

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

Школа – Инженерная школа ядерных технологий  
 Направление подготовки – 14.03.02 Ядерные физика и технологии  
 Отделение школы (НОЦ) – Отделение ядерно-топливного цикла

**БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА**

Тема работы
<b>Моделирование коэффициента диффузии катионов через структурно неоднородный минерал глины</b>

УДК 621.039.7:628.39:549.6:66.021.3

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0А8Д	Шукшина Дарья Дмитриевна		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ОЯТЦ	Хан Валерий Алексеевич	Д.Т.Н.		

**КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:**

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН	Якимова Татьяна Борисовна	К.Э.Н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОЯТЦ	Передерин Юрий Владимирович	К.Т.Н.		

**ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:**

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОЯТЦ	Бычков П.Н.	К.Т.Н.		

## РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ООП

Код компетенции	Результаты освоения ООП (компетенции)
<b>Универсальные</b>	
УК(У)-1	Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач
УК(У)-2	Способен определять круг задач в рамках поставленной цели и выбирать оптимальные способы их решения, исходя из действующих правовых норм, имеющихся ресурсов и ограничений
УК(У)-3	Способен осуществлять социальное взаимодействие и реализовывать свою роль в команде
УК(У)-4	Способен осуществлять деловую коммуникацию в устной и письменной формах на государственном языке Российской Федерации и иностранном(-ых) языке(-ах)
УК(У)-5	Способен воспринимать межкультурное разнообразие общества в социально-историческом, этическом и философском контекстах
УК(У)-6	Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни
УК(У)-7	Способен поддерживать должный уровень физической подготовленности для обеспечения полноценной социальной и профессиональной деятельности
УК(У)-8	Способен создавать и поддерживать безопасные условия жизнедеятельности, в том числе при возникновении чрезвычайных ситуаций
УК(У)-9	Способен проявлять предприимчивость в профессиональной деятельности, в т.ч. в рамках разработки коммерчески перспективного продукта на основе научно-технической идеи
<b>Общепрофессиональные</b>	
ОПК(У)-1	Способен использовать базовые знания естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования
ОПК(У)-2	Способен осуществлять поиск, хранение, обработку и анализ информации из различных источников и баз данных, предоставлять ее в требуемом формате с использованием информационных, компьютерных и сетевых технологий
ОПК(У)-3	Способен использовать в профессиональной деятельности современные информационные системы, анализировать возникающие при этом опасности и угрозы, соблюдать основные требования информационной безопасности, в том числе защиты государственной тайны
<b>Профессиональные компетенции</b>	
ПК(У)-1	Способен использовать научно-техническую информацию, отечественный и зарубежный опыт по тематике исследования, современные компьютерные технологии и информационные ресурсы в своей предметной области
ПК(У)-2	Способен проводить математическое моделирование процессов и объектов атомной отрасли с использованием стандартных методов и компьютерных кодов для проектирования и анализа

ПК(У)-3	Готов к проведению физических экспериментов по заданной методике, составлению описания проводимых исследований и анализу полученных экспериментальных данных
ПК(У)-4	Способен использовать технические средства для измерения основных параметров объектов исследования
ПК(У)-5	Готов к составлению отчета по выполненному заданию, к участию во внедрении результатов исследований и разработок
ПК(У)-6	Способен использовать информационные технологии при разработке новых установок, материалов и приборов, к сбору и анализу исходных данных для проектирования объектов атомной отрасли
ПК(У)-7	Способен к расчету и проектированию деталей и узлов приборов и установок в соответствии с техническим заданием
ПК(У)-8	Готов к разработке проектной и рабочей технической документации, оформлению законченных проектно-конструкторских работ
ПК(У)-9	Способен к контролю соответствия разрабатываемых проектов и технической документации стандартам, техническим условиям, требованиям безопасности и другим нормативным документам
ПК(У)-10	Готов к проведению предварительного технико-экономического обоснования проектных решений при разработке установок и приборов
ПК(У)-11	Способен к контролю за соблюдением технологической дисциплины и обслуживанию технологического оборудования
ПК(У)-12	Готов к эксплуатации современного физического оборудования, приборов и технологий
ПК(У)-13	Способен к оценке ядерной и радиационной безопасности, к оценке воздействия на окружающую среду, к контролю за соблюдением экологической безопасности, техники безопасности, норм и правил производственной санитарии, пожарной, радиационной и ядерной безопасности, норм охраны труда
ПК(У)-14	Готов разрабатывать способы применения ядерно-энергетических, плазменных, лазерных, сверхвысокочастотных и мощных импульсных установок, электронных, нейтронных и протонных пучков, методов экспериментальной физики в решении технических, технологических и медицинских проблем
ПК(У)-15	Способен к составлению технической документации (графиков работ, инструкций, планов, смет, заявок на материалы, оборудование), а также установленной отчетности по утвержденным формам

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации**  
 Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования

**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
 ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Школа – Инженерная школа ядерных технологий  
 Направление подготовки – 14.03.02 Ядерные физика и технологии  
 Отделение школы (НОЦ) – Отделение ядерно-топливного цикла

УТВЕРЖДАЮ:  
 Руководитель ООП

\_\_\_\_\_  
 (Подпись)

\_\_\_\_\_  
 (Дата)

Бычков П.Н.  
 (Ф.И.О.)

**ЗАДАНИЕ**

**на выполнение выпускной квалификационной работы**

В форме:

\_\_\_\_\_ Бакалаврской работы \_\_\_\_\_

Студенту:

Группа	ФИО
0А8Д	Шукшиной Дарье Дмитриевне

Тема работы:

Моделирование коэффициента диффузии катионов через структурно неоднородный минерал глины	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	№32-52/с от 01.02.2022

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

**ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:**

<b>Исходные данные к работе</b>	– нормативно-техническая документация по формированию инженерных барьеров безопасности захоронения РАО; – научно-технические источники по барьерным свойствам глинистых минералов.
<b>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</b>	– обзор литературы по использованию глины при захоронении РАО; – квантово-химическое моделирование системы, включающей глинистый минерал, катионы калия, цезия и молекулы воды; – анализ полученных результатов.
<b>Перечень графического материала</b>	– блок-схема алгоритма квантово-химического моделирования; – презентация.

<b>Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы</b>	
<b>Раздел</b>	<b>Консультант</b>
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и энергосбережение	Якимова Татьяна Борисовна
Социальная ответственность	Передерин Юрий Владимирович

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

**Задание выдал руководитель**

<b>Должность</b>	<b>ФИО</b>	<b>Ученая степень, звание</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
Профессор ОЯТЦ	Хан Валерий Алексеевич	д.т.н.		

**Задание принял к исполнению студент:**

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
0А8Д	Шукшина Дарья Дмитриевна		

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

Студенту:

Группа	ФИО
0А8Д	Шукшиной Дарье Дмитриевне

Школа	ИЯТШ	Отделение школы (НОЦ)	ОЯТЦ
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	14.03.02 «Ядерные физика и технологии»

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

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Стоимость материальных ресурсов в соответствии с рыночными ценами г. Томска. Тарифные ставки исполнителей в соответствии со штатным расписанием НИ ТПУ.
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	Районный коэффициент для г. Томска равен 1,3. Тариф на промышленную электроэнергию равен 3,85 руб./кВт·ч).
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	Коэффициент отчислений во внебюджетные фонды – 30,2%.

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

1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения исследования с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	Анализ потенциальных потребителей результатов исследования. Проведение SWOT-анализа.
2. Планирование и формирование бюджета научного исследования	Определение трудоемкости работ. Разработка графика проведения научного исследования. Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта.
3. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности	Проведение оценки сравнительной эффективности проекта.

**Перечень графического материала:**

1. Оценка конкурентоспособности технических решений
2. Матрица SWOT
3. График проведения и бюджет НИ
4. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИ

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	15.03.2022
--	------------

**Задание выдал консультант:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН	Якимова Татьяна Борисовна	к.э.н		15.03.2022

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0А8Д	Шукшина Дарья Дмитриевна		15.03.2022

## ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
0А8Д	Шукшиной Дарье Дмитриевне

Школа	ИЯТШ	Отделение школы (НОЦ)	ОЯТЦ
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	14.03.02 «Ядерные физика и технологии»

Тема ВКР:

Моделирование коэффициента диффузии катионов через структурно неоднородный минерал глины	
<b>Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:</b>	
1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	Объект исследования: процесс взаимодействия катионов и радионуклидов с глинистыми минералами. Область применения: атомная промышленность.
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. <b>Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:</b> – 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 №197-ФЗ (ред. от 25.02.2022); – СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы.
2. <b>Производственная безопасность:</b> 2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов 2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия	Вредные и опасные факторы: – микроклимат; – шум; – освещенность рабочей зоны; – электромагнитные поля; – пожаробезопасность; – электробезопасность; – радиационная безопасность.
3. <b>Экологическая безопасность:</b>	– анализ влияния объекта и процесса исследования на окружающую среду; – разработка организационных и технических мероприятий по защите окружающей среды.
4. <b>Безопасность в чрезвычайных ситуациях:</b>	– выбор и описание типичной ЧС: пожар в аудитории и пожар в коридоре учебного корпуса; – обоснование мероприятий по предотвращению ЧС; – порядок действий при возникновении ЧС.

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	15.03.2022
--	------------

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОЯТЦ	Передерин Юрий Владимирович	к.т.н		15.03.2022

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0А8Д	Шукшина Дарья Дмитриевна		15.03.2022

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации**  
 Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования

**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
 ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Школа – Инженерная школа ядерных технологий  
 Направление подготовки – 14.03.02 Ядерные физика и технологии  
 Отделение школы (НОЦ) – Отделение ядерно-топливного цикла  
 Период выполнения – Весенний семестр 2021/2022 учебного года

Форма представления работы:

Бакалаврская работа
---------------------

**КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН  
 выполнения выпускной квалификационной работы**

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
25.02.2022	Обзор литературы по использованию глины при захоронении РАО	10
15.03.2022	Составление алгоритма проведения квантово-химического моделирования	5
20.03.2022	Квантово-химическое моделирование	25
10.05.2022	Анализ и обобщение полученных результатов	20
16.05.2022	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	15
18.05.2022	Социальная ответственность	15
26.05.2022	Оформление пояснительной записки и презентации	10

**СОСТАВИЛ:**

**Руководитель ВКР**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ОЯТЦ	Хан Валерий Алексеевич	д.т.н.		

**СОГЛАСОВАНО:**

**Руководитель ООП**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОЯТЦ	Бычков П.Н.	к.т.н.		



## РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа содержит 86 страниц, 16 рисунков, 24 таблицы, 1 приложение, 35 источников.

Ключевые слова: диффузия, глина, инженерный барьер безопасности, катион, вода, слой минерала, заряд слоя.

Объект исследования: процесс взаимодействия катионов и радионуклидов с глинистыми минералами.

Цель работы – изучение зависимости коэффициента диффузии катионов  $K^+$ ,  $Cs^+$  через микрочастицы глинистых минералов монтмориллонит и вермикулит от местоположения атомов Al, замещающих атомы Mg, Fe и Si в слоях исходного минерала.

Выпускная квалификационная работа состоит из четырех частей. В первой части проведен обзор литературы по методам использования минералов глины при захоронении РАО.

Во второй части проведено квантово-химическое моделирование системы, состоящей из глинистого минерала, катионов  $K^+$ ,  $Cs^+$  и молекул воды. Описание полученных результатов моделирования.

В третьей части приведен экономический расчет затрат на проведение научного исследования, составлен календарный план работы.

В четвертой – рассмотрена охрана труда и техника безопасности на рабочем месте при проведении исследовательской работы.

## Обозначения и сокращения

РАО – радиоактивные отходы

ПЗРО – пункт захоронения радиоактивных отходов

ПГЗРО – пункт глубинного захоронения радиоактивных отходов

ВАО – высокоактивные отходы

ИББ – инженерный барьер безопасности

ПО – программное обеспечение

ФРР – функция радиального распределения

НТИ – научно-техническое исследование

ЭМП – электромагнитное поле

ЧС – чрезвычайная ситуация

## Оглавление

Введение.....	13
1 Обзор литературы .....	14
1.1 Методы захоронения радиоактивных отходов.....	14
1.2 Использование глинистых материалов в качестве инженерных барьеров безопасности.....	16
1.3 Свойства глины.....	19
1.3.1 Водонепроницаемость.....	20
1.3.2 Пластичность.....	21
1.3.3 Набухаемость .....	22
1.3.4 Поглощающая способность .....	23
1.4 Методы исследования барьерных свойств глины .....	24
1.4.1 Диффузия.....	25
1.4.2 Сорбция и коэффициент распределения .....	26
2 Расчетная часть.....	28
2.1 Выбор программы для квантово-химического моделирования.....	28
2.2 Квантово-химическое моделирование.....	28
2.3 Результаты квантово-химического моделирования и их анализ .....	31
2.4 Выводы.....	44
3 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение.....	45
3.1 Потенциальные потребители результатов исследования.....	45
3.2 Анализ конкурентных технических решений .....	46
3.3 SWOT-анализ .....	48
3.4 Планирование научно-исследовательской работы .....	50
3.4.1 Определение трудоемкости выполнения работы.....	52
3.4.2 Разработка графика проведения научного исследования .....	52
3.5 Бюджет научно-технического исследования.....	56
3.5.1 Материальные затраты.....	56
3.5.2 Затраты на специальное оборудование .....	57
3.5.3 Заработная плата исполнителей работы .....	58

3.5.4	Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления) .....	60
3.5.5	Накладные расходы .....	60
3.5.6	Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта.	61
3.6	Определение ресурсной эффективности проекта .....	61
	Выводы по разделу .....	64
4	Социальная ответственность .....	65
4.1	Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности .....	65
4.1.1	Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя) правовые нормы трудового законодательства .....	65
4.1.2	Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя .....	66
4.2	Производственная безопасность .....	69
4.2.1	Анализ вредных и опасных факторов .....	69
4.2.2	Обоснование мероприятий по защите исследователя от действия вредных и опасных факторов .....	69
4.2.2.1	Микроклимат .....	69
4.2.2.2	Шум .....	71
4.2.2.3	Освещенность рабочей зоны .....	72
4.2.2.4	Электромагнитные поля .....	75
4.2.2.5	Пожаро-взрывобезопасность .....	76
4.2.2.6	Электробезопасность .....	76
4.3	Экологическая безопасность .....	77
4.4	Безопасность в чрезвычайных ситуациях .....	78
4.4.1	Анализ типичных ЧС при проведении исследования .....	78
	Выводы по разделу .....	79
	Заключение .....	81
	Список использованных источников .....	82
	Приложение А .....	86

## Введение

В настоящее время накоплено большое количество радионуклидов требующих долговременной изоляции. Количество радиоактивных отходов возрастает из-за продолжающейся эксплуатации ядерной энергетики.

Для создания инженерных барьеров безопасности при захоронении радиоактивных отходов используют глинистые материалы. Глины характеризуются изолирующими воду свойствами, что препятствует попаданию радионуклидов в подземные водоносные слои. Способность глинистых минералов противодействовать миграции радионуклидов связана с объемной и поверхностной сорбцией ионов, а также скоростью их диффузии внутри и по поверхности частицы минерала. Возможными путями выхода радионуклидов из области захоронения радиоактивных отходов через барьеры безопасности, при отсутствии микропотоков воды, является диффузия: сквозь микрочастицу глины, в поровом растворе глиняных барьеров, по поверхности микрочастицы. Анионы мигрируют только по порам или по поверхности микрочастиц.

Различными авторами изучалась миграция катионов в различных условиях и по разным траекториям, в том числе расчетными методами. Однако, влиянию структурных особенностей минерала не уделялось должного внимания. Поэтому исследование зависимости скорости миграции катионов через минералы от структурных характеристик является актуальной задачей.

Целью настоящего исследования является изучение зависимости коэффициента диффузии катионов  $K^+$ ,  $Cs^+$  через микрочастицы глинистых минералов монтмориллонит и вермикулит от местоположения атомов Al, замещающих атомы Mg, Fe и Si в слоях исходного минерала.

Для достижения цели поставлены следующие задачи:

1. Обзор литературы по использованию глины при захоронении РАО.
2. Квантово-химическое моделирование системы, включающей глинистый минерал, катионы  $K^+$ ,  $Cs^+$  и молекулы воды.
3. Анализ полученных результатов.

# 1 Обзор литературы

## 1.1 Методы захоронения радиоактивных отходов

В современном мире остро стоит проблема обращения с радиоактивными отходами (РАО), которые накапливаются в результате эксплуатации атомных электростанций. Радиоактивные отходы – это отходы, содержащие радиоактивные изотопы химических элементов и представляющие особую биологическую опасность [1]. Попадание радионуклидов в организм человека может привести к различным мутациям, болезням и летальному исходу. Поэтому радиоактивные отходы необходимо изолировать от окружающей среды на срок, по истечению которого радионуклиды не будут представлять опасность.

В качестве изоляции отходов от окружающей среды применяют их захоронение. Различают четыре способа захоронения РАО:

- поверхностное;
- приповерхностное;
- подземное;
- глубинное.

Выбор способа захоронения зависит от активности радионуклидов, их агрегатного состояния, объемов и от экономической составляющей.

При поверхностном захоронении РАО размещается в контейнерах на специально оборудованных площадках непосредственно на поверхности земли [1], образуя возвышение, или на небольшой глубине. В настоящее время данный вид захоронения применяется для отходов, имеющих период полураспада не более 30 лет. Такой способ размещения отходов располагается над подземными грунтовыми водами. Однако, при воздействиях природного характера может произойти деформация конструкции контейнера с РАО и, как следствие, его разрушение, результатом которого является загрязнение окружающей среды.

Приповерхностное захоронение РАО осуществляется путем захоронения бочек с радиоактивными отходами в траншеях. Отходы размещаются непосредственно в земле [2], в специально оборудованных траншеях, которые располагаются на глубине от 10 до 200 метров в зависимости от уровня их активности РАО [3]. Траншеи могут располагаться, как над подземными грунтовыми водами, так и под ними. В качестве отходов, которые могут захораниваться приповерхностным способом захоронения, выступают твердые и отвержденные РАО (переведенные из жидкого в твердое агрегатное состояние). Воздействие климатических условий на пункт захоронения радиоактивных отходов (ПЗРО), по сравнению с поверхностным, существенно ниже. Однако, данный метод захоронения предполагает близость размещения к грунтовым водам. С течением времени конструкция ПЗРО терпит коррозию, что приводит к нарушению герметичности контейнера с РАО.

В случае подземного захоронения отходы изолируют под землей в заранее разработанных подземных полостях. Доступ к местам захоронения осуществляется через специальные туннели. РАО размещаются под подземными водоносными слоями, что уменьшает риск попадания радионуклидов в грунтовые воды и тем самым минимизирует опасность загрязнения окружающей среды [2]. Преимуществом подземного типа захоронения является небольшая занимаемая площадь на поверхности, а недостатком – геологоразведочные работы по поиску места строительства.

Самым дорогостоящим и обладающим высокими требованиями при создании является пункт глубинного захоронения радиоактивных отходов (ПГЗРО). ПГЗРО предназначен для захоронения накопленных и вновь образующихся высокоактивных радиоактивных отходов (ВАО) [4]. Такой метод предполагает захоронение РАО на срок, по истечению которого отходы не будут представлять опасность окружающей среде [1]. В отличие от предыдущих способов захоронения, в ПГЗРО РАО сохраняют в подземных хранилищах в устойчивых геологических формациях, содержащих минимальное количество грунтовых вод, на глубине от 250 до 1000 метров. Помещение отходов в

контейнеры и размещение их на больших глубинах представляет собой совокупность барьеров, которые препятствуют достижению радионуклидов окружающей среды и человека. В качестве барьеров безопасности выступают горная порода, соль и глина. Подобные хранилища гарантируют, что радионуклиды не попадут в биосферу в течение нескольких десятков тысяч лет.

По сравнению с другими методами захоронения, глубинное является более эффективным, но имеет ряд сложностей и ограничений для строительства:

- трудоемкость землепроходных работ;
- геологоразведочные работы (ограничение мест под строительство);
- устойчивость горных пород;
- минимальное количество грунтовых вод.

На сегодняшний день метод глубинного захоронения считается предпочтительным, однако, высокие требования и экономическая целесообразность препятствует его реализации в мире.

## **1.2 Использование глинистых материалов в качестве инженерных барьеров безопасности**

Пункты захоронения радиоактивных отходов создаются для минимизации вредного или опасного действия РАО на человека или окружающую среду [5]. Особое внимание уделяется инженерным барьерам безопасности (ИББ), а точнее материалам, из которых они изготовлены. К выбору материалов подходят таким образом, чтобы они могли обеспечить долговременные безопасные условия хранения РАО. Поэтому научные исследования, направленные на достижение требуемых значений параметров, например, сорбционных и миграционных, а также на разработку моделей расчета и сценариев развития событий, продолжаются и в настоящее время.

Глинистые материалы, благодаря их уникальным свойствам, являются перспективными в качестве инженерных барьеров безопасности [6]. Создание



инженерных барьеров включает использование глинистых смесей из нескольких компонентов. Как правило, это минералы группы смектитов (монтмориллонит), вермикулитов, каолинитов и иллитов. Глины характеризуются изолирующими воду свойствами, что препятствует попаданию радионуклидов в подземные водоносные слои. В основном используют минералы группы монтмориллонита, которые превосходят остальные виды глинистых минералов своими функциональными характеристиками, что подтверждается результатами российских и зарубежных исследований [7,8].

По номенклатуре Международной минералогической ассоциации глинистые минералы относятся к силикатам (подкласс филлосиликатов) и содержат две группы [9]. Эти группы различаются по количеству тетраэдрических и октаэдрических листов – 1:1 (каолинит, галлуазит, лизардит, бертьерин) или 2:1 (группа истинных слюд (мусковит, биотит, флогопит), слюды с дефицитом межслоя (иллит, глауконит), смектиты (монтмориллонит, сапонит), вермикулиты (вермикулит), группа хлоритов (клинохлор, шамозит)), а также количеством изоморфных замещений, определяющих заряд слоя. Минералы типа 1:1 имеют низкие емкость и набухаемость, а также высокую водопроницаемость (высокая диффузия). Минералы типа 2:1 содержат катионы и молекулы воды в составе межслоевого промежутка (межслоя).

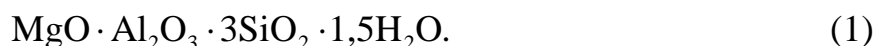
Каолиниты характеризуются низкой емкостью катионного обмена, слабой набухаемостью и противифльтрационными свойствами. Минералы группы смектита, в первую очередь монтмориллонит (имеющий относительно низкий заряд слоя и локализацию изоморфных замещений в октаэдрическом слое) способны к внутрикристаллическому набуханию и хорошо сорбируют катионы и анионы на базальной поверхности и боковых сколах. Глины и их смеси эффективны для создания сорбционных, противифльтрационных и противомиграционных барьеров при захоронении радиоактивных отходов [6].

Монтмориллонит является основным компонентом бентонита (не менее 70%). Представляет собой глинистый минерал, который характеризуется трехэтажной структурой слоев, образующих минерал: октаэдрический слой

оксида алюминия расположен между двумя тетраэдрическими слоями оксида кремния. Между слоями глины располагаются вода (так называемая межслоевая) и катионы щелочных и щелочноземельных металлов.

Минеральный состав монтмориллонита, как и других глин, является непостоянным. Состав зависит от варьирующегося содержания воды, то есть от состава водных растворов, взаимодействующих с глиной.

Химическая формула основной компоненты монтмориллонита:



По разным данным устанавливаются следующие содержания химических элементов, % [10]:

- $\text{SiO}_2$  – от 48 до 56;
- $\text{Al}_2\text{O}_3$  – от 11 до 22;
- $\text{FeO}$  – более 5;
- $\text{MgO}$  – от 4 до 9;
- $\text{CaO}$  – более 0,8;
- $\text{H}_2\text{O}$  – от 12 до 24.

Можно утверждать, что минерал глины содержит постоянную составляющую (каркас) и переменную составляющую (межслоевой раствор). Однако, постоянная составляющая состава глины также может изменяться.

Согласно [11] инженерные барьеры безопасности ПЗРО должны:

- ограничивать контакт упаковок РАО (неупакованных РАО) с природными водами;
- препятствовать разрушению упаковок РАО при внешних воздействиях природного и техногенного характера;
- препятствовать разрушению упаковок РАО при воздействии вмещающих горных пород;
- ограничивать распространение радионуклидов во вмещающие породы установленными в проекте ПЗРО пределами.

Использование глинистых материалов в качестве создания ИББ для обеспечения долгосрочной безопасности ПЗРО играет важную роль. К каждому элементу конструкции ИББ предъявляются критерии выбора, соответствующие его назначению. Согласно [12] ключевые параметры барьеров безопасности для буферного материала приведены в таблице 1.

Таблица 1 – Основные критерии оценки буферного материала ИББ

№ п/п	Параметр	Защитный барьер (бentonитовая глина)	Единица измерения
1	Срок службы	Не ограничен	Год
2	Модуль упругости	20-110	МПа
3	Морозостойкость (от -40 °С до +40 °С)	Не ограничена	цикл.
4	Давление набухания	0,2-10	МПа
6	Водопроницаемость	$10^{-8}$ - $10^{-7}$	м/сут
7	Плотность	1,8-2,6	г/см <sup>3</sup>
8	Пористость	30-60	%
9	Коэффициент распределения радионуклидов	$10^2$ - $10^4$	м <sup>3</sup> /кг
10	Коэффициент диффузии ( <sup>90</sup> Sr, <sup>137</sup> Cs)	$10^{-14}$ - $10^{-11}$	м <sup>2</sup> /с
11	Сорбционная емкость	0,8-1,5	мг/г

В таблице 1 в качестве буферного материала рассматривается бентонитовая глина. Решения о том, какой материал будет использоваться в качестве буфера для будущего пункта захоронения, принимаются с учетом конструкции ПЗРО, времени эксплуатации и условий его размещения.

### 1.3 Свойства глины

Глинистые минералы в виде структур для создания пунктов окончательной изоляции РАО используются более 60 лет. Причиной их использования являются низкие значения коэффициентов фильтрации и способность к задержке подвижных радионуклидов [6]. Пункты захоронения в основном включают использование бентонитовых глин.

Бентониты состоят преимущественно из монтмориллонита, обладающие свойствами, которые, с одной стороны, являются их достоинствами, с другой

стороны, приводящие к их недостаткам. Например, способность к набуханию способствует препятствию усадке глинистых материалов, но и, в свою очередь, приводит к дополнительным нагрузкам на конструкцию ПЗРО и упаковки РАО [13] вплоть до их разрушения. Низкая проницаемость как подземной воды, так и газов, которые могут образовываться при различных процессах, может привести к негативным последствиям. Выделение газов, например, водорода при радиолитическом разложении воды может привести к росту давления барьера вплоть до превышения его прочностных характеристик [13].

Минералы глины и их смеси могут иметь различный гранулометрический состав. Для использования в инженерных барьерах безопасности более предпочтительны материалы с повышенным содержанием тонкодисперсной фракции [6] – менее 5 мкм. Это объясняется тем, что минералы с наименьшим размером зерна проявляют наиболее характерные для минералов глины свойства.

Основными свойствами, по которым глинистые породы отнесены к перспективным геологическим средам, являются [7]:

- низкая водопроницаемость;
- пластичность;
- набухаемость;
- высокая поглощающая способность.

### **1.3.1 Водонепроницаемость**

Водонепроницаемость является одним из важных свойств глинистых материалов. Под водонепроницаемостью понимают способность минералов не пропускать через себя молекулы воды. Пропускная способность глинистых материалов связана с высокой пористостью. Движение воды через кристаллы глинистых минералов происходит следующим образом. Фильтрация воды протекает по наиболее крупным порам между микрочастицами глины. Поры

меньшего размера возникают под влиянием градиента давления, который приводит к частичному выдавливанию поровой воды, наименее связанной со стенками пор. В результате через частичное освободившееся поровое пространство осуществляется фильтрация воды. В порах малого размера фильтрация воды практически не осуществляется из-за межслойной воды, полностью занимающей поровое пространство.

Водопроницаемость характеризуется коэффициентом фильтрации, который численно равен величине скорости фильтрации. Скорость фильтрации определяет количество воды на единицу площади поперечного сечения, проходящей через фильтрующие породы [14]. Величина скорости фильтрации определяется формулой Дарси:

$$v = k \cdot I, \quad (2)$$

где  $k$  – коэффициент фильтрации;

$I$  – напорный градиент, равный отношению падения напора к длине пути фильтрации.

Величина водопроницаемости для глин находится в диапазоне от  $10^{-3}$  до  $10^{-5}$  м/сут и менее, а для проницаемых пород (глинистых песков, суглинков) – от 1 до  $10^{-3}$  м/сут [14].

### 1.3.2 Пластичность

Под пластичностью понимают способность глины изменять и сохранять свою форму под действием внешних сил без разрыва сплошности.

На пластичность глинистых минералов большое влияние оказывает их минеральный состав, а также количество тонкодисперсных частиц, имеющих размер менее 5 мкм. Пластичность минералов можно как увеличить, так и уменьшить. Увеличение пластичности достигается измельчением, растиранием и механической обработкой частиц глины. С помощью добавления непластичных материалов, например, кварцевого песка или молотой

обожженной глины в состав исходного минерала, можно уменьшить его пластичность.

Числом пластичности характеризуется способность минерала удерживать воду. Эта величина вычисляется как разность между пределами текучести. Верхний предел текучести соответствует состоянию, при котором глина начинает переходить в текучее состояние. Нижний предел, в свою очередь, соответствует переходу в твердое состояние.

### **1.3.3 Набухаемость**

Набухаемость – это способность глины увеличивать объем за счет поглощения молекул воды. Процесс набухания сопровождается увеличением влажности, объема породы и возникновением давления набухания [15].

Набухание микрочастиц глины происходит в два этапа. На первом этапе глина впитывает в себя влагу. Наблюдается адсорбция молекул воды поверхностью мелкодисперсных частиц, а также межслоевыми промежутками минералов глины. При этом объем глины остается постоянным. На втором этапе поглощение воды происходит за счет осмотического давления, которое возникает возле поверхности глинистых частиц. Избыточное давление обусловлено повышенной концентрацией обменных катионов, перешедших с поверхности твердой фазы в раствор. На этом этапе объем глины увеличивается. Наибольшей величиной набухания обладают глины, в состав которых входят минералы с подвижной кристаллической структурой, например, группа смектита. Наименьшей – минералы с более жесткой кристаллической структурой, например, каолинит.

На величину набухаемости, как и пластичности, влияет минеральный состав глинистых минералов. Например, объем бентонитовых глин увеличивается в 10 раз, а осадочных – в 3 раза [14].

Свойства глинистых минералов в совокупности, а именно пластичности и набухаемости, оказывают эффект «залечивания». Таким образом, при

увеличении объема глины происходит затягивание трещин в минерале, которые выступают в качестве миграционных каналов. Происходит восстановление барьерных свойств глинистых материалов.

### **1.3.4 Поглощающая способность**

Свойство способности глины поглощать и удерживать в своем объеме различные вещества является ключевым для изоляции РАО. Это обуславливается особенностями кристаллического строения минералов.

Алюмосиликатный каркас глинистых минералов состоит из чередующихся параллельных слоев, образованных силикатными тетраэдрами и алюминатными октаэдрами.

Например, каркас каолинита состоит из двух слоев: тетраэдрического листа оксида кремния и октаэдрического листа гидроксида алюминия. Между собой слои минерала связаны водородными связями. При этом образуется жесткая многослойная решетка, в пространство между которой вхождение воды и ионов затруднено. Каркас монтмориллонита, так называемый базовый пакет, состоит из трех слоев: внутреннего октаэдрического и двух наружных тетраэдрических. Разграничение пакетов происходит по гидроксильным ионам, несущим одинаковые заряды. Молекулы воды и ионы втягиваются в пространства между пакетами, что приводит к увеличению размера кристаллической решетки [14].

Глины характеризуются изоморфизмом, то есть атомы способны замещать друг друга в кристаллической структуре минерала глины. Замещения могут наблюдаться как в тетраэдрическом, так и в октаэдрическом листах. Например, при замене в октаэдрическом листе Al на атомы с меньшим положительным зарядом (Mg, Fe) структурный каркас приобретает отрицательный заряд. Для сохранения электрической нейтральности между слоями внедряются дополнительные катионы. В водных растворах катионы могут свободно перемещаться между отдельными слоями структуры минералов,

например, монтмориллонита и активно обмениваться с катионами из водных растворов. Наименьшей катионообменной емкостью обладает каолинит, наиболее высокой – монтмориллонит [7].

Для характеристики поглощающей способности глинистых материалов в отношении радионуклидов используются, в частности, коэффициент распределения и коэффициент задержки.

Коэффициент распределения рассчитывается по формуле:

$$K_d = \frac{C_{тв}}{C_{ж}} = \frac{I_0 - I_p}{I_p} \cdot \frac{V}{m}, \quad (3)$$

где  $C_{тв}$  – концентрация радионуклида, поглощенного твердой фазой;

$C_{ж}$  – концентрация радионуклида в растворе после установления равновесия;

$I_0$  – концентрация радионуклида в растворе до контакта с твердой фазой;

$I_p$  – концентрация радионуклида в растворе после установления равновесия с твердой фазой;

$V$  – объем раствора;

$m$  – масса твердой фазы.

С коэффициентом распределения связан коэффициент задержки, определяющий величину отставания распространения вещества от распространения жидкой фазы:

$$R = 1 + K_d. \quad (4)$$

Коэффициенты распределения и задержки являются основными параметрами, которые экспериментально определяют барьерные свойства глинистых минералов [14].

#### 1.4 Методы исследования барьерных свойств глины

Исследования барьерных свойств глинистых материалов должны решать две задачи. Во-первых, исследования должны подтверждать характеристики



материалов в условиях внешнего взаимодействия приближенному к реальности. Во-вторых, результаты исследований должны прогнозировать дальнейшее поведение объектов изучения.

Основными характеристиками для выбора буферного материала в качестве барьеров безопасности являются диффузия, сорбция и коэффициент распределения.

### 1.4.1 Диффузия

Под диффузией понимают самопроизвольное смешивание двух веществ. Диффузия является основным механизмом миграции радионуклидов через глиняный барьер при плотности глины более 1,9 г/см<sup>3</sup>. Диффузия катионов, анионов и молекул воды через глину зависит от химического состава минерала.

До достижения барьером полной сорбционной емкости нестационарная диффузия характеризуется истинным коэффициентом диффузии. Затем, если емкость барьера недостаточна для поглощения всей активности радионуклида, он будет выходить за его пределы с постоянной скоростью, определяемой эффективным коэффициентом поровой диффузии [16]. Соотношение коэффициентов диффузии выражается через коэффициент сорбционной емкости:

$$\frac{D_e}{D_a} = \alpha, \quad (5)$$

где  $D_e$  – эффективный коэффициент поровой диффузии;

$D_a$  – истинный коэффициент диффузии.

Для несорбирующихся радионуклидов  $\alpha = 1$ , истинный коэффициент диффузии становится равным эффективному, то есть сорбционная задержка отсутствует, диффузия носит стационарный характер [16].

Именно сорбция на поверхности пор, а не поровая диффузия определяет задержку миграции радионуклидов.

Диффузия внутри барьера безопасности описывается вторым законом Фика [17]:

$$\frac{dC(x, y, z, \tau)}{d\tau} = D \left( \frac{\partial^2 C(x, y, z, \tau)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C(x, y, z, \tau)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C(x, y, z, \tau)}{\partial z^2} \right), \quad (6)$$

где  $\frac{dC}{d\tau}$  – изменение концентрации диффундирующего вещества во времени;

$D$  – коэффициент диффузии;

$x, y, z$  – смещение по соответствующим осям координат.

Таким образом, второй закон Фика описывает изменение общей концентрации диффундирующего вещества в каждой точке среды.

Для того, чтобы убедиться в надежности использования глинистого материала в ИББ в пунктах РАО, необходимо проводить эксперименты по определению миграционных свойств минерала, который включает в себя такой важный параметр, как коэффициент диффузии радионуклидов.

Авторами [18] изучалась миграция радионуклидов через инженерные барьеры безопасности. Диапазон изменения коэффициента диффузии для радиологически опасных изотопов составляет  $10^{-16}$ - $10^{-10}$  м<sup>2</sup>/с.

#### **1.4.2 Сорбция и коэффициент распределения**

Коэффициент распределения радионуклидов на материалах инженерных барьеров безопасности служит одним из ключевых параметров, определяющих использование этих материалов при создании ПЗРО. Для обоснования выбора компонентов ИББ необходимы сведения сорбционной способности наиболее перспективных материалов. Как правило, в качестве компонентов смесей выступают различные глинистые минералы, среди которых наибольшее значение приобретают минералы группы смектитов. Реализуемые в настоящее время стратегии захоронения РАО по большей части включают использование бентонитовых глин в качестве буферного материала, что обусловлено их

свойствами: высокой набухаемостью, сорбционной емкостью и низкой водопроницаемостью.

Для того, чтобы выбрать подходящий компонент буферного материала для барьера безопасности, необходимо учитывать его сорбционные характеристики, а также особенности минерального состава.

В работе [19] изучены сорбционные свойства бентонита, каолинита и вермикулита по отношению к различным радионуклидам. Анализ результатов показывает, что большое содержание монтмориллонита и вермикулитоподобного материала в барьере безопасности способствует высокой сорбционной способности по отношению к большинству радионуклидов. Содержание каолинита, напротив, приводит к снижению коэффициентов сорбционного распределения.

## **2 Расчетная часть**

### **2.1 Выбор программы для квантово-химического моделирования**

Проведение экспериментальных исследований по определению характеристик глины, в особенности коэффициента диффузии, требует длительного времени. Моделирование позволяет получать необходимые данные в более короткие сроки, например, с помощью пакетов для квантово-химического моделирования.

Известны множества программ для квантово-химического моделирования: Materials Studio 8, HyperChem 8, Lammps, Gaussian 3. Ранее использовали Gaussian 3 и HyperChem 8, которые явно уступают по функциональным возможностям и интерфейсу программе Materials Studio 8.

Materials Studio предоставляет широкий набор возможностей для научного квантово-химического моделирования. BIOVIA Materials Studio – это комплексная среда моделирования, предназначенная для изучения взаимосвязи атомной и молекулярной структуры материала с его свойствами и поведением. Используемое программное обеспечение (ПО) имеет полный спектр возможностей компьютерного моделирования, позволяет проводить исследования для разных отраслей промышленности, например, химической, фармацевтической, атомной. Materials Studio предоставляет возможность анализировать материалы при различных размерах частиц, масштабах времени и структуры. Для анализа получаемых результатов расчета можно использовать текстовые данные, выводимые в файл, или графическое изображение, выводимые на экран или в файл.

### **2.2 Квантово-химическое моделирование**

Слои глинистых минералов объединяются в объемное тело за счет межмолекулярных сил, обусловленных нескомпенсированными зарядами на

базальных (плоских) поверхностях каждого слоя [20]. Ионы из раствора сорбируются за счет ионного обмена между слоями и на поверхности глинистых частиц.

Рассмотрим структуру минерала, использованной при расчетах в Materials Studio. Предварительно задается расчетная ячейка, содержащая несколько повторяющихся фрагментов реального материала. В соответствии с идеологией ПО бесконечно твердое тело получается путем мультиплицирования по трем координатам расчетной ячейки. Схема расчетной ячейки, на примере монтмориллонита, приведена на рисунке 1.

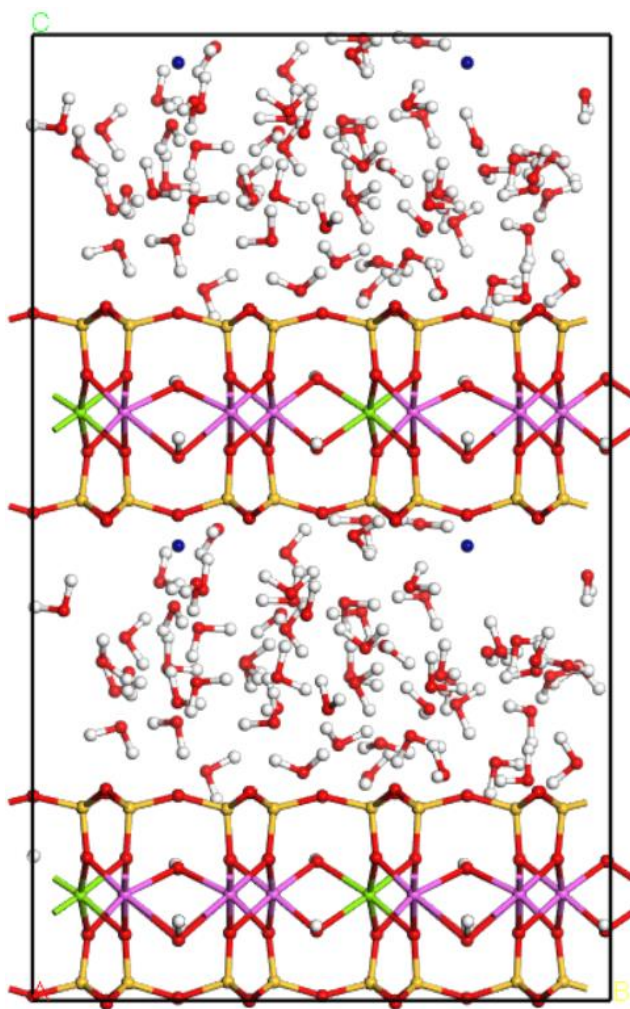


Рисунок 1 – Расчетная ячейка монтмориллонита

Обозначения: О – красный; Н – белый; Al – сиреневый; Mg – зеленый; Si – желтый; К – синий

В расчетной ячейки использовались два слоя минерала, между которыми находятся молекулы воды и ионы калия.

Основными компонентами глины являются атомы Si, Al и O. В процессе эволюции часть атомов Si и Al, в зависимости от геологических условий, заменены на такие атомы как Mg, Fe и Ca. При моделировании часть природных атомов заменяли на атомы Al. Такая замена атомов приводит к изменению отрицательного заряда базальной поверхности. Например, при замене Si на Al в тетраэдрическом листе увеличивается отрицательный заряд поверхности. При замене в октаэдрическом листе Mg на Al отрицательный заряд поверхности уменьшается. Так как заряд катионов строго должен соответствовать отрицательному заряду, то рассмотренные замены сопровождаются изменениями количества межслоевых катионов.

На рисунках 2 и 3 показаны примеры замены атомов в октаэдрическом и тетраэдрическом листах минерала монтмориллонита. Заменяли атом Mg, Fe или Si на атом Al. При этом проводили замену как симметрично, так и со смещением с разных сторон межслойного промежутка.

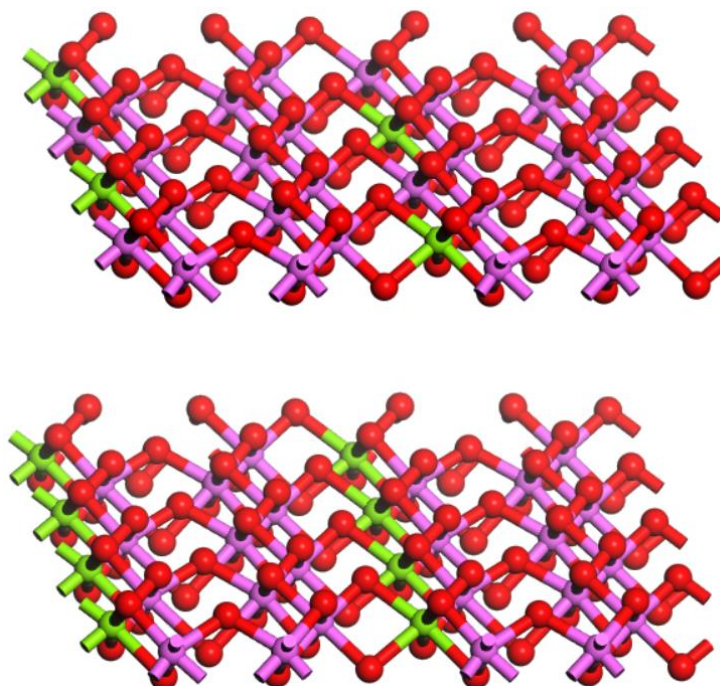


Рисунок 2 – Пример замены 4 атомов Mg с одной стороны в октаэдрическом листе

Замену атома в тетраэдрических листах (рисунок 3) проводили для двух соседних слоев глины, обращенных друг к другу. При этом внешние листы оставались неизменными. Поэтому при мультиплицировании (использование бесконечных периодических волновых функций при решении уравнения Шредингера в квантово-химических расчетах) одно межслойное пространство оказывается модифицированным, а второе – нет.

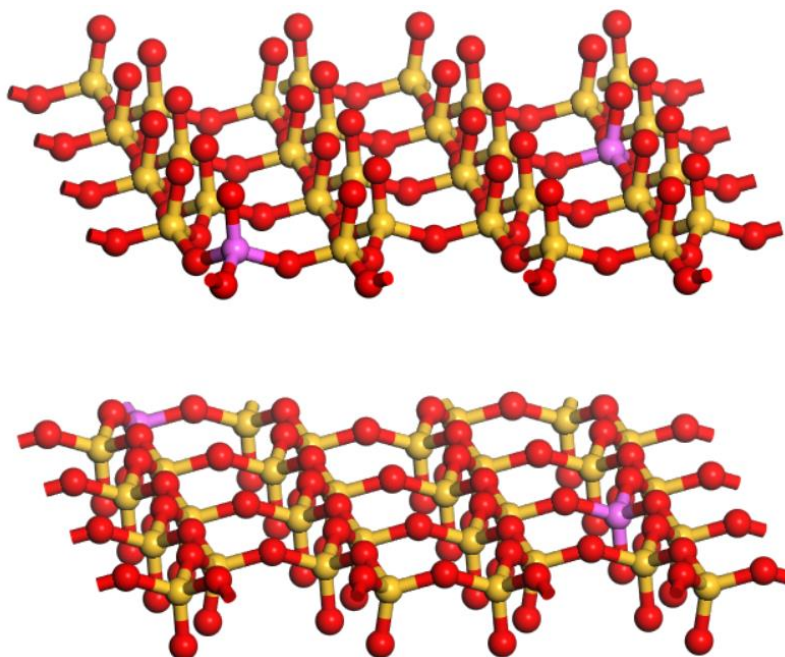


Рисунок 3 – Пример замены 2 атомов Si с каждой стороны соседних слоев со смещением в тетраэдрическом листе

### 2.3 Результаты квантово-химического моделирования и их анализ

Квантово-химический расчет проводили с помощью программы Materials Studio для системы, состоящей из глины, воды и катиона щелочного металла. Для этого в начале задается расчетная ячейка с заданным размером кристалла минерала глины, а также с заданным количеством катионов и молекул воды. Кристаллическая структура, использованная для моделирования, состоит из

$4 \times 2 \times 2$  ячеек с параметрами решетки  $a = 5,23 \text{ \AA}$ ,  $b = 9,08 \text{ \AA}$  и  $c = 10,22 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = \gamma = \beta = 90^\circ$  [21].

Моделирование заключалось в том, что проводили оптимизацию исходной структуры расчетной ячейки, рассчитывали динамику атомов последовательно NPT и NVT методами. NPT метод использовался для оценки среднеквадратического смещения, а NVT – для оценки распределений атомов в пространстве. Для описания взаимодействий между атомами в слое глины использовали силовое поле ClayFF [22]. Расчеты проводили в течение 400 пс с шагом по времени в 0,1 фс. В результате, в указанных папках накапливается массив данных с результатами расчета. Необходимые для дальнейшего использования данные получаются путем анализа результатов расчета. Блок-схема алгоритма квантово-химического моделирования представлена в приложении А. Для оценки влияния структурных особенностей минерала на коэффициент диффузии катионов, получены среднеквадратическое смещение, распределение воды и катионов между слоями минерала, а также функция радиального распределения (ФРР), описывающая гидратную оболочку катиона.

На рисунке 4 приведен график среднеквадратического смещения катиона  $K^+$  в межслоевом пространстве монтмориллонита при различных заменах атомов Mg на атомы Al в октаэдрическом листе слоя минерала.



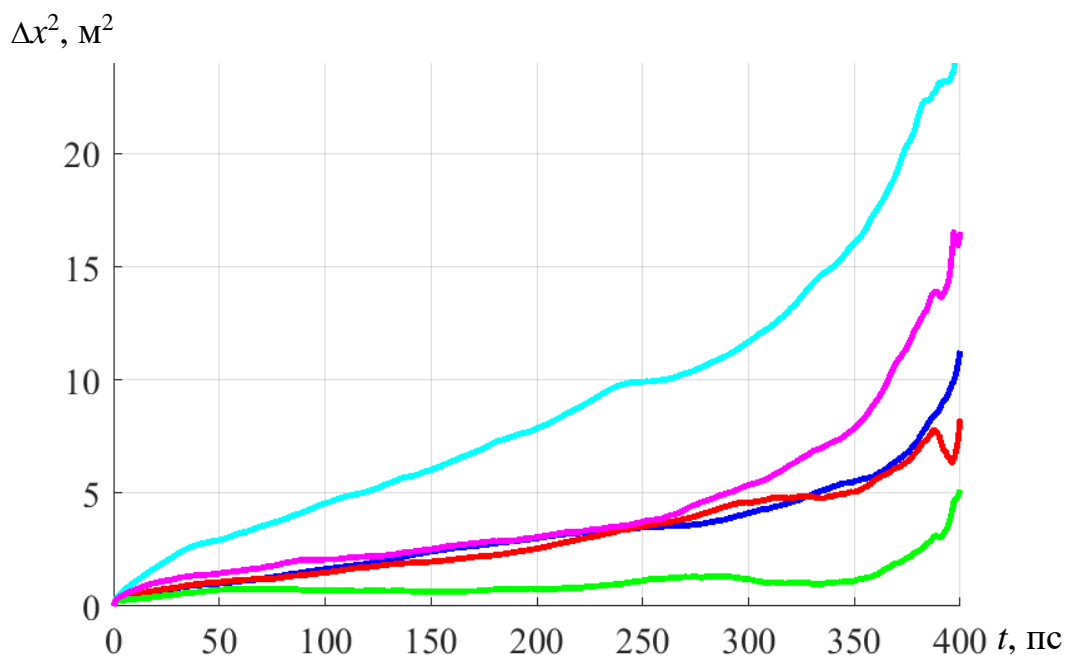


Рисунок 4 – Среднеквадратическое смещение  $K^+$  в межслоевом пространстве монтмориллонита при различных заменах в октаэдрическом листе

Обозначения: █ – исходная структура; █ – замена 8 Mg с одной стороны листа; █ – замена 4 Mg с одной стороны листа; █ – замена 4 Mg с каждой стороны соседних слоев; █ – замена 4 Mg с каждой стороны соседних слоев со смещением

Среднеквадратическое смещение складывается из суммы квадратов расстояний единичных прыжков частицы от одного положения до следующей точки, во время процесса диффузии, и используется для расчета коэффициента самодиффузии. Самодиффузия является важным параметром подвижности. Чем выше коэффициенты диффузии веществ, тем быстрее они проникают друг в друга. Коэффициент самодиффузии можно определить из соотношения:

$$D = \frac{1}{2n} \frac{d}{dt} \langle (R(t) - R(0))^2 \rangle, \quad (7)$$

где  $R(0)$  – начальное положение частицы через время  $t$ ;

$R(t)$  – конечное положение частицы через время  $t$ ;

$n$  – размерность пространства.

В таблице 2 приведены значения коэффициентов диффузии для катионов  $K^+$  и  $Cs^+$  в монтмориллоните, вермикулите при различных вариантах замены атомов.

Таблица 2 – Коэффициенты диффузии  $K^+$  и  $Cs^+$  ( $\cdot 10^{11}$ ,  $m^2/c$ )

Октаэдрический лист (замена Mg или Fe на Al)				Исходная	Тетраэдрический лист (замена Si на Al)			
Монтмориллонит								$K^+$
8×1	4×1	4×2	4×2*	–	2×1	2×2	2×2*	
3,88	1,04	11,9	6,33	4,17	3,56	14,95	1,89	
Вермикулит								$K^+$
8×1	4×1	4×2	4×2*	–	2×1	2×2	2×2*	
8,19	5,23	13,1	26,2	6,35	3,74	3,85	4,41	
Монтмориллонит								$Cs^+$
8×1	4×1	4×2	4×2*	–	2×1	2×2	2×2*	
2,43	2,25	10,2	20,8	7,4	2,9	2,67	2,04	

где 8×1 – замена 8 атомов с одной стороны листа;

4×1 – замена 4 атомов с одной стороны листа;

4×2 – замена 4 атомов с каждой стороны соседних слоев;

4×2\* – замена 4 атомов с каждой стороны соседних слоев со смещением;

2×1 – замена 2 атомов с одной стороны листа;

2×2 – замена 2 атомов с каждой стороны соседних слоев;

2×2\* – замена 2 атомов с каждой стороны соседних слоев со смещением.

Из таблицы 2 видно, что коэффициенты диффузии в значительной мере зависят от положения замещающих атомов Al. Наибольшее изменение коэффициента диффузии как для  $K^+$ , так и для  $Cs^+$  наблюдается при замене в октаэдрическом листе. Связано это с тем, что отрицательный заряд ячейки уменьшается. Однако, для  $K^+$  аналогично высокий коэффициент диффузии наблюдается при симметричной замене в тетраэдрическом листе. Это может быть связано с плохой набухаемостью глины, содержащей  $K^+$ .

В таблице 3 приведены значения коэффициентов диффузии молекул воды для различных вариантов замены атомов.

Таблица 3 – Коэффициенты диффузии молекул воды ( $\cdot 10^{10}$ , м<sup>2</sup>/с)

Октаэдрический лист (замена Mg или Fe на Al)				Исходная	Тетраэдрический лист (замена Si на Al)			
Монтмориллонит								K <sup>+</sup>
8×1	4×1	4×2	4×2*	–	2×1	2×2	2×2*	
10,2	10,2	12,2	14,1	9,57	9,51	9,58	9,32	
Вермикулит								
8×1	4×1	4×2	4×2*	–	2×1	2×2	2×2*	
6,88	12,2	13	17,5	9,94	6,22	7,21	7,92	
Монтмориллонит								Cs <sup>+</sup>
8×1	4×1	4×2	4×2*	–	2×1	2×2	2×2*	
7,14	10,5	12,8	10,5	10,1	8,86	5,71	6,41	

Время защитного действия минералов вермикулит и монтмориллонит толщиной 1 метр, находящихся при нормальных условиях, от диффузии катионов Cs<sup>+</sup> и K<sup>+</sup> оценим по формуле:

$$t = \frac{l}{Z \cdot D \cdot 3600 \cdot 24 \cdot 365}, \quad (8)$$

где  $l$  – толщина глинистого минерала;

$Z$  – коэффициент допустимого выхода загрязнения на чистую поверхность ( $10^{-4}$ - $10^{-2}$ );

$D$  – коэффициент диффузии катиона в глине.

Расчетные данные, по формуле (8), для времени защитного действия слоя глины толщиной 1 метр, составленной из модели вермикулит и монтмориллонит, приведены в таблице 4.

Таблица 4 – Время защитного действия K<sup>+</sup> и Cs<sup>+</sup> ( $\cdot 10^{-5}$ , лет)

Октаэдрический лист (замена Mg или Fe на Al)				Исходная	Тетраэдрический лист (замена Si на Al)			
Монтмориллонит								K <sup>+</sup>
8×1	4×1	4×2	4×2*	–	2×1	2×2	2×2*	
8,2	30	2,7	5	7,6	8,9	2,1	16,8	
Вермикулит								
8×1	4×1	4×2	4×2*	–	2×1	2×2	2×2*	
3,9	6	2,4	1,2	5	8,5	8,2	7,2	
Монтмориллонит								Cs <sup>+</sup>
8×1	4×1	4×2	4×2*	–	2×1	2×2	2×2*	
13	14	3,2	1,5	4,3	11	12	15,5	

Результаты расчета, приведенные в таблице 4, показывают, что время защитного действия минералов, в качестве барьера безопасности, монтмориллонит и вермикулит в среднем составляет  $8,3 \cdot 10^5$  лет. Это свидетельствует о высоких барьерных свойствах минералов.

Из таблицы 3 также видна зависимость коэффициентов диффузии молекул воды от положения замещающих атомов Al. Следует заметить, что в отличие от значений коэффициентов диффузии катионов в монтмориллоните и вермикулите, коэффициенты диффузии молекул воды изменяются незначительно. Это объясняется тем, что молекула воды имеет форму диполя с частичными зарядами на положительном и отрицательном концах молекулы – 0,82, а заряд катиона – 1,0. Общепринятая схема молекулы воды приведена на рисунке 5. Поэтому для молекул воды сила взаимодействия с минералом меньше, чем для катиона. В результате изменение положения и величины заряда поверхности слоя глины для молекул воды меньше, чем для катиона.

Коэффициенты диффузии, приведенные в таблицах 2 и 3 можно объяснить следующим образом. В межслойном пространстве глины наблюдается конкуренция кулоновского взаимодействия катионов, диполей воды и глины. Отрицательный заряд поверхности глины отталкивает атом кислорода с частичным отрицательным зарядом в молекуле воды и притягивает положительный заряженный атом водорода молекул воды, а также катион. Таким образом, катион стремится сформировать гидратную оболочку, а слой глины, в свою очередь, пытаются ее разрушить и притянуть катионы к себе для непосредственного контакта. Чем больше заряд одной из поверхностей, тем больше ее тормозящее действие из-за действия потенциальных ям кулоновского типа на базальной поверхности слоя минерала. В центральной части межслойного промежутка сила взаимодействия катиона с электрическим полем уменьшается практически до нуля. Поэтому, чем ближе катион к центру межслойного промежутка, тем больше коэффициент диффузии.

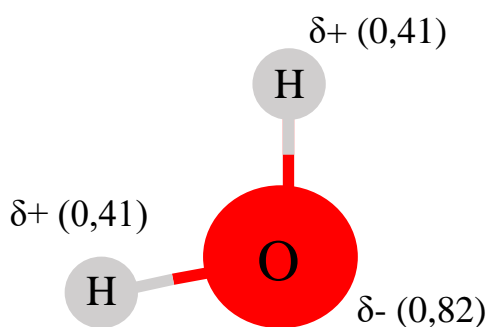


Рисунок 5 – Схема диполя молекулы воды

Дополнительную информацию для анализа коэффициентов диффузии можно получить из данных, приведенных на рисунках 6, 8 и 9-14.

Распределения концентрации катионов  $K^+$  между слоями монтмориллонита и вермикулита, при замене атомов на Al в октаэдрическом (рисунок 6 и 8) и тетраэдрическом листах (рисунок 9 и 10) показывают следующее. При замене в октаэдрическом листе катион более равномерно распределен в межслоевом пространстве. Это может быть связано с тем, что из-за большого расстояния между центрами зарядов (катиона и минерала), гидратная оболочка катионов меньше подвержена разрушению. Сохранению гидратной оболочки (называемый внешнесферным комплексом (рисунок 7б)) также способствует уменьшение отрицательного заряда минерала при замене атомов в октаэдрическом листе. Присутствие в октаэдрическом листе атомов Fe и Mg (вермикулит) обуславливает появление четырех слоев катионов, вместо трех, при наличии лишь Mg (монтмориллонит). Это является следствием наличия двух разноизотопных центров заряда (Fe и Mg), имеющих ферромагнитный парамагнитный характер (рисунок 6 и 8).

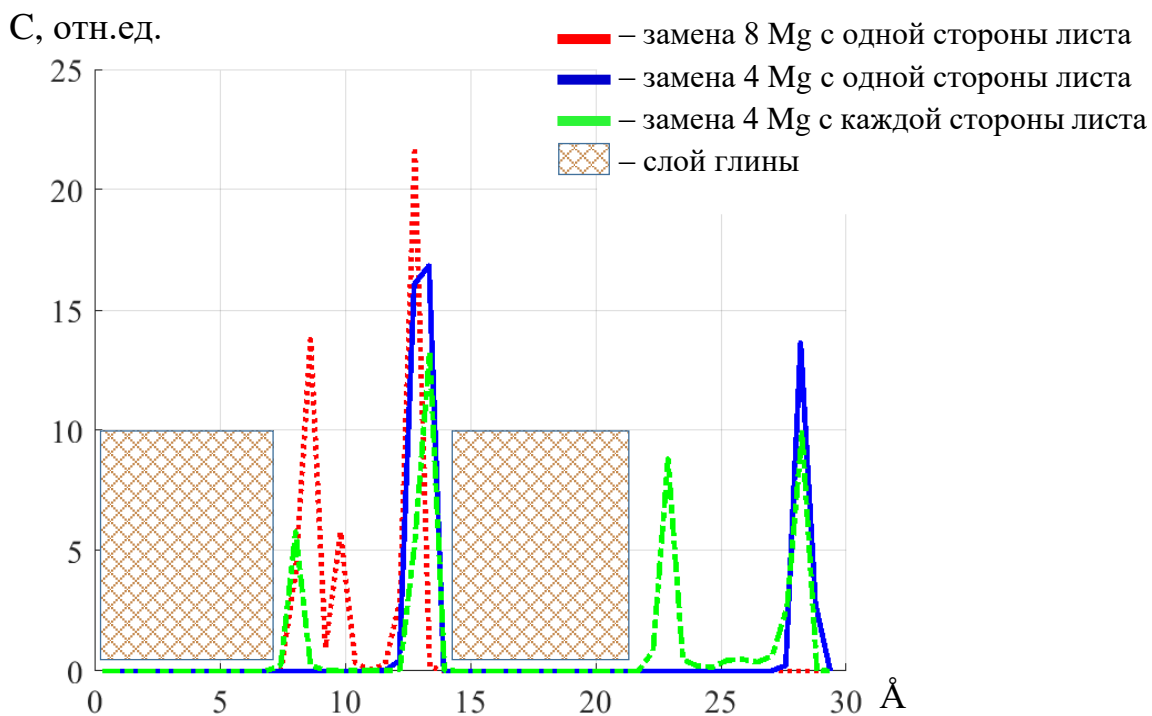


Рисунок 6 – Распределение  $K^+$  в межслоевом пространстве монтмориллонита при различных заменах в октаэдрическом листе

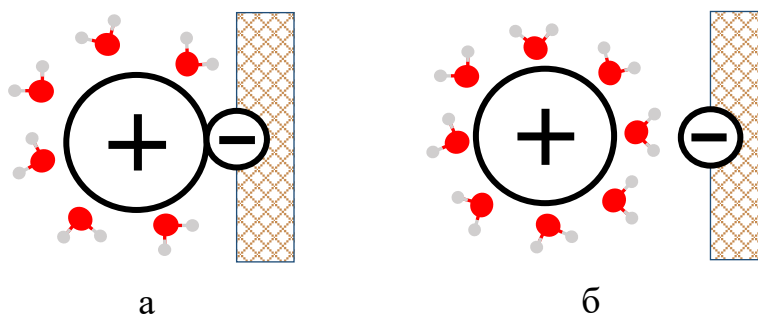


Рисунок 7 – Гидратные оболочки катионов, формирующихся при взаимодействии с минералом

Комплексы: а) внутрисферный; б) внешнесферный

При замене атомов в тетраэдрическом листе заряд слоя минерала возрастает, а расстояние между центрами положительных и отрицательных зарядов уменьшается. Поэтому взаимодействие катиона с поверхностью увеличивается, а с молекулами воды – остается постоянной. При этом катион формирует внутрисферные комплексы (рисунок 7а) с молекулами воды (частично разрушенная гидратная оболочка) и непосредственно контактирует с

поверхностью глины. Непосредственный контакт катиона с потенциальным рельефом базальной поверхности слоя минерала аналогичен попаданию катиона в более глубокую потенциальную яму. Поэтому для смены местоположения катиона необходимы более высокие флуктуации его тепловой энергии. Такие флуктуации более редки, что обуславливает меньший коэффициент диффузии катиона. Преобладание внутрисферных комплексов подтверждается расчетными данными по распределению катионов в межслоевом пространстве минерала (рисунок 9 и 10).

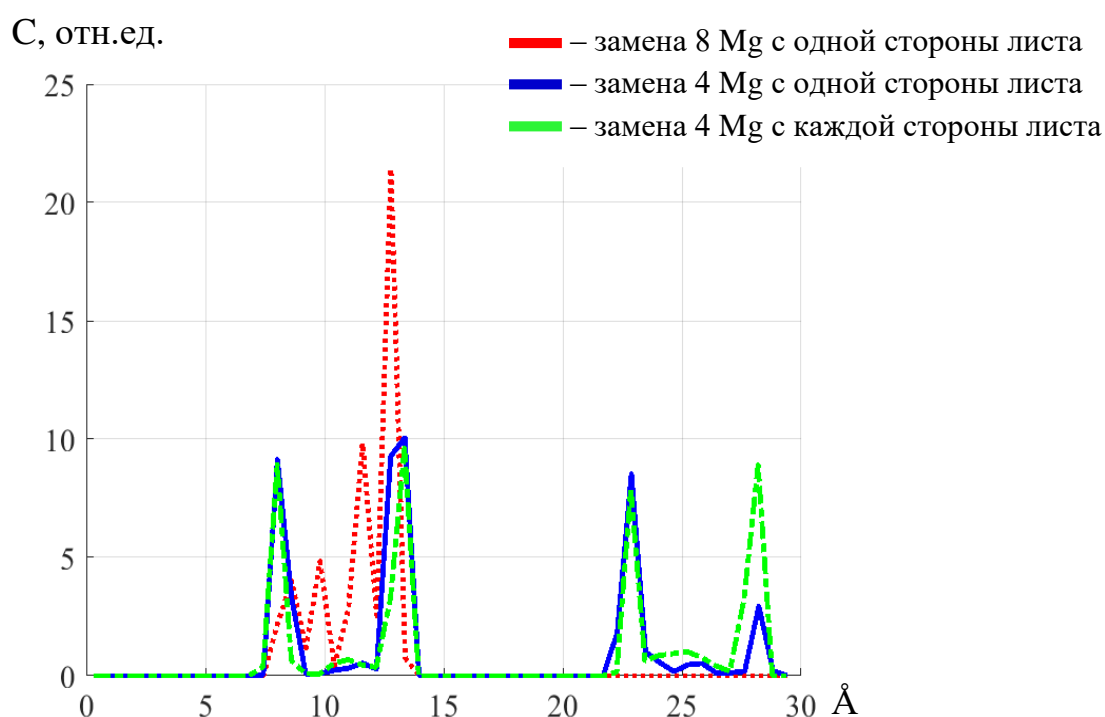


Рисунок 8 – Распределение  $K^+$  в межслоевом пространстве вермикулита при различных заменах в октаэдрическом листе

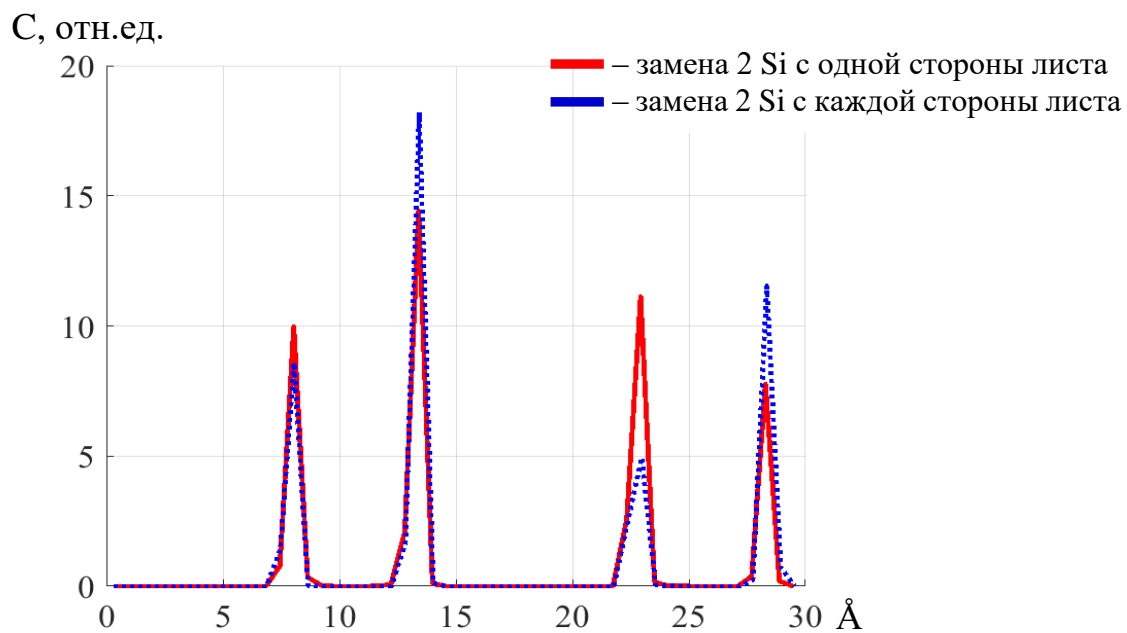


Рисунок 9 – Распределение  $K^+$  в межслоевом пространстве монтмориллонита при различных заменах в тетраэдрическом листе

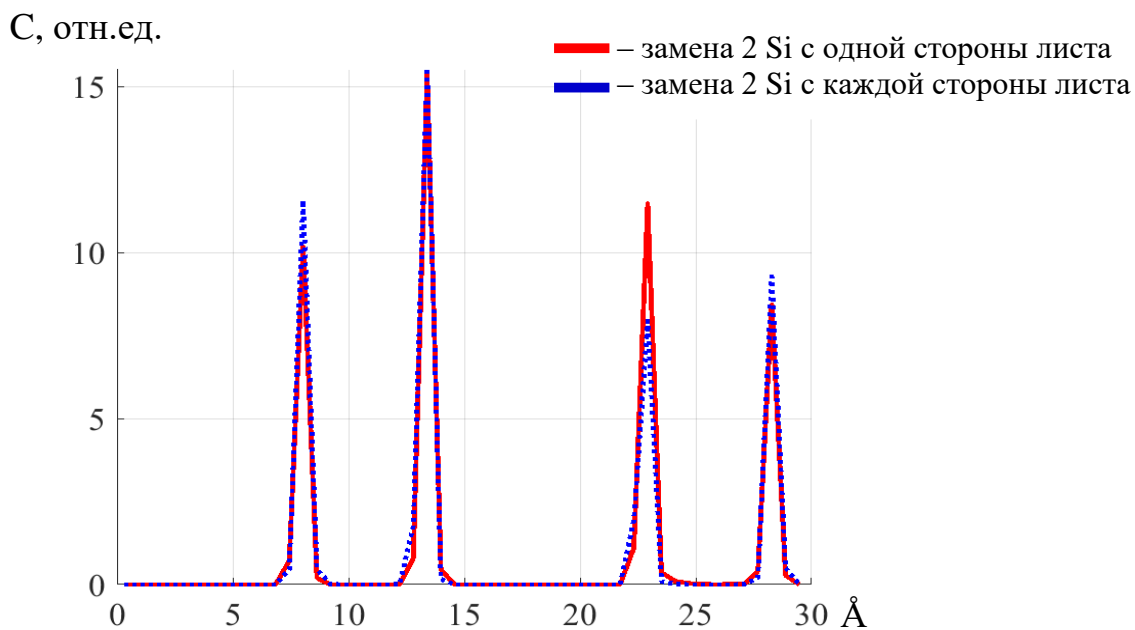


Рисунок 10 – Распределение  $K^+$  в межслоевом пространстве вермикулита при различных заменах в тетраэдрическом листе

Общие закономерности распределения катиона  $Cs^+$  между слоями минерала глины аналогичны распределению  $K^+$  (рисунок 11 и 12). Однако, распределение катиона  $Cs^+$  по нескольким слоям менее выражено. Возможно, это



связано с лучшей гидратируемостью  $\text{Cs}^+$  по отношению к катиону  $\text{K}^+$ . Это означает преобладание внешнесферных комплексов катиона в межслоевом пространстве минерала глины.

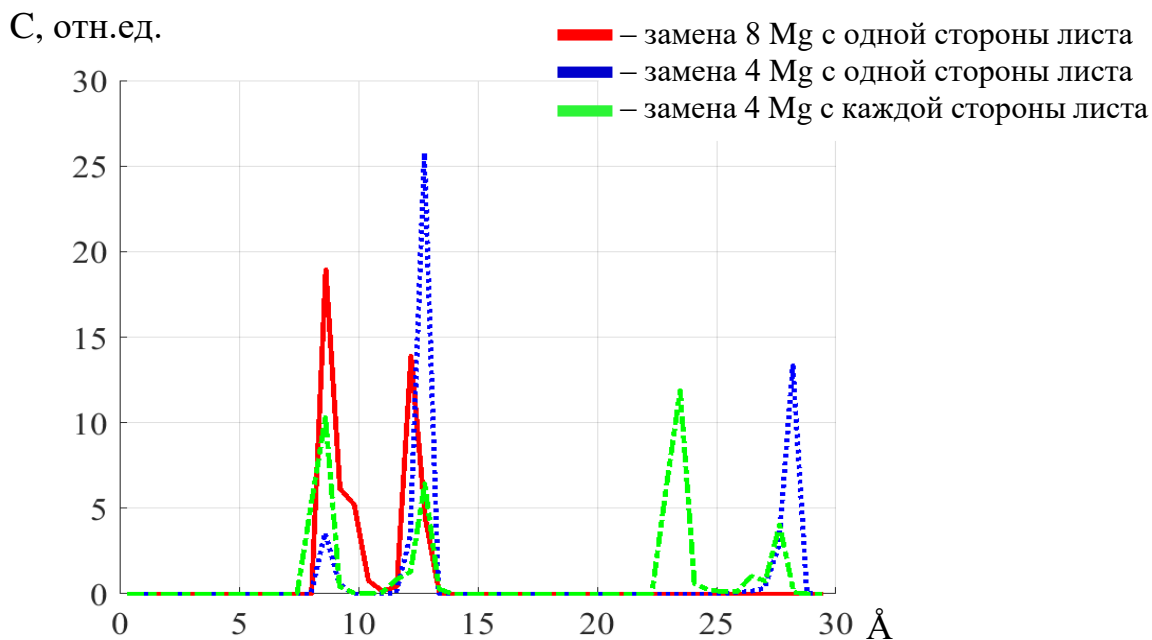


Рисунок 11 – Распределение  $\text{Cs}^+$  в межслоевом пространстве монтмориллонита при различных заменах в октаэдрическом листе

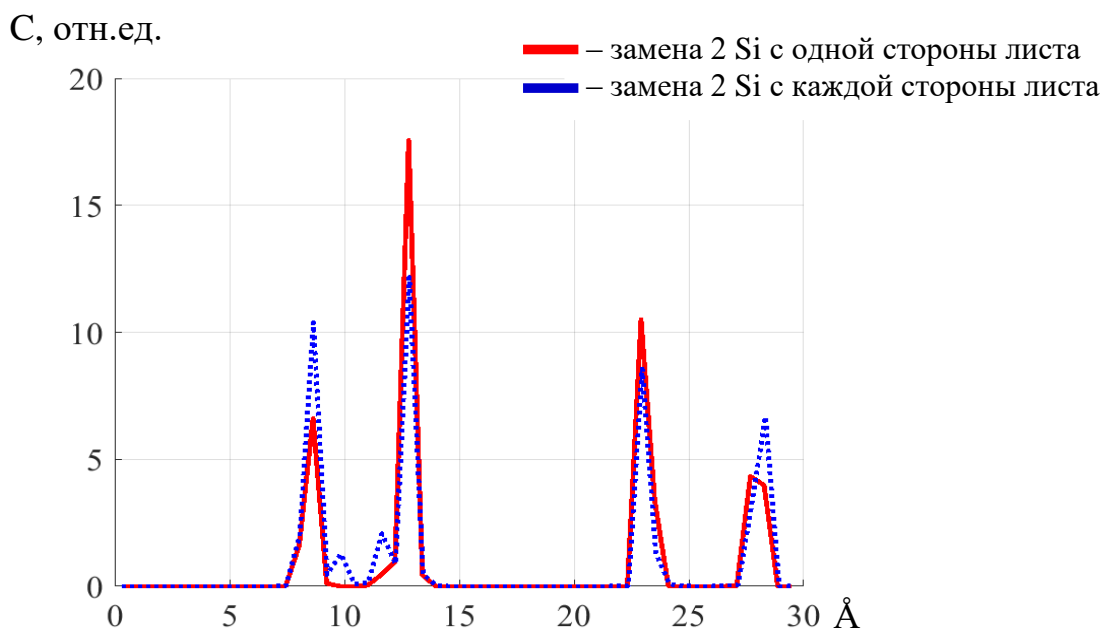


Рисунок 12 – Распределение  $\text{Cs}^+$  в межслоевом пространстве монтмориллонита при различных заменах в тетраэдрическом листе

Гидратная оболочка, характеризуемая графиками функции радиального распределения, получаемая путем квантово-химического расчета, подтверждает предлагаемую выше феноменологическую модель. Замена атомов в тетраэдрическом листе монтмориллонита оказывают значительное влияние на ФРР. Сравнение данных на рисунках 13 и 14 показывает, что модификация октаэдрического листа незначительно влияет на гидратную оболочку  $K^+$ . При замене в тетраэдрическом листе монтмориллонита наблюдается уменьшение амплитуды ФРР при замене с одной стороны листа и практически полное исчезновение гидратной оболочки  $K^+$  при замене с двух сторон листа.

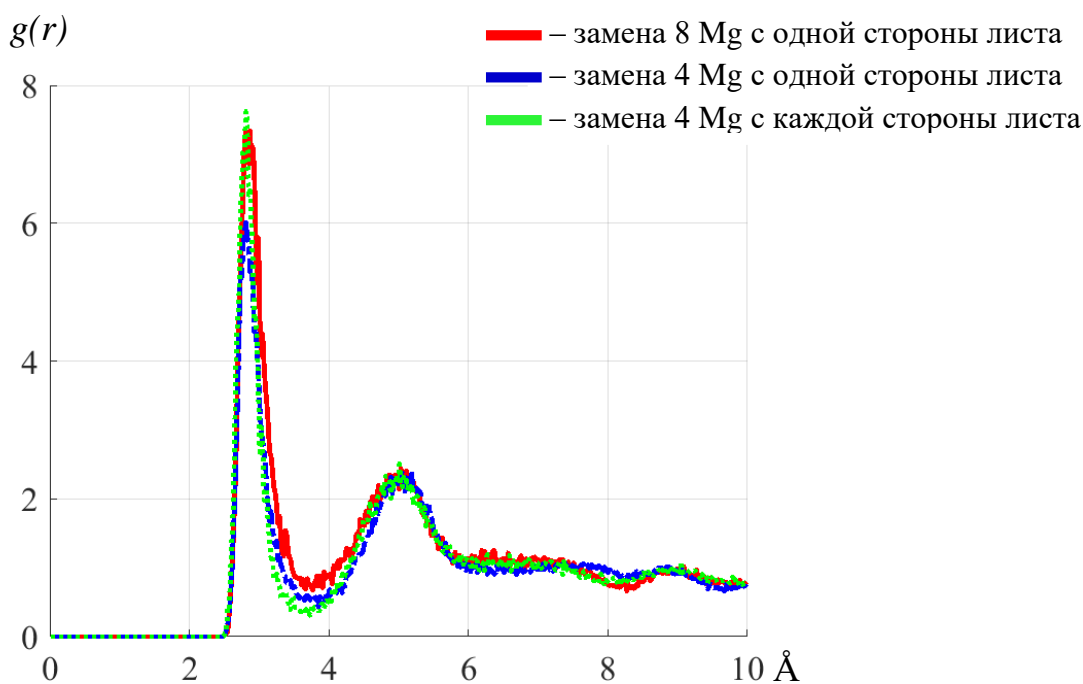


Рисунок 13 – ФРР  $K^+$  в межслоевом пространстве монтмориллонита при различных заменах в октаэдрическом листе

Приведенные результаты квантово-химических расчетов показывают, что барьерные свойства минералов глины в значительной мере зависят от структурных особенностей каркаса минерала. Поэтому перед использованием глины в качестве барьера безопасности захоронения РАО необходимо тщательно

изучить его структурные особенности. Однако, наиболее достоверные данные могут быть получены лишь путем экспериментального определения коэффициента диффузии и коэффициента распределения всех значимых радионуклидов для образцов глины с разных месторождений.

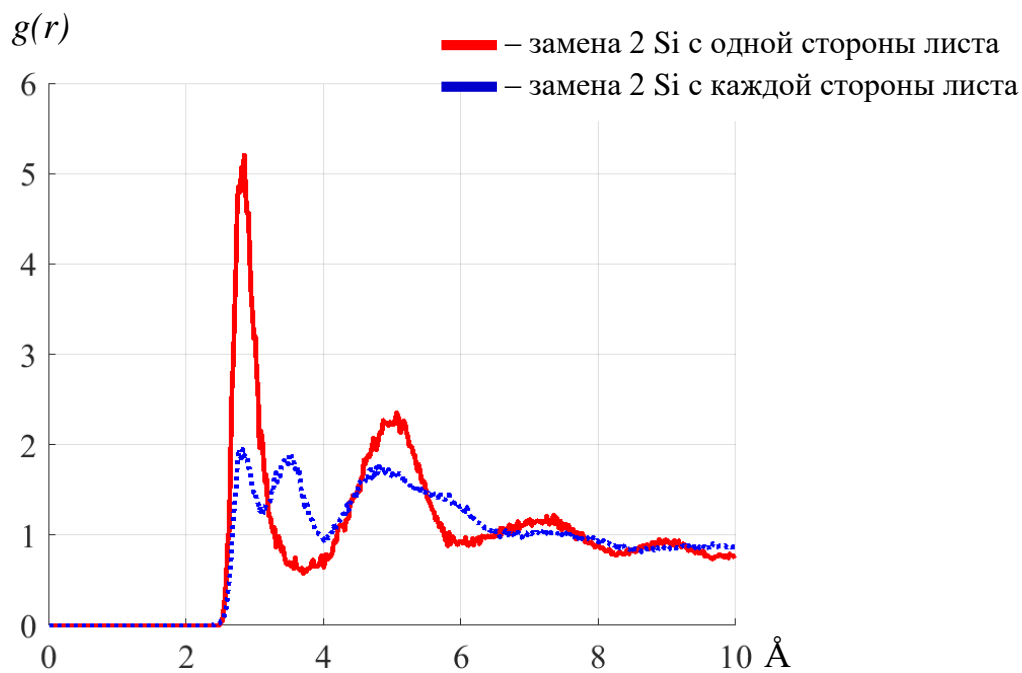


Рисунок 14 – ФРР  $K^+$  в межслоевом пространстве монтмориллонита при различных заменах в тетраэдрическом листе

## 2.4 Выводы

В ходе выполнения ВКР моделировали барьерные свойства минералов монтмориллонит и вермикулит. Рассчитывали коэффициент диффузии катионов  $K^+$  и  $Cs^+$ , распределение катионов и воды между слоями минерала, функцию радиального распределения. Сравнивали данные для природных глин с данными, полученными путем замены атомов Mg, Fe и Si на Al. По результатам выполнения ВКР сделаны следующие выводы:

1. Проведен обзор литературы по методам использования минералов глины при захоронении РАО.
2. Квантово-химическое моделирование показывает, что коэффициент диффузии в значительной мере зависит от положения замещающих атомов в тетраэдрическом и октаэдрическом листах. Наибольшее изменение коэффициента диффузии наблюдается при замене в октаэдрическом листе. Например, в исходной структуре минерала монтмориллонита коэффициент диффузии  $K^+$  равен  $4,17 \cdot 10^{-11} \text{ м}^2/\text{с}$ , а при симметричной замене Mg на Al –  $11,9 \cdot 10^{-11} \text{ м}^2/\text{с}$ .
3. В тетраэдрическом листе наиболее сильный эффект оказывает симметричное замещение с двух сторон атомов Si на атомы Al. Коэффициент диффузии  $K^+$  в исходной структуре монтмориллонита равен  $4,17 \cdot 10^{-11} \text{ м}^2/\text{с}$ , а при замене –  $14,95 \cdot 10^{-11} \text{ м}^2/\text{с}$ .
4. Показано, что наибольшее время защитного действия слоя глины монтмориллонит толщиной 1 метр наблюдается при замене 4 атомов Mg с одной стороны слоя минерала в октаэдрическом листе и составляет  $3 \cdot 10^6$  лет. В исходном минерале это время составляет  $0,76 \cdot 10^6$  лет.

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

Целью данного раздела является оценка конкурентных преимуществ выбранных инструментов для проведения научно-технических разработок, отвечающих предъявляемым требованиям в области ресурсоэффективности и ресурсосбережения.

Достижение цели обеспечивается решением задач:

- разработка общей экономической идеи проекта, формирование концепции проекта;
- организация работ по научно-исследовательскому проекту;
- определение возможных альтернатив проведения научных исследований;
- планирование научно-исследовательских работ;
- оценки коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения;
- определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования [23].

ВКР направлена на исследование коэффициента диффузии катионов через глинистые минералы монтмориллонит, вермикулит при изменении структурных особенностей, например, положений ионов Fe и Mg в слое минерала.

#### **3.1 Потенциальные потребители результатов исследования**

В результате выполнения выпускной квалификационной работы оценены коэффициенты диффузии катионов  $K^+$  и  $Cs^+$  через минералы монтмориллонит, вермикулит. Показаны физико-химические причины, определяющие коэффициент диффузии в рассматриваемых случаях.

Коэффициент диффузии оценивали из результатов квантово-химического моделирования. Известны множества программ для квантово-химического моделирования: Materials Studio 8, HyperChem 8, Lammps, Gaussian. Ранее использовали Gaussian и HyperChem 8, которые явно уступают по функциональным возможностям и интерфейсу программе Materials Studio 8. В качестве аналога используется ПО HyperChem 8.

Целевым рынком результатов исследований по ВКР являются атомная промышленность, научно-исследовательские лаборатории и другие организации, в которых используются или производятся радионуклиды. Эта деятельность приводит к образованию радиоактивных отходов, которые зачастую изолируют от окружающей среды с помощью глинистых минералов.

Сегментировать рынок услуг можно по степени потребности в использовании результатов моделирования. Результаты сегментирования представлены в таблице 5.

Таблица 5 – Результаты сегментирования

		Моделирование коэффициента диффузии катионов $K^+$ и $Cs^+$ через минералы монтмориллонит, вермикулит		
		Атомная промышленность	Научная отрасль	Ядерная медицина
Потребность	Сильная			
	Слабая			

### 3.2 Анализ конкурентных технических решений

Анализ конкурирующих разработок, существующих на рынке, позволяет вносить корректировки в научное исследование, чтобы успешнее противостоять конкурентам. Поскольку рынки пребывают в постоянном движении, необходимо проводить данный анализ систематически. Проведенный анализ рыночного

потенциала результатов моделирования коэффициента диффузии катионов  $K^+$  и  $Cs^+$  через минералы монтмориллонит, вермикулит представлен в таблице 6.

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:

$$K = \sum_i B_i \cdot B_i, \quad (9)$$

где  $K$  – конкурентоспособность разработки;

$B_i$  – вес показателя (в долях единицы);

$B_i$  – балл  $i$ -го показателя.

Таблица 6 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок)

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		$B_f$	$B_{k1}$	$B_{k2}$	$K_f$	$K_{k1}$	$K_{k2}$
1	2	3	4	5	6	7	8
<b>Технические критерии оценки ресурсоэффективности</b>							
1. Технологичность	0,1	5	5	2	0,5	0,5	0,2
2. Необходимость непрерывного контроля	0,05	4	4	4	0,2	0,2	0,2
3. Потребность в дополнительных ресурсах	0,1	5	5	3	0,5	0,5	0,3
4. Долговременные энергозатраты	0,1	5	4	4	0,5	0,4	0,4
5. Универсальность	0,05	4	4	4	0,2	0,2	0,2
<b>Экономические критерии оценки эффективности</b>							
1. Конкурентоспособность продукта	0,1	5	4	4	0,5	0,4	0,4
2. Стоимость эксплуатации	0,2	5	4	4	1	0,8	0,8
3. Сроки эксплуатации (использования)	0,1	4	3	5	0,4	0,3	0,5
4. Стоимость разработки	0,2	5	5	2	1	1	0,4
<b>Итого:</b>	<b>1</b>				<b>4,8</b>	<b>4,3</b>	<b>3,4</b>

где  $B_{\phi}$  – наш продукт;

$B_{K1}$  – наземное хранение открытым способом в контейнерах;

$B_{K2}$  – подземное хранение в контейнерах.

На основании проведенного анализа можно сделать вывод, что разрабатываемая технология захоронения радиоактивных отходов обладает преимуществом как на начальном этапе, так и при долговременной эксплуатации.

### 3.3 SWOT-анализ

SWOT-анализ представляет собой комплексный анализ научно-исследовательского проекта, который применяется для исследования внешней и внутренней сред проекта.

Он проводится в несколько этапов.

Первый этап заключается в описании сильных и слабых сторон, в выявлении возможностей и угроз для реализации проекта. Результат представлен в таблице 7.

Таблица 7 – Матрица SWOT

	<b>Сильные стороны проекта:</b> С1. Низкие первоначальные затраты. С2. Низкие эксплуатационные затраты. С3. Отсутствует необходимость постоянного контроля.	<b>Слабые стороны проекта:</b> Сл1. Необходима подробная георазведка. Сл2. Отличие технологии для жидких и твердых РАО. Сл3. Неизвестна долговременная радиационная стойкость глинистых минералов.
<b>Возможности:</b> В1. Использование местного сырья.		



В2. Использование геологических формаций вблизи источника РАО.		
<b>Угрозы:</b> У1. Миграция радионуклидов до водоносных слоев. У2. Вероятность тектонических изменений. У3. Непредвиденные действия георазведки сторонних организаций.		

Второй этап состоит в выявлении соответствия сильных и слабых сторон научно-исследовательской работы внешним условиям окружающей среды. В таблице 8 представлена интерактивная матрица проекта, в которой показано соотношение сильных и слабых сторон с возможностями и угрозами, что позволяет более подробно рассмотреть перспективы разработки.

Таблица 8 – Интерактивная матрица научно-исследовательского проекта

Возможности проекта	Сильные стороны проекта		
	С1	С2	С3
В1	+	+	0
В2	+	+	0
Возможности проекта	Слабые стороны проекта		
	Сл1	Сл2	Сл3
В1	-	0	-
В2	+	0	-
Угрозы проекта	Сильные стороны проекта		
	С1	С2	С3
У1	+	+	-
У2	+	+	-
У3	0	0	-
Угрозы проекта	Слабые стороны проекта		
	Сл1	Сл2	Сл3
У1	+	0	0
У2	+	+	+
У3	0	0	0

В матрице пересечения сильных и слабых сторон с возможностями и угрозами имеет определенный результат: «+» – сильное соответствие «-» – слабое соотношение, «0» – если есть сомнения в том, что поставить «+» или «-».

Итоговая матрица SWOT-анализа приведена в таблице 9.

Таблица 9 – Итоговая матрица SWOT

	<p><b>Сильные стороны проекта:</b>  С1. Низкие первоначальные затраты.  С2. Низкие эксплуатационные затраты.  С3. Отсутствует необходимость постоянного контроля.</p>	<p><b>Слабые стороны проекта:</b>  Сл1. Необходима подробная георазведка.  Сл2. Отличие технологии для жидких и твердых РАО.  Сл3. Неизвестна долговременная радиационная стойкость глинистых минералов.</p>
<p><b>Возможности:</b>  В1. Использование местного сырья.  В2. Использование геологических формаций вблизи источника РАО.</p>	<p>Широкому использованию технологии способствует сочетание сильных сторон и возможностей.</p>	<p>После дополнительного обоснования радиационной стойкости глинистых минералов значительно расширится номенклатура РАО.</p>
<p><b>Угрозы:</b>  У1. Миграция радионуклидов до водоносных слоев.  У2. Вероятность тектонических изменений.  У3. Непредвиденные действия георазведки сторонних организаций.</p>	<p>За счет постоянного мониторинга захоронения РАО можно уменьшить все негативные последствия потенциальных угроз.</p>	<p>Подробная георазведка уменьшает негативные последствия потенциальных угроз.</p>

Таким образом, в настоящее время преимущества разрабатываемой технологии превалируют над потенциальными угрозами при непрерывном контроле эксплуатирующими организациями.

### 3.4 Планирование научно-исследовательской работы

Исследование по выбранной теме включает в себя следующие этапы:

- 1) Составление технического задания;
- 2) Изучение проблемы, обзор литературы;
- 3) Составление календарного плана;
- 4) Построение модели;
- 5) Написание программного кода;
- 6) Получение результатов моделирования и их анализ;
- 7) Оформление отчета.

Для выполнения выпускной квалификационной работы сформирована рабочая группа, в состав которой входят научный руководитель (НР) и студент (С).

Для оптимизации работ удобно использовать классический метод линейного планирования и управления. Результатом такого планирования является составление линейного графика выполнения всех работ. Расчет параметров линейного графика требует определения продолжительности работ. При отсутствии нормативов времени на проведение отдельных видов работ используются вероятностные оценки. Порядок составления этапов и работ приведен в таблице 10.

Таблица 10 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Основные этапы	№ раб	Содержание работ	Должность исполнителя
Разработка задания	1	Составление технического задания	Научный руководитель
Выбор направления исследований	2	Изучение проблемы, обзор литературы	Студент
	3	Составление календарного плана	Студент
Теоретические и экспериментальные исследования	4	Построение модели	Научный руководитель, студент
	5	Написание программного кода	Студент
	6	Получение результатов моделирования и их анализ	Научный руководитель, студент
Обобщение и оценка результатов	7	Оформление отчета	Студент

### 3.4.1 Определение трудоемкости выполнения работы

Для оптимизации работ используем классический метод линейного планирования и управления, в результате составим линейный график выполнения всех работ.

Для определения трудовых затрат сначала необходимо задать минимально возможную трудоемкость выполнения этапа и максимально возможную, тогда ожидаемая трудоемкость определяется по формуле:

$$t_{ожi} = \frac{3t_{мини} + 2t_{маxi}}{5}, \quad (10)$$

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

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

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

Продолжительность работы в рабочих днях определяется следующим образом:

$$T_{pi} = \frac{t_{ожi}}{Ч_i}, \quad (11)$$

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

### 3.4.2 Разработка графика проведения научного исследования

Поскольку проект является сравнительно небольшим, то оптимальным является построение ленточного графика проведения работ, для большей наглядности и удобства. Диаграмма Ганта представляет собой горизонтальный

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

Перед построением диаграммы Ганта определим длительность работ каждого этапа в календарных днях. Вычисление начинается с определения коэффициента календарности:

$$k = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}}}, \quad (12)$$

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

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

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

$$k = \frac{365}{365 - 104 - 14} = 1,478.$$

Зная коэффициент, можно определить длительность работ в календарных днях:

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k. \quad (13)$$

Используя вышеуказанные формулы, оформим вычисление в виде таблицы 11.

Таблица 11 – Временные показатели проведения научного исследования

Этап	Трудоемкость работ						Длительность работ в рабочих днях, $T_{pi}$	Длительность работ в календарных днях, $T_{ki}$		
	$t_{\text{min}}$ , чел-дни		$t_{\text{max}}$ , чел-дни		$t_{\text{ож}}$ , чел-дни					
	Исполнители									
	НР	С	НР	С	НР	С	НР	С	НР	С
1	2	–	3	–	2,4	–	2,4	–	4	–

2	–	7	–	10	–	8,2	–	8,2	–	13
3	–	3	–	5	–	3,8	–	3,8	–	6
4	1	3	2	5	1,4	3,8	1,4	3,8	3	6
5	–	3	–	5	–	3,8	–	3,8	–	6
6	5	24	7	53	5,8	35,6	5,8	35,6	9	53
7	–	5	–	9	–	6,6	–	6,6	–	10
<b>Итого:</b>									<b>16</b>	<b>99</b>

На основании таблицы 11 построен календарный план-график, в виде диаграммы Ганта, которая представлена в таблице 12.

Таблица 12 – Календарный план-график (диаграмма Ганта) проведения работы

№	Вид работ	$T_{ki}$ , кал. дн.		Продолжительность выполнения работ, неделя												
		Научный руководитель	Студент	февраль		март			апрель			май				
				2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3		
1	Составление технического задания	4	–	■												
2	Изучение проблемы, обзор литературы	–	13		■											
3	Составление календарного плана	–	6			■										
4	Построение модели	3	6				■									
5	Написание программного кода	–	6					■								
6	Получение результатов моделирования и их анализ	9	53					■								
7	Оформление отчета	–	10												■	

Научный руководитель – ■ ; Студент – ■ .

### 3.5 Бюджет научно-технического исследования

В процессе формирования научно-технического исследования (НТИ) используется следующая группировка затрат по статьям:

- материальные затраты;
- затраты на основное оборудование для научно-экспериментальных работ;
- основная заработная плата исполнителей проекта;
- дополнительная заработная плата исполнителей проекта;
- отчисления о во внебюджетные фонды (страховые отчисления);
- накладные расходы [23].

#### 3.5.1 Материальные затраты

Расчет материальных затрат проводится по формуле:

$$Z_m = (1 + k_T) \sum_{i=1}^m C_i \cdot N_{расxi}, \quad (14)$$

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

$N_{расxi}$  – количество материальных ресурсов, планируемых к использованию при выполнении научного исследования;

$C_i$  – цена материального ресурса за единицу (руб./шт., руб./м, руб./м<sup>2</sup>);

$k_T$  – коэффициент, учитывающий транспортно-заготовительные расходы, значение которого варьируется от 15 до 25 %.

Затраты на электроэнергию рассчитываются следующим образом:

$$Z_m = C_{эл} \cdot P \cdot F_{об}, \quad (15)$$

где  $C_{эл}$  – тариф на электроэнергию, для Томска на 2022 год тариф составляет 3,85 руб./(кВт·ч);



$P$  – мощность оборудования, у использованного оборудования мощность питания равна 120 Вт.

$F_{об}$  – время использования оборудования, время использования 576 часов.

Расчет:

$$Z_m = 3,85 \cdot 0,12 \cdot 576 = 266,12 \text{ руб.}$$

Таблица 13 – Материальные затраты

Наименование	Количество, шт.	Цена за ед., руб.	$Z_m$ , руб.
Бумага А4	1	593	593
Электроэнергия	69,12	3,85	266,12
<b>Итого:</b>			859,12

### 3.5.2 Затраты на специальное оборудование

При выполнении инженерного проекта использовалось личное оборудование. Рассчитаем сумму амортизационных отчислений:

$$Z_a = \sum_{i=1}^n \frac{C_{бал} \cdot H_a \cdot g_i \cdot t}{\Phi_{эф}}, \quad (16)$$

где  $C_{бал}$  – стоимость вида оборудования;

$H_a$  – норма годовых амортизационных отчислений;

$g_i$  – количество единиц оборудования;

$t$  – время работы оборудования;

$\Phi_{эф}$  – эффективный фонд времени работы оборудования;

В работе спецоборудованием является ноутбук стоимостью 70000 рублей. Норма амортизации 25 %. Время использования оборудования  $99 \cdot 8/24 = 33$  дня.

$$Z_a = \frac{70000 \cdot 0,25 \cdot 1 \cdot 33}{251} = 2301 \text{ руб.}$$

Исследования по ВКР не предполагают покупку дорогостоящего оборудования и программного обеспечения, превышающего по стоимости 150 000 рублей. Расчеты с помощью программы Materials Studio 8 проводились на персональном компьютере.

### 3.5.3 Заработная плата исполнителей работы

Статья включает основную заработную плату исполнителей, непосредственно занятых выполнением научно-технического исследования, включая премии (доплаты), и дополнительную заработную плату:

$$Z_{зп} = Z_{осн} + Z_{дон}, \quad (17)$$

где  $Z_{осн}$  – основная заработная плата;

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

Основную заработную плату можно определить так:

$$Z_{осн} = Z_{дн} \cdot T_{раб}, \quad (18)$$

где  $Z_{дн}$  – среднедневная заработная плата работника;

$T_{раб}$  – продолжительность работ.

Среднедневная заработная плата работника определяется по формуле:

$$Z_{дн} = \frac{Z_m \cdot M}{F_d}, \quad (19)$$

где  $Z_m$  – месячный должностной оклад работника;

$M$  – количество месяцев работы без отпуска в течение года (10,4 месяца, при отпуске в 48 рабочих дней, 6-дневная неделя);

$F_d$  – действительный годовой фонд рабочего времени персонала.

Таблица 14 – Расчетный годовой фонд рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Студент
Календарное число дней	365	365

Количество нерабочих дней		
-выходные дни	52	52
-праздничные дни	14	14
Потери рабочего времени		
-отпуск	48	48
-невыходы по болезни	—	—
Действительный годовой фонд рабочего времени	251	251

Расчет среднедневной заработной платы и основной заработной платы для научного руководителя (оклад профессора, доктора наук 68510 руб.):

$$Z_{\text{дн}} = \frac{68510 \cdot 10,4}{251} = 2838,7 \text{ руб.}$$

$$Z_{\text{осн}} = 2838,7 \cdot 16 = 45419,2 \text{ руб.}$$

Для студента (при расчетах принимается, что оклад студента принимается равным минимальному размеру оплаты труда 13900 руб.):

$$Z_{\text{дн}} = \frac{18070 \cdot 10,4}{251} = 748,7 \text{ руб.}$$

$$Z_{\text{осн}} = 748,7 \cdot 99 = 74121,3 \text{ руб.}$$

Таблица 15 – Расчет основной заработной платы

Исполнители	$Z_{\text{мс}}$ , руб.	$k_p$	$Z_{\text{м}}$ , руб.	$Z_{\text{дн}}$ , руб.	$T_{\text{раб}}$ , раб.дн.	$Z_{\text{осн}}$ , руб.
Научный руководитель	52700	1,3	68510	2838,7	16	45419,2
Студент	13900	1,3	18070	748,7	99	74121,3
<b>Итого:</b>						119540,5

Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы учитывают величину предусмотренных Трудовым кодексом РФ доплат за отклонение от нормальных условий труда, а также выплат, связанных с обеспечением гарантий и компенсаций (при исполнении государственных и общественных обязанностей, при совмещении работы с обучением, при предоставлении ежегодного оплачиваемого отпуска).

Расчет дополнительной заработной платы ведется по следующей формуле:

$$Z_{доп} = k_{доп} \cdot Z_{осн}, \quad (20)$$

где  $k_{доп}$  – коэффициент дополнительной заработной платы (на стадии проектирования принимается равным 0,12-0,15).

Таблица 16 – Заработная плата исполнителей ВКР

Заработная плата	Научный руководитель	Студент
Основная зарплата $Z_{осн}$ , руб.	45419,2	74121,3
Дополнительная зарплата $Z_{доп}$ , руб.	6131,6	10006,4
Итого по статье $Z_{зн}$ , руб.	51550,8	84127,7
<b>Итого:</b>	135678,5	

### 3.5.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется по формуле:

$$Z_{внеб} = k_{внеб} \cdot Z_{общ}, \quad (21)$$

где  $k_{внеб}$  – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды, варьируется от 30 до 35 %. При расчетах примем, что  $k_{внеб} = 30,2$  % для образовательных и научных учреждений.

Из предыдущих пунктов,  $Z_{общ} = 135678,5$  руб. Тогда величина отчислений составит:

$$Z_{внеб} = 0,302 \cdot 135678,5 = 40974,9 \text{ руб.}$$

### 3.5.5 Накладные расходы

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

$$Z_{\text{накл}} = k_{\text{накл}} \cdot (Z_{\text{м}} + Z_{\text{внеб}} + Z_{\text{осн}}), \quad (22)$$

где  $k_{\text{накл}}$  – коэффициент накладных расходов, при расчете примем равным 16 %.

$$Z_{\text{накл}} = 0,16 \cdot (859,12 + 40974,9 + 119540,5) = 25819,9 \text{ руб.}$$

### 3.5.6 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

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

На основании проведенных расчетов, составим таблицу с полученными затратами научно-исследовательского проекта.

Таблица 17 – Бюджет затрат проекта

Затраты	Сумма, руб.	
	Научный руководитель	Студент
Материальные затраты	859,12	
Затраты на специальное оборудование	–	2301
Заработная плата исполнителей проекта	51550,8	84127,7
Отчисления во внебюджетные фонды	40974,9	
Накладные расходы	25819,9	
<b>Итого:</b>	205633,4	

### 3.6 Определение ресурсной эффективности проекта

Определение эффективности происходит на основе расчета интегрального показателя эффективности научного исследования. Его нахождение связано с определением двух средневзвешенных величин: финансовой эффективности и ресурсоэффективности.

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{финр}^{исп.i} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{max}}, \quad (23)$$

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

$\Phi_{pi}$  – стоимость  $i$ -го варианта исполнения;

$\Phi_{max}$  – максимальная стоимость исполнения научно-исследовательского проекта.

$$I_{финр}^{исп.разработка} = \frac{205633,4}{250000} = 0,82.$$

$$I_{финр}^{исп.аналог} = \frac{215000}{250000} = 0,86.$$

Полученная величина интегрального финансового показателя научного исследования отражает соответствующее численное удешевление стоимости разработки, так как полученное значение для разных исполнителей не превышает единицы.

Интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов исполнения объекта исследования можно определить следующим образом:

$$I_{pi} = \sum a_i \cdot b_i, \quad (24)$$

где  $I_{pi}$  – интегральный показатель ресурсоэффективности для  $i$ -го варианта исполнения разработки;

$a_i$  – весовой коэффициент  $i$ -го варианта исполнения разработки;

$b_i^a, b_i^p$  – бальная оценка  $i$ -го варианта исполнения разработки, устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания.

Таблица 18 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Критерии \ Объект исследования	Весовой коэффициент параметра	Разработка	Аналог
Адекватность используемых физико-химических моделей	0,15	4	3
Время проведения расчетов	0,2	2	3

Наличие интуитивно понятного интерфейса	0,05	4	4
Удобство визуализации результатов	0,1	5	4
Стоимость лицензионной программы	0,2	5	5
Системные требования к ПК	0,2	2	2
Количество предоставляемой информации	0,1	5	3
<b>Итого:</b>	<b>1</b>	<b>3,6</b>	<b>3,35</b>

$$I_{p-разработка} = 0,15 \cdot 4 + 0,2 \cdot 2 + 0,05 \cdot 4 + 0,1 \cdot 5 + 0,2 \cdot 5 + 0,2 \cdot 2 + 0,1 \cdot 5 = 3,6.$$

$$I_{p-аналог} = 0,15 \cdot 3 + 0,2 \cdot 3 + 0,05 \cdot 4 + 0,1 \cdot 4 + 0,2 \cdot 5 + 0,2 \cdot 2 + 0,1 \cdot 3 = 3,35.$$

Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения научного исследования:

$$I_{исп.i} = \frac{I_{p-исп.i}}{I_{финр}}, \quad (25)$$

$$I_{исп.разработка} = \frac{3,6}{0,82} = 4,4.$$

$$I_{исп.аналог} = \frac{3,35}{0,86} = 3,9.$$

С целью определения наиболее целесообразного варианта из предложенных сравним интегральные показатели эффективности вариантов исполнения разработки и определим сравнительную эффективность проекта:

$$\mathcal{E}_{cp} = \frac{I_{исп.1}}{I_{исп.2}}, \quad (26)$$

$$\mathcal{E}_{cp} = \frac{4,4}{3,9} = 1,13.$$

Таблица 19 – Сравнительная эффективность научного исследования

№, п/п	Показатели	Разработка	Аналог
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,82	0,86
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	3,6	3,35
3	Интегральный показатель эффективности	4,4	3,9
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1,13	

На основе расчета интегрального показателя с определением двух средневзвешенных величин финансовой эффективности и ресурсоэффективности можно сделать вывод, что реализация научно-исследовательской работы в первом исполнении более эффективна.

### **Выводы по разделу**

1. Анализ конкурентных технических решений показал, что разрабатываемая технология захоронения радиоактивных отходов, в силу своей технологичности и долговременной эксплуатации, наиболее предпочтительна, чем альтернативные методы.
2. В ходе планирования научно-исследовательской работы определен перечень работ, выполняемый рабочей группой. На основе временных показателей по каждой из проведенных работ построен календарный план-график, в виде диаграммы Ганта, из которого следует, что самая продолжительная по времени работа – это получение результатов моделирования.
3. Бюджет проекта составил 205633,4 рублей.
4. Проведена сравнительная характеристика эффективности разработки на основании интегрального показателя эффективности. Реализация проекта в первом исполнении более эффективна.



## **4 Социальная ответственность**

При захоронении РАО необходимо прогнозировать время защитного действия инженерных барьеров безопасности. Указанное время зависит от коэффициента диффузии радионуклидов через ИББ, в которых наиболее часто используют глинистые минералы или их смеси.

В рамках выполнения выпускной квалифицированной работы проводилось моделирование расчетов коэффициента диффузии катионов  $K^+$ ,  $Cs^+$  через минералы монтмориллонит и вермикулит. Моделировали структурные особенности минералов двух глин для определения коэффициента диффузии катионов через глинистые минералы монтмориллонит и вермикулит в зависимости от положения ионов Fe, Mg и Si в слое минерала.

Расчеты проводились в аудитории № 316 учебного корпуса № 10 на ПК личного пользования.

### **4.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности**

#### **4.1.1 Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя) правовые нормы трудового законодательства**

Основные положения по охране труда изложены в [24]. 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 [24] каждый работник имеет право на:

- рабочее место, соответствующее требованиям охраны труда;
- 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 [24].

#### **4.1.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя**

Рациональная планировка рабочего места должна предусматривать четкий порядок и постоянство в размещении инструментов, приспособлений и

документации, как в процессе работы, так и при их хранении. Правильное расположение предметов обеспечивает удобную рабочую позу, выполнение трудовых процессов с максимальной экономией движений исполнителя, а также полную безопасность труда. Необходимые инструменты для выполнения научного исследования должны располагаться в зоне легкой досягаемости рабочего пространства, как показано на рисунке 15.

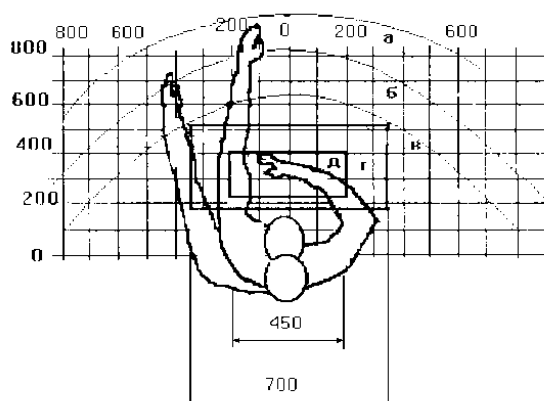


Рисунок 15 – Зоны досягаемости рук в горизонтальной плоскости:

Обозначения: а – зона максимальной досягаемости рук; б – зона досягаемости пальцев при вытянутой руке; в – зона легкой досягаемости ладони; г – оптимальное пространство для грубой ручной работы; д – оптимальное пространство для тонкой ручной работы

Оптимальное размещение предметов труда и документации в зонах досягаемости рук:

- дисплей размещается в зоне «а» (в центре);
- клавиатура – в зоне «г, д»;
- системный блок размещается в зоне «б» (слева);
- принтер находится в зоне «а» (справа);
- литература и документация, необходимая при работе находится в зоне легкой досягаемости ладони – «в» (слева) [25].

При выборе рабочего места, а именно письменного стола должны быть учтены следующие требования [25], которые представлены в таблице 20.

Таблица 20 – Требования к оснащению рабочего места, предусматривающего длительную работу за ПК

Параметры	Размеры
Ширина рабочего стола	От 70 до 140 см
Высота рабочего стола	От 60 до 80 см
Глубина рабочего стола	От 60 до 80 см
Расстояние от глаз до монитора	От 50 до 60 см
Расстояние клавиатуры от края стола	От 10 до 30 см
Сидение	Должно позволять регулировку по высоте, повороту и углу наклона спинки (регулировки должны быть независимыми друг от друга)
Пространство для ног	Ширина от 30 см высота от 60 см, глубина – от 45 см, с углом наклона до 20 градусов

Монитор должен быть расположен на уровне глаз оператора на расстоянии 500-600 мм. Согласно нормам, угол наблюдения в горизонтальной плоскости должен быть не более 45 градусов к нормали экрана. Лучше если угол обзора будет составлять 30 градусов. Кроме того, должна быть возможность выбирать уровень контрастности и яркости изображения на экране [25].

Должна предусматриваться возможность регулировки экрана монитора:

- по высоте +3 см;
- наклон относительно вертикали 10-20 градусов;
- в левом и правом направлениях.

В случае если работа оператора предполагает однообразную умственную работу, которая требует значительного нервного напряжения и большого сосредоточения, то лучше всего выбирать неяркие, малоконтрастные цветовые оттенки (слабонасыщенные оттенки холодного голубого или зеленого цветов), которые не ослабляют внимание. Если работа требует большой умственной и физической напряженности, тогда следует использовать более теплые оттенки, которые способствуют повышению концентрации внимания [25].

В аудитории № 316 учебного корпуса № 10 ТПУ установленные нормы [25] выполняются в полном объеме.

## 4.2 Производственная безопасность

### 4.2.1 Анализ вредных и опасных факторов

Для проведения расчетов используется ПЭВМ. Опасные и вредные факторы, которые могут возникать при работе в аудитории и воздействовать на персонал, представлены в таблице 21.

Таблица 21 – Возможные вредные и опасные факторы

<b>Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015 [26])</b>	<b>Нормативные документы</b>
1. Микроклимат	ГОСТ 30494-2011 Здания жилые и общественные. Параметры микроклимата в помещениях [27]
2. Шум	ГОСТ 12.1.003-83 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Шум. Общие требования безопасности [28]
3. Освещенность рабочей зоны	СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-03 Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещенному освещению жилых и общественных зданий [29]
4. Электромагнитные поля	ГОСТ 12.1.006-84 ССБТ Электромагнитные поля радиочастот. Общие требования безопасности [30]
5. Пожаробезопасность	ГОСТ 12.1.004-91 Система стандартов безопасности труда. Пожарная безопасность. Общие требования [31]
6. Электробезопасность	ГОСТ Р12.1.019-2017 ССБТ Электробезопасность [32]

### 4.2.2 Обоснование мероприятий по защите исследователя от действия вредных и опасных факторов

#### 4.2.2.1 Микроклимат

Основные факторы, характеризующие микроклимат: температура, подвижность и влажность воздуха. Отклонение этих параметров от нормы приводит к ухудшению самочувствия исполнителя, снижению

производительности труда и к возникновению различных заболеваний. Оптимальные значения характеристик микроклимата устанавливаются в соответствии с нормами [27] и приведены в таблице 22.

Таблица 22 – Оптимальные параметры микроклимата

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

Отклонение показателей микроклимата от нормы может приводить к возникновению общих и локальных ощущений теплового дискомфорта, напряжению механизмов терморегуляции, ухудшению самочувствия и понижению работоспособности исполнителя [27].

Для обеспечения установленных норм микроклиматических параметров и чистоты воздуха на рабочих местах и в помещениях применяют вентиляцию.

Вентиляция может осуществляться естественным и механическим путём. Оптимальная кратность воздухообмена в производственных помещениях находится в достаточно широких пределах: от 3 до 40 раз в час [33]. В используемой аудитории установлена система вытяжной вентиляции, обладающая реверсной функцией (забор атмосферного воздуха или выброс воздуха из помещения), марки САТА F-2050 производительностью  $Q = 380 \text{ м}^3/\text{час}$ . САТА F-2050 обеспечивает циркуляцию воздуха в аудитории. Для аудитории с длиной 7 м, шириной 4,8 м и высотой 3,5 м рассчитаем объем помещения по формуле:

$$V = a \cdot b \cdot h, \quad (27)$$

где  $a$  – ширина аудитории;

$b$  – длина аудитории;

$h$  – высота аудитории.

$$V = 7 \cdot 4,8 \cdot 3,5 = 117,6 \text{ м}^3.$$

Данная система вытяжной вентиляции обеспечивает следующую кратность воздухообмена (ВО) в аудитории:

$$BO = \frac{Q}{V}, \quad (28)$$

$$BO = \frac{380}{117,6} = 3,2.$$

Помимо системы вытяжной вентиляции в аудитории находится система локальной вытяжки, предназначенная для удаления вредных газообразных веществ из химического бокса.

Таким образом установлено, что микроклимат в используемой аудитории № 316 учебного корпуса № 10 ТПУ соответствует нормативным условиям [27] для длительной работы персонала.

#### 4.2.2.2 Шум

Превышение уровня шума возникает при работе механических и электромеханических изделий.

Для оценивания шумовой обстановки допускается использовать числовую характеристику, называемую уровнем звука (измеряется в дБ). В соответствии с [28] допустимый уровень шума при работе, требующей сосредоточенности, работе с повышенными требованиями к процессам наблюдения и дистанционного управления производственными циклами на рабочих местах в помещениях с шумным оборудованием, составляет 75 дБ. Зоны с уровнем звука 80 дБ должны быть обозначены знаками безопасности согласно [34].

В аудитории № 316 основными источниками шума являются система вытяжной вентиляции и компьютеры (охлаждение внутри системного блока).

В соответствии со спецификацией на компьютер Intel Core 2 Duo, уровень шума блока питания компьютера составляет 5-10 дБ, уровень шума

охлаждающего устройства процессора 15-20 дБ, остальные элементы охлаждения являются пассивными и их уровень шума не учитывается.

В соответствии со спецификацией системы вытяжной вентиляции САТА F-2050, максимальный уровень шума, производимого внутренним его блоком, составляет 53 дБ.

В рассматриваемой аудитории дополнительная звукоизоляция не требуется, так как предельное значение уровня шума [28] не достигается.

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

- внутренний блок кондиционера следует располагать вдали от людей, занимающихся творческой деятельностью (программисты), и не использовать на полную мощность, если позволяют климатические условия;
- своевременно осуществлять профилактику системных блоков компьютеров (очистка от пыли и смазывание движущихся частей охлаждающих установок, замена излишне шумных комплектующих).

Защита от повышенных уровней шума осуществляется методами его снижения в источнике образования и на пути распространения, устройством экранов и звукопоглощающих облицовок, средствами индивидуальной защиты согласно [28, 34].

#### **4.2.2.3 Освещенность рабочей зоны**

Утомляемость органов зрения может быть связана как с недостаточной освещенностью, так и с чрезмерной освещенностью, а также с неправильным направлением света.

По нормативам 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 [29].



Искусственное освещение в помещениях для эксплуатации ПЭВМ должно осуществляться системой общего равномерного освещения. В производственных и административно-общественных помещениях, в случаях преимущественной работы с документами, следует применять системы:

- комбинированного освещения (к общему освещению дополнительно устанавливаются светильники;
- местного освещения, предназначенные для освещения зоны расположения документов) [29].

Площадь помещения:

$$S = a \cdot b, \quad (29)$$

где  $a$  – длина аудитории;

$b$  – ширина аудитории.

$$S = 7 \cdot 4,8 = 33,6 \text{ м}^2.$$

Высота светильника над рабочей поверхностью:

$$h = h_p - h_{pn}, \quad (30)$$

где  $h_p$  – высота подвеса светильника;

$h_{pn}$  – высота рабочей поверхности над полом.

$$h = 350 - 73 = 277 \text{ см.}$$

При освещении рабочего помещения четырехламповыми светильниками ЛВО-4×18 при одиночной установке или при непрерывных рядах из одиночных светильников в соответствии с требованиями наименьшая допустимая высота над полом составляет 3 м. Рассчитанная величина  $h = 2,77$  м не соответствует требованиям.

Количество светильников определяется с помощью следующей формулы:

$$N = \frac{E_k \cdot S \cdot K_3}{i \cdot \varphi \cdot n}, \quad (31)$$

где  $E_k = 300$  лк – минимальная нормированная освещенность;

$K_3 = 1,5$  – коэффициент запаса, учитывающий загрязнение светильника, наличие в атмосфере дыма, пыли;

$i = 0,49$  – коэффициент использования светового потока;

$n = 4$  – количество ламп в светильнике;

$\varphi = 1080$  Лм – световой поток одной лампы.

$$N = \frac{300 \cdot 33,6 \cdot 1,5}{0,49 \cdot 1080 \cdot 4} = 7,2 \text{ шт.}$$

Во избежание недостаточного освещения рабочего пространства расчетное количество светильников округляется до целого в большую сторону. Таким образом, необходимое количество светильников в аудитории № 316 равняется восьми.

На рисунке 16 изображен план помещения и размещения светильников с люминесцентными лампами в аудитории № 316 учебного корпуса № 10 ТПУ.

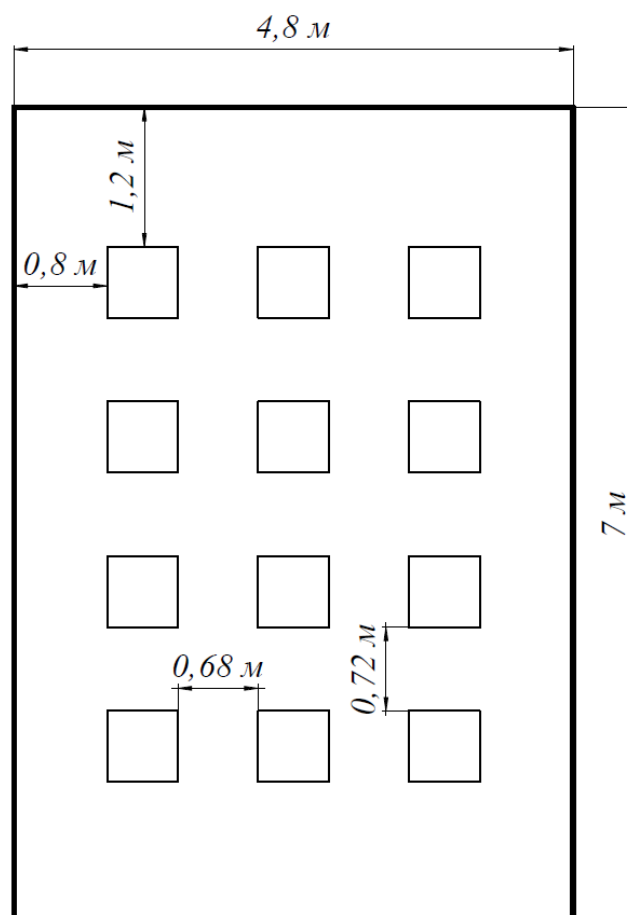


Рисунок 16 – План аудитории № 316 и размещения светильников с люминесцентными лампами

Расчетное количество светильников в аудитории № 316 учебного корпуса № 10 ТПУ – 8 штук, а фактически установлены 12 штук. Таким образом, освещенность помещения соответствует нормам [29].

#### 4.2.2.4 Электромагнитные поля

Основной вредный фактор при использовании ЭВМ – это электромагнитное излучение от составляющих частей компьютера.

Экран и системные блоки ЭВМ также производят электромагнитное излучение. Основная его часть происходит от системного блока и видеокабеля. Напряженность электромагнитного поля (ЭМП) на расстоянии 50 см вокруг экрана по электрической составляющей должна соответствовать таблице 23.

Повышенный уровень электромагнитного излучения может негативно влиять на организм человека, а именно приводить к нервным расстройствам, нарушению сна, значительному ухудшению зрительной активности, ослаблению иммунной системы, расстройствам сердечно-сосудистой системы [30].

Таблица 23 – Допустимые уровни ЭМП, создаваемых ПЭВМ

Наименование параметров		Величина допустимого уровня
Напряженность электромагнитного поля	Диапазон частот 5 Гц – 2 кГц	25 В/м
	Диапазон частот 2 кГц – 400 кГц	2,5 В/м
Плотность магнитного потока	Диапазон частот 5 Гц – 2 кГц	250 нТл
	Диапазон частот 2 кГц – 400 кГц	25 нТл

Существуют следующие способы защиты от электромагнитного поля:

- увеличение расстояния от источника (экран должен находиться на расстоянии не менее 50 см от пользователя);
- применение приэкранных фильтров, специальных экранов и других средств индивидуальной защиты [30].

Таким образом, установлено, что в аудитории № 316 уровень электромагнитного излучения соответствует санитарным нормам [30].

#### **4.2.2.5 Пожаро-взрывобезопасность**

На основании [31] аудитория № 316 относится к категории «ВЗ (П-Па)» по пожарной и взрывопожарной опасности, так как в помещении содержатся твердые и горючие вещества в холодном состоянии.

Основными причинами возгораний в аудитории может служить неисправность электрооборудования, например, короткое замыкание, несоблюдение правил пожарной безопасности, наличие горючих компонентов.

Профилактические мероприятия позволят избежать возникновение пожароопасных ситуаций. К ним относят осуществление визуального осмотра электрооборудования, устранение дефектов и замену старых компьютерных проводов новыми, проверку срабатывания двух датчиков пожарной сигнализации, правильную эксплуатацию оборудования.

#### **4.2.2.6 Электробезопасность**

В зависимости от условий в помещении опасность поражения человека электрическим током увеличивается или уменьшается. Аудитория № 316 10 корпуса ТПУ относится к первому классу «помещения без повышенной опасности» согласно [32]. Однако, наличие в рабочем помещении ПЭВМ вызывает опасность поражения электрическим током.

Оператор ЭВМ работает с электроприборами: компьютером (дисплей, системный блок) и периферийными устройствами. Существует опасность поражения электрическим током в следующих случаях [32]:

- при непосредственном прикосновении к токоведущим частям во время ремонта ЭВМ;
- при прикосновении к нетоковедущим частям, оказавшимся под напряжением (в случае нарушения изоляции токоведущих частей ЭВМ);

- при прикосновении с полом, стенами, оказавшимися под напряжением;
- при коротком замыкании в высоковольтных блоках: блоке питания и блоке дисплейной развёртки.

Основными мероприятиями по защите от поражения электрическим током являются:

- отключение напряжения с токоведущих частей, на которых или вблизи которых будет проводиться работа, и принятие мер по обеспечению невозможности подачи напряжения к месту работы;
- заземление корпусов всех установок через нулевой провод;
- покрытие металлических поверхностей инструментов надежной изоляцией;
- недоступность токоведущих частей аппаратуры (заключение в корпуса электропоражающих элементов и токоведущих частей).

### **4.3 Экологическая безопасность**

При выполнении ВКР проводилось моделирование расчетов коэффициента диффузии катионов через минералы двух глин. При выполнении расчетов используется ПЭВМ.

Влияние эксплуатации ПК на окружающую среду минимально. Наибольший вред от него – потребление электроэнергии. ПЭВМ не производит выбросов вредных веществ, не создает излучения, способного нарушить экологическую безопасность природы. Однако его производство и утилизация составляют серьезную проблему. Так, при производстве ПЭВМ используются тяжелые, щелочноземельные металлы, ртуть, пластик и стекло, что без должной утилизации по окончании службы попадает в природу и остается в не переработанном виде от века до полутора тысяч лет [35].

Мероприятия, позволяющие сохранять экологическую безопасность находясь на рабочем месте [35]:

- правильная утилизация ПЭВМ и других систем, а также их комплектующих;
- использование энергосберегающих ламп;
- использование аккумуляторов вместо солевых батареек.

Снижение уровня загрязнения окружающей среды возможно за счёт более эффективного и экономного использования электроэнергии самими потребителями. Это использование более экономичного оборудования, а также эффективного режима загрузки этого оборудования. Сюда также включается и соблюдение производственной дисциплины в рамках правильного использования электроэнергии [35].

#### **4.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях**

##### **4.4.1 Анализ типичных ЧС при проведении исследования**

Чрезвычайная ситуация (ЧС) – обстановка, сложившаяся на определенной территории в результате аварии, опасного природного явления, катастрофы, стихийного или иного бедствия, которая может повлечь за собой человеческие жертвы, ущерб здоровью людей или окружающей природной среде, значительные материальные потери и нарушение условий жизнедеятельности людей.

При проведении исследования наиболее вероятной ЧС является пожар.

Рассмотрим возможные чрезвычайные ситуации в аудитории № 316 учебного корпуса № 10 ТПУ, а именно:

- пожар;
- удар электрическим током;
- травмирование в результате падения с высоты.

Мероприятия по предотвращению и ликвидации последствий вышеуказанных чрезвычайных ситуаций представлены в таблице 24.

Таблица 24 – Чрезвычайные ситуации, методы их предотвращения и ликвидации последствий

№	Чрезвычайная ситуация	Методы предотвращения ЧС	Ликвидация последствий ЧС
1	Пожар	Периодическое проведение инструктажа; Установка датчиков дыма и огня; Контроль целостности электротехнических приборов.	Обесточить помещение; Заблокировать поступление воздуха; Сообщить о пожаре преподавателю; Покинуть помещение; Вызов пожарной службы и спасателей (тел. 112); Вызов скорой медицинской помощи.
2	Удар электрическим током	Периодическое проведение инструктажа; Заземление всех электротехнических приборов; Контроль целостности электротехнических приборов.	Обесточить помещение; Оказать первую медицинскую помощь; Вызов скорой медицинской помощи; Вызов спасателей (тел. 112).
3	Травмирование в результате падения с высоты	Периодическое проведение инструктажа; Содержание помещения в надлежащем виде; Соблюдение требований безопасности при выполнении работ на высоте.	Оказать первую медицинскую помощь; Вызов скорой медицинской помощи; Вызов спасателей (тел. 112).

### Выводы по разделу

1. Рассмотрены специальные правовые нормы трудового законодательства и организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исполнителя.
2. Проведен анализ вредных и опасных факторов, которые могут возникнуть на рабочем месте при проведении исследования. Приведены мероприятия

по снижению воздействия опасных и вредных факторов на исполнителя [27-34].

3. Рабочее помещение № 316 относится к первому классу электробезопасности – помещения без повышенной опасности [32] и к категории «ВЗ (П-Па)» по пожарной и взрывопожарной безопасности [31].
4. Проведен обзор возможного влияния процесса исследования на окружающую среду. Рассмотрены меры по защите окружающей среды [35].
5. Проведен анализ вероятных чрезвычайных ситуаций, которые могут возникнуть на рабочем месте. Рассмотрены мероприятия по предотвращению ЧС и порядок действий при их возникновении.



## Заключение

В ходе выполнения выпускной квалификационной работы исследована зависимость барьерных свойств глинистых минералов монтмориллонит и вермикулит в зависимости от местоположения атомов Al, замещающих атомы Mg, Fe и Si в слоях исходного минерала. Показано, что, в зависимости от состава глинистого минерала и положения атомов Al, Mg, Fe и Si, время защитного действия глинистого барьера безопасности захоронения РАО из глины монтмориллонит может изменяться до 4 раз.

## Список использованных источников

1. Семак Е.Ю. Перспективный метод захоронения долгоживущих радиоактивных отходов // Молодежь и наука: Сборник материалов VIII Всероссийской конференции студентов, аспирантов и молодых ученых, посвященной 155-летию со дня рождения К.Э. Циолковского. – Красноярск: Сибирский федеральный ун-т, 2012.
2. Кулькова Е.Ю., Френкель Е.Н., Кучер М.И. Захоронение радиоактивных отходов. – СПб.: военная академия материально-технического обеспечения им. генерала армии А.В. Хрулева, 2018. – 16 с.
3. Ахмедзянов В.Р., Лащенкова Т.Н. Обращение с радиоактивными отходами. – М.: Энергия, 2008. – 210 с.
4. Крупская В.В., Бирюков Д.В., Белоусов П.Е., Лехов В.А., Романчук А.Ю., Калмыков С.Н. Стратегия создания пункта глубинного захоронения радиоактивных отходов // Радиоактивные отходы. – 2018. – № 2 (3). – 144-120 с.
5. Ильина О.А., Крупская В.В., Винокуров С.Е., Калмыков С.Н. Современное состояние в разработках и использовании глинистых материалов в качестве инженерных барьеров безопасности на объектах консервации и захоронении РАО в России // Радиоактивные отходы. 2019. № 4 (9). – 71-84 с.
6. Крупская В.В., Бирюков Д.В., Белоусов П.Е., Лехов В.А., Романчук А.Ю., Калмыков С.Н. Применение природных глинистых материалов для повышения уровня ядерной и радиационной безопасности объектов ядерного наследия // Радиоактивные отходы. – 2018. – № 2 (3). – 30-43 с.
7. Савоненков В.Г., Андерсон Е.А., Шабалев С.И. Глины как геологическая среда для изоляции радиоактивных отходов. – СПб.: Радиевый институт им. В.Г.Хлопина, 2012. – 215 с.
8. Wilson M.J. Rock-forming minerals. Sheet Silicates: Clays Minerals. London: The Geological Society, 2013. – 724 p.
9. S. Guggenheim, J.M. Adams, D.C. Bain, F. Bergaya, M.F. Bergaya, M. Brigatti, V.A. Drits, M.L.L. Formoso, E. Galan, T. Kogure, H. Stanjek. Summary of

recommendations of Nomenclature Committees relevant to clay mineralogy: Report of the Association Internationale Pour L'étude des Argiles (AIPEA) nomenclature committee for 2006 // Clays and Clay Minerals. – 2006. – V. 54. – № 6. – P. 761–772.

10. Бетехтин А.Г. Курс минералогии: учебное пособие / А.Г. Бетехтин. – М.: КДУ, 2007. – 720с.

11. НП-055-14 «Захоронение радиоактивных отходов. Принципы, критерии и основные требования безопасности».

12. Павлов Д.И., Ильина О.А. О системном подходе к выбору барьеров безопасности для захоронения РАО классов 3 и 4 // Радиоактивные отходы. – 2020. – № 3 (12). – 39-53 с.

13. Мартынов К.В., Захарова Е.В., Дорофеев А.Н., Зубков А.А, Прищеп А.А. Использование глинистых материалов для создания защитных барьеров радиационно опасных объектов // Радиоактивные отходы. – 2020. – № 3 (12). – 54-65 с.

14. Гольдберг В.М., Скворцов Н.П. Проницаемость и фильтрация в глинах. – М.: Недра, 1986. – 160 с.

15. Соколов В.Н. Глинистые породы и их свойства. – М.: науки о земле, 2000. – 59-65 с.

16. Мартынов К.В., Захарова Е.В., Дорофеев А.Н., Зубков А.А, Прищеп А.А. Функциональные свойства глинистых материалов для защитных барьеров радиационно опасных объектов // Радиоактивные отходы. – 2020. – № 4 (13). – 42-57 с.

17. Лобанов М.Л. Методы определения коэффициентов диффузии: учеб. пособие / М.Л. Лобанов М.Л., М.А. Зорина. – Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2017. – 100 с.

18. Амосов П.В., Наумов А.В., Новожилова Н.В. Минимизация радиационного воздействия на население при подземном захоронении не подлежащего переработке отработавшего ядерного топлива в кристаллических породах Кольского полуострова (1 этап). – Апатиты, КНЦ РАН, «СЕВЕР-2003: Проблемы и решения», 2004. – 55-65 с.

19. Семенкова А.С., Ильина О.А., Крупская В.В., Закусин С.В., Доржиева О.В., Покидько Б.В., Романчук А.Ю., Камыков С.Н. Сорбция радионуклидов на глинистых минералах – компонентах инженерных барьеров безопасности. – М.: вестн. моск. ун-та, 2021. - № 5. – 425-434 с.
20. S. Grazulis, A. Daskevicius, A. Merkys, D. Chateigner, L. Lutterotti, M. Quiro's, N.R. Serebryanaya, P. Moeck, R.T. Downs, A. Le Bail. Crystallography open database (COD): an open-access collection of crystal structures and platform for world-wide collaboration // *Nucleic Acids Research*. – 2012. – V. 40. – P. 420-427.
21. Wyckoff R.W.G. *Crystal Structures*. – 2nd edn. V. 2. D. 312. – N.Y.: Interscience, 1964.
22. Cygan R.T., Liang J.J., Kalinichev A.G. // *J. Phys. Chem. B*. – 2004. – V. 108(4). – P. 1255-1266.
23. Видяев И.Г., Серикова Г.Н., Гаврикова Н.А. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение: учебно-методическое пособие / И.Г. Видяев, Г.Н. Серикова, Н.А. Гаврикова, Н.В. Шаповалова, Л.Р. Тухватулина, З.В. Криницына; Томский политехнический университет. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2014. – 36 с.
24. Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 №197-ФЗ (ред. от 25.02.2022) // *Собрание законодательства РФ*. – 02.07.2021. – №311-ФЗ. – Ст. 216.
25. СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы. – Москва, 2003. – 27 с.
26. ГОСТ 12.0.003-2015 Система стандартов по безопасности труда. Опасные и вредные производственные факторы. Классификация. – М.: Стандартинформ, 2019. – 9 с.
27. ГОСТ 30494-2011 Здания жилые и общественные. Параметры микроклимата в помещениях. – М.: Стандартинформ, 2019. – 11 с.

28. ГОСТ 12.1.003-83 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Шум. Общие требования безопасности. – М.: ИПК Издательство стандартов, 2008. – 11 с.
29. СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-03 Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещенному освещению жилых и общественных зданий. – Москва, 2003. – 39 с.
30. ГОСТ 12.1.006-84 ССБТ Электромагнитные поля радиочастот. Общие требования безопасности. – Москва, 1986. – 5 с.
31. ГОСТ 12.1.004-91 Система стандартов безопасности труда. Пожарная безопасность. Общие требования. – М.: Стандартиформ, 2006. – 64 с.
32. ГОСТ Р12.1.019-2017 ССБТ Электробезопасность. М.: Стандартиформ, 2019. – 16 с.
33. СНиП 41-01-2003 Отопление, вентиляция и кондиционирование. – Москва, 2004. – 60 с.
34. ГОСТ 15548-70 Цвета сигнальные и знаки безопасности для промышленных предприятий. – Москва, 1978. – 24 с.
35. СанПиН 1.2.3685-21 Гигиенические нормативы и требования к обеспечению безопасности и (или) безвредности для человека факторов среды обитания. – Москва, 2021. – 1143 с.

## Приложение А

