

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

Инженерная школа новых производственных технологий
 Направление подготовки 12.04.02 «Оптотехника»
 Отделение школы (НОЦ) материаловедения

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
Взаимодействие между светом и веществом в двумерных материалах

УДК 535.3:620.22-419.7

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4BM72	Ма Бин		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Шеремет Евгения Сергеевна	PhD		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент ОСГН	Жаворонок Анастасия Валерьевна	-		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель	Романова Светлана Владимировна	-		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОМ	Полисадова Елена Федоровна	д.ф.-м.н.		

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ООП

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)
<i>Профессиональные компетенции</i>	
P1	Способность формулировать цели, задачи научного исследования или разработки в области светотехники и фотонных технологий и материалов, способность выделять и обосновывать критерии, на основании которых формируются модели принятия решений, составлять план работ, способность строить физические и математические модели объектов исследования и выбирать алгоритм решения задачи
P2	Способность разрабатывать программы экспериментальных исследований, применять современные методы исследования, оценивать и представлять результаты выполненной работы, защищать приоритет и новизну полученных результатов исследований в области обработки, изучения и анализа фотонных материалов, корпускулярно-фотонных технологий, оптоволоконной техники и технологии, в области оптических и световых измерений, люминесцентной и абсорбционной спектроскопии, лазерной техники, лазерных технологий и оборудования, взаимодействия излучения с веществом, производства и применения светодиодов
P3	Способность к профессиональной оценке проблем проектирования в области светотехники, оплотехники, фотонных технологий и материалов на основе подбора и изучения литературных и патентных источников. Способностью к разработке структурных и функциональных схем оптических, оптико-электронных, светотехнических приборов, лазерных систем и комплексов с определением их физических принципов работы, структуры и технических требований на отдельные блоки и элементы
P4	Способность к конструированию и проектированию отдельных узлов и блоков для осветительной, облучательной, оптико-электронной, лазерных техники, оптоволоконных, оптических, оптико-электронных, лазерных систем и комплексов различного назначения, осветительных и облучательных установок для жилых помещений, сельского хозяйства, промышленности
P5	Способность к разработке и внедрению технологических процессов и режимов сборки оптических и светотехнических изделий, к разработке методов контроля качества изготовления деталей и

	узлов, составлению программ испытаний современных светотехнических и оптических приборов и устройств, фотонных материалов.
P6	Способность эксплуатировать и обслуживать современные светотехнические и оптические приборы и устройства, соблюдать правила охраны здоровья и безопасности труда на производстве, выполнять требования по защите окружающей среды
<i>Универсальные компетенции</i>	
P7	Способность проявлять творческий, нестандартный подход, требующий абстрактного мышления, при решении конкретных научных, технологических и проектно-конструкторских задач в области фотонных технологий и материалов и светотехники, нести ответственность за принятые решения
P8	Способность к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала
P9	Способность к инновационной инженерной деятельности, менеджменту в области организации освоения новых видов перспективной и конкурентоспособной оптической, оптико-электронной и световой, лазерной техники с учетом социально-экономических последствий технических решений
P10	Способностью к координации и организации работы научно-производственного коллектива, принятию исполнительских решений для комплексного решения исследовательских, проектных, производственно-технологических, инновационных задач в области светотехники и фотонных технологий и материалов
P11	Способность к оценке современного состояния развития науки и техники, владение иностранным языком на уровне, позволяющем работать в интернациональной среде с пониманием культурных, языковых и социально – экономических различий, разрабатывать документацию, презентовать и защищать результаты инновационной инженерной деятельности
P12	Способность к сбору сведений, анализу и систематизации знаний об исследуемом объекте

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

Инженерная школа новых производственных технологий
 Направление подготовки 12.04.02 «Оптотехника»
 Отделение школы (НОЦ) материаловедения

УТВЕРЖДАЮ:
 Руководитель ООП
 Полисадова Е.Ф.

 (Подпись) (Дата)

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Магистерской диссертации

Студенту:

Группа	ФИО
4BM72	Ма Бин

Тема работы:

Взаимодействие между светом и веществом в двумерных материалах	
Утверждена приказом директора ИШНПТ	

Срок сдачи студентом выполненной работы:

--	--

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p>Исходные данные к работе</p>	<ul style="list-style-type: none"> ● Наименование объекта исследования: Разработать альтернативный способ анализа оксида графена, восстановленного лазерным облучением, с помощью оптической рамановской спектроскопии. Это позволяет соотнести спектральные характеристики комбинационного рассеяния со степенью восстановления ● Образец исследования: Оксида графена ● Измерение: Использование спектроскопии комбинационного рассеяния для измерения пиков в диапазоне от 600 до 3200 см⁻¹, с использованием токовая атомно-силовая микроскопия для анализа проводимости восстановленного оксида графена, затем сопоставление данных оптического и электрического методов
--	---

Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов	<ul style="list-style-type: none"> ● Литературный обзор: Обзор состояния исследований оксида графена в настоящее время, чтобы узнать достижения в этой области и узнать, чего не хватает ● Эксперимент: Нанесение оксида графена на покрытую золотом подложку, использование лазера с различной мощностью для восстановления оксида графена, использование спектроскопии комбинационного рассеяния для получения оптических спектров, использование атомно-силовой микроскопии с измерением тока для проверки его топографии и проводимости ● Анализ полученных данных и обсуждение результатов
Перечень графического материала	Иллюстрации должны содержать фотоматериалы, схемы и графический материал, отражающие результаты работы.
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы (с указанием разделов)	
Раздел	Консультант
4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсоемкость	Жаворонок Анастасия Валерьевна
5. Социальная ответственность	Романова Светлана Владимировна
Приложение А (английская часть)	Рыбушкина Светлана Владимировна
Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:	
Разделы на русском языке	Литературный обзор, экспериментальная часть, результаты и их обсуждение, финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение, социальная ответственность
Разделы на иностранном языке	Literature review, experiments, and results and discussion

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

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Шеремет Евгения Сергеевна	PhD		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4BM72	Ма Бин		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 130 с., 21 рис., 29 табл., 76 источников, 1 приложение.

Ключевые слова: Спектроскопия комбинационного рассеяния, восстановленный оксид графена, гибкие схемы, двумерные материалы, атомно-силовая микроскопия тока растекания, лазерная обработка, степень восстановления восстановленного оксида графена.

Объектом исследования являются спектры комбинационного рассеяния (КР) двумерного материала оксида графена в разной степени восстановления и их корреляция с проводимостью оксида графена (ОГ).

Цель работы: Разработать альтернативный способ анализа ОГ, восстановленного лазерным облучением, с помощью КР который позволил бы соотнести спектральные характеристики КР со степенью восстановления.

В процессе работы мы измерили спектры КР оксида графена с различной степенью восстановления, проверили электропроводность восстановленного оксида графена (ВОГ) и обнаружили корреляцию между спектрами КР и электропроводностью ВОГ.

В результате исследования разработан новый и альтернативный метод анализа восстановленного лазером ОГ с помощью КР, который позволяет связать степень восстановления и электропроводность. Используя простое измерение методом оптической спектроскопии, мы теперь можем оценить электропроводность восстановленного оксида графена без необходимости создания электрических контактов и с микроскопическим пространственным разрешением.

Область применения: Эти результаты важны для сообщества, работающего над графен-оксидными материалами, позволяющими проводить проводящие и структурные исследования микроустройств на основе ВОГ с высоким пространственным разрешением (~мкм).

Результаты данной работы были опубликованы в статье *Ma, B.; Rodriguez, R. D.; Ruban, A.; Pavlov, S.; Sheremet, E. The Correlation between*

Electrical Conductivity and Second-Order Raman Modes of Laser-Reduced Graphene Oxide. Phys. Chem. Chem. Phys. 2019.[1]

Определения, обозначения, сокращения, нормативные ссылки

ОГ – оксид графена

ВОГ – восстановленный оксид графена

КР – комбинационное рассеяние

АСМ – атомно-силовая микроскопия

ВАХ – вольт-амперная характеристика

РФЭС – рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия

Оглавление

Введение.....	12
1. Обзор литературы.....	13
1.1 Оксид графена	13
1.2 Методы восстановления оксида графена	15
1.3 Спектроскопия КР и анализ спектров ОГ	17
1.3.1 Спектроскопия КР.....	17
1.3.2 Спектроскопия КР в анализе оксида графена	19
2. Материалы и методы.....	24
2.1 Материалы	24
2.2 Подготовка образцов	25
2.3 Спектроскопия КР.....	26
2.4 Атомно-силовая микроскопия (АСМ)	27
3. Результаты и обсуждение	28
3.1 Оптическая микроскопия	28
3.2 Анализ АСМ	28
3.3 Спектры КР	35
3.4 Обсуждение результатов КР и электрических характеристик.....	42
4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение..	48
4.1 Предпроектный анализ	48
4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования.....	48
4.1.2 Анализ конкурентных решений.....	48
4.1.3 SWOT-анализ.....	50

4.2 Инициация проекта	52
4.2.1 Цели и результаты проекта	53
4.2.2 Ограничения и допущения проекта	54
4.3 Планирование управления научно-техническим проектом	54
4.3.1 План проекта	54
4.3.2 Бюджет научного исследования	56
4.3.3. Организационная структура проекта	62
4.3.4. План управления коммуникациями проекта	63
4.3.5. Реестр рисков проекта	64
4.4. Определение ресурсной, финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	65
4.4.1. Оценка абсолютной эффективности исследования	65
4.4.2. Оценка сравнительной эффективности исследования	70
5. Социальная ответственность	76
Введение	76
5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	76
5.2 Производственная безопасность	78
5.3 Анализ опасных и вредных производственных факторов и обоснование мероприятий по снижению уровней воздействия опасных и вредных факторов на исследователя (работающего)	80
5.3.1 Повышенный уровень шума	80
5.3.2 Лазерное излучение	81

5.3.3 Химические реагенты.....	82
5.3.4 Отклонение показателей микроклимата.....	83
5.3.5 Недостаточное освещение.....	85
5.3.6 Электробезопасность.....	86
5.4 Экологическая безопасность.....	88
5.5 Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....	89
Заключение.....	91
Список публикаций.....	93
Список использованных источников.....	94
Приложение А.....	102

Введение

Оксид графена (ОГ) является производным от графена, он является изолятором. Однако, мы можем использовать ряд методов, такие как химический метод, метод термического восстановления, метод лазерного облучения и т. д., чтобы восстановить ОГ и сделать его проводящим. На основе восстановленного оксида графена (ВОГ) были разработаны различные датчики и электроды поскольку технология отличается простотой и низкой стоимостью. С другой стороны, мы также можем контролировать проводимость материала и химические свойства поверхности изменяя степень восстановления. Это достигается подбором концентрации химического реагента, атмосферы восстановления, температуры и мощности лазера. Спектроскопия комбинационного рассеяния (КР) - это быстрый, удобный и простой в использовании инструмент для анализа оксида графена, графита, алмазов. В графене моды второго порядка используются для анализа количества слоев, степени легирования и т.д. Однако при анализе спектров ОГ модами КР второго порядка обычно пренебрегают. В этой работе мы обнаружили, что моды второго порядка ОГ могут точно отражать степень восстановления ОГ.

Цель настоящей работы: Разработать альтернативный способ анализа ОГ, восстановленного лазерным облучением, с помощью спектроскопии КР.

Для успешного выполнения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

- Получение ВОГ с разной степенью восстановления;
- Измерение и анализ спектров КР оксида графена;
- Измерение электропроводности ВОГ как показателя степени восстановления ОГ;
- Корреляция спектров КР оксида графена со степенью его восстановления.

1. Обзор литературы

1.1 Оксид графена

Графен, двумерный (2D) слой sp^2 -гибридизированного углерода,[2] который представляет собой гексагональную решетку, вызвал интерес научного сообщества и интенсивно исследовался с 2004 года.[3] Этот интерес обусловлен главным образом уникальными свойствами графена: механической и химической стабильностью, высокой подвижностью электронов и оптической прозрачностью.[4–6] Эти свойства сделали возможным разработку многих устройств на основе графена, например транзисторов и датчиков.[7,8]

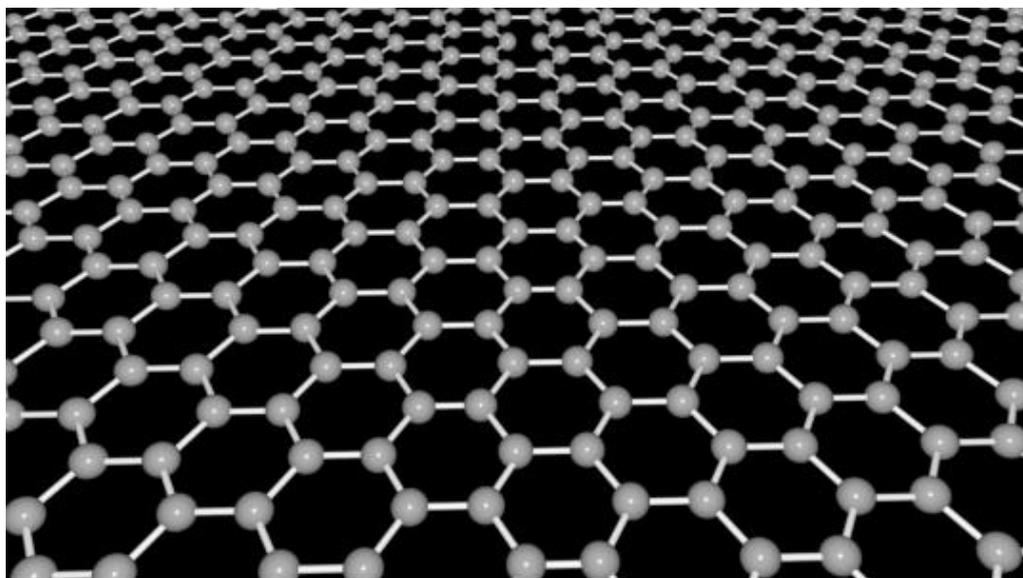


Рисунок 1 - Структура графена

ОГ, окисленная форма графена, представляет собой коричневатожелтый порошок или раствор. Он также привлек внимание сообщества, работающего над этими новыми 2D материалами. Этот интерес к ОГ связан с тем, что этот материал имеет ряд преимуществ перед графеном, таких как простое и недорогое производство и растворимость в воде, что позволяет использовать его в способах изготовления элементов с использованием растворов. После окисления ОГ все еще сохраняет слоистую структуру

графена, но ряд кислородсодержащих функциональных групп присоединяется к каждому слою графена. ОГ является изолирующим материалом, мы можем использовать некоторые методы для удаления кислородсодержащих функциональных групп, чтобы сделать его проводящим. Это указывает на еще одно существенное преимущество ОГ перед графеном - возможность легко контролировать электрическую проводимость, гидрофильность и степень прозрачности путем управления уровнем окисления.[9] Существует три метода изготовления ОГ - хорошо известный метод Бруди, метод Штауденмайера и метод Хаммерса.[10] Метод Бруди является первым методом получения ОГ, химик Бруди добавил хлорат калия (KClO_3) в суспензию графита в дымящей азотной кислоте (HNO_3). Затем он определил состав полученных материалов как 61,04:1,85:37,11 для С:Н:О. Штауденмайер разработал новый метод, основанный на методе Бруди. В своих экспериментах он заменил около двух третей дымящейся (HNO_3) концентрированной серной кислотой (H_2SO_4) и в несколько этапов добавил (KClO_3), чтобы повысить кислотность смеси в эксперименте, что привело к соотношению С:О 2:1. Этот метод требует около четырех дней для прохождения реакции. В методе Хаммерса используется комбинация перманганата калия (KMnO_4) и серной кислоты (H_2SO_4), а также нитрата натрия (NaNO_3). Этот метод имеет некоторые преимущества перед двумя последними, например, реакция метода Хаммерса может быть завершена в течение нескольких часов; KClO_3 был заменен на KMnO_4 для повышения безопасности реакции, избегая выделения взрывчатого ClO_2 ; использование NaNO_3 вместо дымящего HNO_3 устраняет образование паров кислоты.[10,11] Точная химическая структура ОГ обсуждалась в течение нескольких лет, и даже по сей день не существует однозначной модели. Поэтому ниже на рисунке 2 представлена общепринятая концептуальная структура ОГ.

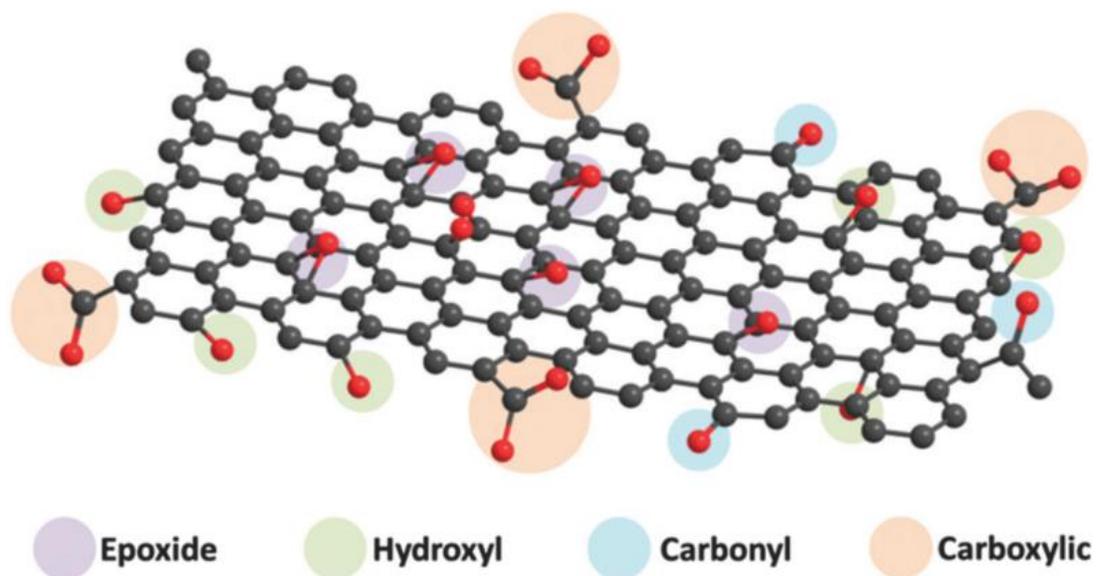


Рисунок 2 - Структурная модель ОГ. Copyright © The Royal Society of Chemistry 2015[12]

1.2 Методы восстановления оксида графена

Для контроля уровня окисления можно использовать несколько методов, таких как химическое восстановление, термический отжиг, лазерный отжиг и т. д.[13] Химическое восстановление с использованием различных химических реагентов, таких как гидразин, борогидрид натрия или витамин С, является легко доступным способом получения ВОГ. Этот метод может производить большие количества ВОГ, но он может приводить к включению других функциональных групп из восстанавливающего агента, такого как азотные группы.[13–15] При термическом отжиге ОГ разлагается на графеноподобный ВОГ, а также газы СО и СО₂, образующиеся из кислородсодержащих групп между листами ОГ.. Между тем, термический отжиг удаляет атомы углерода из слоя ОГ, поскольку он создает газы СО и СО₂. При этом происходит которое раскалывание листов ВОГ на более мелкие кусочки, что приводит к дополнительному искажению углеродной плоскости sp^2 . Следовательно, этот метод хорош для получения небольших, но морщинистых графеновых листов.[13,16,17] Превращение ОГ в ВОГ с помощью лазерного отжига является эффективным, простым в изготовлении

и экологически чистым. Метод подходит для получения графеноподобного материала на любых подложках, даже на термочувствительных полимерах.[18,19] Более низкое воздействие лазерного восстановления на окружающую среду обусловлено меньшей энергией, необходимой для работы лазера, в отличие от термического отжига в печи, которая требует значительно большего потребления энергии. Кроме того, лазерный отжиг позволяет получать структуры ВОГ с произвольной геометрией для изготовления, например, микроэлектронных схем (на рисунке 3 проиллюстрировано лазерное восстановление оксида графена).[20]

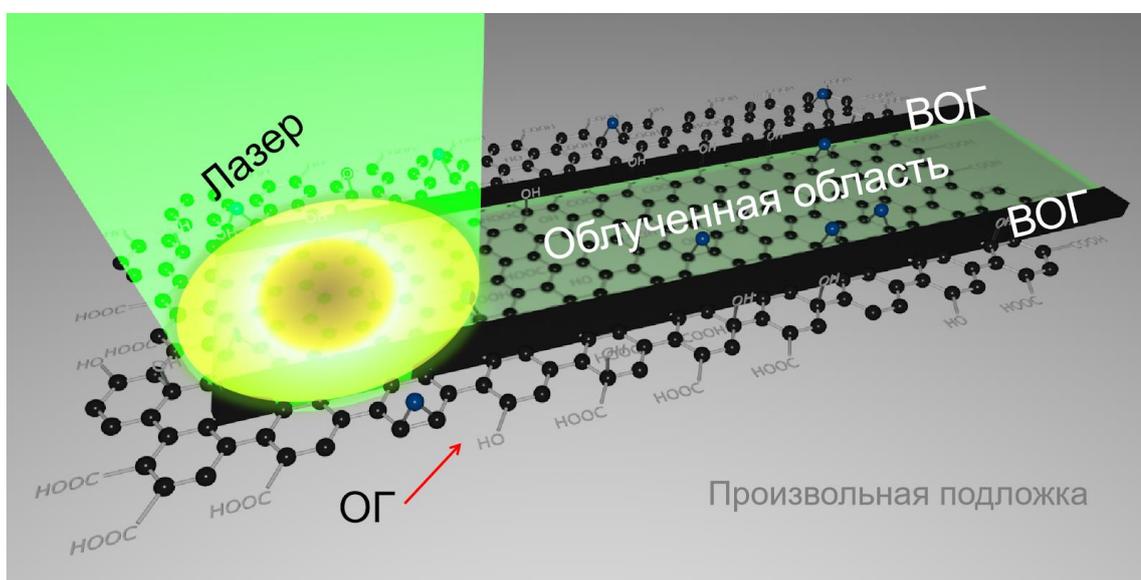


Рисунок 3 - Схема лазерного восстановления оксида графена[21]

В связи с этим лазерный отжиг представляется популярным и универсальным способом получения ВОГ. Контролируя параметры лазерного излучения, такие как мощность и время экспозиции, мы можем получить ВОГ с различными степенями восстановления. Поскольку степень восстановления определяет множество свойств ВОГ от проводимости до химических свойств, поэтому нам нужен метод для ее оценки. Существующие методы оценки степени восстановления ОГ (рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС), измерение электропроводности, ИК спектроскопия) мало подходят для анализа структур, изготовленных методом лазерного восстановления, поскольку они не обеспечивают

микромасштабного разрешения, необходимого при их анализе. Поэтому поиск удобного способа анализа степени восстановления ВОГ представляет большой интерес для многих научных групп.

1.3 Спектроскопия КР и анализ спектров ОГ

1.3.1 Спектроскопия КР

Спектроскопия КР - это метод, заключающийся в измерении частотного сдвига неупруго рассеянного света от образца, когда фотон падающего света взаимодействует с молекулой и создает рассеянный фотон.[22,23] Существуют разные колебательные моды в колебаниях молекул. Например, симметричное растяжение, асимметричное растяжение, ножницы (изгиб), покачивание, виляние, скручивание и т. д. Колебания молекул решетки может производить энергию, а соответствующий квант - так называемый фонон. Когда фотоны и фононы не обмениваются энергией, рассеяние является рэлеевским рассеянием. Когда фотоны из света поглощают энергию от фононов, мы называем рассеяние антистоксовым рассеянием. Когда фотоны возбуждают молекулы, чтобы произвести фононы, падающий свет теряет энергию, чтобы произвести стоксовое или комбинационное рассеяние, которое является светом, который мы должны измерить, чтобы получить полезную информацию. Смещение длины волны рассеянного света зависит от химического состава молекул и силы химической связи, ответственных за рассеяние.[24] Это можно выразить уравнением (1)

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (1)$$

Где k - коэффициент жесткости, ν - частота колебания, m - масса молекулы. Схематическое изображение переходов при комбинационном рассеянии света приведено на рисунке 4.

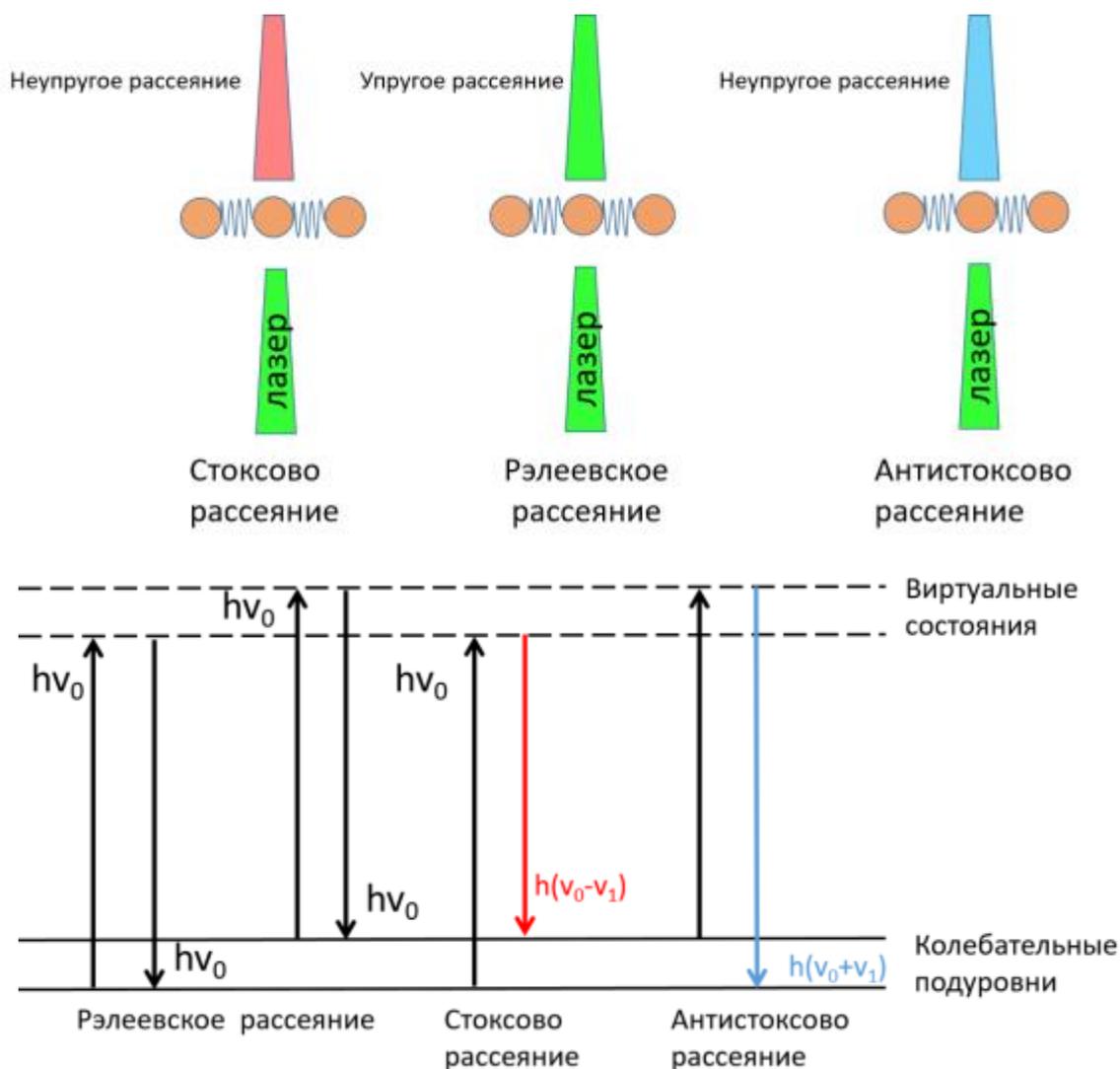


Рисунок 4 - Квантовые переходы при комбинационном рассеянии света[25]

Схема измерений КР показана на рисунке 5. Спектрометр КР состоит из четырех основных компонентов:

- источник монохроматического излучения (лазера);
- система освещения образца и фокусировки света;
- светофильтр;
- системы детектирования излучения и компьютерного контроля.

Как источник возбуждающего света для КР спектроскопии преимущественно используют такие лазеры, как Ar^+ (351,1-514,5 нм), Kr^+ (337,4-676,4 нм) и He-Ne (632,8 нм). В последние годы внедряются также

лазеры Nd:YAG, твердотельные лазеры и эксимерные лазеры для УФ резонансной спектроскопии КР.[26]

Лазерный луч, учитывая его малый диаметр, несложно сфокусировать на образце. Чаще всего рассеянные лучи направляют на светофильтр с помощью системы сборных и фокусирующих линз.

Для фильтрации комбинационных лучей как правило используют интерференционные фильтры, в которых две оптические плоскости способны пропускать только лучи с длинами волн, кратные удвоенной толщине фильтра. В связи с малой интенсивностью комбинационного сигнала, к детекторам применяются серьезные требования, а потому фотографические пленки уступили место высокочувствительным фотодетекторам.

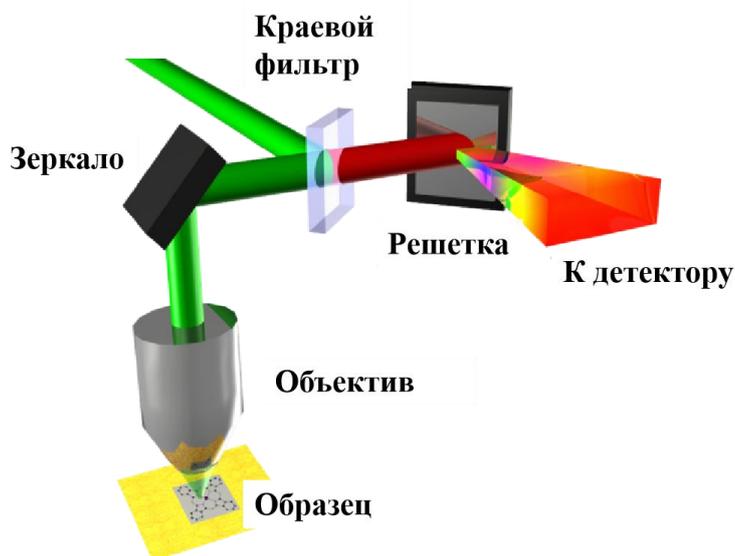


Рисунок 5 - Схематическая структура спектрометра КР

1.3.2 Спектроскопия КР в анализе оксида графена

Спектроскопия КР является предпочтительным инструментом при анализе углеродных наноматериалов.[27,28] Постоянно публикуется большое количество работ, посвященных применению спектроскопии КР для анализа графена и его производных.[29] Чтобы объяснить спектры КР ОГ, мы должны ввести фононную дисперсию графена. В графене существует шесть фононных дисперсий, показанных на рисунке 6. Два собственных значения

соответствуют внеплоскостным колебаниям, ZA (также известный как внеплоскостное колебание oTA, акустическое) и ZO (также известный как внеплоскостное колебание oTO, оптическое), а остальные четыре соответствуют плоскостным колебаниям: TA (поперечный акустический), TO (поперечный оптический), LA (продольный акустический) и LO (продольный оптический).[30]

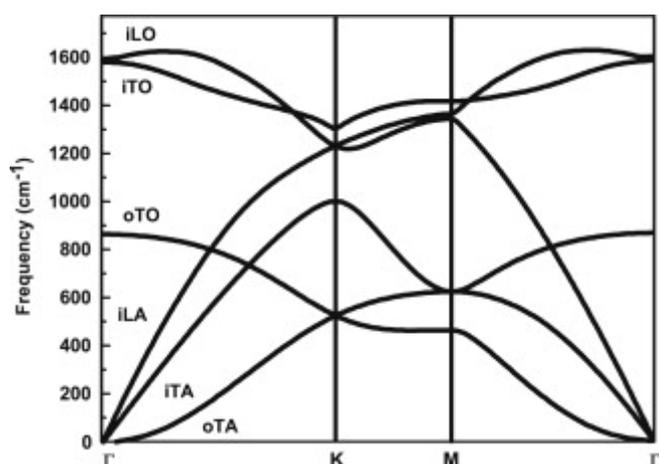


Рисунок 6 - Фононные дисперсионные соотношения для графена. Copyright © 2009 Elsevier B.V. All rights reserved[31]

Особенности КР в графене определяются тем, что зонная структура графена имеет форму конуса Дирака (см. рисунок 7). Поэтому для любой длины волны существует резонансный переход электрона из валентной зоны в зону проводимости. Основные внутрizonные и межзонные переходы, определяющие наблюдаемые в КР спектрах моды графена, представлены на рисунке 7. На рисунке 7 показан резонансный процесс КР рассеяния в графене. Например, G-мода связана с двукратно вырожденной (iTO и LO) фононной модой в центре зоны Бриллюэна. Это означает, что электрон возбуждается фотоном от падающего лазера, затем электрон неупруго рассеивается фононами iTO и LO в точке Γ, см. дисперсионное соотношение графеновых фононов на рисунке 6. Для полосы D рассеяния состоит из двух событий: событие упругого рассеяния на дефектах и событие неупругого рассеяния на фононе iTO. Для полосы G', также известной как 2D-полоса, оба

события представляют собой неупругое рассеяние с участием двух фононов iTO.

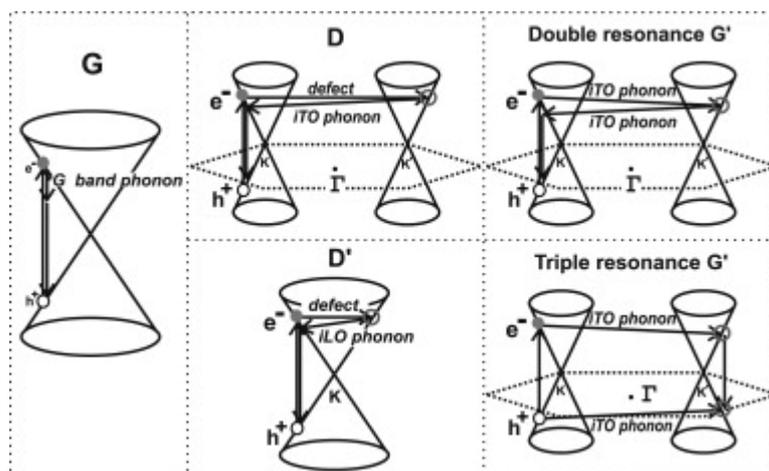


Рисунок 7 - Принципиальная схема КР в графене. Copyright © 2009 Elsevier B.V. All rights reserved[31]

Комбинационные моды OГ подразделяются на моды первого порядка (диапазон от 700 до 1800 cm^{-1}) и моды второго порядка (диапазон от 2500 до 3200 cm^{-1}). В модах первого порядка в спектрах присутствуют в основном углеродные полосы D и G с центрами на 1350 и 1580 cm^{-1} соответственно. Полоса G ($\sim 1583 \text{ cm}^{-1}$) связана с оптической модой E_{2g} первого порядка. Рисунок 8 иллюстрирует E_{2g} колебания атомов в решетке графена и графита связаны с растяжением связей C=C в плоскости двумерного атомарного слоя.[32,33] Полоса D ($\sim 1350 \text{ cm}^{-1}$) относится к дыхательной моде шестиатомного углеродного кольца A_{1g} на границе зоны Бриллюэна K (не представлена на рисунке 8). Ее интенсивность связана с количеством дефектов в плоскости графена и часто используется как показатель качества кристаллической решетки графена и графита.[34] Полоса D' ($\sim 1620 \text{ cm}^{-1}$) соответствует внутризонному двойному резонансу, она также становится активной в спектрах КР при наличии дефектов.[35] В полосах второго порядка полоса 2D с центром в 2700 cm^{-1} (также называемая полосой G') является обертоном полосы D. Полоса 2G ($\sim 3170 \text{ cm}^{-1}$) относится к обертону полосы G, а полоса D + G ($\sim 2940 \text{ cm}^{-1}$) - это объединенный обертоном полос D

и G.[36,37] Происхождение и частота для комбинационных мод углеродных материалов с sp^2 гибридизацией показаны в таблице 1.

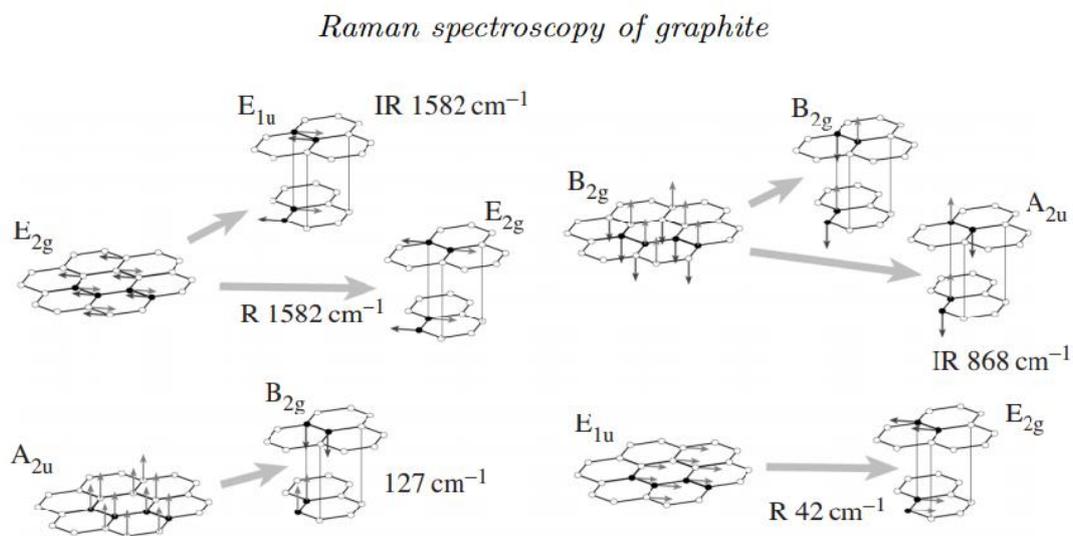


Рисунок 8 - Фононных собственных векторов графена и графита.
Copyright © Phil. Trans. R. Soc. Lond. A (2004)[32]

Таблица 1 - Происхождение и частота для комбинационных мод sp^2 углеродных материалов[38]

Название ^a	ω [см ⁻¹] ^b	Комментарий ^c
D (iTO)	1350	Внутри ($q \sim 2k$ около Γ)
G (iTO,LO)	1585	$q = 0$
D' (LO)	1620	Внутри ($q \sim 2k$ около Γ)
M ⁻ (2oTO)	1732	Внутри + Внутри ($q \sim 2k$ около Γ)
M ⁺ (2oTO)	1755	Внутри + Внутри ($q \sim 0$ около Γ)
G* (LA+iTO)	2450	Меж + Меж ($q \sim 2k$ около K)
G' (2iTO)	2700	Меж + Меж ($q \sim 2k$ около K)
G + D	2935	Внутри + Меж

2G	3170	Обертон G-моды
G + D'	3205	Внутри + Внутри
G''(2LO)	3240	Внутри + Внутри ($q \sim 2k$ около Γ)

^a В скобках указаны альтернативные названия фононных пиков, используемые в литературе.

^b Частоты, указанные в таблице, наблюдаются при $E_{\text{laser}} = 2.41 \text{ eV}$.

^c Внутри: внутризонное рассеяние; Меж: межзонное рассеяние.

В недавней работе, опубликованной Клараунтом с соавторами, авторы исследовали, как использовать спектроскопию КР для анализа степени восстановления ВОГ на основе двух дополнительных полос D^* и D'' между 1100 и 1800 cm^{-1} . [39] Они сфокусировались на полосе D^* (между 1150 и 1200 cm^{-1}), которая была приписана неупорядоченной графитовой решетке, образованной связями sp^2-sp^3 на краях углеродных решеток. [40] Они также сообщили о полосе D'' (между 1500 и 1550 cm^{-1}), связанной с фононной плотностью состояний в кристаллах графита конечного размера [41] или аморфной решеткой. [37] Критическим моментом в работе Клараунта с соавторами является то, что авторы пришли к выводу, что частоты D^* и D'' можно соотнести с содержанием кислорода в ВОГ, полученном термическим отжигом. Однако, когда мы воспроизвели их анализ на образцах ВОГ с лазерным восстановлением, мы обнаружили, что их метод дал очень высокую неопределенность для положений пиков из-за высокой свертки при приближении пиков, расположенных между полосами D и G. Поэтому мы стремились найти альтернативный способ соотнести степень восстановления ВОГ со спектрами КР. Это исследование было в значительной степени обусловлено нашей практической необходимостью оценить, насколько ОГ фактически восстанавливается. В связи с этим мы провели систематическое исследование восстановленного лазером ВОГ методом КР и проводящей АСМ. ОГ был восстановлен с помощью лазера с различной мощностью (от

0,1 мВт до 10 мВт), в результате был получен ВОГ с различными степенями восстановления. Здесь обсуждается прямая корреляция между сопротивлением и параметрами определенного набора полос КР, показывающая, что спектроскопия может использоваться для оценки электропроводности лазерно-восстановленного ОГ.

2. Материалы и методы

2.1 Материалы

Водная дисперсия оксида графена (4 мг/мл, вода) была коммерчески доступна от "Graphenea", Испания. Однослойный характер ОГ был проверен для сильно разбавленных растворов, нанесенных на стекло, и проанализирован с помощью атомно-силовой микроскопии, показывая хлопья ОГ с размером в несколько микрометров и толщиной слоя около 1 нм. Исходная концентрация ОГ 4 мг/мл была разбавлена в 20 раз в сверхчистой воде. Эту дисперсию ОГ использовали для получения пленки ОГ толщиной 103 нм, как описано ниже.



Рисунок 9 - Оксид графена – ОГ

2.2 Подготовка образцов

Подложка, используемая в качестве подложки для пленок ОГ, состоит из стекла размером 10×13 мм с золотым покрытием, полученным термическим испарением пленки Au толщиной 100 нм в сверхвысоком вакууме. Мы выбрали эту подложку с Au-покрытием, чтобы использовать золотую пленку в качестве нижнего электрода и одновременно измерить электропроводность структур ВОГ. Перед нанесением ОГ субстрат был промыт поэтапно в ацетоне, этаноле и деионизированной воде. После сушки, 0,2 мл разбавленного ОГ нанесли на субстрат и оставили для высыхания в комнатных условиях. Осаждение ОГ на Au привело к получению пленки толщиной около 103 нм, которая была восстановлена с помощью сфокусированного лазерного луча от спектрометра КР (532 нм, 50-кратный объектив и линзой с численной апертурой N.A. 0,5). Используемые мощности лазера (показано в таблице 2) были измерены встроенным в спектрометр измерителем мощности, обеспечивающим оценку мощности лазера на поверхности образца. Эти условия освещения привели к восстановлению областей ОГ диаметром 1,3 мкм, полученных при плотностях мощности лазера (на поверхности образца показано в таблице 2). Время облучения для всех мощностей составляло 0,2 с. Оптические изображения восстановленной поверхности показаны на рисунке 10.

Таблица 2 - Используемая мощность лазера и соответствующая ему плотность мощности лазера

Мощность лазера, мВт	Плотность мощности лазера, Вт/м ²
0,1	$0,75 \times 10^8$
0,5	$3,77 \times 10^8$
1	$7,53 \times 10^8$
2	$1,51 \times 10^9$
4	$3,01 \times 10^9$

6	$4,52 \times 10^9$
8	$6,03 \times 10^9$
10	$7,53 \times 10^9$

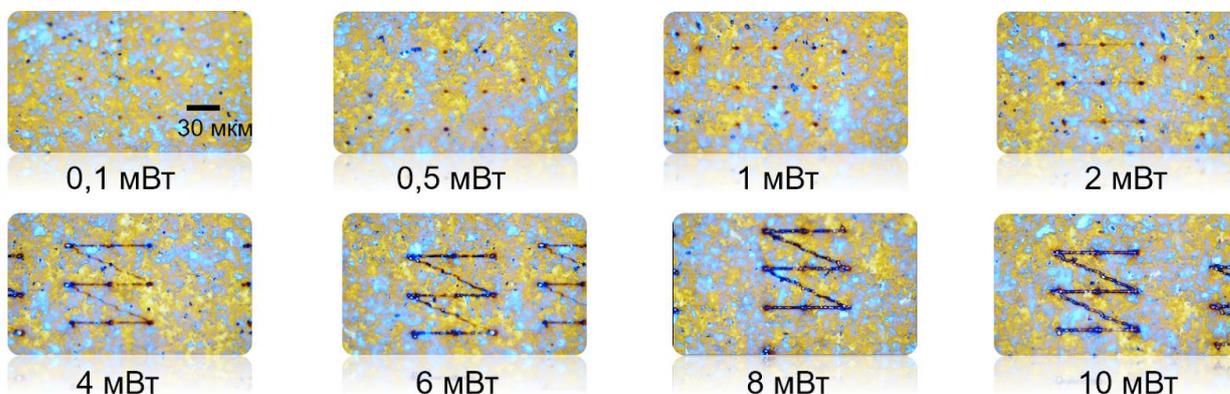


Рисунок 10 - Оптические микрофотографии облученных лазером ВОГ матриц 3x3, полученных при различной мощности лазера

2.3 Спектроскопия КР

Образцы восстановленными областями ВОГ были получены и проанализированы *in situ* с помощью микроскопа КР DXR2xi (Thermo Fisher Scientific, США) при комнатной температуре. Эксперименты по комбинационному рассеянию проводились с лазерным возбуждением с длиной волны 532 нм (объектив 100x и линза с N.A. 0,9). Чтобы свести к минимуму модификации пленок ВОГ, мы выбрали мощность лазера 0,1 мВт для всех описанных здесь экспериментов по спектроскопии КР (0,1 мВт - самая низкая мощность лазера, разрешенная прибором). Плотность мощности лазера составляла $2,46 \times 10^8$ Вт/м² на поверхности образца. Для каждой области ВОГ, полученной при различных мощностях лазера, лазер фокусировался на центре пятна ВОГ используя 100-кратный объектив. Затем измеряли время экспозиции 1 с и 10 повторений для получения статически усредненных спектров. Функция Фойгта использовалась для приближения пиков в диапазоне от 1000 до 1800 см⁻¹, в то время как для приближения

пиков второго порядка в диапазоне от 2500 см^{-1} до 3200 см^{-1} использовалась функция Лоренца. Моды в диапазоне от 1000 до 1800 см^{-1} была приближена шестью пиками, отнесенным к D^* , D , D'' , G , D' и M . Приближение полос в диапазоне от 2500 до 3200 см^{-1} было получено с помощью трех пиков $2D$, $D + G$ и $2G$. Параметры всех приближенных пиков, таких как ширина на полувысоте (FWHM), площади и положения, были получены и проанализированы.



Рисунок 11 - КР микроскоп - DXR2xi[42]

2.4 Атомно-силовая микроскопия (АСМ)

Изображения растекания тока и кривые ВАХ для различных образцов ВОГ были получены с помощью сканирующего зондового микроскопа NTEGRA (NTMDT, Россия). Скорость сканирования составляла около 15 мкм/с . Напряжение смещения, используемое для получения изображений растекания тока, составляло $0,5\text{ В}$. После получения изображения растекания тока было записано несколько вольт-амперных характеристик (ВАХ), которые были усреднены по каждой интересующей области для различных облученных лазером областей ВОГ. ВАХ от ВОГ были использованы для расчета среднего сопротивления для каждой восстановленной области.

Исследование АСМ показало равномерное распределение тока в облученных лазером областях.

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА

«ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту:

Группа	ФИО
4BM72	Ма Бин

Школа	ИШНПТ	Отделение	Материаловедения
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	12.04.02 Опотехника

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

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Расчет материальных затрат НИИ, стоимости специального оборудования, расчет заработной платы руководителя и инженера
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	Анализ конкурентных технических решений, определение альтернатив методов исследования на данном этапе разработки
2. Планирование процесса управления НИИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок	Составление календарного плана проекта. Определение бюджета НИИ
3. Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности	Расчет заработных плат, всех видов отчислений, расчет бюджета НИИ с учетом всех факторов и необходимых затрат

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. Оценка конкурентоспособности технических решений
2. Матрица SWOT
3. График проведения и бюджет НИИ
4. Расчёт денежного потока
5. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИИ

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент	Жаворонок Анастасия Валерьевна	-		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4BM72	Ма Бин		

Тема: «Взаимодействие между светом и веществом в двумерных материалах»

Краткое описание

Данная ВКР посвящена разработке с использованием спектроскопии комбинационного рассеяния для анализа восстановленного оксида графена. Спектроскопия комбинационного рассеяния как оптический инструмент для анализа оксида графена представляется быстрым, удобным и простым в использовании методом. Он имеет много преимуществ по сравнению с другими методами, такими как низкая стоимость, отличная эффективность, низкая энергоэкономичность, удобство в эксплуатации.

4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

4.1 Предпроектный анализ

4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

В этой исследовательской работе мы использовали спектроскопию комбинационного рассеяния в качестве метода для анализа оксида графена с различными степенями восстановления. Целью данного раздела «Финансовый менеджмент, эффективность использования ресурсов и защита ресурсов» является определение перспектив и целесообразности проведения научных исследований с точки зрения эффективности затрат.

Результаты нашего исследования обеспечивают новый и альтернативный рамановский спектроскопический анализ для восстановленного лазером оксида графена, который позволяет связать степень восстановления и электропроводность. Используя простое измерение оптической спектроскопии, мы теперь можем оценить электропроводность набора образцов восстановленного оксида графена даже без необходимости создания электрических контактов. Эти результаты важны для сообщества, работающего над графен-оксидными материалами, позволяющими проводить проводящие и структурные исследования микроустройств на основе восстановленного оксида графена с высоким пространственным разрешением (~мкм).

4.1.2 Анализ конкурентных решений

Рамановская спектроскопия - это быстрый и удобный способ анализа оксида графена. Он имеет несколько преимуществ по сравнению с другими методами, такими как атомная микроскопия с измерением тока, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, рентгеноструктурный или термогравиметрический анализ. Например, эти методы используются для оценки степени отношения C / O. однако пятна восстановленного лазером

оксида графена иногда имеют пространственные размеры в диапазоне 3 мкм, что превышает пространственное разрешение РФЭС или других методов. Сенсорная атомная микроскопия требует контакта с электродом и занимает много времени. С другой стороны, рамановская спектроскопия имеет небольшое ограничение для образцов, и она очень быстрая. Дополнительным преимуществом является стоимость: Стоимость Рамановской спектроскопии в разы меньше стоимости установки для РФЭС.

Экспертная оценка основных технических характеристик данных продуктов представлена в таблице 4.1.

Таблица 4.1 – оценочная карта сравнения конкурентных технических решений

№	Критерии оценки	Вес критерия	Баллы				Конкурентоспособность			
			Бф	Бк1	Бк2	Бк3	Кф	К1	К2	К3
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Технические критерии оценки ресурсоэффективности										
1	Повышение эффективности труда пользователя	0,2	5	2	2	3	1	0,4	0,4	0,6
2	Удобство в эксплуатации (соответствует требованиям потребителей)	0,15	5	3	2	3	0,75	0,45	0,3	0,45
3	Помехоустойчивость	0,1	4	4	4	5	0,4	0,4	0,4	0,5
4	Энергоэкономичность	0,15	5	3	3	2	0,75	0,45	0,45	0,3
5	Надежность	0,05	2	5	4	5	0,1	0,25	0,2	0,25
6	Простота эксплуатации	0,15	5	2	2	3	0,75	0,3	0,3	0,45
Экономические критерии оценки эффективности										
1	Конкурентоспособность продукта	0,08	5	5	5	5	0,4	0,4	0,4	0,4
2	Цена	0,02	4	2	2	2	0,08	0,04	0,04	0,04

3	Финансирование научной разработки	0,06	5	3	2	3	0,3	0,18	0,12	0,18
4	Срок выхода на рынок	0,04	4	5	5	5	0,16	0,2	0,2	0,2
	Итого	1	44	34	31	41	4,69	3,07	2,81	3,37

Исходя из проведенного анализа можно заключить, что уязвимость конкурентных технологических решений обусловлена, прежде всего, недостаточной эффективностью, то есть другие методы занимают много времени для анализа оксида графена. Удобство в использовании других методов очень похоже, все они имеют большое ограничение для образцов. Кроме того, наши методы оцениваются выше, чем другие методы.

4.1.3 SWOT-анализ

SWOT-анализ применяют для исследования внешней и внутренней среды проекта. Матрица составляется на основе анализа рынка и конкурентных технических решений, и показывает сильные и слабые стороны проекта, возможности и угрозы для разработки.

Первый этап заключается в описании сильных и слабых сторон проекта, в выявлении возможностей и угроз для реализации проекта, которые проявились или могут появиться в его внешней среде. Матрица SWOT представлена в таблице 4.2.

Таблица 4.2 – SWOT-анализ

	Сильные стороны	Слабые стороны
	С1. Используя простое измерение оптической спектроскопии, мы теперь можем оценить электропроводность набора образцов восстановленного оксида графена даже без необходимости создания электрических контактов.	СЛ1. Лазер от машины может изменить образцы. СЛ2. Обработка результатов требует много времени. СЛ3. Точность этого метода

	<p>С2. Этот метод является быстрым, простым, высокоэффективным, удобным и имеет гораздо меньше ограничений для образцов.</p> <p>С3. Машина для этого метода намного дешевле других.</p> <p>С4. Это позволяет высокое пространственное разрешение</p>	ниже, чем у других.
Возможности	Участие в международной конференции для рекламы передовых результатов.	Контролировать мощность лазера, чтобы минимизировать модификации.
В1. Международный интерес к результатам исследования, участие в научно-технических конференциях различного уровня	Разработка нового метода на основе спектроскопии комбинационного рассеяния в анализе восстановленного оксида графена.	Измерьте существенные спектры и усредните спектры, чтобы получить точные результаты.
В2. Привлечение кадрового состава и использование этого метода	Для исследований в области оксида графена предоставьте удобный, быстрый метод с высоким пространственным разрешением.	
В3. Применение технологии для ряда других исследований		
Угрозы	Этот метод как раз интересует группы, которые исследуют оксид графена. И это требует больших знаний о том, как обрабатывать данные точно	Если исследователи не обрабатывают данные точно, неопределенности будут проблемой, которая влияет на результаты.
У1 Метод имеет свои ограничения, он просто полезен для восстановленного оксида графена.		Это сильно зависит от длины волны лазера.
У2 Метод остается		

неясным.		
----------	--	--

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

Соотношения параметров представлены в таблице 4.3.

Таблица 4.3 – Интерактивная матрица проекта

Возможности проекта		C1	C2	C3	C4
	B1	+	+	-	+
	B2	+	+	+	+
	B3	-	-	-	-

Возможности проекта		СЛ1	СЛ2	СЛ3
	B1	-	-	-
	B2	-	-	-
	B3	-	-	-

Угрозы проекта		C1	C2	C3	C4
	У1	+	-	+	-
	У2	-	+	-	+

Угрозы проекта		СЛ1	СЛ2	СЛ3
	У1	+	-	+
	У2	-	-	-

4.2 Инициация проекта

В рамках процессов инициации определяются изначальные цели и содержание и фиксируются изначальные финансовые ресурсы. Определяются внутренние и внешние заинтересованные стороны проекта,

которые будут взаимодействовать и влиять на общий результат научного проекта.

4.2.1 Цели и результаты проекта

Перед определением целей необходимо перечислить заинтересованные стороны проекта. Информация по заинтересованным сторонам представлена в таблице 4.4:

Таблица 4.4 – Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидание заинтересованных сторон
Шеремет Евгения Сергеевна, профессор ИШФВП	Отвечает за реализацию, координирует деятельность участников проекта
Ма Бин, магистр ИШНПТ	Выполнение экспериментальной части

Цели и результат проекта представлены в таблице 4.5:

Таблица 4.5 – Цели и результат проекта

Цели проекта:	Разработать альтернативный способ анализа оксида графена, восстановленного лазерным облучением, с помощью оптической рамановской спектроскопии. Это позволяет соотнести спектральные характеристики комбинационного рассеяния со степенью восстановления
Ожидаемые результаты проекта:	Создание метода оптической микроспектроскопии для оценки степени восстановления оксида графена, восстановленного лазером.
Критерии приемки результата проекта:	Используя простое измерение оптической спектроскопии, мы можем оценить электропроводность набора образцов восстановленного оксида графена даже без необходимости создания электрических

	контактов.
Требования к результату проекта:	Требование:
	Этот метод успешно выполнил требования анализа восстановленного оксида графена Этот метод быстрее, удобнее и дешевле в энергии

4.2.2 Ограничения и допущения проекта

Ограничения проекта – это все факторы, которые могут послужить ограничением степени свободы участников команды проекта, а также «границы проекта» - параметры проекта или его продукта, которые не будут реализованных в рамках данного проекта. Эту информацию представить в табличной форме (табл. 4.6).

Таблица 4.6 – Ограничения проекта

Фактор	Ограничения
1.2.3.1 Бюджет проекта	100 000 рублей
1.2.3.1.1 Источник финансирования	НИТПУ
1.2.3.2 Сроки проекта	01.01.2018 – 31.10.2018
1.2.3.2.2 Плановая дата завершения проекта	31.05.2018

4.3 Планирование управления научно-техническим проектом

4.3.1 План проекта

Диаграмма Ганта – это тип столбчатых диаграмм (гистограмм), который используется для иллюстрации календарного плана проекта, на котором работы по теме представляются протяженными во времени отрезками, характеризующимися датами начала и окончания выполнения данных работ.

График строится в виде табл. 4.7 с разбивкой по месяцам и декадам (10 дней) за период времени выполнения научного проекта. При этом работы на графике следует выделить различной штриховкой в зависимости от исполнителей, ответственных за ту или иную работу.

Таблица 4.7 – Календарный план-график проведения НИОКР по теме

Код работы (из ИСР)	Вид работ	Исполнители	Т _к , дн.	Продолжительность выполнения работ																		
				Янв.			Февр.			Март			Апр.			Май.			Июнь			
				1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1			
1	Выбор темы исследования	Р, С	1	■																		
2	Обсуждение содержания исследования	Р, С	2	■						■												
3	Изучение литературы	С	4			■				■												
4	Теоретические и экспериментальные исследования	С	3			■				■												
5	Обработка и анализ данных	С	7			■				■												
6	Обобщение и оценка результатов	Р,С	5										■									
7	Написание научной статьи	Р,С	5													■	■	■				
8	Публикация научной статьи	Р,С	2																■	■		

■ – Руководитель(Р)

■ – Студент (С)

4.3.2 Бюджет научного исследования

При планировании бюджета научного исследования должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов планируемых расходов, необходимых для его выполнения. В процессе формирования бюджета, планируемые затраты группируются по статьям, представленным в таблице.

Таблица 4.8 – Материальные затраты НТИ

Наименование материала	Единицы измерения	Количество	Цена за ед Ц _i , руб	Затраты на материалы З _М , руб
Основные материалы				
Оксид графена	мл	1000	9	9000
Этиловый спирт	мл	100	0.4	40
Ацетон	мл	50	1	50
Золото	г	0.1	3000	300
Итого: 9390 руб				

Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ

В данную статью включают все затраты, связанные с приобретением специального оборудования (приборов, контрольно-измерительной аппаратуры, стендов, устройств и механизмов), необходимого для проведения работ по конкретной теме. Определение стоимости спецоборудования производится по действующим прейскурантам, а в ряде случаев по договорной цене.

Для разработки нынешней системы требуется обычное оборудование в виде персонального компьютера и купленных серверов на время жизненного цикла программного продукта. Среда и средство разработки, программный софт и другие комплектующие, нужные для разработки, распространяются бесплатно и не требуют дополнительных затрат.

Таблица 4.9 – Расчет затрат по статье «Спецоборудование для научных работ»

№ п/п	Наименование оборудования	Кол-во единиц оборудования	Цена единицы оборудования, тыс.руб.	Общая стоимость оборудования, тыс.руб.
1.	Персональный компьютеры	1	50,000	50,000
2.	Рамановская спектроскопия*	1	15,000,000	15,000,000
3.	токовая атомно-силовая микроскопия*	1	12,000,000	12,000,000

* Данное оборудование имеется у ТПУ

Основная заработная плата

В настоящую статью включается основная заработная плата научных и инженерно-технических работников, рабочих макетных мастерских и опытных производств, непосредственно участвующих в выполнении работ по данной теме. Величина расходов по заработной плате определяется исходя из трудоемкости выполняемых работ и действующей системы оплаты труда. В состав основной заработной платы включается премия, выплачиваемая ежемесячно из фонда заработной платы (размер определяется Положением об оплате труда). Расчет основной заработной платы сводится в табл. 4.10.

Таблица 4.10 – Расчет основной заработной платы

№ п/п	Наименование этапов	Исполнители по категориям	Трудоемкость, чел.-дн.	Заработная плата, приходящаяся на один чел.-дн., руб	Всего заработная плата по тарифу (окладам), руб.
1	Выбор темы исследования	Руководитель Магистр	1	2000	2000
2	Обсуждение	Руководитель	2	2000	4000

	содержания исследования	Магистр			
3	Изучение литературы	Магистр	4	1500	6000
4	Теоретические и эксперимента- льные исследования	Магистр	3	2500	7500
5	Обработка и анализ данных	Магистр	7	2500	17,500
6	Обобщение и оценка результатов	Руководитель Магистр	5	3000	15,000
7	Написание научной статьи	Руководитель Магистр	5	3000	15,000
8	Публикация научной статьи	Руководитель Магистр	2	3000	6000
Итого:					73,000

$$C_{зп} = Z_{осн} + Z_{доп}, \quad (4.1)$$

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

$Z_{доп}$ – дополнительная заработная плата.

Основная заработная плата $Z_{осн}$ руководителя рассчитывается по следующей формуле:

$$Z_{осн} = Z_{дн} \cdot T_{раб} \quad (4.2)$$

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

$Z_{дн}$ – среднедневная заработная плата работника, руб.

Значит, для руководителя:

$$Z_{осн} = 22\,000 \cdot 1,3 = 28\,600 \text{ рублей}$$

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{дн}=(Z_{м} \cdot M)/F_{д} \quad (4.3)$$

где $Z_{м}$ – месячный должностной оклад работника, руб (в качестве месячного оклада магистра выступает стипендия, которая составляет 2650 руб);

M – количество месяцев работы без отпуска в течение года:

при отпуске в 45раб. дней $M=10,4$ месяца, 6 - дневная неделя;

$F_{д}$ – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала (в рабочих днях) Тогда,

Для руководителя:

$$Z_{дн} = \frac{28600 * 10,4}{254} = 1171,0 \text{ рублей}$$

Для дипломника:

$$Z_{дн} = \frac{2650 * 10,4}{217} = 127 \text{ рублей}$$

Баланс рабочего времени представлен в таблице 4.11.

Таблица 4.11 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Магистр
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней		
- выходные дни	52	82
- праздничные дни	14	14
Потери рабочего времени		
- отпуск	45	52
- невыходы по болезни	–	–
Действительный годовой фонд рабочего времени	254	217

Таблица 4.12 – Результаты расчета основной заработной платы

Исполнители	$Z_{б}$, руб.	k_p	$Z_{м}$, руб	$Z_{дн}$, руб.	T_p , раб. дн.	$Z_{осн}$, руб.
Руководитель	22000	1.3	28600	1171,0	48	28600
Магистр	2650		2650	127	76	2650
Итого по статье $Z_{осн}$:						31250

Дополнительная заработная плата научно-производственного персонала

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

$$Z_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} * Z_{\text{осн}} \quad (4.4)$$

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

$k_{\text{доп}}$ – коэффициент дополнительной зарплаты ($k_{\text{доп}} = 0,1$);

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

Для руководителя:

$$Z_{\text{доп}} = 28600 * 0,1 = 2860 \text{ рублей}$$

В таблице 4.13 приведен расчёт основной и дополнительной заработной платы.

Таблица 4.13 – Заработная плата исполнителей ВКР, руб

Заработная плата	Руководитель	Магистр
Основная зарплата	28600	2650
Дополнительная зарплата	2860	–
Зарплата исполнителя	31460	2650
Итого		34110

Отчисления на социальные нужды

Статья включает в себя отчисления во внебюджетные фонды.

$$C_{\text{внеб}} = k_{\text{внеб}} * (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}) = 0,3 * (28600 + 2860) = 9438 \text{ руб.} \quad (4.5)$$

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

Накладные расходы

В эту статью относятся расходы по содержанию, эксплуатации и ремонту оборудования, производственного инструмента и инвентаря, зданий, сооружений и др. В расчетах эти расходы принимаются в размере 70 - 90 % от суммы основной заработной платы научно-производственного персонала данной научно-технической организации.

Накладные расходы составляют 80-100 % от суммы основной и дополнительной заработной платы, работников, непосредственно участвующих в выполнении темы.

Расчет накладных расходов ведется по следующей формуле:

$$C_{\text{накл}} = k_{\text{накл}} * (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}) \quad (4.6)$$

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

$$C_{\text{накл}} = 0,3 * (28600 + 2860) = 9438 \text{ руб.}$$

Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта.

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

Таблица 4.14 – Бюджет затрат НТИ

№	Затраты по статьям						
	Сырье, материалы (за вычетом возвратных отходов), покупные	Специальное оборудование для научных (экспериментальных)	Основная заработная плата	Дополнительная заработная плата	Накладные расходы	Отчисления на социальные нужды	Итого плановая себестоимость

	изделия и полуфабрика ты	работ					
1	9390	27,050,000	31250	34110	9438	9438	27,134,236
2	8190	71,930,700	53000	58500	16500	16500	72,075,200

В результате было получено, что бюджет затрат НТИ составит 27,134,236 руб. При этом затраты у конкурентов составляют 72,075,200 рублей, из чего можно сделать вывод что полученный продукт будет экономичней, чем у конкурентов.

4.3.3. Организационная структура проекта

В практике используется несколько базовых вариантов организационных структур: функциональная, проектная, матричная.

Для выбора наиболее подходящей организационной структуры можно использовать табл. 4.15.

Таблица 4.15 – Выбор организационной структуры научного проекта

Критерии выбора	Функциональная	Матричная	Проектная
Степень неопределенности условий реализации проекта	Высокая	Низкая	Высокая
Технология проекта	Сложная	Стандартная	Новая
Сложность проекта	Высокая	Высокая	Высокая
Взаимозависимость между отдельными частями проекта	Низкая	Средняя	Высокая
Критичность фактора времени (обязательства по срокам завершения работ)	Высокая	Средняя	Высокая

Взаимосвязь и взаимозависимость проекта от организаций более высокого уровня	Высокая	Средняя	Низкая
---	---------	---------	--------

В данном случае выбор лежит к проектной структуре проекта из-за особенностей разработки. Составляющая проекта является модульные системы, работающие в постоянном взаимодействии с другими модулями. Также основной причиной выбора проектной структуры является то, что технология проекта является новой, и имеются ограниченные сроки реализации.

4.3.4. План управления коммуникациями проекта

План управления коммуникациями отражает требования к коммуникациям со стороны участников проекта. Пример плана управления коммуникациями приведен в табл. 4.16.

Таблица 4.16 – Пример плана управления коммуникациями

№ п/п	Какая информация передается	Кто передает информацию	Кому передается информация	Когда передает информацию
1.	Статус проекта	Руководитель проекта	Представителю заказчика	Ежеквартально (первая декада квартала)
2.	Обмен информацией о текущем состоянии проекта	Исполнитель проекта	Участникам проекта	Еженедельно (пятница)
3.	Документы и информация по проекту	Ответственное лицо по направлению	Руководителю проекта	Не позже сроков графиков и к. точек
4.	О выполнении контрольной точки	Исполнитель проекта	Руководителю проекта	Не позже дня контрольного события по плану управления

4.3.5. Реестр рисков проекта

Идентифицированные риски проекта включают в себя возможные неопределенные события, которые могут возникнуть в проекте и вызвать последствия, которые повлекут за собой нежелательные эффекты. Информацию по данному разделу необходимо свести в таблицу (табл. 4.17).

Таблица 4.17– Реестр рисков

№	Риск	Вероятность наступления (1-5)	Влияние риска (1-5)	Уровень риска*	Способы смягчения риска
1	Потеря актуальности	2	5	средний	Измерения различных свойств
2	Неточность ПО	3	5	высокий	Многokратные измерения и расчет среднего
3	оборудование может модифицировать образцы	3	4	высокий	перед измерениями, точно регулируя параметры оборудования
4	обработка данных должна быть очень осторожной	2	3	средний	проверить обработку несколько раз

4.4. Определение ресурсной, финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования

4.4.1. Оценка абсолютной эффективности исследования

Динамические методы оценки инвестиций базируются на применении показателей:

- чистая текущая стоимость (**NPV**);
- срок окупаемости (**ДРР**);
- внутренняя ставка доходности (**IRR**);
- индекс доходности (**PI**).

Все перечисленные показатели основываются на сопоставлении чистых денежных поступлений от операционной и инвестиционной деятельности, и их приведении к определенному моменту времени. Теоретически чистые денежные поступления можно приводить к любому моменту времени (к будущему либо текущему периоду). Но для практических целей оценку инвестиции удобнее осуществлять на момент принятия решений об инвестировании средств.

Чистая текущая стоимость (NPV)

Данный метод основан на сопоставлении дисконтированных чистых денежных поступлений от операционной и инвестиционной деятельности.

Если инвестиции носят разовый характер, то **NPV** определяется по формуле

$$NPV = \sum_{t=1}^n \frac{ЧДП_{опt}}{(1+i)^t} - I_0,$$

где $ЧДП_{опt}$ – чистые денежные поступления от операционной деятельности;

I_0 – разовые инвестиции, осуществляемые в нулевом году;

t – номер шага расчета ($t=0, 1, 2 \dots n$);

n – горизонт расчета;

i – ставка дисконтирования (желаемый уровень доходности инвестируемых средств).

Чистая текущая стоимость является абсолютным показателем. Условием экономичности инвестиционного проекта по данному показателю является выполнение следующего неравенства: $NPV > 0$.

Чем больше NPV , тем больше влияние инвестиционного проекта на экономический потенциал предприятия, реализующего данный проект, и на экономическую ценность этого предприятия.

Таким образом, инвестиционный проект считается выгодным, если NPV является положительной.

Таблица 4.18 - Расчет чистой текущей стоимости по проекту в целом

№	Наименование показателей	Шаг расчета				
		0	1	2	3	4
1.	Выручка от реализации, тыс.руб.	0	103,134	103,134	103,134	103,134
2.	Итого приток, тыс.руб.	0	103,134	103,134	103,134	103,134
3.	Инвестиционные издержки, тыс.руб.	-91,236	0	0	0	0
4.	Операционные затраты, тыс. руб. С+Ам+ФОТ	0	53,128	53,128	53,128	53,1284
5.	Налогооблагаемая прибыль		75,325	75,325	75,325	75,325
6.	Налоги, тыс. руб Выр-опер=донал.приб*20%	0	53,820	53,820	53,820	53,820
7.	Итого отток, тыс.руб. Опер.затр.+налоги	-91,236	76,875	76,875	76,875	76,875
8.	Чистый денежный поток, тыс. руб. ЧДП=Пчист+Ам Пчист=Пдонал.-налог	-91,236	62,223	62,223	62,223	62,223
9.	Коэффициент дисконтирования (приведения	1,0	0,885	0,797	0,608	0,588

		при $i = 20\%$				
1 0.	Дисконтированный чистый денежный поток, тыс.руб. (с8*с9)	-91,236	55,067	49,592	37,832	36,359
1 1.	То же нарастающим итогом, тыс.руб. ($NPV = 78,634$ тыс.руб.)	-91,236	-41,746	8,456	49,754	78,634

Таким образом, чистая текущая стоимость по проекту в целом составляет 78,634 тыс. рублей, что позволяет его эффективности.

Дисконтированный срок окупаемости

Как отмечалось ранее, одним из недостатков показателя простого срока окупаемости является игнорирование в процессе его расчета разной ценности денег во времени.

Этот недостаток устраняется путем определения дисконтированного срока окупаемости.

Рассчитывается данный показатель примерно по той же методике, что и простой срок окупаемости, с той лишь разницей, что последний не учитывает фактор времени.

Наиболее приемлемым методом установления дисконтированного срока окупаемости является расчет кумулятивного (нарастающим итогом) денежного потока (см. табл. 4.19).

таблица 4.19 – Дисконтированный срок окупаемости

№	Наименование показателя	Шаг расчета				
		0	1	2	3	4
1.	Дисконтированный чистый денежный поток ($i = 0,20$)	-91,236	55,067	49,592	37,832	36,359
2.	То же нарастающим итогом	-91,236	-41,746	8,456	49,754	78,634
3.	Дисконтированный срок окупаемости	$PP_{диск} = 1 + 41,746 / 49,592 = 0,86$ года				

Внутренняя ставка доходности (IRR)

Для установления показателя чистой текущей стоимости (NPV) необходимо располагать информацией о ставке дисконтирования, определение которой является проблемой, поскольку зависит от оценки экспертов. Поэтому, чтобы уменьшить субъективизм в оценке эффективности инвестиций на практике широкое распространение получил метод, основанный на расчете внутренней ставки доходности (IRR).

Между чистой текущей стоимостью (NPV) и ставкой дисконтирования (i) существует обратная зависимость. Эта зависимость следует из таблицы 4.20 и графика.

Таблица 4.20 - Зависимость NPV от ставки дисконтирования

No	Наименование показателя	0	1	2	3	4	
1	Чистые денежные потоки	-91,236	103,134	103,134	103,134	103,134	
2	коэффициент дисконтирования						
	$i=0,1$	1	0,909	0,826	0,751	0,683	
	$i=0,2$	1	0,833	0,694	0,578	0,482	
	$i=0,3$	1	0,769	0,592	0,455	0,35	
	$i=0,4$	1	0,714	0,51	0,364	0,26	
	$i=0,5$	1	0,667	0,444	0,295	0,198	
	$i=0,6$	1	0,625	0,39	0,244	0,095	
	$i=0,7$	1	0,588	0,335	0,203	0,07	
	$i=0,8$	1	0,556	0,309	0,171	0,095	
	$i=0,9$	1	0,526	0,277	0,146	0,077	
	$i=1$	1	0,5	0,25	3:00	0,006	

3	Дисконтированный денежный поток, тыс. руб						
	$i=0,1$	-91,236	72,887	66,232	60,218	54,766	177,807
	$i=0,2$	-91,236	66,793	55,648	46,346	38,649	131,14
	$i=0,3$	-91,236	61,661	47,469	36,484	28,064	97,382
	$i=0,4$	-91,236	57,251	40,894	29,187	20,848	71,884

	i=0,5	-91,236	53,483	35,602	23,654	15,876	52,319
	i=0,6	-91,236	50,115	31,272	19,565	7,617	32,273
	i=0,7	-91,236	47,148	26,862	16,277	5,613	19,604
	i=0,8	-91,236	44,582	24,777	13,711	7,617	14,391
	i=0,9	-91,236	42,177	22,211	11,707	6,174	5,973
	i=1	-91,236	40,092	20,046	10,023	0,481	-5,654

Из таблицы следует, что по мере роста ставки дисконтирования чистая текущая стоимость уменьшается, становясь отрицательной. Значение ставки, при которой NPV обращается в нуль, носит название «внутренней ставки доходности» или «внутренней нормы прибыли».

Индекс доходности (рентабельности) инвестиций (PI)

Индекс доходности показывает, сколько приходится дисконтированных денежных поступлений на рубль инвестиций.

Расчет этого показателя осуществляется по формуле

Расчет этого показателя осуществляется по формуле

$$PI = \sum_{t=1}^n \frac{ЧПД_t}{(1+i)^t} / I_0,$$

где I_0 – первоначальные инвестиции.

$$PI = \frac{55,067 + 49,592 + 37,832 + 36,359}{126,253} = 1,42$$

$PI=1,42>1$, следовательно, проект эффективен при $i=0,2$;

$NPV=168,68$ тыс. руб.

Социальная эффективность научного проекта учитывает социально-экономические последствия осуществления научного проекта для общества в целом или отдельных категорий населения или групп лиц, в том числе как непосредственные результаты проекта, так и «внешние» результаты в

смежных секторах экономики: социальные, экологические и иные внеэкономические эффекты.

Таблица 4.21 – Критерии социальной эффективности

ДО	ПОСЛЕ
Другие методы дороги	Дешевле и удобнее
Другие методы требуют времени	Быстро и легко работать. нет ограничений для образцов.
Пространственное разрешение других методов ниже	Высокое пространственное разрешение, около 3 мкм

4.4.2. Оценка сравнительной эффективности исследования

Интегральный показатель финансовой эффективности научного исследования получают в ходе оценки бюджета затрат трех (или более) вариантов исполнения научного исследования. Для этого наибольший интегральный показатель реализации технической задачи принимается за базу расчета (как знаменатель), с которым соотносится финансовые значения по всем вариантам исполнения.

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп}i} = \frac{\Phi_{ri}}{\Phi_{\text{max}}}, \quad (4.7)$$

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

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

Φ_{max} – максимальная стоимость исполнения научно-исследовательского проекта (в т.ч. аналоги).

Полученная величина интегрального финансового показателя разработки отражает соответствующее численное увеличение бюджета затрат разработки в размах (значение больше единицы), либо соответствующее численное удешевление стоимости разработки в размах (значение меньше единицы, но больше нуля).

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

$$I_{pi} = \sum a_i \cdot b_i, \quad (4.8)$$

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

a_i – весовой коэффициент i -го варианта исполнения разработки;

b_i^a, b_i^p – бальная оценка i -го варианта исполнения разработки,

устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания;

n – число параметров сравнения.

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности приведен в форме таблицы (табл. 4.22).

Таблица 4.22 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Критерии \ ПО	Весовой коэффициент параметра	Текущий проект	Аналог 1	Аналог 2
1. Способствует росту производительности труда пользователя	0,2	5	3	4
2. Удобство в эксплуатации (соответствует требованиям потребителей)	0,3	5	3	3
3. Помехоустойчивость	0,10	3	4	3
4. Энергосбережение	0,20	4	3	4
5. Надежность	0,10	3	4	4
6. Точность анализа	0,10	3	4	4
ИТОГО	1	23	21	22

$$I_{\phi}^p = \frac{\phi_i^p}{\phi_{\max}} = \frac{5}{23} = 0,22$$

$$I_{\phi}^a = \frac{\phi_i^a}{\phi_{\max}} = \frac{4}{21} = 0,19$$

$$I_T^p = 5*0,2 + 5*0,3 + 3*0,1 + 4*0,2 + 3*0,1 + 3*0,1 = 4,2$$

$$I_{T_1}^p = 3*0,2 + 3*0,3 + 4*0,1 + 3*0,2 + 4*0,1 + 4*0,1 = 3,3$$

$$I_{T_2}^p = 4*0,2 + 3*0,3 + 3*0,1 + 4*0,2 + 4*0,1 + 4*0,1 = 3,6$$

$$I_{\text{финр}}^p = \frac{I_T^p}{I_{\phi}^p} = \frac{4,2}{0,22} = 19,1$$

$$I_{\text{финр}}^a = \frac{I_T^a}{I_{\phi}^a} = \frac{3,3}{0,19} = 17,4$$

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{I_{\phi}^a}{I_{\phi}^p} = \frac{17,4}{19,1} = 0,92$$

Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Аналог	Разработка
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0.19	0.22
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	3.3	4,2
3	Интегральный показатель эффективности	17,4	19.1
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	0.92	1,10

Сравнение значений интегральных показателей эффективности позволяет судить о приемлемости существующего варианта решения поставленной в магистерской диссертации технической задачи с позиции финансовой и ресурсной эффективности.

В ходе проведения анализа показателей эффективности инвестиций была получена чистая текущая стоимость (NPV) – 78,634 тыс. руб. Таким образом, данный инвестиционный проект можно считать выгодным, NPV является положительной величиной. Дисконтированный срок окупаемости проекта (**PP_{дск}**) составляет 0.86 года. Внутренняя ставка доходности (IRR) – 0,90,

что позволяет признать инвестиционный проект экономически оправданным, так как выполняется условие неравенства $IRR > i$. Индекс доходности (PI) – 1,42, и, основываясь на том, что данная величина превышает единицу, можно утверждать, что данная инвестиция приемлема.

Сравнение значений интегральных показателей эффективности показало, что более эффективным вариантом решения поставленной в бакалаврской работе технической задачи с позиции финансовой и ресурсной эффективности является исполнение 3 - модифицирование плазмой атмосферного давления.

Список публикаций

- R.D. Rodriguez, Z. Khan, **В. Ма**, A. Mukherjee, P. Meszmer, J. Kalbacova, E. Garratt, H. Shah, J. Heilmann, A.R. Hight Walker, B. Wunderle, E. Sheremet, M. Hietschold, D.R.T. Zahn, Ion-Induced Defects in Graphite: A Combined Kelvin Probe and Raman Microscopy Investigation, *Physica Status Solidi (a)*. (2019) 1900055.
- **Ма, В.**; Rodriguez, R. D.; Ruban, A.; Pavlov, S.; Sheremet, E. The Correlation between Electrical Conductivity and Second-Order Raman Modes of Laser-Reduced Graphene Oxide. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2019**.
- Prakash, V.; Rodriguez, R. D.; Al-Hamry, A.; Lipovka, A.; Dorozhko, E.; Selyshchev, O.; **Ма, В.**; Sharma, S.; Mehta, S. K.; Dzhagan, V.; et al. Flexible Plasmonic Graphene Oxide/heterostructures for Dual-Channel Detection. *Analyst* **2019**.
- **Ма, В.**; Rodriguez, R. D.; Bogatova, E.; Ruban, A.; Turanov, S.; Valiev, D.; Sheremet, E. Non-Invasive Monitoring of Red Beet Development. *Spectrochim. Acta A Mol. Biomol. Spectrosc.* **2019**, 212, 155–159.
- Rodriguez, R. D.; **Ма, В.**; Sheremet, E. Raman Spectroscopy Investigation of Laser-Irradiated Single-Walled Carbon Nanotube Films. *physica status solidi (b)*, **2019**, 256, 1800412.