



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

Исследовательская школа химических и биомедицинских технологий
Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология
ООП «Перспективные химические и биомедицинские технологии»

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА МАГИСТРАНТА

Тема работы
Изучение свойств слоистого кристалла $Zn_2In_2S_5$ в наномасштабе

УДК 549.321:548.736.172:679.8

Обучающийся

Группа	ФИО	Подпись	Дата
9ДМ11	Чешев Дмитрий Леонидович		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ИШХБМТ	Родригес Рауль Давид Контрерас	Ph.D.		

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН ШБИП	Маланина Вероника Анатольевна	К.Э.Н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель	Авдеева Ирина Ивановна	-		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Романенко С.В.	Д.Х.Н.		

**ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОСВОЕНИЯ ООП
«Перспективные химические и биомедицинские технологии»**

Код компетенции	Наименование компетенции
Универсальные компетенции	
УК(У)-1	Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, выработать стратегию действий;
УК(У)-2	Способен управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла;
УК(У)-3	Способен организовывать и руководить работой команды, вырабатывая командную стратегию для достижения поставленной цели;
УК(У)-4	Способен применять современные коммуникативные технологии, в том числе на иностранном (-ых) языке (-ах), для академического и профессионального взаимодействия;
УК(У)-5	Способен анализировать и учитывать разнообразие культур в процессе межкультурного взаимодействия;
УК(У)-6	Способен определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки.
Общепрофессиональные компетенции	
ОПК(У)-1	Способен организовать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую работу, разрабатывать планы и программы проведения научных исследований и технических разработок;
ОПК(У)-2	Способен использовать современные приборы и методики, организовать проведение экспериментов и испытаний, проводить их обработку и анализировать их результаты
ОПК(У)-3	Способен разрабатывать нормы выработки, технологические нормативы на расход материалов, заготовок, топлива и электроэнергии, контролировать параметры технологического процесса, выбирать оборудование и технологическую оснастку
ОПК(У)-4	Способен находить оптимальные решения при создании продукции с учетом требований качества, надежности и стоимости, а также сроков исполнения, безопасности жизнедеятельности и экологической чистоты.
Профессиональные компетенции выпускников	
ПК(У)-1	Способен к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи
ПК(У)-2	Способен к созданию химических соединений, материалов и изделий биомедицинского назначения и (или) их физико-химического анализа
ПК(У)-3	Способен к применению методов математического моделирования химических соединений, материалов биомедицинского назначения и процессов химических и биомедицинских технологий
ПК(У)-4	Способен к защите объектов интеллектуальной собственности и коммерциализации прав на объекты интеллектуальной собственности
ПК (У)-5	Способен проектировать и организовывать учебный процесс по образовательным программам с использованием современных образовательных технологий



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

Исследовательская школа химических и биомедицинских технологий
Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология
ООП «Перспективные химические и биомедицинские технологии»

УТВЕРЖДАЮ:
Руководитель ООП
18.04.01 Химическая технология
_____ С.В. Романенко
14.03.2023 г.

ЗАДАНИЕ

на выполнение выпускной квалификационной работы

Обучающийся:

Группа	ФИО
9ДМ11	Чешев Дмитрий Леонидович

Тема работы:

Изучение свойств слоистого кристалла $Zn_2In_2S_5$ в наномасштабе

Утверждена приказом директора (дата, номер)

34-38/с от 03.02.2023 г.

Срок сдачи обучающимся выполненной работы:

13.06.2023 г.

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p>Исходные данные к работе</p> <p><i>(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 особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i></p>	<p>Объект исследования: слоистый кристалл $Zn_2In_2S_5$</p>
<p>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</p> <p><i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка</i></p>	<ol style="list-style-type: none"> 1. Литературный обзор существующих исследований свойств $Zn_2In_2S_5$ 2. Проведение исследования: <ol style="list-style-type: none"> 2.1. Изучение структурных свойств материала и его термической стабильности

задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).	<p>2.2.Изучение оптического поглощения в наномасштабе</p> <p>2.3.Изучение электрических и пьезоэлектрических свойств</p> <p>2.4. Демонстрация потенциального применения материала в качестве фотодетектора</p>
Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей)	Результаты исследования, представленные в виде графической информации
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы (с указанием разделов)	
Раздел	Консультант
Социальная ответственность	Авдеева Ирина Ивановна, старший преподаватель
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Маланина Вероника Анатольевна, доцент ОСГН ШБИП
Раздел ВКР на иностранном языке	Гончарова Любовь Анатольевна, доцент
Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:	
Свойства объемного $Zn_2In_2S_5$	
Электронные эффекты в структурах полупроводник/проводник	

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	14.03.2023 г.
-------------------------------------------------------------------------------------------------	---------------

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ИШХБМТ	Родригес Рауль Давид Контрерас	Ph.D.		14.03.2023 г.

Задание принял к исполнению обучающийся:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
9ДМ11	Чешев Дмитрий Леонидович		14.03.2023 г.



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

Исследовательская школа химических и биомедицинских технологий
Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология
ООП «Перспективные химические и биомедицинские технологии»
Уровень образования магистратура
Период выполнения весенний семестр 2022/2023 учебного года

КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН
выполнения выпускной квалификационной работы

Обучающийся:

Группа	ФИО
9ДМ11	Чешев Дмитрий Леонидович

Тема работы:

Изучение свойств слоистого кристалла $Zn_2In_2S_5$ в наномасштабе

Срок сдачи студентом выполненной работы:	13.06.2023 г.
------------------------------------------	---------------

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
22.03.2023 г.	Разработка раздела «Введение»	10
05.04.2023 г.	Разработка раздела «Литературный обзор»	10
19.04.2023 г.	Разработка раздела «Экспериментальная часть»	10
10.05.2023 г.	Разработка разделов «Материалы и методы» и «Результаты и обсуждения» с входящими в них подразделами	10
24.05.2023 г.	Разработка разделов «Социальная ответственность» и «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»	10
01.06.2023 г.	Оформление ВКР	10
15.06.2023 г.	Представление ВКР	40

СОСТАВИЛ:

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ИШХБМТ	Родригес Рауль Давид Контрерас	Ph.D.		15.03.2023

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Романенко С.В.	Д.Х.Н.		15.03.2023

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 109 с., 14 рис., 19 табл., 80 источников, 1 прил.

Ключевые слова: двумерный $Zn_2In_2S_5$, полупроводник, наноматериал, атомно-силовая микроскопия, рамановская спектроскопия, nano-vis, фотодетектор.

Объектом исследования (разработки) является двумерный полупроводник $Zn_2In_2S_5$, полученный методом механического отслоения от «материнского» кристалла.

Цель работы – изучение структурных, электрических и пьезоэлектрических свойств двумерного $Zn_2In_2S_5$, а также использование материала в качестве фотодетектора.

В ходе работы был проведен литературный обзор на существующие работы, посвященные $Zn_2In_2S_5$ в объемном и двумерном видах. Также были проведены эксперименты, результаты которых позволили сделать вывод о структуре материала, его термических, оптических и электрических свойствах.

В результате было установлено, что материал обладает гексагональной кристаллической решеткой с пространственной группой $R3m$, термической стабильностью и оптическим поглощением в синей области видимого диапазона спектра излучения. Также были изучены электронные свойства, которые позволили установить n-тип проводимости, работу выхода электрона и пьезоэлектрический отклик. В качестве прикладного аспекта работы был собран фотодетектор на основе $Zn_2In_2S_5$ и изучены его оптоэлектронные свойства.

Работа носит характер фундаментальных исследований, вследствие чего, в ней не приведены расчеты конструктивных параметров устройств и т.п.

Степень внедрения: низкая

Область применения: оптоэлектроника, электроника

Экономическая эффективность/значимость на данном этапе низкая. Однако стоит учесть растущий по экспоненте рост интереса к двумерным полупроводниковым материалам, которые в будущем могут быть использованы в передовых устройствах оптоэлектроники и электроники.

В будущем планируется продолжить работу по масштабированию полезной площади фотодетектора из $Zn_2In_2S_5$

Содержание

Определения, сокращения, обозначения, ссылки.....	11
Введение	12
1. Литературный обзор.....	13
1.1. Двумерные материалы как объект исследования.	13
1.1.1. Структурные особенности двумерных материалов.....	13
1.1.2. Электронная структура и электрические свойства.....	15
1.1.3. Оптические свойства	18
1.2. Эффекты, возникающие на интерфейсе контакта проводник/полупроводник	21
1.3. История изучения свойств $Zn_2In_2S_5$	23
2. Материалы и методы исследования	27
3. Результаты и обсуждения	28
3.1. Изучение структуры ZIS методами HRTEM, Рамановской спектроскопии и Nano-vis	28
3.2. Электрические и пьезоэлектрические свойства $Zn_2In_2S_5$	37
3.3. Фотодетектор на основе ZIS	43
4. Социальная ответственность	49
4.1. Введение	49
4.2. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	49
4.1.1. Специальные правовые нормы трудового законодательства	49
4.2.2. Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя.....	50
4.3. Производственная безопасность	51
4.4. Анализ вредных производственных факторов	52
4.4.1. Отклонение показателей микроклимата в помещении.....	52

4.4.2. Недостаточный уровень освещения рабочей зоны	54
4.4.3. Психофизиологическое воздействие на организм человека	56
4.3.4. Нагрузка зрительных анализаторов	57
4.4.5. Производственные факторы, связанные с акустическими колебаниями в производственной среде (повышенным уровнем и другими неблагоприятными характеристиками шума)	58
4.4.6. Вредные/химические вещества	58
4.5. Анализ опасных производственных факторов	59
4.5.1. Воздействие лазерного излучения	59
4.5.2. Поражение током.....	59
4.5.3. Короткое замыкание.....	60
4.5.4. Статическое электричество	61
4.6. Экологическая безопасность	61
4.7. Безопасность в чрезвычайных ситуациях	63
4.8. Заключение по разделу «Социальная ответственность»	64
5. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение..	67
5.1. Предпроектный анализ	67
5.1.1. Потенциальные потребители результатов исследования.....	67
5.1.2. Анализ конкурентных технических решений.....	67
5.1.3. SWOT-анализ	69
5.2. Планирование научно-исследовательских работ	70
5.2.1. Структура работ в рамках научного исследования.....	70
5.2.2. Определение трудоемкости выполнения работ.....	71
5.3. Бюджет научно-технического исследования	74
5.3.1. Расчет материальных затрат исследования	74
5.3.2. Расчет затрат на специальное оборудование для научных работ....	76
5.3.3. Основная заработная плата.....	77

5.3.4. Дополнительная заработная плата научно-производственного персонала.....	80
5.3.5. Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления).....	80
5.3.6. Расчет затрат на научные и производственные командировки	81
5.3.7. Накладные расходы	81
5.3.8. Формирование бюджета затрат.....	81
5.4. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования..	82
5.5. Общий вывод по разделу.....	85
Заключение.....	86
Список литературы.....	87
Приложение #1.....	97

ОПРЕДЕЛЕНИЯ, СОКРАЩЕНИЯ, ОБОЗНАЧЕНИЯ, ССЫЛКИ

АСМ – атомно-силовая микроскопия

МЗК – микроскопия зонда Кельвина

МДС – микроскопия диэлектрических сил

МПС – микроскопия пьезоэлектрических сил

ZIS – $Zn_2In_2S_5$

ВОПГ – высокоориентированный пиролитический графит

2D – двумерный

3D – трехмерный (объемный)

HRTEM – просвечивающая электронная микроскопия с высоким разрешением

XRD – рентгеноструктурный анализ

XPS – фотоэлектронная спектроскопия

PTE – фототермическое расширение

ВВЕДЕНИЕ

Двумерные материалы, за последние десятилетия, привлекают все больший интерес научного сообщества. Причинами такого интереса являются их критически малые размеры и, проявляющиеся благодаря таким размерам, уникальные свойства. В области двумерных материалов наиболее известным и изученным является графен – слой углерода толщиной в один атом. Графен также получил широкую известность благодаря его свойствам, а именно высокой проводимости и прочности структуры. Помимо графена, слоистые кристаллы также являются перспективными материалами благодаря их электрическим, оптическим и структурным свойствам. Например, наиболее известный MoS_2 обладает полупроводниковыми свойствами и высокой степенью проводимости, что делает его перспективным кандидатом для электронных и оптоэлектронных устройств. Помимо этого, хорошо известны такие материалы, как h-BN , WS_2 , In_2S_3 , PtSe_2 , $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ и WSe_2 . Однако вместе с тем, довольно большое количество материалов получает меньше внимания, хотя область их потенциального применения также широка. Одним из таких материалов является $\text{Zn}_2\text{In}_2\text{S}_5$ (ZIS), представитель системы Zn-In-S, широко исследованный в объемной форме, но в разы меньше в наномасштабе.

Данная работа фокусируется на изучении структурных, электронных и оптических свойств двумерного ZIS. В ходе работы основными задачами стояли:

- 1) Литературный обзор на существующие работы, посвященные ZIS;
- 2) Определение экспериментов, направленных на изучение свойств материала;
- 3) Анализ полученных данных;
- 4) Демонстрация потенциального применения материала в качестве фотодетектора.

1. Литературный обзор

1.1. Двумерные материалы как объект исследования.

Двумерные материалы – класс материалов, обладающих только двумя размерностями, а именно шириной и длиной, в то время как их толщина составляет обычно один атом, как в случае с графеном, или много меньше латеральных размеров материала. 2D материалы представляют особый интерес для научного сообщества благодаря своим свойствам. При изучении таких материалов обычно обращают внимание на их структурные, электрические и оптические свойства, поскольку они играют основную роль в дальнейшей интеграции двумерных материалов в передовые устройства электроники, фотоники, энергетики и т.д.

1.1.1. Структурные особенности двумерных материалов

Поскольку монослои имеют толщину, сопоставимую с размерами элементарной ячейки, будет справедливо начать описание свойств с нее.

Элементарная ячейка кристаллической решетки – минимальный объем кристаллической решетки, сформированный атомами материала, и образующий некоторую объемную геометрическую фигуру. На рисунке 1 представлены сингонии кристаллических решеток.

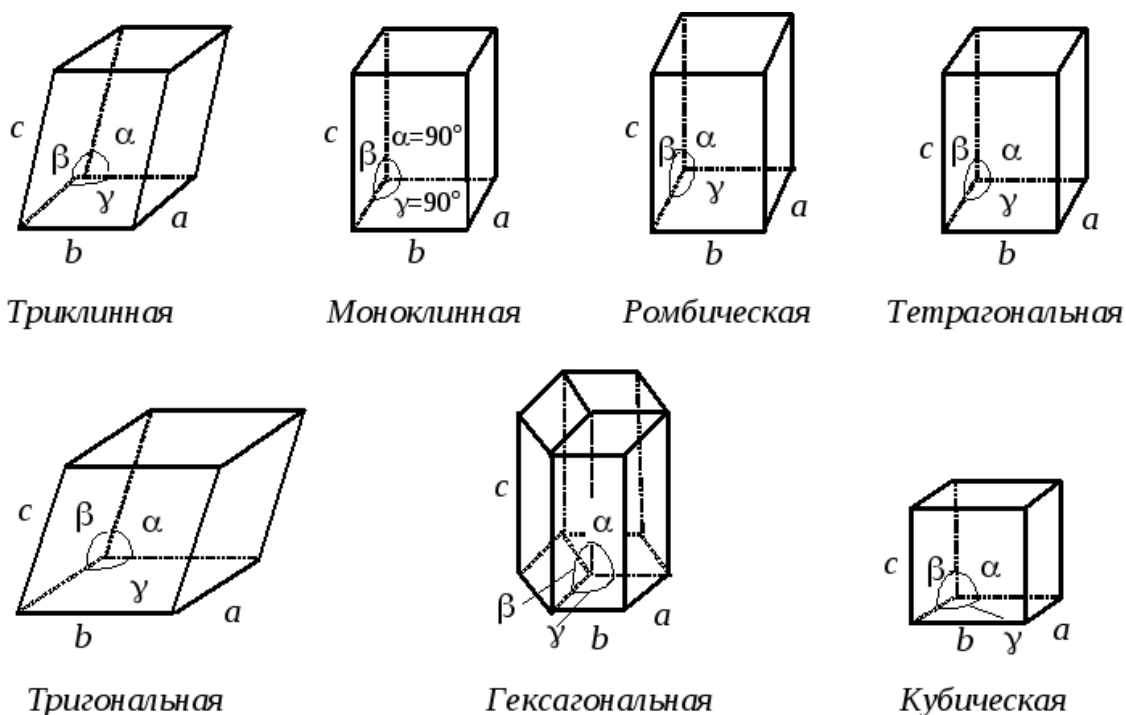


Рисунок 1 – Сингонии элементарных ячеек

Всего существует 7 сингоний, состоящих из 230 пространственных групп. Проводя *трансляцию*, т.е. размножение одной элементарной ячейки ее параллельным переносом, выстраивается кристаллическая решетка материала. Также важной особенностью структуры двумерных материалов является их кристалличность. В кристалличность входят такие параметры, как количество дефектов в структуре, является ли монослой единым кристаллом, или монокристаллом, либо же состоит из множества более мелких кристаллов, которые в свою очередь выстраивают поликристаллическую структуру. В зависимости от условий синтеза, монослой может являться одним кристаллом, или поликристаллическим, т.е. состоящим из отдельных кристаллов. Также, независимо от того, является ли материал монокристаллом или нет, количество дефектов в его структуре также играет большую роль в его кристалличности. На данный момент этот вопрос является одним из важнейших в области получения и исследования свойств двумерных материалов, поскольку их структура напрямую влияет на такие свойства как электропроводность и механическая прочность. Поэтому острым стоит вопрос синтеза именно монокристаллов двумерных материалов. Также стоит отметить масштабируемость синтеза. Изначально в работах, посвященных двумерным материалам, говорилось о получении монослоев механическим отслоением. Однако такие слои были малы по площади, что препятствует их применению в производстве электронных устройств. Однако на сегодняшний день уже известны работы, в которых демонстрируются способы получения достаточно больших по площади монослоев. Например, был показан синтез монокристаллического монослоя MoS_2 на золотой подложке методом эпитаксии [1]. В ходе этой работы будут использованы методы, позволяющие определить тип кристаллической решетки, а также визуализировать возможные дефекты в структуре материала методом *nano-vis*.

1.1.2. Электронная структура и электрические свойства

К одним из наиболее привлекательных свойств двумерных материалов можно отнести их электрические свойства. Действительно, с открытием и изучением графена встал вопрос о применимости как его, так и других материалов, в том числе полупроводников, для устройств современной электроники и фотоники. Однако, начав изучение монослоев, было обнаружено, что они проявляют совершенно иные свойства, в отличие от их трехмерных аналогов. Причиной этому указывают как и критически малые размеры материалов, так и их электронная структура. Электронная структура двумерного материала, в частности, полупроводника, обычно рассматривается с точки зрения зонной теории. Известно, что полупроводники являются таковыми благодаря наличию запрещенной зоны. *Запрещенная зона* — это некоторое количество энергии, разделяющей валентную зону и зону проводимости материала. Для того, чтобы электрон совершил зонно-зонный переход, необходимо приложить количество энергии, равное или больше ширины запрещенной зоны. Графически, это можно изобразить следующим образом (см. рисунок 2)

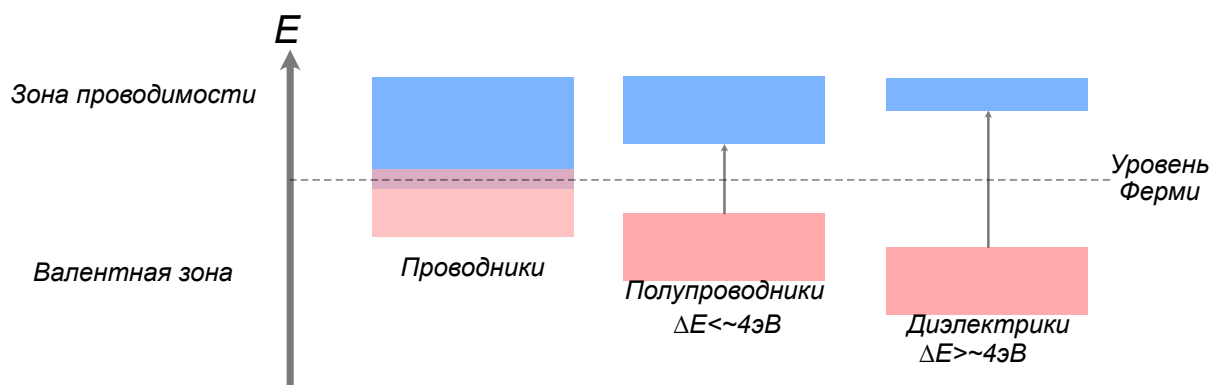


Рисунок 2 – Схематическое изображение зонной структуры для проводников, полупроводников и диэлектриков

На рисунке 2 видно, что в случае проводников запрещенной зоны как таковой не существует, т.е. валентная зона и зона проводимости перекрываются, тогда как в случае диэлектриков запрещенная зона

достаточно широка, чтобы препятствовать зонно-зонному переходу электрона.

Источником энергии для перехода электрона в возбужденное состояние может являться, например, приложенное напряжение, поглощенный фотон или тепловая энергия. В таком случае зонно-зонный переход в полупроводнике может выражаться в появлении тока или излучении во время релаксации. Однако не всегда возбужденные электроны достигают зоны проводимости. Рассмотрим простейший случай поглощения электроном фотона. Как известно, фотон является квантом электромагнитного излучения и обладает некоторой энергией в зависимости от длины волны излучения. При поглощении электроном фотона, электрон переходит в возбужденное состояние. Если же энергия фотона была недостаточна для переноса электрона из валентной зоны в зону проводимости, то такая система (атом или молекула, поглотившая фотон) достигает только виртуального уровня, и, отдавая свою энергию, релаксирует на прежний энергетический уровень. Понятие виртуального уровня приводит к тому, что электронная структура полупроводников (а также диэлектриков) является дискретной. Другими словами, валентная, запрещенная и зона проводимости обладают дискретностью, т.е. набором виртуальных уровней энергии. Рисунок 3 демонстрирует дискретность энергетических уровней твердого тела.

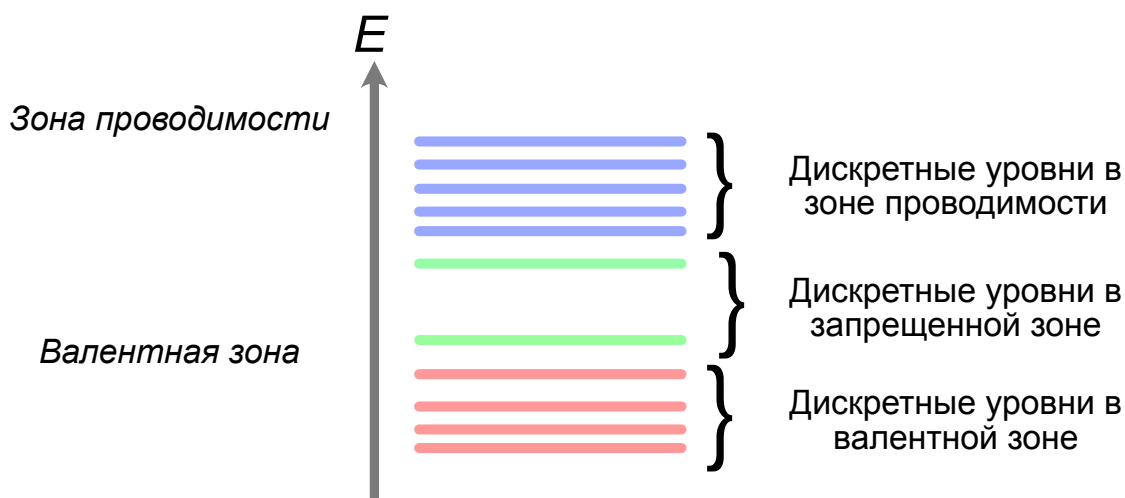


Рисунок 3 – Дискретность энергетических уровней в твердом теле

Помимо наличия дискретных уровней, в области запрещенной зоны находится уровень Ферми. *Уровень Ферми* или *энергия Ферми* – это энергетический уровень, который представляет собой границу между заполненными и незаполненными квантовыми состояниями в материале при температуре 0 К. Это означает, что все состояния, имеющие энергию меньше уровня Ферми, заполнены электронами, а состояния с энергией выше уровня Ферми не заполнены. Также указывается, что при абсолютном нуле уровень Ферми может с 50% вероятностью оказаться заполненным носителем заряда. При этом с ростом температуры шанс того, что уровень Ферми будет занят электроном выше вследствие теплового движения частиц. Для полупроводников с разным типом проводимости энергия Ферми будет находиться в разных положениях внутри запрещенной зоны. Так, в случае полупроводника р-типа уровень Ферми будет находиться ближе к валентной зоне, в то время как для полупроводника n-типа он будет находиться ближе к зоне проводимости. В контексте данной работы численное значение уровня Ферми является одним из ключевых параметров, поскольку влияет на конечное применение ZIS в качестве фотодетектора и, в перспективе, оптимизации параметров материала и контактов для достижения наибольшей эффективности.

Рассмотрение электронной структуры материала не обходится без учета типа перехода. Под типом здесь понимается то, является ли переход прямым или непрямым. Прямыми являются полупроводники, у которых электрон, находящийся на наиболее низком энергетическом уровне зоны проводимости и электрон, находящийся на наиболее высоком уровне в валентной зоне, имеют одинаковый квазиимпульс. Под квазиимпульсом понимается волновой вектор волновой функции, описываемый следующей формулой:

$$p = \hbar k$$

– где \hbar – постоянная Планка, k – волновой вектор.

Непрямозонными полупроводниками называют те, у которых электроны валентной зоны и зоны проводимости имели различный квазиимпульс. Однако для такой структуры характерны низкая вероятность рекомбинационного перехода и низкая внутренняя квантовая эффективность. У прямозонных полупроводников, наоборот, имеется высокая вероятность зонных переходов и высокая квантовая эффективность, поскольку у электронов нет необходимости после зонного перехода выравнять значение импульса. Полупроводники и полупроводниковые структуры с прямозонным переходом обычно являются основными компонентами лазеров ввиду все той же высокой квантовой эффективности. Примечательно, что некоторые монослои, такие как MoS_2 , MoSe_2 , могут обладать прямозонным переходом. Это связано с тем, что при уменьшении размеров полупроводника до монослоя, эффекты квантовой механики начинают играть существенную роль в его свойствах, помимо этого, возникают поверхностные состояния. В малых размерах, электроны и дырки могут находиться только в определенных квантовых состояниях, которые определяются размерами полупроводника и его структурой. Эти квантовые состояния могут привести к образованию прямозонного перехода, который является основой для создания полупроводниковых приборов, таких как светодиоды и лазеры. Кроме того, при уменьшении размеров полупроводника могут возникать поверхностные состояния, влияющие на его свойства и возможность образования прямозонного перехода. Поверхностные состояния полупроводников относятся к электронным состояниям, которые существуют на поверхности полупроводникового материала. Эти состояния возникают из-за нарушения симметрии и измененной связующей среды на поверхности материала по сравнению с его объемной структурой.

1.1.3. Оптические свойства

Оптические свойства двумерных материалов также сильно отличаются от свойств объемных структур. Это вызвано тем, что в случае объемного материала световая волна будет взаимодействовать, в большинстве своем, только с его поверхностью. Наноматериалы, такие как наночастицы и монослои будут целиком взаимодействовать со световой волной, поскольку их размеры много меньше длины волны света и, соответственно, лежат за дифракционным пределом. Также, чем меньше материал, тем сильнее в нем будут локализованы носители заряда. Это означает, что такие материалы будут иметь более сильное поглощение и напряженность электрического поля на их поверхности. На основе локализации и усиления напряженности электрического поля основаны такие методы, как зонд-усиленная рамановская спектроскопия и поверхностно-усиленная рамановская спектроскопия. Вдобавок, такие частицы будут активнее проявлять каталитические свойства, что было показано на примерах наночастиц золота, серебра, платины, а также на примерах других наночастиц в области фотокатализа [2].

Высокая поглощательная способность наноматериалов, в основном, присуща наночастицам. Плоские монослои, напротив, обладают высоким коэффициентом пропускания. Это свойство можно использовать для создания проводящих прозрачных покрытий. К примеру, было показано стекло с покрытием из графена, обладающее проводимостью, а также, фотохромное стекло [3,4]. Помимо графена, широкое применение в качестве фотодетекторов нашли полупроводниковые материалы. На рисунке 4 показаны диапазоны спектральной чувствительности материалов, начиная от УФ и заканчивая дальним ИК.

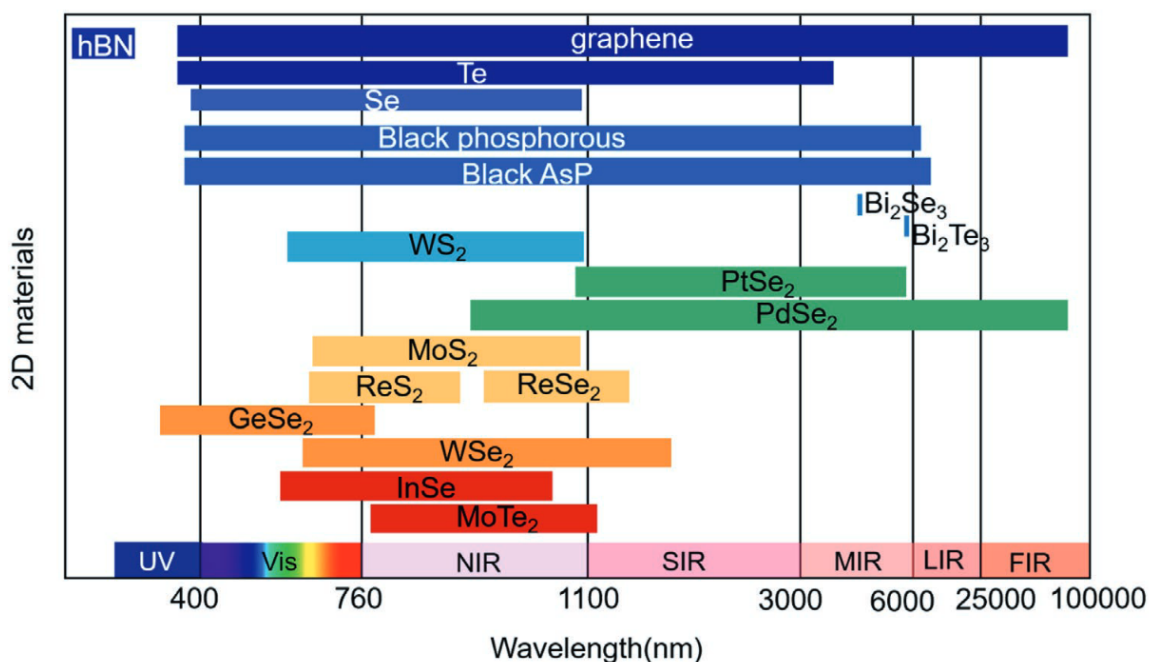


Рисунок 4 – Диапазоны спектральной чувствительности материалов [5]

Как уже было сказано, двумерные полупроводниковые материалы, благодаря своим выдающимся свойствам, перспективны для использования в передовых устройствах электроники и фотоники. Одним из основных применений считается их использование в качестве фотодетекторов. Однако вместе с тем возникает вопрос о их недостатках, таких как сильная зависимость эффективности от наличия дефектов в структуре и низкого коэффициента поглощения.

При разработке фотодетектора на основе 2D полупроводника должны учитываться такие параметры, как:

- *Чувствительность* – отношение напряжения/тока на фотодетекторе к оптической мощности. Характеристика описывает отношение выходного сигнала фотодетектора к падающему излучению;
- *Спектральная чувствительность* – чувствительность фотодетектора в зависимости от длины волны падающего света.
- *Квантовая эффективность* – отношение числа падающих на поверхность детектора фотонов к числу сгенерированных ими электрон-дырочных пар;

- *Эквивалентная мощность шумов* – параметр, определяющий минимальную мощность излучения, которую фотодетектор может различить на фоне шумов;

- *Обнаружительная способность* – величина, обратная эквивалентной мощности шумов;

- *Время отклика* – время, за которое сигнал, записанный фотодетектором, увеличивается с 10% до 90% своей интенсивности.

1.2. Эффекты, возникающие на интерфейсе контакта проводник/полупроводник

В области полупроводниковых приборов при подходе к нанометровому диапазону начинают проявляться различные электронные эффекты. В контексте данной работы необходимо будет учитывать электронные эффекты при взаимодействии полупроводникового ZIS с проводящим высокоориентированным пиролитическим графитом (ВОПГ) и золотыми контактами.

Опираясь на работу Чжана, при контакте полупроводникового и проводникового материалов, их электронные уровни будут искривляться [6]. Этот эффект вызван воздействием свободных электронов, находящихся у поверхности проводника в месте контакта с полупроводником. Также этот эффект может быть вызван поверхностными состояниями на самом полупроводнике. Концепт искривления электронных уровней был разработан Шоттки и Моттом для объяснения принципа работы выпрямляющего контакта в изделиях. Когда полупроводник и металл находятся в контакте, будет происходить перетекание электронов из одного материала в другой из-за разницы в работах выхода электронов. Работа выхода электронов описывает энергию, необходимую для «экстракции» электрона с поверхности материала в пространство.

Рассмотрим 2 случая, когда в контакте с проводником находится полупроводник n-типа с разной, по отношению к проводнику, работой выхода. Для случая, когда $\phi_m > \phi_s$, где ϕ_m –

работа выхода проводника, ϕ_m – работа выхода полупроводника :
 находясь вне контакта, энергетические уровни полупроводника обычно изображаются прямыми, т.е. неизменными. При контакте полупроводника с металлом начинают происходить процессы переноса носителей зарядов. Для n-типа будет происходить перетекание электронов из полупроводника в проводник с формированием обедненного слоя на интерфейсе. При этом также будут выравниваться уровни Ферми, а на самом месте контакта образуется т.н. барьер Шоттки. Схема показана на рисунке 5.

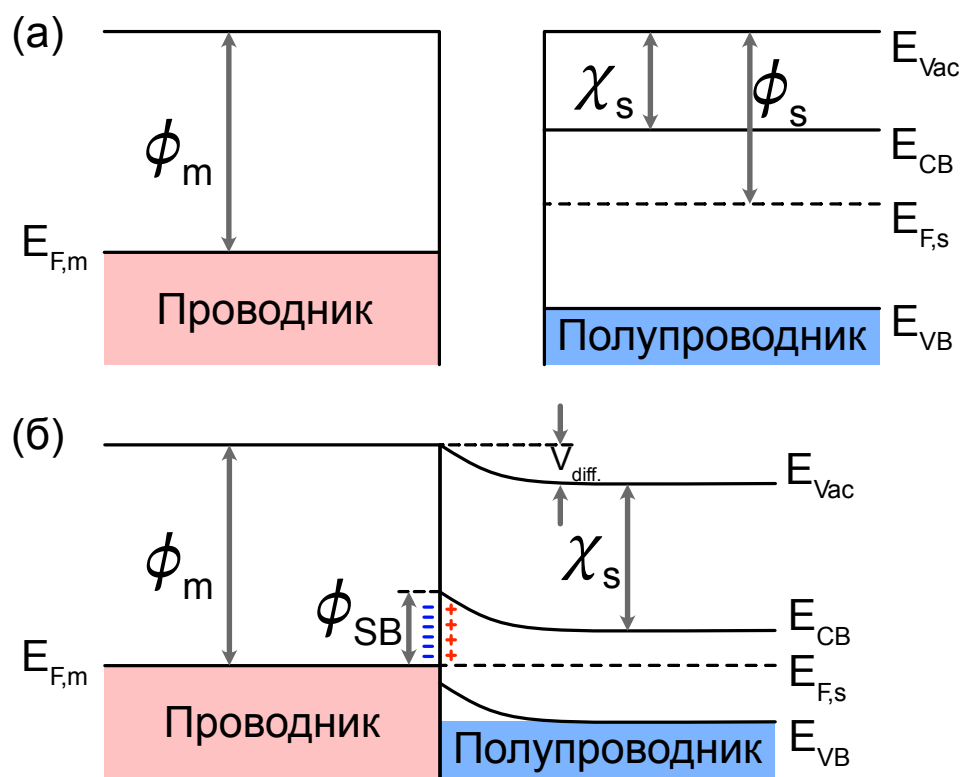


Рисунок 5 – Схема искривления энергетических уровней и распределение зарядов для случая $\phi_m > \phi_s$. (а) Проводник и полупроводник не находятся в контакте, уровни не искривлены, (б) Проводник и полупроводник в контакте, уровни искривлены, формируется барьер Шоттки.

Для случая $\phi_m < \phi_s$ будут происходить похожие процессы, но в данном случае в месте контакта со стороны полупроводника будет формироваться слой с избыточным зарядом (электроны), в то время как положительный заряд будет формироваться со стороны проводника. При

этом уровне Ферми также будут выравниваться и до тех пор, пока они не выравнены, другими словами, до установления равновесия, будут происходить процессы перетекания зарядов. Схематически это изображено на рисунке 6. После окончания процесса на месте контакта будет формироваться омический контакт, т.е. контакт с линейной и симметричной вольт-амперной характеристикой.

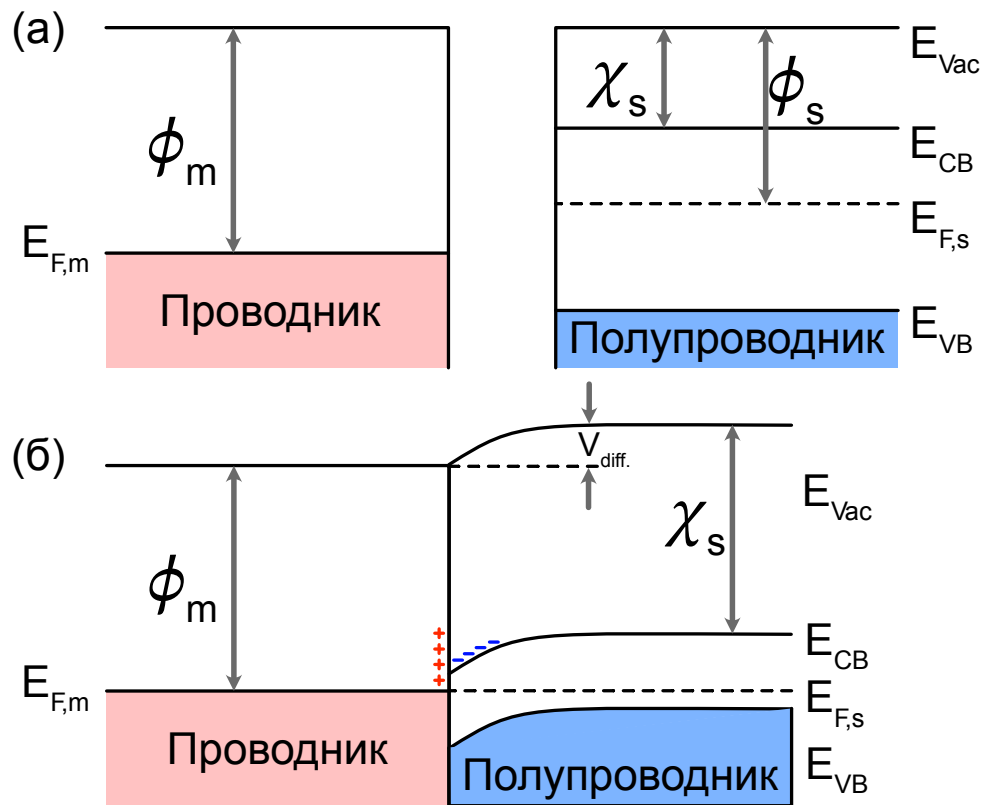


Рисунок 6 – Схема искривления энергетических уровней и распределение зарядов для случая $\phi_m < \phi_s$. (а) Проводник и ПП не находятся в контакте, уровни не искривлены, (б) Проводник и ПП в контакте, уровни искривлены, формируется омический контакт

После формирования обедненной/заряженной областей, энергетические уровни будут искривляться благодаря электрическому полю между проводником и полупроводником, что и называется **искривлением уровней**.

1.3. История изучения свойств $Zn_2In_2S_5$

Слоистые кристаллы – материалы, структура которых представляет собой набор монокристаллических слоев, образующих трехмерную структуру. Обычно монокристаллические слои представляют собой двумерные листы, толщина которых сопоставима с толщиной элементарной ячейки материала и может варьироваться в зависимости от его состава. На сегодняшний день известно большое количество слоистых материалов, которые использовались и используются для создания двумерных слоев [7-11].

В контексте данной работы ZIS также является слоистым кристаллом, изучение которого началось в конце 60-х группой Радаустана [12]. Они впервые сообщили о существовании промежуточной фазы в системе Zn-In-S, в дополнение к уже известным $ZnIn_2S_4$ и $Zn_3In_2S_6$, которая, по их предположению, может образовываться во время синтеза приведенных выше кристаллов. С помощью рентгеноструктурного анализа они установили стехиометрическую формулу данной фазы ($Zn_2In_2S_5$) с ромбоэдрической симметрией. Также авторы кратко обсудили метод синтеза и оптические свойства материала.

Более узконаправленные исследования были проведены позднее. В-первых, были сняты спектры поглощения, которые позволили судить о ширине оптической запрещенной зоны материала [13]. Таким образом было установлено, что значение запрещенной зоны для материала с гексагональной решеткой составило 2.7 эВ. Было показано и влияние температуры на ширину запрещенной зоны, которая уменьшалась с ростом температуры с ~2.8 эВ до 2.7 эВ [14]. Помимо оптических свойств были изучены электрические свойства материала. Для ZIS был установлен n-тип проводимости, а также изучена проводимость в параллельном и перпендикулярных направлениях по отношению к кристаллографическим осям. Была установлена анизотропия проводимости, а именно различие значений тока в $5 \cdot 10^4$ между перпендикулярным и параллельным направлениями осей. Анизотропия оставалась постоянной и при низких

температурах, но уменьшалась с повышением температуры, что объясняется возникновением термоэлектронной эмиссии через потенциальный барьер.

В ходе синтеза слоистых кристаллов нередко случаи возникновения структурных дефектов. Их природа может быть различна, начиная от внутренних напряжений, приведших к формированию дислокаций, и заканчивая примесями и остатками прекурсоров. В случае ZIS, был показан как синтез кристаллов без дефектов, так и с их присутствием в структуре. Такие включения главным образом влияют на электрические свойства полупроводников, снижая их кристалличность и образуя центры рассеяния электронов. Анизотропия проводимости $ZnIn_2S_4$ с $Zn_2In_2S_5$ в качестве дефектов состава была исследована Анагностопулосом и Плоссом [15]. Кроме того, модель $ZnIn_2S_4:Zn_2In_2S_5$ также была применена Галлосом и др. [16] для теоретического описания анизотропии проводимости в системах с присутствием в них структурных дефектов.

В общем и целом, теоретические и практические результаты, полученные при исследовании объемного ZIS, демонстрируют, что эта фаза является многообещающим кандидатом для фотонных и электронных устройств благодаря своей термической стабильности. Тем не менее, данные работы были проведены в конце прошлого века, когда оборудование для изучения свойств наноматериалов только создавалось и развивалось. С открытием и изучением графена в 2004 году фокус научного сообщества резко сместился в сторону изучения свойств двумерных структур, причем не только графена, но и других двумерных материалов [17]. В системе Zn-In-S также присутствовал материал ($ZnIn_2S_4$), привлекавший интерес как перспективный фотокатализатор, в то время как ZIS и другим материалам в системе Zn-In-S уделялось мало внимания.

Система $Zn_nIn_2S_{n+3}$, в частности $ZnIn_2S_4$, привлекла значительное внимание благодаря ширине запрещенной зоны (2.3-2.4 эВ в зависимости от типа решетки), сопоставимой с энергиями фотонов в видимом спектре излучения, тем самым, найдя применение в фотокаталитических

приложениях. Различные структурные, морфологические, электрические, оптические и фотокаталитические свойства данного материала были исследованы в различных аллотропных формах и микро/наноструктурах в диапазоне от 1D до 3D, подчеркивая его преимущества и ограничения в качестве фотокатализатора [18]. Среди преимуществ - меньшая токсичность, простота изготовления и повышенная стабильность в фотокаталитических реакциях по сравнению с другими халькогенидами металлов [19].

И хотя $Zn_2In_2S_5$ обладает потенциалом в электронике и фотонике, его двумерные слои не были достаточно исследованы. Так, за почти 20 лет было опубликовано всего несколько работ, посвященных данному материалу. Например, наноллисты ZIS с включенными дефектами показали высокую эффективность для фотокаталитического получения водорода [20]. В данном случае дефекты, а именно перегруппированные вакансии серы замедляют рекомбинацию носителей зарядов. Структуры, включающие ZIS, такие как $Zn_2In_2S_5/Ti_3C_2(O, OH)_x$, также продемонстрировали свой потенциал в фотокаталитическом способе получения водорода в видимом диапазоне спектра излучения [21]. В данной работе Ti_3C_2 использовался для более эффективного разделения заряда, сгенерированного ZIS в результате облучения. Помимо этой структуры был изучен композит CoP/ $Zn_2In_2S_5$, при помощи которого показано соединение метанола с этиленгликолем [22]. Недавние исследования показали, что ZIS является перспективным материалом для фотокаталитического выделения водорода и очистки воды [23,24]. Однако большинство исследований было сосредоточено на материале как компоненте гетероструктур и в форме наночастиц, например, наносфер. Кроме того, предыдущие исследования были в основном сосредоточены на объемных кристаллах, а не на многослойных или однослойных наноструктурах.

Резюмируя, можно сказать, что основной фокус исследований данного материала был направлен на его объемную структуру и ее свойства, а также на его фотокаталитическую активность. В данной работе мы впервые

демонстрируем электрические, оптические и структурные свойства двумерного $Zn_2In_2S_5$, которые ранее никогда не изучались в наномасштабе.

Характеризация материала проводилась с использованием нескольких аналитических методов, включая рамановскую спектроскопию, атомно-силовую микроскопию (АСМ), сканирующую электронную микроскопию с энергодисперсионной рентгеновской спектроскопией (SEM EDX), просвечивающую электронную микроскопию высокого разрешения (HRTEM) и дифракцию рентгеновских лучей (XRD). Кроме того, для изучения оптического поглощения и фототермического расширения материала в наномасштабе был применен новый метод, объединяющий в себе АСМ и оптическую спектроскопию – *Nano-vis*. Кроме того, для изучения пьезоэлектрических свойств ZIS была применена пьезоэлектрическая силовая микроскопия (PFM). Результаты этого всестороннего исследования открывают новые возможности для будущих исследований применимости этой тройной двумерной фазы в наноэлектронике [25].

2. Материалы и методы исследования

Слоистый кристалл $Zn_2In_2S_5$ был синтезирован методом химического газофазного переноса с использованием ZnS и In_2S_3 в стехиометрических количествах в качестве прекурсоров и йода в качестве транспортного агента. Путем регулирования температуры источника и приемника можно получать различные стехиометрические соединения системы Zn-In-S: $ZnIn_2S_4$, $Zn_2In_2S_5$ и $Zn_3In_2S_6$. Методом механического отслаивания были получены ультратонкие слои материала на ВОПГ. В результате на графитовой поверхности можно было наблюдать слои сероватого оттенка. Передовые методы АСМ, такие как метод зонда Кельвина, диэлектрическая силовая микроскопия и измерение тока были выполнены с использованием NTEGRA Spectra II с использованием проводящих зондов NSG30/Pt, NSG01/Pt с постоянной упругости 20-100 Н/м, 1,45-15,1 Н/м, соответственно. Для

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа 9ДМ11		ФИО Чешев Дмитрий Леонидович	
Школа	Исследовательская школа химических и биомедицинских технологий	Отделение (НОЦ)	-
Уровень образования	магистратура	Направление/специальность	18.04.01 Химическая технология / Перспективные химические и биомедицинские технологии

Тема ВКР:

Изучение свойств слоистого кристалла $Zn_2In_2S_5$ в наномасштабе

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

<p>Введение</p> <ul style="list-style-type: none"> – Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика) и области его применения. – Описание рабочей зоны (рабочего места) при разработке проектного решения/при эксплуатации 	<p><i>Объект исследования:</i> двумерные слои полупроводникового $Zn_2In_2S_5$</p> <p><i>Область применения:</i> наноэлектроника, фотодетекторы</p> <p><i>Рабочая зона:</i> лаборатория</p> <p><i>Размеры помещения</i> 10*5 м.</p> <p><i>Количество и наименование оборудования рабочей зоны:</i> атомно-силовой микроскоп, Рамановский спектрометр, потенциостат, зондовая станция, источник лазерного излучения.</p> <p><i>Рабочие процессы, связанные с объектом исследования, осуществляющиеся в рабочей зоне:</i> измерение спектров комбинационного рассеяния, измерение электрических и фотоэлектрических величин.</p>
------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

<p>1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности при разработке проектного решения/при эксплуатации</p> <ul style="list-style-type: none"> – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. ГОСТ 12.2.032-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования. 2. ГОСТ 21889-76. Система «человек-машина». Кресло человека-оператора. Общие эргономические требования. 3. ГОСТ 23000-78. Система «человек-машина». Пульты управления. Общие эргономические требования. 4. ГОСТ 22269-76 Рабочее место оператора. Взаимное расположение элементов рабочего места 5. ГОСТ Р ИСО 9241-2-2009. Эргономические требования к проведению офисных работ с использованием видеодисплейных терминалов (VDT) 6. ПНД Ф 12.13.1-03. Методические рекомендации. Техника безопасности при работе в аналитических лабораториях (общие положения). 7. СП 2.4.3648-20 «Санитарно-эпидемиологические требования к организации воспитания и обучения, отдыха и оздоровления детей и молодежи». 8. Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 № 197-ФЗ (ред. От 27.12.2018)
<p>2. Производственная безопасность при разработке проектного решения:</p> <ul style="list-style-type: none"> – Анализ выявленных вредных и опасных производственных 	<p>Вредные факторы:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Отклонение показателей микроклимата в помещении • Недостаточный уровень освещенности рабочей зоны

факторов	<ul style="list-style-type: none"> • Нервно-психологические перегрузки • Шум и вибрации • Нагрузка зрительных анализаторов • Вредные/химические вещества <p>Опасные факторы:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Воздействие лазерного излучения • Поражение током • Короткое замыкание • Статическое электричество <p>Средства коллективной защиты:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Средства вентиляции и очистки воздуха • Защитный кожух от лазерного излучения • Защитное заземление <p>Средства индивидуальной защиты:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Халат • Перчатки • Защитные очки • Защитные очки от лазерного излучения <p>Расчет системы искусственного освещения.</p>
<p>3. Экологическая безопасность <u>при разработке проектного решения:</u></p>	<p>Воздействие на селитебную зону: при возникновении пожаров и взрывов могут пострадать соседние корпуса. Воздействие на литосферу: загрязнение почвы химическими веществами, ТБО, утилизация микросхем отработавшего оборудования</p> <p>Воздействие на гидросферу: загрязнение водных источников компьютерными отходами. Смыв остатков реагентов (хим.вещ-в) в канализацию.</p> <p>Воздействие на атмосферу: выброс парниковых газов.</p>
<p>4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях <u>при разработке проектного решения:</u></p>	<p>Возможные ЧС: пожар, наводнение, землетрясение. Наиболее типичная ЧС: пожар.</p>
<p>Дата выдачи задания для раздела по линейному графику 01.03.2023</p>	

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель	Авдеева Ирина Ивановна	-		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
9ДМ11	Чешев Дмитрий Леонидович		

4. СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ

4.1. Введение

Выпускная квалификационная работа представляет собой результаты исследования свойств двумерного материала $Zn_2In_2S_5$ в наномасштабе. Суть работы заключается в использовании различных методов наноанализа, таких как рамановская спектроскопия, атомно-силовая микроскопия и методы измерения электрических величин с помощью зондовой станции. Потенциальное применение данного исследования, в широком смысле, состоит в использовании двумерных слоистых полупроводниковых материалов в передовой нано- и оптоэлектронике, что является одним из стратегических направлений развития экономики РФ в области нанoeлектронной промышленности.

Цель данного раздела: проанализировать опасные и вредные факторы, оказывающие воздействие на человека при конкретном виде деятельности, а также рассмотреть воздействия разрабатываемой системы модернизации на окружающую среду, правовые и организационные вопросы, мероприятия в чрезвычайных ситуациях.

Анализ условий труда проведен в соответствии с рабочим местом магистранта, на котором выполнялась выпускная квалификационная работа. В рамках ВКР работа проводилась на базе лаборатории наноанализа команды TERS-team (3-й корпус, 001 ауд.). На время выполнения работы студент выполнял роль инженера-исследователя.

4.2. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

Безопасность жизнедеятельности в лаборатории зависит от характера выполняемой работы, наличия вредных и опасных факторов на рабочем месте и наличия средств коллективной и индивидуальной защиты.

4.1.1. Специальные правовые нормы трудового законодательства

Согласно Трудовому кодексу Российской Федерации от 30.12.2001 №197-ФЗ (ред. От 19.12.2022) [63] работа проводится в режиме гибкого

рабочего времени, т.е. начало, окончание и общая продолжительность рабочего дня определяется по соглашению сторон. В таком режиме работодатель обеспечивает отработку работником суммарного количества рабочих часов в течении соответствующих учетных периодов, т.е. рабочего дня, недели или месяца. Формат оплаты труда – сдельная.

Продолжительность рабочего дня, согласно Трудовому кодексу, не превышает 40 часов в неделю [63]. В рабочий процесс включены перерывы: обеденный перерыв длительностью 1 час, перерыв на отдых продолжительностью 10 минут каждые 2 часа.

4.2.2. Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя

Требования к рабочему месту в положении сидя прописаны и установлены в ГОСТ 12.2.032-78. «ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования» [64]. Согласно стандарту, рабочее место для выполнения работ сидя организуется при легкой работе, не требующей свободного передвижения работника, а также при работе средней тяжести в случаях, обусловленных особенностями технологического процесса. Конструкция рабочего места и расположение органов управления и обработки информации должны учитывать антропометрические, физиологические и психологические аспекты, а также характер работы. Стандартом регламентированы такие параметры, как зона досягаемости моторного поля в вертикальной и горизонтальной плоскостях при высоте рабочей поверхности над полом в 725 мм. Также стандартом регламентированы зоны зрительного наблюдения в вертикальной и горизонтальной плоскостях, тем самым давая указания для размещения средств информации, например, мониторов персональных компьютеров (ПК).

При работе с ПК используются параметры, регламентированные ГОСТ Р 50923-96 «Дисплеи. Рабочее место оператора» [65]:

- Регулируемая высота рабочей поверхности стола в пределах от 680 мм до 800 мм.
- Размеры рабочей поверхности должны быть не менее 600 (800) x 1200 (1600) x 720 (Глубина x Ширина x Нерегулируемая высота)
- Поверхность сидения должна иметь ширину и глубину не менее 400 мм. Сидение должно иметь возможность регулировки угла наклона от 15° вперед до 5° назад. Регулируемая высота сидения лежит в пределах 400 – 500 мм.
- Дисплей на рабочем месте должен быть установлен ниже уровня глаз оператора. Уровень наблюдения экрана оператора относительно линии взгляда не должен превышать 60°.

4.3. Производственная безопасность

В данном подразделе приводятся вредные и опасные факторы, которые могут возникнуть в ходе выполнения диссертационной работы. Факторы, приведенные далее в таблице 1 по ГОСТ 12.0.003-2015 [66] могут привести к травме, внезапному ухудшению здоровья, заболеваниям и снижению трудоспособности.

Таблица 1 – Основные опасные и вредные факторы, создаваемые в научно-исследовательской лаборатории при проведении работ

Факторы ГОСТ 12.0.003-2015	Нормативные документы
Отклонение показателей микроклимата в помещении	СанПиН 1.2.3685-21 "Гигиенические нормативы и требования к обеспечению безопасности и (или) безвредности для человека факторов среды обитания" ГОСТ Р ИСО 14644-1-2017 «Чистые помещения и связанные с ними контролируемые среды».
Недостаточный уровень освещенности рабочей зоны	СП 52.13330.2016 Естественное и искусственное освещение
Психофизическое воздействие на организм человека	ГОСТ 12.2.032-78. «ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования»
Воздействие лазерного	ГОСТ 31581-2012 «Лазерная безопасность. Общие

излучения	требования безопасности при разработке и эксплуатации лазерных изделий»
Поражение током	ГОСТ Р 58698-2019 «Защита от поражения электрическим током»
Короткое замыкание	ГОСТ 12.1.019-2017 ССБТ. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты.
Нагрузка зрительных анализаторов	СП 52.13330.2016 Естественное и искусственное освещение ГОСТ Р 50923-96 «Дисплеи. Рабочее место оператора»
Статическое электричество	ГОСТ 31613-2012 Электростатическая искробезопасность. Общие технические требования и методы испытаний
Поражение химическими веществами	ГОСТ 12.1.007-76 ССБТ. «Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности»
Производственные факторы, связанные с акустическими колебаниями в производственной среде (повышенным уровнем и другими неблагоприятными характеристиками шума)	ГОСТ 12.1.003-2014 ССБТ. «Шум. Общие требования безопасности»

4.4. Анализ вредных производственных факторов

4.4.1. Отклонение показателей микроклимата в помещении

При работе в помещении лаборатории вопрос контроля микроклимата стоит на первом месте. При работе с наноматериалами необходимо обеспечить чистоту проведения экспериментов согласно ГОСТ Р ИСО 14644-1-2017 «Чистые помещения и связанные с ними контролируемые среды» [67]. Так, для исследовательского оборудования типа спектрометр, атомно-силовой микроскоп и 4-х зондовая станция, необходимо обеспечить класс чистоты не хуже 8 ИСО. Ниже приведены концентрации частиц на м³ для помещения данного класса чистоты.

Таблица 2 – Классификация чистых помещений по ИСО 14644-1:2015

Класс ИСО	Предельно допустимые концентрации частиц, частиц/м ³ , с размерами, равными или большими следующих значений					
	0.1 мкм	0.2 мкм	0.3 мкм	0.5 мкм	1.0 мкм	5.0 мкм

8 ИСО	a	a	a	3520000	8320000	29300
--------------	---	---	---	---------	---------	-------

^a – В этой части таблицы пределы концентраций частиц не устанавливаются ввиду их очень высоких значений.

В офисной части лабораторий необходимые параметры микроклимата, создающие комфортные условия для работы, представлены в таблице 3. Нормы зависят от времени года, характера трудового процесса и характера производственного помещения и нормируется СанПиН 1.2.3685-21 [68].

Таблица 3 – Допустимые величины параметров микроклимата на рабочих местах в помещениях

Период года	Категория работ по уровню энергозатрат, Вт	Температура воздуха, °С		Температура поверхностей, °С	Относительная влажность воздуха, %	Скорость движения воздуха, м/с	
		диапазон ниже опт. величин	диапазон выше опт. величин			для диапазона температур воздуха ниже опт. величин, не более	для диапазона температур воздуха выше опт. величин, не более
1	2	3	4	5	6	7	8
Холодный	16 (140-174)	19,0-20,9	23,1-24,0	18,0-25,0	15-75	0,1	0,2
Теплый	16 (140-174)	20,0-21,9	24,1-28,0	19,0-29,0	15-75	0,1	0,2

Интенсивность теплового облучения рабочих от нагретых поверхностей технологического оборудования, осветительных приборов, инсоляция на постоянных и непостоянных рабочих местах не должна превышать 35 Вт/м² при облучении 50% поверхности тела и более, 70 Вт/м² –

при величине облучаемой поверхности от 25 до 50% и 100 Вт/м² – при облучении не более 25% поверхности тела [68].

Температура в рабочей зоне поддерживается отоплением в холодный период и вентиляцией в теплый период.

Отопление лаборатории и корпуса в целом водяное с применением радиаторов, что обеспечивает постоянное и равномерное нагревание воздуха в холодное время года. В рабочем помещении имеется как естественная вентиляция, так и принудительная.

4.4.2. Недостаточный уровень освещения рабочей зоны

Освещение является неотъемлемой частью рабочего помещения. Качественное освещение способствует поддержанию работоспособности человека на протяжении рабочего дня. Освещение в помещении создается за счет комбинации естественного освещения и искусственного.

Аудитория 001 относится к классу зрительной работы А-2. Освещенность на поверхности стола в зоне работы должна составлять не менее 500 лк [69], так же для комфортной работы необходимо сделать освещение без бликов на поверхности экрана и рабочей поверхности.

Основная часть работы выполнялась в рабочей зоне за персональным компьютером, поэтому качественное освещение является важным фактором.

Произведем расчет искусственного освещения. В аудитории используются два типа световых приборов: линейные и точечные; их характеристики и параметры приведены в таблице 4. Расположение световых приборов представлено на рисунке 1.

Таблица 4 – Световые приборы, используемые в аудитории №250

№	Наименование	Мощность, Вт	Световой поток, лм
1	ЭРА-LM-8-840-A1-addl	8	950

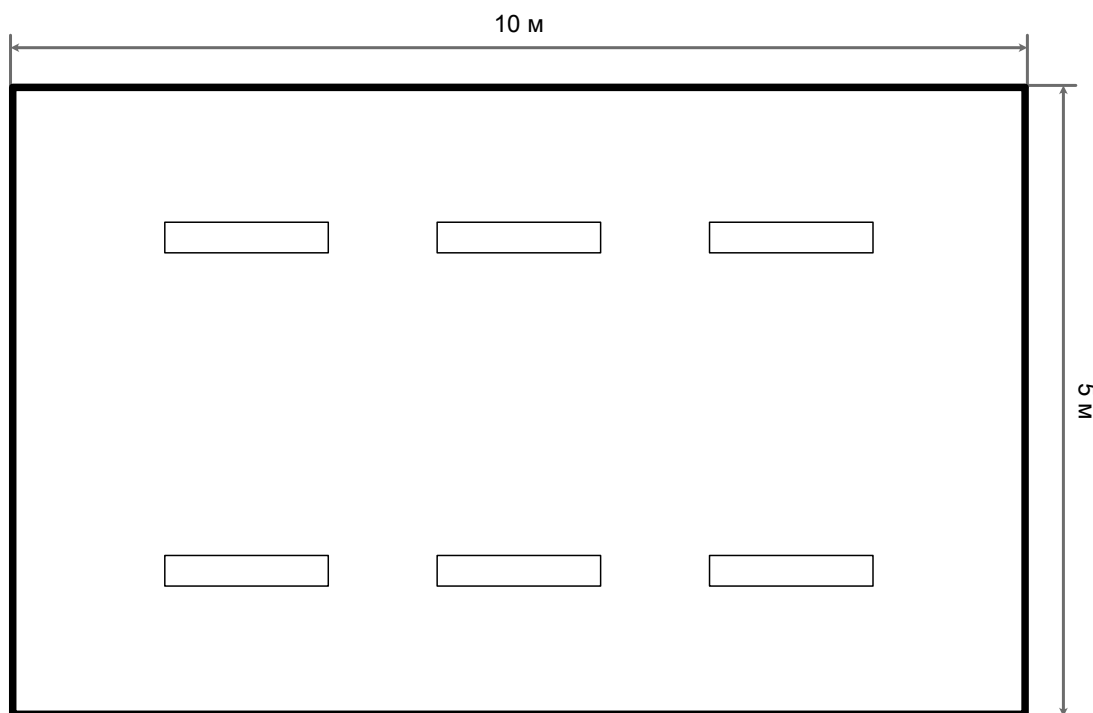


Рисунок 1 – Расположение световых приборов в аудитории №001

Расчет общего равномерного искусственного освещения горизонтальной поверхности будет проведен методом коэффициента использования светового потока, учитывающим световой поток, отраженный от потолка и стен.

Необходимо определить индекс помещения по формуле:

$$i = \frac{A \cdot B}{h \cdot (A + B)} \quad (5.2)$$

где A – длина помещения – 10 м; B – ширина помещения – 5 м; h – высота подвеса светильника над рабочей поверхностью

Определим расчетную высоту:

$$h = H - h_{\text{рп}} = 2,5 - 0,8 = 1,7 \text{ м} \quad (5.3)$$

где $h_{\text{рп}}$ – высота рабочей поверхности над полом – 0,8 м.

Примем коэффициент отражения от стен $\rho_{\text{ст}} = 50\%$, тогда:

$$i = \frac{10 \text{ м} \cdot 5 \text{ м}}{1,7 \cdot (10 \text{ м} + 5 \text{ м})} = 1,96$$

В помещении установлено 6 световых приборов ($N = 6$), требуемая минимальная освещенность $E_{\text{min}} = 500$ лк, коэффициент запаса, учитывающий

загрязнение светильника (источника света, светотехнической арматуры, стен и пр., т.е. отражающих поверхностей), наличие в атмосфере дыма, пыли, светодиодных светильников $k = 1,1$, числовое соотношение неравномерности освещения $z = 1$, коэффициент использования светового потока $\eta = 0,6$, коэффициенты отражения: от стен – 50%, потолка – 70%, пола – 20%, тогда световой поток:

$$\Phi = \frac{E_{min} \cdot k \cdot S \cdot z}{N \cdot \eta} = \frac{500 \cdot 1,1 \cdot 50 \cdot 1}{6 \cdot 0,6} = 7638,9 \text{ лм} \quad (5.4)$$

Сравниваем расчетный световой поток со световым потоком установленных световых приборов в аудитории:

$$\begin{aligned} -10\% &\leq \frac{\Phi_{исп} - \Phi_{расч}}{\Phi_{исп}} \cdot 100\% \leq 20\% \\ -10\% &\leq \frac{950 - 7638,9}{950} \cdot 100\% \leq 20\% \\ -10\% &\leq -6,75\% \leq 20\% \end{aligned}$$

Световой поток осветительных приборов, используемых в аудитории № 001 соответствует стандартным нормам освещения помещения (500 лк).

Электрическая мощность всей осветительной системы рассчитывается по формуле (с учетом, что в каждом осветительном приборе установлено 2 лампы):

$$P = N_{л} \cdot P_{л} = 96 \text{ Вт.}$$

4.4.3. Психофизиологическое воздействие на организм человека

Психофизиологическими вредными и опасными факторами при работе в лаборатории за измерительным оборудованием, согласно классификатору, являются [6]:

- напряжение зрения и внимания;
- интеллектуальные, эмоциональные и длительные статические нагрузки;
- монотонность труда;
- нерациональная организация рабочего места.

Наиболее часто встречающиеся последствия длительной работы за ПК у операторов, это переутомление, боль и сухость в глазах, головные боли, тянущие боли в мышцах шеи, спины, ног, снижение концентрации внимания. Наиболее важным из всех перечисленных ощущений являются переутомление глаз и снижение концентрации внимания.

Негативными последствиями данных ощущений являются возможные ошибки в работе на измерительном оборудовании, которые могут привести к искажению результатов измерения, повреждению образца или оборудования. Для снижения влияния ощущений на процесс работы, необходимым является соблюдение режима работы за компьютером, который предусматривает 15-минутный перерыв каждые 2 часа. За время перерыва рекомендуется выполнять легкую гимнастику, а также упражнения для снятия напряжения с глаз. Помимо этого, необходимо организовать рабочее место с учетом требований ГОСТ 12.2.032-78. «ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования» для повышения комфортности рабочего места и, тем самым, снижения усталости и напряжения работника.

4.3.4. Нагрузка зрительных анализаторов

Под нагрузкой зрительных анализаторов подразумевается нагрузка на глаза работника при выполнении им работ. В лаборатории напряжение на глазах является следствием работы с малыми объектами (атомно-силовые зонды, подложки и наноматериалы), оптическими приборами (микроскоп) и источниками излучения.

Для минимизации нагрузки на зрительный аппарат необходимо выполнять упражнения для снятия напряжения с глаз, а также организовать правильное освещение рабочей области, а именно, иметь освещенность на рабочей плоскости не менее 500 лк [65,71].

4.4.5. Производственные факторы, связанные с акустическими колебаниями в производственной среде (повышенным уровнем и другими неблагоприятными характеристиками шума)

Согласно ГОСТ 12.1.003-2014 ССБТ. «Шум. Общие требования безопасности», шум – звуковые колебания в диапазоне слышимых частот, способные оказать вредное воздействие на безопасность и здоровье работника [9]. Для данной работы, источниками шума в лаборатории будут являться система охлаждения регистрирующего устройства спектрометра, система охлаждения лазеров, включенные вытяжки вытяжных шкафов и вакуумный насос. Согласно СанПин 1.2.3685-21 «Гигиенические нормативы и требования к обеспечению безопасности и (или) безвредности для человека факторов среды обитания» шум в лаборатории не должен превышать уровня в 75 дБ [68].

Для минимизации воздействия шума на работника, работодатель применяет ряд мер, направленных на оценку риска потери слуха работником, проектирование рабочих мест с учетом допустимого уровня риска, использования малошумных машин и специальных звукоизолирующих систем.

4.4.6. Вредные/химические вещества

В рамках ВКР производится работа с химическими веществами, а именно слоистыми кристаллами $Zn_2In_2S_5$, а также сложными органическими соединениями.

Работа с химическими веществами подразумевает использование средств индивидуальной и коллективной защиты, а также соблюдения правил техники безопасности при работе в химической лаборатории согласно ГОСТ 12.1.007-76 ССБТ «Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности» [72].

При работе с химическими веществами необходимо соблюдать технику безопасности, а именно:

- Использовать средства индивидуальной защиты (халат, перчатки);

- Использовать средства коллективной защиты (работа в вытяжном шкафу с включенной вытяжкой);
- Обеспечить защиту дыхательных путей;
- Не подвергать химические вещества воздействию прямых солнечных лучей;
- Соблюдать правила хранения химических веществ;
- Проведение инструктажей по технике безопасности при работе в химической лаборатории.

4.5. Анализ опасных производственных факторов

4.5.1. Воздействие лазерного излучения

Классификация опасных и вредных факторов при эксплуатации лазерных установок, а также требования безопасности прописаны в ГОСТ 12.1.040-83 «Система стандартов безопасности труда. Лазерная безопасность. Общие положения» [70].

При работе с лазерными установками существует риск воздействия лазерного излучения на оператора.

Используемая лабораторная установка типа спектрометр имеет класс опасности 2, следовательно, необходимо оборудовать рабочее место защитным экраном для предотвращения попадания диффузно отраженного лазерного излучения на сетчатку глаза.

Используемая лазерная установка для измерения фотоэлектрических величин исследуемого материала имеет класс опасности 3, а значит необходимым оборудованием будут являться защитные очки для определенной длины волны излучения, а также защитный экран.

4.5.2. Поражение током

Эксплуатация приборов должна соответствовать «Правилам технической эксплуатации» электроустановок промышленных предприятий согласно ГОСТ Р 58698-2019 «Защита от поражения электрическим током»

[73]. Согласно этим правилам необходимо исключить возможность прикосновения человека к токоведущим частям приборов.

Опасность поражения человека электрическим током существует во всех случаях, когда используются электрические установки и оборудование. Для предотвращения электрического поражения необходимо по возможности исключить причины поражения, к которым относят:

- случайные прикосновения к задней панели системного блока, а также переключение разъемов периферийных устройств работающего компьютера;
- появление напряжения на механических частях электрооборудования (корпусах, кожухах и т.д.) в результате повреждения изоляции или других причин;
- множества сетевых фильтров и удлинителей превышают уровень электромагнитных полей токов частоты 50 Гц.

Лаборатория удовлетворяет приведенным выше требованиям, поэтому ее можно отнести к помещениям без повышенной опасности поражения людей электрическим током. Также перед началом работы на оборудовании работник проходит инструктаж по электробезопасности с последующим устным экзаменом и обучение работе на приборах, после чего сдает экзамен на право самостоятельно проводить работы на оборудовании.

4.5.3. Короткое замыкание

Короткое замыкание – это электрическое соединение двух точек цепи с различным потенциалом и минимальным сопротивлением, вызывающим нарушение работы электроустановки. Для предотвращения короткого замыкания, и, как следствие, поломки установки, необходимо, перед работой, проверять изоляцию токоведущих элементов (проводов), отсутствие оголенных проводов и неправильно заземленных элементов (например, заземления в металлический стол или корпус прибора) [69].

4.5.4. Статическое электричество

Статическое электричество – это явление возникновения, сохранения и релаксации свободного электрического заряда на поверхности диэлектриков. Нахождение статического заряда на корпусах электроустановок нежелательно в виду вероятности повреждения электронных компонентов установок и поражения током оператора.

Для исключения или минимизации заряда на поверхности корпусов установок, согласно ГОСТ 31613-2012 «Электростатическая искробезопасность. Общие технические требования и методы испытаний» необходимо убедиться, что установки оборудованы антистатиками, корпуса заземлены, причем, заземление не объединено с землей электроники [70]. Согласно инструкции по эксплуатации к научно-исследовательскому оборудованию, влажность в помещении должна составлять 20-60%. На протяжении года в г. Томске средняя влажность колеблется в пределах 54-83%, поэтому, для контроля влажности в помещении, в особенности в летний период, требуется использование осушителя воздуха. Для избавления от пыли в помещении требуется влажная уборка.

4.6. Экологическая безопасность

Выполнение работы сопряжено с использованием химических веществ и наноматериалов, следовательно, представляющих опасность для окружающей среды.

Атмосфера. Источником загрязнения являются пары этанола и ацетона, используемые в качестве растворителей для промывки подложек перед осаждением полупроводникового материала на их поверхность. Также источником загрязнения является наночастицы исследуемого материала. Для предотвращения загрязнения атмосферы внутри лаборатории и за ее пределами необходимо проводить работы в вытяжном шкафу с включенной вытяжкой. Вытяжная система должна быть оборудована НЕРА (англ. High efficiency particle absorption) фильтром класса H14 [74].

Также при утилизации использованных материалов (в т.ч. салфетки, ткани и иные материалы, задействованные в процессе исследования) будут применяться мусоросжигательные печи. Для уменьшения уровня выброса CO₂ печи должны быть оборудованы фильтрами и пылеуловителями согласно ГОСТ Р 55837 – 2013 [75].

Гидросфера. Источником загрязнения гидросферы будет являться вода, использованная для промывки поверхности подложек. После промывки вода может содержать смытые частицы материала и иных веществ, а также остатки этанола и ацетона. Для предотвращения загрязнения необходимо использовать специальные сливы.

Литосфера. При соблюдении мер безопасности, перечисленных выше, вероятность загрязнения почвы минимальна. Общими правилами соблюдения экологической безопасности будут являться утилизация салфеток, тканей и иных материалов, контактировавших с образцами и растворителями, использованными в процессе проведения работы, будут являться их утилизация в мусоросжигательных печах. Утилизация микросхем отработавшего оборудования проводится путем отделения полезных элементов (кремний, металлы) и их последующей переработкой для новых устройств. Печатные платы измельчаются и утилизируются пиролизом с последующим использованием продуктов пиролиза.

Селитебная зона. Источником вредных и опасных факторов для близлежащих домов и инфраструктурных объектов будут являться выбросы химических веществ через систему вентиляции. Однако, с учетом, что системы вентиляции оборудуются НЕРА фильтрами класса Н14, вероятность загрязнения селитебной зоны маловероятна. К опасным факторам можно отнести пожар в корпусе с его возможным перекидыванием на соседние постройки. Для предотвращения подобного сценария лаборатории оборудуются датчиками задымления, пожарной сигнализацией и огнетушителями.

4.7. Безопасность в чрезвычайных ситуациях

Чрезвычайная ситуация (ЧС) техногенного характера - событие, ограниченное определенной территорией, произошедшее в связи с промышленной аварией или иным бедствием, несущее отрицательные последствия для жизнедеятельности человека.

К возможным чрезвычайным ситуациям на рабочем месте выделяют внезапный пожар, взрыв.

Причиной возгорания может быть:

- Ток короткого замыкания;
- Неисправность устройства компьютера или электросетей;
- Небрежность оператора при работе с техникой (компьютером);
- Воспламенение ПК из-за перегрева, перегрузки

В связи с этим, при работе с компьютером необходимо соблюдать нормы пожарной безопасности, согласно ГОСТ 12.1.004-91 «Пожарная безопасность [73].

Для минимизации вероятности возникновения пожара работник обязан пройти инструктаж по пожарной безопасности. Лаборатория должна быть оборудована пожарной сигнализацией и средствами пожаротушения. Электрическое оборудование должно иметь заземление и отсутствующие голые провода для предотвращения КЗ с возникновением искры. Также работник должен быть проинструктирован о безопасной работе с легковоспламеняющейся жидкостью и правилах ее хранения.

При появлении пожара, любой, увидевший пожар должен: незамедлительно заявить о данном в пожарную службу по телефонному номеру 01 или 112, заявить о происшествии и соблюдать покой. В случае возникновения пожара в здании автоматически срабатывают датчики пожаротушения, и звуковая система оповещает всех сотрудников о немедленной эвакуации из здания и направляются на выход в соответствии с планом эвакуации при пожарах и других ЧС.

4.8. Заключение по разделу «Социальная ответственность»

В разделе были проанализированы опасные и вредные факторы, оказывающие влияние на человека во время работы в химической лаборатории. В разделе приведены правовые, организационные вопросы обеспечения безопасности, а также мероприятия по минимизации риска возникновения ЧС.

Категория помещения по электробезопасности, согласно ПУЭ, соответствует соответствующим первому классу – «помещения без повышенной опасности» [78].

Согласно правилам по охране и эксплуатации электроустановок, персонал должен обладать I группой допуска по электробезопасности, т.е. пройти инструктаж с проверкой знаний в форме устного опроса, проверкой приобретенных способов работы или оказания первой помощи при поражении током [79]. Помимо этого, поскольку научно-исследовательское оборудование является сложным устройством, персонал обязан пройти обучение по его эксплуатации и сдать соответствующий экзамен на право самостоятельной работы с ним.

Категория тяжести труда по СанПин 1.2.3685-21 относится к группе Ib (работы, производимые сидя, стоя или связанные с ходьбой и сопровождающиеся физические напряжения [68].

Помещение лаборатории категории помещения группы А, возможный класс пожара В1-В4 [18]. Характеристика веществ и материалов, находящихся в помещении: легковоспламеняющиеся жидкости мелкодисперсные материалы, способные образовывать взрывоопасные смеси с воздухом, при воспламенении которых происходит взрыв.

Рассмотренный объект может вызывать опасное воздействие на окружающую среду и относится к объектам IV категории.

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

Студенту:

Группа	ФИО
9ДМ11	Чешеву Дмитрию Леонидовичу

Школа	Химических и биомедицинских технологий	Отделение школы (НОЦ)	-
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	18.04.01 Химическая технология/ Перспективные химические и биомедицинские технологии

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

1. <i>Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	<i>Бюджет проекта – не более 14 009 048 руб., в т.ч. затраты по оплате труда – не более 151 347,3 руб.</i>
2. <i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	<i>В соответствии с ГОСТ 14.322-83 «Нормирование расхода материалов» и ГОСТ Р 51541-99 «Энергосбережение. Энергетическая эффективность»</i>
3. <i>Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	<i>1. Налоговый кодекс Российской Федерации 2. ФЗ №212 от 24.07.2009 в ред. От 19.12.2016</i>

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. <i>Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ</i>	<i>Определение потенциальных потребителей результатов исследования, анализ конкурентных технических решений</i>
2. <i>Разработка устава научно-технического проекта</i>	<i>Планирование этапов разработки программы, определение трудоемкости.</i>
3. <i>Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок</i>	<i>Сравнительный анализ интегральных показателей эффективности, формирование бюджета НТИ.</i>
4. <i>Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности</i>	<i>Расчет уравнений эффективности НТИ. Расчет уравнений сравнительной эффективности НТИ.</i>

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. «Портрет» потребителя результатов НТИ
2. Сегментирование рынка
3. Оценка конкурентоспособности технических решений
4. Диаграмма FAST
5. Матрица SWOT

- | |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 6. График проведения и бюджет НИИ
7. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИИ
8. Потенциальные риски |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	01.04.2023
------------------------------------------------------	------------

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент ОСГН ШБИП ТПУ	Маланина Вероника Анатольевна	к.э.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
9ДМ11	Чешев Дмитрий Леонидович		

5. ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ

В данной работе приведено исследование свойств двумерного полупроводникового материала $Zn_2In_2S_5$. В ходе работы были изучены структурные, физические и электрические свойства материала, а также показано его потенциальное применение в качестве фотодетектора.

5.1. Предпроектный анализ

5.1.1. Потенциальные потребители результатов исследования

Данная работа является, по большей части, фундаментальными исследованиями с демонстрацией потенциальной применимости материала в качестве приемника оптического излучения.

В перспективе, результаты работы могут быть использованы производителями оптико-электронного и электронного оборудования. Карта сегментирования рынка по области применения и доли рынка сбыта приведена в таблице 1.

Таблица 1 – карта сегментирования рынка по области применения разработки

Область рынка сбыта	Доля рынка, %
Гражданский сектор	50
Научно-техническое производство	40
Военный сектор	10

Из приведенной карты сегментирования можно сделать вывод, что основной областью применения разработки является промышленность гражданской и научно-технической направленности.

5.1.2. Анализ конкурентных технических решений

На сегодняшний день в России, исходя из открытых источников, существует 4 производителя фотодиодов: НПП Инжект (г. Саратов), НПП Восток (г. Новосибирск) АО Восход (г. Калуга) и ГК АМЭО (г. Санкт-

Петербург). В качестве конкурентных технических решений выберем ГК АМЭО и НПП Инжект.

ГК АМЭО является судостроительной группой компаний, осуществляющих деятельность в сфере обеспечения морских и промышленных объектов. Предприятие производит оптоэлектронное оборудование, в т.ч. фотодиоды ФД. НПП Инжект является частью корпорации Росатом и занимается изготовлением оптической и лазерной продукции, а также фотодиодов.

Таблица 2 – Оценочная карта сравнения конкурентных технических решений

№	Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
			Бф	Бк1	Бк2	Кф	К1	К2
	1	2	3	4	5	7	8	9
Технические критерии оценки ресурсоэффективности								
1	Удобство в эксплуатации (соответствует требованиям потребителей)	0,1	5	4	3	0,5	0,4	0,3
2	Спектральный диапазон	0,15	4	5	3	0,6	0,75	0,45
3	Шумы	0,2	4	5	5	1	0,8	0,8
4	Чувствительность фотодиода	0,01	4	5	5	0,04	0,05	0,05
5	Темновой ток	0,05	4	4	3	0,2	0,2	0,15
6	Инерционность	0,05	3	4	4	0,15	0,2	0,2
Экономические критерии оценки эффективности								
1	Конкурентоспособность продукта	0,01	5	5	4	0,05	0,05	0,04
2	Уровень проникновения на рынок	0,01	1	5	3	0,01	0,05	0,03
3	Цена	0,15	3	2	3	0,45	0,3	0,45
4	Послепродажное обслуживание	0,02	5	4	3	0,1	0,08	0,06
5	Финансирование научной разработки	0,02	4	4	4	0,08	0,08	0,08
6	Срок выполнения проекта	0,03	4	5	5	0,12	0,15	0,15
	Итого	1	56	58	49	4,2	3,81	3,26

Исходя из расчетов, проведенных на основе данных таблицы 2., можно сделать вывод, что разработка имеет высокий уровень конкурентоспособности.

5.1.3. SWOT-анализ

SWOT-анализ применяется для исследования внешней и внутренней среды проекта.

Таблица 3 — SWOT-анализа

	Сильные стороны (С): 1. Материал с большой площадью 2. Обладание полупроводниковыми свойствами 3. Наличие фотоэлектрических свойств	Слабые стороны (Сл): 1. Сложность синтеза кристаллов 2. Дороговизна исследования и разработки
Возможности (В): 1. Создание нового типа детекторов, способных работать в ближнем УФ и видимом диапазоне 2. Изучение нового полупроводникового материала	Созданное устройство на основе предлагаемого материала позволяет преобразовывать оптические сигналы в электрические, тем самым расширяя вариативность использования материала в электронике	Образование сторонних продуктов возможно с учетом определенных энергетических уровней материала. Т.е. невозможно получить вещество, если для его синтеза будет недостаточно выделяемой энергии
Угрозы (У): 1. Возможная низкая эффективность фотоэлектрического преобразования 2. Возможная неустойчивость хим. состава при нахождении во внешних условиях	Увеличение площади именно у двумерной структуры способно увеличить эффективность итогового изделия. Также, для увеличения спектрального диапазона можно использовать другие материалы, тем самым изменяя электронную структуру материала	Дороговизна исследования и возможная малая эффективность могут привести к отклонению финансирования проекта за ненадобностью и отсутствием экономической выгоды для финансирующего фонда.

Таблица 4 – Интерактивная матрица проекта

Сильные стороны						
Возможности проекта		C1	C2	C3	Сл1	Сл2
	B1	+	+	+	0	-
	B2	+	+	0	+	0
Угрозы проекта	У1	-	0	+	0	-
	У2	+	+	-	+	+

Таким образом, из таблиц 3 и 4 были представлены проблемы, имеющиеся у разрабатываемого комплексного освещения. Эти проблемы обусловлены сильными и слабыми сторонами проекта, а также внешними угрозами и возможностями.

5.2. Планирование научно-исследовательских работ

5.2.1. Структура работ в рамках научного исследования

Планирование научно-исследовательской работы происходит в следующем порядке:

- Определение структуры работ в рамках научного исследования;
- Определение участников каждой работы;
- Установление продолжительности работ;
- Построение графика проведения научных исследований.

Для выполнения научных исследований формируется рабочая группа, в состав которой могут входить научные сотрудники и преподаватели, инженеры, техники и лаборанты, численность групп может варьироваться. По каждому виду запланированных работ устанавливается соответствующая должность исполнителей. Перечень этапов и работ, распределение исполнителей по данным видам работ приведен в таблице 5.

Таблица 5 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Основные этапы	№ Раб.	Содержание работ	Должность исполнителей
Разработка технического задания	1	Составление и утверждение задания	Руководитель
Выбор направления исследования	2	Подбор материалов	Магистрант
	3	Изучение литературы	Магистрант
	4	Выбор методов исследования	Магистрант
	5	Разработка календарного плана	Магистрант
Проведение исследований	6	Исследование материала методами, доступными в лаборатории	Магистрант
	7	Исследование материала методами, недоступными в лаборатории и ВУЗе	Магистрант
	8	Сборка стенда для проведения эксперимента по прикладному применению материала	Магистрант
Обобщение и оценка результатов	9	Обработка и анализ полученных результатов	Руководитель, Магистрант
Оформление отчета	10	Составление отчета согласно полученным результатам	Магистрант

5.2.2. Определение трудоемкости выполнения работ

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

Ожидаемое значение трудоемкости определяется следующей формулой:

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

Где $t_{ож,i}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения i -й 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 того, что для выполнения работ требуется такие специалисты, как магистрант (М) и научный руководитель (Р), рассчитывается продолжительность одной работы, раб. дн.:

$$T_{Pi} = \frac{t_{ож.и}}{Ч_i}$$

Где T_{Pi} – продолжительность одной работы в раб. дн.;

$t_{ож.и}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения i -й работы чел7-дн;

$Ч_i$ – численность исполнителей на одном этапе работ.

5.2.3. Разработка графика проведения научного исследования

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

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k_{кал.}$$

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

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

$k_{кал.}$ – коэффициент календарности.

Последний определяется как:

$$k_{кал.} = \frac{T_{кал.}}{T_{кал.} - T_{вых.} - T_{пр.}}$$

Где $T_{кал.}$ – календарные дни (т.е. значение равно 365 дн.);

$T_{вых.}$ – выходные дни ($T_{вых.} = 78$);

$T_{пд.}$ – праздничные дни ($T_{пд.} = 14$).

Тогда коэффициент календарности для М и Р будет:

$$k_{кал.} = \frac{T_{кал.}}{T_{кал.} - T_{вых.} - T_{пр.}} = \frac{365}{365 - 78 - 14} = 1,34.$$

Показатели времени проведения исследования показаны в таблице 6.

Таблица 6. Временные показатели проведения научно-исследовательской работы

№Работ	Исполнитель	Продолжительность работ, дни			Длительность работ чел/дн.	
		$t_{min.}$	$t_{max.}$	$t_{ож.}$	T_{Pi}	T_{Ki}
1	Р	4	6	4,8	2,4	3
2	М	8	10	8,8	8,8	12
3	М	14	15	14,4	14,4	19
4	М	1	2	1,4	1,4	2
5	М	3	5	3,8	3,8	5
6	М	30	40	34	34	46
7	М	20	30	24	24	32
8	М	7	9	7,8	7,8	10
9	Р, М	5	7	5,8	2,9	4
10	М	14	21	16,8	16,8	22
Итого:		106	145	121,6	116,3	155

На основании SWOT-анализа (таблица 3) строится календарный план-график для максимального по длительности исполнения работ в рамках исследовательского проекта.

Таблица 7 – Календарный график план

№ работ	Вид работ	Исполнитель	T_{ki} , кал. дн.	Продолжительность выполнения работ									
				Янв.		Фев.		Март		Апр.		Май	
				1	2	1	2	1	2	1	2	1	2
1	Составление и утверждение задания	Р	3										
2	Подбор материалов	М	12										
3	Изучение литературы	М	19										
4	Выбор методов исследования	М	2										
5	Разработка календарного плана	М	5										
6	Исследование материала методами,	М	46										

	доступными в лабораториях													
7	Исследование материала методами, недоступными в лаборатории и ВУЗе	М	32											
8	Сборка стенда для проведения эксперимента по прикладному применению материала	М	10											
9	Обработка и анализ полученных результатов	Р, М	4											
10	Составление отчета согласно полученным результатам	М	22											

 - магистрант (М),  - руководитель (Р)

5.3. Бюджет научно-технического исследования

При планировании бюджета НТИ необходимо учитывать затраты.

Так, статьи расходов в НТИ следующие:

- Материальные затраты НТИ;
- Затраты на спец. оборудование для научных работ;
- Основная заработная плата исполнителей темы;
- Дополнительная заработная плата исполнителей темы;
- Отчисления во внебюджетные фонды;
- Затраты на командировки (конференции);
- Накладные расходы.

5.3.1. Расчет материальных затрат исследования

Для разработки проекта использовались следующие материалы и оборудование:

- Приобретаемые сырье и материалы для НТИ;

- Покупные материалы и комплектующие для оборудования, используемые в процессе создания научно-технической продукции для обеспечения нормального технологического процесса и для упаковки продукции или расходуемых на другие производственные и хозяйственные нужды, не относимые к основным средствам;
- покупные комплектующие изделия и полуфабрикаты, подвергающиеся в дальнейшем монтажу или дополнительной обработке;
- Сырье и материалы, покупные комплектующие изделия и полуфабрикаты, используемые в качестве

В материальные затраты также включаются затраты на канцелярию и т.п., однако, они являются частью накладных расходов. Расчет материальных затрат осуществляется по следующей формуле:

$$Z_M = (1 + k_T) \cdot \sum_{i=1}^m C_i \cdot N_{\text{расх.}i}$$

Где m – количество материальных ресурсов i -го вида, планируемых при выполнении научного проекта;

$N_{\text{расх.}i}$ – количество материальных ресурсов i -го вида, планируемых к использованию при выполнении научного исследования;

C_i – цена приобретения единицы i -го вида потребляемых материальных ресурсов (руб./шт., руб./кг и т.д.);

k_T – коэффициент, учитывающий транспортно-заготовительные расходы.

Материальные затраты представлены в следующей таблице:

Таблица 8 – Материальные затраты

Наименование	Количество	Цена за ед. руб.	Затраты на материалы, руб.
Высокоориентированный пиролитический графит	1	115 000	115 000
SiO ₂ /Si подложка с золотыми контактами	1	7000	7000
Скотч	1	50	50

Этанол	1	63	63
Салфетки Kimtech, упаковка	1	2000	2000
Предметное стекло, упаковка	1	500	500
Итого		124 613	124 613

5.3.2. Расчет затрат на специальное оборудование для научных работ

Расчеты по приобретению спецоборудования и оборудования, имеющегося в организации, сводятся в таблицу:

Таблица 9 – Расчет бюджета затрат на приобретение спецоборудования для научных работ

Наименование оборудования	Количество единиц оборудования	Цена единицы оборудования, тыс. руб.	Общая стоимость оборудования, тыс. руб.
Атомно-силовой микроскоп	1	5 000	5 000
Рамановский конфокальный спектрометр	1	6 000	6 000
Зондовая станция	1	2 500	2 500
Компьютер в полной комплектации (системный блок, монитор, клавиатура, мышь, периферия)	3	50	150
Лазерные модули	3	2	6
Итого		13 552 000	13 656 000

Лабораторное оборудование относится к приборам 5-й амортизационной группе с периодом полезного использования 7-10 лет. Поскольку оборудование эксплуатируется в лабораторных условиях с контролируемой средой, выбираем срок полезного использования 10 лет. Тогда:

- Годовая норма амортизации: $100\% \text{ ст. об.} / 10 \text{ лет} = 10\%$, Тогда ежегодная сумма амортизации, руб. = $13\,656\,000 \cdot 10\% = 1\,365\,650$ руб.

- Ежемесячная сумма амортизации = $1\,365\,650 / 12 \text{ мес.} = 113\,804,2$ руб.

Лабораторное оборудование было введено в эксплуатацию 01.09.2018, тогда, на 01.09.2028 сумма амортизации за 120 мес. составит:

$$120 \cdot 113\,804,2 = \mathbf{13\,656\,504,4} \text{ руб.}$$

Поскольку выполнение магистерской диссертации длится 2 года, значит, амортизация на период выполнения проекта составит:

$$24 \cdot 113\,804,2 = \mathbf{2\,731\,300,8} \text{ руб.}$$

5.3.3. Основная заработная плата

В настоящую статью включается основная заработная плата научных и инженерно-технических работников, рабочих макетных мастерских и опытных производств, непосредственно участвующих в выполнении работ по данной теме. Величина расходов по заработной плате определяется исходя из трудоемкости выполняемых работ и действующей системы оплаты труда. В состав основной заработной платы включается премия, выплачиваемая ежемесячно из фонда заработной платы (размер определяется Положением об оплате труда). Расчет основной заработной платы сводится в таблицу 10.

Таблица 10 – Расчет основной заработной платы

№ п/п	Наименование этапов	Исполнители по категориям	Трудоемкость, чел.-дн.	Заработная плата, приходящаяся на один чел.-дн., руб	Всего заработная плата по тарифу (окладам), руб.
1	Выбор темы и направления ВКР; составление технического задания; анализ и оценка полученных результатов; оформление технической документации	Руководитель	7	1035,9	7 251,3
2	Изучение литературы и выбор методов решения проблемы; создание концепта освещения; оценка эффективности полученных результатов; оформление технической документации; доработка проекта	Магистрант	152	948	144 096
Итого:				99 737,3	

$$C_{зп} = Z_{осн} + Z_{доп},$$

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

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

$$Z_{осн} = Z_{дн} \cdot T_{раб}$$

где $T_{раб}$ – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб.дн.; $Z_{дн}$ – среднедневная заработная плата работника, руб.

Значит, для руководителя:

$$Z_{осн} = 1035,9 \cdot 7 = 7\,251,3 \text{ рублей}$$

Для студента-магистра:

$$Z_{осн} = 948 \cdot 152 = 144\,096 \text{ рублей}$$

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{\text{дн}} = \frac{(Z_{\text{м}} \cdot M)}{F_{\text{д}}}$$

где $Z_{\text{м}}$ – месячный должностной оклад работника, руб и составляет 20400 руб. M – количество месяцев работы без отпуска в течение года: при отпуске в 45 раб. дней $M = 10,4$ месяца, 6 - дневная неделя; при отпуске в 24 раб. дня $M = 11,2$ месяца, 5 – дневная рабочая неделя; $F_{\text{д}}$ – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала (в рабочих днях). Тогда,

Для руководителя:

$$Z_{\text{дн}} = \frac{25000 \cdot 10,4}{251} = 1035,9 \text{ рублей}$$

Для студента-магистра:

$$Z_{\text{дн}} = \frac{20400 \cdot 11,2}{241} = 948 \text{ рублей}$$

Баланс рабочего времени представлен в таблице 11.

Таблица 11 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Магистр
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней		
- выходные дни	52	82
- праздничные дни	14	14
Потери рабочего времени		
- отпуск	48	28
- невыходы по болезни	–	–
Действительный годовой фонд рабочего времени	251	241

Таблица 12 – Результаты расчета основной заработной платы

Исполнители	$Z_{\text{б}}$, руб.	$k_{\text{р}}$	$Z_{\text{м}}$, руб	$Z_{\text{дн}}$, руб.	$T_{\text{р}}$, раб. дн.	$Z_{\text{осн}}$, руб.
Руководитель	24861,6	1,3	25000	1035,9	7	7 251,3
Магистр	20400		20400	948	152	144 096
Итого по статье $Z_{\text{осн}}$:						151 347,3

5.3.4. Дополнительная заработная плата научно-производственного персонала

Дополнительная заработная плата включает оплату за непроработанное время (очередной и учебный отпуск, выполнение государственных обязанностей, выплата вознаграждений за выслугу лет и т.п.) и рассчитывается исходя из 13% от основной заработной платы, работников, непосредственно участвующих в выполнении темы:

$$З_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} \cdot З_{\text{осн}}$$

где $З_{\text{доп}}$ – дополнительная заработная плата, руб.; $k_{\text{доп}}$ – коэффициент дополнительной зарплаты ($k_{\text{доп}} = 0,13$); $З_{\text{осн}}$ – основная заработная плата, руб.

Для руководителя:

$$З_{\text{доп}} = 7\,251,3 \cdot 0,13 = 942,7 \text{ рублей}$$

В таблице 12 приведен расчёт основной и дополнительной заработной платы.

Таблица 12 – Заработная плата исполнителей ВКР, руб

Заработная плата	Руководитель	Магистр
Основная зарплата	7 251,3	144 096
Дополнительная зарплата	942,7	–
Зарплата исполнителя	8 194	144 096
Итого	152 290	

5.3.5. Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

Статья включает в себя отчисления во внебюджетные фонды.

$$С_{\text{внеб}} = k_{\text{внеб}} \cdot (З_{\text{осн}} + З_{\text{доп}}) = 0,3 \cdot (151\,347,3 + 942,7) = 45\,687 \text{ руб.} \quad (4.5)$$

где $k_{\text{внеб}}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.), принимаем $k_{\text{внеб}} = 0,3$.

5.3.6. Расчет затрат на научные и производственные командировки

На данном этапе в научных и производственных командировках нет необходимости.

5.3.7. Накладные расходы

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

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

Расчет накладных расходов ведется по следующей формуле:

$$C_{\text{накл}} = k_{\text{накл}} \cdot (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}) = 0,2 \cdot (151\,347,3 + 942,7) \quad (4.6) \\ = 30\,458 \text{ руб}$$

где $k_{\text{накл}}$ – коэффициент накладных расходов, принимаем $k_{\text{накл}} = 0,2$.

5.3.8. Формирование бюджета затрат

Определение бюджета затрат на научно-исследовательский проект приведен в таблице:

Таблица 13 – Сводная таблица затрат

Наименование статьи	Сумма, руб.
1. Материальные затраты НТИ	124 613,0
2. Затраты на специальное оборудование для научных работ	13 656 000
3. Затраты на основную заработную плату исполнителей темы	151 347,3
4. Затраты на дополнительную заработную плату для исполнителей темы	942,7
5. Отчисления во внебюджетные фонды	45 687,0

6. Затраты на научные и производственные командировки	0
7. Накладные расходы	30 458,0
Итого: бюджет затрат НИ	14 009 048

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

Интегральный показатель финансовой эффективности научного исследования получают в ходе оценки бюджета затрат нескольких вариантов исполнения научного исследования. Для этого наибольший интегральный показатель реализации технической задачи принимается за базу расчета, с которым соотносятся финансовые значения по всем вариантам.

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\text{фин}} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\text{max}}},$$

Где $I_{\text{фин}}$ – интегральный финансовый показатель разработки;

Φ_{pi} – стоимость i -го варианта разработки или аналога;

Φ_{max} – максимальная стоимость разработки или аналога научно-исследовательского проекта.

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

Таким образом:

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп1}} = 0,2$$

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп2}} = 0,2$$

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп3}} = 1$$

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп4}} = 0,6$$

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

$$I_{pi} = \sum a_i \cdot b_i,$$

где I_{pi} – интегральный показатель ресурсоэффективности для i -го варианта исполнения разработки; a_i – весовой коэффициент i -го варианта исполнения разработки; b_i^a, b_i^p – бальная оценка i -го варианта исполнения разработки, устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания; n – число параметров сравнения.

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности приведен в форме таблицы (табл. 14).

Таблица 14 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Критерии	Весовой коэффициент параметра	Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3	Исп. 4
1. Удобство в эксплуатации (соответствует требованиям потребителей)	0,1	4	4	5	5
2. Спектральный диапазон	0,15	5	5	5	4
3. Шумы	0,15	3	3	3	3
4. Чувствительность фотодиода	0,20	3	4	5	5
5. Темновой ток	0,25	4	4	5	5
6. Инерционность	0,15	4	4	4	4
ИТОГО	1	3,8	4	4,55	4,4

Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения разработки считается так:

$$I_{\text{исп.1}} = \frac{I_{\text{р-исп.1}}}{I_{\text{финр}}^{\text{исп.1}}} = \frac{3,8}{0,2} = 19$$

$$I_{\text{исп.2}} = \frac{I_{\text{р-исп.2}}}{I_{\text{финр}}^{\text{исп.2}}} = \frac{4}{0,2} = 20$$

$$I_{\text{исп.3}} = \frac{I_{\text{р-исп.3}}}{I_{\text{финр}}^{\text{исп.3}}} = \frac{4,55}{1} = 4,55$$

$$I_{\text{исп.4}} = \frac{I_{\text{р-исп.4}}}{I_{\text{финр}}^{\text{исп.4}}} = \frac{4,4}{0,6} = 7,33$$

Сравнительная эффективность

Для сравнения вариантов исполнения проекта и определения наиболее эффективного используется показатель сравнительной эффективности проекта:

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{I_{\text{исп.1}}}{I_{\text{исп.2}}}$$

Таблица 15 - Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3	Исп. 4
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,2	0,2	1	0,6
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	3,8	4	4,55	4,4
3	Интегральный показатель эффективности	19	20	4,55	7,33
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	0,95 (1 к 2) 4,18 (1 к 3) 2,59 (1 к 4)	4,4 (2 к 3) 2,73 (2 к 4) 1,05 (2 к 1)	0,62 (3 к 4) 0,23 (3 к 1) 0,23 (3 к 2)	0,38 (4 к 1) 0,37 (4 к 2) 1,61 (4 к 3)

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

Сравнение значений интегральных показателей эффективности показало, что более эффективным вариантом решения поставленной в магистерской работе технической задачи с позиции финансовой и ресурсной эффективности является исполнение 2.

5.5. Общий вывод по разделу

В результате работы по разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» выявили и сравнили разработку и два аналога научно-исследовательской работы.

Сначала было проведено сегментирование рынка, которое определило наличие различных аналогов фотодетекторов, производимых на территории РФ. Оценка целесообразности исследования показала, что на начальном этапе внедрения полупроводниковых 2D кристаллов в качестве фотодетекторов несет в себе такие риски, как высокий уровень шумов и малый спектральный диапазон. Однако данные недостатки могут быть исправлены в процессе конструирования финального продукта.

Бюджет затрат разработки равен **14 009 048** рубля, что является достаточно большой суммой. Однако стоит заметить, что научно-исследовательское оборудование покупается исследовательскими центрами с целью выполнения на них большого количества сторонних проектов и грантов, таким образом, делая данную покупку оправданной.

Сравнение значений интегральных показателей эффективности показало, что более эффективным вариантом решения поставленной в магистерской работе технической задачи с позиции финансовой и ресурсной эффективности является исполнение 2.

ПРИЛОЖЕНИЕ #1

Раздел Literature review

Обучающийся:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
9ДМ11	Чешев Дмитрий Леонидович		

Консультант ИШХБМТ:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ИШХБМТ	Родригес Рауль Давид Контрерас	Ph.D.		

Консультант – лингвист отделения иностранных языков ШБИП:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОИЯ	Гончарова Любовь Анатольевна	к.п.н.		

1. Literature review

1.1. 2D materials as an object of investigation

Two-dimensional materials are the class of materials that possess only 2 dimensions, width and length, while its thickness is only one atom as in case of graphene or comparable with unit cell materials. 2D materials are in great interest for the scientific community due to their properties. An investigation of these materials is connected with the study of their structural, electrical and optical properties since they are playing a huge role in integration of them in modern electronic, photonic devices and green energy production.

1.1.1. Structural properties of two-dimensional materials

Since monolayers are compared with a unit cell in thickness, it would be logically to start the discussion from this point.

A unit cell is a minimal volume of a crystal lattice formed by atoms of a material that creates a certain geometric shape. In figure 1 types of unit cell are presented.

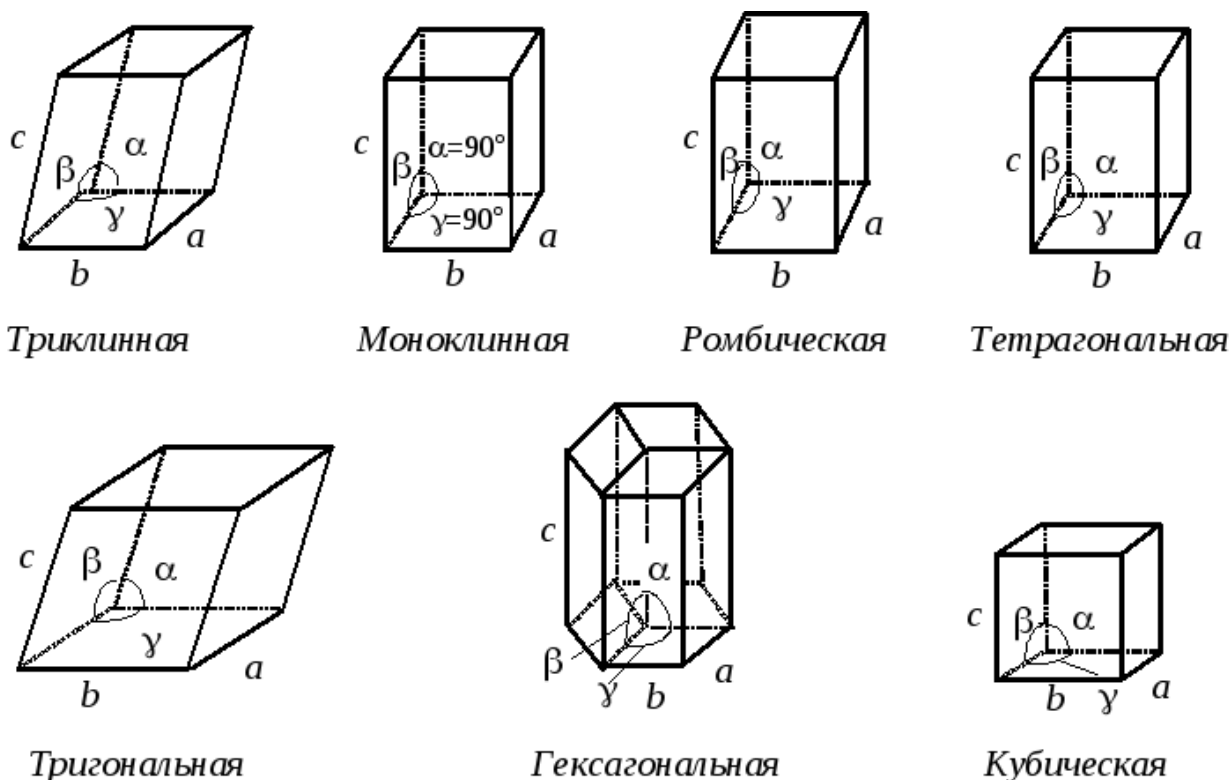


Fig. 1. Types of unit cells

There are 7 syngonies contain of 230 space groups. It becomes possible through translation process (multiplying of a single unit cell by its parallel transition) to create crystal lattice. Another important point is material's crystallinity. Crystallinity is the property of material's structure which tells about a concentration of lattice defects. If the defects concentration is low, so that material is usually highly crystalline, and vice versa. Depending on synthesis condition a monolayer can be free of these defects or not. At the moment this is one of the main issues in 2D material's synthesis because the properties, such as electrical conductivity and mechanical strength strongly depend on material's structure. Initially, the works devoted to two-dimensional materials described monolayer's obtaining process by mechanical exfoliation. However, such layers were small in size, which prevents their use in the production of electronic devices. Now there are works that show methods of obtaining sufficiently large monolayers. For example, the synthesis of a single-crystal monolayer MoS₂ on a gold substrate by epitaxy was shown [1]. In this work methods for determination of the type of crystal lattice, as well as visualization of optical absorption by the nano-vis are used.

1.1.2. Electronic structure and electrical properties

One of the most attracting properties of 2D materials are the electrical properties. With graphene opening, an issue of its (and the rest of 2D materials) applicability in electronics and photonics has been arisen. But once an investigation was started, it was noticed that they reveal completely different properties. The reason of such a behavior is materials' sizes and their electronic structure. Electronic structure of 2D semiconductor is considering from the band theory point of view. It is known that semiconductors have band gap making them semiconductive. Band gap is some amount of energy that divides valence and conduction bands in the material. To make electron do electron transition it is necessary to transfer the band gap. Scheme of that process is represented in figure 2.

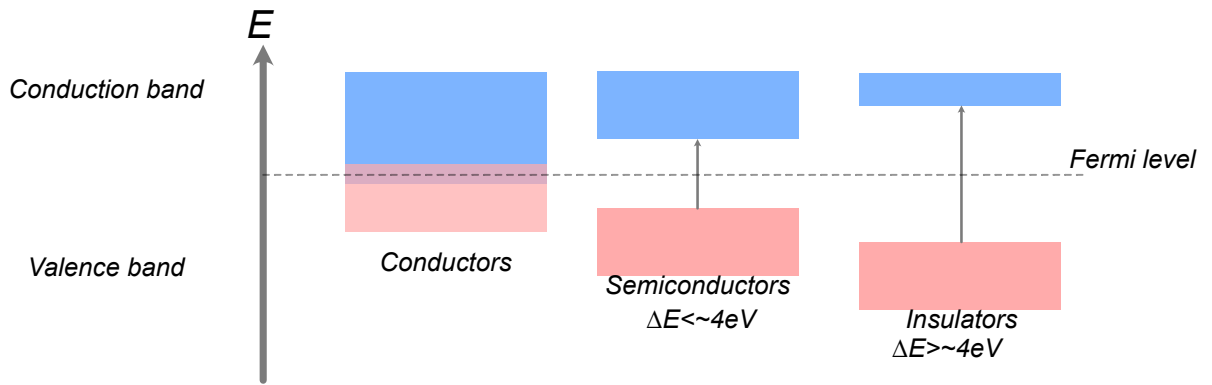


Figure 2 – Scheme of band transition for conductors, semiconductors and insulators.

Figure 2 demonstrates that in case of conductors there is no such a band gap while its valence and conduction bands are overlapping. For insulators it is vice versa, the energy which is required for electron transition is too high.

A source of energy for electron to be passed can be a photon, phonon or voltage. In case of semiconductors band transition may be revealed as a current flow or irradiation due to relaxation. However, excited electrons do not always reach the conduction band. Let's consider the simplest case of electron absorption of a photon. As it is known, a photon is a quantum of electromagnetic radiation and has some energy depending on the wavelength of the radiation. When an electron absorbs a photon, the electron goes into an excited state. If the photon energy was insufficient to transfer an electron from the valence band to the conduction band, then such a system (molecule or the particle that absorbs the photon) reaches only the virtual level, and, giving its energy, relaxes to the previous energy level or lower. The concept of a virtual layer leads to the fact that the electronic structure of semiconductors (as well as dielectrics) is discrete. In other words, the valence, band gap and conduction band have discreteness, i.e. a set of virtual energy levels. Figure 3 demonstrates the discreteness of the energy levels of a solid.

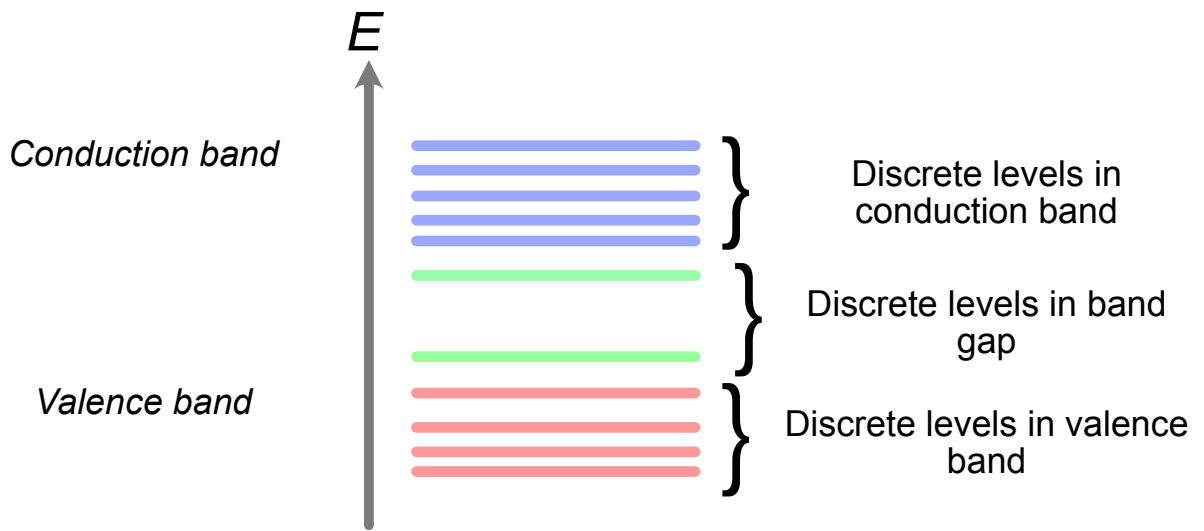


Figure 3. Discrete levels in a solid body

In addition to discrete energy levels, the Fermi level is located within the bandgap region. The Fermi level, or Fermi energy, represents the boundary between filled and unfilled quantum states in a material at a temperature of 0 K. This means that all states with energy lower than the Fermi level are filled with electrons, while states with energy above the Fermi level are not. Additionally, the Fermi level has a 50% probability of being filled with a charge carrier at absolute zero. As temperature increases, the chance of the Fermi level being occupied by an electron rises due to thermal motion of particles. In semiconductors of different conductivity types, the Fermi energy is situated differently within the bandgap. In p-type semiconductors, the Fermi level is closer to the valence band, whereas for n-type semiconductors, it is closer to the conduction band. Within the context of this work, the numerical value of the Fermi level is a key parameter, influencing the final application of ZIS as a photodetector and potentially leading to optimization of material parameters in the future.

Consideration of a material's electronic structure must also include an analysis of the type of transition, which can be either straight-band or non-straight-band. In straight-band semiconductors, the electron located at the lowest energy level of the conduction band and the electron located at the highest energy level in the valence band share the same quasi-momentum. A quasi-momentum is the wave vector of a wave function, which can be described by the following formula:

$$p = \hbar k$$

- Where \hbar – Plank constant, k – wave vector.

Indirect band gap semiconductors have electrons in the valence and conduction bands with different quasi-momentum. However, these materials tend to have a low probability of recombination transition and low internal quantum efficiency. In contrast, straight-band semiconductors have a high probability of band transitions and high quantum efficiency because electrons do not need to equalize pulse value after a band transition. Straight-band semiconductors are often dominant components of lasers due to their high quantum efficiency. Notably, some monolayers of semiconductors may exhibit direct-band transitions, such as MoS₂, MoSe₂ and black phosphorous, owing to the significant impact of quantum mechanics on their properties at this scale. In small sizes, electrons and holes can only occupy specific quantum states dictated by the semiconductor's size and structure; these states may result in straight-band transitions that serve as the basis for creating semiconductor devices such as LEDs and lasers. Additionally, decreasing the size of a semiconductor leads to the formation of a large number of surface states that can influence its properties and contribute to direct-band transition formation. Surface states of semiconductors refer to the electronic states that exist at the surface of a semiconductor material. These states arise due to the broken symmetry and altered bonding environment at the surface of the material, compared to the bulk.

1.1.3. Optical properties

The optical properties of two-dimensional materials differ significantly from those of three-dimensional structures. This is attributable to the fact that light waves interact primarily with the surface of a bulk material. However, nanomaterials like nanoparticles and monolayers interact with the entirety of the light wave as their dimensions are smaller than the wavelength of light and thus lie beyond the diffraction limit. Furthermore, smaller materials localize more charge carriers, resulting in stronger absorption and electric field strength on their surface.

Techniques like probe-enhanced Raman spectroscopy and surface-enhanced Raman spectroscopy rely on the localization and amplification of the electric field strength. Additionally, such particles tend to exhibit catalytic properties more actively, as has been shown in examples of gold, silver, platinum nanoparticles, and other nanoparticles used in photocatalysis [2].

Nanoparticles, in particular, possess high absorption capacity, whereas flat monolayers have high transmittance levels. This property can be leveraged to create conductive transparent coatings, such as the graphene-coated glass with conductivity and photochromic glass described in previous studies [3,4]. Alongside graphene, semiconductor materials have seen wide usage in photodetectors. Figure 4 illustrates the spectral sensitivity ranges of different materials, which extend from UV to far IR.

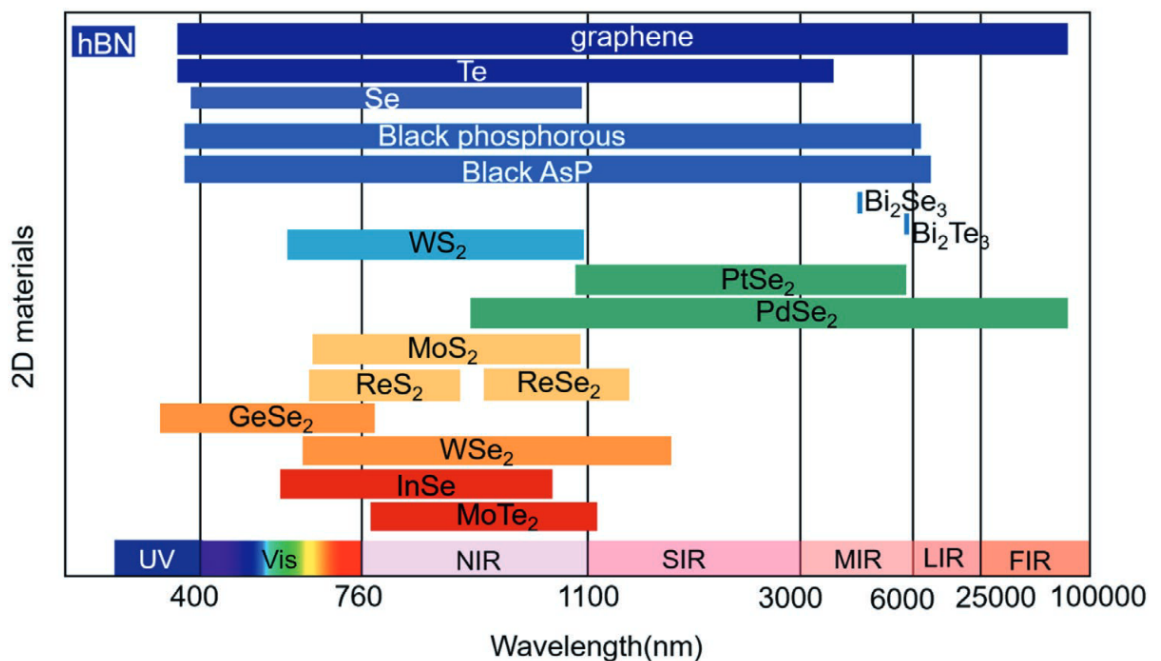


Figure 4. Spectral response ranges of 2D materials [5]

As noted previously, the unique properties of two-dimensional semiconductor materials make them highly promising candidates for advanced electronic and photonic devices, particularly in their application as photodetectors. However, this must be balanced against certain disadvantages, such as the dependence of efficiency on the presence of structural defects and low absorption coefficients.

Critical parameters to consider when developing a photodetector based on 2D semiconductors include:

- *Sensitivity*: the ratio of photodetector voltage/current to optical power, describing the output signal-to-incident radiation ratio.
- *Spectral sensitivity*: the dependence of photodetector sensitivity on incident light wavelength.
- *Quantum efficiency*: the ratio of incident photons to electron-hole pairs generated by the detector.
- *Equivalent noise power*: the minimum radiation power detectable by the photodetector against a noisy background.
- *Detection capacity*: the inverse of equivalent noise power.
- *Response time*: the time during which the photodetector signal increases from 10% to 90% of its intensity.

1.2. Effects that are arisen at the interface of conductor/semiconductor contact

When working with semiconductors, electronic effects become increasingly prominent as the material size approaches the nanometer range. In this work, it is necessary to consider electronic effects in the interaction between a semiconductor ZIS and conductive horns or gold contacts.

Zhang's work demonstrates that when semiconductor and conductor materials come into contact, their electronic levels will bend [5]. This phenomenon occurs because of free electrons located on the surface of the conductor at the point of contact with the semiconductor, as well as surface states on the semiconductor itself. The concept of electronic level bending was developed by Schottky and Mott to explain the operation of rectifying contacts in devices. When a semiconductor and a metal are in contact, electrons flow from one material to another due to differences in electron output work. This refers to the amount of energy required to release an electron from the surface of a material into the space.

Let us consider two cases involving an n-type semiconductor in contact with a conductor having different electron output works compared to the semiconductor. In the first case, where $\phi_m > \phi_s$ (where ϕ_m represents the conductor's electron output work and ϕ_s represents the semiconductor's electron output work), energy levels of the semiconductor appear unchanged when out of contact. However, when the semiconductor contacts the metal, charge carrier transfer processes begin to occur. For n-type semiconductors, electrons flow from the semiconductor into the conductor, resulting in the formation of a depleted layer at the interface, while the Fermi levels are aligned. At the point of contact, a Schottky barrier forms. Figure 5 illustrates this process.

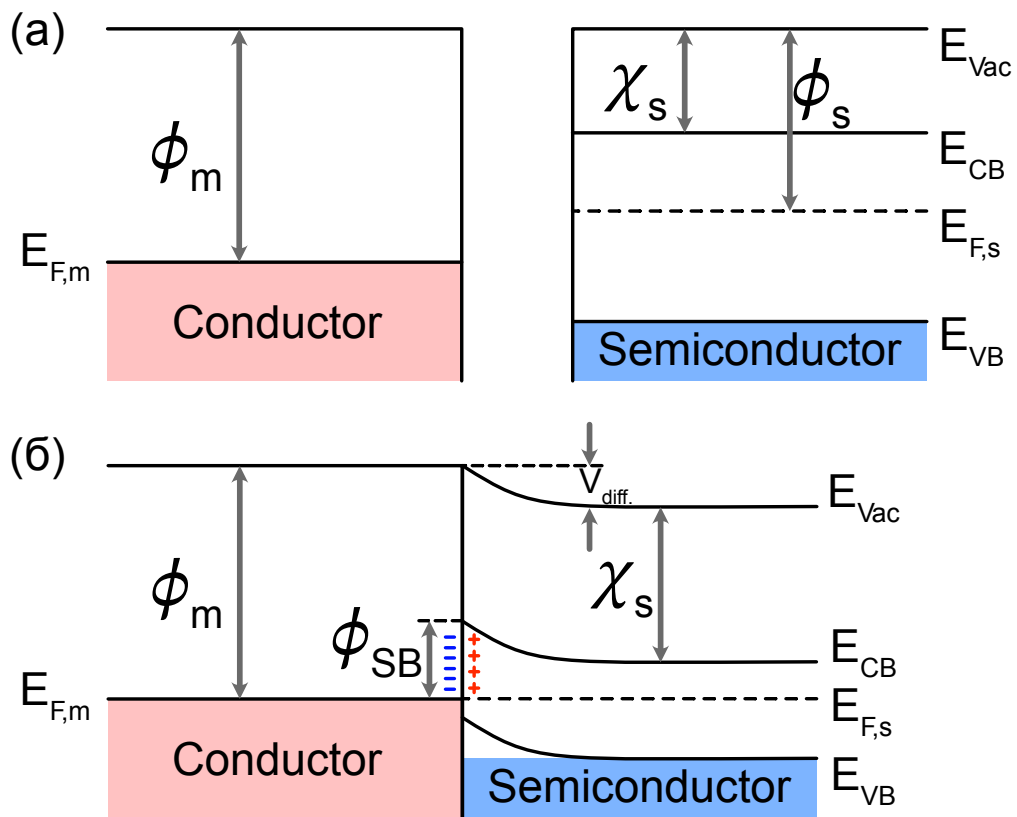


Figure 5. Scheme of band bending and charge carriers distribution for $\phi_m > \phi_s$ (a) Conductor and semiconductor are not in contact so bands are straight, (b) Conductor and semiconductor are in contact, band is bended, Schottky barrier is formed

For the case of $\phi_m < \phi_s$, similar processes will occur, but in this case, a layer with an excess charge (electrons) will be formed at the contact point on the semiconductor side, while a positive charge will be formed on the conductor side. At the same time, the Fermi levels will also align and until they are aligned, in

other words, until the equilibrium is established, the processes of charge flow will occur. Schematically, this is shown in Figure 6. After the end of the process, an ohmic contact will be formed at the contact site, i.e. a contact with a linear and symmetrical voltage characteristic.

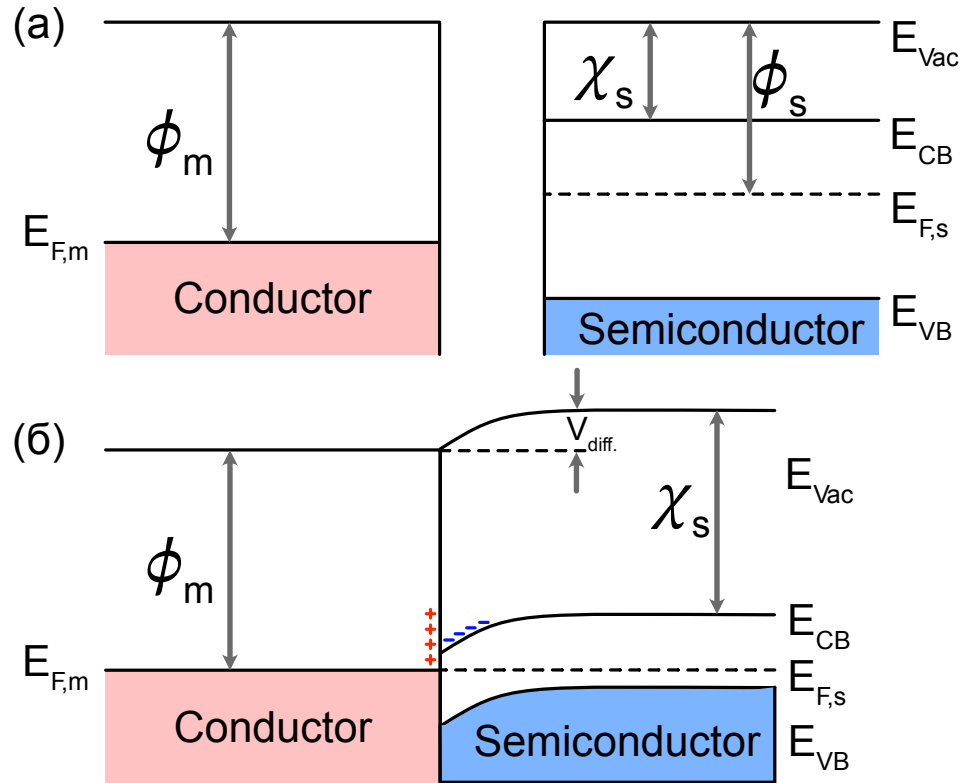


Figure 6. Scheme of band bending for $\phi_m < \phi_s$. (a) Conductor and semiconductor are not in contact, bands are not bended, (b) Conductor and semiconductor are in contact, bands are bended, ohmic contact is formed

After the formation of depleted/charged regions, the energy levels will be bent due to the electric field between the conductor and the semiconductor, which is called **band bending**.

1.3. Previous studies of $Zn_2In_2S_5$

Over the last years, numerous semiconductor-layered materials have been synthesized and investigated, known for their anisotropic nature and strong intra-layer atomic bonding with weaker inter-layer interactions. Recently, the trend has been to explore the potential of 2D materials, consisting of one or a few monolayers, that can be stacked to create complex structures with varying conducting/semiconducting/insulating properties for (opto)electronic applications. However, despite the potential benefits, only a few materials, such as graphene, h-

BN, MoS₂, WS₂, and WSe₂, have been in focus with new emerging In₂S₃, PtSe₂, talc, and Bi₂O₂Se. Thus, a vast number of materials were left underexplored. One of such materials is Zn₂In₂S₅, a representative of the Zn-In-S system, which shows exciting potential as a photonic and electronic material but has not been widely investigated at the nanoscale.

Radaustan *et al.* [11] first reported on the existence of a new phase in the Zn-In-S system, in addition to ZnIn₂S₄ and Zn₃In₂S₆, which they postulated could form with varying numbers of sulfur atoms and metal cations. Through X-ray structure analysis, they confirmed the existence of this phase as Zn₂In₂S₅ (ZIS), with rhombohedral symmetry, serving as an intermediate phase in the Zn-In-S system. The authors discussed the synthesis method and optical properties of the material.

The impact of temperature on the optical and electrical properties of bulk Zn₂In₂S₅ was examined previously [12]. A step-by-step approach to synthesizing bulk crystals and their structural characterization using electron microscopy and electron diffraction were employed to comprehend the material further. Optical absorption spectra obtained from samples ranging from 10-50 μm in thickness at varying temperatures revealed a direct band gap of 2.7 eV for three-pack polytype Zn₂In₂S₅, which exhibited n-type conductivity. The band gap increased to approximately 2.8 eV at lower temperatures, displaying the typical behavior of semiconductors [13]. Furthermore, I-V curves were recorded for various crystallographic directions of the layered structure, showing anisotropic conductivity to be 5·10⁴ between perpendicular and parallel to the layer planes. The conductivity anisotropy remained constant at low temperatures but decreased with increasing temperature, attributed to thermionic emission over potential barriers leading to the attainment of activation energy.

Besides the bulk Zn₂In₂S₅, similar ZIS phases may contain Zn₂In₂S₅ in their structure as stoichiometric faults. Such inclusions affect the electrical properties of semiconductors. The anisotropy of conductivity of ZnIn₂S₄ with Zn₂In₂S₅ as composition faults was investigated by Anagnostopoulos and Ploss [14].

Furthermore, the $\text{ZnIn}_2\text{S}_4:\text{Zn}_2\text{In}_2\text{S}_5$ model was also applied by Gallos *et al.* [15] to theoretically describe the conductivity anisotropy in the systems with component faults. The theoretical and practical results obtained by the investigation of bulk $\text{Zn}_2\text{In}_2\text{S}_5$ demonstrate this phase as a promising one for photonic and electronic devices due to its thermal stability. Nonetheless, the exfoliation and analysis of graphene have ushered in a new era of atomically thin materials [16]. Despite the rising interest in ZnIn_2S_4 as a promising photocatalytic material, scant attention has been given to the intermediate $\text{Zn}_2\text{In}_2\text{S}_5$ phase.

The $\text{Zn}_n\text{In}_2\text{S}_{n+3}$ system, particularly ZnIn_2S_4 , has gained significant attention due to its promising visible-light response in photocatalytic applications. Various structural, morphological, electrical, optical, and photocatalytic properties of ZnIn_2S_4 have been investigated in different micro/nano-structured forms ranging from 1D to 3D, highlighting its advantages and limitations as a photocatalyst [17]. Among the benefits are lower toxicity, ease of fabrication, and enhanced stability in photocatalytic reactions compared to other ternary metal chalcogenides [18].

Although $\text{Zn}_2\text{In}_2\text{S}_5$ has potential in electronics and photonics, its 2D layers have not been extensively explored. Defective $\text{Zn}_2\text{In}_2\text{S}_5$ nanosheets have shown potential for photocatalytic hydrogen production by rearranging sulfur vacancies [19], which leads to the separation of charge carriers and prevents fast recombination. ZIS hybrids, such as $\text{Zn}_2\text{In}_2\text{S}_5/\text{Ti}_3\text{C}_2(\text{O}, \text{OH})_x$, have also demonstrated their potential in visible-light photocatalytic hydrogen production [20]. CoP/ $\text{Zn}_2\text{In}_2\text{S}_5$ composite has been explored for coupling methanol into ethylene glycol [21]. Recent studies have shown that ZIS is a promising material for photocatalytic hydrogen release and water purification [22,23]. However, most studies have focused on the material as a component of heterostructures and in nanoparticle form. Additionally, previous studies have primarily focused on bulk hexagonal crystals rather than the few-layer or single-layer forms that make 2D materials so intriguing.

Here we report for the first time the electrical, optical, and structural properties of the layered two-dimensional $\text{Zn}_2\text{In}_2\text{S}_5$ that have never been studied before at the nanoscale in its 2D graphene-like form.

To thoroughly characterize this material, a combination of analytical techniques including Raman spectroscopy, atomic force microscopy (AFM), scanning electron microscopy with energy dispersive X-ray spectroscopy (SEM EDX), high-resolution transmission electron microscopy (HRTEM), and X-ray diffraction (XRD) were utilized. Furthermore, a novel method of photothermal expansion, nano-vis, was also applied to study the photothermal properties of the material at the nanoscale. In addition, piezoelectric force microscopy (PFM) was used for the first time on $\text{Zn}_2\text{In}_2\text{S}_5$, revealing its unique piezoelectric properties within the Zn-In-S family. The results of this comprehensive investigation open up new spheres for future research on the applicability of this ternary 2D phase in nanoelectronics [24].