



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

Школа Инженерная школа ядерных технологий
Направление подготовки 14.04.02 Ядерная физика и технологии
Отделение школы (НОЦ) Отделение ядерно-топливного цикла

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
Исследование барьерных свойств облученных минералов глины

УДК 621.039.59

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0АМ11	Лапо Михаил Петрович		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ОЯТЦ ИЯТШ ТПУ	Хан В.А.	Д.Т.Н., профессор		

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН ШБИП ТПУ	Спицына Л.Ю.	К.Э.Н., доцент		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОЯТЦ ИЯТШ ТПУ	Передерин Ю.В.	К.Т.Н., доцент		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Изотопные технологии и материалы	Видяев Д.Г.	Д.Т.Н., профессор		

РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ООП

Код компетенции	Результаты освоения ООП (компетенции)
Универсальные	
УК(У)-1	Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий
УК(У)-2	Способен управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла
УК(У)-3	Способен организовывать и руководить работой команды, вырабатывая командную стратегию для достижения поставленной цели
УК(У)-4	Способен применять современные коммуникативные технологии, в том числе на иностранном (-ых) языке (-ах), для академического и профессионального взаимодействия
УК(У)-5	Способен анализировать и учитывать разнообразие культур в процессе межкультурного взаимодействия
УК(У)-6	Способен определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки
Общепрофессиональные	
ОПК(У)-1	Способен формулировать цели и задачи исследования, выбирать критерии оценки, выявлять приоритеты решения задач
ОПК(У)-2	Способен применять современные методы исследования, оценивать и представлять результаты выполненной работы
ОПК(У)-3	Способен оформлять результаты научно-исследовательской деятельности в виде статей, докладов, научных отчетов и презентаций с использованием систем компьютерной верстки и пакетов офисных программ
Профессиональные	
ПК(У)-1	Способен использовать фундаментальные законы в объёме достаточном для самостоятельного комбинирования и синтеза новых идей, творческого самовыражения
ПК(У)-2	Способен создавать новые методы расчета современных физических установок и устройств, разрабатывать методы и перспективные технологии
ПК(У)-3	Способен создавать математические и физические модели, описывающие процессы и явления в разделительных каскадах, установках разделения и тонкой очистки веществ, переработки и обезвреживания промышленных отходов
ПК(У)-4	Способен оценить перспективы развития ядерной отрасли, использовать её современные достижения и передовые технологии в научно-исследовательских работах
ПК(У)-5	Способен самостоятельно выполнять экспериментальные и теоретические исследования для решения научных и производственных задач с использованием современных приборов для научных исследований и математических методов расчета
ПК(У)-6	Способен провести расчет, концептуальную и проектную разработку современных физических установок и приборов
ПК(У)-7	Способен формулировать технические задания, использовать информационные технологии и пакеты прикладных программ при проектировании и расчете физических установок, использовать знания методов анализа эколого-экономической эффективности при проектировании и реализации проектов
ПК(У)-8	Способен к объективному анализу технических и расчетно-теоретических разработок, решений и проектов, учету их соответствия требованиям законов в области промышленности, экологии, технической, радиационной и ядерной безопасности, другим нормативным актам на российском и международном уровне, подготовить экспертное заключение
ПК(У)-9	Готовность к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования и дополнительного профессионального образования (ДПО)
ПК(У)-10	Способен разрабатывать планы и программы организации инновационной деятельности, осуществлять технико-экономическое обоснование инновационных проектов, управлять программами освоения новой продукции и технологии

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

Инженерная школа ядерных технологий
Направление подготовки 14.04.02 Ядерная физика и технологии
Отделение ядерно-топливного цикла

УТВЕРЖДАЮ:
 Руководитель ООП
 _____ Видяев Д.Г.
 (Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

магистерской диссертации

Студенту:

Группа	ФИО
0АМ11	Лапо Михаилу Петровичу

Тема работы:

Исследование барьерных свойств облученных минералов глины	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	№ 27-77/С от 27.01.2023

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе	1. нормативно-техническая документация по формированию инженерных барьеров безопасности захоронения РАО; 2. научно-технические источники по барьерным свойствам глинистых минералов.
Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов	1. обзор литературы по использованию глины при захоронении РАО; 2. квантово-химическое моделирование системы, включающей глинистый минерал, катионы калия, цезия и молекулы воды; 3. анализ полученных результатов.

Перечень графического материала	<p>Графики:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Расчетная ячейка монтмориллонита 2. Пример изоморфного замещения 4 атомов Mg с одной стороны в октаэдрическом листе 3. Пример изоморфного замещения 2 атомов Si с каждой стороны соседних слоев со смещением в тетраэдрическом листе 4. Среднеквадратическое смещение K^+ в межслоевом пространстве монтмориллонита при различных заменах в октаэдрическом листе 5. Схема диполя молекулы воды 6. Распределение K^+ в межслоевом пространстве монтмориллонита при различных заменах в октаэдрическом листе 7. Гидратные оболочки катионов, формирующихся при взаимодействии с минералом 8. Распределение K^+ в межпакетном пространстве вермикулита при различных заменах в октаэдрическом листе 9. Распределение K^+ в межпакетном пространстве монтмориллонита при различных заменах в тетраэдрическом листе 10. Распределение K^+ в межпакетном пространстве вермикулита при различных заменах в тетраэдрическом листе 11. Распределение Cs^+ в межпакетном пространстве монтмориллонита при различных заменах в октаэдрическом листе 12. Распределение Cs^+ в межпакетном пространстве монтмориллонита при различных заменах в тетраэдрическом листе 13. ФРР K^+ в межпакетном пространстве монтмориллонита при различных заменах в октаэдрическом листе 14. ФРР K^+ в межпакетном пространстве монтмориллонита при различных заменах в тетраэдрическом листе
--	--

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы	
Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Доцент Отделения социально-гуманитарных наук, к.э.н. Спицына Л.Ю.
Социальная ответственность	Доцент Отделения ядерно-топливного цикла, к.т.н. Передерин Ю.В.

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	27.01.2023
---	------------

Задание выдал руководитель:

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

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0AM11	Лапо Михаил Петрович		

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 14.04.02 Ядерная физика и технологии
Отделение школы (НОЦ) Отделение ядерно-топливного цикла

Форма представления работы:

Магистерская диссертация

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

Срок сдачи студентом выполненной работы:

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
27.01.2023	Обзор литературы по использованию глины при захоронении РАО	10
15.03.2023	Составление алгоритма проведения квантово-химического моделирования	5
20.03.2023	Квантово-химическое моделирование	25
10.05.2023	Анализ и обобщение полученных результатов	20
16.05.2023	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	15
18.05.2023	Социальная ответственность	15
26.05.2023	Оформление пояснительной записки и презентации	10

СОСТАВИЛ:

Руководитель ВКР

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

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ОЯТЦ ИЯТШ ТПУ	Видяев Дмитрий Геннадьевич	д.т.н., профессор		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа содержит 104 страниц текста, 16 рисунков, 29 таблицы, 37 источников литературы, 1 приложение.

Ключевые слова: глинистый минерал, противоион, диффузия, вода, катион, заряд слоя.

Объект исследования: процесс взаимодействия K^+ , Cs^+ и молекул воды с глинистыми минералами вермикулит, монтмориллонит.

Цель работы – изучение зависимости коэффициента диффузии противоионов K^+ , Cs^+ между пакетами глинистых минералов монтмориллонит и вермикулит от координат атомов Al, замещающих атомы Mg, Fe и Si в слоях глинистых минералов.

Выпускная квалификационная работа состоит из четырех частей. В первой части проведен обзор научно-технической литературы по методам использования глинистых минералов при геологическом захоронении РАО.

Во второй части приведены результаты квантово-химического моделирования процессов в глинистом минерале, содержащем катионы K^+ , Cs^+ и молекулы воды. Приведен анализ полученных результатов моделирования.

В третьей части приведены результаты экономического расчета затрат на проведение научного исследования, календарный план работы.

В четвертой главе рассмотрены вопросы охраны труда и техники безопасности на рабочем месте при проведении исследований.

Содержание

Введение.....	10
1 Обзор литературы	12
1.1 Методы захоронения радиоактивного отходов	12
1.2 Использование глинистых материалов в качестве инженерных барьеров безопасности.....	14
1.3 Свойства глины	17
1.3.1 Водонепроницаемость.....	18
1.3.2 Пластичность.....	19
1.3.3 Набухаемость	20
1.3.4 Поглощающая способность	20
1.4 Методы исследования барьерных свойств глины	22
1.4.1 Диффузия.....	22
1.4.2 Сорбция и коэффициент распределения	24
2 Квантово-химический расчет процессов в минералах монтмориллонит и вермикулит.....	25
2.1 Выбор программы для квантово-химического моделирования.....	25
2.2 Квантово-химическое моделирование.....	26
2.3 Результаты квантово-химического моделирования и их анализ	28
3 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение .	42
3.1 Предпроектный анализ.....	42
3.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования	42
3.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.....	43
3.1.3 SWOT-анализ	45

3.2	Инициализация проекта	47
3.3	Планирование управления научно-техническим проектом	48
3.3.1	Контрольные события проекта.....	49
3.3.2	План проекта	49
3.4	Бюджет научного исследования.....	52
3.4.1	Расчет материальных затрат	52
3.4.2	Расчет амортизации оборудования	53
3.4.3	Основная заработная плата исполнителей темы	54
3.4.4	Отчисления во внебюджетные фонды.....	56
3.4.5	Накладные расходы	57
3.4.6	Формирование бюджета затрат исследовательского проекта.....	57
3.5	Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования..	58
3.6	Вывод по разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»	61
4	Социальная ответственность	63
4.1	Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	63
4.1.1	Правовые нормы трудового законодательства.....	63
4.1.2	Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя	65
4.2	Производственная безопасность	67
4.2.1	Анализ вредных и опасных факторов.....	67
4.2.2	Обоснование мероприятий по защите исследователя от действия вредных и опасных факторов	69
4.2.3	Микроклимат.....	69

4.2.4 Повышенный уровень электромагнитного излучения.....	71
4.2.5 Недостаточная освещенность рабочей зоны.....	71
4.2.6 Превышение уровня шума	74
4.2.7 Психофизиологические факторы	75
4.2.8 Поражение электрическим током	76
4.2.9 Пожарная и взрывная безопасность.....	78
4.3 Безопасность в аварийных и чрезвычайных ситуациях.....	81
4.4 Вывод по разделу «Социальная ответственность».....	82
Выводы	83
Список используемых источников.....	84
Приложение А	89

Введение

Эксплуатация атомной энергетики приводит к формированию радиоактивных отходов (РАО). В настоящее время накоплено большое количество РАО, требующих долговременной изоляции от сферы человеческой жизнедеятельности. В настоящее время количество РАО продолжает накапливаться из-за продолжающейся эксплуатации ядерной энергетики.

Глинистые минералы являются наиболее подходящим материалом для формирования инженерных барьеров безопасности при захоронении РАО. Глинистые минералы имеют хорошие водоизолирующие свойства. Это препятствует попаданию радионуклидов в подземные водоносные слои из места захоронения. Способность глинистых минералов противодействовать миграции радионуклидов связана с сорбцией и диффузией ионов как в объеме, так и на поверхности микрочастиц минерала. Единственной возможностью выхода радионуклидов из области захоронения РАО через барьеры безопасности, при отсутствии микрофльтрации воды, является диффузия. Диффузия происходит через микрочастицу глины, в поровом растворе уплотненного слоя глины, по поверхности микрочастицы. Анионы могут мигрировать только через раствор порового пространства и по поверхности микрочастиц.

В литературе приведены результаты изучения миграции противоионов в различных условиях и по разным траекториям, как экспериментально, так и расчетными методами. При этом недостаточно уделялось внимания изучению влияния структурных особенностей глинистых минералов на коэффициент диффузии ионов. В настоящее время исследование зависимости скорости миграции катионов через глинистые минералы от их структурных особенностей является актуальной.

Цель исследования - изучение зависимости коэффициента диффузии катионов K^+ , Cs^+ между пакетами минералов монтмориллонит и вермикулит

от координат атомов Al, замещающих атомы Mg, Fe и Si в различных слоях минерала.

Для достижения цели поставлены следующие задачи.

1. Обзор научной литературы по использованию смесей глин при геологическом захоронении РАО.
2. Квантово-химическое моделирование процессов в глинистом минерале, содержащем катионы K^+ , Cs^+ и молекулы воды.
3. Анализ полученных результатов.

1 Обзор литературы

1.1 Методы захоронения радиоактивного отходов

Вопрос обращения с радиоактивными отходами (РАО), которые накапливаются при работе атомных электростанций, является одной из актуальных проблем современного мира. Радиоактивные отходы представляют особую биологическую опасность, так как содержат радиоактивные изотопы химических элементов, которые могут вызывать различные мутации, болезни и даже летальный исход при попадании в организм человека [1]. Поэтому необходимо изолировать радиоактивные отходы от окружающей среды на определенный срок, после которого они перестанут представлять угрозу.

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

1. поверхностное;
2. приповерхностное;
3. подземное;
4. глубинное.

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

Для поверхностного захоронения РАО используются контейнеры, которые размещаются на специально оборудованных площадках на поверхности земли или в небольшой глубине, образуя возвышение [1]. Этот метод применяется для отходов с периодом полураспада до 30 лет и располагается над подземными грунтовыми водами. Однако, при воздействиях природного характера возможна деформация и разрушение контейнера с РАО, что приведет к загрязнению окружающей среды.

Для переработки радиоактивных отходов проводится приповерхностное захоронение. Этот метод заключается в захоронении бочек с отходами в траншеях, расположенных на глубине от 10 до 200 метров в специально оборудованных ямах. В зависимости от уровня радиоактивности отходов,

траншеи могут располагаться над или под подземными грунтовыми водами [2, 3]. Под данную категорию отходов попадают твердые и отвержденные РАО, которые были переведены из жидкого в твердое агрегатное состояние.

По сравнению с поверхностным методом захоронения, Пункт захоронения радиоактивных отходов (ПЗРО) менее подвержен воздействию климатических условий. Однако, ПЗРО предусматривает размещение рядом с грунтовыми водами. В течение времени конструкция ПЗРО подвержена коррозии, что может привести к нарушению герметичности контейнера с радиоактивными отходами. В подземном захоронении отходы изолируются под землей в специально разработанных подземных полостях. Для получения доступа к местам захоронения используются специальные туннели.

При размещении РАО под подземными водоносными слоями уменьшается риск загрязнения грунтовых вод радионуклидами, что позволяет минимизировать опасность для окружающей среды [2]. Небольшая площадь, занимаемая на поверхности, является преимуществом подземного типа захоронения, но для его строительства необходимы геологоразведочные работы.

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 несколько десятков тысяч лет.

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

1. трудоемкость землепроходных работ;
2. геологоразведочные работы (ограничение мест под строительство);
3. устойчивость горных пород;
4. 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

Для уменьшения вредного воздействия радиоактивных отходов на человека и окружающую среду создаются пункты захоронения. Особое внимание уделяется инженерным барьерам безопасности (ИББ), которые изготавливают из материалов, обеспечивающих долговременное безопасное хранение РАО. При выборе материалов учитываются требуемые значения параметров, таких как сорбционные и миграционные, и проводятся научные исследования для разработки моделей расчета и сценариев развития событий. Эти исследования продолжаются и в настоящее время.

Инженерные барьеры безопасности могут быть созданы с использованием глинистых материалов, так как они обладают уникальными свойствами. Для этого используются глинистые смеси, состоящие из нескольких компонентов, как правило, из минералов группы смектитов (монтмориллонит), вермикулитов, каолинитов и иллитов. Глины имеют изолирующие свойства по отношению к воде, что позволяет предотвратить

попадание радионуклидов в подземные водоносные слои [6]. Главным компонентом в таких смесях являются минералы группы монтмориллонита, которые обладают лучшими функциональными характеристиками, чем остальные глинистые минералы, что было подтверждено российскими и зарубежными исследованиями [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 низкую емкость и набухаемость, а также высокую водопроницаемость (высокая диффузия). Минералы типа 2:1 содержат катионы и молекулы воды в составе межслоевого промежутка (межслоя).

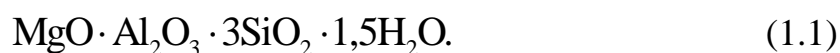
Минералы группы смектита, в особенности монтмориллонит, хорошо сорбируют катионы и анионы на базальной поверхности и боковых сколах, благодаря относительно низкому заряду слоя и локализации изоморфных замещений в октаэдрическом слое. В отличие от каолинитов, которые обладают низкой емкостью катионного обмена, слабой набухаемостью и противифильтрационными свойствами, смеси глин эффективно применяются для создания сорбционных, противифильтрационных и противомиграционных барьеров при захоронении радиоактивных отходов [6].

Основным компонентом бентонита является монтмориллонит, который составляет не менее 70% его состава. Этот глинистый минерал имеет трехэтажную структуру, состоящую из слоя оксида алюминия, расположенного между двумя слоями оксида кремния. Между слоями глины

находится вода (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]:

1. SiO_2 – от 48 до 56;
2. Al_2O_3 – от 11 до 22;
3. Fe_2O_3 – более 5;
4. MgO – от 4 до 9;
5. CaO – более 0,8;
6. H_2O – 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:

1. ограничивать контакт упаковок РАО (неупакованных РАО) с природными водами;
2. препятствовать разрушению упаковок РАО при внешних воздействиях природного и техногенного характера;
3. препятствовать разрушению упаковок РАО при воздействии вмещающих горных пород;
4. 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 1.1.

Таблица 1.1 – 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 ³
8	Пористость	30-60	%
9	Коэффициент распределения радионуклидов	10^2 - 10^4	м ³ /кг
10	Коэффициент диффузии (⁹⁰ Sr, ¹³⁷ Cs)	10^{-14} - 10^{-11}	м ² /с
11	Сорбционная емкость	0,8-1,5	мг/г

В таблице 1.1 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

Более 60 лет назад начали использовать глинистые минералы в виде структур для создания пунктов окончательной изоляции РАО. Низкие значения коэффициентов фильтрации и способность к задержке подвижных радионуклидов стали причиной их применения [6]. В основном для пунктов захоронения используются бентонитовые глины, состоящие преимущественно из монтмориллонита. Эти глины обладают свойствами, которые с одной стороны являются их достоинствами, а с другой - недостатками. Например, их способность к набуханию помогает

препятствовать усадке глинистых материалов, но в свою очередь приводит к дополнительным нагрузкам на конструкцию ПЗРО и упаковки РАО [13], что может даже привести к их разрушению.

При различных процессах, низкая проницаемость как подземной воды, так и газов, может иметь негативные последствия. Водород, который выделяется при радиоллизе воды, может привести к росту давления барьера и превышению 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]:

1. низкая водопроницаемость;
2. пластичность;
3. набухаемость;
4. высокая поглощающая способность.

1.3.1 Водонепроницаемость

Одним из важных свойств глинистых материалов является водонепроницаемость, которая означает, что эти минералы не пропускают через себя молекулы воды. Пористость глинистых материалов является причиной их пропускной способности. Движение воды через кристаллы глинистых минералов происходит следующим образом: фильтрация воды происходит через наиболее крупные поры между микрочастицами глины, а поры меньшего размера возникают под давлением, вызывающим частичное выдавливание поровой воды. В результате частично освободившееся поровое пространство позволяет фильтрации воды пройти. Однако, фильтрация воды

через поры малого размера практически невозможна из-за межслойной воды, которая полностью заполняет 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:

$$v = k \cdot I, \quad (1.2)$$

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

Пластичность глины – это ее способность сохранять свою форму под действием внешних сил без разрыва сплошности. Минеральный состав и количество тонкодисперсных частиц влияют на пластичность глинистых минералов. Увеличить пластичность можно измельчением, растиранием и механической обработкой частиц глины. Если же необходимо уменьшить пластичность, то можно добавить непластичных материалов, например, кварцевого песка или молотой обожженной глины, в состав исходного минерала.

Способность минерала удерживать воду определяется числом пластичности, которое вычисляется как разность между пределами текучести. В свою очередь, верхний предел текучести соответствует состоянию, при котором глина переходит в текучее состояние, а нижний предел - 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.

Глинистые минералы имеют алюмосиликатный каркас, состоящий из параллельных слоев, чередующихся между собой. Такие слои образованы алюминатными октаэдрами и силикатными тетраэдрами. Например, каркас каолинита состоит из гидроксида алюминия и оксида кремния, которые образуют два слоя. Водородные связи связывают слои минерала, создавая жесткую многослойную решетку, в которую сложно проникнуть воде и ионам. Базовый пакет монтмориллонита содержит три слоя: внутренний октаэдрический и два наружных тетраэдрических.

Ионы гидроксила, имеющие одинаковый заряд, используются для разделения пакетов. Кристаллическая решетка увеличивается в размере из-за того, что молекулы воды и ионы втягиваются в пространство между пакетами [14]. Глины обладают изоморфизмом, что означает, что атомы могут заменять друг друга в кристаллической структуре минерала глины. Замены могут происходить как в тетраэдрических, так и в октаэдрических слоях. Например, замена атома Al на атомы с меньшим положительным зарядом (Mg, Fe) в октаэдрическом слое приводит к тому, что структурный каркас становится отрицательно заряженным.

Для поддержания электрической нейтральности между слоями структуры минералов, таких как монтмориллонит, в них вводятся дополнительные катионы. Катионы в водных растворах могут легко перемещаться между отдельными слоями и активно обмениваться с катионами из растворов. Каолинит обладает наименьшей катионообменной емкостью, в то время как монтмориллонит имеет наиболее высокую [7].

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

Коэффициент распределения рассчитывается по формуле:

$$K_d = \frac{C_{мс}}{C_{жс}} = \frac{I_0 - I_p}{I_p} \cdot \frac{V}{m}, \quad (1.3)$$

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:

$$R = 1 + K_d. \quad (1.4)$$

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

1.4 Методы исследования барьерных свойств глины

Для решения двух задач необходимо исследовать барьерные свойства глинистых материалов. В первую очередь, нужно подтвердить характеристики материалов в условиях внешнего взаимодействия, близких к реальным. Во вторую очередь результаты исследований должны прогнозировать дальнейшее поведение объектов изучения. Основными характеристиками, которые определяют выбор 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 $1,9 \text{ г/см}^3$. 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:

$$\frac{D_e}{D_a} = \alpha, \quad (1.5)$$

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 радионуклидов через барьер безопасности описывается вторым законом Фика [17]:

$$\frac{dC(x, y, z, \tau)}{d\tau} = D \left(\frac{\partial^2 C(x, y, z, \tau)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C(x, y, z, \tau)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C(x, y, z, \tau)}{\partial z^2} \right), \quad (1.6)$$

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 радиационно опасных изотопов составляет 10^{-16} - 10^{-10} м²/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 подобного вермикулиту материала в барьере безопасности способствует высокой сорбционной способности по отношению к большинству радионуклидов. Содержание каолинита, напротив, приводит к снижению коэффициентов сорбционного распределения.

2 Квантово-химический расчет процессов в минералах монтмориллонит и вермикулит

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.

В настоящее время известны множества программ для квантово-химического моделирования: Materials Studio 8, HyperChem 8, Lammps, Gaussian 3. Нами ранее использовались Gaussian 3 и HyperChem 8, которые 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 широкий набор 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

Известно, что глинистые минералы состоят из пакетов, которые объединяются микрочастицу за счет межмолекулярных сил, обусловленных нескомпенсированными зарядами на базальных (плоских) поверхностях каждого пакета [20]. Ионы из раствора сорбируются микрочастицей глины за счет ионного обмена между слоями и на их поверхности.

Рассмотрим структуру фрагмента, имитирующего минерал, использованного при расчетах в Materials Studio. Вначале формируется ячейка, содержащая минимальное количество атомов, полностью повторяющее структуру пакета. Далее формируется расчетная ячейка из нескольких минимально повторяющихся фрагментов минерала. 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 2.1.

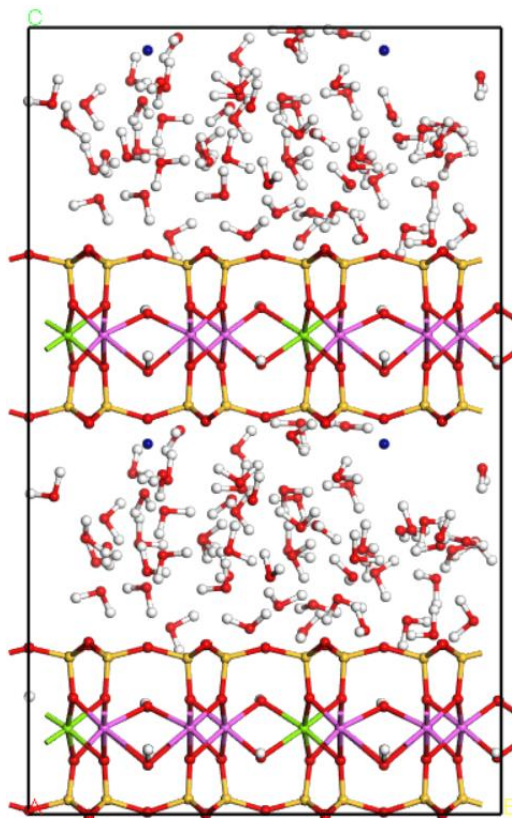


Рисунок 2.1 – Расчетная ячейка монтмориллонита

Обозначения: O – красный; H – белый; Al – сиреневый; Mg – зеленый; Si – желтый; K – синий

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

Основными элементами, содержащимся в глинах являются атомы Si, Al и O. В процессе эволюции часть атомов Si и Al, в зависимости от геологических условий, заменяются 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, действие которого проецируется на базальную поверхность. Так как валентности замещаемого и замещающего атомов не совпадают, то 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 положительный заряд катионов строго должен соответствовать отрицательному заряду пакетов микрочастицы, то рассмотренные замены сопровождаются изменениями количества межслоевых катионов.

На рисунках 2.2 и 2.3 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 межпакетного промежутка.

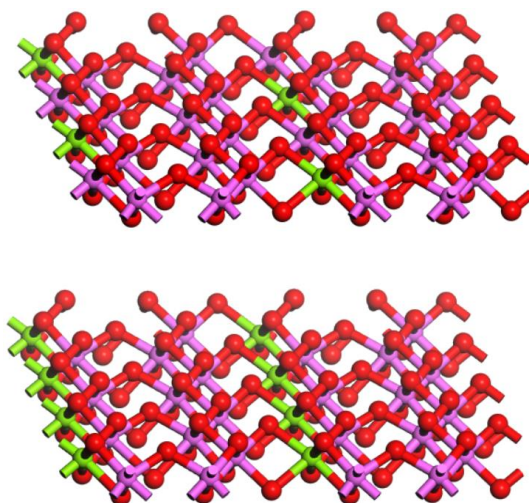


Рисунок 2.2 – Пример изоморфного замещения 4 атомов Mg с одной стороны в октаэдрическом листе

Замену атома в тетраэдрических листах (рисунок 2.3) проводили для двух соседних слоев глины, обращенных друг к другу. При этом внешние листы оставались неизменными. Для квантово-химических расчетов в ПО производится мультиплицирование расчетной ячейки - при решении уравнения Шредингера используются бесконечные периодические волновые функции, составленные для периодически размещенной пространственно ограниченной расчетной ячейки. Поэтому одно межслойное пространство оказывается модифицированным, а второе – нет.

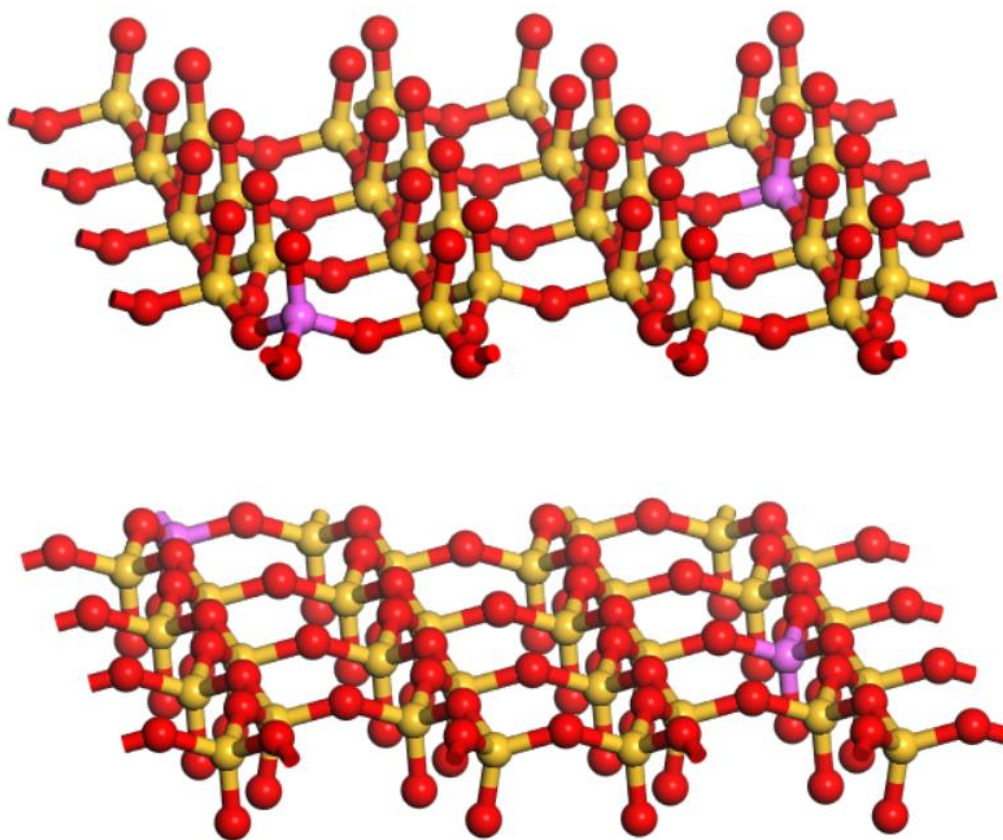


Рисунок 2.3 – Пример изоморфного замещения 2 атомов Si с каждой стороны соседних слоев со смещением в тетраэдрическом листе

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, состояла 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 вначале проводили оптимизацию исходной структуры расчетной ячейки, далее 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 для продолжительности по времени 400 пс с шагом 0,1 фс. В результате, в указанных папках накапливается массив данных с результатами расчета. Необходимые для дальнейшего использования данные получаются путем анализа результатов расчета. Для оценки влияния структурных особенностей минерала на коэффициент диффузии катионов, получены среднеквадратическое смещение, распределение молекул воды и катионов между слоями минерала, а также функция радиального распределения (ФРР), описывающая гидратную оболочку катиона.

На рисунке 2.4 приведен график среднеквадратического смещения катиона K^+ в межслоевом пространстве монтмориллонита при различных заменах атомов Mg на атомы Al в октаэдрическом листе слоя минерала.

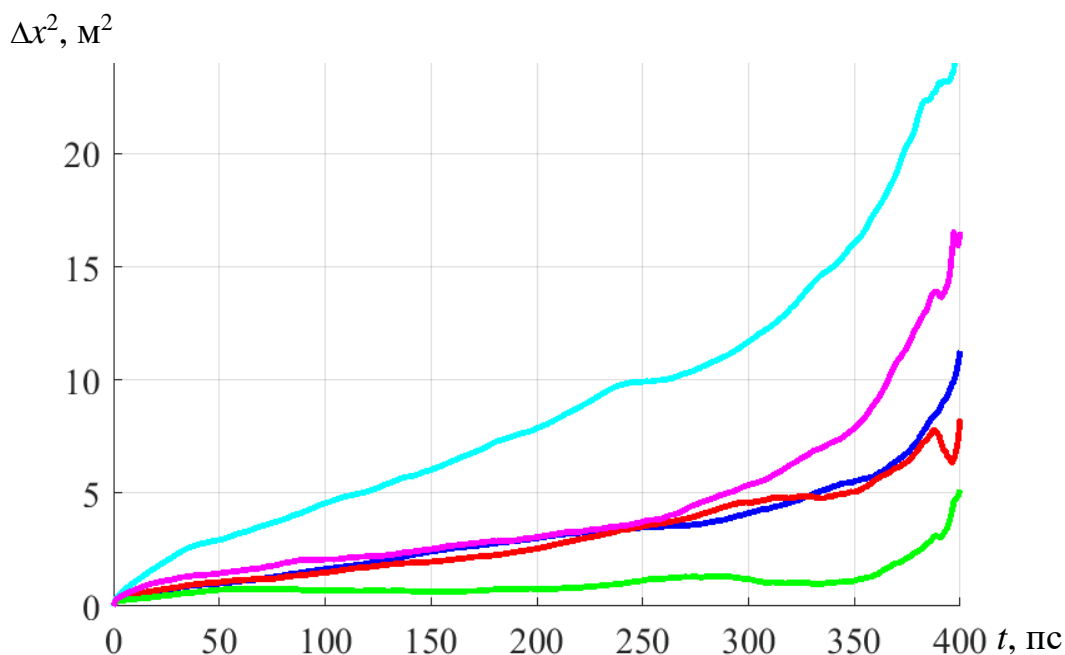


Рисунок 2.4 – Среднеквадратическое смещение K^+ в межслоевом пространстве монтмориллонита при различных заменах в октаэдрическом листе

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 самодиффузии веществ, тем быстрее они проникают друг в друга. Коэффициент самодиффузии можно определить из соотношения:

$$D = \frac{1}{2n} \frac{d}{dt} \langle (R(t) - R(0))^2 \rangle, \quad (2.1)$$

где $R(0)$ – начальное положение частицы через время t ; $R(t)$ – конечное положение частицы через время t ; n – размерность пространства.

В таблице 2.1 приведены значения коэффициентов диффузии катионов K^+ и Cs^+ в монтмориллоните и вермикулите при различных вариантах изоморфного замещения атомов в пакетах минерала.

Таблица 2.1 – 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								
8×1	4×1	4×2	4×2*	–	2×1	2×2	2×2*	K^+
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 2.1 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 2.2 приведены значения коэффициентов диффузии молекул воды для различных вариантов изоморфного замещения атомов.

Таблица 2.2 – Коэффициенты диффузии молекул воды ($\cdot 10^{10}$, м²/с)

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*	
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*	Cs ⁺
6,88	12,2	13	17,5	9,94	6,22	7,21	7,92	
Монтмориллонит								Cs ⁺
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⁺ и K⁺ оценим по формуле:

$$t = \frac{l}{Z \cdot D \cdot 3600 \cdot 24 \cdot 365}, \quad (2.2)$$

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 (2.2), для времени защитного действия уплотненного слоя глины толщиной 1 метр, составленной из модели минерала вермикулит и монтмориллонит, приведены в таблице 2.3.

Таблица 2.3 – Время защитного действия K⁺ и Cs⁺ ($\cdot 10^{-5}$, лет)

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*	
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*	Cs ⁺
3,9	6	2,4	1,2	5	8,5	8,2	7,2	
Монтмориллонит								Cs ⁺
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 2.3, 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 2.3 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 2.5. 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 2.1 и 2.3 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 пакеты глинистого минерала, в свою очередь, пытаются ее разрушить и притянуть катионы к себе для непосредственно 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 располагается к центру межпакетного пространства, тем больше коэффициент диффузии.

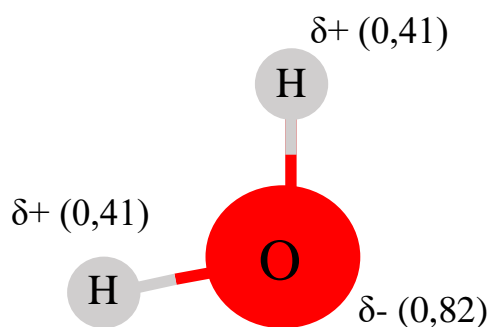


Рисунок 2.5 – Схема диполя молекулы воды

Дополнительную информацию для анализа коэффициентов диффузии можно получить из данных, приведенных на рисунках 2.6, 2.8 и 2.9-2.14.

Распределения концентрации катионов K^+ между пакетами монтмориллонита и вермикулита, при замене атомов на Al в октаэдрическом (рисунок 2.6 и 2.8) и тетраэдрическом листах (рисунок 2.9 и 2.10) 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 (часто называемой внешнесферным комплексом (рисунок 2.7б) 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 разнотипных центров отрицательного заряда (Fe и Mg), имеющих ферромагнитный парамагнитный характер (рисунок 2.6 и 2.8).

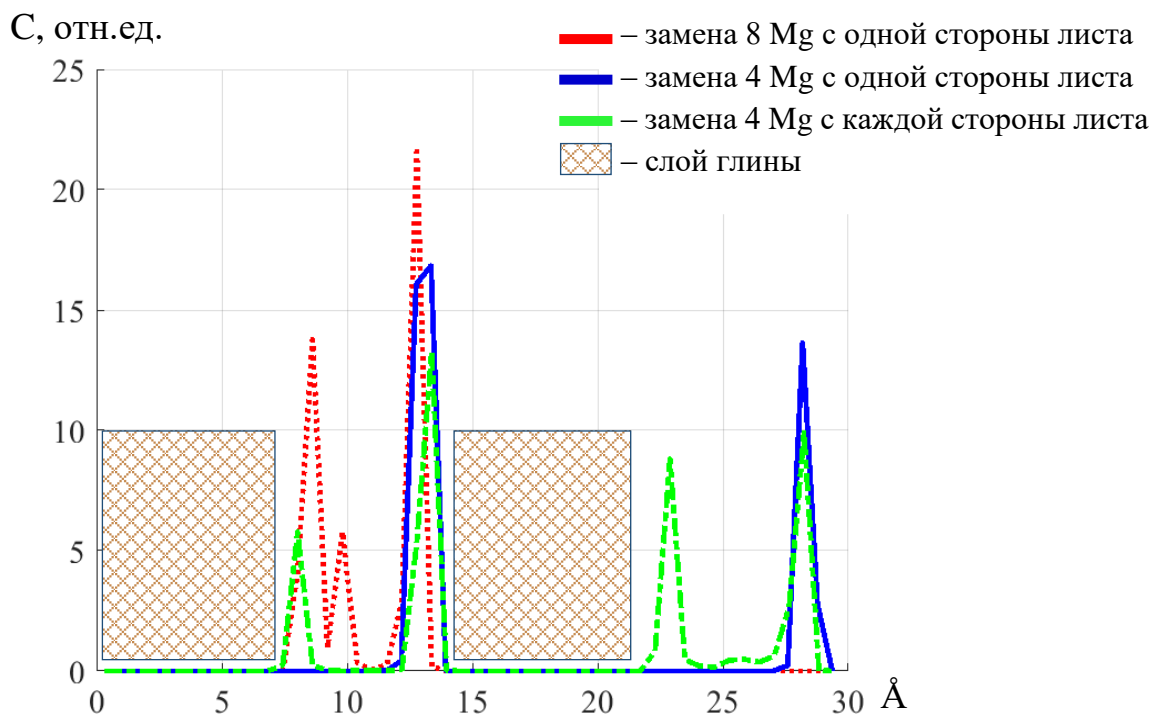


Рисунок 2.6 – Распределение K^+ в межслоевом пространстве монтмориллонита при различных заменах в октаэдрическом листе

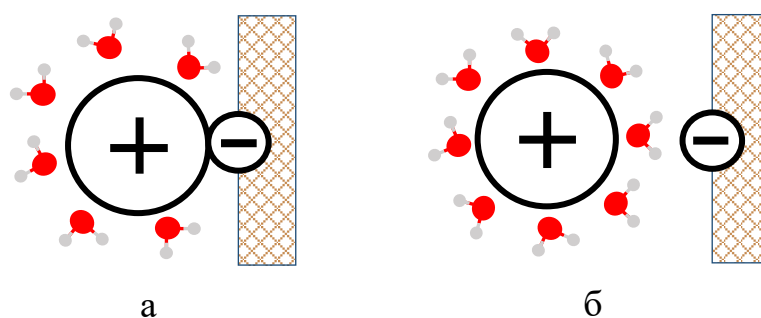


Рисунок 2.7 – Гидратные оболочки катионов, формирующихся при взаимодействии с минералом

Комплексы: а) внутрисферный; б) внешнесферный

При замене атомов в тетраэдрическом листе заряд пакета 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 2.7а) с молекулами воды (частично разрушенная гидратная оболочка) и непосредственно контактирует

с поверхностью глины. Непосредственный контакт катиона с потенциальным рельефом базальной поверхности пакета минерала аналогичен попаданию катиона в более глубокую потенциальную яму. Поэтому для смены местоположения катиону 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 2.9 и 2.10).

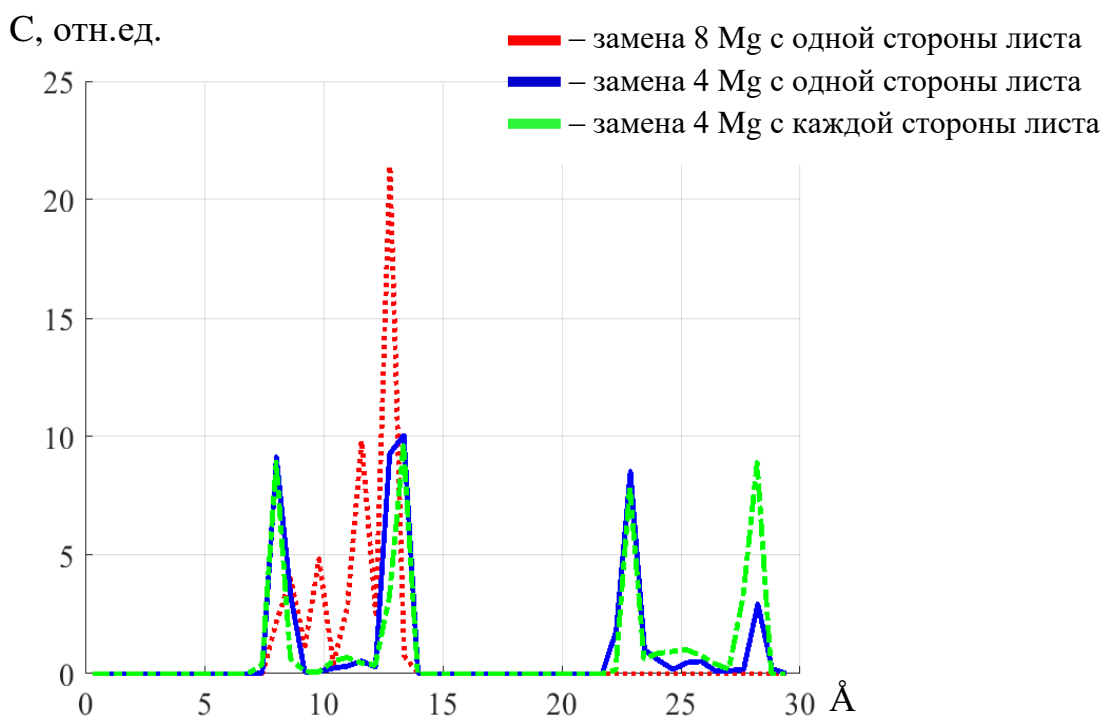


Рисунок 2.8 – Распределение K^+ в межпакетном пространстве вермикулита при различных заменах в октаэдрическом листе

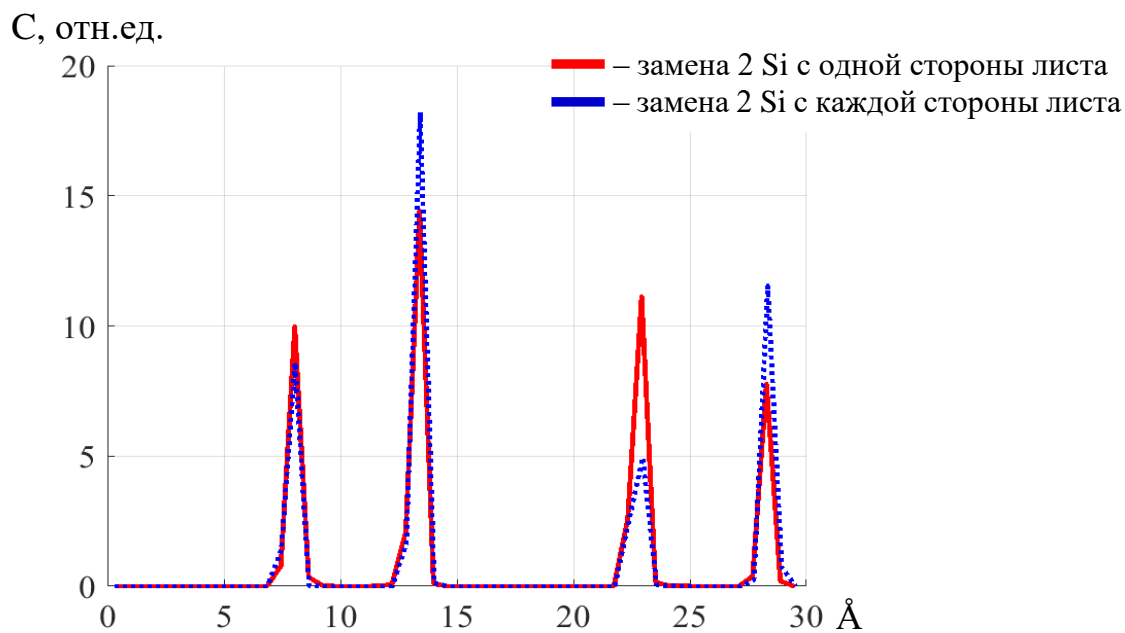


Рисунок 2.9 – Распределение K^+ в межпакетном пространстве монтмориллонита при различных заменах в тетраэдрическом листе

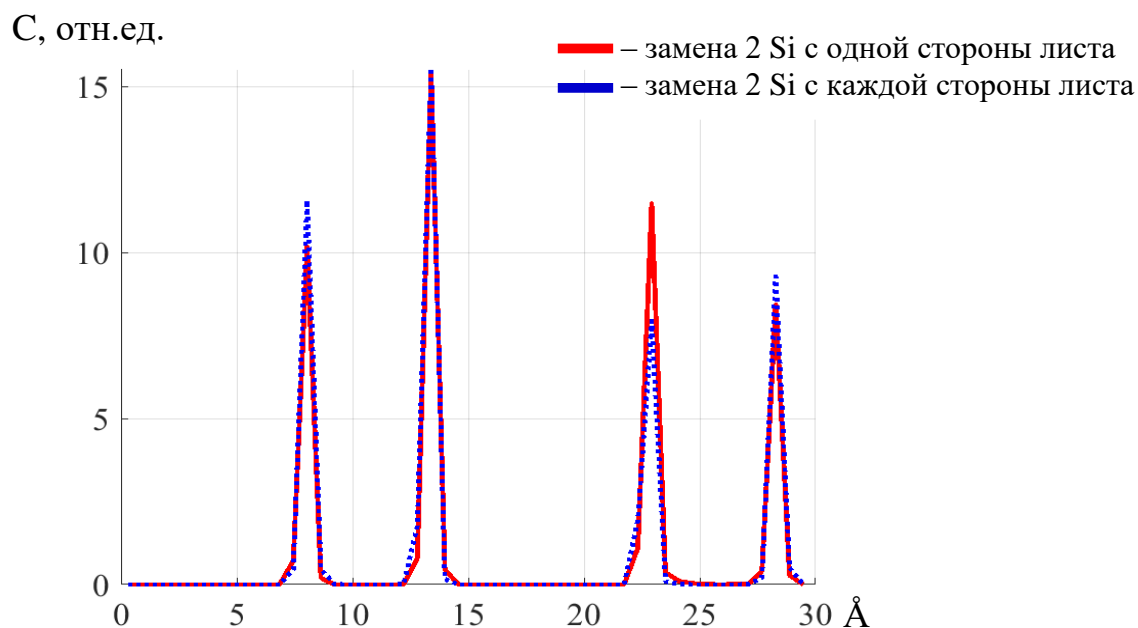


Рисунок 2.10 – Распределение K^+ в межпакетном пространстве вермикулита при различных заменах в тетраэдрическом листе

Общие закономерности распределения катиона Cs^+ между слоями минерала глины аналогичны распределению K^+ (рисунок 11 и 12). Однако, распределение катиона Cs^+ по нескольким слоям в межпакетном пространстве

менее выражено. Возможно, это связано с лучшей гидратируемостью Cs^+ по отношению к катиону K^+ . Это означает преобладание внешнесферных комплексов катиона в межпакетном пространстве минерала глины.

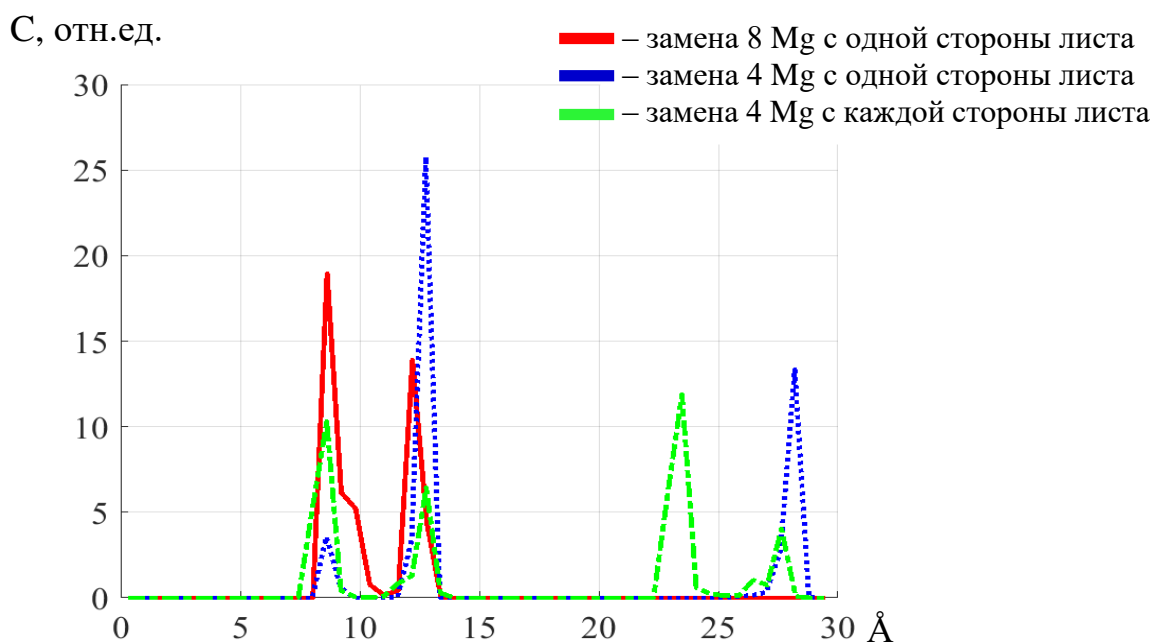


Рисунок 2.11 – Распределение Cs^+ в межпакетном пространстве монтмориллонита при различных заменах в октаэдрическом листе

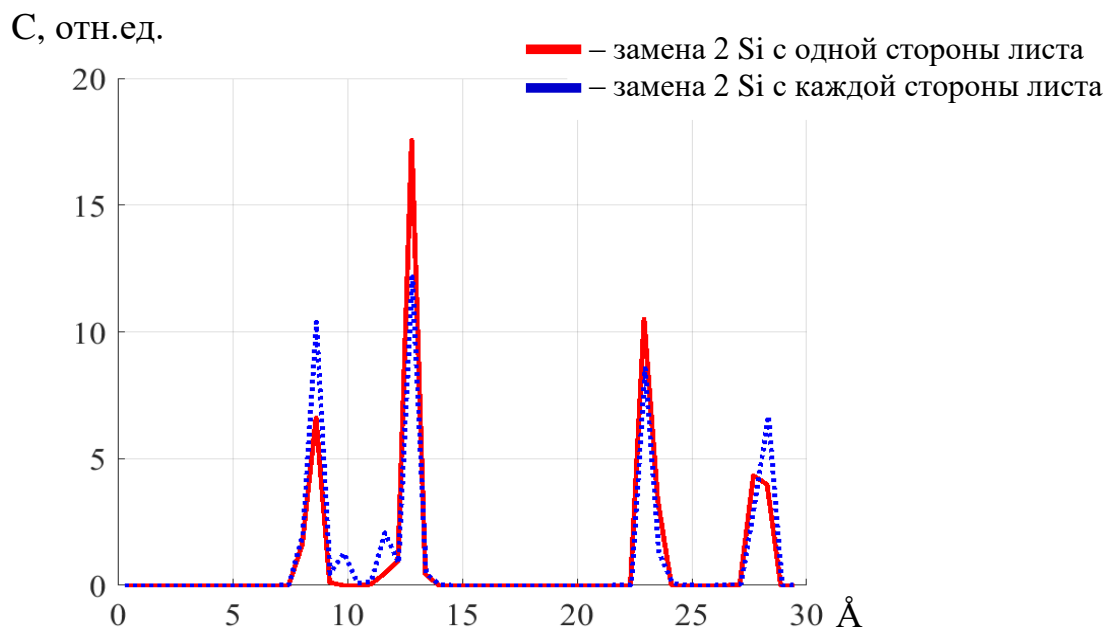


Рисунок 2.12 – Распределение Cs^+ в межпакетном пространстве монтмориллонита при различных заменах в тетраэдрическом листе

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 2.13 и 2.14 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.

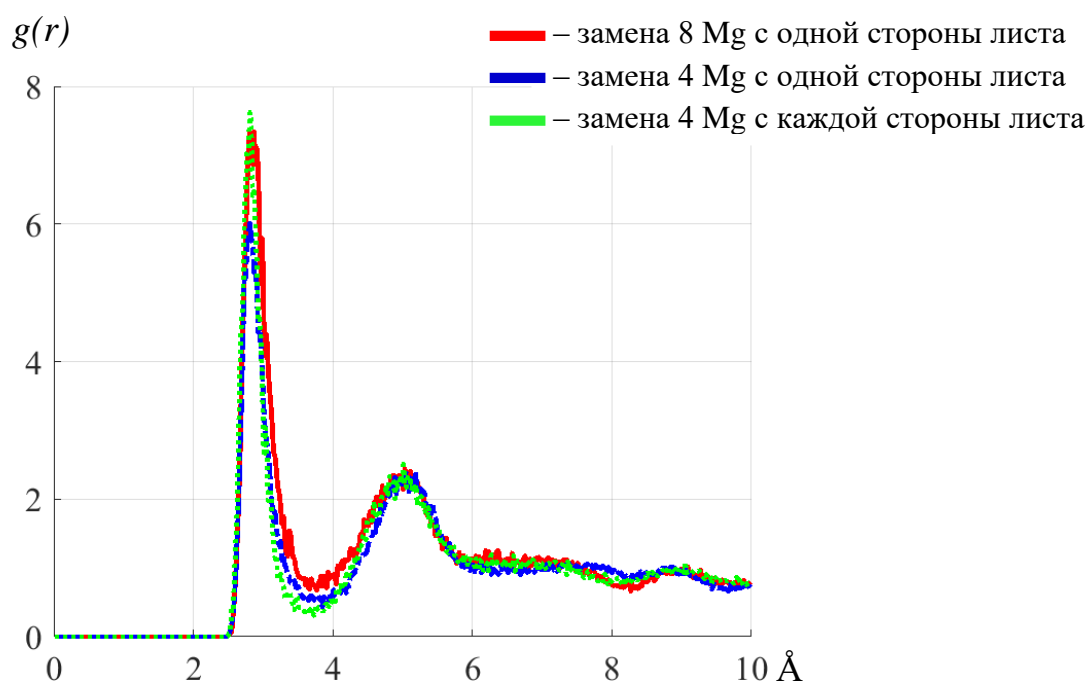


Рисунок 2.13 – ФРР K^+ в межпакетном пространстве монтмориллонита при различных заменах в октаэдрическом листе

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.

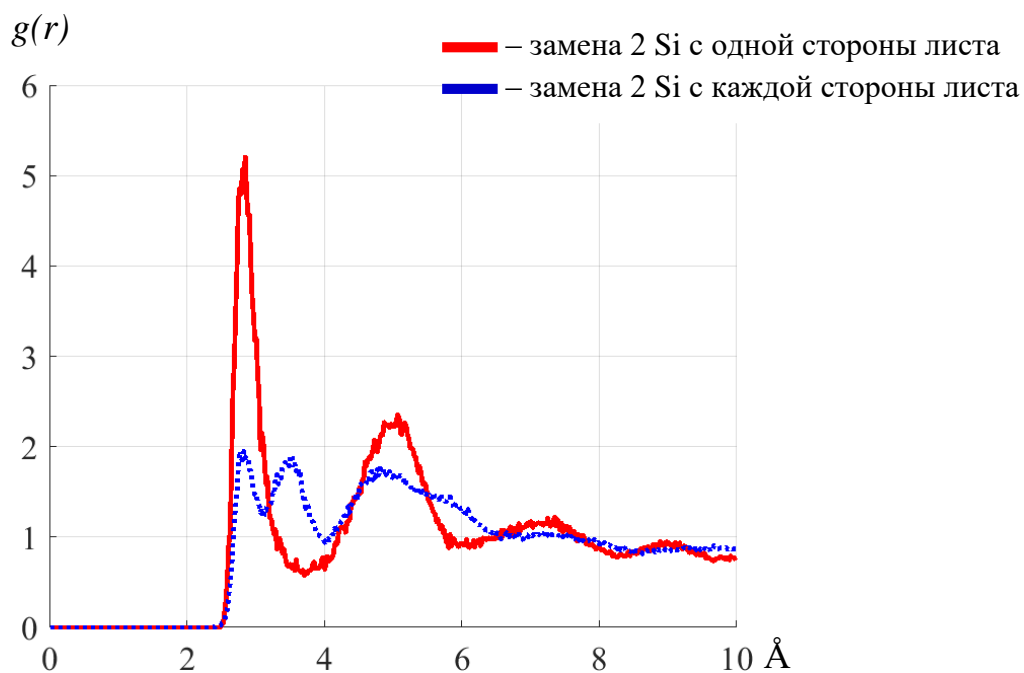


Рисунок 2.14 – ФРР K^+ в межпакетном пространстве монтмориллонита при различных заменах в тетраэдрическом листе

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

Студенту:

Группа	ФИО
ОАМ11	Лапо Михаилу Петровичу

Школа	ИЯТШ	Отделение школы (НОЦ)	ОЯТЦ
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	14.04.02 Ядерные физика и технологии

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

1. <i>Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	Бюджет проекта – не более 150000 руб., в т.ч. затраты по оплате труда – не более 100000 руб.
2. <i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	Районный коэффициент для города Томска равен 1,3. Премияльный коэффициент равен 0,3.
3. <i>Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	Коэффициент отчислений во внебюджетные фонды- 30,2%

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. <i>Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ</i>	1. Анализ и оценка конкурентоспособности НИ; 2. SWOT-анализ.
1. <i>Разработка устава научно-технического проекта</i>	1. Цели и результат проекта; 2. Организационная структура проекта; 3. Ограничения и допущения проекта.
2. <i>Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок</i>	Формирование плана и графика разработки: организация работ НИ; определение структуры работ; разработка графика Ганта. Формирование бюджета затрат на НИ: материальные затраты; заработная плата; отчисления во внебюджетные фонды.
3. <i>Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности</i>	1. Определение интегрального финансового показателя разработки; 2. Определение интегрального показателя ресурсоэффективности разработки; 3. Определение интегрального показателя эффективности; 4. Оценка абсолютной эффективности НИ.

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. <i>Сегментирование рынка</i>
2. <i>Оценка конкурентоспособности технических решений</i>
3. <i>Матрица SWOT</i>
4. <i>Иерархическая структура работ</i>
5. <i>Календарный план-график проведения научного исследования</i>
6. <i>Диаграмма Ганта</i>

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент ОСГН ШБИП ТПУ	Спицына Любовь Юрьевна	к.э.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОАМ11	Лапо Михаил Петрович		

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.

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

3.1 Предпроектный анализ

3.1.1 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.

Сегментировать рынок услуг можно по степени потребности использования данных расчетов.

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 3.1.

Таблица 3.1 – Сегментирование рынка услуг по производству стабильных изотопов

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

Как видно из таблицы 3.1. сильная заинтересованность в проведенной работе у атомной промышленности.

3.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

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 3.2.

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.

Таблица 3.2 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		B_{Φ}	B_{k1}	B_{k2}	K_{Φ}	K_{k1}	K_{k2}
1	2	3	4	5	6	7	8
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
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
Экономические критерии оценки эффективности							
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	0,1	4	3	5	0,4	0,3	0,5
4. Стоимость разработки	0,2	5	5	2	1	1	0,4
Итого	1				4,8	4,3	3,4

где B_{Φ} – 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.

3.1.3 SWOT-анализ

SWOT – представляет собой комплексный анализ научно-исследовательского проекта. SWOT-анализ применяют для исследования внешней и внутренней среды проекта [23, 24].

Составлена матрица SWOT-анализа (таблица 3.3).

Таблица 3.3 – SWOT-анализ

	Сильные стороны проекта: С1. Низкие первоначальные затраты. С2. Низкие эксплуатационные затраты. С3. Отсутствует необходимость постоянного контроля.	Слабые стороны проекта: Сл1. Необходима подробная георазведка. Сл2. Отличие технологии для жидких и твердых РАО. Сл3. Неизвестна долговременная радиационная стойкость глинистых минералов.
Возможности: В1. Использование местного сырья. В2. Использование геологических формаций вблизи источника РАО.		
Угрозы: У1. Миграция радионуклидов до водоносных слоев. У2. Вероятность тектонических изменений. У3. Непредвиденные действия георазведки сторонних организаций.		

В таблице 3.4 представлена интерактивная матрица проекта, в которой показано соотношение сильных сторон с возможностями.

Таблица 3.4 – Интерактивная матрица проекта

Возможности проекта	Сильные стороны проекта
---------------------	-------------------------

	C1	C2	C3
B1	+	+	0
B2	+	+	0

В матрице пересечения сильных сторон и возможностей имеет определенный результат: «+» – сильное соответствие сильной стороны и возможности, «-» – слабое соотношение, «0» – если есть сомнения в том, что поставить «+» или «-».

В результате составлена итоговая матрица SWOT-анализа, представленная в таблице 3.5.

Таблица 3.5 – SWOT-анализ

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

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

3.2 Инициализация проекта

В инициацию проекта входит информация о заинтересованных сторонах проекта, иерархии целей проекта и критериях достижения целей.

Под заинтересованными сторонами проекта понимаются лица или организации, которые активно участвуют в проекте или интересы которых могут быть затронуты как положительно, так и отрицательно в ходе исполнения или в результате завершения проекта.

Информация о заинтересованных сторонах проекта, информация о целях и результатах проекта, рабочая группа проекта и ограничения проекта приведены в таблицах 3.6 – 3.7.

Таблица 3.6 – Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидания заинтересованных сторон
НИИ	Использование расчетов для проведение дальнейших экспериментов
Компании атомной промышленности	

Таблица 3.7 – Цели и результаты проекта

Цели проекта:	Изучить зависимость коэффициента диффузии катионов K^+ , Cs^+ через микрочастицы глинистых минералов монтмориллонит и вермикулит
Ожидаемые результаты проекта:	Получить зависимости коэффициента диффузии катионов
Критерии приемки результата проекта:	Характер полученная модели зависимости должен совпадать с уже имеющимися

Таблица 3.8 – Рабочая группа проекта

ФИО, основное место работы, должность	Роль в проекте	Функции
Хан В.А., ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», профессор	Руководитель	координация проекта; выбор направления исследования; составление и утверждения технического задания; календарное планирование работ; обобщение и оценка результатов.
Лапо М.П., ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», магистрант	Исполнитель	выбор направления исследования; календарное планирование работ; обзор источников информации; проведение расчетов; составление отчета; анализ полученных данных; подведение итогов.

Таблица 3.9 – Ограничения проекта

Фактор	Ограничения/допущения
Бюджет проекта	Не должен превышать 150 000 руб.
Источник финансирования	Средства ФГАОУ ВО НИ ТПУ.
Сроки проекта	Задание на выполнение исследований должно быть утверждено к 15.02.2023. Работа должна быть выполнена к 20.05.2023
Прочие ограничения и допущения	Ограничение рабочего времени участников проекта (руководителя и исполнителя).

3.3 Планирование управления научно-техническим проектом

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 (НР) и студент-исполнителя (И)

3.3.1 Контрольные события проекта

Ключевые события исследовательского проекта, их даты и результаты приведены в таблице 3.10.

Таблица 3.10 – Контрольные события проекта

№	Контрольное событие	Дата	Результат
1	Разработка технического задания на НИР	1.02.2023	Приказ по ИЯТШ
2	Составление и утверждение технического задания	3.02.2023	Задание на выполнение исследования
3	Выбор направления исследований	5.02.2023	
4	Подбор и изучение материалов по теме	7.02.2023	Отчет
5	Календарное планирование работ	12.02.2023	План работ
6	Изучение возможностей расчетной модели	13.02.2023	Отчет
7	Освоение методики расчета на практике	14.02.2023	Отчет
8	Проведение расчетов	15.02. 2023-28.03.2023	Отчет
9	Анализ полученных данных	29.03.2023	Отчет
10	Обобщение и оценка результатов	30.03.2023	Отчет
11	Составление пояснительной записки	1.04.2023-25.05.2023	Пояснительная записка
12	Проверка правильности выполнения ГОСТа пояснительной записки	26.05.2023	Пояснительная записка
13	Подготовка к защите	27.05.2023-22.06.2023	

3.3.2 План проекта

В рамках планирования исследовательского проекта построен календарный план-график с помощью диаграммы Ганта. [23, 25].

Линейный график и календарный план-график проведения научного исследования представлены в таблицах 3.11 и 3.12 соответственно.

Таблица 3.11 – Календарный план проекта

Код работы	Название	Длительность, дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников
1	Разработка технического задания	2	1.02.2023	2.02.2023	НР
2	Составление и утверждение технического задания	2	3.02.2023	4.02.2023	НР
3	Выбор направления исследований	3	5.02.2023	7.02.2023	НР, И
4	Подбор и изучение материалов по теме	3	8.02.2023	10.02.2023	И
5	Календарное планирование работ	3	11.02.2023	13.02.2023	НР, И
6	Изучение возможностей расчетной модели	1	14.02.2023	14.02.2023	И
7	Освоение методики расчета на практике	1	15.02.2023	15.02.2023	И
8	Проведение расчетов	41	16.02.2023	28.03.2023	И
9	Анализ полученных данных	1	29.03.2023	29.03.2023	И
10	Обобщение и оценка результатов	1	30.03.2023	30.03.2023	НР, И
11	Составление пояснительной записки	25	1.04.2023	25.05.2023	И
12	Проверка правильности выполнения ГОСТа пояснительной записки	2	26.05.2023	27.05.2023	НР, И
13	Подготовка к защите	56	27.05.2023	22.06.2023	И

Таблица 3.12 – Календарный план-график проведения научного исследования

№	Вид работ	Исполнители	Т _к , кал.дн.	Продолжительность выполнения работ													
				Февраль			Март			Апрель			Май			Июнь	
				1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2
1	Разработка технического задания	НР	2	■													
2	Составление и утверждение технического задания	НР	2	■													
3	Выбор направления исследований	НР, И	3	■	■												
4	Подбор и изучение материалов по теме	И	3		■												
5	Календарное планирование работ	НР, И	3	■	■												
6	Изучение возможностей расчетной модели	И	1		■												
7	Освоение методики расчета на практике	И	1		■												
8	Проведение расчетов	И	41		■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■
9	Анализ полученных данных	И	1						■								
10	Обобщение и оценка результатов	НР, И	1						■								
11	Составление пояснительной записки	И	25						■	■	■	■	■	■	■	■	■
12	Проверка правильности выполнения ГОСТа пояснительной записки	НР, И	2												■	■	
13	Подготовка к защите	И	26													■	■

■ – НР ■ – И ■

3.4 Бюджет научного исследования

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

- материальные затраты;
- основная заработная плата исполнителей темы;
- отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления);
- накладные расходы.

3.4.1 Расчет материальных затрат

Расчет материальных затрат осуществляется по следующей формуле:

$$Z_M = (1 + k_T) \cdot \sum_{i=1}^m C_i \cdot N_{\text{расхи}}, \quad (3.1)$$

где m – количество видов материальных ресурсов, потребляемых при выполнении научного исследования; $N_{\text{расхи}}$ – количество материальных ресурсов i -го вида, планируемых к использованию при выполнении научного исследования (шт., кг, м, м² и т.д.); C_i – цена приобретения единицы i -го вида потребляемых материальных ресурсов (руб./шт., руб./кг, руб./м, руб./м² и т.д.); k_T – коэффициент, учитывающий транспортно-заготовительные расходы, принимаются в пределах 15 – 25 % от стоимости материалов [23, 24].

Основными затратами в данной исследовательской работе являются затраты на электроэнергию. Программное обеспечение по образовательным лицензиям бесплатное. Результаты расчетов по затратам на материалы приведены в таблице 3.13.

Затраты на электроэнергию для работы ПЭВМ рассчитываются по формуле:

$$C = C_{\text{эл}} \cdot P \cdot F_{\text{об}} = 5,8 \cdot 0,5 \cdot 960 = 2784,$$

где $C_{эл}$ – тариф на промышленную электроэнергию (5,8 руб. за 1 кВт·ч); P – мощность оборудования, кВт; $F_{об}$ – время использования оборудования, ч.

Затраты на электроэнергию составили 2784 рубля.

Таблица 3.13 – Материальные затраты

Наименование	Марка, размер	Количество	Цена за единицу, руб.	Сумма, руб.
Электричество		480 кВт·ч	5,8	2784
Всего за материалы				2784
Транспортно-заготовительные расходы				0
Итого по статье C_m				2784

3.4.2 Расчет амортизации оборудования

В итоговую стоимость проекта входят отчисления на амортизацию за время использования оборудования в статье накладных расходов (таблица 3.14). Все работы проводились на персональном компьютере.

Таблица 3.14 – Затраты на оборудование

№	Наименование оборудования	Кол-во, шт.	Срок полезного использования, лет	Цена единицы оборудования, руб.	Общая стоимость оборудования, руб.
1	Персональный компьютер	1	3	45000	45000
Итого:	45000руб.				

Расчет амортизации проводится следующим образом:

Норма амортизации рассчитывается по формуле:

$$H_A = \frac{1}{n}, \quad (3.2)$$

(где n – срок полезного использования, лет.

Амортизация рассчитывается по формуле:

$$A = \frac{H_A \cdot I}{12} \cdot m, \quad (3.3)$$

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

Рассчитаем амортизацию для персонального компьютера, с учётом, что срок полезного использования 3 года:

$$H_A = \frac{1}{n} = \frac{1}{3} = 0,33$$

Сумму амортизационных отчислений находим следующим образом:

$$A = \frac{H_A \cdot И}{12} \cdot 4 = \frac{0,33 \cdot 45000}{12} \cdot 4 = 4950 \text{ руб.}$$

Суммарные затраты амортизационных отчислений:

$$A = 4950$$

В данном разделе проведен расчёт амортизации оборудования. Амортизация для персонального компьютера, с учётом, что срок полезного использования 3 года составила 0,33, а общая сумма амортизационных отчислений 4950 рублей.

3.4.3 Основная заработная плата исполнителей темы

Статья включает основную заработную плату работников, непосредственно занятых выполнением проекта, (включая премии, доплаты) и дополнительную заработную плату.

$$C_{ЗП} = З_{осн} + З_{доп}, \quad (3.4)$$

где $З_{осн}$ – основная заработная плата; $З_{доп}$ – дополнительная заработная плата.

Основная заработная плата ($З_{осн}$) руководителя рассчитывается по следующей формуле:

$$З_{осн} = З_{дн} \cdot T_{раб}, \quad (3.5)$$

где $З_{осн}$ – основная заработная плата одного работника; $T_{раб}$ – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, рабочих дней; $З_{дн}$ – среднедневная заработная плата работника, руб.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле

$$З_{дн} = (З_{м} \cdot M) / F_{д}, \quad (3.6)$$

где $З_{м}$ – месячный должностной оклад работника, руб.; M – количество месяцев работы без отпуска в течение года:

- 1) при отпуске в 24 раб.дня $M = 11,2$ месяца, 5-дневная неделя;

2) при отпуске в 48 раб.дней $M=10,4$ месяца, 6-дневная неделя; F_d – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. Дн. (таблица 3.15).

Таблица 3.15 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	НР	И
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней:		
– выходные дни/праздничные дни	66	66
Потери рабочего времени:		
– отпуск/невыходы по болезни	56	48
Действительный годовой фонд рабочего времени	243	251

И ежемесячно получает вознаграждение в размере МРОТ 13890 руб.

Основная заработная плата научного руководителя рассчитывается на основании отраслевой оплаты труда. Отраслевая система оплаты труда в ТПУ предполагает следующий состав заработной платы:

- оклад – определяется предприятием. В ТПУ оклады распределены в соответствии с занимаемыми должностями, например, ассистент, ст. преподаватель, доцент, профессор;
- стимулирующие выплаты – устанавливаются руководителем подразделений за эффективный труд, выполнение дополнительных обязанностей и т.д.;
- иные выплаты: районный коэффициент.

Руководителем данной научно-исследовательской работы является сотрудник с должностью профессор и степенью доктор наук. Оклад профессора составляет 35000 рублей (без учета РК).

Для расчета месячного должностного оклада работника применяется формула:

$$Z_m = Z_{ок} \cdot k_p, \quad (3.7)$$

где $Z_{ок}$ – заработная плата по окладу, руб.; k_p – районный коэффициент, равный 1,3 (для Томска).

Заработная плата исполнителей приведена в таблице 3.16.

Таблица 3.16 – Заработная плата исполнителей исследовательской работы

Исполнители	$Z_{ок}$, руб.	k_p	Z_m , руб.	$Z_{дн}$, руб.	$T_{раб}$	$Z_{осн}$, руб.
НР	35000	1,30	45500	2240	8 д.	17920
И	13890	1,30	18057	863	63д.	54369
Итого $Z_{осн}$:	72289 руб.					

Дополнительная заработная плата рассчитывается исходя из 10-15 % от основной заработной платы работников, непосредственно участвующих в выполнении темы. Примем коэффициент дополнительной заработной платы для научного руководителя равным 15%. Тогда дополнительная зарплата руководителя 2688 рублей, а исполнителя 8155 рублей.

Суммарная зарплата руководителя 20608 рублей, исполнителя 62524 рублей.

3.4.4 Отчисления во внебюджетные фонды

Размер отчислений во внебюджетные фонды составляет 30,2 % от суммы затрат на оплату труда работников, непосредственно занятых выполнением исследовательской работы.

Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется исходя из следующей формулы:

$$C_{внеб} = k_{внеб} \cdot (Z_{осн} + Z_{доп}), \quad (3.8)$$

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

Таким образом отчисления во внебюджетные фонды от затраты на оплату труда руководителя вычисляются следующим образом:

$$C_{внеб} = 0,302 \cdot 20608 = 6223 \text{ руб.}$$

Отчисления во внебюджетные фонды от затраты на оплату труда исполнителя вычисляются следующим образом:

$$C_{\text{внеб}} = 0,302 \cdot 62524 = 18882 \text{ руб.}$$

В результате расчётов определены отчисления во внебюджетные фонды от затрат на оплату труда руководителя и исполнителя, при том, что коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды составил 0,302. Для руководителя, отчисления составили 6223 руб., а для исполнителя 18882 рубля.

3.4.5 Накладные расходы

В эту статью включаются затраты на управление и хозяйственное обслуживание, которые могут быть отнесены непосредственно на конкретную тему. Кроме того, сюда относятся расходы по содержанию, эксплуатации и ремонту оборудования, производственного инструмента и инвентаря, зданий, сооружений и др.

Расчет накладных расходов ведется по следующей формуле:

$$C_{\text{накл}} = k_{\text{накл}} \cdot (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}), \quad (3.9)$$

где $k_{\text{накл}}$ – коэффициент накладных расходов.

Накладные расходы в ТПУ составляют 12 – 16 % от суммы основной и дополнительной зарплаты работников, участвующих в выполнении темы. Примем $k_{\text{накл}} = 16 \%$.

Накладные расходы составляют:

$$C_{\text{накл}} = 0,16 \cdot (20608 + 62524) = 13301 \text{ руб.}$$

3.4.6 Формирование бюджета затрат исследовательского проекта

Определение бюджета затрат на научно-исследовательский проект по каждому варианту исполнения приведен в таблице 3.17.

Таблица 3.17 – Расчет бюджета затрат исследовательского проекта

Материальные затраты	2784 руб.
Амортизационные отчисления	4950 руб.
Основная заработная плата	72289 руб.
Дополнительная заработная плата	10843 руб.
Страховые взносы	25105 руб.
Итого без накладных расходов	115971 руб.
Накладные расходы	13301 руб.
Итого бюджетная стоимость	129272 руб.

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

Интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов исполнения объекта исследования можно определить по формул

$$I_{pi} = \sum a_i \cdot b_i, \quad (3.10)$$

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^b – бальная оценка i -го варианта исполнения разработки, устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания.

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности данного исследования представлен в таблице 3.18. В качестве аналога выступает изучение зависимости коэффициента диффузии иных катионов.

Таблица 3.18 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Критерии	Весовой коэффициент параметра	Текущий проект	Аналог
1.Экономичность	0,15	4	3
2.Удобство в эксплуатации	0,15	5	4
3. Закрытость получаемых данных	0,15	4	4
4. Доступность	0,1	5	4
5. Надежность	0,25	4	4
6. Затраты на разработку	0,2	4	3
Итого	1	4,25	3,65

$$I_p = 0,15 \cdot 4 + 0,15 \cdot 5 + 0,15 \cdot 4 + 0,1 \cdot 5 + 0,25 \cdot 4 + 0,2 \cdot 4 = 4,25;$$

$$I_a = 0,15 \cdot 3 + 0,15 \cdot 4 + 0,15 \cdot 4 + 0,1 \cdot 4 + 0,25 \cdot 4 + 0,2 \cdot 3 = 3,65.$$

Интегральный финансовый показатель разработки определяется по формуле

$$I_{\phi}^p = \frac{\Phi_i}{\Phi_{\max}}, \quad (3.11)$$

где i – стоимость i -го варианта исполнения; \max – максимальная стоимость исполнения НТИ.

$$I_{\phi}^p = \frac{\Phi_p}{\Phi_{\max}} = \frac{312572}{350000} = 0,89;$$

$$I_{\phi}^a = \frac{\Phi_a}{\Phi_{\max}} = \frac{180000}{200000} = 0,9.$$

Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения разработки ($I_{\text{финр}}^p$) и аналога ($I_{\text{финр}}^a$) определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формулам

$$I_{\text{финр}}^p = \frac{I_p}{I_{\phi}^p}, \quad (3.12)$$

$$I_{\text{финр}}^a = \frac{I_a}{I_{\phi}^a}; \quad (3.13)$$

$$I_{\text{финр}}^p = \frac{I_p}{I_{\phi}^p} = \frac{4,25}{0,89} = 4,77;$$

$$I_{\text{финр}}^a = \frac{I_a}{I_{\phi}^a} = \frac{3,65}{0,9} = 4.$$

Сравнение интегрального показателя эффективности текущего проекта и аналогов позволит определить сравнительную эффективность проекта.

Сравнительная эффективность проекта определяется по формуле

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{I_{\text{финр}}^p}{I_p} \text{ (таблица 3.19).}$$

Таблица 3.19 – Сравнительная эффективность разработки

Показатели	Аналог	Разработка
Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки и аналогов	3,65	4,25
Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения разработки и аналога	4	4,77
Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1,09	1,12

На основе расчета интегрального показателя с определением двух средневзвешенных величин: финансовой эффективности и ресурсоэффективности научного исследования можно сделать вывод о том, что разрабатываемый проект является более эффективным вариантом решения поставленной задачи по сравнению с предложенным аналогом.

3.6 Вывод по разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

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. Проведена сравнительная характеристика эффективности разработки на основании интегрального показателя эффективности. Реализация проекта в первом исполнении более эффективна.

4. Бюджет исследования составил 129272руб, в том числе заработная плата 83132 руб. и накладные расходы 13301 руб.

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
0AM11	Лапо Михаилу Петровичу

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

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

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. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности: – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.	- Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 № 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. Производственная безопасность: 2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов 2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия	Вредные и опасные факторы: – отклонение показателей микроклимата; – повышенный уровень электромагнитных излучений; – недостаточная освещенность рабочей зоны; – повышенный уровень шума; – психофизиологические факторы; – опасность поражения электрическим током.
4. Безопасность в аварийных и чрезвычайных ситуациях:	– выбор и описание типичной АСиЧС – пожар, удар током, падение с высоты собственного роста; – обоснование мероприятий по предотвращению АСиЧС; – порядок действий при возникновении АСиЧС.

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	27.01.2023
--	------------

Задание выдал консультант:

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

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0AM11	Лапо Михаил Петрович		

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 Правовые нормы трудового законодательства

Основные положения по охране труда изложены в Трудовом кодексе Российской Федерации. В этом документе указано, что охрана здоровья трудящихся, обеспечение безопасных условий труда, ликвидация профессиональных заболеваний и производственного травматизма являются одной из главных забот государства.

Согласно Трудовому кодексу Российской Федерации, каждый работник имеет право на:

- 1) рабочее место, соответствующее требованиям охраны труда;
- 2) обязательное социальное страхование от несчастных случаев на производстве и профессиональных заболеваний;
- 3) 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;

4) отказ от выполнения работ в случае возникновения опасности для его жизни и здоровья вследствие нарушения требований охраны труда;

5) обеспечение средствами индивидуальной и коллективной защиты в соответствии с требованиями охраны труда за счет средств работодателя;

6) обучение безопасным методам и приемам труда за счет средств работодателя;

7) 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;

8) внеочередной медицинский осмотр в соответствии с медицинскими рекомендациями с сохранением за ним места работы (должности) и среднего заработка во время прохождения указанного медицинского осмотра;

9) 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.

Согласно Трудовому кодексу Российской Федерации нормальная продолжительность рабочего времени не может превышать 40 часов в неделю, работодатель обязан вести учет времени, отработанного каждым работником [26].

4.1.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя

Рациональная планировка рабочего места предусматривает четкий порядок и постоянство размещения предметов, средств труда и документации. То, что требуется для выполнения работ чаще должно располагаться в зоне легкой досягаемости рабочего пространства, как изображено на рисунке 4.1 [27].

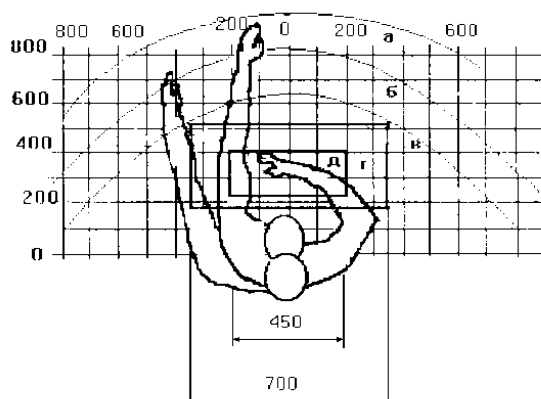


Рисунок 4.1 – Зоны досягаемости рук в горизонтальной плоскости:

- 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:

- 1) дисплей размещается в зоне «а» (в центре);
- 2) клавиатура - в зоне «г» и «д»;
- 3) системный блок размещается в зоне «б» (слева);
- 4) принтер находится в зоне «а» (справа);

5) литература и документация, необходимая при работе находится в зоне легкой досягаемости ладони – «в» (слева);

б) в выдвижных ящиках стола - литература, не используемая постоянно.

Требования к оснащению рабочего места приведены в таблице 4.1 [27].

Таблица 4.1 – Требования к оснащению рабочего места, предусматривающего длительную работу за ПК

Ширина рабочего стола	От 80 до 140 см
Высота рабочего стола	75 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, глубина – от 40 см, с углом наклона до 20 градусов

Монитор должен располагаться на уровне глаз оператора на расстоянии 500-600 мм. Угол наблюдения в горизонтальной плоскости должен быть не более 45 градусов к нормали экрана. Должна быть возможность выбирать уровень контрастности и яркости изображения на экране [27].

Также должна предусматриваться возможность регулировки экрана монитора [27]:

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

Клавиатуру должна располагаться на поверхности стола на расстоянии 100 – 300 мм от края, на уровне локтя оператора с углом наклона к горизонтальной плоскости 15°. Конструкция клавиши должна обеспечивать оператору ощущение щелчка. Цвет клавиш должен контрастировать с цветом панели.

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, которые не ослабляют внимание. Если работа требует большой умственной и физической напряженности, тогда следует использовать более теплые оттенки, которые способствуют повышению концентрации внимания [27].

4.2 Производственная безопасность

4.2.1 Анализ вредных и опасных факторов

Группы производственных условий, характеризующиеся наличием опасных и вредных факторов:

- 1) физические;
- 2) химические;
- 3) психофизиологические;
- 4) биологические.

Опасные и вредные факторы, воздействующие на персонал при работе с ПЭВМ приведены в таблице 4.2.

Таблица 4.2 – Возможные опасные и вредные факторы

Факторы	Нормативные документы
1. Отклонение показателей микроклимата	СанПиН 2.2.4.548–96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений [28]
2. Повышенный уровень электромагнитного излучения	ГОСТ 12.1.006-84 ССБТ. Электромагнитные поля радиочастот. Общие требования безопасности [29]
3. Недостаточная освещенность рабочей зоны	СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278–03. Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещённому освещению жилых и общественных зданий [30]
4. Превышение уровня шума	СН 2.2.4/2.1.8.562–96. Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории застройки [31]
5. Психофизиологические факторы	СанПиН 1.2.3685-21. Гигиенические нормативы и требования к обеспечению безопасности и (или) безвредности для человека факторов среды обитания [32]
6. Поражение электрическим током	ГОСТ 12.1.038-82 ССБТ. Электробезопасность. Предельно допустимые уровни напряжений прикосновения и токов [33]
7. Пожаровзрывоопасность	ГОСТ 12.1.044-2018 ССБТ Пожаровзрывоопасность веществ и материалов [34]

К психологически вредным факторам, воздействующим на персонал, относятся [32]:

- 1) нервно - эмоциональные перегрузки;
- 2) умственное напряжение;
- 3) физические перегрузки.

Биологические и химические вредные производственные факторы отсутствуют.

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

В соответствии с основными требованиями к помещениям для эксплуатации ПЭВМ они должны иметь естественное и искусственное освещение. Площадь на одно рабочее место пользователей ПЭВМ должна составлять не менее 6 м² [27].

4.2.3 Микроклимат

Воздух рабочей зоны (микроклимат) производственных помещений определяют следующие параметры: температура, относительная влажность, скорость движения воздуха. Оптимальные значения характеристик микроклимата устанавливаются в соответствии с нормами и приведены в таблице 4.3.

Таблица 4.3 – Оптимальные параметры микроклимата

Период года	Температура, °С	Относительная влажность, %	Скорость движения воздуха, м/с
Холодный и переходный	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.

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

Общеобменная вентиляция используется для обеспечения в помещениях соответствующего микроклимата. Периодически должен вестись контроль влажностью воздуха. В летнее время при высокой уличной температуре должны использоваться системы кондиционирования [35].

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 [36]. 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:

$$V = a \cdot b \cdot h, \quad (5.1)$$

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:

$$BO = \frac{Q}{V}, \quad (5.2)$$

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

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 [36] для длительной работы персонала.

4.2.4 Повышенный уровень электромагнитного излучения

Экран и системные блоки ПЭВМ производят электромагнитное излучение. Основная его часть происходит от системного блока и видеокабеля. Напряженность электромагнитного поля на расстоянии 50 см вокруг экрана по электрической составляющей должна соответствовать таблице 4.4.

Повышенный уровень электромагнитного излучения может негативно влиять на организм человека: приводить к нервным расстройствам; нарушению сна; значительному ухудшению зрительной активности; ослаблению иммунной системы; расстройствам сердечно-сосудистой системы [29].

Таблица 4.4 – Допустимые уровни параметров электромагнитного поля

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

Для защиты от ЭМП увеличивают расстояние от источника (экран должен находиться на расстоянии не менее 50 см от пользователя).

Таким образом, установлено, что в аудитории № 316 уровень электромагнитного излучения соответствует санитарным нормам [29].

4.2.5 Недостаточная освещенность рабочей зоны

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

По нормативам [30] освещенность на поверхности стола в зоне размещения рабочего документа должна быть 300-500 лк. Освещение не

должно создавать бликов на поверхности экрана. Освещенность поверхности экрана не должна быть более 300 лк.

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

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:

- 1) комбинированного освещения (к общему освещению дополнительно устанавливаются светильники;
- 2) местного освещения, предназначенные для освещения зоны расположения документов) [30].

Площадь помещения:

$$S = a \cdot b, \quad (5.3)$$

где А – длина, м; В – ширина, м.

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

Коэффициент отражения свежепобеленных стен с окнами, без штор $\rho_c = 50 \%$, свежепобеленного потолка $\rho_{II} = 70 \%$. Коэффициент запаса, учитывающий загрязнение светильника, для помещений с малым выделением пыли равен $K_s = 1,5$. Коэффициент неравномерности для светодиодных лент $Z = 1,1$.

Высота светильника над рабочей поверхностью определяется по формуле:

$$h = h_n - h_p, \quad (5.4)$$

где h_n – высота светильника над полом, высота подвеса, h_p – высота рабочей поверхности над полом.

Высота светильника над рабочей поверхностью определяется по формуле:

$$h = h_p - h_c = 3,5 - 0,73 = 2,77 \text{ м.} \quad (5.5)$$

Количество светильников определяется по следующей формуле:

$$N = \frac{E \cdot S \cdot K_3}{i \cdot \varphi \cdot \eta}. \quad (5.6)$$

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.

$$N = \frac{E \cdot S \cdot K_3}{i \cdot \varphi \cdot \eta} = \frac{300 \cdot 33,6 \cdot 1,5}{0,49 \cdot 1080 \cdot 4} = 7,2 \text{ шт.}$$

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

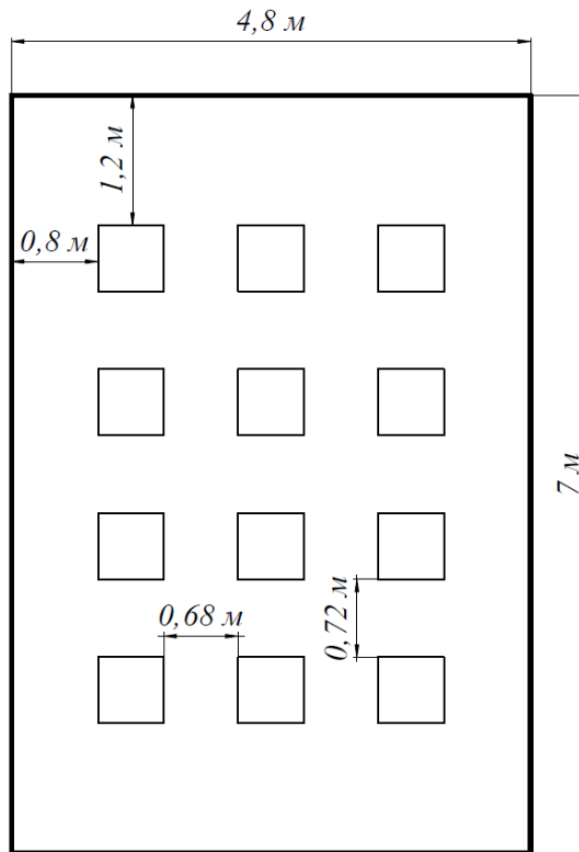


Рисунок 4.2 – План помещения и размещения светильников со светодиодными лентами

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

4.2.6 Превышение уровня шума

Шум является общебиологическим раздражителем. Шум оказывает влияние на слуховой анализатор, действует на структуры головного мозга, вызывая сдвиги в различных функциональных системах организма. Шум может создаваться работающим оборудованием, установками кондиционирования воздуха, осветительными приборами дневного света, а также проникать извне. При выполнении работы на ПЭВМ уровень шума на рабочем месте не должен превышать 50 дБА.

Выделяют следующие неблагоприятные воздействия шума на организм человека: снижение разборчивости речи; неприятные ощущения; развитие

утомления; снижение производительности труда; появление шумовой патологии.

В таблице 4.5 приведены нормы уровня шума при различных видах работ [31].

Таблица 4.5 – Нормативы уровня шума при различных видах работ

	Максимально допустимый уровень шума (дБА), в полосах следующих октав (Гц)									
	125	160	200	250	315	400	500	630	800	1000
Научная работа, расчеты, конструирование	86	71	61	54	49	45	42	40	38	50
Офисы, лаборатории	93	79	70	68	58	55	52	52	49	60

Уровень шума в аудитории № 316 корпуса № 10 ТПУ не превышает 50 дБа.

4.2.7 Психофизиологические факторы

Психофизиологические опасные и вредные производственные факторы, делятся на физические перегрузки (статические, динамические) и нервно-психические перегрузки (умственное перенапряжение, монотонность труда, эмоциональные перегрузки).

Трудовая деятельность работников непромышленной сферы относится к категории работ, связанных с использованием больших объемов информации, с применением компьютеризированных рабочих мест, с частым принятием ответственных решений в условиях дефицита времени, непосредственным контактом с людьми разных типов темперамента. Это обуславливает высокий уровень нервно-психической перегрузки, снижает функциональных на активность центральной нервной системы, приводит к расстройствам в ее деятельности, развития утомления, переутомления, стрессу.

Наиболее эффективные средства предупреждения утомления при работе на производстве – это средства, нормализующие активную трудовую деятельность человека. На фоне нормального протекания производственных процессов одним из важных физиологических мероприятий против утомления является правильный режим труда и отдыха [32].

В связи с соблюдением санитарных правил утомление в процессе работы в аудитории № 316 корпуса № 10 сведено к минимуму [32].

4.2.8 Поражение электрическим током

Рабочее помещение по опасности поражения электрическим током можно отнести ко 1 классу, т.е. это помещение без повышенной опасности из-за возможности одновременного прикосновения человека к имеющим соединение с землей металлоконструкциям зданий, технологическим аппаратам, механизмам и т.п., с одной стороны, и к металлическим корпусам электрооборудования – с другой [33].

Существует опасность электропоражения в следующих случаях:

- 1) при непосредственном прикосновении к токоведущим частям во время ремонта;
- 2) при прикосновении к нетоковедущим частям, оказавшимся под напряжением (в случае нарушения изоляции токоведущих частей);
- 3) при прикосновении с полом, стенами, оказавшимися под напряжением;
- 4) при коротком замыкании в высоковольтных блоках: блоке питания и блоке дисплейной развертки.

Степень опасного воздействия электрического тока на организм человека зависит от:

- 1) рода и величины напряжения и тока;
- 2) частоты электрического тока;
- 3) пути прохождения тока через тело человека;
- 4) продолжительности воздействия на организм человека;

5) условий внешней среды.

Электрический ток оказывает на человека термическое, электролитическое, механическое и биологическое воздействие.

Термическое воздействие тока проявляется в ожогах, нагреве кровеносных сосудов и других органов, в результате чего в них возникают функциональные расстройства.

Электролитическое действие тока характеризуется разложением крови и других органических жидкостей, что вызывает нарушения их физико-химического состава.

Механическое действие тока проявляется в повреждениях (разрыве, расслоении и др.) различных тканей организма в результате электродинамического эффекта.

Биологическое действие тока на живую ткань выражается в опасном возбуждении клеток и тканей организма, сопровождающемся произвольными судорожными сокращениями мышц. В результате такого возбуждения может возникнуть нарушение и даже полное прекращение деятельности органов дыхания и кровообращения.

Основными мероприятиями по защите от поражения электрическим током являются:

- 1) обеспечение недоступности токоведущих частей путем использования изоляции в корпусах оборудования;
- 2) применение средств коллективной защиты от поражения электрическим током;
- 3) использование защитного заземления, защитного зануления, защитного отключения [33];
- 4) использование устройств бесперебойного питания.

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

Организационными мероприятиями по электробезопасности являются периодические и внеплановые инструктажи. Периодический инструктаж

проводится всему неэлектротехническому персоналу, выполняющему следующие работы: включение и отключение электроприборов, уборка помещений вблизи электрощитов, розеток и выключателей и т. д. Весь неэлектротехнический персонал должен быть аттестован на первую квалификационную группу по электробезопасности. Периодический инструктаж проводится не менее одного раза в год [33].

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

Аудитория № 316 корпуса № 10 ТПУ относится к первому классу «помещения без повышенной опасности» [33].

4.2.9 Пожарная и взрывная безопасность

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.

Возможные причины возгорания [34]:

- 1) работа с открытой электроаппаратурой;
- 2) короткие замыкания в блоке питания;
- 3) несоблюдение правил пожарной безопасности;
- 4) наличие горючих компонентов.

Наиболее опасным с точки зрения пожарной безопасности веществом, применяемым в работе, является этанол.

Все работы с этанолом должны проводиться с использованием приточно-вытяжной вентиляции вдали от огня и источников искрообразования.

При отборе проб, проведении анализа и обращении в процессе транспортных и производственных операций с этанолом применяются индивидуальные средства защиты по нормам выдачи специальной одежды, специальной обуви и других средств защиты, утвержденным в установленном порядке.

Для тушения горящего этанола применяют порошковые огнетушители, средства объемного тушения (минимальная огнетушащая концентрация: углекислого газа – 29% (по объему), азота – 43% (по объему), дибромтетрафторэтана – 2,1% (по объему), песок, асбестовое одеяло и пену [34].

Мероприятия по пожарной профилактике разделяются на: организационные, технические, эксплуатационные и режимные [34].

Организационные мероприятия предусматривают правильную эксплуатацию оборудования, правильное содержание зданий и территорий, противопожарный инструктаж рабочих и служащих, обучение производственного персонала правилам противопожарной безопасности, издание инструкций, плакатов, наличие плана эвакуации [34].

К техническим мероприятиям относятся: соблюдение противопожарных правил, норм при проектировании зданий, при устройстве электропроводов и оборудования, отопления, вентиляции, освещения, правильное размещение оборудования [34].

К режимным мероприятиям относятся, установление правил организации работ, и соблюдение противопожарных мер. Для предупреждения возникновения пожара от коротких замыканий, перегрузок необходимо соблюдение следующих правил пожарной безопасности [34]:

- 1) исключение образования горючей среды (герметизация оборудования, контроль воздушной среды, рабочая и аварийная вентиляция);

2) правильная эксплуатация оборудования (правильное включение оборудования в сеть электрического питания, контроль нагрева оборудования);

3) правильное содержание зданий и территорий (исключение образования источника воспламенения - предупреждение самовозгорания веществ, ограничение огневых работ);

4) обучение производственного персонала правилам противопожарной безопасности;

5) издание инструкций, плакатов, наличие плана эвакуации;

6) соблюдение противопожарных правил, норм при проектировании зданий, при устройстве электропроводов и оборудования, отопления, вентиляции, освещения;

7) правильное размещение оборудования;

8) своевременный профилактический осмотр, ремонт и испытание оборудования.

При возникновении пожара сообщить руководителю, органам противопожарной безопасности предприятия и приступить к тушению пожара огнетушителем.

При возникновении аварийной ситуации необходимо [34]:

1) сообщить руководству (дежурному);

2) позвонить в соответствующую аварийную службу или МЧС по телефону – 112;

3) принять меры по ликвидации последствий аварии в соответствии с инструкцией.

На основании [37] 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.

4.3 Безопасность в аварийных и чрезвычайных ситуациях

Аварийные и 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. Пожар в рабочем помещении может возникнуть вследствие причин неэлектрического и электрического характера. В таблице 4.6 рассмотрены возможные аварийные и чрезвычайные ситуации, методы по их предотвращению и ликвидации их последствий.

Таблица 4.6 – Аварийные и чрезвычайные ситуации, методы их предотвращения и ликвидации последствий

№	АСиЧС	Меры предотвращения АСиЧС	Меры по ликвидации последствий АСиЧС
1	Пожар	Проведение вводного и повторного (через 6 мес.) инструктажа; Соблюдение технологических режимов производства; Создание условий для эвакуации персонала	Вызов пожарной службы и спасателей (тел. 112); Вызов скорой медицинской помощи
2	Травмирование в результате падения с высоты	Проведение вводного и повторного (через 6 мес.) инструктажа; Создание систем предупреждения падений; Соблюдать требования безопасности при выполнении работ на высоте	Вызов скорой медицинской помощи (тел. 030, 112); Оказание первой помощи
3	Удар током	Проведение вводного и повторного (через 6 мес.) инструктажа; Содержание энергетических сетей в исправном состоянии	Вызов скорой медицинской помощи (тел. 030, 112); Оказание первой помощи

4.4 Вывод по разделу «Социальная ответственность»

В разделе рассмотрены следующие вредные и опасные факторы помещения:

- 1) микроклимат [28];
- 2) шум [31];
- 3) электромагнитное излучение [29];
- 4) освещенность [30];
- 5) психофизиологические факторы [32];
- 6) электробезопасность [33];
- 7) пожаро-взрывобезопасности [34, 37].

Помещение № 316 10 корпуса ТПУ отнесено:

- 1) по электробезопасности – к 1 классу [33];
- 2) по пожаро-взрывобезопасности – к категории «В3 (П-Па)» [34, 37].

Также рассмотрены возможные аварийные и чрезвычайные ситуации, методы их предотвращения и ликвидации последствий.

Выводы

В ходе выполнения ВКР моделировали процессы между пакетами минералов монтмориллонит и вермикулит. Рассчитывали коэффициент диффузии катионов K^+ и Cs^+ , распределение катионов и воды между пакетами минерала, функцию радиального распределения. Сравнивали данные для природных минералов и минералов, полученных за счет изоморфного замещения атомов Mg, Fe и Si на Al. По результатам выполнения ВКР сделаны следующие выводы.

Проведен обзор литературы по использованию глинистых минералов при геологическом захоронении РАО.

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 – $11,9 \cdot 10^{-11} \text{ м}^2/\text{с}$.

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 – $14,95 \cdot 10^{-11} \text{ м}^2/\text{с}$.

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.

Список используемых источников

1. Семак Е.Ю. Перспективный метод захоронения долгоживущих радиоактивных отходов / Е.Ю. Семак // 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. – Режим доступа: <http://conf.sfu-kras.ru/sites/mn2012/section04.html>, свободный.
2. Кулькова Е.Ю. Захоронение радиоактивных отходов. / Е.Ю. Кулькова, Е.Н. Френкель, М.И. Кучер. – СПб.: военная академия материально-технического обеспечения им. генерала армии А.В. Хрулева, 2018. – 16 с.
3. Ахмедзянов В.Р. Обращение с радиоактивными отходами. / В.Р. Ахмедзянов, Т.Н. Лащенко. – М.: Энергия, 2008. – 210 с.
4. Стратегия создания пункта глубинного захоронения радиоактивных отходов / В.В. Крупская, Д.В. Бирюков, П.Е. Белоусов [и др.] // Радиоактивные отходы. – 2018. – № 2 (3). – 144-120 с.
5. Современное состояние в разработках и использовании глинистых материалов в качестве инженерных барьеров безопасности на объектах консервации и захоронении РАО в России. / О.А. Ильина, В.В. Крупская, С.Е. Винокуров [и др.] // Радиоактивные отходы. 2019. № 4 (9). – 71-84 с.
6. Применение природных глинистых материалов для повышения уровня ядерной и радиационной безопасности объектов ядерного наследия / В.В. Крупская, Д.В. Бирюков, П.Е. Белоусов // Радиоактивные отходы. – 2018. – № 2 (3). – 30-43 с.
7. Савоненков В.Г. Глины как геологическая среда для изоляции радиоактивных отходов. / В.Г. Савоненков, Е.А. Андерсон, С.И. Шабалев. – СПб.: Радиевый институт им. В.Г. Хлопина, 2012. – 215 с.
8. Wilson M.J. Rock-forming minerals. Sheet Silicates: Clays Minerals / M.J. Wilson. – London: The Geological Society, 2013. – 724 с.
9. 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 / S. Guggenheim, J.M. Adams, D.C. Bain [и др.] // *Clays and Clay Minerals*. – 2006. – Т. 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. О системном подходе к выбору барьеров безопасности для захоронения РАО классов 3 и 4 / Д.И. Павлов, О.А. Ильина // *Радиоактивные отходы*. – 2020. – № 3 (12). – 39-53 с.

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

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

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

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

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

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

19. Сорбция радионуклидов на глинистых минералах – компонентах инженерных барьеров безопасности / А.С. Семенкова, О.А. Ильина, В.В. Крупская [и др.]. – М.: вестн. моск. ун-та, 2021. - № 5. – 425-434 с.

20. Crystallography open database (COD): an open-access collection of crystal structures and platform for world-wide collaboration / S. Grazulis, A. Daskevicius, A. Merkys [и др.] // *Nucleic Acids Research*. – 2012. – Т. 40. – С. 420-427.
21. Wyckoff R.W.G. *Crystal Structures* / R.W.G. Wyckoff. – N.Y.: Interscience, 1964.
22. Cygan R.T. Molecular Models of Hydroxide, Oxyhydroxide, and Clay Phases and the Development of a General Force Field / R.T. Cygan, J.J. Liang, A.G. Kalinichev // *J. Phys. Chem. B*. – 2004. – Т. 108(4). – С. 1255-1266. – DOI: 10.1021/jp0363287
23. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение : учебно-методическое пособие / Н.А. Гаврикова, Л.Р. Тухватулина, И.Г. Видяев [и др.] : Томский политехнический университет. – Томск : НИ ТПУ, 2014. – 73 с.
24. Кнышова, Е. Н. Экономика организации : учебник / Е.Н. Кнышова, Е.Е. Панфилова. – М. : ФОРУМ : ИНФРА-М, 2023. – 335 с. – (Среднее профессиональное образование). – ISBN 978-5-8199-0696-5. – Текст : электронный. – URL: <https://znanium.com/catalog/product/1911502> (дата обращения: 22.05.2023). – Режим доступа: по подписке.
25. Шульмин В. А. Экономическое обоснование в дипломных проектах: учебное пособие для вузов / В. А. Шульмин, Т. С. Усынина. – Старый Оскол : ТНТ, 2012. – 192 с.
26. Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 №197-ФЗ (ред. от 19.12.2022, с изм. от 11.04.2023) (с изм. и доп., вступ. в силу с 01.03.2023) // Техэксперт : [Электронный ресурс]. – URL: <https://docs.cntd.ru/document/901807664> (дата обращения: 21.05.2023).
27. СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03. Санитарно-эпидемиологические правила и нормативы «Гигиенические требования к ПЭВМ и организация работы».
28. СанПиН 2.2.4.548-96. Физические факторы производственной среды. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений : утверждены и введены в действие постановлением Госкомсанэпиднадзора

- России от 1 октября 1996 г., № 21 // Техэксперт : [Электронный ресурс]. – URL: <https://docs.cntd.ru/document/901704046> (дата обращения: 21.05.2023).
29. ГОСТ 12.1.006-84 ССБТ. Электромагнитные поля радиочастот. Допустимые уровни на рабочих местах и требования к проведению контроля. // Техэксперт : [Электронный ресурс]. – URL: <https://docs.cntd.ru/document/5200272> (дата обращения: 21.05.2023).
30. СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-03. Санитарно-эпидемиологические правила и нормативы «Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещённому освещению жилых и общественных зданий».
31. СН 2.2.4/2.1.8.562-96. Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории жилой застройки // Техэксперт : [Электронный ресурс]. – URL: <https://docs.cntd.ru/document/901703278> (дата обращения: 21.05.2023).
32. СанПиН 1.2.3685-21. Гигиенические нормативы и требования к обеспечению безопасности и (или) безвредности для человека факторов среды обитания (от 28 января 2021 г. № 2) // Техэксперт : [Электронный ресурс]. – URL: <https://docs.cntd.ru/document/573500115> (дата обращения: 21.05.2023).
33. ГОСТ 12.1.038-82 ССБТ. Электробезопасность. Предельно допустимые значения напряжений прикосновения и токов // Техэксперт : [Электронный ресурс]. – URL: <https://docs.cntd.ru/document/5200313> (дата обращения: 21.05.2023).
34. ГОСТ 12.1.044-2018 ССБТ. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов // Техэксперт : [Электронный ресурс]. – URL: <https://docs.cntd.ru/document/1200160696> (дата обращения: 21.05.2023).
35. ГОСТ 30494-2011 Здания жилые и общественные. Параметры микроклимата в помещениях. – М.: Стандартинформ, 2019. – 11 с.
36. СНиП 41-01-2003 Отопление, вентиляция и кондиционирование. – Москва, 2004. – 60 с.

37. НПБ 105-95. Определение категорий помещений и зданий по взрывопожарной и пожарной опасности // Техэксперт : [Электронный ресурс]. – URL: <https://docs.cntd.ru/document/9051557> (дата обращения: 21.05.2023).

Приложение А

Investigation of the barrier properties of irradiated clay minerals

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0AM11	Лапо Михаил Петрович		

Консультант лингвист Отделения иностранных языков ИЯТШ

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель	Квашнина Ольга Сергеевна			

Introduction

The operation of nuclear energy leads to the formation of radioactive waste (RW). Currently, a large amount of radioactive waste has been accumulated, requiring long-term isolation from the sphere of human life. Currently, the amount of radioactive waste continues to accumulate due to the continued operation of nuclear power.

Clay minerals are the most suitable material for the formation of engineering safety barriers for radioactive waste disposal. Clay minerals have good water insulating properties. This prevents the entry of radionuclides into underground aquifers from the disposal site. The ability of clay minerals to counteract the migration of radionuclides is associated with the sorption and diffusion of ions both in the volume and on the surface of mineral microparticles. The only way for radionuclides to escape from the RW disposal area through safety barriers, in the absence of water microfiltration, is diffusion. Diffusion occurs through the clay microparticle, in the pore solution of the compacted clay layer, over the surface of the microparticle. Anions can migrate only through the solution of the pore space and on the surface of the microparticles.

The literature presents the results of studying the migration of counterions under various conditions and along various trajectories, both experimentally and by calculation methods. At the same time, insufficient attention was paid to the study of the influence of the structural features of clay minerals on the diffusion coefficient of ions. At present, the study of the dependence of the rate of migration of cations through clay minerals on their structural features is topical.

The purpose of the study is to study the dependence of the diffusion coefficient of K^+ , Cs^+ cations between the mineral packets montmorillonite and vermiculite on the coordinates of Al atoms replacing Mg, Fe, and Si atoms in different layers of the mineral.

To achieve the goal, the following tasks were set.

1. Review of scientific literature on the use of clay mixtures in the geological disposal of radioactive waste.

2. Quantum-chemical modeling of processes in a clay mineral containing K^+ , Cs^+ cations and water molecules.
3. Analysis of the obtained results.

1 Literature review

1.1 Disposal methods for radioactive waste

The issue of handling radioactive waste (RW), which accumulates during the operation of nuclear power plants, is one of the urgent problems of the modern world. Radioactive waste poses a special biological hazard, since it contains radioactive isotopes of chemical elements that can cause various mutations, diseases, and even death when they enter the human body [1]. Therefore, it is necessary to isolate radioactive waste from the environment for a certain period, after which they will no longer pose a threat.

Burial is used to isolate waste from the environment. There are four methods of radioactive waste disposal:

1. superficial;
2. near-surface;
3. underground;
4. deep.

The choice of disposal method depends on the activity of radionuclides, their state of aggregation, volumes, and the economic component.

For surface disposal of radioactive waste, containers are used, which are placed on specially equipped sites on the surface of the earth or at a shallow depth, forming an elevation [1]. This method is applied to waste with a half-life of up to 30 years and is located above groundwater table. However, under natural impacts, deformation and destruction of the container with radioactive waste is possible, which will lead to environmental pollution.

Near-surface disposal is carried out for the processing of radioactive waste. This method consists in burying drums with waste in trenches located at a depth of 10 to 200 meters in specially equipped pits. Depending on the level of radioactive waste, trenches can be located above or below groundwater [2, 3]. This category of waste includes solid and solidified RW that has been transferred from a liquid to a solid state of aggregation.

Compared to the surface disposal method, the Radioactive Waste Disposal Facility (RWDF) is less affected by climatic conditions. However, RWDS provides for placement near groundwater. Over time, the structure of the RWDS is subject to corrosion, which can lead to a breach of the tightness of the container with radioactive waste. In underground disposal, waste is isolated underground in specially designed underground cavities. Special tunnels are used to gain access to burial sites.

When RW is placed under underground aquifers, the risk of contamination of groundwater with radionuclides is reduced, which makes it possible to minimize the danger to the environment [2]. The small area occupied on the surface is an advantage of the underground type of disposal, but geological exploration is necessary for its construction.

The most expensive and highly demanding facility for creation is a deep disposal facility for radioactive waste (DWDF). DGRWDF is designed for disposal of accumulated and newly formed high-level radioactive waste (HLW) [4]. This method involves the disposal of radioactive waste for a period after which the waste will not pose a danger to the environment [1]. Unlike the previous methods of disposal, in the DGRW RW is stored in underground storages in stable geological formations containing a minimum amount of groundwater at a depth of 250 to 1000 meters. The placement of waste in containers and their placement at great depths is a set of barriers that prevent radionuclides from reaching the environment and humans. Rock, salt and clay act as safety barriers.

Compared to other disposal methods, deep burial is more efficient, but has a number of difficulties and limitations for construction:

1. the complexity of earthworks;
2. exploration work (limitation of places for construction);
3. stability of rocks;
4. minimum amount of groundwater.

To date, the method of deep burial is considered to be preferable, however, high requirements and economic feasibility hinder its implementation in the world.

1.2 Use of clay materials as engineered safety barriers

To reduce the harmful effects of radioactive waste on humans and the environment, disposal facilities are being created. Particular attention is paid to engineering safety barriers (ESBs), which are made from materials that ensure long-term safe storage of radioactive waste. When choosing materials, the required values of parameters, such as sorption and migration, are taken into account, and scientific research is carried out to develop calculation models and scenarios for the development of events. These studies are still ongoing.

Engineering safety barriers can be created using clay materials as they have unique properties. For this, clay mixtures are used, consisting of several components, as a rule, from minerals of the smectite group (montmorillonite), vermiculites, kaolinites and illites. Clays have insulating properties with respect to water, which makes it possible to prevent the entry of radionuclides into underground aquifers [6]. The main component in such mixtures are minerals of the montmorillonite group, which have better functional characteristics than other clay minerals, which was confirmed by Russian and foreign studies [7, 8].

According to the nomenclature of the International Mineralogical Association, clay minerals belong to silicates (a subclass of phyllosilicates) and contain two groups [9]. These groups differ in the number of tetrahedral and octahedral sheets - 1:1 (kaolinite, halloysite, lizardite, berthierine) or 2:1 (a group of true micas (muscovite, biotite, phlogopite), micas with interlayer deficiency (illite, glauconite), smectites (montmorillonite, saponite), vermiculites (vermiculite), a group of chlorites (clinochlore, chamosite)), as well as the number of isomorphic substitutions that determine the charge of the layer. Minerals type 1:1 have low capacity and swelling, as well as high water permeability (high diffusion). Minerals of the 2:1 type contain cations and water molecules as part of the interlayer gap (interlayer).

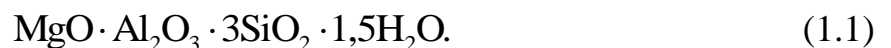
Minerals of the smectite group, especially montmorillonite, adsorb cations and anions well on the basal surface and side cleavages due to the relatively low charge of the layer and the localization of isomorphic substitutions in the octahedral

layer. Unlike kaolinites, which have a low cation exchange capacity, low swelling capacity, and impervious properties, clay mixtures are effectively used to create sorption, impervious, and anti-migration barriers for radioactive waste disposal [6].

The main component of bentonite is montmorillonite, which makes up at least 70% of its composition. This clay mineral has a three-story structure consisting of a layer of alumina sandwiched between two layers of silicon oxide. Between the layers of clay is water (interlayer) and cations of alkali and alkaline earth metals.

The mineral composition of montmorillonite, like other clays, is variable. The composition depends on the varying water content, that is, on the composition of the aqueous solutions interacting with the clay.

The chemical formula of the main component of montmorillonite:



According to various data, the following contents of chemical elements are established, % [10]:

1. SiO_2 – from 48 to 56;
2. Al_2O_3 – from 11 a.m. to 10 p.m.;
3. Fe_2O_3 – more than 5;
4. MgO – from 4 to 9;
5. CaO – more than 0.8;
6. H_2O – from 12 to 24.

It can be argued that the clay mineral contains a constant component (framework) and a variable component (interlayer solution). However, the constant component of the clay composition can also change.

According to [11] RWDF engineering safety barriers should:

1. limit contact of RW packages (unpacked RW) with natural waters;
2. prevent the destruction of RW packages under external influences of natural and man-made nature;
3. prevent destruction of radioactive waste packages under the influence of enclosing rocks;

4. limit the spread of radionuclides into the host rocks within the limits established in the RWDF project.

The use of clay materials as the creation of ESB to ensure the long-term safety of RWDS plays an important role. For each element of the ESB design, selection criteria are presented that correspond to its purpose. According to [12], the key parameters of buffer material safety barriers are given in Table 1.1.

Table 1.1 - Main criteria for evaluating IBB buffer material

No	Parameter	Protective barrier (bentonite clay)	Unit dimensions
1	Life time	Not limited	Year
2	Elastic modulus	20-110	MPa
3	Frost resistance (from -40 °C to +40 °C)	Not limited	cycle.
4	swelling pressure	0.2-10	MPa
6	Water permeability	10^{-8} - 10^{-7}	m/day
7	Density	1.8-2.6	g/cm ³
8	Porosity	30-60	%
9	Distribution coefficient of radionuclides	10^2 - 10^4	m ³ /kg
10	Diffusion coefficient (⁹⁰ Sr, ¹³⁷ Cs)	10^{-14} - 10^{-11}	m ² /s
11	Sorption capacity	0.8-1.5	mg/g

Table 1.1 considers bentonite clay as a buffer material. Decisions about what material will be used as a buffer for a future disposal site are made taking into account the design of the RWDF, the time of operation and the conditions of its location.

1.3 Clay properties

More than 60 years ago, clay minerals began to be used in the form of structures to create points for the final isolation of radioactive waste. Low values of filtration coefficients and the ability to delay mobile radionuclides became the reason for their use [6]. Basically, bentonite clays, consisting mainly of montmorillonite, are used for burial sites. These clays have properties that, on the

one hand, are their advantages, and on the other, their disadvantages. For example, their ability to swell helps to prevent shrinkage of clay materials, but in turn leads to additional loads on the design of RWDF and RW packaging [13], which can even lead to their destruction.

In various processes, low permeability of both groundwater and gases can have negative consequences. Hydrogen, which is released during the radiolysis of water, can lead to an increase in the pressure of the barrier and an excess of its strength characteristics [13].

Clay minerals and their mixtures can have different granulometric composition. For use in engineering safety barriers, materials with a high content of finely dispersed fraction [6] - less than 5 μm are more preferable. This is because minerals with the smallest grain size exhibit the properties most characteristic of clay minerals.

The main properties according to which clayey rocks are classified as promising geological media are [7]:

1. low water permeability;
2. plastic;
3. swelling;
4. high absorbency.

1.3.1 Water resistance

One of the important properties of clay materials is water resistance, which means that these minerals do not allow water molecules to pass through them. The porosity of clay materials is the reason for their throughput. The movement of water through crystals of clay minerals occurs as follows: water is filtered through the largest pores between clay microparticles, and smaller pores appear under pressure, causing partial extrusion of pore water. As a result, the partially freed pore space allows water filtration to pass through. However, water filtration through small pores is practically impossible due to interlayer water, which completely fills the pore space.

Water permeability is characterized by the filtration coefficient, which is numerically equal to the filtration rate. The filtration rate determines the amount of water per unit cross-sectional area passing through the filter rocks [14]. The value of the filtration rate is determined by the Darcy formula:

$$v = k \cdot I, \quad (1.2)$$

where k is the filtration coefficient; I is pressure gradient equal to the ratio of the pressure drop to the length of the filtration path.

The value of water permeability for clays is in the range from 10^{-3} to 10^{-5} m/day or less, and for permeable rocks (argillaceous sands, loams) - from 1 to 10^{-3} m/day [14].

1.3.2 Plasticity

The plasticity of clay is its ability to maintain its shape under the action of external forces without breaking the continuity. The mineral composition and the amount of fine particles affect the plasticity of clay minerals. Plasticity can be increased by grinding and mechanical processing of clay particles. If it is necessary to reduce plasticity, then non-plastic materials, such as quartz sand or ground fired clay, can be added to the composition of the original mineral.

The ability of a mineral to hold water is determined by the plasticity number, which is calculated as the difference between the yield points. In turn, the upper yield point corresponds to the state in which the clay passes into a fluid state, and the lower limit - into a solid state.

1.3.3 Swelling

Swelling is the ability of clay to increase volume by absorbing water molecules. The swelling process is accompanied by an increase in moisture content, rock volume, and the appearance of swelling pressure [15].

Swelling of clay microparticles occurs in two stages. At the first stage, the clay absorbs moisture. Adsorption of water molecules by the surface of fine particles, as well as by interlayer spaces of clay minerals, is observed. In this case, the volume of clay remains constant. At the second stage, the absorption of water occurs due to the osmotic pressure that takes place near the surface of the clay particles. The excess pressure is due to the increased concentration of exchangeable cations that have passed from the surface of the solid phase into the solution. At this stage, the volume of clay increases. Clays that contain minerals with a mobile crystal structure, for example, the smectite group, have the greatest swelling value. The smallest are minerals with a more rigid crystal structure, for example, kaolinite.

The magnitude of swelling, as well as plasticity, is affected by the mineral composition of clay minerals. For example, the volume of bentonite clays increases by a factor of 10, and that of sedimentary clays by a factor of 3 [14].

The properties of clay minerals in combination, namely plasticity and swelling, have the effect of "healing". Thus, with an increase in the volume of clay, cracks in the mineral are tightened, which act as migration channels. The barrier properties of clay materials are restored.

1.3.4 Absorption capacity

The property of the ability of clay to absorb and retain various substances in its volume is the key to the isolation of radioactive waste. This is due to the peculiarities of the crystal structure of minerals.

Clay minerals have an aluminosilicate framework consisting of parallel layers alternating with each other. Such layers are formed by aluminate octahedra and silicate tetrahedra. For example, the framework of kaolinite consists of aluminum hydroxide and silicon oxide, which form two layers. Hydrogen bonds bind the layers

of the mineral, creating a rigid multilayer lattice, which is difficult for water and ions to penetrate. The base package of montmorillonite contains three layers: an inner octahedral layer and two outer tetrahedral layers.

The hydroxyl ions, which have the same charge, are used to separate the packets. The crystal lattice increases in size due to the fact that water molecules and ions are drawn into the space between the packets [14]. Clays exhibit isomorphism, which means that atoms can replace each other in the crystal structure of the clay mineral. Substitutions can occur in both tetrahedral and octahedral layers. For example, the replacement of an Al atom by atoms with a lower positive charge (Mg, Fe) in an octahedral layer leads to the fact that the structural framework becomes negatively charged.

To maintain electrical neutrality between the layers of the structure of minerals, such as montmorillonite, additional cations are introduced into them. Cations in aqueous solutions can easily move between individual layers and actively exchange with cations from solutions. Kaolinite has the lowest cation exchange capacity, while montmorillonite has the highest [7].

To characterize the absorption capacity of clay materials in relation to radionuclides, in particular, the distribution coefficient and the delay coefficient are used.

The distribution coefficient is calculated by the formula:

$$K_d = \frac{C_s}{C_l} = \frac{I_0 - I_p}{I_p} \cdot \frac{V}{m}, \quad (1.3)$$

where C_s is the concentration of the radionuclide absorbed by the solid phase; C_l is the concentration of the radionuclide in the solution after equilibrium has been established; I_0 is the concentration of the radionuclide in the solution before contact with the solid phase; I_p is the concentration of the radionuclide in the solution after equilibrium with the solid phase is established; V is the volume of the solution; m is the mass of the solid phase.

The distribution coefficient is associated with the delay coefficient, which determines the amount of lag between the spread of a substance and the spread of the liquid phase:

$$R = 1 + K_d. \quad (1.4)$$

Distribution coefficients and delays are the main parameters that determine the barrier properties of clay minerals [14]. These parameters can be determined experimentally.

1.4 Methods for studying the barrier properties of clay

To solve two problems, it is necessary to study the barrier properties of clay materials. First of all, it is necessary to confirm the characteristics of materials in conditions of external interaction close to real ones. Secondly, the results of the research should predict the further behavior of the objects of study. The main characteristics that determine the choice of buffer material as safety barriers are diffusion, sorption and distribution coefficient.

1.4.1 Diffusion

Diffusion is the spontaneous mixing of two substances. Diffusion is the main mechanism for the migration of radionuclides through the clay barrier at a clay density of more than 1.9 g/cm³. Diffusion of cations, anions and water molecules through clay depends on the chemical composition of the mineral.

Until the barrier reaches its full sorption capacity, nonstationary diffusion is characterized by a true diffusion coefficient. Then, if the barrier capacitance is insufficient to absorb all the activity of the radionuclide, it will go beyond its limits at a constant rate determined by the effective pore diffusion coefficient [16]. The ratio of the diffusion coefficients is expressed in terms of the sorption capacity coefficient:

$$\frac{D_e}{D_a} = \alpha, \quad (1.5)$$

where D_e is the effective pore diffusion coefficient; D_a is the true diffusion coefficient.

For non-sorbing radionuclides $\alpha = 1$, the true diffusion coefficient becomes equal to the effective one, that is, there is no sorption delay, diffusion is stationary [16].

It is sorption on the surface of pores, and not pore diffusion, that determines the delay in the migration of radionuclides.

Diffusion of radionuclides through the safety barrier is described by second law [17]:

$$\frac{dC(x, y, z, \tau)}{d\tau} = D \left(\frac{\partial^2 C(x, y, z, \tau)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C(x, y, z, \tau)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C(x, y, z, \tau)}{\partial z^2} \right), \quad (1.6)$$

where $\frac{dC}{d\tau}$ is the change in the concentration of the diffusing substance over time; D is the diffusion coefficient; x, y, z is offset along the corresponding coordinate axes.

In order to verify the reliability of the use of clay material in the ESB at RW points, it is necessary to conduct experiments to determine the migration properties of the mineral, which includes such an important parameter as the diffusion coefficient of radionuclides.

The authors of [18] studied the migration of radionuclides through engineering safety barriers. The range of variation of the diffusion coefficient for radiation hazardous isotopes is 10^{-16} - 10^{-10} m²/s.

1.4.2 Sorption and partition coefficient

The coefficient of distribution of radionuclides on the materials of engineering safety barriers is one of the key parameters that determine the use of these materials in the creation of RWDS. To substantiate the choice of ESB components, information is needed on the sorption capacity of the most promising materials. As a rule, various clay minerals act as components of mixtures, among which minerals

of the smectite group acquire the greatest importance. The strategies currently being implemented for radioactive waste disposal will mostly involve the use of bentonite clays as a buffer material due to their properties: high swelling capacity, sorption capacity and low water permeability.

In order to select the appropriate component of buffer material for the safety barrier, its sorption characteristics, as well as the characteristics of the mineral composition, must be taken into account.

In [19], the sorption properties of bentonite, kaolinite, and vermiculite with respect to various radionuclides were studied. Analysis of the results shows that the high content of montmorillonite and vermiculite-like material in the safety barrier contributes to a high sorption capacity for most radionuclides. The content of kaolinite, on the contrary, leads to a decrease in the coefficients of sorption distribution.

Conclusions

In the course of the WRC, the processes between the mineral packets montmorillonite and vermiculite were simulated. The diffusion coefficient of K^+ and Cs^+ cations, the distribution of cations and water between mineral packets, and the radial distribution function were calculated. The data for natural minerals and minerals obtained by isomorphic substitution of Mg, Fe, and Si atoms by Al were compared. The following conclusions were drawn.

A review of the literature on the use of clay minerals in the geological disposal of radioactive waste was carried out.

Quantum chemical modeling shows that the diffusion coefficient largely depends on the position of the substituting atoms in the tetrahedral and octahedral sheets. The greatest change in the diffusion coefficient is observed upon replacement in an octahedral sheet. For example, in the original structure of the montmorillonite mineral, the diffusion coefficient K^+ is $4.17 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$, and with a symmetrical replacement of Mg by Al – $11.9 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$.

In a tetrahedral sheet, the strongest effect is exerted by the symmetrical substitution of Si atoms by Al atoms on both sides. The diffusion coefficient K^+ in the original structure of montmorillonite is $4.17 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$, and when replaced it is $14.95 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$.

It is shown that the longest time of the protective action of a montmorillonite clay layer 1 meter thick is observed when 4 Mg atoms are replaced on one side of the mineral layer in an octahedral sheet and is $3 \cdot 10^6$ years. In the original mineral, this time is $0.76 \cdot 10^6$ years.