

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

Школа – Инженерная школа ядерных технологий

Направление подготовки – 14.04.02 «Ядерные физика и технологии»

Отделение школы (НОЦ) – Отделение ядерно-топливного цикла

Магистерская диссертация

Тема работы
Исследование изотопной селективности процесса кристаллизации NaCl из водного раствора, находящегося в магнитном поле

УДК 539.2:537.612:543.51:66.065.5

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0AM81	Семоненко А.А.		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ОЯТЦ ИЯТШ	В.Ф. Мышкин	д.ф.-м.н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН ШБИП	И.В. Кашук	к.т.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент ОЯТЦ ИЯТШ	Т.С. Гоголева	к.ф.-м.н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОЯТЦ ИЯТШ	Л.И. Дорофеева	к.ф.-м.н.		

Планируемые результаты обучения по ООП

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)
Профессиональные компетенции	
P1	Применять глубокие, математические, естественнонаучные, социально-экономические и профессиональные знания для теоретических и экспериментальных исследований в области технологий ядерно-топливного цикла, физики кинетических явлений, методов разделения жидких и газовых смесей, изотопных технологий и материалов в профессиональной деятельности.
P2	Ставить и решать инновационные инженерно-физические задачи, реализовывать проекты в области изотопных технологий и материалов, получения высокочистых веществ, переработки, утилизации и обезвреживания промышленных отходов.
P3	Создавать теоретические, физические и математические модели, описывающие явления и закономерности в области изотопных технологий и материалов, проводить исследования в области разделения молекулярных и изотопных смесей, получения высокочистых веществ.
P4	Разрабатывать новые алгоритмы и методы расчета каскадов для разделения молекулярных и изотопных смесей, эксплуатировать, проводить испытания, монтаж и настройку современных физических установок и устройств.
P5	Оценивать перспективы развития ядерной отрасли, анализировать радиационные риски и сценарии потенциально возможных аварий, разрабатывать меры по снижению рисков и обеспечению ядерной и радиационной безопасности руководствуясь законами и нормативными документами, составлять экспертное заключение
P6	Разрабатывать и внедрять новые виды продукции и технологий, проектировать и организовывать инновационный бизнес, формировать эффективную стратегию и активную политику риск-менеджмента на предприятии, применять методы оценки качества и результативности труда персонала, применять знание основных положений патентного законодательства и авторского права Российской Федерации.
P7	Демонстрировать глубокие знания социальных, этических и культурных аспектов инновационной профессиональной деятельности, использовать современные достижения и передовые технологии получения и применения изотопно-модифицированных материалов в профессиональной деятельности
P8	Самостоятельно учиться и непрерывно повышать квалификацию в течение всего периода профессиональной деятельности.
P9	Активно владеть иностранным языком на уровне, позволяющем работать в иноязычной среде, разрабатывать документацию, презентовать результаты профессиональной деятельности.
P10	Эффективно работать индивидуально и в коллективе, демонстрировать ответственность за результаты работы и готовность следовать корпоративной культуре организации.

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

Школа – Инженерная школа ядерных технологий
 Направление подготовки (специальность) – 14.04.02 «Ядерные физика и технологии»
 («Изотопные технологии и материалы»)
 Отделение школы (НОЦ) – Отделение ядерно-топливного цикла

УТВЕРЖДАЮ:
 Руководитель ООП

 « ____ » _____ 2020 г. Л.И.Дорофеева

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Магистерской диссертации

Студенту:

Группа	ФИО
0AM81	Семоненко Александр Александрович

Тема работы:

Исследование изотопной селективности процесса кристаллизации NaCl из водного раствора, находящегося в магнитном поле	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	№ 62-51/с от 02.03.2020 г.

Срок сдачи студентом выполненной работы:	25.05.2020
--	------------

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе <i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i>	1. Предмет исследования: процесс кристаллизации NaCl в магнитном поле. 2. Используемое оборудование: вакуумный насос 2НВР-5ДМ, колбы Бунзена, вакууметр, натекатели, постоянный магнит
Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов <i>(аналитический обзор по литературным источникам с</i>	Аналитический обзор литературы; постановка цели и задач исследования; сборка установки для проведения экспериментов; разработка методики проведения экспериментов; анализ полученных результатов; экономическое обоснование

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).	проведения НИР; выводы по работе; заключение
---	--

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы

Раздел	Консультант
Экспериментальная часть	профессор ОЯТЦ ИЯТШ В.Ф. Мышкин
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	доцент ОСГН ШИП И.В. Кашук
Социальная ответственность	ассистент ОЯТЦ ИЯТШ Т.С. Гоголева

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	02.03.2020
--	------------

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ОЯТЦ ИЯТШ	В.Ф. Мышкин	д.ф.-м.н., профессор		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0AM81	Семоненко Александр Александрович		

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

Студенту:

Группа	ФИО
0AM81	Семоненко Александр Александрович

Школа	Инженерная школа ядерных технологий	Отделение Школа	Отделение ядерного топливного цикла
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	14.04.02 «Ядерные физика и технологии/Изотопные технологии и материалы»

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

1. <i>Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	Стоимость материальных ресурсов и специального оборудования определены в соответствии с рыночными ценами г. Томска Тарифные ставки исполнителей определены штатным расписанием НИ ТПУ
2. <i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	Норма амортизационных отчислений на специальное оборудование
3. <i>Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	Отчисления во внебюджетные фонды 30 %

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. <i>Анализ конкурентных технических решений (НИ)</i>	Расчет конкурентоспособности SWOT-анализ
2. <i>Формирование плана и графика разработки и внедрения (НИ)</i>	Структура работ. Определение трудоемкости. Разработка графика проведения исследования
3. <i>Составление бюджета инженерного проекта (НИ)</i>	Расчет бюджетной стоимости НИ
4. <i>Оценка ресурсной, финансовой, бюджетной эффективности (НИ)</i>	Интегральный финансовый показатель. Интегральный показатель ресурсоэффективности. Интегральный показатель эффективности.

Перечень графического материала

1. Оценка конкурентоспособности ИР
2. Матрица SWOT
3. Диаграмма Ганта
4. Бюджет НИ
5. Основные показатели эффективности НИ

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	02.03.2020
---	------------

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН ШБИП	Кашук Ирина Вадимовна	к.т.н доцент		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0AM81	Семоненко Александр Александрович		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
0AM81	Семоненко Александр Александрович

Школа	ИЯТШ	Отделение (НОЦ)	ОЯТЦ
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	14.04.02 «Ядерные физика и технологии»/«Изотопные технологии и материалы»

Тема ВКР:

Исследование изотопной селективности процесса кристаллизации NaCl из водного раствора, находящегося в магнитном поле

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	Исследование процесса кристаллизации NaCl из водного раствора, находящегося в магнитном поле. Область применения – атомная энергетика.
--	---

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.	– Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 27.12.2018) – СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03. Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы.
2. Производственная безопасность: 2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов 2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия	Вредные и опасные факторы: – отклонение показателей микроклимата; – недостаточная освещенность рабочей зоны; – превышение уровня шума; – повышенный уровень электромагнитного излучения – поражение электрическим током.
3. Экологическая безопасность:	– анализ влияния объекта и процесса исследования на окружающую среду; – разработка организационных и технических мероприятий по защите окружающей среды.
4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:	– описание типичной ЧС – пожар на рабочем месте;

	– превентивные меры и порядок действий во время ЧС.
--	---

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	02.03.2020
--	------------

Задание выдал консультант:

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

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0AM81	Семоненко Александр Александрович		

Реферат

Выпускная квалификационная работа объёмом 89 страница, 16 рисунков, 17 таблиц, 43 источник, 20 формул.

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 рамках ВКР в процессе исследования 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}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	8
Введение	11
1 Обзор научно – технической литературы.....	13
1.1 Параметры решетки кристаллов, обогащенной по изотопам.....	13
1.2 Методы выращивания кристаллов	14
1.2.1 Выращивание кристаллов из растворов	14
1.2.2 Изогидрическая кристаллизация.....	15
1.2.3 Изотермическая кристаллизация	16
1.2.4 Кристаллизация высаливанием.....	17
1.2.5 Кристаллизация вымораживанием	17
1.2.6 Кристаллизация в результате химической реакции.....	17
1.2.7 Выращивание кристаллов из расплавов	18
1.3 Влияние магнитного поля на рост кристалла из водных растворов ...	19
1.4 Методы анализа модифицированных по изотопам материалов.....	20
1.5 Кристаллизация в магнитном поле	22
2 Экспериментальные исследования влияния магнитного поля на кристаллы	24
2.1 Экспериментальная установка	24
2.2 Методика проведения эксперимента	26
2.3 Получение исследуемых образцов.....	28
2.3.1 Получение исследуемых образцов при проведении экспериментальных исследований №1	28
2.3.2 Получение исследуемых образцов при проведении экспериментальных исследований №2	29
2.4 Результаты рентгенодифракционного анализа	30
3 Выводы. Заключение	37
4.1 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения .	39
4.1.1 Анализ конкурентных технических решений	39
4.1.2 SWOT-анализ	41
4.2 Планирование научно-исследовательских работ.....	45
4.2.1 Структура работ в рамках научного исследования	45

4.2.2 Определение трудоемкости выполнения работ и разработка графика проведения	47
4.2.3 Бюджет научно-технического исследования	50
4.3 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	57
5 Социальная ответственность	60
5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	60
5.1.1 Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя) правовые нормы трудового законодательства.....	60
5.1.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя	62
5.2 Производственная безопасность.....	62
5.2.1 Анализ опасных и вредных производственных факторов	63
5.2.1.1 Отклонение показателей микроклимата.....	63
5.2.1.2 Недостаточная освещенность	64
5.2.1.3 Повышенный уровень шума	64
5.2.1.4 Повышенный уровень электромагнитных излучений	65
Список использованных источников	73

Введение

Из 92 стабильных элементов 71 элемент имеют два и более изотопов. Изотопы одного элемента отличаются количеством нейтронов в ядре и поэтому атомной массой. Известно, что изотопы значительно отличаются по ядерно-физическим свойствам. При этом все остальные свойства изотопов одного элемента могут отличаться незначительно.

Материалы определенного изотопного могут обладать значительно лучшими требуемыми параметрами, чем их природные аналоги. Например, для изготовления микросхем меньшего размера и увеличения степени интеграции элементов используют моноизотопные полупроводники из-за их лучшей теплопроводности. Кварцевые световоды, содержащие 50% ^{28}Si и 50% ^{30}Si имеют меньшее пропускание, чем световод из природного кварца. Для конструкционных материалов, используемых, например, в поле радиоактивного излучения, применяют специально формируемые смеси изотопов [1].

Развиваются методы использования изотопов в медицине и изучении биохимических процессов. Например, изотоп ^{25}Mg может ускорять скорость биохимических процессов. Применение парамагнитного изотопа ^{25}Mg в медицинских целях считается перспективным [2].

Разработаны множество методов разделения практически всех изотопов. Значительная часть из них испытаны в промышленных технологиях. Однако, высокая стоимость материалов, обогащенных по целевым изотопам, препятствует их широкому применению.

Поэтому являются актуальными исследования по поиску и разработке инновационных энергоэффективных методов разделения изотопов различных элементов.

Значительное влияние на физико-химические процессы способно оказывать магнитное поле из-за спиновых эффектов. При этом магнитное поле оказывает малое энергетическое действие на материалы. Это

воздействие может изменять параметры процесса, а также исключать один из путей достижения конечного состояния в этом процессе.

Водный раствор хлорида натрия хорошо подходит для отработки методов магнитного управления процессом кристаллизации за счет высокой растворимости в воде, хорошей способности к кристаллизации при испарении воды. Также следует учитывать изотопный состав соли: натрий моноизотопен, хлор содержит изотопы ^{35}Cl и ^{37}Cl [3].

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 NaCl из водных растворов.

Поставленная цель будет решена в рамках следующих задач:

1. Обзор научно-технической литературы;
2. Экспериментальные исследования по формированию пространственного распределения изотопов хлора по объему кристалла NaCl , формируемого из водного раствора во внешнем слабом магнитном поле;
3. Анализ результатов.

1 Обзор научно – технической литературы

1.1 Параметры решетки кристаллов, обогащенной по изотопам

Известно, что изотопный состав существенной влияет на параметры и физические свойства кристаллической решетки. Рассмотрим это влияние на примере водородосодержащих соединениях. Как правило, при замене водорода на дейтерий в водородосодержащих соединениях знак изотопического эффекта соответствует уменьшению параметра решетки.

Все же, значение изотопного эффекта оказывалось противоположным в некоторых случаях. Изотопическое замещение может приводить к сдвигу температуры полиморфных превращений или даже изменению характера этих превращений у некоторых веществ. Зависимость температуры изотопического эффекта в значении параметров кристаллической решетки связывается с различием коэффициентов линейного расширения водородо- или дейтерийсодержащих соединений. Практически всегда, дейтерирование приводит к увеличению коэффициентов расширения.

С помощью рентгеноструктурных исследований льда из легкой и тяжелой воды впервые попытались обнаружить различия в структурах твердых тел, отличающихся изотопным составом.

Проводилось сравнение параметров решеток изотопных модификаций LiH и LiD. В структуре льда водород находится в группе атомов, образующих молекулу воды. Замена изотопа, путем вызова небольших изменений расстояния между ядрами внутри таких группы, практически не влияет на расстояние между молекулами. В отличие от льда, атомы H (D) в гидриде лития занимают заданное положение в узлах решетки. Следовательно, замена изотопов H-D приводит к более заметному, чем у льда, изменению размеров элементарной ячейки [4].

Еще большее изменение параметров решеток при замене водорода на дейтерий происходит у гидридов серы и селена, у гидрида гафния.

У металлоподобных дейтерида и гидрида урана и лантана обнаружено несколько меньшее различие в молярных объемах.

Первыми изотопами металлов, которые изучались методами рентгеноструктурного анализа были изотопы лития: ${}^6\text{Li}$ и ${}^7\text{Li}$. При обработке рентгенограмм этих изотопов, зарегистрированных при различных температурных условиях, выяснилось, что параметры решеток данных изотопов при температуре равной $T=293\text{K}$ не отличаются в пределах точности измерения. При температуре $4,2\text{K}$ различие в параметрах решеток изотопов составляют: Li^6 - $3,480\text{\AA}$, Li^7 - $3,478\text{\AA}$.

Одной из причин изотопических эффектов в параметрах решетки твердых тел является различие нулевых колебаний. Из эффекта нулевых колебаний следует, что положение минимума кривой потенциальной энергии взаимодействия определяет равновесное расстояние между двумя соседними частицами в узлах кристаллической решетки. Даже при абсолютном нуле $T=0\text{K}$, частица все равно испытывает колебания (нулевые колебания) вопреки самому определению абсолютного нуля. Увеличение энергии колеблющихся частиц приводит к увеличению среднего расстояния между этими частицами из-за несимметричности потенциальной кривой. Значение частоты нулевых колебаний меньше у тяжелых элементов, чем у легких, так как энергия обратно пропорциональна корню из массы. Принимая во внимание эффект нулевых колебаний, можно сделать вывод о том, что при абсолютном нуле молярный объем легкого изотопа должен быть больше, чем у более тяжелого. Описанные закономерности происходят на решетках с простыми Ван-дер-Ваальсовскими силами связи (изотопы Ne, H, He) [5].

1.2 Методы выращивания кристаллов

1.2.1 Выращивание кристаллов из растворов

Для начала кристаллизации из раствора необходимо создать критический коэффициент пересыщения. Коэффициент пересыщения равен отношению концентрации соли к концентрации, при которой в равновесных условиях начинается кристаллизация. Используются следующие методы кристаллизации:

1. Изогидрическая кристаллизация;
2. Изотермическая кристаллизация;
3. Кристаллизация высаливанием;
4. Кристаллизация вымораживанием;
5. Кристаллизация в результате химических реакций;
6. Выращивание кристаллов из расплавов;
7. Кристаллизация из газовой фазы.

1.2.2 Изогидрическая кристаллизация

Принцип изогидрической кристаллизации основан на том факте, что растворимость большинства веществ уменьшается с понижением температуры раствора. Исходя из этого, добиться пересыщения, необходимого для начала процесса образования кристаллов, можно путем охлаждения горячего насыщенного раствора.

На диаграмме растворимости (рис. 1.1) охлаждение горячего ненасыщенного раствора, имеющего температуру t_1 и концентрацию C_1 (точка A), до конечной температуры t_2 условно можно изобразить линией AC, которая пересекает кривую растворимости в точке B, 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 .

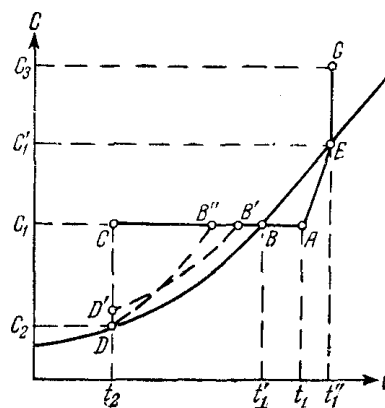


Рисунок 1.1 - Диаграмма растворимости

В том случае, если в растворе не образуется сколько-нибудь заметного пересыщения, процесс его охлаждения и кристаллизации будет изображаться линией ABD. В зависимости от способности раствора образовывать пересыщение и его скорости охлаждения реальные процессы могут протекать также по линиям AB'D'D или AB''D [6].

1.2.3 Изотермическая кристаллизация

Изотермическая кристаллизация – так же, один из методов перевода раствора из насыщенного состояния в пересыщенное, что является обязательным условием для инициации процесса образования кристаллов. Однако, в отличие от изогидрического метода, данный метод основан не на уменьшении растворимости вещества в раствора, а на переводе раствора в пересыщенное состояние за счет изменения соотношения вещество:растворитель путем выпаривания последнего из раствора.

Линия AEG на рисунке 1.1 отображает процесс перехода раствора из насыщенного в пересыщенный. Так же, можно заметить, что температура кипения соответственно возрастает с увеличением концентрации раствора. При достижении пересыщенного состояния (точка E) температура принимает постоянное значение t_1'' .

Приведенный на рисунке 1.1 график процесса кристаллизации AEG является условным, где точка G лишь характеризует общее пересыщение раствора, которое может быть достигнуто удалением из него определенной части растворителя. В большинстве случаев процесс кристаллизации раствора при выпаривании протекает при постоянной концентрации, предельно близкой к состоянию насыщения для данной температуры t_1'' . Процесс кристаллизации путем охлаждения становится неэффективным, при условии, когда растворимость соли практически не изменяется при изменении температуры. В таких случаях целесообразно применять изотермическую кристаллизацию. Например, кривая растворимости NaCl демонстрирует, что при охлаждении насыщенного раствора выпадает

намного меньшее количество соли, чем при выпаривании, следовательно, второй способ будет предпочтительнее.

1.2.4 Кристаллизация высаливанием

Еще одним способом добиться пересыщения раствора является методом высаливания. Чтобы добиться пересыщения раствора согласно данному методу, необходимо добавить к исходному раствору вещество, которое вступая в реакцию с веществом, находящимся в исходном растворе, будет способно понизить его растворимость, что приведет к инициации процесса кристаллизации в растворе. Имеет смысл вводить высаливающее вещество в раствор в насыщенном состоянии, в противном случае может замедлиться или прекратиться растворение осадителя вовсе в следствии осаждения на нем соли.

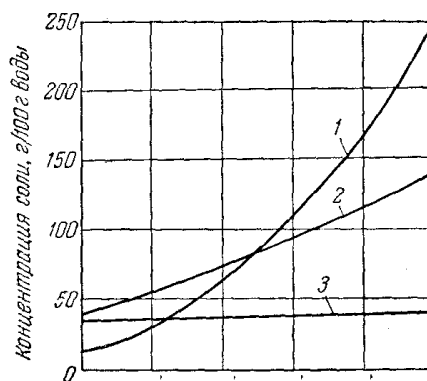


Рисунок 1.2 - Кривые растворимости в воде: 1 - KNO_3 , 2 - $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$ и 3 - NaCl .

Одним из недостатков такого способа является его низкая экономическая эффективность из-за дороговизны органических растворителей и процессов их подготовки и переработки.

1.2.5 Кристаллизация вымораживанием

Данный метод нашел свое применение в селективном выделении компонентов из естественных растворов (рассолов). Например, охлаждение рапы соляных озер позволяет получать чистую поваренную соль, путем вымерзания из нее $\text{NaCl}(\text{H}_2\text{O})_2$

1.2.6 Кристаллизация в результате химической реакции

Еще одним способом добиться пересыщения раствора и начать

процесс роста кристаллов – может быть химическая реакция.

Выпадения кристаллического осадка из раствора можно добиться пресыщением этого раствора путем химической реакции. Данный метод нашел свое применение и активно используется, как в промышленности, так и в аналитических лабораториях.

При очистке сточных и природных вод чаще всего проводят кристаллизацию сульфатов, гидроокисей металлов, обладающих незначительной растворимостью, и карбонатов. Полнотой осаждения примесей главным образом обусловлено использование при очистке кристаллизации труднорастворимых соединений. Следует отметить, что в определенных условиях остаточные пресыщения при кристаллизации труднорастворимых соединений могут быть значительными. Это связано с тем, что такие вещества способны к образованию устойчивых пересыщенных растворов.

1.2.7 Выращивание кристаллов из расплавов

В современном мире, значительная часть технически необходимых и важных для промышленности кристаллов выращивается именно методом выращивания из расплавов. Например, простейшие полупроводниковые материалы, металлы, галогениды, оксиды, ниобаты, ванадаты, волфраматы и прочие получают из расплавов. В некоторых случаях можно даже получить пяти и более компонентные монокристаллы.

Наиболее подходящими для данного метода веществами являются те вещества, что могут плавиться без химического разложения, имеют крайне низкую химическую активность и не имеют полиморфных переходов. Однако, при выращивание кристаллов данным методом необходимо брать в расчет процессы, которые могут повлиять на состав исходного расплава, такие как, испарение, термическая диссоциация и взаимодействие с окружающей средой.[7]

Ян Чорхальский, польский химик, в 1918 году разработал метод, позже названный в его честь, который получил наиболее широкое

применение в промышленном производстве полупроводниковых и прочих кристаллов. Преимуществом данного метода является тот факт, что сам кристалл растет в пространстве без контакта со стенками тигля, что позволяет легко менять диаметр вытягиваемого кристалла, а так же, визуально контролировать его рост. И на сегодняшний день данный метод активно используется в промышленности для получения диэлектрических материалов, синтетических кристаллов драгоценных камней и, конечно же, полупроводниковых материалов.

Свойства выращиваемого материала и требования по физико-химическим свойствам и геометрическим параметрам определяют технологические особенности поведения процесса [8-10].

Одним из наиболее значимым недостатком данного метода является сильная химическая неоднородность получаемых кристаллов.

1.3 Влияние магнитного поля на рост кристалла из водных растворов

Известно, что число «зародышей» кристаллов в органических соединений и неорганических солей возрастает прямо пропорционально напряженности действующего на раствор магнитного поля [11]. Также стоит отметить, что на формирование кристаллообразований оказывает влияние постоянное магнитное поле. В магнитных полях происходит пространственная ориентация кристаллов, начиная с самого момента возникновения кристаллических центров и продолжается вплоть до образования поликристаллических агрегатов. Таким образом, ориентирующее действие магнитного поля проявляется в системе на совершенно различных уровнях дисперсности: макроскопическом, молекулярном и атомном.

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.

Также установлено, 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 [12-14].

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 [15].

1.4 Методы анализа модифицированных по изотопам материалов

Для выявления долевого содержания различных изотопов в соединении используют анализ изотопного состава. Для решений этой задачи используются методы ядерной спектроскопии и радиометрии. Наиболее сложной задачей является анализ стабильных изотопов.

Анализ является необходимым инструментом контроля и мониторинга процессов разделения изотопов. В силу того, что различия в химических свойствах изотопов ничтожно малы, в изотопном анализе за фундаментальную основу берутся различия физических свойств изотопов [16].

Масс-спектрометр – универсальный и распространенный инструмент, который позволяет определить изотопный состав с точностью до 0.1%.

Спектральные приборы, принцип работы которых основан на разнице энергетических уровней изотопов, имеют меньшую чувствительность для определения изотопного состава.

Результатом спектрального анализа является картина наложения спектров исследуемых изотопов, где соотношение интенсивностей будет коррелировать с отношением изотопного состава образца.

Самыми распространенными являются колебательные ИК-спектры или полосатые молекулярные спектры в видимой или УФ области.

Используют также вращательные микроволновые спектрографы в области 104-105 МГц и спектры ядерного магнитного резонанса [17-19].

Для исследования фазного состава, структуры и анализа несовершенств кристаллов используют рентгендифракционные методы. Они работают благодаря тому, что различные типы волн дифрагируют на периодической решетке кристалла.

Любое вещество в конденсированном состоянии имеет атомарное упорядочение. В случае жидкостей и аморфных тел – это ближний порядок, или дальний порядок в случае поликристаллов и монокристаллов. Так как размер атомов имеет порядок длины волны рентгеновского излучения, то в последнем случае атомы вещества образуют естественную трехмерную дифракционную решетку для рентгеновских лучей.

Существуют дифракционные условия, при которых, в случае упругого рассеяния рентгеновского излучения, возникают интерференционные максимумы при определенных углах рассеяния в зависимости от длины волны λ и расстояния между плоскостями трехмерной атомарной решетки d . Эти условия носят имя Лауэ и Вульфа-Брегга. Наиболее просто выводится условие Вульфа-Брегга:

$$n\lambda = 2d \sin \theta, \quad (1.1)$$

Под углом θ к атомной плоскости на кристалл падает монохроматическое рентгеновское излучение с длиной волны λ (рис. 1.4.1). Длина волны определяется материалом анода рентгеновской трубки и, как правило, соответствует характеристической K_α линии анода. Выделение одной длины волны излучения осуществляется либо K_β -фильтром, либо кристаллическим монохроматором.

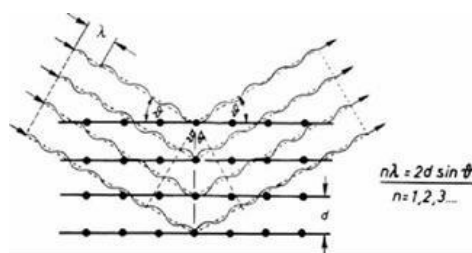


Рисунок 1.3 – Условие дифракции Вульфа-Брегга.

1.5 Кристаллизация 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 [22-25]. 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 [26].

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 пресыщения и температуры раствора, от давления газовой смеси над раствором, а также парциального давления паров растворителя.

2 Экспериментальные исследования влияния магнитного поля на кристаллы

2.1 Экспериментальная установка

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 НВР-5ДМ, откачивающий воздух до 2 мм рт.ст.;
3. Вакууметр ВИТ-2, 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.

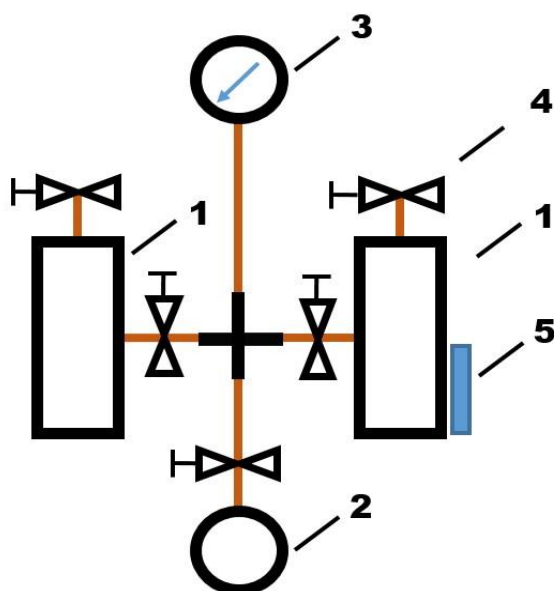


Рисунок 2.1 – Схема экспериментальной установки. 1 – колбы Бунзена с раствором; 2 – вакуумный насос; 3 – вакуумметр; 4 – натекатель; 5 – магнит.



Рисунок 2.2 – экспериментальная установка для исследования формирования кристаллов из водного раствора NaCl в магнитном поле.

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.

2.2 Методика 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 насыщенный 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 насыщенного 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 °С;

7. Подготовка проб для рентгенодифракционного анализа.

Следует заметить, на начальном этапе откачивания воздуха из колб Бунзена происходит образование пузырей в растворе. 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. В последующем, когда концентрация соли в растворе превышает концентрацию насыщения, пузыри исчезают. При этом площадь сцепления пузыря с дном колбы в магнитном поле составляет 0,8 от диаметра пузыря, без поля 0,6. Это обусловлено тем, что в постоянном магнитном поле изменяется коэффициент поверхностного натяжения насыщенного раствора NaCl.

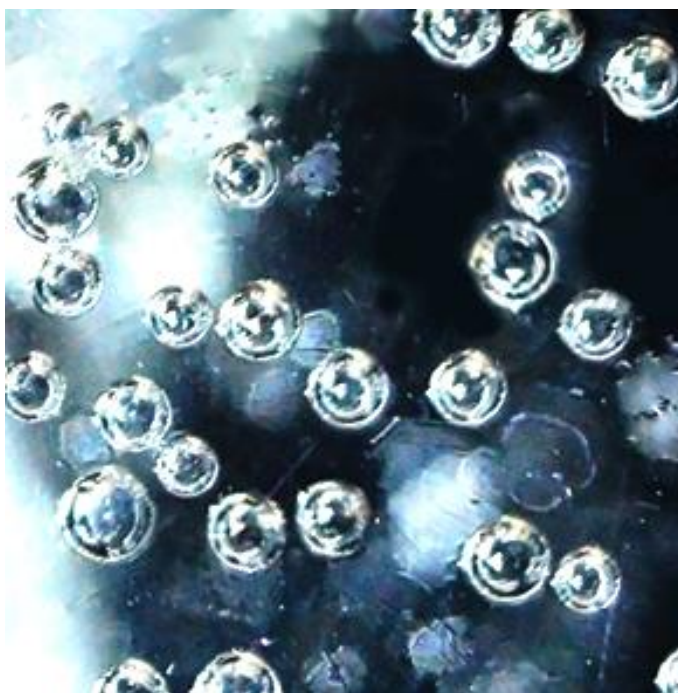


Рисунок 2.3 – образовавшиеся пузыри в колбе, на которую действует магнитное поле

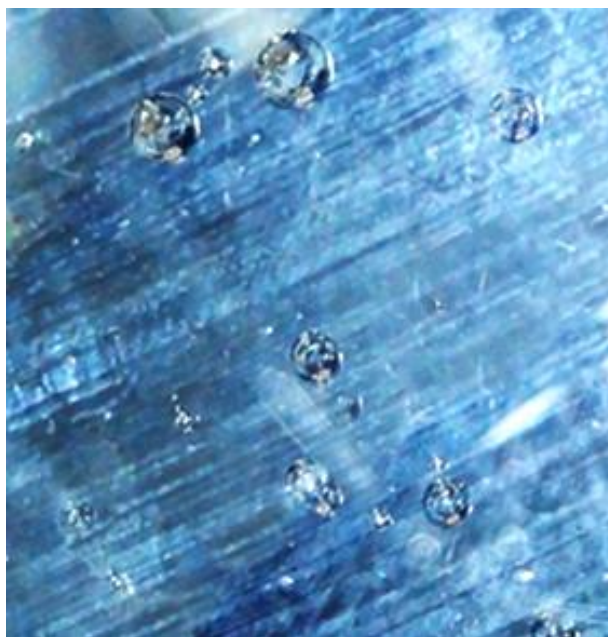


Рисунок 2.4 – образовавшиеся пузыри в колбе, не находящей под действием магнитного поля

2.3 Получение исследуемых образцов

2.3.1 Получение исследуемых образцов при проведении экспериментальных исследований №1

В ходе проведения экспериментальных исследований №1 выращивались кристаллы NaCl одновременно в двух колбах Бунзена из водного раствора NaCl. На одну колбу действовали магнитным полем от постоянного магнита с остаточной намагниченностью 1.0-1.2 Тл. Размер магнита – 3х4 см. Поэтому магнитное поле в области расположения раствора составляло 10-65 мТл. На другую колбу воздействием магнитным полем не производилось. В результате испарения воды, кристаллы NaCl образовывались как на поверхность раствора, так и на дне колбы.

Эксперимент №1: кристаллы выращивались в течении 10 минут, объем раствора в каждой колбе составлял 400 мл.

Эксперимент №2: кристаллы выращивались в течении 30 минут, объем раствора в каждой колбе составлял 400 мл.

Эксперимент №3: кристаллы выращивались в течении 660 минут, объем раствора в каждой колбе составлял 200 мл.

Эксперимент №4: кристаллы выращивались в течении 710 минут, объем раствора в каждой колбе составлял 200 мл.

Эксперимент №5: кристаллы выращивались в течении 1500 минут, объем раствора в каждой колбе 200 мл.

В результате проведения первой серии из пяти экспериментов по выращиванию кристаллов NaCl было получено 10 образцов выращенных кристаллов. 5 образцов - из колбы, на которую воздействовали магнитным полем, 5 образцов – из колбы, на которую воздействие магнитным полем не осуществлялось.

В ходе эксперимента кристаллы образовывались на дне колбы, ее стенках и поверхности раствора. Образовавшиеся на поверхности маленькие кристаллы падали на дно и продолжали расти в форме правильных кубиков. Для рентгенодифракционного анализа кристаллы отбирались со дна колбы, где их образовывалось наибольшее количество.

2.3.2 Получение исследуемых образцов при проведении экспериментальных исследований №2

При проведении экспериментальных исследований №2 кристаллы выращивались в колбе Бунзена под воздействием пары магнитов, величина магнитного поля которых в области расположения колбы с раствором составляла 20-30 мТл. Размер магнитов – 6х12 см.

Эксперимент №1: кристаллы выращивались в течении 100 минут, в течении эксперимента постоянное магнитное поле варьировалось в пределах 25-70 мТл. Кристаллы NaCl отобраны со дна колбы.

Эксперимент №2: кристаллы выращивались в течении 720 минут, величина магнитного поля, которым воздействовали на раствор, составляла 36 мТл. Кристаллы NaCl отобраны со дна колбы.

Эксперимент №3: кристаллы выращивались в течении 720 минут, воздействием магнитным полем величиной 70 мТл было начато спустя 90 минут от начала эксперимента. Кристаллы отобраны со дна колбы.

Эксперимент №4: кристаллы выращивались в течении 720 минут. Для выращивания кристаллов использовался пересыщенный раствор NaCl, который отстаивался в сосуде в течении 6 суток. Величина магнитного поля – 55 мТл. Воздействие магнитным полем было начато спустя 70 минут от начала эксперимента. Образцы отобраны со дна колбы.

Эксперимент №5: кристаллы выращивались в течении 720 минут. Для выращивания кристаллов использовался пересыщенный раствор NaCl, который отстаивался в сосуде в течении 6 суток под воздействием магнитного поля величиной 35 мТл. Величина магнитного поля – 55 мТл. Воздействие магнитным полем было начато спустя 70 минут от начала эксперимента. Образцы отобраны со дна колбы.

В результате второй серии из пяти экспериментов было получено 5 образцов, выращенных при разных времени воздействия и величины магнитного поля. Так же в группу образцов второй серии экспериментов для анализа был добавлен образец №6, представляющий собой поваренную соль, из которой получали пересыщенный раствор.

2.4 Результаты рентгенодифракционного анализа

Для исследования образцов, полученных в серии экспериментов №1, методом рентгенодифракционным анализом использовался рентгеновский дифрактометр XRD-7000S с вертикальным высокоточным гониометром с детектором на Cu излучении. Измерения дифрактограмм осуществлялись в диапазоне $2\theta = (20^0-90^0)$ при скорости сканирования 10град/с, с шагом сканирования 0.0143 град.

Полученные спектры рентгеновской дифракции приведены на рисунках 2.6 – 2.8. По горизонтальной шкале приведены углы дифракции. По вертикальной шкале – интенсивность дифрагированного потока в логарифмическом масштабе.

На рисунке 2.5 представлен общий вид рентгенограммы порошков NaCl полученных при различных параметрах. Красным цветом обозначены рефлексы фаз NaCl взятых из базы PCPDF. Далее, на рисунках 2.6-2.13

приведены дифракционные пики с высоким разрешением по углу для всех отобранных проб. Кривые разных цветов соответствуют разным образцам соли.

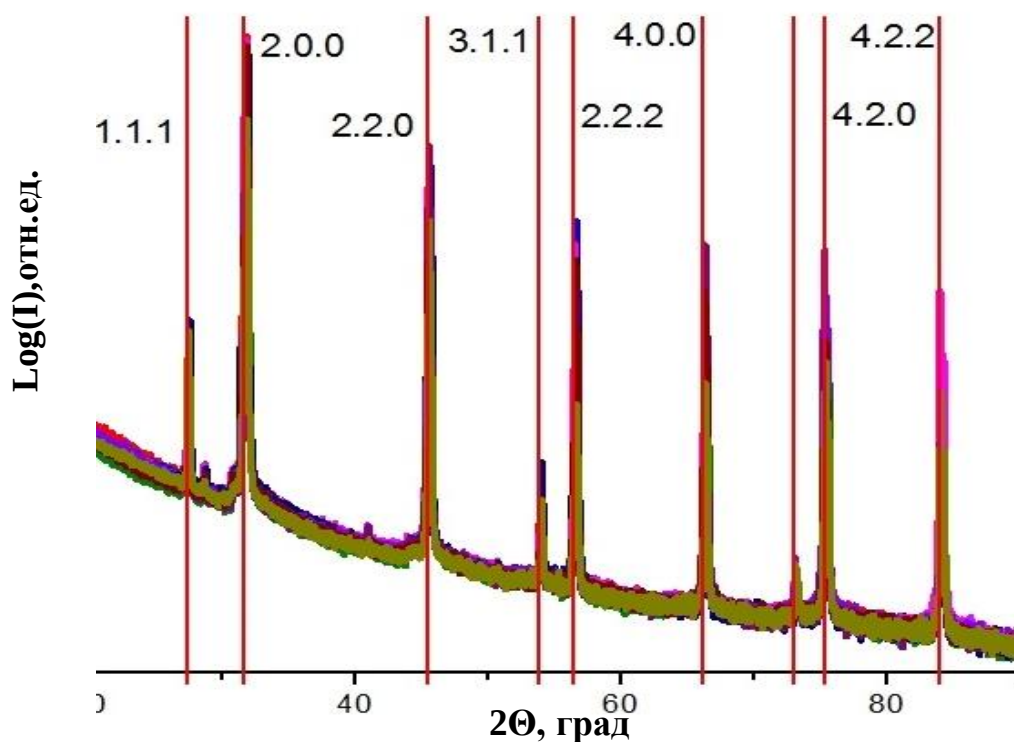


Рисунок 2.5 - спектр дифракции на кристаллах NaCl.

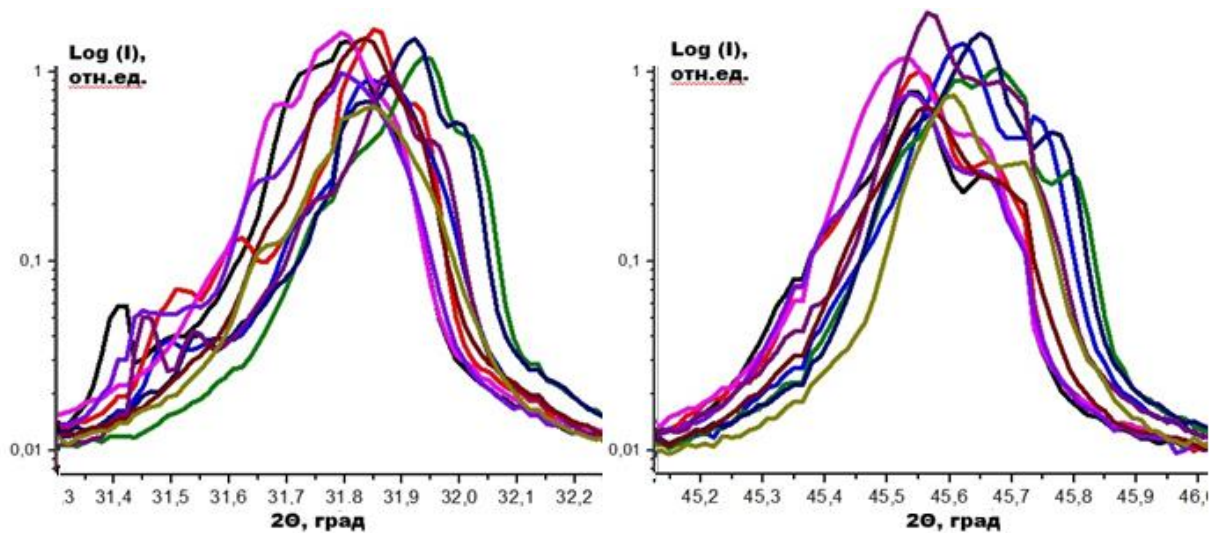


Рисунок 2.6 – первый и второй дифракционные пики с высоким разрешением по углу.

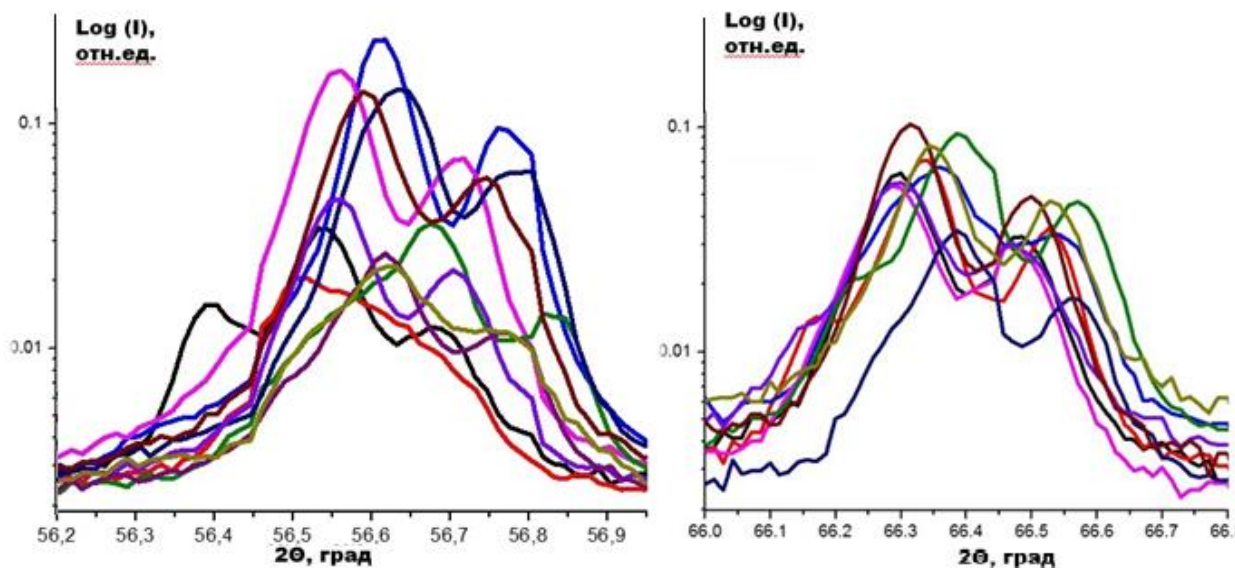


Рисунок 2.7 – третий и четвертый дифракционные пик с высоким разрешением по углу.

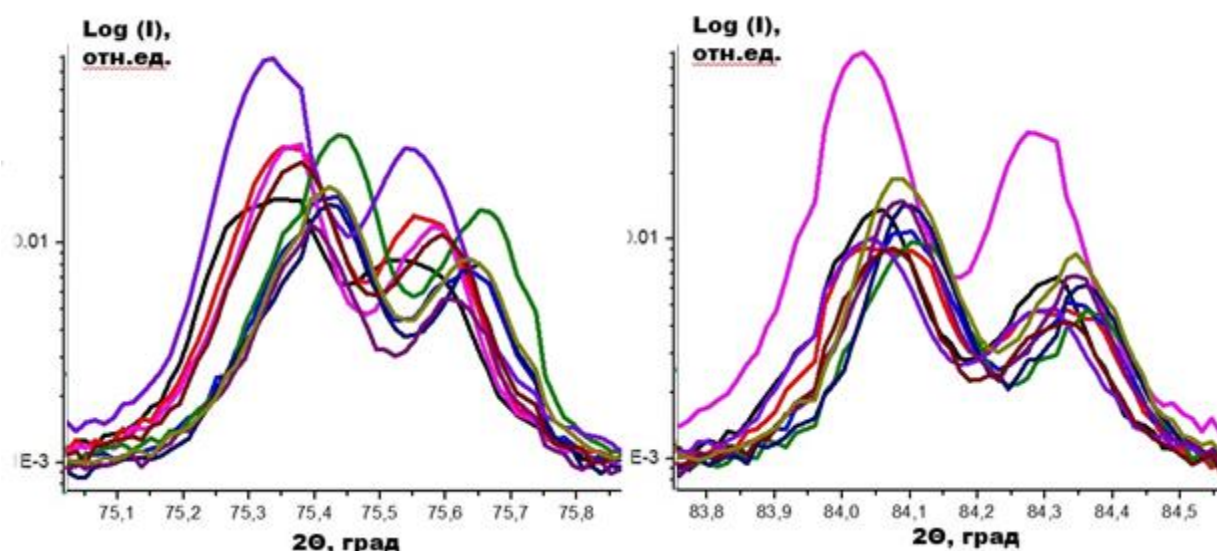


Рисунок 2.8 – пятый и шестой дифракционные пики с высоким разрешением по углу.

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.

Полученные спектры рентгеновской дифракции приведены на рисунках 2.9 – 2.11. По горизонтальной шкале приведены углы дифракции. По вертикальной шкале – интенсивность дифрагированного потока в логарифмическом масштабе.

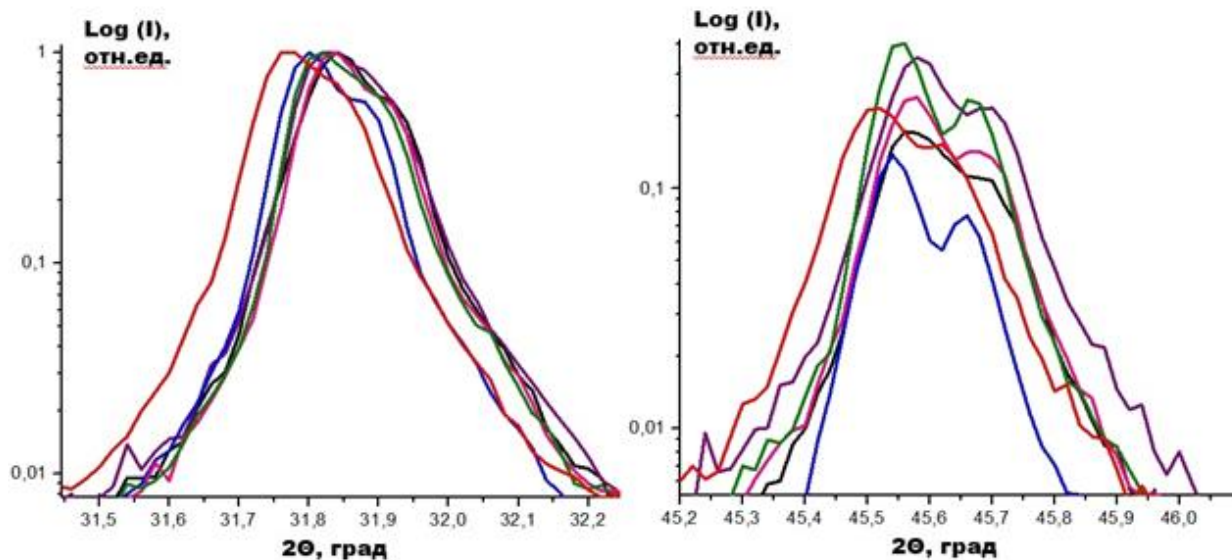


Рисунок 2.9 – первый и второй дифракционные пики.

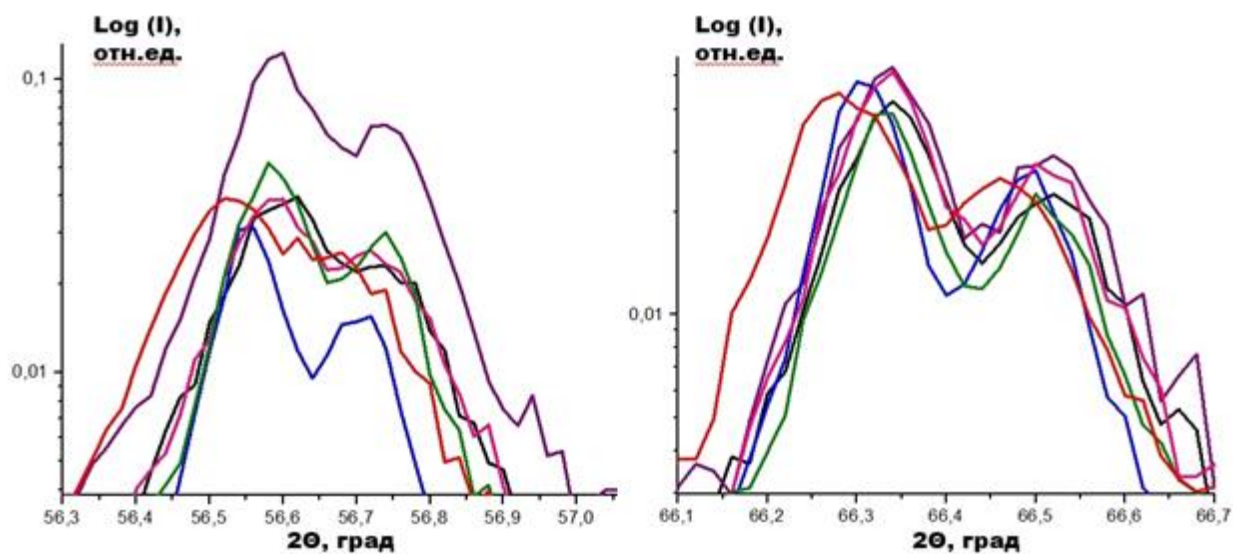


Рисунок 2.10 – третий и четвертый дифракционные пики.

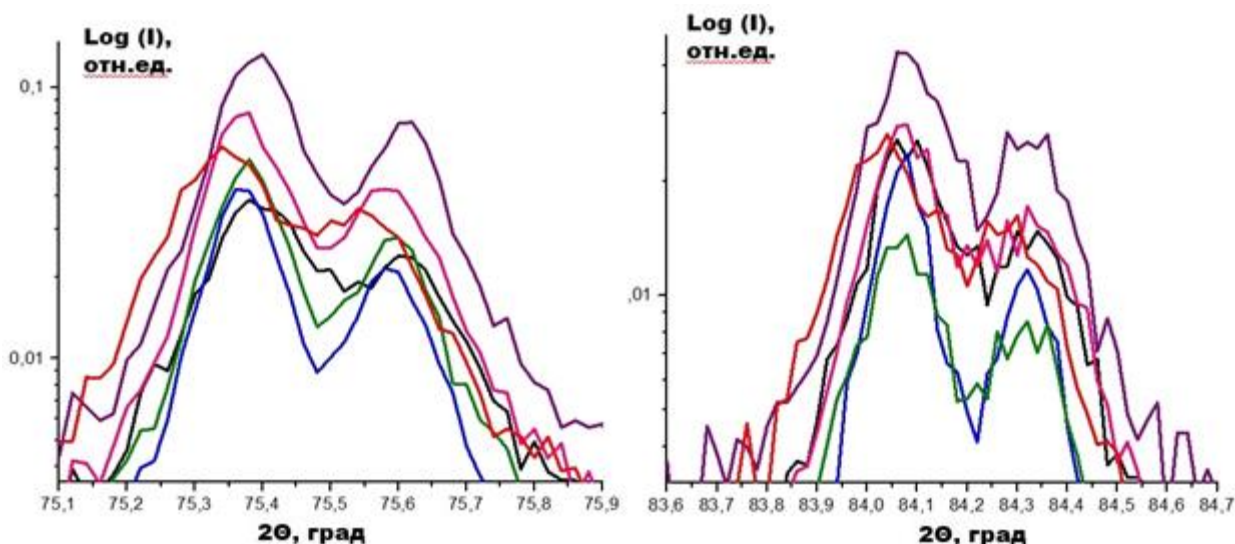
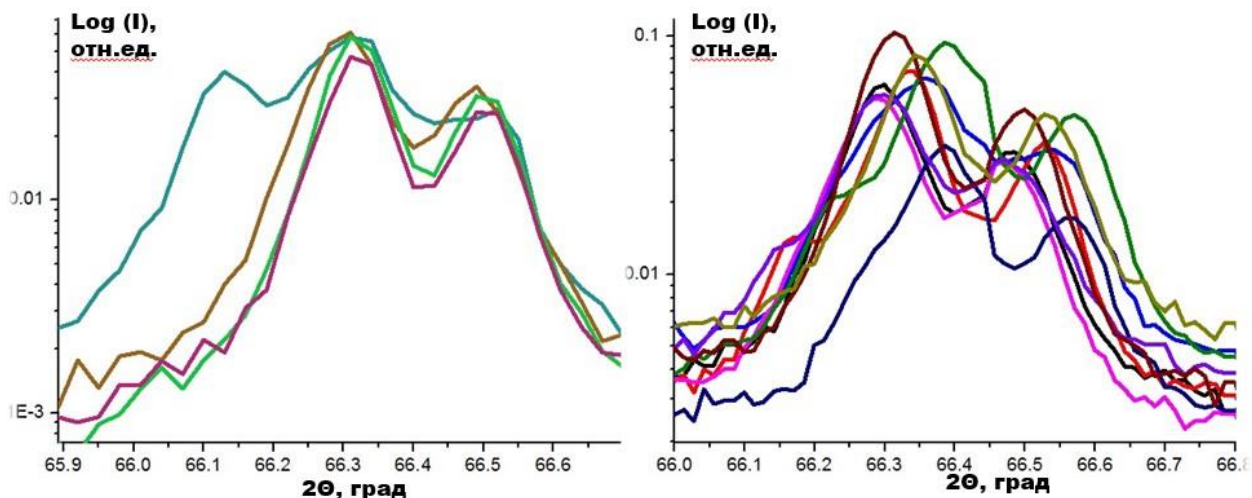


Рисунок 2.11 – пятый и шестой дифракционные пики.

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 – с увеличением угла дифракции уменьшается интенсивность пиков и увеличивается угловое разрешение.

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 ^{37}Cl хлора. (обогащенные по изотопам области).

Рисунок 2.12 - четвертые дифракционные пики с высоким разрешением по углу. Слева данные соответствуют кристаллам полученным при атмосферном давлении (ранее), справа – результаты получены в вакууме.

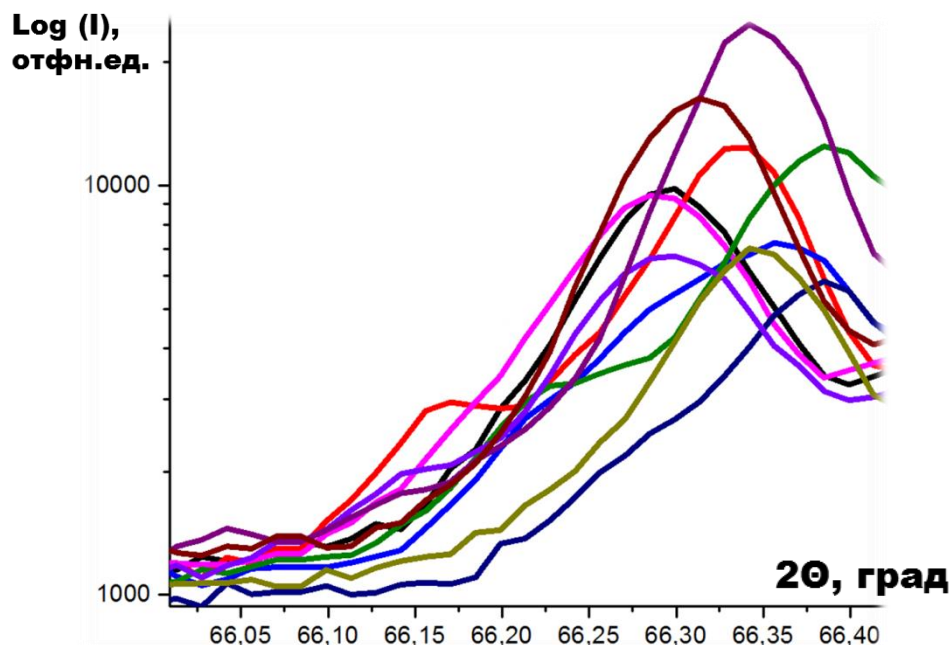


Рисунок 2.12 - 4 дифракционный пик с высоким разрешением по углу

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 А. 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 Выводы. Заключение

Из анализа экспериментальных данных по выращиванию кристаллов NaCl из водного раствора во внешнем постоянном магнитном поле 25-50 мТл, действующем на локальные участки в объеме раствора, можно сделать следующие выводы:

1. В слабом постоянном магнитном поле в разной мере изменяется скорость образования кристаллов NaCl из водного раствора разными изотопами хлора.

2. При воздействии неоднородным в пространстве магнитным полем формирующиеся из водных растворов кристаллы содержат разный изотопный состав, который может быть, как равномерно распределен по кристаллу, так и находиться в виде отдельных кластеров с повышенным содержанием ^{37}Cl .

3. В постоянном магнитном поле изменяется коэффициент поверхностного натяжения насыщенного раствора NaCl.

* * *

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

4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

В настоящее время перспективность научного исследования определяется не столько масштабом открытия, оценить которое на первых этапах жизненного цикла высокотехнологического и ресурсоэффективного продукта бывает достаточно трудно, сколько коммерческой ценностью разработки. Оценка коммерческой ценности разработки является необходимым условием при поиске источников финансирования для проведения научного исследования и коммерциализации его результатов. Это важно для разработчиков, которые должны представлять состояние и перспективы проводимых научных исследований.

Необходимо понимать, что коммерческая привлекательность научного исследования определяется не только превышением технических параметров над предыдущими разработками, но и тем, насколько быстро разработчик сумеет найти ответы на такие вопросы – будет ли продукт востребован рынком, какова будет его цена, каков бюджет научного проекта, какой срок потребуется для выхода на рынок и т.д.

Таким образом, целью раздела «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» является проектирование и создание конкурентоспособных разработок, технологий, отвечающих современным требованиям в области ресурсоэффективности и ресурсосбережения. Достижение цели обеспечивается решением задач:

- оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований;
- планирование научно-исследовательских работ;
- расчет бюджета научно-технического исследования;
- определение ресурсной, финансовой, бюджетной эффективности исследования [27].

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

4.1 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

4.1.1 Анализ конкурентных технических решений

Детальный анализ конкурирующих разработок, существующих на рынке, необходимо проводить систематически, поскольку рынки пребывают в постоянном движении. Такой анализ помогает вносить коррективы в научное исследование, чтобы успешнее противостоять своим соперникам. Важно реалистично оценивать сильные и слабые стороны разработок конкурентов.

Основным конкурентом метода разделения изотопов хлора путем кристаллизации соли NaCl в магнитном поле является метод разделения изотопов на газовых центрифугах и газодиффузионных каскадах.

Оценочная карта анализа представлена в таблице 4. Позиция разработки и конкурентов оценивается по каждому показателю экспертным путем по пятибалльной шкале, где 1 – наиболее слабая позиция, а 5 – наиболее сильная. Веса показателей, определяемые экспертным путем, в сумме должны составлять 1. Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле:

$$K = \sum B_i \cdot b_i \quad (4.1)$$

где K – конкурентоспособность научной разработки или конкурента;

B_i – вес показателя (в долях единицы);

b_i – балл i -го показателя.

Таблица 4 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок)

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		Б _ф	Б _{к1}	Б _{к2}	К _ф	К _{к1}	К _{к2}
1	2	3	4	5	6	7	8
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
1.Помехоустойчивость	0,1	5	4	3	0,5	0,4	0,3
2.Экологичность	0,18	5	3	3	0,9	0,54	0,54
3.Надежность	0,05	5	4	3	0,25	0,2	0,15
4.Простота эксплуатации	0,1	5	3	3	0,5	0,3	0,3
5.Экономичность	0,09	5	3	3	0,45	0,27	0,27
Экономические критерии оценки эффективности							
1.Конкурентоспособность продукта	0,07	5	4	3	0,35	0,28	0,21
2.Уровень проникновения на рынок	0,07	4	5	5	0,28	0,35	0,35
3.Цена	0,07	5	4	4	0,35	0,28	0,28
4.Предполагаемый срок эксплуатации	0,08	5	5	5	0,4	0,4	0,4
5.Послепродажное обслуживание	0,06	5	3	2	0,3	0,18	0,12
6.Финансирование научной разработки	0,03	4	5	4	0,12	0,15	0,12
7.Срок выхода на рынок	0,04	5	4	4	0,2	1,16	0,16
8.Наличие сертификации разработки	0,06	4	5	4	0,24	0,3	0,24
Итого	1	62	52	46	4,84	3,81	3,44

Проведенный анализ конкурентных технических решений показал, что исследование является наиболее актуальным и перспективным, имеет конкурентоспособность.

4.1.2 SWOT-анализ

Для исследования внешней и внутренней среды проекта, в этой работе проведен SWOT-анализ с детальной оценкой сильных и слабых сторон исследовательского проекта, а также его возможностей и угроз.

Первый этап, составляется матрица SWOT, в которую описаны слабые и сильные стороны проекта и выявленные возможности и угрозы для реализации проекта, которые проявились или могут появиться в его внешней среде, приведены в таблице 4.2.

Таблица 4.2 – Матрица SWOT-анализа

Сильные стороны	Слабые стороны
С1. Заявленная экономичность и энергоэффективность технологии.	Сл1. Недостаток финансовых средств.
С2. Экологичность технологии.	Сл2. Отсутствие прототипа научной разработки.
С3. Наличие необходимого оборудования для проведения испытаний предлагаемой технологии.	
С4. Маленький срок получения результатов при проведении научного исследования.	
С5. Квалифицированный персонал.	
Возможности	Угрозы
В1. Появление дополнительного спроса на новый продукт.	У1. Отсутствие спроса на новые технологии производства.
В2. Повышение стоимости конкурентных разработок.	У2. Несвоевременное финансовое обеспечение.
В3. Использование научно-исследовательских достижений ТПУ.	

После того как сформулированы четыре области SWOT переходим к реализации второго этапа.

Второй этап состоит в выявлении соответствия сильных и слабых сторон научно-исследовательского проекта внешним условиям окружающей среды. Это соответствие или несоответствие должны помочь выявить степень необходимости проведения стратегических изменений.

В рамках данного этапа необходимо построить интерактивную матрицу проекта. Ее использование помогает разобраться с различными комбинациями взаимосвязей областей матрицы SWOT. Возможно использование этой матрицы в качестве одной из основ для оценки вариантов стратегического выбора. Каждый фактор помечается либо знаком «+» (означает сильное соответствие сильных сторон возможностям), либо знаком «-» (что означает слабое соответствие); «0» – если есть сомнения в том, что поставить «+» или «-». Соотношения параметров представлены в таблицах 4.3–4.6.

Таблица 4.3 – Интерактивная матрица проекта «Возможности проекта и сильные стороны»

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

Таблица 4.4 – Интерактивная матрица проекта «Возможности проекта и слабые стороны»

Слабые стороны проекта			
Возможности проекта		Сл.1	Сл.2
	B1	-	+
	B2	-	0
	B3	-	-

Таблица 4.5 – Интерактивная матрица проекта «Угрозы проекта и сильные стороны»

Сильные стороны проекта					
Угрозы проекта		C1	C2	C3	C4
	У1	+	+	0	–
	У2	+	0	+	–

Таблица 4.6 – Интерактивная матрица проекта «Угрозы проекта и слабые стороны»

Слабые стороны проекта			
Угрозы проекта		Сл.1	Сл.2
	У1	+	+
	У2	+	-

Анализ интерактивных таблиц представляется в форме записи сильно коррелирующих сильных сторон и возможностей, или слабых сторон и

возможностей и т.д. Каждая из записей представляет собой направление реализации проекта.

В рамках третьего этапа должна быть составлена итоговая матрица SWOT-анализа, которая приводится в таблице 4.7.

Таблица 4.7 – Итоговая матрица SWOT – анализа

	Сильные стороны научно-исследовательского проекта: С1.Заявленная экономичность и энергоэффективность технологии; С2.Экологичность технологии; С3.Наличие необходимого оборудования для проведения испытаний предлагаемой технологии; С4.Маленький срок получения результатов при проведении научного исследования.	Слабые стороны научно-исследовательского проекта: Сл1.Недостаток финансовых средств; Сл2.У руководства НИР проблемы с материально-техническим обеспечением
Возможности: В1.Появление дополнительного спроса на новый продукт; В2.Повышение стоимости конкурентных разработок; В3.Использование научно-исследовательских достижений ТПУ.	Из данной комбинации видно, что существует возможность создания надежного и экономически выгодного способа формирования кристаллов с заданным распределением изотопов по объему из водного раствора.	В рамках данной работы не требуется высокотехнологичное и дорогостоящее оборудование, однако отсутствие прототипа научной разработки может существенно увеличить срок проведения научных работ.
Угрозы: У1.Отсутствие спроса на новые технологии производства;	Проведя анализ сильных сторон и угроз, видно, что вышеуказанные сильные стороны	Несвоевременное финансовое обеспечение и отсутствие спроса на

У2.Несвоевременное финансовое обеспечение..	проекта существенно понизит процент угроз исследования.	могут новые технологии производства могут привести к недостатку финансовых средств. Чтобы снизить уровень этих угроз работа должна быть востребована в настоящее время. Также, отсутствие прототипа научной разработки может привести к снижению спроса на данную технологию.
---	---	---

В результате SWOT-анализа показано, что на преимущества разрабатываемой технологии преобладают над ее недостатками. Данные недостатки, которые на данный момент на практике не устранены, но в теории уже есть возможности для их устранения. Результаты анализа учтены в дальнейшей научно-исследовательской разработке.

4.2 Планирование научно-исследовательских работ

4.2.1 Структура работ в рамках научного исследования

Планирование комплекса научно-исследовательских работ осуществляется в порядке:

- определение структуры работ в рамках научного исследования;
- определение количества исполнителей для каждой из работ;
- установление продолжительности работ;
- построение графика проведения научных исследований.

Для оптимизации работ удобно использовать классический метод линейного планирования и управления [28].

Результатом такого планирования является составление линейного графика выполнения всех работ. Порядок этапов работ и распределение исполнителей для данной научно-исследовательской работы, приведен в таблице 4.8.

Таблица 4.8 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Основные этапы	№ раб	Содержание работ	Должность исполнителя
Разработка технического задания	1	Составление и утверждение технического задания, утверждение плана-графика	Научный руководитель
	2	Календарное планирование выполнения ВКР	Инженер, научный руководитель
Выбор способа решения поставленной задачи	3	Обзор научной литературы	Инженер
	4	Выбор методов исследования	Инженер
Теоретические и экспериментальные исследования	5	Планирование эксперимента	Инженер, научный руководитель
	6	Подготовка образцов для эксперимента	Инженер
	7	Проведение эксперимента	Инженер
Обобщение и оценка результатов	8	Обработка полученных данных	Инженер
	9	Оценка правильности полученных результатов	Инженер, Научный руководитель
Оформление отчета по НИР (комплекта документации по ОКР)	10	Составление пояснительной записки	Инженер

4.2.2 Определение трудоемкости выполнения работ и разработка графика проведения

При проведении научных исследований основную часть стоимости разработки составляют трудовые затраты, поэтому определение трудоемкости проводимых работ является важным этапом составления сметы.

Для определения ожидаемого (среднего) значения трудоемкости использована следующая формула:

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

где $t_{\text{ож}i}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения i -ой работы, человеко-дни;

t_{mini} – минимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы, человеко-дни;

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

Зная величину ожидаемой трудоемкости, можно определить продолжительность каждой i -ой работы в рабочих днях T_{pi} , при этом учитывается параллельность выполнения работ разными исполнителями. Данный расчёт позволяет определить величину заработной платы.

$$T_{pi} = \frac{t_{\text{ож}i}}{Ч_i}, \quad (4.3)$$

где T_{pi} – продолжительность одной работы, рабочие дни;

$t_{\text{ож}i}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения одной работы, человеко-дни;

$Ч_i$ – численность исполнителей, выполняющих одновременно одну и ту же работу на данном этапе, чел.

Для перевода длительности каждого этапа из рабочих в календарные дни, необходимо воспользоваться формулой (4.4):

$$T_{ki.инж} = T_{pi} \cdot k_{кал}, \quad (4.4)$$

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

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

$k_{кал}$ – календарный коэффициент.

Календарный коэффициент определяется по формуле:

$$k_{кал.инж} = \frac{T_{кал}}{T_{кал} - T_{вых} - T_{пр}} = \frac{365}{365 - 104 - 14} = 1,48 \quad (4.5)$$

где $T_{кал}$ – общее количество календарных дней в году; $T_{вых}$ – общее количество выходных дней в году; $T_{пр}$ – общее количество праздничных дней в году.

Расчеты временных показателей проведения научного исследования обобщены в таблице 4.9.

Таблица 4.9 – Временные показатели проведения научного исследования

Название работы	Трудоёмкость работ						Длительнос ть работ в рабочих днях T_{pi}	Длительнос ть работ в календарны х днях T_{ki}
	t_{min} , чел-дни		t_{max} , чел- дни		$t_{ож\acute{e}}$, чел-дни			
	Исп.1	Исп.2	Исп.1	Исп.2	Исп.1	Исп.2		
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1. Составлени е и утверждение технического задания, утверждение плана-графика	3	-	5	-	2,8	-	3,8	6

2. Календарное планирование выполнения ВКР	1	2	4	4	2,2	2,8	2,5	4
3. Обзор научной литературы	-	5	-	10	-	7	7	10
4. Выбор методов исследования	-	4	-	6	-	4,8	4,8	7
5. Планирование эксперимента	1	5	4	8	2,2	6,2	4,2	6
6. Подготовка образцов для эксперимента	-	4	-	8	-	5,6	5,6	8
7. Проведение эксперимента	-	14	-	20	-	16,4	16,4	24
8. Обработка полученных данных	-	8	-	14	-	10,4	10,4	15
9. Оценка правильности полученных результатов	2	3	4	5	2,8	3,8	3,3	5
10. Составление пояснительной записки		6		12	-	8,4	8,4	12
Итого:	7	51	17	87	10	65,4	66,4	97

Примечание: Исп. 1 – научный руководитель, Исп. 2 – инженер.

На основе таблицы составлен календарный план-график выполнения проекта с использованием диаграммы Ганта (таблица 4.10).

Таблица 4.10 – Диаграмма Ганта

№	Вид работ	Исп	T_{ki} кал. дн.	Продолжительность работ											
				февр			март			апр			май		
				1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3
1	Составление и утверждение технического задания, утверждение плана-графика	Исп1	4												
2	Календарное планирование выполнения ВКР	Исп1 Исп2	4	 											
3	Обзор научной литературы	Исп2	11												
4	Выбор методов исследования	Исп2	6												
5	Планирование эксперимента	Исп1 Исп2	7			 									
6	Подготовка образцов для эксперимента	Исп2	9												
7	Проведение эксперимента	Исп2	25												
8	Обработка полученных данных	Исп2	18												
9	Оценка правильности полученных результатов	Исп1 Исп2	5								 				
10	Составление пояснительной записки	Исп2	13												

Примечание:

 – Исп. 1 (научный руководитель),  – Исп. 2 (инженер)

4.2.3 Бюджет научно-технического исследования

При планировании бюджета научно-технического исследования учитывались все виды расходов, связанных с его выполнением. В этой работе использовать следующую группировку затрат по следующим статьям:

- материальные затраты научно-исследовательской работы (НИР);
- затраты на специальное оборудование для экспериментальных работ;
- основная заработная плата исполнителей темы;

- дополнительная заработная плата исполнителей темы;
- отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления);
- накладные расходы НИР.

4.2.3.1 Расчет материальных затрат научно-технического исследования

Материальные затраты — это затраты организации на приобретение сырья и материалов для создания готовой продукции.

Данная часть включает затрат всех материалов, используемых при получении образца, выращенного кристалла NaCl Результаты расчета затрат представлены в таблице 4.11.

Таблица 4.11 – Затраты на получение образца.

Наименование статей	Единица измерения	Количество	Цена за ед., руб.	Итого затраты, руб.
Поваренная соль	кг	5	15	75
Дистиллированная вода	л	20	35	700
Итого:				775

4.2.3.2 Расчет амортизации специального оборудования

Расчет сводится к определению амортизационных отчислений, так как оборудование было приобретено до начала выполнения данной работы и эксплуатировалось ранее, поэтому при расчете затрат на оборудовании учитываем только рабочие дни по данной теме.

Расчет амортизации проводится следующим образом:

Норма амортизации: рассчитывается по формуле:

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

где n – срок полезного использования в количестве лет.

Амортизация оборудования рассчитывается по формуле:

$$A = \frac{H_A I}{12} \cdot m, \quad (4.7)$$

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

Таблица 4.12 – Затраты на оборудование

№ п/п	Наименование оборудования	Кол-во ед.	полезного использования	Время использования, мес.	H_A , %	Цена оборудования, руб.	Амортизация
1	Рентгеновский дифрактометр Shimadzu XRD 7000	1	10	0,25	10	2800000	5833
2	Вакуумный насос НВР-5ДМ	1	15	0,5	7	50000	139
Итого:		5972 руб.					

4.2.3.3 Основная заработная плата исполнителей темы

В данном разделе рассчитывается заработная плата инженера и руководителя, помимо этого необходимо рассчитать расходы по заработной плате, определяемые трудоемкостью проекта и действующей системой оклада [27].

Основная заработная плата $З_{осн}$ одного работника рассчитывается по следующей формуле:

$$З_{осн} = З_{он} \cdot T_p, \quad (4.8)$$

где $З_{он}$ – среднедневная заработная плата, руб.; T_p – продолжительность работ, выполняемых работником, раб.дн. (таблица 4.9).

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

Для шестидневной рабочей недели (рабочая неделя руководителя):

$$З_{он} = \frac{З_m \cdot M}{F_o} = \frac{51285 \cdot 10,3}{246} = 2147,3 \text{ руб.}, \quad (4.9)$$

где $З_m$ – месячный должностной оклад работника, руб.; F_o – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дней; M – количество месяцев работы без отпуска в течение года:

- при отпуске в 28 раб. дня – $M = 11,2$ месяца, 5-дневная рабочая неделя;
- при отпуске в 56 раб. дней – $M = 10,3$ месяца, 6-дневная рабочая неделя.

Для пятидневной рабочей недели (рабочая неделя инженера):

$$З_{он} = \frac{З_m \cdot M}{F_o} = \frac{33150 \cdot 11,2}{213} = 1743,1 \text{ руб.} \quad (4.10)$$

Должностной оклад работника за месяц:

- для руководителя:

$$З_m = З_{мс} \cdot (1 + k_{np} + k_o) k_p = 26300 \cdot (1 + 0,3 + 0,2) \cdot 1,3 = 51285 \text{ руб.} \quad (4.11)$$

- для инженера:

$$З_m = З_{мс} \cdot (1 + k_{np} + k_o) k_p = 17000 \cdot (1 + 0,3 + 0,2) \cdot 1,3 = 33150 \text{ руб.}, \quad (4.12)$$

где $З_{мс}$ – заработная плата, согласно тарифной ставке, руб.; k_{np} – премиальный коэффициент, равен 0,3; k_o – коэффициент доплат и надбавок, равен 0,2; k_p – районный коэффициент, равен 1,3 (для г. Томска).

Таблица 4.13 – Баланс рабочего времени исполнителей

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

Таблица 4.14 – Расчет основной заработной платы исполнителей

Исполнители НИ	$З_{мс}, руб$	$k_{пр}$	k_o	k_p	$З_{м}, руб$	$З_{он}, руб$	$T_p, раб.дн.$	$З_{осн}, руб$
Руководитель	26300	0,3	0,2	1,3	51285	2147,3	10	21473
Инженер	17000	0,3	0,2	1,3	33150	1743,1	65,4	113992,2
Итого:								135465,2

Дополнительная заработная плата определяется по формуле:

– для руководителя:

$$З_{дон} = k_{дон} \cdot З_{осн} = 0,15 \cdot 21473 = 3221 \text{ руб.} \quad (4.13)$$

– для инженера:

$$З_{дон} = k_{дон} \cdot З_{осн} = 0,15 \cdot 113992,2 = 17098,8 \text{ руб.} \quad (4.14)$$

где $k_{дон}$ – коэффициент дополнительной заработной платы (на стадии проектирования принимаем равным 0,15).

4.2.3.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

Отчисления во внебюджетные фонды определяется по формуле:

– для руководителя:

$$З_{внеб} = k_{внеб}(З_{осн} + З_{доп}) = 0,3 \cdot (21473 + 3221) = 7408,2 \text{ руб.} \quad (4.15)$$

– для инженера:

$$З_{внеб} = k_{внеб}(З_{осн} + З_{доп}) = 0,3 \cdot (113992,2 + 17098,4) = 39327,2 \text{ руб.}, \quad (4.16)$$

где $k_{внеб}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд ОМС и социальное страхование). Общая ставка взносов составляет в 2020 году – 30% (ст. 425, 426 НК РФ).

4.2.3.5 Накладные расходы

Накладные расходы включают в себя следующие расходы: печать, ксерокопирование материалов исследования, оплата услуг связи и т.д. Сумма 5 статьи затрат, рассчитанных выше, приведена в таблице ниже и используются для расчета накладных расходов.

Таблица 4.15 – Группировка затрат по статьям

Статьи					
1	2	3	4	5	6
Амортизация	Сырье, материалы	Основная заработная плата	Дополнительная заработная плата	Отчисления на социальные нужды	Итого без накладных расходов
5972	775	135465,2	20319,8	46735,4	209267,4

Величина накладных расходов определяется по формуле (4.16):

$$З_{накл} = (\text{сумма статей } 1 \div 5) \cdot k_{нр}, \quad (4.17)$$

где $k_{нр}$ – коэффициент, учитывающий накладные расходы. Величина коэффициента принимается равной 0,2.

На основании полученных данных по отдельным статьям затрат составляется калькуляция плановой себестоимости НИ «Исследование изотопной селективности процесса кристаллизации NaCl из водного раствора, находящегося в магнитном поле» по форме, приведенной в таблице 4.16.

Таблица 4.16 – Группировка затрат по статьям

№	Наименование статьи	Сумма, руб.	Примечание
		Текущий Проект	
1	Материальные затраты НИР	775	Пункт 4.2.3.1
2	Затраты на специальное оборудование	5972	Пункт 4.2.3.2
3	Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	135465,2	Пункт 4.2.3.3
4	Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	20319,8	Пункт 4.2.3.3
5	Отчисления во внебюджетные фонды	46735,4	Пункт 4.2.3.4
6	Накладные расходы	41853,5	Пункт 4.2.3.5
Бюджет затрат НИР		251120,9	Сумма ст. 1- 6

4.3 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования

Для определения эффективности исследования рассчитан интегральный показатель эффективности научного исследования путем определения интегральных показателей финансовой эффективности и ресурсоэффективности.

Интегральный финансовый показатель разработки рассчитывается как:

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i} = \frac{\Phi_{\text{pi}}}{\Phi_{\text{max}}}, \quad (4.18)$$

где $I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i}$ – интегральный финансовый показатель разработки;

Φ_{pi} – стоимость i -го варианта исполнения;

Φ_{max} – максимальная стоимость исполнения.

$\Phi_{\text{текущ.проект}} = 251120,9$ руб.

$$I_{\text{финр}}^{\text{тек.пр.}} = \frac{\Phi_{\text{тек.пр.}}}{\Phi_{\text{max}}} = \frac{251120,9}{251120,9} = 1,00;$$

Интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов выполнения НИР (I_{pi}) определен путем сравнительной оценки их характеристик, распределенных с учетом весового коэффициента каждого параметра (таблица 4.17).

Таблица 4.17 – Сравнительная оценка характеристик вариантов НИР

Объект исследования Критерии	Весовой коэффициент параметра	Текущий проект
1. Безопасность при использовании установки	0,15	4
2. Стабильность работы	0,2	4
3. Технические характеристики	0,2	5
4. Механические свойства	0,3	5
5. Материалоёмкость	0,15	5
ИТОГО	1	4,65

Расчет интегрального показателя для разрабатываемого проекта:

$$I_{p1} = 0,15 \cdot 4 + 0,2 \cdot 4 + 0,2 \cdot 5 + 0,3 \cdot 5 + 0,15 \cdot 5 = 4,65;$$

Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения разработки вычисляется на основании показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле:

$$I_{исп.i} = \frac{I_{p-исп.i}}{I_{финр}^{исп.i}}. \quad (4.19)$$

$$I_{исп.1} = \frac{4,65}{1,00} = 4,65,$$

Сравнение среднего интегрального показателя сопоставляемых вариантов не представляется возможным в связи с отсутствием аналогичных реализованных или находящихся на стадии исследования работ.

Выводы по разделу

В результате выполнения изначально сформулированных целей раздела, можно сделать следующие выводы:

1. В результате проведенного анализа не удалось оценить конкурентоспособность исследуемого метода в связи с отсутствием аналогичных существующих разработок.

2. При проведении планирования был разработан план-график выполнения этапов работ для руководителя и инженера, позволяющий оценить и спланировать рабочее время исполнителей. Были определены: общее количество календарных дней для выполнения работы – 76 дней, общее количество календарных дней, в течение которых работал инженер – 66 и общее количество календарных дней, в течение которых работал руководитель – 10;

3. Составлен бюджет проектирования, позволяющий оценить затраты на реализацию проекта, которые составляют 251120,9руб.

5 Социальная ответственность

Целью выполнения выпускной квалификационной работы (ВКР) является исследование изотопной селективности процесса кристаллизации NaCl из водного раствора, находящегося в магнитном поле.

В экспериментальной части магистерской диссертации была проведена серия из 11 экспериментов по выращиванию кристаллов NaCl при различных уровнях воздействия магнитного поля, источниками которого являлись постоянные магниты.

Выполнение ВКР проводилось в отделении ядерно-топливного цикла (ОЯТЦ) Инженерной школы ядерных технологий (ИЯТШ) Томского политехнического университета. Для выполнения экспериментальной части ВКР в качестве рабочего места использовался компьютерный стол с ЭВМ, соответствующее периферийное оборудование (монитор, клавиатура, мышь) и программное обеспечение (Microsoft Word, Microsoft Excel). Так же использовалось оборудование, предназначенное для работы с низким вакуумом (вакуумный насос, вакуумметр).

Целью раздела «Социальная ответственность» является анализ объектов исследования на предмет выявления основных техносферных опасностей и вредных воздействий, оценка степени воздействия их на человека.

Потенциальным пользователем результатов исследования является государственная корпорация по атомной энергии «Росатом».

5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

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

Основные положения по охране труда изложены в Трудовом кодексе Российской Федерации [29]. В этом документе указано, что охрана здоровья трудящихся, обеспечение безопасных условий труда, ликвидация

профессиональных заболеваний и производственного травматизма являются одной из главных забот государства.

Согласно Трудовому кодексу Российской Федерации каждый работник имеет право на:

- рабочее место, соответствующее требованиям охраны труда;
- обязательное социальное страхование от несчастных случаев на производстве и профессиональных заболеваний;
- получение достоверной информации от работодателя, соответствующих государственных органов и общественных организаций об условиях и охране труда на рабочем месте, о существующем риске повреждения здоровья, а также о мерах по защите от воздействия вредных и (или) опасных производственных факторов;
- отказ от выполнения работ в случае возникновения опасности для его жизни и здоровья вследствие нарушения требований охраны труда;
- обеспечение средствами индивидуальной и коллективной защиты в соответствии с требованиями охраны труда за счет средств работодателя;
- обучение безопасным методам и приемам труда за счет средств работодателя;
- личное участие или участие через своих представителей в рассмотрении вопросов, связанных с обеспечением безопасных условий труда на его рабочем месте, и в расследовании происшедшего с ним несчастного случая на производстве или профессионального заболевания;
- внеочередной медицинский осмотр в соответствии с медицинскими рекомендациями с сохранением за ним места работы (должности) и среднего заработка во время прохождения указанного медицинского осмотра;
- гарантии и компенсации, установленные в соответствии с настоящим кодексом, коллективным договором, соглашением, локальным нормативным актом, трудовым договором, если он занят на работах с вредными и (или) опасными условиями труда.

В трудовом кодексе Российской Федерации говорится, что нормальная продолжительность рабочего времени не может превышать 40 часов в неделю, работодатель обязан вести учет времени, отработанного каждым работником.

5.1.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя

Рабочее место при работе с ПК должно составлять не менее чем 6 м² [30]. Выполнение экспериментальной части ВКР проводилось в аудитории 001А учебного корпуса № 10 ТПУ. Общая площадь аудитории 220,6 м², по 110,3 м² на одного оператора ЭВМ, что соответствует гигиеническим требованиям при работе с ЭВМ. Пространство для ног должно соответствовать следующим параметрам: высота пространства для ног не менее 600 мм, расстояние сиденья до нижнего края рабочей поверхности не менее 150мм, а высота сиденья 420 мм [31].

Так же предусмотрены следующие требования к организации рабочего места пользователя ПЭВМ: конструкция рабочего стула (кресла) должна обеспечивать поддержание рациональной рабочей позы при работе на ПЭВМ позволять изменять позу с целью снижения статического напряжения мышц шейно-плечевой области и спины для предупреждения развития утомления. Тип рабочего стула (кресла) следует выбирать с учетом роста пользователя, характера и продолжительности работы с ПЭВМ. Рабочий стул (кресло) должен быть подъемно-поворотным, регулируемым по высоте и углам наклона сиденья и спинки, а также расстоянию спинки от переднего края сиденья, при этом регулировка каждого параметра должна быть независимой, легко осуществляемой и иметь надежную фиксацию [32].

5.2 Производственная безопасность

Научно-исследовательская работа проводилась в отделении ядерно-топливного цикла. Исследования велись на ПЭВМ, а так же использовалась экспериментальная установка, включающая в себя: вакуумный насос, вакуумметр (механический).

В данном пункте анализируются вредные и опасные факторы, которые могут возникать при проведении исследований в лаборатории, при разработке или эксплуатации проектируемого решения.

5.2.1 Анализ опасных и вредных производственных факторов

5.2.1.1 Отклонение показателей микроклимата

Санитарные правила и нормы СанПиН 2.2.4.548-96 «Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений» предназначены для предотвращения неблагоприятного воздействия микроклимата рабочих мест, производственных помещений на самочувствие, функциональное состояние, работоспособность и здоровье человека [33].

Микроклимат производственных помещений и рабочей зоны должен не зависеть от состояния природных метеорологических факторов, и формировать подходящие климатические условия, безопасные для персонала и наиболее благоприятные для выполнения работ.

Оптимальные нормы температуры, относительной влажности и скорости движения воздуха производственных помещений для работ, производимых сидя и не требующих систематического физического напряжения (категория Ia), приведены в табл. 5.1, в соответствии с СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 и [34].

Таблица 5.1 – Оптимальные величины показателей микроклимата

Период года	Температура, °С	Температура поверхностей, °С	Относительная влажность, %	Скорость движения воздуха, м/с
Холодный	21-23	20-24	40-60	0,1
Тёплый	22-24	21-25	40-60	0,1

Для поддержания допустимых величины показателей климатических условий рабочей зоны необходимо конструирование специального технического помещения. В холодный период года – отопление, вытяжная вентиляция, средства индивидуальной защиты от охлаждения, а в теплый период – естественная и приточная вентиляции поддерживают температуру воздуха на рабочих местах.

5.2.1.2 Недостаточная освещенность

Источниками света могут быть как естественные, так и искусственные объекты. Естественным источником в помещении служит солнце, искусственными являются электрические лампочки. При длительной работе в условиях недостаточной освещенности и при нарушении других параметров световой среды зрительное восприятие снижается, развивается близорукость, болезнь глаз, появляются головные боли.

По нормативу [30] освещенность на поверхности стола в зоне размещения рабочего документа должна быть 300-500 лк. Освещение не должно создавать бликов на поверхности экрана. Освещенность поверхности экрана не должна быть более 300 лк.

Яркость светильников общего освещения в зоне углов излучения от 50° до 90° с вертикалью в продольной и поперечной плоскостях должна составлять не более 200 кд/м, защитный угол светильников должен быть не менее 40°. Коэффициент запаса (K_3) для осветительных установок общего освещения должен приниматься равным 1,4. Коэффициент пульсации не должен превышать 5%.

5.2.1.3 Повышенный уровень шума

Основным источником шума на испытательной площадке является вакуумный насос.

Повышенный шум на рабочем месте оказывает вредное влияние на организм работника в целом, вызывая неблагоприятные изменения в его внутренних органах и нервной системе, способствуя развитию утомления, снижению работоспособности, внимательности и производительности труда, изменениям в сердечно-сосудистой системе и появлению общих и профессиональных заболеваний (тугоухость, неврит слухового нерва и др.), а также производственный травматизм.

Согласно санитарным нормам СН 2.2.4/2.1.8.562-96 предельно допустимый уровень звука на рабочем месте для трудовой деятельности – 65 дБ [35].

Для защиты от вредного воздействия шума во время испытания применяются защитные противошумные наушники.

5.2.1.4 Повышенный уровень электромагнитных излучений

Основное рабочее оборудование – персональный компьютер, является источником электромагнитного излучения. Как и шум, электромагнитное поле своим воздействием может быть причиной учащенного пульса, дыхания, повышения артериального давления, возникновения головных болей, ослабления внимания и замедления реакции, что снижает общую работоспособность человека. Электромагнитное поле, создаваемое персональным компьютером, имеет сложный спектральный состав в диапазоне частот от 0 Гц до 1000 МГц, и в том числе мощность экспозиционной дозы мягкого рентгеновского излучения в любой точке на расстоянии 0,05 м от экрана при любых положениях ПК не должна превышать 100 мкР/ч [30].

5.2.1.5 Поражение электрическим током

Знание допустимых для человека значений тока и напряжения позволяет правильно оценить опасность поражения и определить требования к защитным мерам от поражения электрическим током.

ГОСТ 12.1.038-82 устанавливает предельно допустимые уровни напряжений прикосновения и токов, протекающих через тело человека. Под напряжением прикосновения понимается напряжение между двумя точками цепи тока, которых одновременно касается человек. Нормы предназначены для проектирования способов и средств защиты от поражения электрическим током людей при их взаимодействии с электроустановками. Они соответствуют прохождению тока через тело человека по пути рука-рука или рука-ноги [36].

Стандарт предусматривает нормы для электроустановок при нормальном (неаварийном) режиме их работы, а также при аварийных режимах производственных и бытовых электроустановок.

Значения напряжения прикосновения и силы тока, протекающего через тело человека при нормальном (неаварийном) режиме работы электроустановки, не должны превышать значений, приведенных в табл. 5.2.

Таблица 5.2. Предельно допустимые значения напряжения соприкосновения и силы тока

Род и частота тока	Наибольшие допустимые значение	
	U_{np} , В	I_h , мА
Переменный, 50 Гц	2	0,3
Переменный, 400 Гц	3	0,4
Постоянный	8	1,0

Для лиц, выполняющих работу в условиях высокой температуры и влажности (относительная влажность больше 75%), эти нормы должны быть уменьшены в три раза.

5.2.2 Обоснование мероприятий по защите исследователя от действия опасных и вредных факторов

5.2.2.1 Требования к помещениям для работы с ПЭВМ

В соответствии с [30] помещения для эксплуатации ПЭВМ должны иметь естественное и искусственное освещение. Площадь одного рабочего места пользователя ПЭВМ с видеодисплейным терминалом (ВДТ) на базе электронно-лучевой трубки (ЭЛТ) должна составлять не менее 6 м², а для ВДТ на базе плоского дискретного экрана (жидкокристаллический, плазменный) 4,5 м².

5.2.3.2 Микроклимат

Для обеспечения установленных норм микроклиматических параметров и чистоты воздуха на рабочих местах и в помещениях применяют вентиляцию. Общеобменная вентиляция используется для обеспечения в помещениях соответствующего микроклимата. Периодически должен

вестись контроль влажности воздуха. В летнее время при высокой уличной температуре должны использоваться системы кондиционирования.

Радиаторы должны устанавливаться в нишах, прикрытых деревянными или металлическими решетками. При этом температура на поверхности нагревательных приборов не должна превышать 95 °С, чтобы исключить пригорание пыли [37].

5.2.3.3 Недостаточная освещенность рабочей зоны

Рабочие столы следует размещать таким образом, чтобы ВДТ были ориентированы боковой стороной к световым проемам, чтобы естественный свет падал преимущественно слева. Также как средство защиты для минимизации воздействия фактора следует установка местного освещения из-за недостаточной освещенности, оконные проемы должны быть оборудованы регулируемыми устройствами типа: жалюзи, занавесей, внешних козырьков.

Если помещение не соответствует вышеописанным нормам, то это влечет за собой ухудшение здоровья рабочих и как следствие ухудшение рабочего процесса.

5.2.3.4 Повышенный уровень шума

В исследовательских аудиториях имеют место шумы различного рода, которые генерируются как внутренними, так и внешними источниками шумов. В рассматриваемом случае внутренними источниками шумов являются рабочее оборудование, а именно персональный компьютер, принтер, вентиляционная система, а также вакуумный насос. При возможном превышении предельно допустимого уровня (ПДУ) достаточно использовать в помещении звукопоглощающие материалы (звукопоглощающая облицовка стен и потолка, оконные шторы) [38]. Для уменьшения шума, проникающего снаружи помещения, следует установить уплотнения по периметру притворов дверей и окон.

5.2.3.5 Электромагнитные излучения (ЭМИ)

При возможном превышении ПДУ возможны следующие меры защиты: увеличение расстояния между источником ЭМИ и рабочей зоной, установка отражающих или поглощающих экранов, конструктивное совершенствование оборудования с целью снижения используемых уровней ЭМИ, общей потребляемой и излучаемой мощности оборудования.

5.2.3.6 Поражение электрическим током

Степень опасного воздействия на человека электрического тока зависит от рода и величины напряжения и тока, частоты электрического тока, пути прохождения тока через тело человека, продолжительности воздействия на организм человека, условий внешней среды.

Основными мероприятиями по защите от поражения электрическим током являются:

- обеспечение недоступности токоведущих частей путём использования изоляции в корпусах оборудования;
- применение средств коллективной защиты от поражения электрическим током;
- использование защитного заземления, защитного зануления, защитного отключения;
- использование устройств бесперебойного питания [39].

Технические способы и средства применяют отдельно или в сочетании друг с другом так, чтобы обеспечивалась оптимальная защита.

Организационными мероприятиями по электробезопасности являются периодические и внеплановые инструктажи. Периодический инструктаж проводится всему неэлектротехническому персоналу, выполняющему следующие работы: включение и отключение электроприборов, уборка помещений вблизи электрощитов, розеток и выключателей и т. д. Весь неэлектротехнический персонал должен быть аттестован на первую квалификационную группу по электробезопасности. Периодический инструктаж проводится не менее одного раза в год.

Внеплановый инструктаж проводится руководителем подразделения при введении в эксплуатацию нового технического электрооборудования.

5.3 Экологическая безопасность

В данном подразделе рассматривается характер воздействия проектируемого решения на окружающую среду. Выявляются предполагаемые источники загрязнения окружающей среды, возникающие в результате реализации предлагаемых в ВКР решений.

Во время работы вакуумный насос не выделяет каких-либо вредных веществ, следственно не наносит вреда окружающей среде. С точки зрения влияния на окружающую среду можно рассмотреть влияние серверного оборудования при его утилизации.

Большинство компьютерной техники содержит бериллий, кадмий, мышьяк, поливинилхлорид, ртуть, свинец, фталаты, огнезащитные составы на основе брома и редкоземельные минералы. Это очень вредные вещества, которые не должны попадать на свалку после истечения срока использования, а должны правильно утилизироваться.

Утилизация компьютерного оборудования осуществляется по специально разработанной схеме, которая должна соблюдаться в организациях:

- На первом этапе необходимо создать комиссию, задача которой заключается в принятии решений по списанию морально устаревшей или не рабочей техники, каждый образец рассматривается с технической точки зрения.
- Разрабатывается приказ о списании устройств. Для проведения экспертизы привлекается квалифицированное стороннее лицо или организация.
- Составляется акт утилизации, основанного на результатах технического анализа, который подтверждает негодность оборудования для дальнейшего применения.

- Формируется приказ на утилизацию. Все сопутствующие расходы должны отображаться в бухгалтерии.

- Утилизацию оргтехники обязательно должна осуществлять специализированная фирма.

- Получается специальная декларация официальной формы, которая подтвердит успешность уничтожения электронного мусора.

После оформления всех необходимых документов, компьютерная техника вывозится со склада на перерабатывающую фабрику. Все полученные в ходе переработки материалы вторично используются в различных производственных процессах. [40].

5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

Пожар, из-за непосредственной связи с техническими объектами, классифицируют как непреднамеренную чрезвычайную ситуацию техногенного характера .

Пожаробезопасность в производственном помещении направлена на сохранение материальных ценностей, жизни и здоровья людей от неконтролируемого процесса горения. Для определения способов осуществления пожаробезопасности необходимо определить категории помещений определяются, исходя из вида находящихся в помещениях горючих веществ и материалов, их количества и пожароопасных свойств, а также, исходя из объемно-планировочных решений и помещений и характеристик проводимых в них технологических процессов [36]. Аудитория 001Б 10 корпуса относится к классу Д – пониженная пожароопасность, так как в помещении находятся негорючие вещества и материалы в холодном состоянии.

Помещение должно быть оснащено системой с дымовыми извещателями. Сигналы извещателей включают систему протоколирования информации, формируют управляющую систему тревоги и систему оповещения о пожаре для своевременной эвакуации людей.

Выбор типа и расчет необходимого числа огнетушителей производится в зависимости от их огнетушащей способности. Аудитории подходит класс А (пожар твердых веществ) и класс Е (горение электроустановок) [41].

Основную опасность представляет возгорание. Пожар в рабочем помещении может возникнуть вследствие причин неэлектрического и электрического характера.

К причинам неэлектрического характера относятся халатное и неосторожное обращение с огнём. К причинам электрического характера относятся: короткое замыкание; перегрузка проводов; искрение; статическое электричество.

Режим короткого замыкания – появление в результате резкого возрастания силы тока, электрических искр, частиц расплавленного металла, электрической дуги, открытого огня, воспламенившейся изоляции. Причины возникновения короткого замыкания: ошибки при проектировании; старение изоляции; увлажнение изоляции; механические перегрузки.

Пожарная опасность при перегрузках – чрезмерное нагревание отдельных элементов, которое может происходить при ошибках проектирования в случае длительного прохождения тока, превышающего номинальное значение.

Наиболее вероятными из чрезвычайных ситуаций являются возникновения пожара и взрыва, которые могут возникнуть из-за неисправности электрооборудования. Основные причины возникновения пожара: Воспламенение изоляции электрических проводов, генератора, трансформаторов, в результате длительного воздействия повышенной нагрузки, короткого замыкания или аварийных ситуаций.

Исходя из [42] пожарная профилактика обеспечивается: системой предотвращения пожара; системой противопожарной защиты; организационно-техническими мероприятиями. К мерам предотвращения пожара относятся: применение средств защитного отключения возможных

источников загорания (защитного зануления); применение искробезопасного оборудования; выполнение правил (инструкций) по пожарной безопасности.

К мерам противопожарной защиты относятся: применение пожарных извещателей; средств коллективной и индивидуальной защиты от факторов пожара; системы автоматической пожарной сигнализации; порошковых или углекислотных огнетушителей.

При обнаружении загорания рабочий немедленно сообщает по телефонам 01, 101 или 112 в пожарную охрану, сообщает руководителю, приступают к эвакуации людей и материальных ценностей. Тушение пожара организуется первичными средствами с момента обнаружения пожара. Пострадавшим при пожаре обеспечивается скорая медицинская помощь.

Выводы по разделу

При выполнении раздела «Социальная ответственность» магистерской диссертации были рассмотрены специальные правовые нормы трудового законодательства и организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя, которые регулируются трудовым кодексом Российской Федерации и СанПиН 2.2.2/2.4.1.1340-03. Проведен анализ основных вредных и опасных факторов, среди которых: отклонение показателей микроклимата, превышение уровня шума, повышенный уровень электромагнитного излучения, недостаточная освещенность рабочей зоны, поражение электрическим током. Проведен анализ влияния процесса исследования на окружающую среду, а также рассмотрены мероприятия по предотвращению наиболее вероятной ЧС и порядок действий в случае возникновения пожара.

Список использованных источников

1. Бучаченко А. Л. Магнитные и спиновые эффекты в химических реакциях / А. Л. Бучаченко, Р. З. Сагдеев, К. М. Салихов; под ред. Ю. Н. Молина. — Новосибирск: Наука, 1978. — 297 с.
2. Баранов В.Ю. Изотопы. Свойства, получение, применение М.: ИздАТ, 2000. 703 с.
3. Hoering T., Parker P. The geochemistry of the stable isotopes of chlorine // *Geochimica et Cosmochimica Acta*. — 1961. — Vol. 23, no. 3/4. — Pp. 186–199.
4. Константинов Б.П., Бакулин Е.А. Разделение изотопов хлора в водных растворах LiCl, NaCl и HCl // *Журнал физической химии*. — 1965. — Т. 39, 3. — С. 592–596.
5. Сликтер Ч. Основы теории магнитного резонанса. - М.: Мир, 1981. - 448 с.
6. Трошев С.А. Структура и динамика пограничного слоя в процессе роста кристаллов. Автореферат дисс. канд. геолого-минералогических наук. Институт геологии Коми научного центра Уральского отделения РАН. Сыктывкар, 1994.
7. Фролов Ю.Г. Курс коллоидной химии. Поверхностные явления и дисперсные системы - 2-е изд., перераб. и доп: Учебник для вузов. - М.: Химия, 1983.-464 с.
8. Селигман Г. Изотопы в повседневной жизни / МАГАТЭ.
9. 1991.Myshkin V. F. , Bespala 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
10. Булыжев Е.М., Меньшов Е.Н. Математическая теория магнитной коагуляции ферромагнитных частиц в слабозагрязненных сточных водах // *Известия Самарского научного центра РАН*. 2014. Т. 16, № 1. - С.247-254

11. Smirnov V.N. Determination of the rate constants for the reaction $\text{Fe} + \text{O}_2 = \text{FeO} + \text{O}$ in the forward and reverse directions // Kinet. Catal. 2011 V. 52. P. 166 – 169.
12. И.А. Семиохин, А.К. Лынькова, А.Г. Серенкова // Вестник МГУ, Сер. Хим. 1960, N5, с.29.
13. Бочкарев А.В., Трефилова А.Н., Бобров М.Ф. Расчет отношений приведенных статистических сумм по состояниям изотопных форм (β -факторов) для ионных кристаллов // Журнал физической химии. — 2003. — Т. 77, 8. — С. 1351–1359.
14. Бочкарев А.В., Трефилова А.Н., Смарицын С.Н. Фракционирование изотопов хлора в процессе осаждения галита из раствора. — В сб.: VIII Всероссийская (Международная) научная конференция «Физико-химические процессы при селекции атомов и молекул». 6–10 октября 2003г., г.Звенигород. Сборник докладов. М., ЦНИИ Атоминформ; г.Троицк, ГНЦ РФ ТРИНИТИ, С.222–227.
15. Мелихов И.В., Меркулова М.С. Сокристаллизация. — М.: Химия, 1975. — 280 с.
16. Al-Jibbouri S., Ulrich J. The growth and dissolution of sodium chloride in a fluidized bed crystallizer // Journal of Crystal Growth. — 2002. — Vol. 234, no. 1. — Pp. 237–246.
17. Зельдович Я.Б., Бучаченко А. Л., Франкевич Е. Л. Магнитно-спиновые эффекты в химии и молекулярной физике // УФН 155 (1) – 1988, - С.3-45. Бучаченко А.Л.. Химическая поляризация электронов и ядер. – М.; Наука, 1974, 245 с.
18. Асхабов А.М. Количественная оценка кинетических параметров и механизмов роста кристаллов. — Сыктывкар: Геопринт, 1996. — 28 с.
19. Kaufmann R.S., Long A., Bentley H.W., Davis S.N. Natural chlorine isotope variations // Nature. — 1984. — Vol. 309, no. 5966. — Pp. 338–340.
20. Бочкарев А.В., Трефилова А.Н., Бобров М.Ф., Цурков Н.А. Разделение изотопов в процессе роста ионных кристаллов из раствора //

Журнал физической химии. — 2003. — Т. 77, 11. — С. 2075–2080.

21. Мурин А.Н., Лурье Б.Г. Диффузия меченых атомов и проводимость в ионных кристаллах. — Л.: Изд. Лен.университета, 1967. — 100 с.

22. Белоусов А. П., Белоусов П. Я., Метод измерения дисперсного состава и локального газосодержания газожидкостных потоков // автоматрия, - 2008, том 44, №2, С. 50-55.

23. Анисимов М.П. Нуклеация: теория и эксперимент // Успехи химии 72 (7) 2003. С. 664-705.

24. Павлов В. А., Скрипов В. П. Кинетика спонтанного зародышеобразования в сильно перегретых жидкостях // ТВТ. — 1976. — 8. — С. 579-585.

25. Амелин А.Г. Теоретические основы образования тумана при конденсации пара. — М.: Химия, 1972. — 304 с.

26. Горелик А.Г., Амитин А.В. Десублимация в химической промышленности. - М.: Химия, 1986. - 272 с., 42.Русанов А.И. // ДАН СССР. - 1981. - Т. 261. - № 3. —700с.

27. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение: учебно-методическое пособие / Н.А. Гаврикова, Л.Р. Тухватулина, И.Г. Видяев, Г.Н. Серикова, Н.В. Шапаваова. —Томск: НИ ТПУ, 2014. —73 с.

28. Скворцов Ю.В. Организационно-экономические вопросы в дипломном проектировании: Учебное пособие. —М.: Высшая школа, 2006. — 399 с.

29. Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197;

30. СанПиН 2.2.2/2.4.1.1340-03. «Гигиеническими требованиями к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы»; утв. постановлением Госкомсанэпиднадзора РФ от 15.06.2003 г.;

31. ГОСТ 12.0.003-2015. Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Опасные и вредные производственные факторы. Классификация. М.: Стандартинформ, 2016;
32. ГОСТ 12.0.003-74. Опасные и вредные производственные факторы. Классификация – М.: ИПК Издательство стандартов, 1992. – 4 с.;
33. СанПиН 2.2.4.548-96 «Гигиеническими требованиями к микроклимату производственных помещений»; утв. постановлением Госкомсанэпиднадзора РФ от 13.06.2003 г.;
34. ГОСТ 12.1.003-83. Система стандартов безопасности труда. Шум. Общие требования безопасности. – М.: Стандартинформ, 2008. – 11с.;
35. ГОСТ 12.1.038-82 ССБТ. Электробезопасность. Предельно допустимые уровни напряжений прикосновения и токов.
36. Теоретические основы безопасности жизнедеятельности / Р. И. Айзман, С. В. Петров, В. М. Ширшова. — Новосибирск: АРТА, 2011. — 208 с. — (Серия «Безопасность жизнедеятельности»);
37. СП 12.13130.2009 Определение категорий помещений, зданий и наружных установок по взрывопожарной и пожарной опасности. – М.: МЧС России, 2009. – 35 с.;
38. СП 60.13330.2016. Отопление, вентиляция и кондиционирование воздуха.– М.: Минрегион России, 2016;
39. СН 2.2.4/2.1.8.562-96. «Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории жилой застройки»; утв. постановлением Госкомсанэпиднадзора РФ от 31.10.1996 г.;
40. ГОСТ 12.1.019-2017 ССБТ. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты.
41. Федеральный закон от 22.07.2013 г. №123 – ФЗ, Технический регламент о требованиях пожарной безопасности.
42. Федеральный закон «Об отходах производства и потребления» от 24.06.1998 N 89-ФЗ;

43. ГОСТ 12.1.004-91, ССБТ «Пожарная безопасность. Общие требования». – М.: МВД России, 1992. – 25 с.

Приложение А
(обязательное)

Research of the isotope selectivity of the crystallization of NaCl from an aqueous solution in a magnetic field

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0AM81	Семоненко Александр Александрович		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Мышкин В.Ф.	д.ф.-м.н.		

Консультант-лингвист отделения иностранных языков ШБИП

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель	Смирнова У.А.			

1 Literature review

1.1 Parameters of the lattice of crystals enriched in isotopes

During studying the structure of solids, it was found that a significant change in the lattice parameter is caused by the replacement of hydrogen with deuterium. When replacing hydrogen with deuterium in hydrogen-containing compounds, the sign of the isotopic effect usually corresponds to a decrease in the lattice parameter. However, in some cases the isotope effect turned out to be the opposite. In some substances that experience polymorphic transformations when the temperature changes, isotopic substitution leads to a shift in the temperature of these transformations, and sometimes to a change in the nature of such a transformation. The temperature dependence of the isotopic effect in the value of the crystal lattice parameters is related to the difference in the linear expansion coefficients of compounds containing hydrogen or deuterium. In most cases, deuteration leads to an increase in expansion coefficients.

Using X-ray diffraction studies of ice from light and heavy water, it was first tried to detect differences in the structures of solids that differ in isotopic composition.

The lattice parameters of isotopic modifications of lithium hydride LiH and LiD were compared. Hydrogen in the ice structure is in a group of atoms that form a water molecule. Replacing the isotope by causing small changes in the distance between the nuclei within such a group practically does not affect the distance between the molecules. Unlike ice, H (D) atoms in lithium hydride occupy a given position at the lattice sites. Therefore, the replacement of H-D isotopes leads to a more noticeable change in unit cell size than in ice [4].

An even greater change in the lattice parameters when replacing hydrogen with deuterium occurs in sulfur and selenium hydrides, and in hafnium hydride.

In metal-like deuteride and hydride of uranium and lanthanum, a slightly smaller difference in molar volumes was found.

The first isotopes of metals that were studied by X-ray diffraction analysis were lithium isotopes: ^6Li and ^7Li . When processing x-ray diffraction patterns of

these isotopes recorded at various temperatures, it turned out that the lattice parameters of both isotopes at room temperature do not differ within the measurement accuracy. At a temperature of 4.2 K, the difference in the lattice parameters of the isotopes is: Li^6 - 3.480 Å, Li^7 - 3.478 Å.

One of the causes of isotopic effects in the lattice parameters of solids is the difference in the zero-point vibrations. In a crystal lattice, the equilibrium distance between two neighboring particles is generally determined by the position of the minimum of the curve of potential energy of interaction between these particles. Even with absolute zero, the particle at the bottom of the potential well is not at rest, but experiences zero vibrations. Taking into account zero-point vibrations, which are exclusively a quantum effect, leads to the fact that the distance between interacting particles varies depending on their mass. The greater the energy of the oscillating particles, the greater the average distance between these particles due to the asymmetry of the potential curve. The frequency of zero vibrations is greater for atoms of “light” elements than for “heavy” ones, since energy is inversely proportional to the root of the mass. Taking into account zero vibrations allows us to conclude that at absolute zero the molar volume (lattice parameter) of the “heavy” isotope should be less than that of the “light” one. The described regularities occur on lattices with simple Van der Waals binding forces (isotopes of hydrogen, neon, helium) [5].

1.2 Methods of growing crystals

1.2.1 Crystal growth from solutions

To start crystallization from a solution, it is necessary to create a critical coefficient of supersaturation. The supersaturation coefficient is equal to the ratio of salt concentration to the concentration at which crystallization begins under equilibrium conditions. The following crystallization methods are used:

1. Isohydric crystallization;
2. Isothermal crystallization;
3. Crystallization by salting out;
4. Crystallization by freezing;

5. Crystallization as a result of chemical reactions;
6. Growing crystals from melts.

1.2.2 Isohydric crystallization

With decreasing temperature, the solubility of most substances decreases. Therefore, when the hot solutions are cooled, a supersaturation occurs, which causes the precipitation of crystals.

In the solubility diagram (Fig. 1.1), the cooling of a hot unsaturated solution with temperature t_1 and concentration C_1 (point A) to a final temperature t_2 can be conditionally depicted by the AC line that intersects the solubility curve at point B, which characterizes the saturated state of the solution at temperature t_1' . If the crystallization of a solution begins only after it is cooled to a temperature t_2 , at which complete removal of supersaturation ends, the crystallization process is shown by the CD line, and the final state of the solution is shown by point D on the solubility curve corresponding to the equilibrium concentration C_2 .

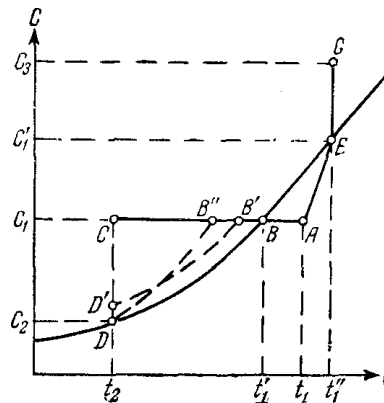


Figure 1.1 - Solubility diagram

In the event that no noticeable supersaturation is formed in the solution, the process of its cooling and crystallization will be represented by the ABD line. Depending on the ability of the solution to form a supersaturation and its cooling rate, real processes can also occur along the lines AB'D'D or AB''D [6].

1.2.3 Isothermal crystallization

Due to the partial removal of the solvent during evaporation of the solution at a constant boiling point, it is possible to transfer the saturated solution, characterized by point A in Fig. 1.1, into a supersaturated state.

The change in the concentration of the initial unsaturated solution during evaporation will be represented by the AEG line, which shows that the boiling point increases with increasing concentration of the solution. Only after the transition of the solution to a saturated state at a concentration of C_1' (point E) does the temperature no longer change and remains equal to t_1'' .

The graph of the crystallization process shown in Fig.1.1 along the AEG line in the solubility diagram is conditional, and point G characterizes only the total supersaturation of the solution, which can be obtained by removing a certain part of the solvent from it. In most cases, crystallization of the solution during evaporation proceeds at a constant concentration very close to the saturation state for a given temperature t_1'' . Crystallization by cooling becomes ineffective when the solubility of the salt remains almost unchanged with temperature. In such cases, isothermal crystallization is used. The solubility curve, for example, NaCl, shows that when a saturated solution is cooled, only a very small amount of salt precipitates from it, therefore, NaCl crystallization is always carried out by evaporation.

1.2.4 Salting out crystallization

It is possible to cause a supersaturation of the solution and crystallization if a substance is added to the solution that decreases the solubility of the released salt. Substances added to the solution, as a rule, have the same ion with the crystallized salt. It is better to introduce the salting out substance into the solution in the form of a saturated solution, since crystallizing salt may precipitate on it due to the addition of a solid salting out agent, which will slow down or even stop the dissolution of the precipitant.

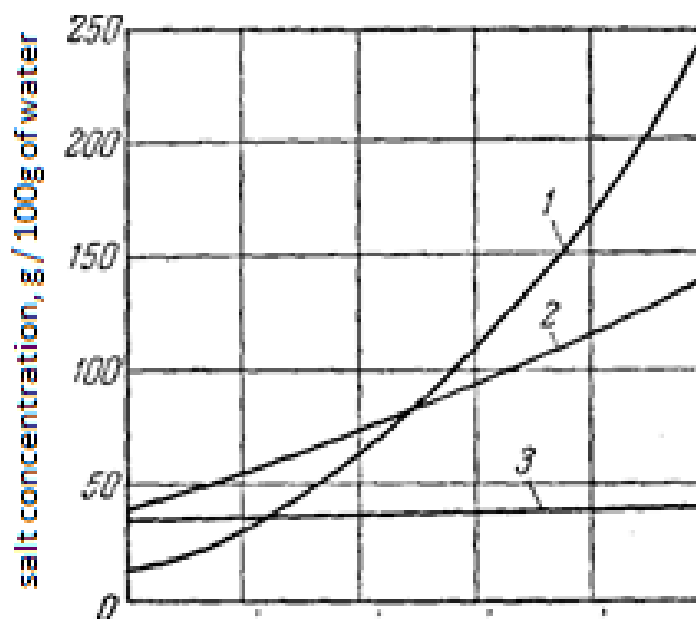


Figure 1.2 - Graphs of solubility in water: 1 - KNO_3 , 2 - $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$ and 3 - NaCl .

The relatively high cost of organic solvents, the regeneration of which requires additional operations (for example, distillation and distillation), is a disadvantage of this method and is associated with some loss of reagent.

1.2.5 Crystallization by freezing

This method is mainly used to isolate individual components from natural brines - brines of salt lakes and sea bays. When cooling brines of salt lakes from saturated brines, sodium chloride dihydrate $\text{NaCl} \cdot (\text{H}_2\text{O})_2$ freezes. Freezing it from brine is one of the methods for obtaining pure table salt, since the dihydrate does not contain impurities.

1.2.6 Crystallization from a chemical reaction

Due to the supersaturation resulting from chemical reactions, it is possible to isolate the crystalline phase from the solution. This method is used in a number of chemical industries and in analytical practice.

When treating wastewater and natural waters, crystallization of sulfates, metal hydroxides with insignificant solubility, and carbonates are most often carried out. The completeness of the deposition of impurities is mainly due to the use of sparingly soluble compounds in the crystallization treatment. It should be

noted that under certain conditions, residual supersaturations during crystallization of sparingly soluble compounds can be significant. This is due to the fact that such substances are capable of forming stable supersaturated solutions.

1.2.7 Crystal growth from melts

Today, more than half of technically important crystals are grown from melt. These methods are used to grow elementary semiconductors and metals, oxides, halides, chalcogenides, tungstates, vanadates, niobates and other substances. In some cases, single crystals are grown from the melt, which contain five or more components. The presence of alternative methods of growing crystals from a melt allows, based on a comparative analysis of their main technological characteristics, to choose one or another method for producing crystals with various properties.

Substances melting without decomposition, without polymorphic transitions and characterized by low chemical activity, are most suitable for growing from a melt. During crystallization from a melt, it is necessary to take into account the processes affecting the composition of the melt (thermal dissociation, evaporation, interaction of the melt with the environment), processes at the crystallization front, heat transfer processes in the crystal and melt, mass transfer processes (impurity transfer due to convection and diffusion in the melt) [7].

Developed in 1918, the Czochralski method is most widely used in industry for the production of semiconductor and other single crystals. Compared to other methods, the advantage of the melt pulling method is that the crystal grows in free space without contact with the walls of the crucible, while changing the diameter of the growing crystal and visually controlling the growth can be quite easy. At present, many semiconductor (silicon, gallium arsenide, indium phosphide and arsenide, etc.) and dielectric materials, synthetic crystals of precious stones are grown by melt drawing methods.

The properties of the grown material and the requirements for physicochemical properties and geometric parameters determine the technological features of the process behavior [8-10].

In the general case, the growth of single crystals of semiconductors by the Czochralski method can be carried out both in vacuum and in an atmosphere of an inert gas under different pressures. The Czochralski method can be carried out both containerless and in container versions.

A significant chemical heterogeneity of the grown crystals, which is expressed in a monotonic change in the composition of successive layers of the crystal along the direction of growth, is the most significant drawback of the Czochralski method.

1.3 The Influence of the magnetic field on the growth of a crystal from aqueous solutions

It was established that upon crystallization of organic compounds and inorganic salts from aqueous solutions under the action of a magnetic field, the number of nuclei increases several times, increasing in proportion to the magnetic field strength [11]. It is also worth noting that a constant magnetic field affects the formation of crystal formations. From the moment of the appearance of crystalline centers, the crystals are oriented in magnetic fields and remain in the process of crystal growth until the formation of polycrystalline aggregates. Thus, the orienting effect of the magnetic field manifests itself in the system at completely different levels of dispersion: macroscopic, molecular and atomic.

The observed effect of the magnetic field on the kinetics of the crystallization process, according to many researchers, is associated either with a decrease in the work of nucleation or with structural changes in the initial phase resulting from the orienting action of the magnetic field.

It was also found that in the low-temperature region the magnetic field reduces the activation energy of supercooled betol (ether). The decrease in the activation energy approximately corresponds to the magnitude of the work of rotation of the molecule in a magnetic field, and the exponential term of the nucleation rate in the formula $\exp(-U / kT)$ turns out to be larger than during crystallization under ordinary conditions. In the high-temperature region for the same betol, the action of a magnetic field gives the opposite effect [12-14].

After magnetic treatment of aqueous solutions of salts, their crystallization proceeds differently. The influence of the magnetic field in this case is explained by a change in the structure of solutions and hydrated layers around the particles forming the crystal [15].

1.4 Methods of analysis of isotope modified materials

An analysis of the isotopic composition is used to determine the content of different isotopes in an element or its compound. Analysis of mixtures of radioactive isotopes is a fairly simple task, which is solved using the methods of radiometry and nuclear spectroscopy. Stable isotope analysis is a more complex problem. The analysis is necessary to control the separation and concentration of isotopes, when determining the geological age and genesis of rocks by isotopic methods, in the case of using stable isotopic indicators. The chemical differences of the isotopes are too small to be able to apply them in the isotope analysis. They use the dependence of various physical properties on the isotopic composition or, more rarely, specific nuclear reactions that occur when an ionizing radiation is exposed to a given isotope [16].

The use of a mass spectrometer with electrical registration of the intensities of ion beams of isotopes separated in electric and magnetic fields after ionization of a sample by electron impact is the most universal and common method. In standard serial devices, it is possible to determine the isotopic composition with an accuracy of 1 - 0.1% in the sample, the content of this element in which does not exceed fractions of a mg.

Various spectral methods based on isotopic shifts of the energy levels of atoms and molecules have less sensitivity to isotopes. The spectrum of a mixture of isotopes is the superposition of the spectra of individual isotopes with intensity ratios corresponding to the isotopic composition. Most often, they use vibrational IR spectra or striped molecular spectra in the visible or UV region. Rotary microwave spectrographs in the 104-105 MHz region and nuclear magnetic resonance spectra also use [17-19].

Nuclear magnetic resonance (NMR) is the resonance absorption of electromagnetic waves due to quantum transitions of atomic nuclei between energy states with different orientations of the nuclear spin. For most nuclei, NMR is observed in the frequency range 1–10 MHz in magnetic fields of 10^3 – 10^4 Oe. NMR spectra are used to study the structure of solids and complex molecules.

Very small isotope contents can be determined with high sensitivity, but not very high relative accuracy, by activation analysis, for example, ^{17}O from the characteristic ^{17}F positron radiation generated during deuteron irradiation of the sample by the $^{17}\text{O}(\text{d}, \text{n})^{18}\text{F}$ reaction [20]. The H: D ratio can also be found from the absorption of slow neutrons, for which the capture cross section for protons is many times larger than for deuterons.

When using mass spectrometric and spectral methods, such a thorough cleaning of the sample is not required as when measuring physical constants, and it is often possible to find not only the total content of this isotope, but also the ratio of the concentrations of molecules with different isotopic substitutions in the sample, for example, C_6D_6 , C_6D_5 , ... C_6H_6 in deuterobenzene [21].

X-ray diffraction methods are used to study the phase composition, structure, and analysis of crystal imperfections. They work due to the fact that different types of waves are diffracted on a periodic crystal lattice.

Any substance in a condensed state has atomic ordering. In the case of liquids and amorphous bodies, this is short-range order, or long-range order in the case of polycrystals and single crystals. Since the size of the atoms is of the order of the x-ray wavelength, in the latter case, the atoms of the substance form a natural three-dimensional diffraction grating for x-rays.

There are diffraction conditions under which, in the case of elastic X-ray scattering, interference maxima arise at certain scattering angles depending on the wavelength λ and the distance between the planes of the three-dimensional atomic lattice d . These conditions are named after Laue and Wolf-Bragg. The Wolfe-Bragg condition is most simply derived:

$$n\lambda = 2d \sin \theta, \tag{1.1}$$

At an angle θ to the atomic plane, monochromatic x-ray radiation with a wavelength λ is incident on the crystal (Fig. 1.4.1). The wavelength is determined by the anode material of the x-ray tube and, as a rule, corresponds to the characteristic $K\alpha$ line of the anode. Isolation of a single radiation wavelength is carried out either by a $K\beta$ filter or by a crystalline monochromator.

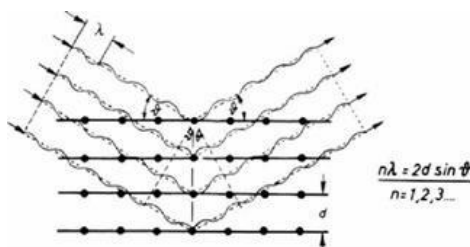


Figure 1.3 - The Wulff-Bragg diffraction condition.

1.5 Crystallization in a magnetic field

The magnitude of the magnetic field determines the resonance frequencies of the precession of atomic spins in solution and on the crystal growth surface. The temperature of the solution determines the frequency of collisions of atoms and surfaces. The larger the difference in the indicated frequencies, the greater the probability of the deposition of the selected isotope on the surface of the crystal [22-25]. Therefore, a magnetic field can change the rate of crystallization from aqueous solutions due to the formation of differences in the spin dynamics of two isotopes of one element. When using a salt solution with a binary mixture of isotopes, concentration gradients of two isotopes are formed at the crystal growth boundary. When a stationary state is established, the relative crystallization rates of two isotopes will be lower than before the onset of the stationary state. Therefore, to increase the isotope effect, it is necessary to alternately form the preferred crystallization conditions for different isotopes. In this case, the formation of crystal layers enriched in different isotopes is possible [26].

Since it is not possible to estimate in advance the resonance conditions for crystallization of one of the isotopes, it is logical to carry out the crystallization process by periodically acting on the cell with a constant magnetic field. In the intervals between periods of exposure to a magnetic field, periods of crystallization

occur without exposure to a magnetic field with an isotope effect known in the literature. In this case, a significant amount of experimental research is necessary. Simultaneous crystallization in several cells, which are synchronously (simultaneously) affected by magnetic fields of different strengths, which are under equal conditions (temperature, pressure, concentration of the solution) can reduce the required number of experimental studies.

Obviously, in addition to the magnitude of the magnetic field, it is necessary to optimize the crystallization rate and the mode of exposure to the magnetic field. The crystallization rate depends on the degree of saturation and temperature of the solution, on the pressure of the gas mixture above the solution, as well as on the partial pressure of the vapor of the solvent.