

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

Институт Физико-технический
Направление подготовки 14.03.02 Ядерные физика и технологии
Кафедра Физико-энергетические установки

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы

**Разработка методики количественного анализа урана в
растворах**

УДК 543.427.4

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0A2Г	Дубровка С.П.		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент каф. ФЭУ ФТИ	Чурсин С.С.			

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент каф. МЕН ИСГТ	Сечина А.А.	к.х.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

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

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Зав. кафедрой	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
ФЭУ ФТИ	Долматов О.Ю.	к.ф.-м.н., доцент		

Томск – 2016 г.

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ООП

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)
Общекультурные компетенции	
P1	Демонстрировать культуру мышления, способность к обобщению, анализу, восприятию информации, постановке цели и выбору путей ее достижения; стремления к саморазвитию, повышению своей квалификации и мастерства; владение основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, навыки работы с компьютером как средством управления информацией; способность работы с информацией в глобальных компьютерных сетях.
P2	Способность логически верно, аргументировано и ясно строить устную и письменную речь; критически оценивать свои достоинства и недостатки, намечать пути и выбирать средства развития достоинств и устранения недостатков.
P3	Готовностью к коопérationи с коллегами, работе в коллективе; к организации работы малых коллективов исполнителей, планированию работы персонала и фондов оплаты труда; генерировать организационно-управленческих решения в нестандартных ситуациях и нести за них ответственность; к разработке оперативных планов работы первичных производственных подразделений; осуществлению и анализу исследовательской и технологической деятельности как объекта управления.
P4	Умение использовать нормативные правовые документы в своей деятельности; использовать основные положения и методы социальных, гуманитарных и экономических наук при решении социальных и профессиональных задач, анализировать социально-значимые проблемы и процессы; осознавать социальную значимость своей будущей профессии, обладать высокой мотивацией к выполнению профессиональной деятельности.
P5	Владеть одним из иностранных языков на уровне не ниже разговорного.
P6	Владеть средствами самостоятельного, методически правильного использования методов физического воспитания и укрепления здоровья, готов к достижению должного уровня физической подготовленности для обеспечения полноценной социальной и профессиональной деятельности.

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)
Профессиональные компетенции	
P7	Использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования.
P8	Владеть основными методами защиты производственного персонала и населения от возможных последствий аварий, катастроф, стихийных бедствий; И быть готовым к оценке ядерной и радиационной безопасности, к оценке воздействия на окружающую среду, к контролю за соблюдением экологической безопасности, техники безопасности, норм и правил производственной санитарии, пожарной, радиационной и ядерной безопасности, норм охраны труда; к контролю соответствия разрабатываемых проектов и технической документации стандартам, техническим условиям, требованиям безопасности и другим нормативным документам; за соблюдением технологической дисциплины и обслуживанию технологического оборудования; и к организации защиты объектов интеллектуальной собственности и результатов исследований и разработок как коммерческой тайны предприятия; и понимать сущность и значение информации в развитии современного информационного общества, сознавать опасности и угрозы, возникающие в этом процессе, соблюдать основные требования информационной безопасности, в том числе защиты государственной тайны).
P9	Уметь производить расчет и проектирование деталей и узлов приборов и установок в соответствии с техническим заданием с использованием стандартных средств автоматизации проектирования; разрабатывать проектную и рабочую техническую документацию, оформление законченных проектно-конструкторских работ; проводить предварительного технико-экономического обоснования проектных расчетов установок и приборов.
P10	Готовность к эксплуатации современного физического оборудования и приборов, к освоению технологических процессов в ходе подготовки производства новых материалов, приборов, установок и систем; к наладке, настройке, регулировке и опытной проверке оборудования и программных средств; к монтажу, наладке, испытанию и сдаче в эксплуатацию опытных образцов приборов, установок, узлов, систем и деталей.

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)
P11	Способность к организации метрологического обеспечения технологических процессов, к использованию типовых методов контроля качества выпускаемой продукции; и к оценке инновационного потенциала новой продукции.
P12	Способность использовать информационные технологии при разработке новых установок, материалов и приборов, к сбору и анализу информационных исходных данных для проектирования приборов и установок; технические средства для измерения основных параметров объектов исследования, к подготовке данных для составления обзоров, отчетов и научных публикаций; к составлению отчета по выполненному заданию, к участию во внедрении результатов исследований и разработок; и проведения математического моделирования процессов и объектов на базе стандартных пакетов автоматизированного проектирования и исследований.
P13	Уметь готовить исходные данные для выбора и обоснования научно-технических и организационных решений на основе экономического анализа; использовать научно-техническую информацию, отечественный и зарубежный опыт по тематике исследования, современные компьютерные технологии и базы данных в своей предметной области; и выполнять работы по стандартизации и подготовке к сертификации технических средств, систем, процессов, оборудования и материалов;
P14	Готовность к проведению физических экспериментов по заданной методике, составлению описания проводимых исследований и анализу результатов; анализу затрат и результатов деятельности производственных подразделений; к разработки способов применения ядерно-энергетических, плазменных, лазерных, СВЧ и мощных импульсных установок, электронных, нейтронных и протонных пучков, методов экспериментальной физики в решении технических, технологических и медицинских проблем.
P15	Способность к приемке и освоению вводимого оборудования, составлению инструкций по эксплуатации оборудования и программ испытаний; к составлению технической документации (графиков работ, инструкций, планов, смет, заявок на материалы, оборудование), а также установленной отчетности по утвержденным формам; и к организации рабочих мест, их техническому оснащению, размещению технологического оборудования.

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

Институт Физико-технический
Направление подготовки 14.03.02 Ядерные физика и технологии
Кафедра Физико-энергетические установки

УТВЕРЖДАЮ:
Зав. кафедрой ФЭУ

18.02.2016 О. Ю. Долматов

**ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы**

В форме:

Бакалаврской работы

Студенту:

Группа	ФИО
0A2Г	Дубровка Светлане Павловне

Тема работы:

Утверждена приказом проректора-директора (директора) (дата, номер)	№ 1333/С от 18.02.2016
---	------------------------

Срок сдачи студентом выполненной работы:

26.06.2016

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе	<ul style="list-style-type: none">– аналитический комплекс Спектроскан МАКС-G;– электронные весы;– оборудование химической лаборатории редкоземельных элементов;– порошковый азотнокислый уранил;– требования к УиК ЯМ.
Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов	<ul style="list-style-type: none">– анализ нормативно-правовых документов по вопросам учета и контроля ядерных материалов;– настройка и калибровка спектрометра;– освоение программного обеспечения для работы с РФА спектрометром;– измерение стандартных образцов и оценка точности метода;– разработка методики количественного определения урана в водных растворах;– апробация методики и устранение недостатков.

Перечень графического материала	пробозагрузочные средства.
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы:	
Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Сечина А.А.
Социальная ответственность	Гоголева Т.С.
Названия разделов, которые должны быть написаны на иностранном языке:	
нет	

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику:	16.05.2016
--	------------

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент каф. ФЭУ ФТИ	Чурсин С.С.			16.05.2016

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0A2Г	Дубровка С.П.		16.05.2016

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И
РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту:

Группа	ФИО
0А2Г	Дубровка Светлане Павловне

Институт	ФТИ	Кафедра	ФЭУ
Уровень образования	бакалавр	Направление/специальность	14.03.02 Ядерные физика и технологии

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

1. Стоимость ресурсов научного исследования: материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Этапы проведения работ
2. Оценка коммерческого потенциала и перспективности разработки
3. Затраты на оборудование и материалы, заработную плату специалистов

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Сечина А.А.	к.х.н.		11.04.2016

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0А2Г	Дубровка С.П.		11.04.2016

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»**

Студенту:

Группа	ФИО
0А2Г	Дубровка Светлане Павловне

Институт	ФТИ	Кафедра	ФЭУ
Уровень образования	бакалавр	Направление/специальность	14.03.02 Ядерные физика и технологии

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

- | | |
|--|--|
| 1. Описание рабочего места (рабочей зоны, технологического процесса, механического оборудования) на предмет возникновения: | <ul style="list-style-type: none"> – вредных проявлений факторов производственной среды (метеоусловия, вредные вещества, освещение, шумы, вибрации, электромагнитные поля, ионизирующие излучения); – опасных проявлений факторов производственной среды (механической природы, термического характера, электрической, пожарной и взрывной природы); |
| 2. Знакомство и отбор законодательных и нормативных документов по теме | <ul style="list-style-type: none"> – электробезопасность; – пожаровзрывобезопасность; – требования охраны труда при работе на ПЭВМ; – работа с вредными веществами; – радиационная безопасность. |

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

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

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент кафедры ПФ ФТИ	Гоголева Т.С.	к.ф.-м.н		11.04.2016

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0А2Г	Дубровка С.П.		11.04.2016

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

Институт Физико-технический
Направление подготовки (специальность) 14.03.02 Ядерные физика и технологии
Уровень образования высшее
Кафедра Физико-энергетические установки
Период выполнения (весенний семестр 2015/2016 учебного года)

Форма представления работы:

Бакалаврская работа

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

Срок сдачи студентом выполненной работы:	26.06.2016
--	------------

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
16.05.2016	Выдача задания	
18.05.2016	Настройка прибора и подготовка образцов	
26.05.2015	Разработка методики количественного определения урана в растворах	
09.06.2015	Апробация полученной методики	
26.06.2015	Сдача работы	

Составил преподаватель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент каф. ФЭУ ФТИ	Чурсин С.С.			16.05.2016

СОГЛАСОВАНО:

Зав. кафедрой	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
ФЭУ	Долматов О.Ю.	к.ф.-м.н., доцент		16.05.2016

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа содержит 87 страниц, 17 рисунков, 18 таблиц, 17 формул, 18 источников, 2 приложения.

Ключевые слова: рентгенофлуоресцентный анализ, Спектроскан МАКС-G, спектрометрия, учет и контроль ядерных материалов, качественный анализ, количественный анализ, неразрушающий анализ.

Объектом исследования являются вопросы учета и контроля ядерных материалов в рамках специального обращения с ними.

Предмет исследования – количественный анализ малых содержаний урана в растворах с помощью аналитического комплекса Спектроскан МАКС-G.

Целью работы является разработка методики по определению концентрации урана в водных растворах РФА спектрометре Спектроскан МАКС-G.

В процессе исследования проводился анализ нормативно-правовых документов по вопросам организации и функционирования системы учета и контроля ядерных материалов на ядерном объекте.

Был осуществлена оценка точности выбранного метода и проведен ряд экспериментов по количественному определению урана в водных растворах на рентгенофлуоресцентном спектрометре.

В результате были получены зависимости между концентрациями урана в пробе и интенсивностями вторичного излучения. Таким образом, была разработана и, в дальнейшем, успешно апробирована методика количественного определения урана в водных растворах.

СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ

ВПВ – вредный производственный фактор

ЗП – заработка плата

ИИИ – источник ионизирующего излучения

НРА – неразрушающий анализ

НТИ – научно-техническое исследование

ОПВ – опасный производственный фактор

ОТВС – облученная тепловыделяющая сборка

ОЯТ – облученное ядерное топливо

ПФ – производственный фактор

РБ – радиационная безопасность

РСА – рентгеноспектральный анализ

РФА – рентгенофлуоресцентный анализ

СИЗ – средства индивидуальной защиты

ТБ – техника безопасности

УЕ – учетная единица

УиК – учет и контроль

ЭВМ – электронно-вычислительная машина

ЭМИ – электромагнитное излучение

ЯМ – ядерный материал

ЯТЦ – ядерный топливный цикл

Содержание

Введение.....	14
1 Теоретические основы РФА.....	16
1.1 Образование рентгеновского излучения	18
1.2 Выход флуоресценции	21
1.3 Качественный флуоресцентный анализ	22
1.4 Количественный флуоресцентный анализ	23
1.5 Геометрия измерений.....	24
1.6 Типы источников для РФА	25
2 Аналитический комплекс Спектроскан МАКС-Г	29
2.1 Подготовка образцов	33
2.2 Характеристические линии урана.....	34
3 Разработка методики количественного определения урана в водных растворах	35
3.1 Точность метода РФА	35
3.2 Подготовка водных растворов нитрата уранила	36
3.3 Градуировочные характеристики	37
4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	47
4.1 Планирование научно-исследовательской работы	47
4.2 QuaD-анализ	48
4.3 Бюджет научно-технического исследования.....	50
4.3.1 Материальные затраты НТИ	50
4.3.2 Основная заработная плата исполнителей темы.....	52
5 Социальная ответственность	57
5.1 Анализ опасных и вредных производственных факторов	57
5.2 Обоснование и разработка мероприятий по снижению уровней вредного воздействия и устранения их влияния при работах на ЭВМ.....	59
5.2.1 Требования и организация работ на ЭВМ	59
5.3 Условия безопасной работы	60
5.4 Радиационная безопасность	62
5.5 Электробезопасность.....	65
5.6 Пожарная и взрывная безопасность	67

Заключение	69
Список публикаций студента.....	70
Список использованных источников	71
Приложение А	74
Приложение Б	76

Введение

На сегодняшний день во всем мире прилагаются значительные усилия по обеспечению специального обращения по отношению к ядерным материалам, так как многие из них представляют существенную коммерческую и энергетическую ценности. Помимо этого, существует реальная угроза использования ядерных материалов в военных или террористических целях, и, пожалуй, самое важное – это возможность радиационного заражения. Как известно, специальное обращение направлено на обеспечение сохранности ядерного материала и полного знания о нем и представляет собой совокупность трех главных составляющих – физическая защита, учет и контроль ядерных материалов.

С точки зрения системы учета и контроля ядерных материалов, всегда необходимо располагать полной информацией о качественном и количественном составе того или иного радиоактивного вещества, так как в соответствии с НП-030-12 «Основные правила учета и контроля ядерных материалов» ядерные материалы, находящиеся в любых химических соединениях должны регистрироваться, начиная с установленного минимального количества и подвергаться категорированию в соответствии с приложениями № 4-7. Вопросы качественного и количественного состава того или иного образца эффективно решаются спектрометрическими методами. Одним из таких методов является рентгенофлуоресцентный анализ, который представляет собой быстрый, неразрушающий и безопасный для окружающей среды метод анализа, обладающий высокой точностью и воспроизводимостью результатов.

Целью данной выпускной квалификационной работы является создание методики определения концентрации урана в водных растворах для решения задач УиК ЯМ с помощью аналитического комплекса Спектроскан МАКС-G.

Для достижения поставленной цели было необходимо решить следующие задачи:

- изучить физические принципы рентгенофлуоресцентного анализа;
- изучить принцип работы прибора Спектроскан МАКС-Г, освоить методики измерения качественного и количественного состава на данном приборе;
- провести калибровку и настройку спектрометра, оценить точность метода путем измерения стандартного образца;
- подготовить водные растворы азотнокислого уранила разных концентраций;
- получить градуировочные характеристики;
- апробировать методику на растворах с неизвестными концентрациями урана.

Актуальность работы обусловлена тем, что на разных стадиях ядерного топливного цикла, в частности в сфере рудоразведочных работ по нахождению ураносодержащих месторождений и на рудодобывающих производствах, используются виды анализа, которые требуют большие временные затраты и дополнительные реагенты. Применение разработанной методики позволит упростить основные производственные процессы, а также сделать их более быстрыми и дешевыми по сравнению с используемыми химическими методами. Также данная методика может применяться в целях учета и контроля ядерных материалов для определения малых содержаний урана в растворах или элементного состава образца.

1 Теоретические основы РФА

В практике физико-химического анализа наибольшее значение приобрела фотолюминесценция. Различают два её вида:

- фосфоресценция – свечение продолжается некоторое время после снятия источника возбуждения;
- флуоресценция – свечение прекращается в течение $10^{-9} – 10^{-7}$ с после снятия источника возбуждения.

Главное отличие между этими двумя излучениями в том, что флуоресценция представляет собой разрешенный по спину излучательный переход между двумя состояниями одинаковой мультиплетности: между синглетными уровнями (с самого нижнего синглетного колебательного уровня в основное состояние) или триплетными. Явление фосфоресценции же является запрещенным по спину излучательным переходом между двумя состояниями разной мультиплетности, например, синглет-триплетные переходы. Время жизни при фосфоресценции мало и составляет порядка $10^{-3} – 10^{-2}$ с.

В 1913 английский физик Генри Мозли установил зависимость между частотой спектральных линий характеристического рентгеновского излучения и атомным номером излучающего элемента. Зависимость была названа в честь первооткрывателя законом Мозли (1). Это фундаментальное открытие можно назвать началом эры рентгенофлуоресцентного анализа (РФА). В современной интерпретации закон Мозли может быть сформулирован так: закон, связывающий частоту спектральных линий характеристического рентгеновского излучения атома химического элемента с его порядковым номером:

$$\sqrt{\frac{E}{R}} = \frac{Z - S_n}{n}, \quad (1)$$

где Z – заряд ядра в атоме определенного элемента;

R – постоянная Ридберга ($R=13,6$ эВ);

S_n – постоянная экранирования;

n – главное квантовое число (К-, L-, M- и т. д. серии, соответствующие значениям $n = 1, 2, 3, \dots$).

Таким образом, РФА основан на том, что рентгеновское излучение, испускаемое ионизированным атомом, обладает энергией, которая является характерной особенностью элемента. Интенсивность рентгеновского излучения пропорциональна как концентрации элемента, так и мощности ионизирующего излучения.

РФА является модификацией широкого круга методов эмиссионного рентгеноспектрального анализа (PCA), который основан на возбуждении в анализируемом образце рентгеновского характеристического излучения атомов практически всех химических элементов, входящих в состав пробы, и регистрации сложного спектра пробы с помощью рентгеновского спектрометра.

По способу возбуждения атомов методы эмиссионного PCA подразделяются на три группы [1]:

- PCA с электронным возбуждением – рентгеновские спектры, возникающие под действием электронного удара, испускается первичное излучение – рентгеновская трубка;
- PCA с фотонным возбуждением – это и есть РФА, проводится по вторичному характеристическому излучению – рентгеновская флуоресценция;
- PCA с ионным возбуждением.

Для неразрушающего анализа (НРА) ядерных материалов (ЯМ) наиболее применима фотонная ионизация, которая достигается использованием рентгеновской трубы или радиоизотопного источника. Другие методы являются трудно реализуемыми из-за больших размеров установок и сложной конструкции ИИИ.

Простота и однозначность рентгеновского спектра элементов является большим преимуществом эмиссионного PCA, что делает его идеальным средством идентификации элементов.

Важной особенностью рентгеновского излучения является также высокая проникающая способность высокоэнергетических рентгеновских фотонов,

вследствие чего оно может давать информацию об изучаемой твердой или жидкой пробе значительного объема. При РФА предварительная пробоподготовка вообще может не потребоваться, а проба после анализа остается неизменной и пригодной для использования в дальнейших исследованиях.

РФА представляет собой дополнительную методику к плотнотетрии. В плотнотетрии регистрируются электроны, прошедшие через образец без взаимодействия, в то время как в РФА регистрируется излучение, образованное фотонами, провзаимодействовавшими с материалом образца. Плотнотетрия применяется для измерения образцов с высокими концентрациями определяемого элемента, а РФА наиболее пригоден для измерения образцов с более низкими концентрациями элементов [2].

1.1 Образование рентгеновского излучения

Рентгеновское излучение возникает в результате переходов атомных электронов и является характеристикой элемента. При облучении вещества светом возможен переход электронов между различными энергетическими уровнями [1]. Разница энергии между энергетическими уровнями и частота колебаний поглощенного света соотносятся между собой уравнением:

$$h\nu = E_2 - E_1, \quad (2)$$

где h – постоянная Планка, Дж \cdot с;

E_2 – энергия в возбужденном состоянии, Дж;

E_1 – энергия в основном состоянии, Дж.

После поглощения света часть полученной системой энергии расходуется в результате релаксации. Часть же может быть испущена в виде фотона определённой энергии, что проиллюстрировано на рисунке 1.

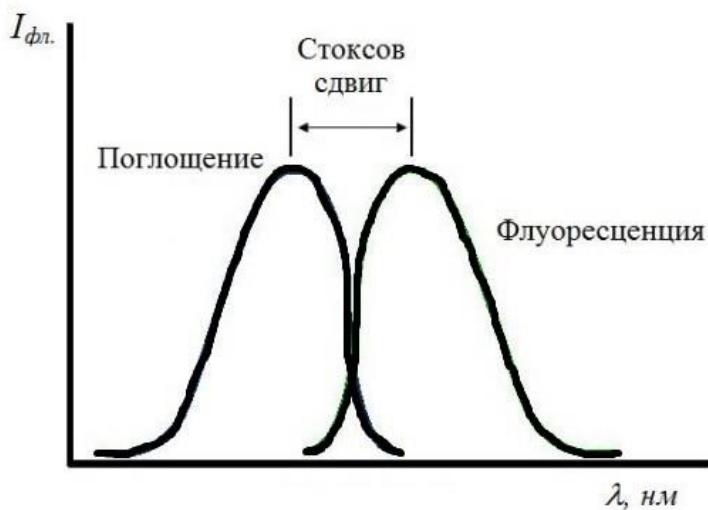


Рисунок 1 – Спектры поглощения и флуоресценции

Сущность рентгенофлуоресцентного анализа достаточно проста и легко поясняется на классической модели атома, что представлено на рисунке 2.

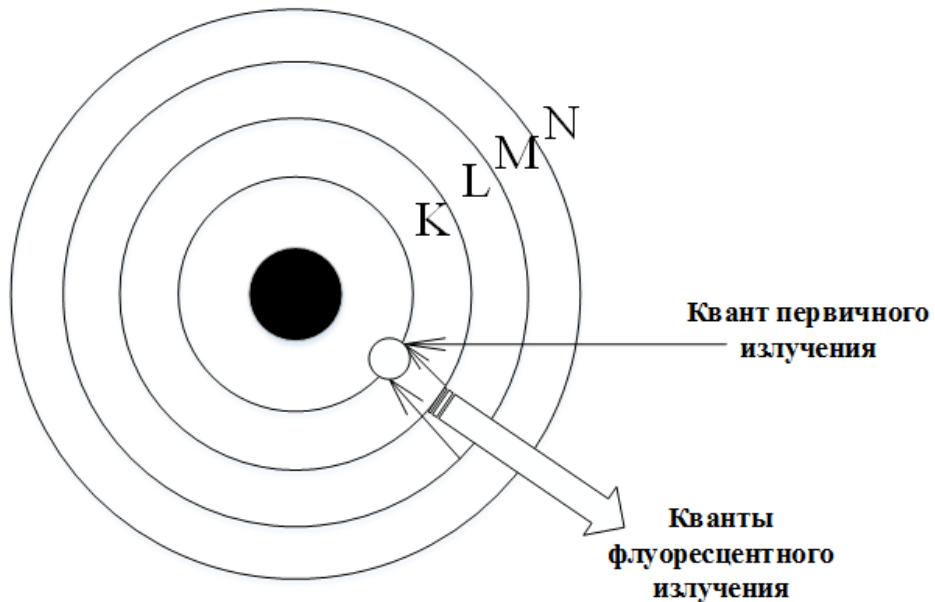


Рисунок 2 – Классическая модель атома и механизм излучения флуоресценции

Согласно классической модели атома вокруг ядра по орбитам (K, L, M, N, O и так далее) врачаются электроны. Метод основывается на том, что атомы образца бомбардируются рентгеновскими квантами, происходит удаление электрона из атома и, соответственно, образуется вакансия — атом оказывается в возбужденном состоянии с энергией, равной энергии связи удаленного электрона. Затем происходит перестройка электронных уровней и электронный

переход с ближайших электронных орбиталей на вакантную с излучением вторичного (флуоресцентного) кванта. Процесс возбуждения рентгеновской флуоресценции носит вероятностный характер, наибольшая вероятность электронного перехода характерна для ближайшей оболочки по отношению к вакантной. Спектры рентгеновского характеристического излучения имеют четкую структуру, зависящую от строения электронных оболочек атомов элементов, что представлено на рисунке 3.

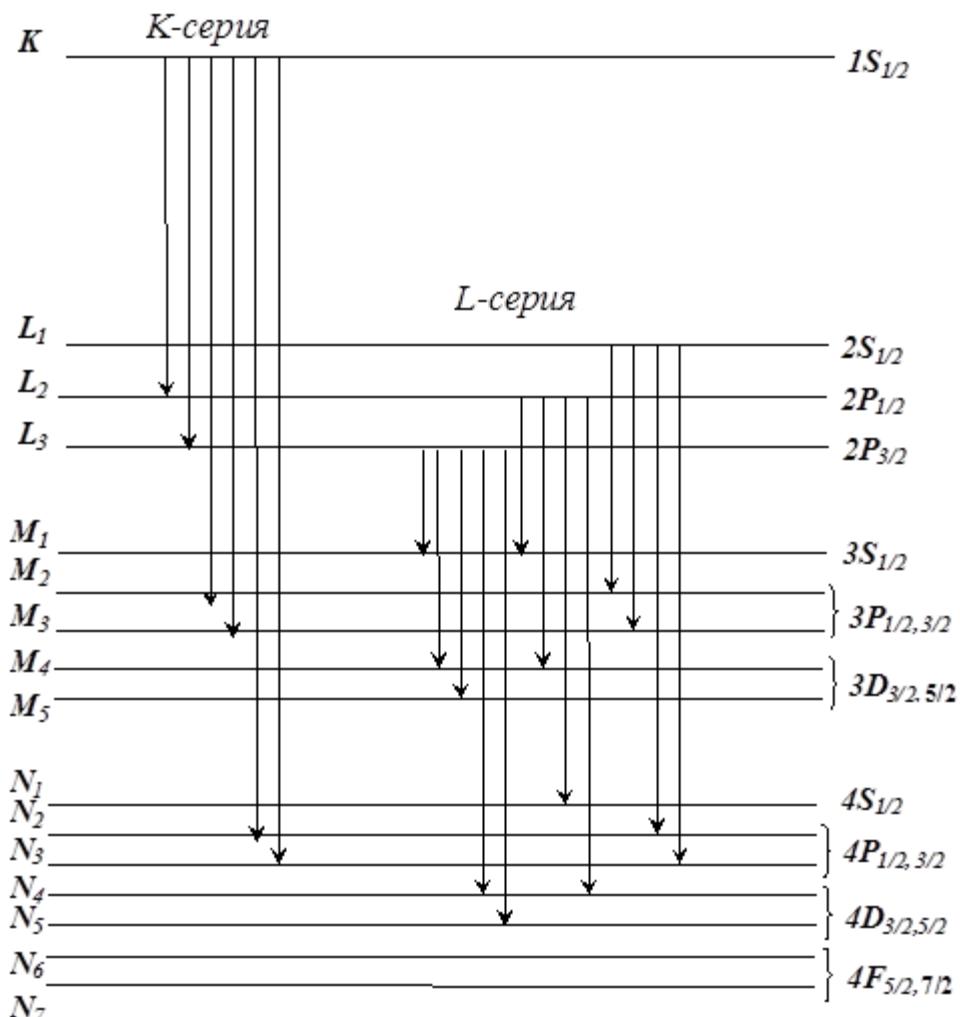


Рисунок 3 – Диаграмма энергетических переходов многоэлектронного атома

Рентгеновское характеристическое излучение, имеющее линейчатый спектр, предоставляет широкие возможности для элементного РФА.

1.2 Выход флуоресценции

Не всякая ионизация приводит к испусканию рентгеновских квантов. Конкурирующим процессом является эффект Ожэ. Этот процесс обусловлен тем, что возбужденный атом вновь обретает энергетическую стабильность путем испускания электрона с внешней оболочки. Отношение числа испущенных рентгеновских квантов к общему числу возбужденных атомов называется выходом флуоресценции ω_i где i обозначает оболочку, с которой испускается квант. Выход флуоресценции увеличивается с ростом атомного номера элемента и составляет более 95 % для рентгеновского излучения К-серии элементов с $Z > 78$, что проиллюстрировано на рисунке 4.

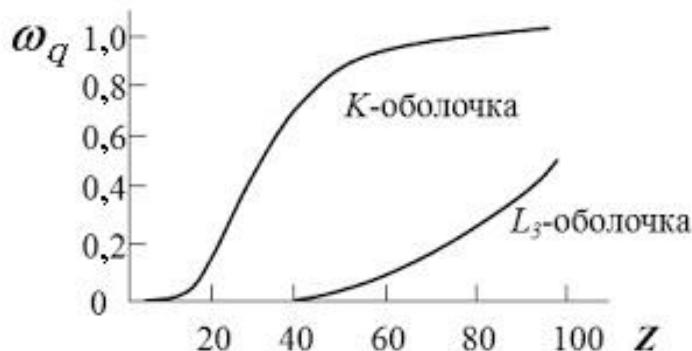


Рисунок 4 – Зависимость выхода флуоресцентного излучения от атомного номера элемента

Выход флуоресценции может быть приближенно описан следующим выражением:

$$\omega_i = \frac{Z^4}{(A_i + Z^4)}, \quad (3)$$

где ω_i – выход флуоресценции;

Z – порядковый номер элемента;

A_i – константа, приблизительно равно 10^6 для К-оболочки и 10^8 для L-оболочки.

Важно отметить, что для РФА существуют трудности, связанные с низким выходом флуоресцентного излучения легких элементов по сравнению со средними и тяжелыми.

1.3 Качественный флуоресцентный анализ

Качественный анализ по спектрам флуоресцентного (вторичного) излучения позволяет обнаружить присутствие определённого вещества в анализируемой пробе. Для отождествления измеренного спектра флуоресценции со спектром какого-либо вещества определяют следующие параметры:

- количество максимумов в спектре флуоресценции;
- положение максимумов полос флуоресценции в спектре;
- полуширины полос флуоресценции – разность между двумя длинами волн, при которых интенсивность флуоресценции составляет половину от максимальной.

Важно отметить, что условия эксперимента, при которых проводятся люминесцентные измерения, значительно влияют на форму спектра флуоресценции. Все вышеуказанные параметры, например, могут изменяться в зависимости от pH среды, ее температуры, полярности растворителя, концентрации исследуемого вещества.

Преимуществом качественного флуоресцентного анализа многокомпонентных смесей является возможность выделения флуоресценции отдельных элементов путём изменения длины волны возбуждения флуоресценции. Незначительные изменения состояния вещества: агрегация, комплексообразование, изменение кислотно-основного равновесия обычно очень сильно сказываются на его люминесцентных свойствах, в связи с этим, измерение спектров люминесценции – один из основных методов изучения состояния вещества в различных системах и соединениях.

Основным недостатком метода является то, что качественный флуоресцентный анализ является элементным, то есть, невозможно определить какой конкретно изотоп того или иного элемента присутствует в образце.

1.4 Количественный флуоресцентный анализ

Между интенсивностью флуоресцентного излучения вещества и его концентрацией существует зависимость, которая в общем случае выглядит следующим образом:

$$I_\phi = K\omega(I_0 - I) = I_0K\omega(1 - T) = I_0K\omega(1 - 10^{-D}), \quad (4)$$

где I_0 и I – интенсивности падающего и выходящего из образца светового пучка;

ω – выход флуоресценции;

K – коэффициент, характеризующий чувствительность прибора для измерения флуоресценции;

T – пропускание образца при длине волны возбуждения флуоресценции;

D – оптическая плотность образца при длине волны возбуждения флуоресценции.

Из уравнения 4 видно, что величина интенсивности флуоресценции меняется в зависимости от оптической плотности образца по экспоненциальному закону, то есть, в общем случае между интенсивностью флуоресценции и концентрацией образца зависимость имеет нелинейный характер, что осложняет использование РФА в целях установления количественного состава образца. Однако при значениях $D \leq 0,01$ выражение 4 может быть преобразовано в линейную зависимость:

$$I_\phi \cong 2,31I_0K\omega D = 2,31I_0\varepsilon Cl, \quad (5)$$

где ε – коэффициент молярной экстинкции флуорофора при длине волны возбуждения флуоресценции;

C – концентрация флуорофора;

l – длина оптического пути возбуждающего света.

Таким образом, в определённых пределах оптических плотностей интенсивность флуоресценции пропорциональна концентрации флуоресцирующего вещества.

1.5 Геометрия измерений

Выбор геометрии имеет огромное значение для всех спектрометрических анализов, РФА не стал исключение и также требует ее подбора. Основной тип взаимодействия, которое имеет место при РФА – фотоэлектрический. Однако необходимо учитывать и другие процессы, в частности, эффект обратного комптоновского рассеяния. Энергия гамма-кванта, рассеянного за счет комптоновского эффекта определяется следующим выражением:

$$E' = \frac{511}{(1 - \cos \varphi + \frac{511}{E})}, \quad (6)$$

где E' , E – энергии рассеянного и падающего фотонов, кэВ;

φ – угол между падающим и рассеянным фотонами.

Энергия рассеянного фотона минимальна при угле равном 180° . Фотоны, рассеянные под таким углом или близким к нему, могут образовать в спектре пик обратного рассеяния. Такая геометрия оптимальна для работы с К-РФА, так как в этом случае пик обратного рассеяния и непрерывный комптоновский спектр рассеянных фотонов находятся ниже области характеристического рентгеновского излучения, что приводит к минимизации фона под фотопиками рентгеновского излучения [2]. Для обеспечения такого типа геометрии используют кольцевой источник, который представлен на рисунке 5.

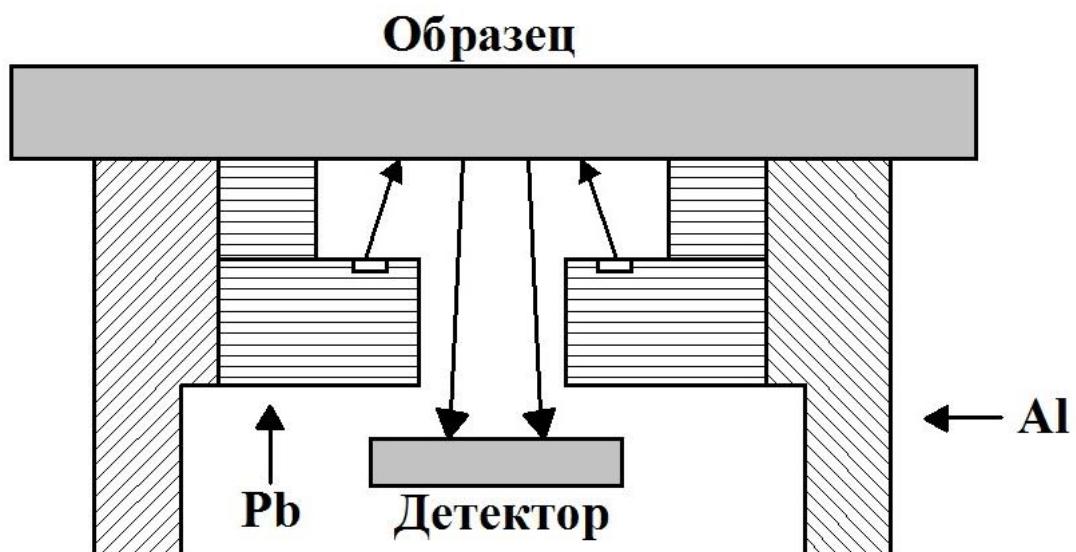


Рисунок 5 – Кольцевой источник возбуждения

Для рентгеновских квантов L-серии геометрия измерений не так критична, так как энергия рассеянного фотона при 180° примерно в 4 – 6 раз ниже чем для К-серии, и пик обратного рассеяния находится выше рассматриваемой области рентгеновского излучения. В целях минимизации пика обратного рассеяния необходимо контролировать рассеивающие материалы вблизи детектора [2].

Уменьшение потерь за счет мертвого времени и наложений импульсов достигается путем экранирования детектора от источника возбуждения и фонового излучения. Для ограничения влияния нежелательных источников используются коллиматоры, а для стабилизации отклика рентгеновского излучения относительные положения, образца и детектора должны быть фиксированы, часто эти компоненты объединяют в единую конструкцию.

1.6 Типы источников для РФА

Чаще всего применяют два типа источников: дискретные источники гамма- или рентгеновского излучения или непрерывные источники – генераторы рентгеновского излучения. Каждый тип источника обладает рядом своих преимуществ и недостатков. Выбирая подходящий источник, необходимо учитывать тип, энергию и мощность.

В качестве дискретного источника гамма-излучения наиболее применим Co^{57} , так как этот элемент испускает гамма-кванты с энергией 122 кэВ, которая является наиболее эффективной для ионизации К-оболочки урана или плутония. Для ионизации L-оболочки урана или плутония хорошо подходит источник из Cd^{109} , который испускает рентгеновские кванты К-линии серебра – 22 кэВ. Дискретные линейные источники небольшие размеры, крайне стабильны и просты в эксплуатации, что делает их привлекательными для множества различных применений РФА. Существует два главных недостатка при использовании этого источников такого типа. Во-первых, все подобные источники распадаются и, следовательно, требуют периодической замены.

Периоды полураспада для Co^{57} и Cd^{109} равны 272 и 453 дня соответственно. Во-вторых, дискретные радиоизотопные источники нельзя отключить, что, в свою очередь, вызывает трудности при их транспортировке и обращении с ними. Обычно используется геометрия кольцевого источника, так как она экранирует детектор от источника возбуждения и минимизирует влияние обратного рассеяния. В таблице 1 приведены основные радиоизотопы, которые могут быть применены для РФА урана и плутония [2].

Таблица 1 – Источники возбуждения, применяемые для анализа урана и плутония

Радиоизотоп	Период полураспада	Способ распада	Используемое излучение	
			Тип	Энергия, кэВ
Co^{57}	270 дней	Электронный захват	Гамма-кванты	122
			Гамма-кванты	136
Cd^{109}	453 дня	Электронный захват	Рентгеновские кванты К-линии Ag	22
Se^{75}	120 дней	Электронный захват	Гамма-кванты	121
			Гамма-кванты	136
Ce^{144}	285 дней	Бета-распад	Рентгеновские кванты К-линии Ag	36
			Гамма-кванты	134
I^{125}	60 дней	Электронный захват	Рентгеновские кванты К-линии Ag	27
			Гамма-кванты	35
$\text{Pm}^{147}\text{-Al}$	2,6 лет	Бета-распад	Непрерывный спектр	12 – 45*

* – конечная точка тормозного спектра.

Рентгеновские генераторы образуют тормозное излучение в процессе термоэлектронной эмиссии с нити накаливания, ускорения и бомбардировки электронами мишени. Из-за необходимости высоковольтного питания и устройств отвода образующегося в мишени тепла, рентгеновские генераторы могут иметь большие габариты, особенно при высоком рабочем напряжении. Однако существуют небольшие портативные генераторы, которые не требуют сложных систем охлаждения.

Спектр рентгеновского генератора охватывает область энергий от значения ускоряющего потенциала генератора до края пропускания окна рентгеновского излучения.

Типичные спектры рентгеновского генератора на разных антикатодах приведены на рисунке 6. В дополнении к непрерывному спектру образуется характеристическое рентгеновское излучение материала мишени. Эти рентгеновские кванты могут вызывать интерференцию, которая может быть устранена с помощью фильтров. Выбранный фильтр должен иметь край поглощения немного ниже энергии, которая должна быть ослаблена.

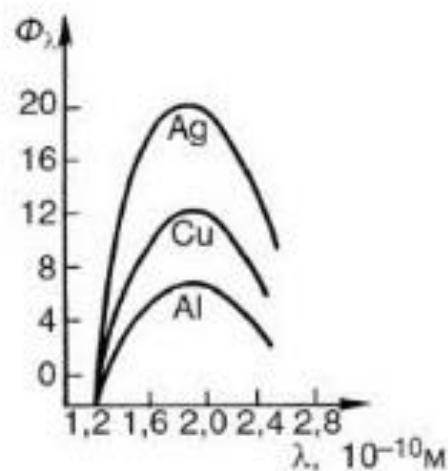


Рисунок 6 – Типичные спектры рентгеновского генератора на разных антикатодах

На рисунке 7 представлен полный спектр рентгеновской трубы – наложение характеристического спектра на спектр тормозного излучения.

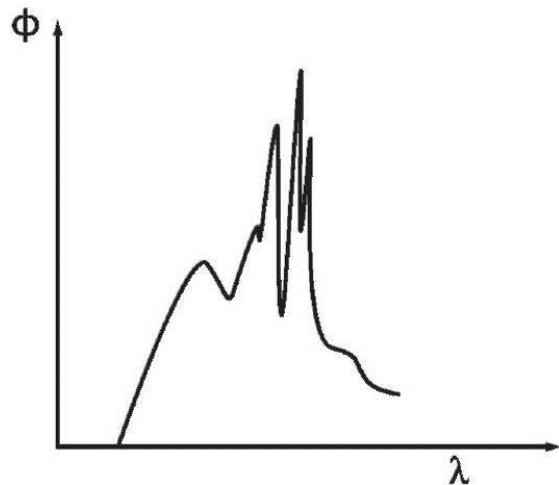


Рисунок 7 – Спектр рентгеновской трубы вместе с характеристическим излучением

Рентгеновские генераторы могут включаться и отключаться по требованию, а их энергетическое распределение и интенсивность – изменяться по желанию. Обычно они представляют более интенсивный источник фотонов, чем радиоизотопные источники. Однако их использование возможно в случае

простоты и компактности. Точность анализа определяется стабильностью рентгеновской трубки, поэтому данному прибору необходимо повышенное внимание с точки зрения электробезопасности. Современные генераторы имеют нестабильность менее 0,1 % в течение небольшого времени работы с ними и от 0,2 % до 0,3 % в течение длительного времени работы [3].

2 Аналитический комплекс Спектроскан МАКС-Г

В работе использовался аналитический комплекс Спектроскан МАКС-Г производства НПО «Спектрон». Спектроскан МАКС-Г является портативным волнодисперсионным рентгенофлуоресцентным кристалл-дифракционным сканирующим спектрометром, предназначенным для определения содержания химических элементов от Ca до U в веществах, находящихся в твердом, порошкообразном, растворенном состояниях, а также нанесенных на поверхности или осажденных на фильтры [4].

Принцип волновой дисперсии (разложение рентгеновского спектра по длинам волн) основан на использовании дифракции излучения на монокристаллах, которая происходит в соответствии с законом Вульфа-Брэгга, описанным в формуле 7:

$$n\lambda = 2d \sin \vartheta, \quad (7)$$

где λ – длина волны излучения, дифракционно отражаемого от плоскости монокристалла, если угол падения излучения на плоскость равен ϑ (угол Брэгга);

d – межплоскостное расстояние для отражающей плоскости, $n = 1, 2, 3$ – порядок отражения (в рентгеноспектральной аппаратуре обычно используется первый порядок, реже второй, все последующие создают мешающие отражения).

Исследуемое изучение направляется под разными углами ϑ на плоскость кристалла с известным межплоскостным расстоянием d и одновременно измеряется интенсивность отраженного под тем же углом излучение, которое раскладывается в спектр по длинам волн, что представлено на рисунке 8.

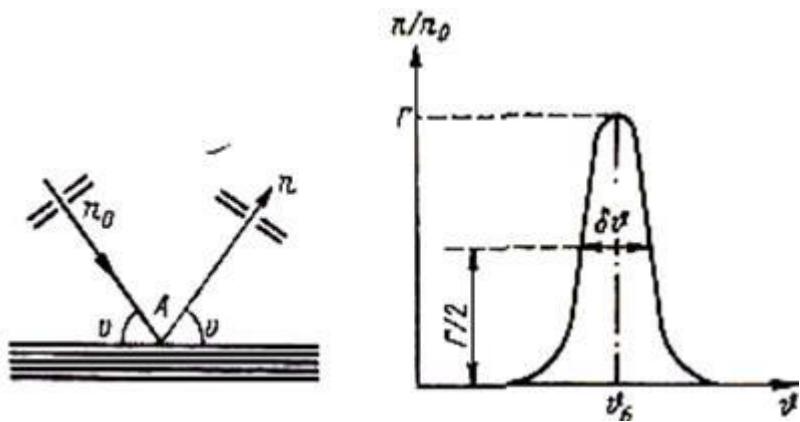


Рисунок 8 – Отражение монохроматического излучения от монокристалла

Если на кристалл направлен коллимированный поток монохроматического излучения с длиной волны λ , которой для данного межплоскостного расстояния соответствует определенное значение угла Брэгга ϑ_B , идеальный кристалл отразит это излучение только при $\vartheta = \vartheta_B$, причем отношение отраженного потока фотонов к падающему называется коэффициентом отражения Γ и будет близко к 1.

Реальные кристаллы отличаются от идеальных тем, что состоят из отдельных блоков – кристаллитов, ориентировка которых имеет небольшой угловой разброс относительно общего положения отражающей плоскости. Среднее угловое отклонение называется мозаичностью кристалла $\delta\vartheta$ и составляет $10^{-4} – 10^{-2}$ рад. Из-за мозаичности кривая зависимости интенсивности от дифракционного отражения монохроматической линии от угла ϑ на половине максимума имеет ширину $\delta\vartheta$, а коэффициент отражения Γ в дифракционном максимуме обычно составляет $0,1 – 0,4$.

Мозаичность кристалла $\delta\vartheta$ и коэффициент отражения Γ определяют энергетическое разрешение и светосилу кристалл-дифракционного спектрометра, причем светосила кристалла пропорциональна произведению $\delta\vartheta$ и Γ [1]. Основные характеристики самых распространённых кристаллов-анализаторов представлены в таблице 2.

Таблица 2 – Характеристики кристаллов-анализаторов

Кристалл	Отражающая плоскость	2d, нм	Γ	$\delta\theta$, 10^{-4} рад	$\Gamma^*\delta\theta$, 10^{-5} рад	Определяемые Элементы (серия)
LiF	220	0,2848	0,10	20	20	V – Ba (K) Ce – U (L)
	200	0,4028	0,20	20	40	K – Cd (K) I – U (L)
SiO ₂	1011	0,6687	0,50	3	15	Cl – Mo (K) Pd – U (L)
Ge	111	0,6532	0,70	3	20	P – Mo (K) Zr – U (L)
C	002	0,6710	0,40	120	440	P – Mo (K) Zr – U (L)
PET	002	0,8733	0,40	2	8	Al – Sc (K)
EDDT	020	0,8803	0,27	6	18	Al – Si (K)
RAP	001	2,6121	0,20	3	6	O – Al (K)
KAP	001	2,6632	0,13	1,5	2	O – Al (K)

В спектрометре Спектроскан МАКС-G установлено два кристалла-анализатора: LiF(220) и пиролитический графит C002. Рентгенооптическая схема данного спектрометра представлена на рисунке 9.

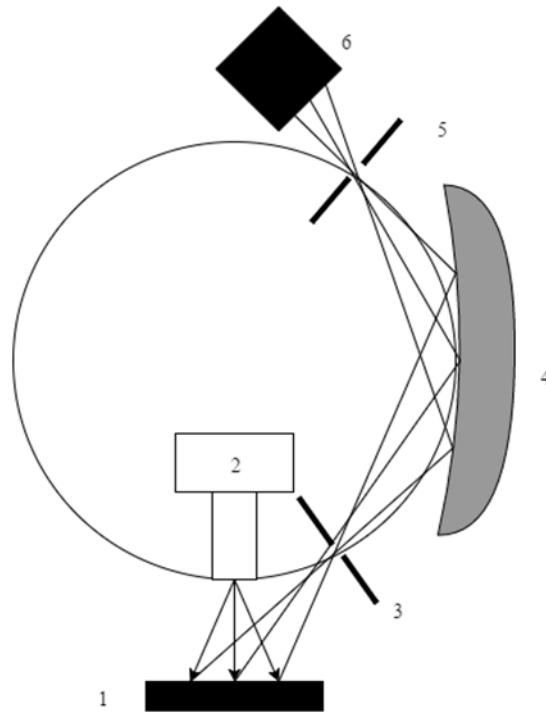


Рисунок 9 – Рентгенооптическая схема спектрометра Спектроскан МАКС-G

Первичное излучение рентгеновской трубы 2 возбуждает в исследуемом образце 1 флуоресцентное излучение, которое через входную щель 3 попадает

на фокусирующий кристалл-анализатор 4, выделяющий из спектра образца характеристическую линию, соответствующую условиям отражения по закону Вульфа-Брэгга. Выделенное излучение кристалл-анализатор 4 фокусирует в приемную щель 5 блока детектирования 6, сигнал с которого поступает на вход усилителя-дискриминатора, затем на вход счетного устройства. Число импульсов, зарегистрированное за установленное время экспозиции пропорционально содержанию соответствующего химического элемента в образце, и в зависимости от конкретной аналитической задачи, может быть пересчитано по различным методикам в процент или массовую долю элемента в образце.

Спектрометр Спектроскан МАКС-G поддерживает три основных способа проведения измерений, как для качественного, так и для количественного анализов. Первый и наиболее часто используемый режим носит название «быстрый проезд», второй – полный анализ, а третий является пользовательским.

Режим «быстрого проезда» является экспрессным методом, время проведения одного измерения в зависимости от настроек в среднем составляет от 2 до 8 минут.

Полный анализ применяется гораздо реже, как правило, для получения наиболее точных результатов в более сложных условиях. Например, когда проба имеет очень большое количество различных элементов, примесей и их количественное содержание крайне мало. Среднее и наиболее оптимальное время проведения полного анализа составляет от 60 до 75 минут.

Пользовательский режим по применимости находится на уровне с «быстрым проездом», так как позволяет оператору самому выбрать необходимый шаг и экспозицию, а значит и время измерений, так как эти три параметра имеют прямую связь.

2.1 Подготовка образцов

Для установки проб в спектрометр используются следующие принадлежности:

- обойма с крышкой;
- кювета жидкостная с прижимным кольцом;
- кювета порошковая;
- кювета фильтровальная с оправой;
- переходники;
- пленка лавсановая (пленка полиэтилентерефталатная марки ПЭТ-КЭ толщиной 6 мкм, ГОСТ 24234-80).

Все пробы устанавливаются в обойму, снизу прижимаются поролоном до полного прилегания поверхности пробы к обойме или переходнику и закрываются крышкой. В приложении А представлен чертеж пробозагрузочных средств, в частности, изображена обойма, прижимное кольцо и крышка обоймы.

Поверхность образца должна плотно прилегать к внутренней части кюветы и не иметь возможности деформироваться в процессе измерений. Это может привести к повреждению входного окна. Выступание образца за пределы кюветы недопустимо.

Все образцы должны устанавливаться в спектрометр только в специальных обоймах и кюветах, входящих в комплект прибора. Запрещается использовать обоймы и кюветы, не соответствующие штатным по типу и габаритным размерам, а также помещать в пробозагрузочное устройство образцы без кювет и обойм.

Процесс установки обоймы с образцом в спектрометр складывается из нескольких этапов:

- выдвинуть пробозагрузочное устройство;
- установить обойму с образцом в пробозагрузочное устройство так, чтобы паз на обойме совпал с зубчиком на пробозагрузочном устройстве;

- задвинуть пробозагрузочное устройство до упора.

Для извлечения обоймы с образцом пробозагрузочное устройство необходимо выдвинуть. Пробы могут быть твердые, порошковые, жидкие и фильтры.

2.2 Характеристические линии урана

Флуоресценция урана характеризуется, главным образом, L-серий первого порядка отражения. Стандартная библиотека длин волн вторичного излучения, которая входит в программное обеспечение к спектрометру, содержит достаточно большое количество характеристических линий урана. Этот элемент обнаруживается на всех используемых кристаллах, в частности, на кристалле-анализаторе LiF(200) в двух порядках отражения и во втором порядке отражения на пиролитическом графите (C002). Все характеристические линии урана представлены в таблице 3.

Таблица 3 – Характеристические линии урана

Кристалл	Порядок отражения	Длина волны, мА	Энергия, кэВ
LiF(200)	1	910	13,64
		1067	11,63
	2	614	20,21
		720	17,23
		754	16,46
		910	13,63
		1067	11,63
	C002	754	16,46
		910	13,63
		1067	11,63

Важно отметить, что, в общем случае, самым мощным, а значит и самым достоверным является первый порядок отражения на любом кристалле. Однако в некоторых аналитических ситуациях существует необходимость проведения измерений во втором порядке отражения. Использование высших порядков отражения, как правило, является нецелесообразным.

4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

4.1 Планирование научно-исследовательской работы

Планирование научно-исследовательских работ складывается из нескольких основных этапов:

- определение структуры работ в рамках научного исследования;
- определение участников каждого вида работ;
- установление временных рамок;
- построение графика проведения научных исследований.

Все научные исследования проводились автором данной выпускной квалификационной работы под контролем научного руководителя. В таблице 9 представлен календарный план проведения исследований, который включает в себя все основные этапы исследовательской работы, содержание работ по каждому этапу и их продолжительность.

Таблица 9 – Календарный план выполнения исследований

№ этапа	Наименование работ по основным этапам НИОКР	Содержание работ	Сроки выполнения работ (мес.)
1	Выбор направления исследования	Подбор и изучение материалов по теме	1
		Проведение патентных исследований	
		Выбор направления исследования	
		Календарное планирование работ по теме	
2	Теоретические и экспериментальные исследования	Обоснование применения рентгенофлуоресцентного анализа для ядерных материалов	5
		Разработка методики по определению малых количеств урана в водных растворах	

Продолжение таблицы 9

№ этапа	Наименование работ по основным этапам НИОКР	Содержание работ	Сроки выполнения работ (мес.)
3	Обобщение и оценка результатов	Апробация созданной методики и оценка ее эффективности	2
		Анализ возможных недостатков и их устранение	1

4.2 QuaD-анализ

Важным этапом при создании нового продукта является оценка коммерческого потенциала и перспективности разработки. В рамках решения данной задачи была выбрана технология QuaD, которая представляет собой гибкий инструмент измерения характеристик, описывающих качество новой разработки и ее перспективность на рынке и позволяющих принимать решение целесообразности вложения денежных средств в научно-исследовательский проект.

В основе технологии QuaD лежит нахождение средневзвешенной величины среди показателей коммерческого потенциала разработки и оценки качества разработки.

Показатели оценки качества и перспективности новой разработки подбираются исходя из выбранного объекта исследования с учетом его технических и экономических особенностей разработки, создания и коммерциализации.

В соответствии с технологией QuaD каждый показатель оценивается экспертным путем по стобалльной шкале, где 1 – наиболее слабая позиция, а 100 – наиболее сильная.

Оценка качества и перспективности по технологии QuaD определяется по формуле 11:

$$\Pi_{cp} = \sum B_i * B_i, \quad (11)$$

где $\bar{P}_{ср}$ – средневзвешенное значение показателя качества и перспективности научной разработки;

B_i – вес показателя;

B_i – средневзвешенное значение i -го показателя.

Целесообразно проводить данный анализ с помощью оценочной карты, которая представлена в таблице 10.

Таблица 10 – Оценочная карта для сравнения конкурентных разработок по технологии QuaD

Критерии оценки	Вес	Баллы	Макс балл	Относительное значение	Средневзвешенное значение
Показатели оценки качества разработки					
Энергоэффективность	0,10	80	100	0,80	8,00
Помехоустойчивость	0,06	95	100	0,95	5,70
Надежность	0,30	80	100	0,80	24,00
Унифицированность	0,03	80	100	0,80	2,40
Уровень материалаомкости разработки	0,08	60	100	0,60	4,80
Уровень шума	0,01	85	100	0,85	0,85
Безопасность	0,08	90	100	0,90	7,20
Потребность в ресурсах памяти	0,01	65	100	0,65	0,65
Функциональная мощность	0,03	70	100	0,70	2,10
Простота эксплуатации	0,08	95	100	0,95	7,60
Показатели оценки коммерческого потенциала разработки					
Способность к конкуренции	0,11	80	100	0,80	8,80
Уровень проникновения на рынок	0,02	65	100	0,65	1,30
Перспективность рынка	0,04	70	100	0,70	2,80
Цена	0,03	80	100	0,80	2,40
Послепродажное обслуживание	0,02	95	100	0,95	1,90
Итого	1	1170	1500	11,95	80,50

Так как вычисленное средневзвешенное значение показателя качества лежит в диапазоне от 80 до 100, то данная разработка считается перспективной в соответствии с технологией QuaD.

4.3 Бюджет научно-технического исследования

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

- материальные затраты НТИ;
- затраты на специальное оборудование для научных работ;
- основная заработка плата исполнителей темы;
- дополнительная заработка плата исполнителей темы;
- отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления);
- затраты научные и производственные командировки;
- контрагентные расходы;
- накладные расходы.

4.3.1 Материальные затраты НТИ

Данная статья включает стоимость всех материалов, используемых при разработке проекта:

- приобретаемые со стороны сырье и материалы, необходимые для создания научно-технической продукции;
- покупные материалы, используемые в процессе создания научно-технической продукции для обеспечения нормального технологического процесса и для упаковки продукции или расходуемых на другие производственные и хозяйственныe, а также запасные части для ремонта оборудования, износа инструментов, приспособлений, инвентаря, приборов, лабораторного оборудования и других средств труда, не относимых к основным средствам, износ спецодежды и других малоценных и быстроизнашивающихся предметов;

- покупные комплектующие изделия и полуфабрикаты, подвергающиеся в дальнейшем монтажу или дополнительной обработке;
- сырье и материалы, покупные комплектующие изделия и полуфабрикаты, используемые в качестве объектов исследований и для эксплуатации, технического обслуживания и ремонта изделий – объектов исследований.

В материальные затраты, помимо вышеуказанных, включаются дополнительно затраты на канцелярские принадлежности, диски, картриджи и прочее.

Расчет материальных затрат был осуществлен по следующей формуле:

$$Z_m = (1 + K_T) * \sum_{i=0}^m \Pi_i * N_{\text{расхи}}, \quad (12)$$

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, m^2 и т.д.);

Π_i – цена приобретения единицы i -го вида потребляемых материальных ресурсов (руб./шт., руб./кг, руб./м, руб./ m^2 и т.д.);

K_T – коэффициент, учитывающий транспортно-заготовительные расходы.

Значения цен на материальные ресурсы были установлены по данным, размещенным на соответствующих сайтах в Интернете организациями-поставщиками. Величина коэффициента K_T , отражающего соотношение затрат по доставке материальных ресурсов и цен на их приобретение, зависит от условий договоров поставки, видов материальных ресурсов, территориальной удаленности поставщиков и т.д. Транспортные расходы принимаются в пределах 15-25% от стоимости материалов. Материальные затраты, необходимые для данной разработки представлены в таблице 11.

Таблица 11 – Материальные затраты НТИ

№	Наименование	Количество	Цена за ед., руб.	Итого, руб.
1	Бумага А4	5	250	1 250
2	Краска для принтера	1	1 300	1 300
3	Ножницы	1	200	200

Продолжение таблицы 11

№	Наименование	Количество	Цена за ед., руб.	Итого, руб.
4	Глицерин чистый	1	500	500
5	Глицерин	6	18	108
6	Перчатки резиновые	6	70	420
7	Респиратор	25	55	1 375
8	Бахилы	50	5	250
9	Утилизация ветоши	1	2 000	2 000
10	Поролон	1	150	150
11	Ткань	1	300	300
12	Халат	2	1 500	3 000
13	Одноразовая шапочка	50	3	150
14	Электроэнергия	3 600	3,5	12 600
15	Вода холодная	29	34	986
Итого, руб.				24 589

4.3.2 Основная заработная плата исполнителей темы

Трудовые затраты в большинстве случаях образуют основную часть стоимости разработки, поэтому важным моментом является определение трудоемкости работ каждого из участников научного исследования.

Трудоемкость выполнения научного исследования оценивается эксперты путем в человеко-днях и носит вероятностный характер, т.к. зависит от множества трудно учитываемых факторов. Ожидаемая трудоемкость выполнения работы $t_{ож}$ была рассчитана по следующей формуле 13:

$$t_{ож} = \frac{3 \cdot t_{min} + 2 \cdot t_{max}}{5}, \quad (13)$$

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

t_{min} – минимально возможная трудоемкость, чел.-дн.;

t_{max} – максимально возможная трудоемкость выполнения работы, чел.-дн.

Исходя из полученных значений ожидаемой трудоемкости работы, была определена продолжительность каждой работы в рабочих днях. Такое вычисление необходимо для обоснованного расчета заработной платы, так как удельный вес зарплаты в общей сметной стоимости научных исследований составляет около 65 %.

$$T_p = \frac{t_{ож}}{\chi}, \quad (14)$$

где T_p – продолжительность работы, раб. дн.;

χ – численность исполнителей, выполняющих ту же работу на данном этапе, чел.

Также был выполнен перевод длительности каждого из этапов работ из рабочих дней в календарные дни по формуле:

$$T_{ki} = T_{pi} * k_{кал}, \quad (15)$$

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

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

$k_{кал}$ – коэффициент календарности.

Коэффициент календарности был определен по формуле 16 и получился равным 1,48:

$$k_{кал} = \frac{T_{кал}}{T_{кал} - T_{вых} - T_{пр}}, \quad (16)$$

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

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

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

В таблице 12 представлены результаты расчетов трудоемкости работ, а в таблице 13 приведен календарный план-график.

Таблица 12 – Временные показатели внедрения разработки

Название работы	Трудоемкость работ			Исполнители	Длительность работ в рабочих днях T_p , дни	Длительность работ в календарных днях T_k , дни
	t_{min} , чел-дни	t_{max} , чел-дни	$t_{ож}$, чел-дни			
Выбор направления исследования	25	40	31	Научный руководитель	16	24
				Студент		
Теоретические и экспериментальные исследования	140	160	148	Научный руководитель	74	110
				Студент		
Обобщение и оценка результатов	90	100	94	Научный руководитель	47	70
				Студент		
Итого, дней					137	204

Таблица 13 – Календарный план-график проведения НИР

Этапы	Под этапы	Содержание работ	T _к , кал. дн.	Продолжительность выполнения работ																										
				Сент.			Октб.			Нояб.			Дек.			Янв.			Фев.			Март			Апр.			Май		
				1	2	3	1	2	1	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3			
1	1	Подбор и изучение материалов по теме	8																											
	2	Выбор направления исследования	6																											
	3	Календарное планирование работ по теме	10																											
2	4	Обоснование применение РФА спектрометра в области нераспространения	3																											
	5	Разработка методики по определению малых количеств урана в водных растворах	107																											
3	6	Апробация созданной методики и оценка ее эффективности	50																											
	7	Анализ возможных недостатков и их устранение	20																											

где – студент, – научный руководитель.

Исходя из рассчитанных показателей трудоемкости был проведен расчет основной заработной платы лиц, непосредственно участвующих в выполнении работ по данной теме. В состав основной заработной платы включается премия, выплачиваемая ежемесячно из фонда заработной платы в размере 20 – 30 % от тарифа или оклада.

Расчет основной заработной платы был выполнен по формуле 17 и сводится в таблице 14:

$$Z_{\text{осн}} = Z_{\text{дн}} * T_p, \quad (17)$$

где $Z_{\text{осн}}$ – основная заработка плата одного работника, руб.;

$Z_{\text{дн}}$ – среднедневная заработка плата работника, руб.;

T_p – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб. дн.

Таблица 14 – Расчет основной заработной платы

№	Исполнитель	Трудоемкость, чел.-дн.	ЗП, приходящаяся на один чел.-дн., руб.	Оклад ЗП, руб.	Число человек на должности	Затраты на ЗП, руб.
1	Научный руководитель	273	467	14 000	1	127 491
2	Студент	273	267	8 000	1	72 891
Итого						200 382

Сумма отчислений во внебюджетные фонды, исходя из указанных заработных плат, составляет в среднем 5 946 рублей в месяц. За все время проведения исследований отчисления составят 54 109 рублей. Полный расчет бюджета НТИ представлен в таблице 15.

Таблица 15 – Расчет бюджета затрат НТИ

Наименование статьи	Сумма, руб.
Материальные затраты	24 589
Затраты по основной заработной плате исполнителей	200 382
Отчисления во внебюджетные фонды	54 109
Бюджет затрат НТИ	279 080

В результате выполнения работы была доказана перспективность выполняемой разработки и определен бюджет НТИ за все время исследований, который составил 279 080 рублей.

Список публикаций студента

- 1 Дубровка С.П. Изучение возможности применения рентгенофлуоресцентного анализа для определения малых количеств радиоактивных элементов в пробах / С.П. Дубровка // Сборник тезисов докладов VI Школы-конференции молодых атомщиков Сибири / СТИ НИЯУ МИФИ, Томск. – Томск, 2015. – С. 147.
- 2 Дубровка С.П. Применение рентгенофлуоресцентного анализа для определения малых количеств урана в водных растворах / С.П. Дубровка // Сборник материалов XI (XLIII) Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Образование, наука, инновации: вклад молодых исследователей» / Кемеровский государственный университет, Кемерово. – Кемерово, 2016. – Вып. 17. – С. 1878.
- 3 Дубровка С.П., Чурсин С.С. Методика определения концентрации урана в водных растворах / С.П. Дубровка, С.С. Чурсин // VIII Международная научно-практическая конференция «Физико-технические проблемы в науке, промышленности и медицине» / НИ ТПУ, Томск. – Томск, 2016. – С. 262.