{доп}} = 0,13 \times 12112 = 1574,$$

### 3.3.5 Отчисления во внебюджетные фонды

В данной статье расходов отражаются обязательные отчисления по установленным нормам от затрат на оплату труда работников.

Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется исходя из следующей формулы:

$$Z_{\text{внеб}} = k_{\text{внеб}} \cdot (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}) ,$$

где  $k_{\text{внеб}}$  – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды 27,1 %.

$$Z_{\text{внеб}} = 0,271 \cdot (12112 + 1574) = 3709 \text{руб.}$$

### 3.3.6 Контрагентские расходы

Контрагентские расходы включают затраты, связанные с выполнением каких-либо работ по теме сторонними организациями (контрагентами, субподрядчиками).

Расчет величины этой группы расходов включает в себя затраты на проведение анализов в лаборатории СФТИ на масс – спектрометре.

$$Z_{\text{м}} = (1 + 0,12) \cdot 2000 \cdot 2 = 4480 \text{руб.}$$

### 3.3.7 Накладные расходы

Накладные расходы учитывают прочие затраты организации, не попавшие в предыдущие статьи расходов: печать и ксерокопирование материалов исследования, оплата услуг связи, электроэнергии, и т.д. Их величина определяется по следующей формуле:

$$Z_{\text{накл}} = (\text{сумма статей } 1 \div 6) \cdot k_{\text{нр}},$$

где  $k_{\text{нр}}$  – коэффициент, учитывающий накладные расходы. Величину коэффициента накладных расходов можно взять в размере 16%.

$$Z_{\text{накл}} = 85490 \cdot 0,16 = 13678 \text{ руб.}$$

### 3.3.8 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

Рассчитанная величина затрат научно-исследовательской работы (темы) является основой для формирования бюджета затрат проекта, который при формировании договора с заказчиком защищается научной организацией в качестве нижнего предела затрат на разработку научно-технической продукции.

Определение бюджета затрат на научно-исследовательский проект по каждому варианту исполнения приведен в таблице 3.3.8.1..

Таблица 3.3.8.1 –Расчет бюджета затрат НИТ

Наименование статьи	Сумма, руб.	Примечание
Материальные затраты НИТ	34272	Пункт 3.3.1
Затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	22727	Пункт 3.3.2
Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	18728	Пункт 3.3.3

Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	1574	Пункт 3.3.4
Затраты на отчисления во внебюджетные фонды	3709	Пункт 3.3.5
Контрагентские расходы	4480	Пункт 3.3.6
Накладные расходы	13678	Пункт 3.3.7
Бюджет затрат НИИ	99168	Сумма ст. 1-7

### 3.4 Ресурсоэффективность

Все научно-исследовательские работы должны проводиться с полным технико-экономическим обоснованием ожидаемой и фактической эффективности результатов разработки. В связи с многообразием форм воздействия результатов НИР на все стороны общественного развития, виды эффекта от выполняемых работ можно классифицировать грубо по двум признакам; по сфере проявления эффекта и характеру его воздействия на общественное развитие. По характеру воздействия на общественное развитие выделяется три основных эффекта; экономический, оборонный, социальный.

В связи с тем, что под эффектом НИР, в общем подразумевают полезный результат, отдача её выполнения и последующего за тем внедрения, существует система количественных и качественных характеристик оценки разных видов эффектов.

Социальный эффект можно рассматривать как совокупность его основных разновидностей.

- социально-политический,
- социально научный,
- социально-культурный.

Социально-научный эффект в росте числа открытий, изобретений, увеличение суммарного объема научно-технической информации, полученной в

результате выполнения НИР. За последние годы появилось предложение не только определять по количественной характеристике социального эффекта, но и по системе количественных показателей его оценки.

Элементом количественной оценки социально-научного эффекта следует определение научно-технического эффекта НИР по методике. Сущность этой методики состоит в том, что на основе оценок признаков работы определяется коэффициент социально-научного эффекта НИР:

$$H_T = \sum_{i=1}^4 r_i k_i$$

где  $r_i$  - весовой коэффициент  $i$ -го признака научно – технического эффекта;

$k_i$  - количественная оценка  $i$ -го признака.

Количественная оценка уровня новизны определяется на основе значений баллов. Теоретический уровень полученных результатов НИР определяется на основе значений баллов, приведенных в таблице 3.4.1.

Таблица 3.4.1 - Весовые коэффициенты признаков научно-технического эффекта.

Признаки научно-технического эффекта	Примерные значения $r_i$
Уровень новизны	0,6
Теоретический уровень	0,4
Возможность реализации	0,2
Масштабы реализации	0,2

Оценим по данной методике научно-технический эффект данной дипломной работы и сравним её по коэффициентам научно-технического эффекта с максимально и минимально возможным.

Таблица 3.4.2 – Баллы уровней новизны.

Уровень новизны	Характеристика уровня новизны	Баллы
Принципиальное	По новому или впервые объяснены известные факты, закономерности. Разработано существенное усовершенствование. Введены новые понятия, дополнения, уточнения ранее достигнутых результатов.	8-10
Новое	Разработано усовершенствование. Впервые найдена связь между известными фактами, объектами. Разработаны более простые способы для достижения прежних результатов.	5-7
Относительно новое	Результаты исследований систематизируются и обобщаются имеющиеся сведения. Определяют пути дальнейшего исследования. Проведена рациональная частичная модификация.	2-4
Традиционные	Работа выполнена по традиционной методике. Результат исследований носит информационный характер. Подтверждены или поставлены под сомнения известные представления, нуждающиеся в проверке.	1
Не обладающие новизной	Получен результат, который был ранее известен.	0

Таблица 3.4.3 – Баллы значимости теоретических уровней.

№	Теоретический уровень полученных результатов	Баллы
1	Установление закона, разработка новой теории.	9-10
2	Глубокая разработка проблемы: многоэлементный анализ связей, взаимосвязей между фактами.	7-8
3	Разработка способов (алгоритм, программа мероприятий).	3-6
4	Элементарный анализ между факторами с наличием гипотезы, классификации, объясняющей версии.	0.6-2
5	Описание отдельных элементарных фактов, изложение опыта, наблюдение результатов измерений.	0-0.5

Таблица 3.4.4 – Вероятность реализации научных результатов (теоретических работ) по времени и масштабу реализации.

№	Время реализации	Баллы
1	В течение первых лет	5-10
2	От 5 до 10 лет	3-4
3	Более 10 лет	0-2

Таблица 3.4.5 – Масштабы реализации.

№	Масштабы реализации	Баллы
1	Одно или несколько предприятий	0-2
2	Отрасль	3-4
3	Народное хозяйство	5-10

Настоящая дипломная работа оценивается следующим образом:

- балл уровня новизны – 4
- балл значимости теоретического уровня – 5
- балл по времени реализации – 5
- балл по масштабам реализации – 3

Коэффициент научно-технического эффекта дипломной работы составляет:

$$H_T = 0.6 * 4 + 0.4 * 5 + 0.2 * 5 + 0.2 * 3 = 7$$

Максимальный возможный коэффициент:

$$H_{T_{\max}} = 14$$

Минимально возможный коэффициент:

$$H_{T_{\min}} = 1$$

Работа была направлена на экспериментальное определение изменения изотопного эффекта в магнитном поле при кристаллизации NaCl из водных растворов. В ходе данной работы были изучены и определены наиболее эффективные способы выращивания кристаллов из водных растворов во внешнем периодическом магнитном поле, которые способствуют формированию микрокристаллов NaCl обогащенных по разным изотопам, а это, в свою очередь, позволит уменьшить себестоимость материалов с заданным изотопным составом. Сам процесс формирования достаточно прост и доступен, что делает его наименее затратным с экономической точки зрения.

Из проделанных расчетов следует, что основные затраты на научно-техническое исследование приходятся на оплату труда исполнителей темы. Это связано с тем, что при выполнении данной работы ввиду ее особенностей отсутствовали, либо были минимизированы прочие затраты.

В ходе выполнения данной дипломной работы был составлен календарный план по НИР, рассчитана смета затрат на НИР, общая сумма затрат на НИР равна 99168 руб. Произвели оценку научно-технического эффекта НИР, которая получилась равной 7. При сравнении с максимальным коэффициентом  $H_{T_{\max}} = 14$ , пришли к выводу, что работа выполнена на среднем уровне.

## Список публикаций

1. Myshkin V. F. , Bepala E. V. , Khan V. A. , Makarevich S. V. Laws of the oxidation of carbon isotopes in plasma processes under magnetic field // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. - 2016 - Vol. 135, Article number 012029. - p. 1-5
2. Мышкин В. Ф. , Хан В. А. , Беспала Е. В. , Ленский В. Н. , Задорожный В. Н. , Макаревич С. В. , Семченко И. С. , Цхе А. А. Вывод уравнений кинетики плазмохимических процессов с участием изотопов в магнитном поле // Политематический сетевой электронный научный журнал Кубанского государственного аграрного университета. - 2016 - №. 123. - С. 1863-1876
3. Новоселов И. Ю. , Макаревич С. В. , Давыдов Е. Ю. Оценка состояния радиоактивных микропримесей в облученном графите уранграфитовых ядерных реакторов // Радиоактивность и радиоактивные элементы в среде обитания человека: материалы V Международной конференции, Томск, 13-16 Сентября 2016. - Томск: STT, 2016 - С. 465-468
4. Макаревич С. В. , Ушаков И. А. , Давыдов Е. Ю. Десублимация радионуклидов с поверхности графита в неравновесной гелевой плазме // Физико-технические проблемы в науке, промышленности и медицине: сборник научных трудов VIII Международной научно-практической конференции, Томск, 1-3 Июня 2016. - Томск: ТПУ, 2016 - С. 135-136
5. Макаревич С. В. , Беспала Е. В. , Новоселов И. Ю. Расчет оптимальных параметров процесса переконденсации графита в низкотемпературной плазме // Изотопы: технологии, материалы и применение: сборник тезисов докладов III Международной научной конференции молодых ученых, аспирантов и студентов, Томск, 19-23 Сентября 2016. - Томск: Графика, 2016 - С. 53
6. Макаревич С. В. Исследование изотопного эффекта при кристаллизации в магнитном поле из водного раствора // Изотопы: технологии,

материалы и применение: сборник тезисов докладов II Международной научной конференции молодых ученых, аспирантов и студентов, Томск, 19-23 Октября 2015. - Томск: Графика, 2015 - С. 31