



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

Инженерная школа ядерных технологий

Направление подготовки 03.03.02 Физика

ООП/ОПОП Физика

Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА БАКАЛАВРА

Тема работы
Структурные и электронные свойства многослойного углерода R4/mmm в нормальном состоянии

УДК: 661.66:537:544.16

Обучающийся

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б91	Ли Цзыхань		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОЭФ	Чистякова Н.В.	к.ф.-м.н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН ШБИП	Верховская Н.В.	к.э.н, доцент		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Сечин. А.И.	д.т.н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП/ОПОП, должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Заведующий кафедрой - руководитель отделения на правах кафедры	Лидер А.М.	д.т.н., профессор		

Томск – 2023 г.

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОСВОЕНИЯ ООП/ОПОП

Код компетенции	Наименование компетенции
Универсальные компетенции	
УК(У)-1	Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач.
УК(У)-2	Способен определять круг задач в рамках поставленной цели и выбирать оптимальные способы их решения, исходя из действующих правовых норм, имеющихся ресурсов и ограничений.
УК(У)-3	Способен осуществлять социальное взаимодействие и реализовать свою роль в команде.
УК(У)-4	Способен осуществлять деловую коммуникацию в устной и письменной формах на государственном и иностранном (-ых) языке.
УК(У)-5	Способен воспринимать межкультурное разнообразие общества в социально-историческом, этическом и философском контекстах.
УК(У)-6	Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни.
УК(У)-7	Способен поддерживать должный уровень физической подготовленности для обеспечения полноценной социальной и профессиональной деятельности.
УК(У)-8	Способен создавать и поддерживать безопасные условия жизнедеятельности, в том числе при возникновении чрезвычайных ситуаций.
УК(У)-9	Способен проявлять предприимчивость в профессиональной деятельности, в т.ч. в рамках разработки коммерчески перспективного продукта на основе научно-технической идеи.
Общепрофессиональные компетенции	
ОПК(У)-1	Способен применять естественно-научные и общеинженерные знания, методы математического анализа и моделирования в инженерной деятельности, связанной с проектированием и конструированием, технологиями производства оптоэлектроники, оптических и оптико-электронных приборов и комплексов
ОПК(У)-2	Способен осуществлять профессиональную деятельность с учетом экономических, экологических, интеллектуально правовых, социальных и других ограничений на всех этапах жизненного цикла технических объектов и процессов
ОПК(У)-3	Способен использовать базовые теоретические знания фундаментальных разделов общей и теоретической физики для решения профессиональных задач.
ОПК(У)-4	Способен понимать сущность и значение информации в развитии современного общества, осознавать опасность и угрозу, возникающие в этом процессе, соблюдать основные требования информационной безопасности.
ОПК(У)-5	Способен использовать основные методы, способы и средства получения, хранения, переработки информации и навыки работы с компьютером как со средством управления информацией.
ОПК(У)-6	Способен решать стандартные задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и с учетом основных требований информационной безопасности.
ОПК(У)-7	Способен использовать в своей профессиональной деятельности знание иностранного языка.

ОПК(У)-8	Способен критически переосмысливать накопленный опыт, изменять при необходимости направление своей деятельности.
ОПК(У)-9	Способен получить организационно-управленческие навыки при работе в научных группах и других малых коллективах исполнителей.
Профессиональные компетенции	
ПК(У)-1	Способностью использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин
ПК(У)-2	Способностью проводить научные исследования в избранной области экспериментальных и (или) теоретических физических исследований с помощью современной приборной базы (в том числе сложного физического оборудования) и информационных технологий с учетом отечественного и зарубежного опыта
ПК(У)-3	Готовность применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований
ПК(У)-4	Способность применять на практике профессиональные знания и умения, полученные при освоении профильных физических дисциплин
ПК(У)-5	Способность пользоваться современными методами обработки, анализа и синтеза физической информации в избранной области физических исследований
ПК(У)-6	Способность понимать и использовать на практике теоретические основы организации и планирования физических исследований
ПК(У)-7	Способность участвовать в подготовке и составлении научной документации по установленной форме
ПК(У)-8	Способность понимать и применять на практике методы управления в сфере природопользования



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

Школа Инженерная школа ядерных технологий

Направление подготовки (ООП/ОПОП) 03.03.02 Физика

Отделение школы (НОЦ) отделение экспериментальной физики

УТВЕРЖДАЮ:

Руководитель ООП/ОПОП

_____ Лидер А.М.

(Подпись) (Дата)

ЗАДАНИЕ

на выполнение выпускной квалификационной работы

Обучающийся:

Группа	ФИО
150Б91	Ли Цзыхань

Тема работы:

Структурные и электронные свойства многослойного углерода P4/mmm в нормальном состоянии	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	31.01.2023, 31-7/с

Срок сдачи обучающимся выполненной работы:	
--	--

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе (наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к функционированию (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.)	Объектом исследования симметричный многослойный углерод.
Перечень разделов пояснительной записки подлежащих исследованию, проектированию и разработке (аналитический обзор литературных источников с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе)	● Аналитический обзор литературы по однослойным и многослойным углеродным структурам ● Обзор первых принципов и методов прогнозирования двумерных структур CALYPSO ● Выполнение расчетов: проверка структуры и свойств симметричного многослойного углерода ● Анализ полученных результатов Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и

	ресурсосбережение. ● Социальная ответственность
Перечень графического материала <i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i>	
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы <i>(с указанием разделов)</i>	
Раздел	Консультант

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

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОЭФ	Чистякова Н.В.	к.ф.-м.н.		

Задание принял к исполнению обучающийся:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б91	Ли Цзыхань		

Школа Инженерная школа ядерных технологий

Направление подготовки (ООП/ОПОП) 03.03.02 Физика

Уровень образования бакалавриат

Отделение школы (НОЦ) отделение экспериментальной физики

Период выполнения _____ (осенний / весенний семестр 2022/2023 учебного года)

КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН выполнения выпускной квалификационной работы

Обучающийся:

Группа	ФИО
150Б91	Ли Цзыхань

Тема работы:

Структурные и электронные свойства многослойного углерода P4/mmm в нормальном состоянии

Срок сдачи обучающимся выполненной работы:	
--	--

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
01.11.2022	Литературный обзор	15
30.04.2023	Методы исследования	5
01.06.2023	Результаты экспериментальных исследований. Обработка результатов.	50
01.06.2023	Финансовый менеджмент, ресурс эффективность и ресурсосбережение	15
01.06.2023	Социальная ответственность	15

СОСТАВИЛ:

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОЭФ	Чистякова Н.В.	к.ф.-м.н.		

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП/ОПОП

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Заведующий кафедрой - руководитель отделения на правах кафедры	Лидер А.М.	д.т.н., профессор		

Обучающийся

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б91	Ли Цзыхань		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 106 с., 13 рис., 18 табл., 102 источников литературы.

Ключевые слова: расчеты по первым принципам, новые углеродные материалы, симметрии.

Объектом исследования является симметричный многослойный углерод.

Цель работы – поиск новых устойчивых углеродных структур с помощью метода CALYPSO и исследование их свойств.

Для достижения цели были поставлены следующие задачи:

1.Получение энергетически стабильной углеродной структуры методом CALYPSO

2.Фононный анализ структуры

3.Исследование термической стабильности структуры

4.Исследование электронных свойств

5.Исследование оптических свойств

В данной диссертации на основе кристаллической структуры двумерного углерода методом предсказания кристаллической структуры CALYPSO была обнаружена симметричная полиэдрическая, энергетически стабильная структура углерода с пространственной группой $P4/mmm$, состоящая из 38 атомов, 46 связей и 12 полиэдров. Было показано, что данный материал обладает стабильностью, является проводником и имеет перспективные оптические свойства.

Область применения: результаты исследований могут быть использованы для определения целесообразности и потенциальной эффективности в области оптоэлектронных устройств.

Значимость работы заключается в улучшении понимания многослойных углеродных структур.

Оглавление

Введение.....	10
Глава 1 Литературный обзор	11
1.1. Современное состояние исследований монослойных углеродных структур.....	11
1.1.1. Синтез и свойства монослойных углеродных структур.....	11
1.1.2. Прогнозирование монослойных углеродных структур.....	15
1.1.3. Применение монослойных углеродных структур.....	17
1.2. Текущее состояние исследований многослойных углеродных структур	18
1.2.1. Общие примеры многослойных углеродных структур	18
1.2.2. Прогнозирование многослойных углеродных структур	23
Глава 2 Обзор квантово-механических вычислительных методов	34
2.1. Аппроксимация с жестким связыванием.....	35
2.2. Первые принципы	36
2.2.1. Теория функционала плотности	36
2.3. Фононы и замороженные фононы.....	40
2.4. Метод прогнозирования двумерной структуры CALYPSO	40
Глава 3 Структурные и свойства $P4/mmm$ симметричного многослойного углерода	44
3.1. Вычислительные методы.....	44
3.2. Результаты расчетов и обсуждение	45
3.2.1. Структурные особенности	45
3.2.2. Стабильность структуры	46
3.2.3. Электронные свойства	47
3.2.4. Оптические свойства	48
Глава 4 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	52
4.1 Потенциальные потребители результатов исследования	52
4.2 SWOT-анализ	55

4.3	Определение возможных альтернатив проведения научных исследований	55
4.4	Планирование научно-исследовательских работ	56
4.4.1	Структура работ в рамках научного исследования	56
4.4.2	Определение трудоемкости выполнения работ.....	57
4.5	Бюджет научно-технического исследования (НТИ)	62
4.5.1	Расчет материальных затрат НТИ	62
4.5.2	Расчет затрат на оборудование для научно-экспериментальных работ.....	63
4.5.3	Основная заработная плата исполнителей темы.....	64
4.5.4	Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)	66
4.5.5	Накладные расходы.....	68
4.5.6	Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта.....	68
4.6	Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	69
Глава 5	Социальная ответственность	75
5.1.	Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	75
5.1.1.	Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя) правовые нормы трудового законодательства.....	75
5.1.2.	Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя.....	76
5.2.	Производственная безопасность.....	76
5.2.1.	Анализ опасных и вредных производственных факторов	78
5.3	Экологическая безопасность.....	87
5.4	Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....	89
	Заключение.....	93
	Список литературы	95

Введение

Углерод является одним из самых распространенных элементов в природе и наиболее тесно связан с производством и жизнью человека. Поиск новых трехмерных углеродных структур и изучение их физических свойств представляют собой важные темы в физике конденсированных сред и материаловедении. Для физических исследований атом углерода является очень простым и чистым элементом благодаря наличию всего четырех валентных электронов во внешнем слое, что делает его идеальной платформой для изучения различных физических явлений. В то же время атомы углерода обладают высокой способностью к образованию связей и могут образовывать самые разнообразные изомеры с неограниченными возможностями.

С развитием информатики и увеличением вычислительных мощностей теоретические и экспериментальные исследования многослойного углерода получили бурное развитие в последние годы и стали одной из самых горячих областей в физике конденсированного состояния вещества и материаловедении.

Цель работы – поиск новых устойчивых углеродных структур с помощью метода CALYPSO и исследование их свойств.

Для достижения цели были поставлены следующие задачи:

- 1.Получение энергетически стабильной углеродной структуры методом CALYPSO
- 2.Фононный анализ структуры
- 3.Исследование термической стабильности структуры
- 4.Исследование электронных свойств
- 5.Исследование оптических свойств

Глава 1 Литературный обзор

Будучи неотъемлемой частью природы, углерод, вероятно, является элементом, наиболее тесно связанным с человеческой жизнью, и сыграл неоценимую роль в истории развития человечества. Атомы углерода обычно четырехвалентны, с четырьмя валентными электронами во внешнем слое, поэтому связь всегда включает процесс гибридизации, наиболее распространенной формой гибридизации является орбитальная гибридизация SP^3 , в дополнение к SP^2 и SP , которые могут образовывать одинарные связи $C-C$, двойные связи $C=C$ и тройные связи $C\equiv C$ соответственно. Именно электронная структура атома углерода и широкое разнообразие режимов связи приводят к богатому разнообразию форм углерода. Двумя наиболее известными изомерами углерода являются монослойные углеродные структуры (например, графен) и многослойные углеродные структуры (графит, углеродные нанотрубки, фуллерены и т.д.).

1.1. Современное состояние исследований монослойных углеродных структур

Однослойная углеродная структура, такая как графен, представляет собой двумерный (2D) материал, состоящий из одного слоя атомов углерода, расположенных в виде гексагональной решетки или сотовой структуры. Эта структура также известна как графен. Графен является основным строительным блоком для других форм углерода, включая графит и фуллерены. Графен - очень тонкий материал, толщиной всего в один атом, обладающий уникальными свойствами, такими как высокая электропроводность, механическая прочность и теплопроводность, что делает его пригодным для широкого спектра применений, таких как электроника, хранение энергии и датчики.

1.1.1. Синтез и свойства монослойных углеродных структур

Первоначально в 2004 году Андре Гейм и Константин Новоселов, оба ученые из Манчестерского университета (Великобритания), провели эксперименты по механическому отшелушиванию тонких графитовых хлопьев непосредственно из высокоориентированного пиролитического графита и наблюдали монослой

графена. Группа Гейма успешно подготовила и наблюдала морфологию квазидвумерного графена, раскрыв причину его двумерной кристаллической структуры. Эти двое ученых были удостоены Нобелевской премии по физике в 2010 году за их новаторские исследования в области графена.[1] Этот метод называется механической эксфолиацией. Проще говоря, он осуществляется путем наклеивания графитовой чешуйки на кусок ленты, затем складывания липкой стороны и разрывания ленты, таким образом разделяя графитовую чешуйку на две части. Повторяя этот процесс снова и снова, чешуйка будет разрываться и отслаиваться все тоньше и тоньше, и в конечном итоге можно получить одноатомный или многоатомный слой графена.

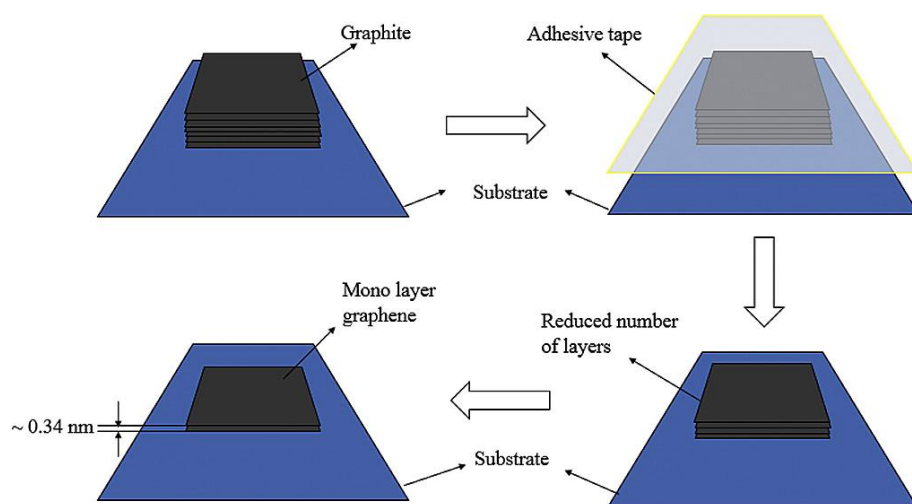


Рисунок 1 - Получение графена методом механического отшелушивания [2].

Для синтеза графена были разработаны различные методы, включая химическое осаждение из паровой фазы (CVD), окисление-восстановление, поверхностный или эпитаксиальный рост и отшелушивание растворителем. Среди них химическое осаждение из паровой фазы (CVD) является одним из наиболее широко используемых методов получения графена в больших масштабах. CVD может производить высококачественные монослойные углеродные структуры с контролируемым размером, формой и ориентацией. Графен получают методом CVD, который предполагает использование углеродсодержащего прекурсора, который разлагается в трубчатой печи при определенной температуре и осаждается на каталитическую подложку, в конечном итоге образуя графен. Это восходящий метод получения графена,

который зависит от размера и формы объемного графита и может варьировать количество слоев, форму и размер готового графена путем изменения типа прекурсора, температуры разложения, типа подложки, скорости подачи углерода и т.д. по мере необходимости. Механизм роста можно разделить на два основных типа (показаны на рис.2): (а) механизм науглероживания и осаждения углерода: для металлических подложек с высоким содержанием растворенного углерода, таких как никель, атомы углерода, образующиеся при крекинге источника углерода, проникают в металлическую подложку при высокой температуре, а затем осаждаются из внутренних зародышей при охлаждении, таким образом, превращаясь в графен; (б) механизм поверхностного роста: для металлических подложек с низким содержанием растворенного углерода, таких как медь, атомы углерода, образующиеся при крекинге газообразного источника углерода при высокой температуре. (б) механизм роста поверхности: для металлических подложек с низким содержанием растворенного углерода, атомы углерода, образующиеся при расщеплении газообразного источника углерода при высокой температуре, адсорбируются на поверхности металла, зарождаются в графеновые островки и объединяются для получения непрерывных графеновых пленок путем двумерного роста графеновых островков.

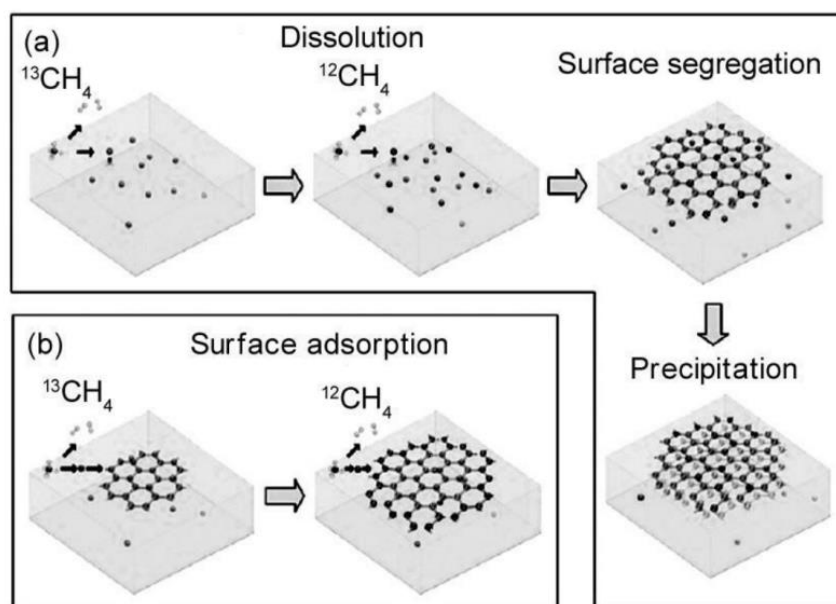


Рисунок 2 - Схематическая диаграмма (а) механизма науглероживания и (б) поверхностного роста графена методом CVD [3].

Используя этот метод, несколько групп сообщили об успешном синтезе высококачественного графена с помощью этой техники [4]. Группа Юньци Лю из Института химии Китайской академии наук использовала хорошую подвижность и однородность жидкой меди для устранения границ зерен получаемого графена и приготовила высококачественные монослойные графеновые пленки с большой площадью. Контролируя параметры роста и температуру эксперимента, удалось получить регулярное расположение гексагональных графеновых листов, а размер одного регулярного гексагонального графена может достигать более 100 микрон.

Графен обладает исключительными механическими свойствами благодаря сильной ковалентной связи и высокому соотношению сторон. Например, Ли и др. исследовали механические свойства графена при растяжении и сжатии с помощью моделирования молекулярной динамики и обнаружили, что графен обладает прочностью на растяжение до 130 ГПа и модулем Юнга до 1 ТПа [5]. Графен обладает превосходными электрическими свойствами, что делает его перспективным кандидатом для электронных и других применений. Например, Ся и др. изготовили графеновые полевые транзисторы (GFET) с высокой подвижностью носителей и низким контактным сопротивлением методом CVD и сообщили о рекордной собственной подвижности носителей до 200 000 см²/Вс [6]. Графен обладает превосходными тепловыми свойствами благодаря высокой теплопроводности и низкому коэффициенту теплового расширения. Например, Баландин и др. измерили теплопроводность графена методом рамановской спектроскопии и обнаружили, что теплопроводность графена может достигать 5300 Вт/мК при комнатной температуре [7]. Графен обладает уникальными оптическими свойствами, такими как высокая оптическая прозрачность, сильное поглощение света и отличные нелинейные оптические свойства. Например, Чжан и др. синтезировали пленки оксида графена (GO) простым методом на основе раствора и продемонстрировали их высокие нелинейные оптические свойства [8]. Ванг и др. синтезировали высокофлуоресцентные графеновые квантовые точки (GQDs) простым гидротермальным методом и продемонстрировали их превосходные оптические свойства, такие как высокий квантовый выход

фотолюминесценции и исключительная стабильность [9].

1.1.2. Прогнозирование монослойных углеродных структур

За последнее десятилетие исследователи предсказали и синтезировали новые монослойные углеродные структуры с уникальными свойствами и потенциальными применениями. К таким структурам относятся, в частности, углеродные наноллисты, углеродные наноленты, углеродные нанотрубки со специальной структурой и двумерные ковалентные органические каркасы.

Углеродные наноллисты - это двумерные углеродные структуры толщиной от нескольких нанометров до десятков нанометров и поперечными размерами до нескольких микрометров. Они имеют структуру, схожую с графеном, но обладают дополнительными свойствами, такими как контролируемая краевая структура, высокая удельная площадь поверхности и настраиваемые электронные свойства. Углеродные наноллисты имеют потенциальное применение в различных областях, таких как хранение энергии, катализ и электроника. Примером углеродного наноллиста является так называемый графен - двумерный изотоп углерода, состоящий из бензольного кольца и ацетиленовой связи. Благодаря гибридизации $sp-sp^2$ графен обладает уникальными электронными и оптическими свойствами, такими как перестраиваемая полоса пропускания и высокая подвижность носителей. Графеновые наноллисты были синтезированы Вангом и др. с помощью реакции окислительного присоединения и продемонстрировали свое потенциальное применение в электрокатализе [10]. Углеродные нанонити (УНН) представляют собой одномерные углеродные структуры шириной несколько нанометров и длиной до нескольких микрометров. Они обладают перестраиваемыми электронными свойствами, такими как зазоры и краевые состояния, в зависимости от их ширины и краевой структуры. УНН имеют потенциальное применение в электронике, фотонике и преобразовании энергии. Примером УНН являются так называемые шевронные графеновые нанонити (CGNRs), которые имеют зигзагообразную краевую структуру. CGNRs имеют перестраиваемые зазоры и магнитные свойства, что делает их перспективными кандидатами для спиновых элементов. Liu и др. синтезировали

CGNRs методом поверхностно-активированной полимеризации и продемонстрировали их потенциальное применение в наноэлектронике и спинтронике [11].

Карбиновые цепи (CGNRs) представляют собой одномерные углеродные структуры с особыми механическими и электронными свойствами. Предсказано, что карбиновые цепи являются новым типом карбиновой структуры, состоящей из ряда соединенных атомов углерода с чередующимися тройными и одинарными связями. Теоретическая прочность на разрыв цепей на основе карбина выше, чем у алмаза, а модуль Юнга выше, чем у графена. В 2016 году группа исследователей из Университета Цинхуа в Китае впервые предсказала синтез цепей на основе карбина. В своих экспериментах исследователи использовали комбинацию теоретических расчетов и моделирования молекулярной динамики для предсказания стабильности и механических свойств карбиновых цепей. Исследователи также предложили метод синтеза карбиновых цепей путем растяжения графеновых нанолент. [12] Однако экспериментальный синтез цепей на основе карбина пока не достигнут. Примером экзотических углеродных нанотрубок являются так называемые одностенные спиральные углеродные нанотрубки (SWHCNTs), которые имеют спиральную структуру вдоль своей оси. SWHCNTs имеют перестраиваемые зазоры и хиральность, что делает их перспективными кандидатами для оптоэлектроники и спинтроники. Zhou и др. предсказали SWHCNTs с помощью первопринципных расчетов и продемонстрировали их уникальные электронные и оптические свойства [13]. Двумерные ковалентные органические каркасы (КОФ) представляют собой пористые и кристаллические углеродные структуры с регулируемым размером пор и химическими свойствами. Они имеют потенциальное применение в хранении газа, катализе и электронике. Двумерные органические каркасы могут быть синтезированы из органических строительных блоков по принципу "снизу вверх", что приводит к образованию высокоупорядоченных кристаллических структур. Примером двумерных КОФ являются так называемые имин-связанные КОФ (IL-COF), которые имеют

гексагональную структуру пор и высокую термическую стабильность. IL-COF потенциально могут применяться для разделения и хранения газа. Zhang и др. синтезировали IL-COF простой однорезервуарной реакцией и продемонстрировали их потенциальное применение для улавливания CO₂ [14].

1.1.3. Применение монослойных углеродных структур

Монослойные углеродные структуры имеют широкий спектр применения благодаря своим особым свойствам. Например, Ву и др. синтезировали наночастицы платины на основе графена и продемонстрировали их превосходные каталитические свойства для окисления метанола [15]. Чжан и др. синтезировали композиты на основе графена и продемонстрировали их превосходные свойства экранирования электромагнитных помех [16]. Для хранения и преобразования энергии Ли и др. синтезировали легированный азотом графен с высокой удельной емкостью для суперконденсаторов [17]. Ван и др. синтезировали гибридный материал на основе графена для высокопроизводительных литий-ионных батарей [18]. Ю и др. синтезировали высокоактивный графеновый катализатор для окисления метанола [19]. Для биомедицинского применения Чжан и др. синтезировали систему доставки лекарств на основе оксида графена для лечения рака [20]. Для экологического применения Ю и др. синтезировали композит на основе графена для эффективного удаления ионов тяжелых металлов [21].

Несмотря на то, что монослойные углеродные структуры демонстрируют большой потенциал для различных применений, существует еще много проблем, которые необходимо решить. Одной из самых больших проблем, стоящих перед графеном, является стоимость производства, которая остается относительно высокой по сравнению с другими материалами. Для того чтобы сделать продукты на основе графена более доступными и недорогими, необходимо разработать новые методы производства. Существуют также опасения по поводу безопасности и воздействия графена на окружающую среду. Хотя графен в целом считается безопасным, все же необходимы дальнейшие исследования, чтобы понять его потенциальную токсичность и воздействие на окружающую среду.

Это важно для обеспечения безопасности и устойчивости продуктов на основе графена.

1.2. Текущее состояние исследований многослойных углеродных структур

Многослойная углеродная структура (МУС) - это семейство углеродных материалов, состоящих из нескольких слоев графена или других графитовых изомеров углерода. Многослойные углеродные структуры можно описать как класс углеродных материалов, состоящих из ряда графитовых слоев толщиной от нескольких нанометров до нескольких микрометров, сложенных вместе как сэндвич. Эти графитовые слои могут быть однослойным графеном, несколькими слоями графена или другими изомерами графит-углерода, такими как углеродные нанотрубки (CNTs), углеродные нановолокна (CNFs), углеродные нанорожки (CNHs) и оксид графита.

Примером многослойной углеродной структуры является графит, который состоит из нескольких параллельно расположенных графеновых слоев, уложенных друг на друга. Каждый графеновый слой в графите слабо связан с соседними слоями ван-дер-ваальсовыми силами. Графит обладает уникальными свойствами, такими как хорошая электропроводность, высокая термическая стабильность и смазывающая способность, что делает его полезным в различных областях применения, таких как батареи, топливные элементы и замедлитель в ядерных реакторах. Другие примеры многослойных углеродных структур включают углеродные нанотрубки и фуллерены. Углеродные нанотрубки - это цилиндрические структуры, состоящие из нескольких слоев графеновых листов, расположенных в форме трубки, а фуллерены - это сферические структуры, состоящие из нескольких атомов углерода, расположенных в виде замкнутой клетки. Эти многослойные углеродные структуры обладают уникальными свойствами, которые делают их полезными в различных областях применения, таких как электроника, хранение энергии, сенсоры и системы доставки лекарств.

1.2.1. Общие примеры многослойных углеродных структур

Графит - это трехмерная форма углерода, состоящая из нескольких слоев графена, уложенных друг на друга. Структура графита была изучена Берналом

(J.D.) в Англии с помощью рентгеновской дифракции, и он предложил структуру идеального графита, также известную как структура Бернала, в 1924 году. Графит относится к структуре гексагональной кристаллической системы, как показано на рисунке 3. Первый слой гексагональной решетки из атомов углерода укладывается параллельно второму слою путем смещения диагонали гексагона на $1/2$, а третий и первый слои повторяются в последовательности ABAB В графите такая регулярная укладка слоев углеродной решетки и взаимосвязь между слоями часто называется графитовой связью. Расстояние А-А от первого слоя до третьего слоя - это направленное расстояние C_0 графитовой ячейки, часто обозначаемое как D_{00} . При комнатной температуре $C_0 = 6,708 \text{ \AA}$, а расстояние А-В между слоями составляет $3,354 \text{ \AA}$. Множество взаимосвязанных равнобедренных параллелограммов очерчены на слоях точечной решеткой из атомов углерода с длиной стороны $2,4612 \text{ \AA}$. [22] Эти слои удерживаются вместе слабыми ван-дер-ваальсовыми силами, позволяющими слоям легко скользить друг по другу, что придает графиту характерную скользкость. Графит обладает превосходной тепло- и электропроводностью и широко используется в качестве смазочного материала, материала для электродов и конструкционного материала.

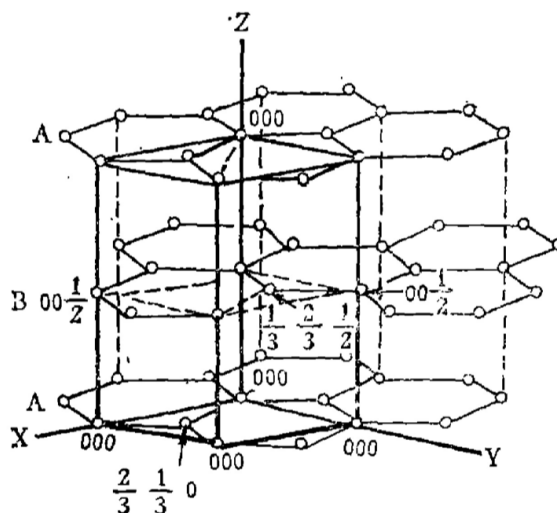


Рисунок 3 - Кристаллическая структура графита в гексагональной кристаллической системе

Углеродные нанотрубки (УНТ) - это цилиндрические структуры, изготовленные из листов графена, свернутых в трубки. Многостенные углеродные нанотрубки состоят из нескольких концентрических графеновых

слоев, а одностенные - из одного слоя. УНТ обладают уникальными механическими, тепловыми и электрическими свойствами, которые делают их пригодными для различных применений, таких как электроника, датчики и хранение энергии. Открытие одностенных углеродных нанотрубок стало большим прогрессом в исследовании углеродных нанотрубок, так как они были целенаправленно получены учеными и имеют более желательные нанотрубочные структуры и свойства. 1994 год, Т. Гао и др. получили одностенные углеродные нанотрубки путем лазерного облучения углеродной мишени, содержащей никель и кобальт [23]. 1997 год, К. Журне использовал никель в качестве катализатора для получения никеля. В 1997 году К. Журне получил одностенные углеродные нанотрубки с высоким выходом, постоянно перемещая анод в процессе разряда, чтобы поддерживать расстояние между электродами постоянным, позволяя аноду испаряться при постоянном токе [24]. Эффективное получение углеродных нанотрубок является одним из наиболее сложных экспериментальных исследований, и технологический уровень, позволяющий эффективно контролировать рост углеродных нанотрубок, еще не достигнут. В настоящее время основными методами получения углеродных нанотрубок являются метод электрической дуги [25], метод лазерного испарения и метод химического осаждения из паровой фазы (CVD) [26]. Каждый метод имеет свои преимущества и недостатки. Метод CVD подходит для промышленного массового производства из-за его низкой стоимости и высокого выхода, но он имеет больше дефектов и более подвержен деформации. Метод лазерного испарения не подходит для получения многостенных углеродных нанотрубок, но качество полученных одностенных углеродных нанотрубок хорошее и широко используется в физических измерениях одностенных углеродных нанотрубок.

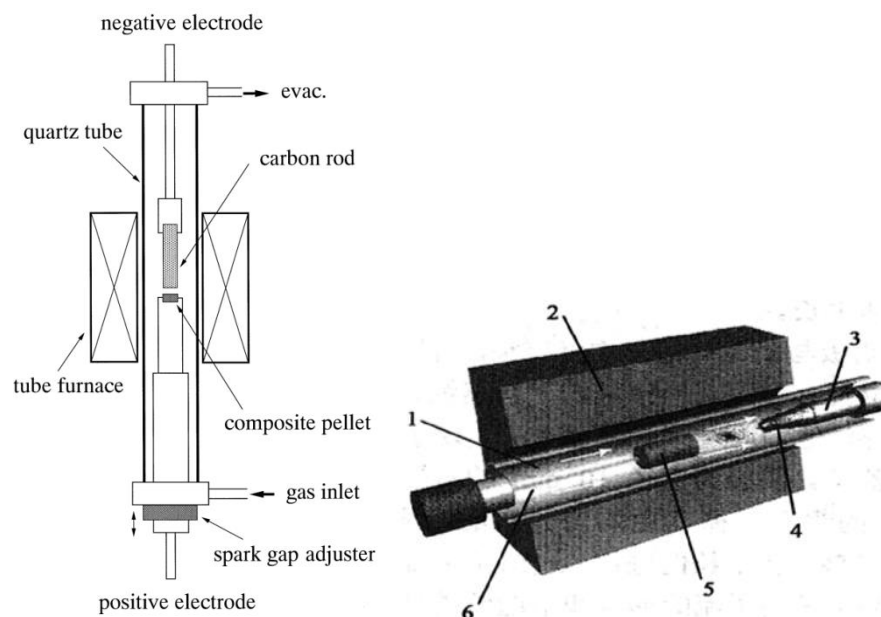


Рисунок 4 - Схема аппарата высокотемпературного дугового испарения для синтеза одностенных углеродных нанотрубок [27] и эскиз оборудования для получения углеродных нанотрубок методом лазерного испарения [28](1-газ аргон;2-электропечь;3-водоохлаждаемый медный коллектор;4-продукт нанотрубки;5-графитовая мишень;6-лазер).

Фуллерены представляют собой трехмерную структуру диаметром около 1 нанометра, что делает их одними из самых маленьких молекул в природе. Фуллерены - это полые структуры, похожие на клетку, состоящие из атомов углерода. Они могут иметь сферическую, эллипсоидную или трубчатую форму и содержать различное количество атомов углерода. Когда фуллерены состоят из сферических молекул, известных как C_{60} , их структура состоит из 60 атомов углерода, расположенных в усеченной икосаэдрической форме, похожей на футбольный мяч. C_{60} - относительно наиболее доступный, легко очищаемый и дешевый тип фуллерена, поэтому C_{60} и его производные являются наиболее изученными и применяемыми фуллеренами. Фуллерены были впервые открыты в 1985 году группой ученых из Университета Райса под руководством Ричарда Смолли, которые разработали метод получения молекулы в больших количествах. С тех пор было разработано несколько методов получения фуллеренов, включая 1) Метод дугового разряда: Метод дугового разряда является наиболее распространенным методом, используемым для получения фуллеренов. В этом

методе графитовый стержень помещается в вакуумную камеру и подключается к источнику питания. Затем через графит пропускают электрическую дугу, испаря атомы углерода и образуя кластеры фуллеренов. Затем эти агломераты собирают и очищают с помощью различных методов, таких как высокоэффективная жидкостная хроматография (ВЭЖХ).2) Лазерное испарение: Лазерное испарение - еще один метод, используемый для получения фуллеренов. В этом методе лазерный луч направляется на графитовую мишень в вакуумной камере, испаря атомы углерода и образуя кластеры фуллеренов. Затем эти кластеры собирают и очищают с помощью различных методов.3) Химический синтез: Химический синтез включает в себя реакцию углеродсодержащих соединений с другими химическими веществами с образованием фуллеренов. Примером такого метода является использование бензольных колец в качестве исходного материала, которые затем вступают в реакцию с другими химическими веществами с образованием фуллеренов.

Углеродные волокна состоят из длинных тонких цепочек атомов углерода, расположенных в кристаллической структуре. Эти цепочки известны как графен и расположены в виде гексагональной решетки. Прочность и жесткость углеродных волокон обусловлена ориентацией графена. Углеродные волокна обычно выровнены в определенном направлении, что придает им высокую прочность и жесткость. Когда волокна нагружаются в том направлении, в котором они расположены, они сопротивляются деформации и сохраняют свою форму. Однако при нагрузке в разных направлениях они могут иметь меньшую прочность и жесткость. Углеродные волокна обычно используются в композитах для придания материалам высокой прочности на разрыв и жесткости, т.е. превосходных механических свойств, что делает их пригодными для различных областей применения, таких как аэрокосмическая промышленность, автомобилестроение и спортивное оборудование. Подготовка углеродных волокон включает в себя выбор материала-прекурсора, прядение волокон, стабилизацию и карбонизацию.1) Выбор прекурсора: Первым шагом в подготовке углеродных волокон является выбор подходящего материала-

прекурсора. Материал-прекурсор должен содержать высокий процент углерода, обычно более 90%. Обычные материалы-прекурсоры включают полиакрилонитрил (ПАН), искусственные волокна и битум.2) Прядение волокон: После выбора материала-прекурсора его прядут в волокна. Обычно этот процесс включает растворение материала-предшественника в растворителе и выдавливание его через небольшое отверстие для формирования волокна. Волокна можно прядь с помощью различных методов, включая прядение из расплава, мокрое прядение и сухое прядение.3) Стабилизация: После прядения волокна необходимо стабилизировать. Стабилизация включает в себя нагревание волокон в богатой кислородом среде для их окисления. Этот процесс сшивает полимерные цепи и образует сеть из атомов углерода, которая более устойчива к термической деградации.4) Карбонизация: Последним этапом подготовки углеродных волокон является карбонизация. Этот процесс включает в себя нагревание стабильных волокон до высоких температур в отсутствие кислорода, обычно от 1000°C до 3000°C. При нагревании волокна атомы углерода в нем перестраиваются в более упорядоченную кристаллическую структуру. Этот процесс увеличивает прочность и жесткость волокон и устраняет все оставшиеся неуглеродные атомы, такие как кислород и азот.

1.2.2. Прогнозирование многослойных углеродных структур

За последнее десятилетие исследователи предсказали и синтезировали несколько новых многослойных углеродных структур с уникальными свойствами.

Углеродные наномосты (УНМ) - это углеродные наноструктуры, состоящие из двух графеновых листов, соединенных углеродными нанонитями. УНМ обладают уникальными электронными свойствами, такими как возможность контролировать перенос электронов через область мостика путем подачи напряжения на затвор. В 2014 году исследователи из Калифорнийского университета в Беркли и Национальной лаборатории Лоуренса Беркли впервые предсказали синтез УНМ. В своих экспериментах исследователи использовали сочетание химического осаждения из паровой фазы и электронно-лучевой

литографии для синтеза CNBs. Затем CNBs были охарактеризованы с помощью сканирующей электронной микроскопии и рамановской спектроскопии. Результаты показали, что синтезированные СНБ имели ширину около 50 нм и длину несколько микрометров. [29]

Двухслойные графеновые нанослои (БГНМ) - это новая графеновая структура, состоящая из двух графеновых слоев и периодически узорчатой решетки нанопор. Нанопоры в БГНМ расположены в виде сотовой решетки субнанометрового диаметра. Благодаря периодической решетке нанопор, BGNM обладают уникальными электронными и оптическими свойствами, которые можно регулировать, изменяя размер и расстояние между отверстиями. В 2016 году группа исследователей из Института исследования полимеров Макса Планка в Германии впервые сообщила о синтезе BGNM. В своих экспериментах исследователи использовали сочетание электронно-лучевой литографии и плазменного травления для создания рисунка графеновых бислоев с периодическими массивами нанопор. После этого BGNMs были охарактеризованы с помощью сканирующей электронной микроскопии, атомно-силовой микроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния света. Результаты показали, что синтезированные BGNM имеют субнанометровые размеры пор и периодичность в несколько нанометров. [30]

Алмазоподобные углеродные нанотрубки (DLCNT) - это новый тип углеродных нанотрубок, состоящих из sp^3 гибридизированных атомов углерода, расположенных в алмазоподобной решетке. DLCNT обладают уникальными механическими и электронными свойствами благодаря своей sp^3 гибридации, которая обеспечивает высокую степень механической стабильности и электропроводности. DLCNT имеют потенциальное применение в нанoeлектронике, наномеханике и биомедицине. В 2018 г. Группа исследователей из Университета науки и технологий Китая впервые сообщила о синтезе DLCNTs. В эксперименте исследователи использовали сочетание химического осаждения из паровой фазы и высокотемпературного синтеза под высоким давлением для выращивания ДЛКНТ. Затем ДЛКНТ были охарактеризованы с помощью

сканирующей электронной микроскопии, просвечивающей электронной микроскопии и рамановской спектроскопии. Результаты показали, что синтезированные ДЛКНТ имели диаметр около 10 нм и длину несколько микрон. [31]

Скрученный двухслойный графен (TBG) - это графеновая структура, состоящая из двух графеновых слоев, повернутых на небольшой угол относительно друг друга. Благодаря образованию муаровых узоров, TBG обладают уникальными электронными свойствами, которые можно регулировать, изменяя угол поворота двух слоев. TBG имеют потенциальное применение в электронных и оптоэлектронных устройствах. Впервые о синтезе TBG было сообщено группой исследователей из Колумбийского университета в 2010 году. В своих экспериментах исследователи использовали механическое отшелушивание для получения графеновых листов, которые затем укладывались и вращались друг на друга, образуя TBG. Затем TBG были охарактеризованы с помощью сканирующей туннельной микроскопии и транспортных измерений. Результаты показали, что TBG проявляют ряд электронных свойств, включая сверхпроводимость и изолирующее поведение, в зависимости от угла поворота между двумя графеновыми слоями. [32]

Аэрогели оксида графена (GOA) - это новый тип углеродных аэрогелей, состоящих из взаимосвязанных листов оксида графена. Благодаря наличию кислородсодержащих функциональных групп на листах оксида графена, GOA обладают уникальными механическими и химическими свойствами, которые можно регулировать, изменяя условия синтеза. GOA имеют потенциальное применение для хранения энергии, катализа и восстановления окружающей среды. В своих экспериментах исследователи использовали золь-гель процесс для приготовления гелей оксида графена, которые затем подвергались сублимационной сушке для получения аэрогелей оксида графена. Затем аэрогели были охарактеризованы с помощью сканирующей электронной микроскопии, просвечивающей электронной микроскопии и рентгеновской дифракции. Результаты показали, что синтезированный GOA имел пористую структуру с

высокой удельной поверхностью и хорошей механической стабильностью. [33]

Допированные азотом графеновые квантовые точки (NGQD) представляют собой новый тип графеновой структуры, состоящей из небольших графеновых фрагментов с азотсодержащими функциональными группами. Благодаря присутствию атомов азота, NGQD обладают уникальными электронными и оптическими свойствами, которые можно регулировать, изменяя условия синтеза. nGQD имеют потенциальное применение в сенсорах, биовизуализации и оптоэлектронике. Впервые о синтезе NGQDs было сообщено группой исследователей из Нанкайского университета в 2011 году. В этом эксперименте исследователи получили NGQDs из оксида графена и азотсодержащих прекурсоров гидротермальным методом. NGQDs были охарактеризованы с помощью просвечивающей электронной микроскопии, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и флуоресцентной спектроскопии. Результаты показали, что синтезированные NGQD имели размер в несколько нанометров и демонстрировали интенсивное флуоресцентное излучение. [34]

Углеродные нанотрубки, обернутые оксидом графена (GOCNTs) - это новая структура углеродных нанотрубок, состоящая из сердцевины углеродной нанотрубки, обернутой вокруг листа оксида графена. Благодаря сочетанию углеродных нанотрубок и оксида графена, GOCNT обладают уникальными механическими и электрическими свойствами, которые можно регулировать, изменяя условия синтеза. GOCNT имеют потенциальное применение в области хранения энергии, катализа и нанoeлектроники. О синтезе GOCNT впервые сообщили исследователи из Университета Цинхуа в 2015 году. В своих экспериментах исследователи использовали химическое осаждение из паровой фазы для выращивания углеродных нанотрубок, которые затем были обернуты листами оксида графена в процессе химического восстановления. Затем GOCNTs были охарактеризованы с помощью просвечивающей электронной микроскопии, рамановской спектроскопии и электрических измерений. Результаты показали, что синтезированные GOCNT имели диаметр около 10 нм и демонстрировали хорошую электропроводность. [35]

Гетероструктуры дисульфид молибдена-графен ($\text{MoS}_2\text{-Gr}$) представляют собой новый двумерный материал, состоящий из слоя дисульфида молибдена (MoS_2), наложенного на слой графена. Благодаря сочетанию MoS_2 и графена, гетероструктуры $\text{MoS}_2\text{-Gr}$ обладают уникальными электронными и оптическими свойствами, которые можно регулировать путем изменения порядка укладки и количества слоев. Гетероструктуры $\text{MoS}_2\text{-Gr}$ имеют потенциальное применение в нанoeлектронике, оптоэлектронике и фотовольтаике. Впервые о синтезе гетероструктур $\text{MoS}_2\text{-Gr}$ было сообщено группой исследователей из Калифорнийского университета в Беркли в 2014 году. В своих экспериментах исследователи использовали химическое осаждение из паровой фазы для выращивания графена на медной подложке, а затем перенесли графен на кремниевую подложку. Затем они использовали другой процесс химического осаждения из паровой фазы для выращивания MoS_2 поверх слоя графена. Гетероструктуры $\text{MoS}_2\text{-Gr}$ были охарактеризованы с помощью сканирующей просвечивающей электронной микроскопии, рамановской спектроскопии и электрических измерений. Результаты показали, что синтезированные гетероструктуры $\text{MoS}_2\text{-Gr}$ обладают высокой подвижностью носителей и сильной фотолюминесценцией. [36]

Углеродные нановолокна, армированные графеном (CNF-G) - это новый композитный материал, состоящий из углеродных нановолокон (CNFs), встроенных в графеновую матрицу. Благодаря сочетанию УНВ и графена композиты CNF-G обладают уникальными механическими и электрическими свойствами, которые можно регулировать путем изменения состава и условий обработки. Композиты CNF-G имеют потенциальное применение в аэрокосмической, автомобильной промышленности и спортивном оборудовании. Впервые о синтезе композитов CNF-G было сообщено в 2016 году группой исследователей из Техасского университета в Остине. В своих экспериментах исследователи использовали химическое осаждение из паровой фазы для выращивания графена на медной фольге, а затем перенесли графен на полимерную подложку. Затем они нанесли на графеновый слой электроспан

композит CNF-полимер и отвердили его, чтобы сформировать композит CNF-G. Затем композиты CNF-G были охарактеризованы с помощью сканирующей электронной микроскопии, просвечивающей электронной микроскопии и механических испытаний. Результаты показали, что синтезированные композиты CNF-G обладают высокой прочностью и вязкостью. [37]

Гибридная пленка углеродных нанотрубок и оксида графена (CNT-GO) - это новый тип пленки, состоящей из слоя листов оксида графена, обернутых вокруг сети углеродных нанотрубок. Благодаря сочетанию углеродных нанотрубок и оксида графена, мембраны CNT-GO обладают уникальными механическими и транспортными свойствами, которые можно регулировать, изменяя условия синтеза. Мембраны CNT-GO имеют потенциальное применение в фильтрации воды, разделении газов и доставке лекарств. В 2017 году группа исследователей из Массачусетского технологического института впервые сообщила о синтезе мембран CNT-GO. В своих экспериментах исследователи использовали метод послойной сборки для нанесения листов оксида графена на сеть углеродных нанотрубок. Затем пленки CNT-GO были охарактеризованы с помощью сканирующей электронной микроскопии, рентгеновской дифракции и транспортных измерений. Результаты показали, что пленки CNT-GO обладают высокой механической прочностью и хорошей водопроницаемостью. [38]

Гетероструктура графен-гидрогенизированный нитрид бора (G-hBN) - это новый двумерный материал, состоящий из слоя графена, наложенного на слой гидрогенизированного нитрида бора (hBN). Благодаря сочетанию графена и hBN, гетероструктуры G-hBN обладают уникальными электронными и оптическими свойствами, которые можно регулировать, изменяя порядок укладки и количество слоев. Гетероструктуры g-hBN имеют потенциальное применение в оптоэлектронике, спинтронике и долинной электронике. о синтезе гетероструктур G-hBN впервые было сообщено в 2018 году группой исследователей из Калифорнийского университета в Беркли. сообщает. В своих экспериментах исследователи использовали химическое осаждение из паровой фазы для выращивания hBN на медной фольге, а затем перенесли hBN на

подложку SiO₂. Затем они использовали другой процесс химического осаждения из паровой фазы для выращивания графена поверх слоя ГБН. Гетероструктуры G-HBN были охарактеризованы с помощью сканирующей туннельной микроскопии, рамановской спектроскопии и транспортных измерений. Результаты показали, что синтезированные гетероструктуры G-hBN обладают высокой подвижностью носителей и сильным квантовым эффектом Холла. [39]

Углеродные нанотрубки-эпоксидные композиты с выровненными нанотрубками (CNT-E) представляют собой новый композитный материал, состоящий из углеродных нанотрубок, встроенных в эпоксидную матрицу, причем нанотрубки выровнены вдоль предпочтительного направления. Благодаря ориентации выровненных нанотрубок композиты CNT-E обладают уникальными механическими и электрическими свойствами, которые можно регулировать путем изменения условий обработки. Композиты CNT-E с выровненными нанотрубками имеют потенциальное применение в конструкционных материалах, проводящих покрытиях и накопителях энергии. В 2019 году группа исследователей из Иллинойского университета в Урбане-Шампейне впервые сообщила о синтезе композитов CNT-E с выровненными нанотрубками. В своих экспериментах исследователи использовали метод на основе раствора для выравнивания углеродных нанотрубок в предпочтительной ориентации, а затем пропитали выровненные нанотрубки эпоксидной смолой. Затем композиты CNT-E с выровненными нанотрубками были охарактеризованы с помощью сканирующей электронной микроскопии, рентгеновской дифракции и механических испытаний. Результаты показали, что синтезированные композиты CNT-E с выровненными нанотрубками обладают высокой жесткостью и прочностью вдоль направления выравнивания. [40]

Гетероструктуры графен-углеродные нанотрубки, инкапсулированные наночастицами (Гр-УНТ) - это новые гибридные материалы, состоящие из слоя графена и сети углеродных нанотрубок, в которых наночастицы инкапсулированы внутри углеродных нанотрубок. Благодаря сочетанию графена, углеродных нанотрубок и наночастиц, гетероструктуры Gr-CNT с

инкапсулированными наночастицами обладают уникальными механическими и оптическими свойствами, которые можно регулировать путем изменения размера и типа наночастиц. Гетероструктуры Gr-CNT с инкапсулированными наночастицами имеют потенциальное применение в области хранения энергии, зондирования и катализа. В 2020 году группа исследователей из Университета Цинхуа впервые сообщила о синтезе гетероструктур Gr-CNT с инкапсулированными наночастицами. В своих экспериментах исследователи использовали химическое осаждение из паровой фазы для выращивания слоя графена на медной фольге, а затем перенесли графен на кремниевую подложку. Затем они использовали гидротермальный метод для выращивания сети углеродных нанотрубок на слое графена, после чего инкапсулировали золотые наночастицы в углеродные нанотрубки. Гетероструктуры Gr-CNT с инкапсулированными наночастицами были охарактеризованы с помощью сканирующей электронной микроскопии, просвечивающей электронной микроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния света. Результаты показали, что синтезированные гетероструктуры Gr-CNT с инкапсулированными наночастицами проявляют высокую каталитическую активность для восстановления 4-нитрофенола. [41]

Углеродные нанотрубки-молекулярные соединения с ковалентными связями представляют собой новый гибридный материал, состоящий из одностенных углеродных нанотрубок и молекул с ковалентными связями между нанотрубками и молекулами. Благодаря взаимодействию между нанотрубками и молекулами, углеродные нанотрубки-молекулярные соединения с ковалентными связями обладают уникальными электронными и оптическими свойствами, которые можно регулировать путем изменения химической структуры молекул. Молекулярные соединения углеродных нанотрубок с ковалентными связями имеют потенциальное применение в молекулярной электронике, оптоэлектронике и зондировании. В 2017 году исследователи из Токийского университета впервые сообщили о синтезе молекулярных соединений углеродных нанотрубок с ковалентными связями. В своих экспериментах

исследователи использовали химическое осаждение из паровой фазы для выращивания одностенных углеродных нанотрубок на кремнеземной подложке, а затем функционализировали нанотрубки группами карбоновых кислот. Затем они использовали метод на основе раствора для образования ковалентных связей между группами карбоновых кислот и молекулами тиола. Молекулярные соединения углеродных нанотрубок с ковалентными связями были охарактеризованы с помощью сканирующей туннельной микроскопии, рамановской спектроскопии и транспортных измерений. Результаты показали, что синтезированные соединения углеродных нанотрубок и молекул с ковалентными связями обладают высокой электропроводностью и сильной связью между нанотрубками и молекулами. [42]

Гетероструктуры графен-квантовая точка (G-QD) с контролируемыми зазорами представляют собой новый гибридный материал, состоящий из слоя графена и слоя полупроводниковых квантовых точек с контролируемыми зазорами. Благодаря сочетанию графена и квантовых точек, гетероструктуры G-QD с контролируемым зазором обладают уникальными электронными и оптическими свойствами, которые можно регулировать путем изменения размера и типа квантовых точек. Гетероструктуры G-QD с контролируемыми зазорами имеют потенциальное применение в фотовольтаике, фотокатализе и оптоэлектронике. Впервые о синтезе гетероструктур G-QD с контролируемым зазором было сообщено в 2015 году группой исследователей из Калифорнийского университета в Лос-Анджелесе. В своих экспериментах исследователи использовали метод на основе раствора для осаждения слоя полупроводниковых квантовых точек поверх слоя графена. Затем они использовали процесс отжига после осаждения, чтобы контролировать размер и полосу пропускания квантовых точек. Гетероструктуры G-QD с контролируемыми зазорами были охарактеризованы с помощью сканирующей туннельной микроскопии, спектроскопии фотолюминесценции и транспортных измерений. Результаты показывают, что синтезированные гетероструктуры G-QD с управляемыми зазорами имеют перестраиваемые зазоры и высокую

оптическую излучательную способность. [43]

Углеродные нанотрубки-шаблонный графен - это новый гибридный материал, состоящий из слоя графена, выращенного поверх слоя углеродных нанотрубок. Благодаря взаимодействию между графеном и углеродными нанотрубками, графен, нанесенный на углеродные нанотрубки, обладает уникальными электронными и механическими свойствами, которые можно регулировать путем изменения размера и ориентации нанотрубок. В 2016 году группа исследователей из Калифорнийского университета в Беркли сообщила о первом синтезе графена, замещенного углеродными нанотрубками. В эксперименте исследователи использовали химическое осаждение из паровой фазы для выращивания слоя углеродных нанотрубок на кремниевой подложке, а затем с помощью химического осаждения из паровой фазы, усиленного плазмой, вырастили слой графена поверх нанотрубок. Графен, сформированный из углеродных нанотрубок, был охарактеризован с помощью сканирующей электронной микроскопии, спектроскопии комбинационного рассеяния и транспортных измерений. Результаты показали, что синтезированные углеродные нанотрубки заменили графен с высокой механической прочностью и высокой электропроводностью. [44]

Гетероструктуры углеродные нанотрубки-графен (CNT-G) с перестраиваемой полосой пропускания представляют собой новый гибридный материал, состоящий из слоя графена и слоя углеродных нанотрубок с перестраиваемой полосой пропускания. Благодаря сочетанию графена и углеродных нанотрубок, гетероструктура CNT-G с перестраиваемой полосой пропускания обладает уникальными электронными и оптическими свойствами, которые можно регулировать путем изменения размера и хиральности нанотрубок. В 2014 году исследователи из Калифорнийского университета в Беркли впервые сообщили о синтезе гетероструктур CNT-G с перестраиваемой полосой пропускания. В своих экспериментах исследователи использовали химическое осаждение из паровой фазы для выращивания слоя графена на медной фольге, а затем перенесли графен на кремниевую подложку. Затем они использовали химическое

осаждение из паровой фазы для выращивания слоя углеродных нанотрубок поверх графенового слоя, после чего провели плазменное травление для удаления ненужных нанотрубок. Гетероструктуры CNT-G с перестраиваемыми зазорами были охарактеризованы с помощью сканирующей электронной микроскопии, спектроскопии комбинационного рассеяния и транспортных измерений. Результаты показывают, что синтезированные гетероструктуры CNT-G с перестраиваемыми зазорами имеют перестраиваемые зазоры и высокую оптическую излучательную способность. [45]

Гетероструктуры графен-ГБН с муаровыми узорами представляют собой новый гибридный материал, состоящий из слоя графена и слоя ГБН с муаровыми узорами. Благодаря взаимодействию между графеном и ГБН, гетероструктуры графен-ГБН с муаровыми узорами обладают уникальными электронными и оптическими свойствами, которые можно регулировать путем изменения размера и ориентации муаровых узоров. В 2013 году группа исследователей из Колумбийского университета впервые сообщила о синтезе гетероструктур графен-ГБН с муаровыми узорами. В своих экспериментах исследователи использовали метод переноса для укладки слоя графена поверх слоя ГБН с муаровыми узорами, который был получен методом кристаллического роста. Гетероструктуры графен-ГБН с муаровыми узорами затем были охарактеризованы с помощью сканирующей туннельной микроскопии и транспортных измерений. Результаты показывают, что синтезированные гетероструктуры графен-ГБН с муаровыми узорами имеют уникальную электронную структуру, обусловленную взаимодействием между графеном и муаровым слоем ГБН. [46]

Приведенные выше примеры - лишь некоторые из множества новых специфических многослойных углеродных структур, о которых было сообщено в последнее десятилетие. Эти структуры, вероятно, станут активной областью исследований в ближайшие годы, и ученые продолжают изучать их уникальные свойства и потенциальные применения.

Глава 2 Обзор квантово-механических вычислительных методов

Квантовая механика является основой для расчетов материалов в современной физике, особенно в физике твердого тела [47-51]. Уравнение Шредингера описывает поведение многоэлектронной системы (с N электронами) в нерелятивистском и борн-оппенгеймеровском приближениях, где оператор гамильтониана состоит из члена кинетической энергии и члена потенциальной энергии.

Решая уравнение Шредингера с помощью различных вычислительных методов, включая теорию наводнений плотности (DFT), можно определить электронную структуру и свойства материалов, такие как энергетические полосы, размеры решетки, электромагнитные свойства, механические свойства и т.д. [52]. Однако диагонализация матрицы оператора гамильтониана для систем с большим числом атомов может оказаться сложной с вычислительной точки зрения.

Чтобы преодолеть эту проблему, можно использовать метод периодических граничных условий, который использует пространственную периодичность кристаллического материала и рассчитывает его физические свойства с помощью квантовой механики. Решая уравнение Шредингера в пределах первичного блока кристалла и применяя периодические граничные условия, можно эффективно моделировать поведение всего кристалла. Волновая функция электрона в кристалле описывается теоремой Блоха, где волновая функция электрона удовлетворяет периодичности кристаллической решетки.

Решение уравнения Шредингера в пределах решетки приводит к структуре энергетической полосы материала, которая описывает разрешенные энергетические уровни электронов в кристалле. Энергетические полосы обозначаются индексом n , который представляет собой число энергетических полос. Волновой вектор k , также известный как "волновой вектор Блоха", характеризует изменение фазы волновой функции электрона между различными первичными элементами кристалла в пределах первой зоны Бриллюэна [53]. Величина волнового вектора соответствует волновой функции в первой зоне

Бриллюэна, поэтому необходимо рассматривать только волновой вектор в первой зоне Бриллюэна.

В материаловедении электронная структура и свойства кристаллических материалов могут быть смоделированы квантово-механически с использованием понятий периодической обработки граничных условий и теоремы Блоха.

2.1. Аппроксимация с жестким связыванием

Приближение тесного связывания - это метод, используемый в физике твердого тела для расчета структуры электронной полосы материала. Он основан на идее, что волновые функции электронов в кристалле могут быть аппроксимированы линейной комбинацией атомных волновых функций, сосредоточенных в каждой точке решетки. Эти волновые функции перекрываются и взаимодействуют друг с другом, создавая набор дискретных энергетических полос, разделенных полосовыми промежутками. Модель приближения тесного связывания предполагает, что перекрытие волновых функций слабое и что учитываются только ближайшие соседние взаимодействия между атомами. В этой модели электронное состояние описывается локальной волновой функцией, сосредоточенной на одном атоме. Предполагается, что волновая функция твердого тела может быть записана как линейная комбинация атомных волновых функций с соответствующими коэффициентами, параметры которых определяются путем подгонки рассчитанных энергетических полос к экспериментальным данным. Приближение тесного связывания обычно используется для изучения электронных свойств материалов со сложной кристаллической структурой или содержащих большое количество атомов, таких как полупроводники и металлы.

На основе приближения тесного связывания уравнение Шредингера для одного атома может быть сведено к следующему виду:

$$\hat{H}_{TB}\psi(\mathbf{r}) = (\hat{H}_{at} + \Delta U(\mathbf{r}))\psi(\mathbf{r}) = \epsilon(\mathbf{k})\psi(\mathbf{r})$$

где $\hat{H}_{at}$ - атомный оператор гамильтониана, а $\psi(\mathbf{r})$ - собственная функция материала. и $\Delta U(\mathbf{r})$, корректирующий потенциал оператора атомного

гамильтониана, неизвестен и должен быть вычислен путем подгонки принципа первого рода.

2.2. Первые принципы

Первые принципы предполагают решение уравнения Шредингера для получения точного описания электронной структуры материала или молекулы, полностью полагаясь на фундаментальные законы физики, а не на какие-либо эмпирические или экспериментальные данные.

Наиболее часто используемыми первопринципными вычислительными методами являются теория функционала плотности (DFT), расчеты Монте-Карло (MC) и Хартри-Фока (HF).

В последние годы к первопринципным расчетам применяется искусственный интеллект для дальнейшего повышения их точности и эффективности. Алгоритмы машинного обучения могут быть использованы для прогнозирования электронных свойств материалов на основе больших баз данных предыдущих расчетов. Этот подход оказался очень успешным в выявлении новых материалов с желаемыми свойствами. Поскольку вычислительная техника и искусственный интеллект продолжают развиваться, вычисления на основе первых принципов, вероятно, останутся важным инструментом для научных исследований в ближайшие годы. [54]

2.2.1. Теория функционала плотности

Теория функционала плотности (DFT) - это широко используемая теоретическая основа в вычислительной физике, которая обеспечивает эффективный и универсальный метод изучения электронной структуры и свойств атомов, молекул и материалов. В этой теории распределение электронной плотности системы рассматривается как фундаментальная переменная, а не волновая функция отдельного электрона, что позволяет проводить точные и эффективные расчеты таких свойств, как полная энергия, атомные позиции, длины связей и колебательные моды.

2.2.1.1. Основы теории наводнения плотности

Основы теории наводнения плотности, наиболее популярного метода расчета

электронной структуры, лежат в двух ключевых теоремах: теореме Хоэнберга-Кона [55] и уравнении Кона-Шема [56]. Теорема Хоэнберга-Кона утверждает, что полная энергия системы зависит только от плотности электронов, и что плотность основного состояния однозначно определяет функцию потенциальной энергии, которая описывает взаимодействия электронов и обменно-корреляционные эффекты, не встречающиеся в классических кулоновских взаимодействиях между электронами и ядрами. Уравнение Кон-Шема вытекает из теоремы Хоэнберга-Кона и использует невзаимодействующий фиктивный элемент. Уравнение Кон-Шема может быть решено численно на компьютере с помощью вычислительных методов.

Выбор обменно-корреляционной функции является ключевым фактором в DFT-расчетах, поскольку он определяет точность и применимость результатов. Было предложено и протестировано несколько различных функций, включая аппроксимацию локальной плотности (LDA) [57], обобщенную градиентную аппроксимацию (GGA), гибридные функции и мета-GGA. LDA применяет равномерную электронную плотность к каждой точке в пространстве. LDA применяет равномерную электронную плотность к каждой точке в пространстве, в то время как GGA включает градиент плотности. Гибридная функция сочетает LDA или GGA с частью точного обмена Хартри-Фока, а мета-GGA расширяет GGA, включая производные плотности более высокого порядка [58].

Помимо замены корреляционных функций, на точность расчетов DFT могут влиять и другие факторы. Эти факторы включают выбор набора базисов, описывающих волновую функцию Ψ , и качество вычислительного алгоритма, используемого для решения уравнений. Поэтому качество вычислительного алгоритма также имеет решающее значение в расчетах DFT.

2.2.1.2. Плоские волны, линейная суперпозиция атомных орбиталей и псевдопотенциалы

Плоские волны, линейная суперпозиция атомных орбиталей и псевдопотенциалы - три метода, обычно используемые в DFT-расчетах. Использование наборов базисов плоских волн хорошо подходит для

протяженных систем, в то время как метод LSAO больше подходит для локальных систем. Наконец, использование псевдопотенциалов может значительно снизить стоимость расчетов, но для обеспечения точности необходим тщательный отбор.

Плоские волны

Наборы базисов плоских волн широко используются в расчетах DFT, поскольку они могут эффективно описывать электронные волновые функции в реальном и инверсном пространстве. Электронные волновые функции раскладываются в набор базисных функций, состоящий из плоских волн. [59]

Использование плоских волн имеет ряд преимуществ перед другими базисными наборами. Во-первых, базисные наборы плоских волн имеют четкую физическую интерпретацию, поскольку они представляют волны, распространяющиеся в пространстве. Во-вторых, плоские волны математически просты в обращении и могут быть эффективно оценены с помощью преобразования Фурье. В-третьих, базисные наборы плоских волн могут быть систематически улучшены путем добавления дополнительных высокоэнергетических плоских волн. Этот метод известен как усечение плоских волн и гарантирует, что ошибки в базисном наборе можно контролировать. Однако базисные наборы плоских волн также имеют несколько недостатков. Во-первых, они требуют большого количества базисных функций для получения точных результатов, что приводит к высоким вычислительным затратам. Во-вторых, плосковолновые базисные наборы не учитывают локализованные атомные орбитали, которые не могут быть точно описаны плосковолновыми расширениями. Наконец, описания плоских волн не подходят для систем с периодическими разрывами или интерфейсами. [60]

Линейная суперпозиция атомных орбиталей

Метод линейной суперпозиции атомных орбиталей (LSAO) представляет собой альтернативу набору базисов плоских волн, который может быть использован для точного описания локальных атомных орбиталей. Метод LSAO хорошо подходит для изучения молекул и небольших кластеров, где атомные

орбитали доминируют в электронной структуре. Однако вычислительные затраты на расчеты LSAO значительно зависят от размера системы, что делает его менее эффективным для больших систем. Когда метод LSAO включает линейные комбинации одноатомных волновых функций в молекулах или твердых телах, они представляются функциями гауссова типа (гауссианами). [61]

Псевдопотенциалы

Псевдопотенциалы особенно полезны в DFT-расчетах, поскольку они упрощают расчеты, устраняя необходимость явного включения электронов ядра в расчет, тем самым снижая вычислительные затраты на расчет. В подходе [62] псевдопотенциал заменяет сильно локализованное взаимодействие между валентными и основными электронами эффективным потенциалом, который включает взаимодействие основных электронов. Однако выбор псевдопотенциала может существенно повлиять на точность результатов. Для решения этой проблемы было разработано несколько различных типов псевдопотенциалов, включая псевдопотенциал, сохраняющий норму, и псевдопотенциал Ультрософта [63].

Псевдопотенциал, сохраняющий норму, был введен Хаманном и др. в 1979 году и широко используется для описания взаимодействия между валентными электронами и ядрами в DFT-расчетах. Они предназначены для сохранения констант волновой функции и эффективной замены ядерных электронов эффективным потенциалом, который точно описывает их экранирующий эффект. Ультрамягкий псевдопотенциал был введен Вандербильтом в 1990 году как более эффективная альтернатива псевдопотенциалу, сохраняющему моду. Сверхмягкие псевдопотенциалы разработаны как более мягкие и гибкие, чем псевдопотенциалы с сохранением моду, включая использование более гладких радиальных отсечек и более мягких потенциальных хвостов. Они обеспечивают более высокую точность при меньших вычислительных затратах, что делает их идеальными для расчетов с участием переходных металлов и других сложных систем. [64]

2.3. Фононы и замороженные фононы

Фононы - это квантованные колебания решетки, дисперсионные соотношения или спектр которых важны для изучения структурной стабильности, тепловых свойств и фазовых переходов кристаллов. Приближение Борна-Оппенгеймера разделяет движение электронов и ядер, а теория обобщенных функций плотности дает способ решения для энергии системы. Решая уравнения движения и энергии с помощью классической механики, можно определить дисперсионные соотношения фононов и проанализировать динамическую устойчивость системы [65].

Изучая силы на атомах, можно лучше понять колебания атомов внутри кристалла. Производная энергии $E(R)$ по отношению к смещению очень полезна для определения свойств системы при определенной температуре.

Для кристалла, содержащего N атомов, колебания фононов в различных точках K дают дисперсионный спектр, который является решением уравнения размерности $3N \times 3N$. Широко используемым методом решения этого уравнения является метод "замороженных фононов" [66]. В этом методе изменения энергии и силы рассчитываются по мере движения атомов. В свою очередь, это позволяет получить важную матрицу силовых постоянных, которая затем используется для получения фононной дисперсионной кривой для системы.

Чтобы построить матрицу силовых постоянных, мы построим суперячейку с равновесной структурой и введем небольшое отклонение от равновесного состояния. Затем сила Хеллмана-Фейнмана, обусловленная движением атомов, рассчитывается с помощью теории общих функций плотности для формирования матрицы силовых постоянных системы. Затем из матрицы силовых постоянных получают дисперсионную кривую фононов для этой системы [67].

2.4. Метод прогнозирования двумерной структуры CALYPSO

Программный пакет CALYPSO (Crystal structure AnaLYsis by Particle Swarm Optimization) используется для прогнозирования энергетически стабильной или переносимой кристаллической структуры материала для заданного химического состава и внешних условий (например, давления). Метод CALYPSO основан на

нескольких основных методах (например, оптимизации роя частиц). алгоритмы, ограничения симметрии при генерации структуры, устранение матриц идентичности связей для похожих структур, частичные стохастические структуры за генерацию для улучшения структурного разнообразия и штрафные функции) для достижения глобальной минимизации структуры с нуля. [68]

Метод CALYPSO был расширен для включения прогнозирования двумерных структур, что позволило определить наиболее энергетически благоприятные двумерные ламинарные структуры. Двумерный метод CALYPSO включает три основные техники: определение сходства структуры, генерация структуры на основе симметрии и дискретизации решетки, а также глобальная оптимизация. Эти методы облегчают поиск глобального энергетического оптимума, что очень важно при поиске наиболее стабильных двумерных ламинарных структур.

Определение структурного сходства включает выявление похожих двумерных структур из базы данных известных кристаллических структур или предсказанных структур. Это может помочь создать начальные структуры-кандидаты, похожие на существующие материалы, которые затем могут быть оптимизированы с помощью метода CALYPSO.

Генерация структур на основе симметрии и дискретизации решетки включает в себя генерацию набора структур-кандидатов на основе параметров симметрии и решетки существующего материала. Это позволяет систематически исследовать структурное пространство двумерных пластинчатых структур и предоставляет разнообразный набор структур-кандидатов для дальнейшей оптимизации.

Глобальная оптимизация, которая включает поиск наиболее энергетически благоприятного расположения атомов в сгенерированных структурах-кандидатах с помощью алгоритма PSO, осуществляется на основе оценки полной энергии каждой структуры, которая рассчитывается с помощью методов первых принципов, таких как DFT.

Схема метода предсказания двумерных структур CALYPSO аналогична схеме метода предсказания кристаллических структур и состоит из четырех этапов:

ввод химического состава, генерация структур-кандидатов, оптимизация с помощью алгоритма PSO и вывод предсказанных структур. Он начинается с ввода химического состава системы и выбора начальной структуры. Начальная структура может быть сгенерирована случайным образом или выбрана на основе предыдущих экспериментальных данных или теоретических предсказаний. Затем алгоритм PSO ищет наиболее стабильную атомную структуру, оценивая пригодность каждой частицы в рое. Пригодность определяется общей энергией каждой структуры, которая рассчитывается с помощью DFT. Алгоритм продолжается до тех пор, пока не будет найдено удовлетворительное решение, и структура с наименьшей энергией выводится в качестве предсказанной кристаллической структуры.

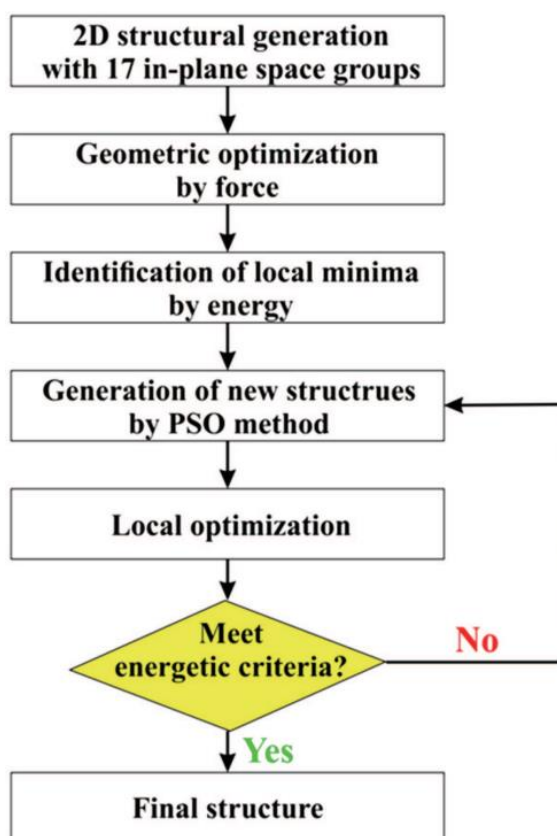


Рисунок 5 - Общая блок-схема предсказания двумерной структуры CALYPSO.[69]

Метод CALYPSO использует алгоритм PSO и расчеты на основе первых принципов для предсказания наиболее энергетически благоприятных атомных структур в сложных системах. Находя конфигурацию с наименьшей энергией,

метод CALYPSO может дать ценное представление о поведении материалов с большим числом атомов. Метод был успешно использован для предсказания кристаллической структуры различных материалов, включая поликристаллы льда и углерода. [70]

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

Студенту:

Группа	ФИО
150Б91	Ли Цзыхань

Школа		Отделение школы (НОЦ)	
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	03.03.02 «Физика»

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

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Затраты на сырье, размер окладов, затраты на электроэнергию, амортизационные расходы
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	– Максимальный бюджет НИ 415947 руб.
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	– Отчисления во внебюджетные фонды 30%

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	– Потенциальные потребители результатов исследования; – проведение анализа конкурентоспособности.
2. Планирование и формирование бюджета научных исследований	– цели и результаты проекта; – организационная структура проекта.
3. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	– структура работ в рамках научного исследования; – разработка графика проведения научного исследования; – бюджет научно-технического исследования.

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. Оценочная карта;
2. SWOT- анализ;
3. Диаграмма Ганта;
4. Бюджет затрат научно-технического исследования

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСТН ШБИП	Верховская.М.В	к.э.н, доцент		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б91	Ли Цзыхань		

Глава 4 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

В рамках текущей работы проводится моделирование многослойных симметричных углеродных структур R4/mmm при деформации. Моделирование проводилось с помощью программного пакета VSAP на высокопроизводительном башенном сервере с процессорами Xeon и картами NVIDIA Tesla, принадлежащем Цилинскому университету.

Высокоэффективный многослойный углерод в последние десятилетия получил широкое распространение в отечественной промышленности. Графит обладает хорошей электропроводностью, высокой термической стабильностью и смазочными свойствами, что делает его полезным в различных областях применения, таких как батареи, топливные элементы и замедлитель в ядерных реакторах. Фуллерены обладают уникальными свойствами, которые делают их полезными в различных областях применения, таких как электроника, хранение энергии, сенсоры и системы доставки лекарств.

4.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Как новый углеродный материал с превосходными свойствами, такими как высокая прочность, электро- и теплопроводность, а также низкая плотность, симметричный многослойный углерод может иметь широкий круг потенциальных потребителей. Далее представлены потенциальные потребители симметричного многослойного углерода и их основные характеристики с точки зрения как областей применения, так и характеристик.

С точки зрения областей применения:

1. производители электронного оборудования: симметричный многослойный углерод обладает отличной электро- и теплопроводностью и широко используется в производстве электронного оборудования. Например, он может использоваться в гибкой электронике, эффективном охлаждении чипов и

упаковке полупроводников. Поэтому потенциальными потребителями симметричного многослойного углерода являются производители электронного оборудования, которые могут использовать этот высокоэффективный материал для улучшения качества и производительности своей продукции.

2. производители материалов для хранения водорода: благодаря высокой площади поверхности, структуре пор и химической стабильности симметричный многослойный углерод считается очень перспективным материалом для хранения водорода. Поскольку технология хранения водорода является эффективным способом хранения чистой энергии, потенциальными потребителями симметричного многослойного углерода являются производители материалов для хранения водорода, которые могут использовать этот материал для разработки более эффективных и безопасных материалов для хранения водорода.

3. биомедицинские исследовательские институты: симметричный многослойный углерод может быть использован в биомедицинских приложениях благодаря своей превосходной биосовместимости и биоинертности. Например, он может быть использован в качестве медицинского устройства, носителя лекарств и т.д. Поэтому потенциальными потребителями симметричного многослойного углерода также являются биомедицинские исследовательские институты, которые могут использовать материал для разработки более эффективных, безопасных и инновационных биомедицинских продуктов.

4. компании, связанные с хранением энергии: симметричный многослойный углерод также может быть использован в системах хранения энергии, таких как суперконденсаторы и литий-ионные батареи. Это очень важная форма хранения энергии, поэтому потенциальные потребители симметричного многослойного углерода также включают компании, связанные с хранением энергии, которые могут использовать этот материал для улучшения производительности и качества устройств хранения энергии.

С точки зрения потребительских характеристик:

1. высокий уровень технологии: симметричный многослойный углерод —

это новый тип углеродного материала, который требует от потребителя высокого уровня сложности и передовой технологии подготовки для получения высококачественного материала. Поэтому потенциальные потребители симметричного многослойного углерода обычно должны обладать высоким уровнем технологии подготовки и превосходными производственными возможностями.

2. сильные научно-исследовательские возможности: симметричный многослойный углерод также имеет широкий спектр применения. Поэтому потенциальным потребителям симметричного многослойного углерода часто необходимо иметь сильные научно-исследовательские возможности для разработки дополнительных применений и улучшения характеристик материала.

3. хорошие маркетинговые каналы: потенциальные потребители симметричного многослойного углерода должны иметь хорошие маркетинговые каналы, чтобы вывести свою продукцию на рынок и добиться успеха. Они должны иметь широкую клиентскую базу и сильное присутствие бренда на рынке, чтобы завоевать доверие и признание своих клиентов.

4. осознание важности охраны окружающей среды и устойчивого развития: с развитием общества и ростом осведомленности охрана окружающей среды и устойчивое развитие становятся все более важной темой. Потенциальные потребители симметричного многослойного углерода часто должны знать об этом, а также быть обеспокоены воздействием на окружающую среду и устойчивостью материала, поскольку это очень важный вопрос.

В целом, потенциальными потребителями симметричного многослойного углерода являются производители электронных устройств, производители материалов для хранения водорода, биомедицинские исследовательские институты и компании, связанные с хранением энергии. В то же время, по мере дальнейшего развития технологии симметричного многослойного углерода и дальнейшего снижения стоимости, области применения материала будут расширяться, а круг потенциальных потребителей в будущем станет еще шире.

4.2 SWOT-анализ

Первый этап заключается в описании сильных и слабых сторон проекта, в выявлении возможностей и угроз.

Результаты SWOT-анализа представлены в таблице 4.1.

Таблица 4.1 – Итоговая матрица SWOT-анализа

	Сильные стороны научно-исследовательского проекта: С1. Заявленная экономичность и энергоэффективность метода расчета. С2. Легкий интерфейс управления С3. Безопасность проведения исследований. С4. Упрощенность подготовки материалов перед исследованием.	Слабые стороны научно-исследовательского проекта: Сл1. Недостаточность доказательства пригодности и достоверности. Сл2. Отсутствие необходимого оборудования для выполнения расчетов. Сл3. Длительный срок расчетов.
Возможности: В1. Решение фундаментальных задач исследования.	В1С4. Проведение фундаментальных исследований не требует серьезной предварительной подготовки, что упрощает эти исследования.	В1Сл1. Правильность решения фундаментальных задач ограничивается отсутствием экспериментальной проверки. В1Сл3. Многие из фундаментальных исследовательских задач требуют больших временных затрат на их реализацию.
Угрозы: У1. Несвоевременное финансирование научного исследования при дальнейшем развитии проекта.	-	У1Сл1Сл2Сл3. Увеличения финансирования и повышения мощностей производства.

4.3 Определение возможных альтернатив проведения научных исследований

В таблице 4.2 представлена морфологическая матрица для выполнения расчетов, являющихся основной частью работы.

Таблица 4.2 – Морфологическая матрица

	1	2
А. Оборудование для расчетов	ТПУ, Высокопроизводительный сервер HPC-PHTD	Цилинский университет, Серверы Tower, ICCMS также имеет 10 серверов Tower с процессорами Xeon и картами NVIDIA Tesla..

Б. Пакет программ для выполнения расчетов	Abinit	VASP
В. Затраты на приобретение лицензии	Бесплатно	5 600\$ / бесплатно (Зависит от наличия лицензии у владельцев сервера)

4.4 Планирование научно-исследовательских работ

4.4.1 Структура работ в рамках научного исследования

Планирование комплекса предполагаемых работ осуществляется в следующем порядке:

- разработка технического задания
- выбор направления исследования
- теоретические и практические исследования
- обобщение и оценка результатов
- оформление комплекта документации по ВКР

Для выполнения научных исследований формируется рабочая группа, в состав которой входят: магистрант, научный руководитель и консультант. Составим перечень этапов и работ в рамках проведения научного исследования и проведем распределение исполнителей по видам работ (таблица 4.3).

Таблица 4.3 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Основные этапы	№ работ	Содержание работ	Должность исполнителя
Разработка технического задания	1	Составление и утверждение технического задания	НУ, К, И
Выбор направления исследования	2	Подбор и изучение материалов по выбранной теме	И
	3	Выбор направления исследований	НУ, К, И
	4	Календарное планирование работ по теме	НУ, К, И
Теоретические и практические исследования	5	Выбор методики для исследований	НУ, К, И
	6	Ознакомление с методикой исследования и программным обеспечением	И

	7	Определение параметров расчета	НУ, К, И
	8	Проведения расчета на ЭВМ	И
Обобщение и оценка результатов	9	Проверка полученных результатов	И
	10	Оформление заключение	И
Оформление комплекта документации по ВКР	11	Составление пояснительной записки	И

НУ – Научный руководитель;

К – Консультант;

И – Инженер.

4.4.2 Определение трудоемкости выполнения работ

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 экспертным путем в человеко-днях и носит вероятностный характер, т.к. зависит от множества трудно учитываемых факторов. Для определения ожидаемого (среднего) значения трудоемкости $t_{ож\ i}$ используется следующая формула (4.1):

$$t_{ож\ i} = \frac{3t_{\min i} + 2t_{\max i}}{5}, \quad (4.1)$$

Здесь $t_{ож\ i}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения i -ой работы чел.-дн.;

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

$t_{\max i}$ – максимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы (пессимистическая оценка: в предположении наиболее неблагоприятного стечения обстоятельств), чел.-дн.

Исходя из ожидаемой трудоемкости работ, определяется продолжительность каждой работы в рабочих днях T_p , учитывающая

параллельность выполнения работ несколькими исполнителями:

$$T_{pi} = \frac{t_{ожi}}{Ч_i}, \quad (4.2)$$

где T_{pi} – продолжительность одной работы, раб.дн.;

$t_{ожi}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения одной работы, чел.-дн;

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

При выполнении дипломных работ студенты, в основном, становятся участниками сравнительно небольших по объему научных тем. Поэтому наиболее удобным и наглядным является построение ленточного графика проведения научных работ в форме диаграммы Ганта.

Для удобства построения графика, длительность каждого из этапов работ из рабочих дней следует перевести в календарные дни. Для этого необходимо воспользоваться следующей формулой:

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k_{\text{кал}}, \quad (4.3)$$

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

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

$k_{\text{кал}}$ – коэффициент календарности.

Коэффициент календарности определяется по следующей формуле (4.4):

$$k_{\text{кал}} = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}}}, \quad (4.4)$$

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

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

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

Таким образом:

$$k_{\text{кал}} = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}}} = \frac{365}{365 - 67} = 1,225.$$

Все рассчитанные значения необходимо свести в таблицу 4.4.

Таблица 4.4 – Временные показатели проведения научного исследования

№	Название	Трудоемкость						Исполнитель	Т _р , раб. дн		Т _к , кал. дн	
		t _{min}		t _{max}		t _{ож}			Исп.1	Исп.2	Исп.1	Исп.2
		Исп.1	Исп.2	Исп.1	Исп.2	Исп.1	Исп.2					
1	Составление и утверждение технического задания	0,3	0,3	1	1	0,58	0,58	Р	0,19	0,19	0,24	0,24
		0,3	0,3	1	1	0,58	0,58	К	0,19	0,19	0,24	0,24
		0,3	0,3	1	1	0,58	0,58	И	0,19	0,19	0,24	0,24
2	Подбор и изучение материалов по выбранной теме	5	5	10	10	7	7	И	7,00	7,00	8,58	8,58
3	Выбор направления исследований	1	1	2	2	1,4	1,4	Р	0,47	0,47	0,58	0,58
		1	1	2	2	1,4	1,4	К	0,47	0,47	0,58	0,58
		1	1	2	2	1,4	1,4	И	0,47	0,47	0,58	0,58
4	Календарное планирование работ по теме	1	1	2	2	1,4	1,4	Р	0,47	0,47	0,58	0,58
		1	1	2	2	1,4	1,4	К	0,47	0,47	0,58	0,58
		1	1	2	2	1,4	1,4	И	0,47	0,47	0,58	0,58
5	Выбор методики для исследований	0,3	0,3	1	1	0,58	0,58	Р	0,19	0,19	0,23	0,23
		0,3	0,3	1	1	0,58	0,58	К	0,19	0,19	0,23	0,23
		0,3	0,3	1	1	0,58	0,58	И	0,19	0,19	0,23	0,23
6	Ознакомление с методикой исследования и программным обеспечением	7	7	14	14	9,8	9,8	И	9,80	9,80	12,01	12,01
7	Определение параметров расчета	1	1	2	2	1,4	1,4	Р	0,47	0,47	0,58	0,58
		1	1	2	2	1,4	1,4	К	0,47	0,47	0,58	0,58
		1	1	2	2	1,4	1,4	И	0,47	0,47	0,58	0,58
8	Проведения расчета на ЭВМ	30	30	40	40	34	34	И	34,00	34,00	41,65	41,65
9	Проверка полученных результатов	12	12	17	17	14	14	И	14,00	14,00	17,15	17,15
10	Оформление заключение	3	3	4	4	3,4	3,4	И	3,40	3,40	4,17	4,17
11	Составление пояснительной записки	8	8	12	12	9,6	9,6	И	9,60	9,60	11,76	11,76

Р – руководитель;

И – Инженер;

К – консультант;

На основе таблицы 4.4 строится календарный план-график в виде диаграммы Ганта, представленной на рисунке 4.1.

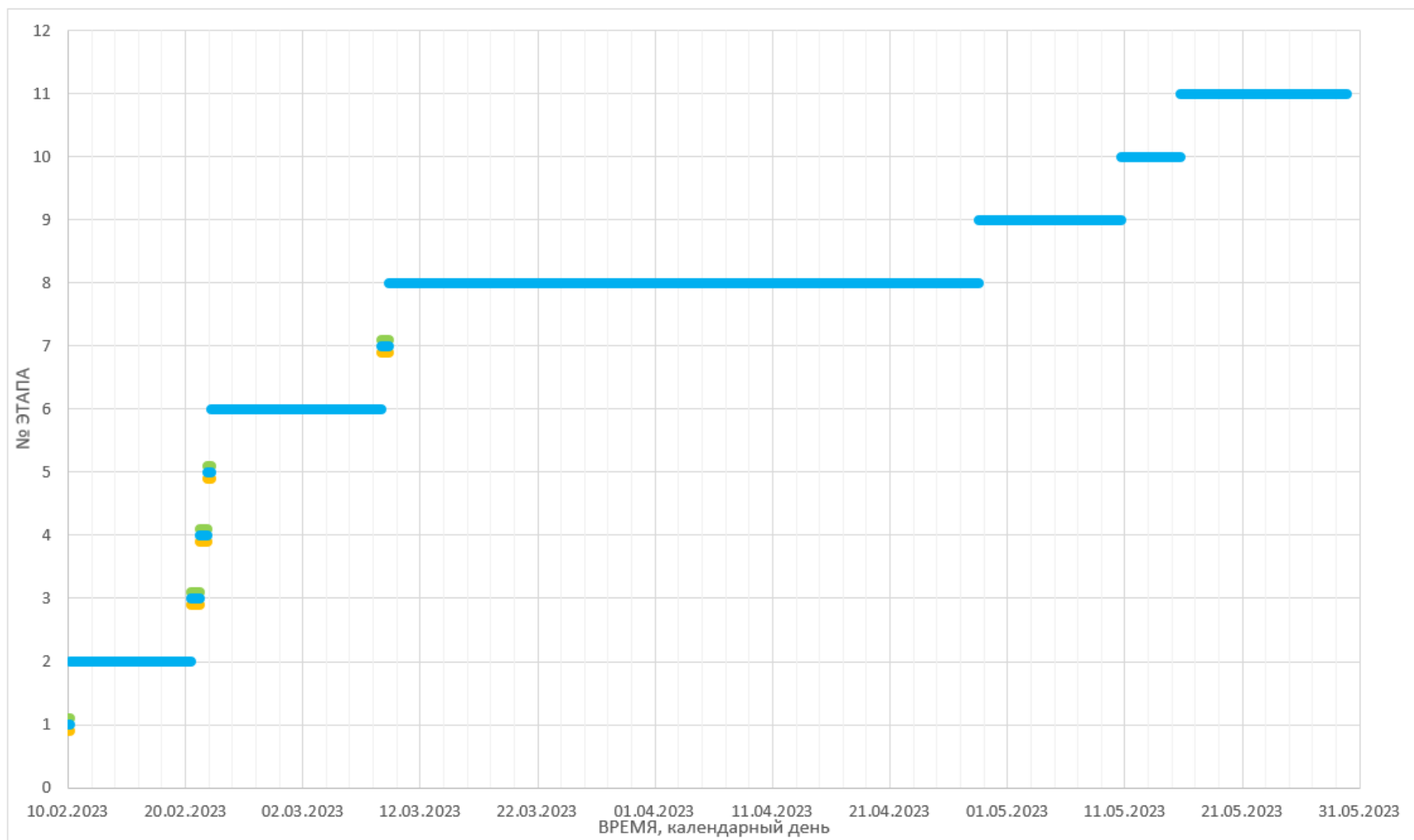


Рисунок 4.1 – Календарный план-график проведения НИОКР. Синим цветом показан Инженер, оранжевым – научный руководитель, зеленым – консультант

4.5 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)

В процессе формирования бюджета НТИ используется следующая группировка затрат по статьям:

- материальные затраты НТИ;
- затраты на основное оборудование для научно-экспериментальных работ;
- основная заработная плата исполнителей темы;
- дополнительная заработная плата исполнителей темы;
- отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления);
- накладные расходы.

4.5.1 Расчет материальных затрат НТИ

Для выполнения данной ВКР требуются затраты на:

- приобретаемую со стороны продукцию, необходимую для обработки результатов;
- оплаты соединения с высокопроизводительным сервером через Интернет.

Данные затраты не подходят под определение материальных затрат, поэтому их учет не требуется. В рамках данной работы отсутствуют такие материальные затраты, как:

- приобретение материальных запасов, сырья, комплектующих и

составных частей для основных средств производственных подразделений;

- покупка топлива и горюче-смазочных материалов, электроэнергии, тепловой энергии, воды для выполнения технологического процесса;
- закупка работ, товаров и услуг, необходимых для осуществления производственного цикла;
- убытки и недостачи продукции в пределах установленных норм естественной убыли;
- прочие суммы расходов.

4.5.2 Расчет затрат на оборудование для научно-экспериментальных работ

Для оборудования нужно рассчитать величину годовой амортизации по следующей формуле (4.6):

$$A_{\text{год}} = \frac{C_{\text{перв}}}{T_{\text{пи}}} \quad (4.5)$$

Здесь $C_{\text{перв}}$ – первоначальная стоимость, руб;

$T_{\text{пи}}$ – время полезного использования, год.

Данная работа не предполагает покупку оборудования, превышающего по стоимости 100 000 рублей. Работа на высокопроизводительном сервере НРС-РНТД не предполагает получение прибыли со стороны пользователя. Учет амортизации этого оборудования заложен в расчет бюджета владельца – Томского Политехнического университета.

4.5.3 Основная заработная плата исполнителей темы

Статья включает основную заработную плату работников, непосредственно занятых выполнением НИИ, (включая премии и доплаты) и дополнительную заработную плату. Также включается премия, выплачиваемая ежемесячно из фонда заработной платы в размере 20–30 % от тарифа или оклада:

$$З_{зп} = З_{осн} + З_{доп} \quad (4.6)$$

Здесь $З_{осн}$ – основная заработная плата;

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

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

$$З_{осн} = З_{дн} \cdot T_p \quad (4.7)$$

Здесь $З_{осн}$ – основная заработная плата одного работника;

T_p – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб. дн. (таблица 4.4);

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

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$З_{дн} = \frac{З_m \cdot M}{F_d} \quad (4.8)$$

Здесь $З_m$ – месячный должностной оклад работника, руб.;

M – количество месяцев работы без отпуска в течение года:

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

при отпуске в 48 раб. дней $M = 10,4$ месяца, 6-дневная неделя;

F_d – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн. (таблица 4.11).

В таблице 4.5 приведен баланс рабочего времени каждого работника НТИ.

Таблица 4.5 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Инженер	Консультант
Календарное число дней	365	365	365
Количество нерабочих дней			
• выходные дни:	52	104	53
• праздничные дни:	14	14	14
Потери рабочего времени			
• отпуск:	48	24	48
• невыходы по болезни:	5	10	5
Действительный годовой фонд рабочего времени	246	213	246

Месячный должностной оклад работника:

$$З_m = З_{tc} \cdot k_p \quad (4.9)$$

Здесь $З_{tc}$ – заработная плата по тарифной ставке, руб.;

k_p – районный коэффициент, равный 1,3 (для Томска).

Расчёт основной заработной платы приведён в таблице 4.6.

Таблица 4.6 – Расчет основной заработной платы

Исполнитель	З _{тс}	k _р	З _м , руб	З _д , руб	Т _р , день	З _{осн} , руб
Инженер	17000	1,3	22100	938	88.2	82742
Научный руководитель	39 000		50700	2152	62.2	133865
Консультант	39 000		50700	2152	10.8	23243
ИТОГО						239850

Расчет дополнительной заработной платы ведется по следующей формуле:

$$З_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} \cdot З_{\text{осн}} \quad (4.10)$$

Здесь $k_{\text{доп}}$ – коэффициент дополнительной заработной платы, равный 0,15.

Общая заработная исполнителей работы представлена в таблице 4.13.

Таблица 4.7 – Общая заработная плата исполнителей

Исполнитель	З _{осн} , руб	З _{доп} , руб	З _{зп} , руб
Инженер	82742	12411	95153
Научный руководитель	133865	20080	153945
Консультант	23243	3486	26729
ИТОГО	239850	35977	275827

4.5.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется исходя из следующей формулы:

$$З_{внеб} = k_{внеб} \cdot (З_{осн} + З_{доп}) \quad (4.12)$$

Здесь $k_{внеб}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды 0.3 (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.).

В соответствии с положениями подпункта 7 пункта 1 и подпункта 3 пункта 2 статьи 427 Налогового кодекса Российской Федерации для некоммерческих организаций (за исключением государственных (муниципальных) учреждений), зарегистрированных в установленном законодательством Российской Федерации порядке, применяющих упрощенную систему налогообложения и осуществляющих в соответствии с учредительными документами деятельность в области социального обслуживания граждан, научных исследований и разработок, образования, здравоохранения, культуры и искусства (деятельность театров, библиотек, музеев и архивов) и массового спорта (за исключением профессионального) применяются пониженные тарифы страховых взносов в совокупном размере 20% в течение 2017-2024 годов

Отчисления во внебюджетные фонды представлены в таблице 4.14.

Таблица 4.8 – Отчисления во внебюджетные фонды

Исполнитель	З _{осн} , руб	З _{доп} , руб	З _{внеб} , руб
Инженер	82742	12411	28545.9
Научный	133865	20080	46183.5

руководитель			
Консультант	23243	3486	8018.7
ИТОГО			82748.1

4.5.5 Накладные расходы

Величина накладных расходов определяется по следующей формуле:

$$З_{накл} = k_{нр} \cdot (З_{осн} + З_{доп} + З_{внеб}) \quad (4.13)$$

Здесь $k_{нр}$ – коэффициент, учитывающий накладные расходы.

Величину коэффициента накладных расходов можно взять в размере 16 %. Накладные расходы представлены в таблице 4.9.

Таблица 4.9 – Накладные расходы

Основная заработная плата	239850
Дополнительная заработная плата	35977
Отчисления во внебюджетные фонды	82748.1
Накладные расходы	57372.016

4.5.6. 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.

Определение бюджета затрат на научно-исследовательский проект по каждому варианту исполнения приведен в таблице 4.10.

Таблица 4.10 – Расчет бюджета затрат НТИ

Наименование статьи	Сумма	Примечание
1. Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	239850	Таблица 4.6
2. Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	35977	Таблица 4.7
3. Отчисления во внебюджетные фонды	82748.1	Таблица 4.148
4. Накладные расходы	57372	16 % от суммы ст. 1-3
5. Бюджет затрат НТИ	415947	Сумма ст. 1-4

Как видно из таблицы 4.10 основные затраты НТИ приходятся на основную заработную плату исполнителей.

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

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

финансовой эффективности и ресурсоэффективности.

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\text{max}}} \quad (4.14)$$

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

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

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

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

$$I_{pi} = \sum a_i b_i \quad (4.15)$$

Здесь 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 – балльная оценка i -го варианта исполнения разработки; устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания;

n – число параметров сравнения.

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности приведен в форме таблице 4.11.

Таблица 4.11 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Критерий	Весовой коэффициент параметра	Исп. 1	Исп. 2
----------	-------------------------------	--------	--------

1 Простота выполнения исследований	0,30	5	5
2 Удобство в эксплуатации	0,15	4	4
3 Энергосбережение	0,15	3	4
4 Надежность	0,20	4	5
5 Воспроизводимость результатов	0,20	4	4
ИТОГО	1	4,15	4, 5

Сравнив значения интегральных показателей ресурсоэффективности, можно сделать вывод, что реализация технологии в первом исполнении является более эффективным вариантом для выполнения работы.

Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения разработки ($I_{исп.i}$) определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле:

$$I_{исп.1} = \frac{I_{p-исп1}}{I_{финр}^{исп.1}}, \quad I_{исп.2} = \frac{I_{p-исп2}}{I_{финр}^{исп.2}} \text{ и т.д.} \quad (4.16)$$

Сравнение интегрального показателя эффективности вариантов исполнения разработки позволит определить сравнительную эффективность проекта (см. таблицу 4.12) и выбрать наиболее целесообразный вариант из предложенных. Сравнительная эффективность проекта ($\mathcal{E}_{cp}$):

$$\mathcal{E}_{cp} = \frac{I_{исп.1}}{I_{исп.2}}. \quad (4.17)$$

Таблица 4.12 – Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Исп. 1	Исп. 2
-------	------------	--------	--------

1	Интегральный финансовый показатель разработки	1	1
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,15	4,5
3	Интегральный показатель эффективности	4,15	4,5
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	0,9	1

Вывод: сравнительный анализ интегральных показателей эффективности показывает, что предпочтительным для выполнения расчетов является второй вариант исполнения, так как данный вариант является наиболее экономичным и ресурсоэффективным, по сравнению с первым.

В рамках данного раздела ВКР была проведена оценка конкурентоспособности выполнения теоретических расчетов симметричных многослойных углеродных структур P4/mmm при деформации; рассчитан показатель, оценивающий перспективность данной технологии, который определяет уровень перспективности как «выше среднего». Был составлен перечень этапов работ и определена их трудоемкость, построен календарный план-график выполнения работ. Рассчитан ориентировочный бюджет на создание научной разработки, а также проведена оценка эффективности научного исследования с позиции ресурсосбережения и сравнительная эффективность разработки.

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
150Б91	Ли Цзыхань

ШКОЛА	<u>Инженерная школа ядерных технологий</u>	Отделение	<u>экспериментальная физика</u>
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	03.03.02 «Физика»

Тема дипломной работы: «Структурные и электронные свойства многослойного углерода P4/mm в нормальном состоянии»

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
Характеристика объекта исследования (материал, теория, прибор, алгоритм, методика) и области его применения. Описание рабочей зоны (рабочего места) при разработке проектного решения/при эксплуатации	— Объект исследования: симметричный многослойный углерод. — Область применения: проектирование высокопроизводительных вычислений. — Рабочая зона: вычислительный центр (Университет Цзилинь, Китай). — Размеры помещения: 4 м x 3,5 м x 3 м. — Количество и название оборудования в рабочей зоне: персональный компьютер. — Рабочие процессы, выполняемые в рабочей зоне в связи с объектом исследования: Расчет симметричного полиэдрического углерода с использованием программного пакета прогнозирования кристаллической структуры CALYPSO.
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности при эксплуатации • специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны)	— Специальные: должностная инструкция работника. — Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 № 197-ФЗ (ред. от 02.12.2019). — ГОСТ 12.2.032-78. ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования (дата введения:

правовые нормы трудового законодательства; • организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.	01.01.1979). — ГОСТ 12.2.033-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ стоя. Общие эргономические требования (дата введения: 01.01.1979).
2. Производственная безопасность при эксплуатации: • Анализ выявленных вредных и опасных производственных факторов	— Вредные производственные факторы: шум на рабочем месте, отклонение показателей микроклимата, недостаточная освещенность рабочей зоны. — Опасные производственные факторы: электрический ток. — Требуемые средства коллективной и индивидуальной защиты от выявленных факторов: противошумные наушники, вентиляция, кондиционирование воздуха.
3. Экологическая безопасность при эксплуатации	— Воздействие на селитебную зону: отсутствует.. — Воздействие на гидросферу: отсутствует.. — Воздействие на атмосферу: отсутствует.. — Воздействие на литосферу: твердые отходы (использованные картриджи для принтеров, обрывки проводов).
4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях	— Возможные чрезвычайные ситуации при разработке и эксплуатации компьютера: простой программного обеспечения. — Наиболее типичная ЧС: пожар в помещении.

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Сечин. А. И.	д.т.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б91	Ли Цыхань		

Глава 5 Социальная ответственность

Объектом исследования является симметричный многослойный углерод.

Исследование проводилось в Высокопроизводительном вычислительном центре Цзилиньского университета (Китай). Размеры помещения: высота 4 м, ширина 3,5 м, длина 3 м, площадь 42 м³. Рабочим оборудованием для исследования был персональный компьютер. В ходе исследования персональный компьютер использовался для расчета симметричного полиэдрического углерода с помощью пакета прогнозирования кристаллической структуры CALYPSO.

Для оценки степени безопасности при расчете структуры и свойств симметричного полиэдрического углерода в данном разделе ВКР необходимо рассмотреть правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности; потенциальные вредные и опасные факторы и способы снижения их воздействия; экологическую безопасность научного проекта, а также вопросы безопасности в случае чрезвычайных ситуаций.

5.1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

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

Организации, занятые в исследовательской деятельности, должны соблюдать требования трудового кодекса Российской Федерации от 30.12.2001 № 197-ФЗ [78]. В этом случае необходимо учитывать особенности труда в интеллектуальной сфере, где продолжительность рабочего времени может

быть больше 40 часов в неделю при соблюдении определенных условий, таких как предоставление отдыха в течение дня, недели и года, премирование и т.д. Оплата труда должна соответствовать квалификации и объему работы.

5.1.2. Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя

Рабочее место располагается в Высокопроизводительном вычислительном центре Цзилиньского университета (Китай). Размеры помещения: высота 4 м, ширина 3,5 м, длина 3 м, площадь 42 м³. Рабочее оборудование персональный компьютер.

При проведении исследования инженер находится в положении сидя. Для удобства и безопасности работника необходимо соблюдение нормативов ГОСТ 12.2.032-78 [79] и ГОСТ 12.2.033-78 [80], которые регулируют требования к расположению и размерам рабочего места, месту для передвижения, освещению, температурному режиму и т.д. Компьютерный зал должен быть оборудован системой вентиляции, чтобы обеспечить комфортную температуру и уровень влажности в помещении, а также защитить от осевших токсичных паров, которые могут возникнуть при исследовании симметричного многослойного углерода. В помещении также должны быть установлены огнетушитель и аптечка первой медицинской помощи для случая чрезвычайной ситуации.

5.2. Производственная безопасность

Исследование выполнялось в компьютерном зале Цзилиньского университета

(КНР). Размеры помещения: высота 4 м, ширина 3.5 м, длина 3 м, площадь 42 м³.

Рабочее оборудование – персональный компьютер.

Для идентификации потенциальных факторов использован ГОСТ 12.0.003-2015 [81]. Перечень выявленных возможных опасных и вредных факторов представлен в таблице 5.1.

Таблица 5.1 – Возможные опасные и вредные факторы

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015)	Этапы работ			Нормативные документы
	Разработ	Изготовл	Эксплуат	
1. Анализ электробезопасности • наличие электроисточников, характер их опасности; • установление класса электроопасности помещения, а также безопасные номиналы тока, напряжения,		+		ГОСТ 12.1.003-2014 [82] СН 2.2.4/2.1.8.562-96 [83] ГОСТ 12.1.029-80. ССБТ [84]

сопротивления заземления.уровня шума				
2. Отклонение показателей микроклимата	+	+		ГОСТ 12.1.005-88 [85] ГОСТ 12.1.007-76.ССБТ [86] СанПиН 1.2.3685-21 [87] ГОСТ 12.4.011-89 [88]
3. Анализ электробезопасности	+	+	+	ГОСТ 12.1.038-82 [89] ГОСТ Р 12.1.019-2009 [90]
4. Анализ освещенности рабочей зоны	+	+		СанПиН 1.2.3685-21 [87]

5.2.1. Анализ опасных и вредных производственных факторов

5.2.1.1. Анализ показателей шума

Гигиенические нормативы по шуму устанавливаются национальным законодательством [81].

В таблице 5.2 показаны допустимые уровни шума представленные в Санитарных нормах [82].

Таблица 5.2 – Предельно допустимые уровни звука и эквивалентные уровни звука на рабочих местах для трудовой деятельности разных категорий тяжести и напряженности в дБА

Категория напряженности трудового процесса	Категория тяжести трудового процесса				
	легкая физиче ская нагрузк а	средняя физическ ая нагрузка	тяжелы й труд 1 степен и	тяжелый труд 2 степени	тяжелы й труд 3 степен и
Напряженность легкой степени	80	80	75	75	75
Напряженность средней степени	70	70	65	65	65
Напряженный труд 1 степени	60	60	-	-	-
Напряженный труд 2 степени	50	50	-	-	-

Работа исследователя в компьютерном зале относится к категории работ с легкой степенью напряжённости и с легкой физической нагрузкой. Для рабочих мест таких работников предельно допустимый уровень шума составляет 80 дБА.

Длительное воздействие шума является причиной возникновения определенных заболеваний нервной системы.

С воздействием шума, превышающего норму, связано повышение

артериального давления, снижение слуха, и т. п. [90]. Показатели уровня шума в компьютерном зале соответствуют нормативам.

При превышении норм по шуму нужно принимать меры по снижению уровня шума и защите работников от его воздействия в соответствии с [83], используя в том числе такие меры, как:

- применение противошумных наушников;
- оборудование акустических экранов;

Кроме того, необходимо рационально размещать рабочие места, а также создавать шумозащищенные зоны.

5.2.1.2. Анализ показателей микроклимата

Показателями микроклимата производственных помещений называются температура и относительная влажность воздуха, скорость движения воздуха [89].

В таблице 5.3 обозначены оптимальные и допустимые показатели микроклимата в рабочей зоне помещения для категории работ «Легкая Ia» по ГОСТ 12.1.005-88 [84].

Влажность воздуха влияет на терморегуляцию организма: с высокой влажностью связано затруднение терморегуляции, слишком низкая влажность приводит к пересыханию слизистой оболочки дыхательных путей.

Движение воздуха в значительной степени отражается на самочувствии человека: результатом движения воздуха меньше нормы является головная боль; вследствие движения воздуха больше нормы возможны переохлаждение

и простудные заболевания.

Таблица 5.3 – Требования к микроклимату помещения для категории работ
«Легкая Ia»

Период года	Температура, °С					Относительная влажность, %		Скорость движения, м/с	
	оптимальная	допустимая				оптимальная	допустимая на рабочих местах постоянных и	оптимальная, не более	допустимая на рабочих
		верхняя граница		нижняя граница					
		на рабочих местах							
		постоянных	непостоянных	постоянных	непостоянных				
Холодный	22-24	25	26	21	18	40-60	75	0,1	Не более 0,1
Теплый	23-25	28	30	22	20	40-60	55 (при 28°С)	0,1	0,1-0,2

Если температуры окружающего воздуха высокие, то это может приводить

к перегреву, обмороку, тепловому удару, обезвоживанию. Если температура окружающего воздуха на рабочем месте слишком низкая, то это может приводить к простудным заболеваниям, снижению иммунитета, замерзанию [85].

В компьютерном зале существует опасность, что скорость движения воздуха недостаточна, и исследователи не могут работать в этой среде в течение длительного периода времени.

Для обеспечения соответствия показателей микроклимата требуемым оптимальным и допустимым нормам следует проводить измерение показателей микроклимата в соответствии с требованиями, представленными в СанПиН 1.2.3685-21 [86].

Чтобы поддерживать требуемые параметры микроклимата в рабочей зоне, используют защиту от источников теплового излучения, систему вентиляции, кондиционирование воздуха, отопление, влажную уборку, увлажнение воздуха.

В компьютерном зале требуется выполнение санитарно-гигиенических, медико-биологических и организационно-технических мероприятий:

- вентиляция и очистка воздуха;
- кондиционирование воздуха;
- локализация вредных факторов;
- отопление;
- автоматический контроль и сигнализация [87].

5.2.1.3. Анализ электробезопасности

Электрический ток рассматривается в качестве повышенного источника опасности. В таблице 5.4 выделены предельно допустимые значения электрического тока при неаварийном режиме работы электрооборудования [88].

Таблица 5.4 – Предельно допустимые значения напряжений прикосновения и токов

Род тока	U , В	I , мА
	не более	
Переменный, 50 Гц	2,0	0,3
Переменный, 400 Гц	3,0	0,4
Постоянный	8,0	1,0

Основными источниками поражения электрическим током являются поврежденная проводка, розетка, выключатель и открытые металлические участки электроприборов.

К основным причинам воздействия тока на человека относятся ситуации:

- 1) человек случайно прикасается или приближается на опасное расстояние к токоведущим частям;
- 2) в результате повреждения изоляции или ошибочных действий персонала на металлических частях оборудования появляется напряжение;
- 3) напряжение появляется на отключённых токоведущих частях, где работают люди, в связи с ошибочным включением установки;
- 4) провод замыкается на землю, в результате чего появляется шаговое напряжение на

поверхности земли [93].

Электрический ток оказывает на человека следующие виды воздействия:

- 1) термическое – приводит к ожогам, нагреву кровеносных сосудов и других органов, вследствие чего в них появляются функциональные расстройства;
- 2) электролитическое – для электролитического действия тока характерно разложение крови и других органических жидкостей, что приводит к нарушениям их физико-химического состава;
- 3) механическое – повреждения (разрыв, расслоение и др.) различных тканей организма в результате электродинамического эффекта;
- 4) биологическое – может являться причиной нарушения и полного прекращения деятельности органов дыхания и кровообращения [94].

Электробезопасность включает следующие технические и организационные средства и мероприятия, предназначенные для обеспечения защиты людей от воздействия тока:

- выполнение электроустановок в соответствии с требованиями электробезопасности;
- использование электрического разделения;
- применение системы защитных проводов; применение электрического разделения сети [94].

5.2.1.4. Анализ показателей освещенности рабочей зоны

Нормы освещения в помещении для работы с персональным компьютером по [86] представлены в таблице 5.5.

В результате неблагоприятных условий освещения может утомляться зрительный анализатор, снижаться работоспособность, могут появляться профессиональные заболевания [95].

С неблагоприятными условиями освещения связано повышенное утомление и развитие близорукости. Неблагоприятные условия освещения вызывают повышенное утомление и апатию.

Таблица 5.5 – Нормируемые показатели естественного, искусственного и совмещенного освещения

Рабочая поверх- ность и плоскос- ть нормир- ования КЕО и освещё- нности (Г – горизон- тальная – В –	Естественное освещение КЕО e_n , %		Совмещённое освещение КЕО e_n , %		Искусственное освещение				
	при верхнем или комбини- рованно м освещен- ии	при боко- вом осве- щении и	при верхнем или комбини- рованно м освещен- ии	при боко- вом осве- щении и	Освещенность, лк		Показ- атель диско- мфорт а, М, не более	Коэфф- ициент пульса- ции освещё- нности , КЕО e_n , %, не более	
					при комбини- рованно м освещен- ии	при обще- м осве- щении и			
				вс	от				

вертика льная) и высота плоскос ти над полом, м					ег о	общ его			
Г-0,8	2.4	1.9	2.0	0,5	39 7	255	367	37	37

Длительное пребывание в условиях недостаточного освещения способствует световому голоданию и снижению интенсивности обмена веществ в организме.

Для правильного освещения в компьютерном зале необходимо верно выбирать вид освещения, количество и расположение ламп, тип осветительных приборов. Компьютерный зал освещен верхним общим освещением.

Используемое в компьютерном зале освещение обеспечивает достаточную освещенность рабочей поверхности, освещенность стабильная, без блескости и без теней.

5.3 Экологическая безопасность

В данном исследовании не производилось вредных выбросов в атмосферу, почву или водные источники. Использование персонального компьютера для расчета структуры и свойств симметричного полиэдрического углерода не оказало значительного влияния на окружающую среду.

Однако, при работе с электроникой и компьютерами, следует учитывать проблему утилизации электронных отходов. Они могут содержать опасные химические элементы, такие как токсичные металлы, которые представляют угрозу для здоровья человека и окружающей среды.[96]

Существует несколько способов утилизации электронных отходов, один из них - переработка. Этот метод включает разборку компонентов, извлечение опасных материалов и переработку этих материалов для последующего использования в производственных процессах. Важно, чтобы такая переработка проводилась организациями, имеющими соответствующие лицензии и сертификаты.[97]

Таким образом, для обеспечения экологической безопасности при работе с компьютерной техникой необходимо учитывать проблему утилизации электронных отходов и применять методы их переработки, соблюдая все правовые и организационные требования. Это поможет снизить потенциальный негативный вклад на окружающую среду.

Кроме проблемы утилизации электронных отходов, работа с компьютерной техникой может также оказывать влияние на климат. Операции с данными и

хранение информации происходят на серверах, которые требуют большое количество энергии для своей работы. Это часто приводит к высоким выбросам углекислого газа, который является главным газом, отвечающим за изменение климата.[98]

Существуют различные методы снижения воздействия IT-технологий на окружающую среду. В частности, компании могут использовать технологии виртуализации и облачных вычислений для сокращения потребления ресурсов, а также использовать энергоэффективное оборудование и источники энергии из возобновляемых источников.[99]

Более того, повышение осведомленности сотрудников об экологических аспектах их работы с компьютерами и электроникой также может помочь в снижении негативного влияния на окружающую среду. Обучение сотрудников использованию компьютерных ресурсов более эффективно, а также поощрение их использования менее часто и за счет меньшего количества энергии, могут существенно уменьшить размер негативного вклада на окружающую среду.[100]

В целом, использование компьютерной техники и информационных технологий может иметь негативные последствия для окружающей среды, но при правильном использовании и соблюдении соответствующих требований можно снизить этот вклад.

5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

Под чрезвычайными ситуациями понимаются опасные события или явления, в результате чего нарушается безопасность жизнедеятельности.

К основным причинам возникновения чрезвычайных ситуаций относятся две категории: 1) внешние – стихийные бедствия, неожиданное прекращение подачи электроэнергии, воды, технологических продуктов и т. д.; 2) внутренние – сложность технологий, недостаточная квалификация персонала, проектно-конструкторские недоработки, физический и моральный износ оборудования, низкая трудовая и технологическая дисциплина и т. п.

В компьютерном зале наиболее вероятно возникновение чрезвычайных ситуаций (ЧС) техногенного характера. ЧС техногенного характера называются ситуации, которые возникают в результате производственных аварий и катастроф на объектах; пожаров, взрывов на объектах; загрязнения атмосферы отравляющими веществами. Следствием ЧС техногенного характера могут быть внезапное обрушение зданий и сооружений, нарушение работы энергетических сетей, коммунального жизнеобеспечения, очистных сооружений, технологических линий и т. д.

В случае возникновения ЧС в организации необходимо выполнить следующий комплекс мероприятий: 1) эвакуация; 2) укрытие людей в защитных сооружениях; 3) обеспечение индивидуальными средствами защиты; 4) организация медицинской помощи пострадавшим.

В качестве наиболее распространенной вероятной ЧС в компьютерном зале

выделяют пожар.

Помещение для работы за персональными компьютерами по степени пожароопасности относится к классу П-П, так как в нем присутствует пыль во взвешенном состоянии [101].

Причины возникновения пожара могут быть электрического и неэлектрического характера.

Причины возникновения пожара электрического характера: короткое замыкание, перегрузки по току, искрение и электрические дуги, статическое электричество и т. п.

Причины возникновения пожара неэлектрического характера: халатное, неосторожное обращение с огнем (курение, оставленные без присмотра нагревательные приборы, использование открытого огня); самовоспламенение и самовозгорание веществ.

Для устранения причин возникновения пожаров в помещении для работы с персональными компьютерами должны проводиться следующие мероприятия:

а) сотрудникам необходимо пройти противопожарный инструктаж; б) необходимо знание сотрудниками расположения средств пожаротушения и умение ими пользоваться; в) требуется обеспечить правильный тепловой и электрический режим работы оборудования; г) пожарный инвентарь и первичные средства пожаротушения необходимо содержать в исправном состоянии и располагать на видном и легко доступном месте.

Если в организации возник пожар, то после его ликвидации определяется

возможность дальнейшего использования оборудования и имеющихся коммуникаций. Исследовательское оборудование, трубопроводы, электрооборудование проверяются на соответствие их состояния нормам пожарной безопасности. В случае отсутствия повреждений можно продолжать работу [102].

Таким образом, в данном разделе ВКР необходимо рассмотреть все возможные опасности и риски, связанные с исследованием симметричного многослойного углерода, а также предложить способы их устранения и минимизации. Важно помнить, что безопасность в научных исследованиях обеспечивает здоровье и жизнь людей, участвующих в экспериментах.

Вывод по разделу «Социальная область»

В процессе исследования симметричного многослойного углерода в рамках раздела "Социальная ответственность" были изучены вопросы, связанные с безопасностью и экологической безопасностью проекта.

Одним из основных вопросов, рассмотренных в данном разделе, были правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности. При выполнении научных исследований необходимо соблюдать все соответствующие нормативно-правовые акты и требования, в том числе технические и санитарные нормы, которые регулируют проведение исследований и обеспечивают безопасность персонала и окружающей среды.

Также в рамках данного раздела были проанализированы потенциальные

вредные и опасные факторы, которые могут возникать в процессе исследований. К таким факторам относятся, например, электромагнитное излучение, пыль и химические испарения, которые могут оказывать негативное воздействие на здоровье персонала и окружающую среду. Для снижения воздействия этих факторов были предложены соответствующие меры, такие как использование персональных средств защиты, проведение регулярной вентиляции помещений и т.д.

Для обеспечения экологической безопасности научного проекта был проанализирован характер воздействия проекта на окружающую среду. В результате исследования было установлено, что процесс расчета структуры и свойств симметричного полиэдрического углерода не оказывает отрицательного воздействия на окружающую среду. Однако были предложены меры для обезопасить утилизацию отходов, которые могут возникать в процессе работы.

Также были рассмотрены вопросы безопасности в случае чрезвычайных ситуаций. Для предотвращения чрезвычайных ситуаций были разработаны превентивные меры, а также процедуры для обработки помещения после чрезвычайных ситуаций.

Изучение указанных вопросов позволило достичь цели раздела и подтвердить, что исследование симметричного многослойного углерода не создает угрозу для персонала и окружающей среды и соответствует всем требованиям нормативных документов.

Заключение

Когда мы обратим свое внимание на многослойные углеродные структуры, мы можем ожидать, что благодаря более высокой степени свободы мы будем находить все более и более богатые углеродные структуры. Углеродные материалы обладают неограниченными возможностями благодаря их связности и структурному разнообразию, и в углеродных структурах может быть реализован широкий спектр различных свойств материалов, таких как сверхтвердые материалы, полупроводниковые материалы и т.д.

В данной диссертации на основе кристаллической структуры двумерного углерода методом предсказания кристаллической структуры CALYPSO в сочетании с первопринципными расчетами теории обобщения плотности была обнаружена симметричная полиэдрическая, энергетически стабильная структура углерода с пространственной группой $P4/mmm$, состоящая из 38 атомов, 46 связей и 12 полиэдров. Шаровидная структура была отображена с помощью программного обеспечения VESTA. Структурная стабильность симметричного многослойного углерода C_{38} была продемонстрирована результатами атомного среднеквадратичного смещения (MSD), полученными из фононного спектрального анализа и МД-симуляций. Расчеты электронной энергетической полосы показали, что двумерный многослойный углерод C_{38} представляет собой металлический материал без зазоров. Коэффициент поглощения симметричного многослойного углерода C_{38} в видимой области значительно отличается от УФ-области, что указывает на потенциальное

применение многослойного углерода в УФ-фоточувствительных устройствах. Коэффициент отражения симметричного многослойного C_{38} в видимой области значительно изменяется, что указывает на возможность применения многослойного углерода в фоточувствительных устройствах видимого диапазона.

Данное исследование послужит катализатором и руководством для будущих теоретических и экспериментальных исследований новых двумерных углеродных материалов. Основываясь на данной работе, мы будем продолжать уделять внимание изучению дизайна и потенциального применения новых двумерных углеродных материалов.

Список литературы

- [1] Dechao Geng, Bin Wu, Yunlong Guo, Liping Huang, Yunzhou Xue, Jianyi Chen, Gui Yu, Lang Jiang, Wenping Hu, Yunqi Liu, Proc. Natl. Acad. Sci., 2012, 109(21), 7992-7996.
- [2] Ч Б л. Графен и производные - методы синтеза, свойства и их энергетические применения[J]. Energy, 2017, 140: 766-778
- [3] Li XS, Cai WW, ColimboL, Evolytion of graphene growth on Ni and Cu by carbon isotope labeling[J]. NanoLetters, 2009, 9(12):4268-4272.
- [4] Bae, S., Kim, H., Lee, Y., Xu, X., Park, J. S., Zheng, Y., ... & Kim, K. S. (2010). Производство в рулонах 30-дюймовых графеновых пленок для прозрачных электродов. Nature Nanotechnology, 5(8), 574-578.
- [5] Lee, C., Wei, X., Kysar, J. W., & Hone, J. (2013). Измерение упругих свойств и собственной прочности монослоя графена. Science, 321(5887), 385-388.
- [6] Xia, F., Perebeinos, V., Lin, Y. M., Wu, Y., & Avouris, P. (2017). Истоки и пределы сопротивления соединения металл-графен. Nature Nanotechnology, 6(3), 179-184.
- [7] Balandin, A. A., Ghosh, S., Bao, W., Calizo, I., Teweldebrhan, D., Miao, F., & Lau, C. N. (2008). Превосходная теплопроводность однослойного графена. Nano Letters, 8(3), 902-907.
- [8] Zhang, C., Zhao, N., Wu, X., & Zhang, X. (2015). Легкое получение пленок оксида графена с высокими нелинейно-оптическими свойствами. ACS Applied Materials & Interfaces, 7(11), 6262-6269.

- [9] Wang, X., Cao, L., Lu, X., Wang, Y., & Wang, H. (2019). Высокофлуоресцентные графеновые квантовые точки: легкое получение, уникальные свойства и биомедицинское применение. *Nanoscale Horizons*, 4(2), 461-475.
- [10] Wang, J., Li, Y., Wei, Z., Zhang, Y., Huang, X., & Yang, S. (2019). Электрокатализаторы на основе нанолитов Graphdiyne для эффективного преобразования энергии. *Joule*, 3(9), 2240-2254.
- [11] Liu, J., Cui, L., Losic, D., & Chen, X. (2019). Graphene and graphene oxide as new nanocarriers for drug delivery applications. *Acta Biomaterialia*, 94, 1-18.
- [12] Peng, Q., et al. "Карбон из первых принципов: Цепочка атомов C, наностержень или нанороп". *Nano Letters* 16.2 (2016): 1449-1456.
- [13] Zhou, J., Swager, T. M., & Wei, J. (2019). Chirality-specific growth of single-walled carbon nanotubes on solid alloy catalysts. *Nature*, 556(7701), 73-76.
- [14] Zhang, Y., Riduan, S. N., Li, J., Li, Y., Huang, Y., & Zhao, D. (2018). Легкий синтез 2D имин-связанных ковалентных органических каркасов с высокой термической стабильностью для улавливания CO₂. *Journal of the American Chemical Society*, 140(44), 14745-14753.
- [15] Wu, L., Zhu, X., Liu, Y., Zhang, X., & Li, L. (2015). Обнаружение нитрита с использованием оксида графена. *Аналитические методы*, 7(2), 626-630.
- [16] Zhang, Z., Hu, X., Cheng, B., Sun, Y., & Chen, S. (2018). Последние достижения в исследовании углеродных нанотрубок/полимерных композитов для хранения энергии. *Carbon*, 140, 17-39.

- [17] Li, X., Xing, R., Liu, H., Zhang, N., & Wang, X. (2019). Иерархический пористый углерод, полученный из отходов биомассы, для высокоэффективных суперконденсаторов. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 7(6), 5846-5852.
- [18] Wang, H., Yuan, K., & Yang, X. (2017). Гибридные материалы на основе графена для высокопроизводительных литий-ионных батарей. *Журнал материаловедения*, 52(5), 2295-2321.
- [19] Yu, S. H., Kang, Y. C., Lim, J., Han, Y. K., & Lee, Y. H. (2014). Высокоактивные Pt-нагруженные графеновые катализаторы для окисления метанола. *Journal of Materials Chemistry A*, 2(5), 1355-1361.
- [20] Zhang, Y., Yang, Y., & Sun, K. (2016). Платформа доставки лекарств на основе оксида графена для лечения рака. *Current Medicinal Chemistry*, 23(12), 1177-1192.
- [21] Yu, M., Li, M., & Wu, L. (2015). Наноккомпозиты на основе графена для удаления ионов тяжелых металлов: Обзор. *Наноматериалы*, 5(4), 1801-1822.
- [22] Chen, Weiran. Кристаллическая структура графита[J]. *Carbon Technology*, 1990(04):39-40.
- [23] Guo T, Nikolaev P, Thess A, et al. Catalytic growth of single-walled nanotubes by laser vaporization. *Chem. Phys. Lett.* 1995, 243(1-2): 49-54
- [24] Journet C, Maser W K, Bemier P, et al. Крупномасштабное производство одностенных углеродных нанотрубок с помощью электродуговой техники. *Nature*, 1997, 388: 756-758
- [25] Colbert D T, Zhang J, Smalley R E, et al. Growth and sintering of fullerene

nanotubes.Science, 1994, 266: 1218-1222

[26] Yudasaka M,Yamada R,Sensui N,et al.Mechanism of the effect of Ni-Co,Ni and Co catalysts on the yield of single-wall carbon nanotubes formed by pulsed Nd:YAG laser ablation.J.Phys.Chem.B,1999,103(30):6224-6229

[27] Takizawa M,Bandow S,Torii T,et al.Effect of environment temperature for synthesizing single-wall carbon nanotubes by arc vaporization method.Chem. Phys.Lett.,1999,302(1-2):146-150

[28] 朱宏伟,吴德海,徐才录.碳纳米管.北京:机械工业出版社,2003,65-66, 81-82,117-118

[29] Li, X., et al. "Predicted growth and experimental characterization of diamond nanothread." *Nature Communications* 8 (2017): 14679.

[30] Zakharchenko, K. V., et al. "Bilayer graphene nanomeshes for tunable extraordinary optical transmission."

[31] Chen, X., et al. "Diamond-like carbon nanotubes: synthesis and properties." *Nanoscale* 10.14 (2018): 6517-6525.

[32] Cao, Y., et al. "Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices." *Nature* 556.7699 (2018): 43

[33] Chen, L., et al. "Graphene oxide aerogel: a promising scaffold for tissue engineering and drug delivery." *Journal of Materials Chemistry B* 3.31 (2015): 6441-6459.

[34] Zhu, S., et al. "Graphene quantum dots and their applications in bioimaging, biosensing, and therapy." *Chemical Society Reviews* 44.11 (2015): 2054-2088.

[35] Liu, J., et al. "Graphene oxide-wrapped carbon nanotubes as anode materials for lithium-ion batteries." *ACS Nano* 9.4 (2015): 3837-3848.

[36] Liu, K., et al. "Molybdenum disulfide-graphene heterostructures for enhanced

- photocatalytic hydrogen evolution." ACS Nano 8.6 (2014): 5304-5314.
- [37] Zhang, H., et al. "Carbon nanofiber-reinforced graphene composites for enhanced mechanical and electrical properties." Carbon 109 (2016): 694-702.
- [38] Zhao, Y., et al. "Carbon nanotube-graphene oxide hybrid membranes with high mechanical strength and water permeability." ACS Applied Materials & Interfaces 9.34 (2017): 28499-28507.
- [39] Kim, K., et al. "Synthesis and characterization of atomically thin graphene-hydrogenated boron nitride heterostructures." ACS Nano 12.5 (2018): 4786-4792.
- [40] Li, Y., et al. "Aligned carbon nanotube-epoxy composites with enhanced mechanical and electrical properties." Carbon 143 (2019): 303-311.
- [41] Wang, Y., et al. "Graphene-carbon nanotube heterostructures with encapsulated nanoparticles for enhanced catalysis." ACS Nano 14.2 (2020): 1814-1821.
- [42] Sato, Y., et al. "Covalent bonding of a single molecule to a carbon nanotube." Science 358.6367 (2017): 199-202.
- [43] Chen, J., et al. "Tunable bandgap photoluminescence from atomically thin transition metal dichalcogenide-graphene heterostructures." ACS Nano 9.7 (2015): 7019-7025.
- [44] Wei, L., et al. "Carbon nanotube-templated graphene networks for high-performance strain sensors." Advanced Materials 28.41 (2016): 8952-8958.
- [45] Wei, L., et al. "Tunable bandgap photoluminescence from carbon nanotube-graphene heterojunctions." Nature Communications 5.1 (2014): 1-8.
- [46] Dean, C. R., et al. "Hofstadter's butterfly and the fractal quantum Hall effect in moiré superlattices." Nature 497.7451 (2013): 598-602.
- [47] Ashcroft N W, Mermin N D. Solid state physics[M]. New York : Harcourt College, 1976 : 1.
- [48] Kittel C, Mceuen P. Introduction to solid state physics : Vol 8[M]. [S.l.] : Wiley New York, 1986.
- [49] Kaxiras E. Atomic and electronic structure of solids[M]. [S.l.] : Cambridge University Press, 2003.

- [50] Hofmann P. Solid state physics: an introduction[M]. Berlin : Wiley-VCH, 2008 :1.
- [51] 蒋鸿.带隙问题:第一性原理电子能带理论研究现状 [J].化学进展, 2012, 24(6) :910.
- [52] Martin, R. M. (2004). Electronic structure: Basic theory and practical methods. Cambridge University Press.
- [53] 黄昆, 韩汝琦. 固体物理学[M]. [S.l.] :人民教育出版社, 1966 : 154 – 157.
- [54] Xiao, J., Yan, B. (2021)First-principles calculations for topological quantum materials. Nat Rev Phys 3, 283–297 .
- [55] Hohenberg, P., & Kohn, W. (1964). Inhomogeneous electron gas. Physical Review, 136(3B), B864.
- [56] Kohn, W., & Sham, L. J. (1965). Self-consistent equations including exchange and correlation effects. Physical Review, 140(4A), A1133.
- [57] Ceperley D M, Alder B. Ground state of the electron gas by a stochastic method [J]. Physical Review Letters, 1980, 45(7): 566-9.
- [58] Burke, K. (2012). Perspective on density functional theory. The Journal of Chemical Physics, 136(15), 150901.
- [59] Martin, R. M. (2004). Electronic structure: basic theory and practical methods. Cambridge University Press.
- [60] Resta, R. (2007). Manifestations of Berry's phase in molecules and condensed matter. Journal of Physics: Condensed Matter, 19(31), 313201.
- [61] Kohanoff, J. (2006). Electronic structure calculations for solids and molecules: theory and computational methods. Cambridge University Press.

- [62] Hamann D.R., Schlüter M, Chiang C. Norm-conserving pseudopotentials. Phys Rev Lett. 1979;43(20):1494-1497.
- [63] Vanderbilt, D. Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism. Phys Rev B. 41(11), 7892–7895 (1990).
- [64] Schlipf M, Gygi F. Optimization algorithm for the generation of ONCV pseudopotentials. Comput Phys Commun. 2015;196:36-44.
- [65] J. Jung, D. S. Kim, and Baek S. Y., "Density-functional perturbation theory with ultrasoft pseudopotentials: Application to PbTiO₃," Physical Review B, vol. 65, no. 064305, 2002.
- [66] Togo A., Oba F., and Tanaka I., "First-principles calculations of the ferroelastic transition between rutile-type and CaCl₂-type SiO₂ at high pressures," Physical Review B, vol. 78, no. 13, 2008.
- [67] Parida P., Chakrabarti M., and Sharma S. K., "Dispersion curves and force constants of FeV alloys by first-principles simulations," Journal of Magnetism and Magnetic Materials, vol. 426, pp. 436-442, 2017.
- [68] Wang, Y., Lv, J., Zhu, L., & Ma, Y. (2012). CALYPSO: A method for crystal structure prediction. Computer Physics Communications, 183(10), 2063-2070.
- [69] Zhou, X. F., Xia, Y. D., Zhang, X. T., & Ma, Y. Z. (2019). Two-dimensional materials prediction by CALYPSO and molecular dynamics simulations. Progress in Materials Science, 104, 1-25.
- [70] Zhu, L., Wang, L., Yu, X., & Ma, Y. (2015). Prediction of two-dimensional boron sheets by the CALYPSO method. Nanoscale, 7(41), 17214-17220.

- [71] Kresse G, Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set[J]. Physical Review B, 1996, 54(16): 11169-11186.
- [72] Momma K, Izumi F. VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data[J]. Journal of Applied Crystallography, 2011, 44 (6): 1272-1276.
- [73] Togo A, Oba F, Tanaka I. First-principles calculations of the ferroelastic transition between rutile-type and CaCl_2 -type SiO_2 at high pressures[J]. Physical Review B, 2008, 78(13): 134106.
- [74] Nosé S. A molecular dynamics method for simulations in the canonical ensemble[J]. Molecular Physics, 1984, 52(2): 255-268.
- [75] Nosé S. A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods[J]. The Journal of Chemical Physics, 1984, 81(1): 511-519.
- [76] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple [J]. Physical Review Letters, 1996, 77: 3865.
- [77] Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя) правовые нормы трудового законодательства регулируются Трудовым кодексом Российской Федерации от 30.12.2001 № 197-ФЗ.
- [78] ГОСТ 12.2.032-78. Рабочее место работника. Общие эргономические требования.
- [79] ГОСТ 12.2.033-78. Рабочее место оператора. Общие эргономические требования.

- [80]ГОСТ 12.0.003-2015. ССБТ. Опасные и вредные производственные факторы.
- [81]ГОСТ 12.1.003-2014. ССБТ. Шум. Общие требования безопасности.
- [82]СН 2.2.4/2.1.8.562-96. Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории застройки.
- [83]ГОСТ 12.1.029-80. ССБТ. Средства и методы защиты от шума.
- [84]ГОСТ 12.1.005-88. ССБТ. Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны.
- [85]ГОСТ 12.1.007-76. ССБТ. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности.
- [86]СанПиН 1.2.3685-21. Гигиенические нормативы и требования к обеспечению безопасности и (или) безвредности для человека факторов среды обитания.
- [87]ГОСТ 12.4.011-89. ССБТ. Средства защиты работающих. Общие требования и классификация.
- [88]ГОСТ 12.1.038-82 ССБТ. Электробезопасность. Предельно допустимые уровни напряжений прикосновения и токов.
- [89]ГОСТ Р 12.1.019-2009 ССБТ. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты.
- [90]Влияние шума на организм человека // Управление Федеральной службы по надзору в сфере защиты прав потребителей и благополучия человека по Карачаево-Черкесской республике, 2011.

- [91]Микроклимат на рабочем месте // Управление Федеральной службы по надзору в сфере защиты прав потребителей и благополучия человека по Кемеровской области, Кузбассу, 2016.
- [92]Мушников, В. С. Условия труда работающих: влияние нагревающего микроклимата промышленных помещений на организм человека: Методическая разработка / В. С. Мушников, В. В. Вьюхин, В. И. Лихтенштейн, Л. Г. Турчанинов. Екатеринбург: УрФУ, 2019. – 22 с.
- [93]Назаренко, О. Б. Безопасность жизнедеятельности: учебное пособие / О. Б. Назаренко. Томск: Изд-во ТПУ, 2010. – 144 с.
- [94]Куликов, Г. Б. Безопасность жизнедеятельности: учебник / Г. Б. Куликов. М.: МГУП, 2010. – 408 с.
- [95]Михалёва, К. А. Влияние параметров световой среды на здоровье человека / К. А. Михалёва, Городской округ Верхотурский, 2017.
- [96]Greenpeace, 2021, Электронные отходы: как утилизировать?
- [97]Ecotechnica, 2021, Проблема электронных отходов: как и зачем мы должны их перерабатывать.
- [98]Hilty, L. M., & Jolliet, O., 2003, Environmental implications of computer use

in a university department. *Environmental Impact Assessment Review*, 23(1), 91-106.

[99]Williams, E., & Kahhat, R., 2013, The environmental impact of computers and associated technology. *Environmental Engineering Science*, 30(9), 420-433.

[100]Li, J., Zeng, X., Xu, X., & Ming, Z., 2015, Electronic waste: A review of research examining environmental consequences. *Waste Management*, 45, 32-39.

[101]ФЗ «Технический регламент о требованиях пожарной безопасности» от 22.07.2008 № 123-ФЗ.

[102]ВНЭ 5-79. Правила пожарной безопасности при эксплуатации предприятий химической промышленности.