

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

Инженерная школа ядерных технологий
 Направление подготовки 03.03.02 Физика
 ООП/ОПОП Физика
 Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА БАКАЛАВРА

Тема работы
<i>Исследование рамановских спектров углеродных нанотрубок с серными цепочками при высоком давлении и температуре</i>

УДК 519.876:661.666.-022.532

Обучающийся

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б91	Сунь Юйхань		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Лаптев Р.С.	К.Т.Н.		

Консультант (при наличии)

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент	Никитина Л.В.			

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Верховская М.В.	К.Э.Н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Сечин А.И.	Д.Т.Н., профессор		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

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

Томск – 2023 г.

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОСВОЕНИЯ ООП/ОПОП

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

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

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

Инженерная школа ядерных технологий
 Направление подготовки (ООП/ОПОП) 03.03.02 Физика
 Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

УТВЕРЖДАЮ:
 Руководитель ООП/ОПОП
 _____ Лидер А.М.
 (Подпись) (Дата)

ЗАДАНИЕ на выполнение выпускной квалификационной работы

Обучающийся:

Группа	ФИО
150Б91	Сунь Юйхань

Тема работы:

<i>Исследование рамановских спектров углеродных нанотрубок с серными цепочками при высоком давлении и температуре</i>	
<i>Утверждена приказом директора (дата, номер)</i>	22.05.2023, 142 - 41/с

Срок сдачи обучающимся выполненной работы:	06.06.2023
--	------------

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p>Исходные данные к работе <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 функционированию (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.)</i></p>	<p>Углеродные нанотрубки с ограниченным доменом сложной одномерной системы серных цепочек, гидростатическое давление, создаваемое алмазной наковальней, внешний нагрев до температуры 400°C на устройстве алмазной наковальни с нагревательным кольцом, лазерный нагрев, одноступенчатый спектрометр комбинационного рассеяния inVia Reflex фирмы Renishaw plc (Великобритания) с Ar⁺/Kr⁺ лазером (514,5 нм, E = 2,41 эВ)</p>
<p>Перечень разделов пояснительной записки подлежащих исследованию, проектированию и разработке <i>(аналитический обзор литературных источников с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе)</i></p>	<ul style="list-style-type: none"> - Аналитический обзор литературных источников с целью выяснения особенностей взаимодействия одномерных серных цепочек с углеродными нанотрубками при высоком давлении и температуре. - Подготовка экспериментальных образцов и методы исследования их характеристик. - Результаты исследований на рамановском спектрометре при варьировании давлений и температур. - Социальная ответственность. - Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение. - Заключение

Перечень графического материала <i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i>	-
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы <i>(с указанием разделов)</i>	
Раздел	Консультант
Социальная ответственность	Сечин А.И.
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Верховская М.В.
Названия разделов, которые должны быть написаны на иностранном языке:	
-	

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	3.10.2022
---	-----------

Задание выдал руководитель / консультант (при наличии):

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент	Никитина Л. В.			

Задание принял к исполнению обучающийся:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б91	Сунь Юйхань		

Инженерная школа ядерных технологий
 Направление подготовки (ООП/ОПОП) 03.03.02 Физика
 Уровень образования бакалавриат
 Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики
 Период выполнения _____ (осенний / весенний семестр 2022/2023 учебного года)

КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН выполнения выпускной квалификационной работы

Обучающийся:

Группа	ФИО
150Б91	Сунь Юйхань

Тема работы:

Исследование рамановских спектров углеродных нанотрубок с серными цепочками при высоком давлении и температуре

Срок сдачи обучающимся выполненной работы:	06.06.2023
--	------------

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
30.11.2022	Литературный обзор по теме ВКР	15
06.02.2023	Исследование рамановских спектров углеродных нанотрубок с серными цепочками при высоком давлении	20
28.04.2023	Исследование рамановских спектров углеродных нанотрубок с серными цепочками после лазерного нагрева при различных давлениях	20
2.05.2023	Анализ результатов	20
15.05.2023	Социальная ответственность	10
20.05.2023	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	10
29.05.2023	Заключение	5

СОСТАВИЛ:

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОЭФ ИЯТШ	Лаптев Р.С.	К.Т.Н.		

Консультант (при наличии)

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент ОЭФ ИЯТШ	Никитина Л. В.			

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП/ОПОП

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

Обучающийся

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б91	Сунь Юйхань		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 91 с., 12 рис., 16 табл., 15 источников, 0 прил.

Ключевые слова: углеродные трубки, ограниченные домены, серные цепочки, высокое давление, высокая температура, лазерный нагрев, алмазная наковальня, структурная трансформация, спектроскопия комбинационного рассеяния, рамановская спектроскопия

Объектом исследования являются углеродные нанотрубки с ограниченным доменом сложной одномерной системы серных цепочек

Целью работы является исследование структурной трансформации углеродных нанотрубок с ограниченным доменом сложной одномерной системы серных цепочек при высоких давлениях и температуре

В процессе исследования проводилось прессование образцов на устройстве для создания сверхвысоких гидростатических давлений типа алмазной наковальни. Проводились исследования спектров комбинационного рассеяния углеродных нанотрубок с ограниченным доменом сложной одномерной системы серных цепочек при комнатной температуре и давлениях от 0 до 39 ГПа, после внешнего нагрева температурой 400°C и лазерного нагрева при декомпрессии.

В результате исследований установлено, что в полученных образцах происходит преобразование серных цепей в S_8 мономеров в одномерной серной цепи в ограниченной области углеродной трубки при высоких температурах и давлениях по сравнению с комнатной температурой, но оно нестабильное.

Основные конструктивные, технологические и технико-эксплуатационные характеристики: композитная система (6,5) хиральных одностенных углеродных нанотрубок и одномерных серных цепочек спрессованная с хлопьями рения в качестве укупорочного материала и хлорида натрия в качестве среды передачи давления до 100 мкм с помощью прессы с рубиновым маркером и алмазными наковальнями. In situ рамановская

спектроскопия при декомпрессии при комнатной температуре, после нагрева температурой 400°С и лазерного нагрева.

Область применения: результаты работы могут быть использованы для сравнительного анализа и интерпретаций результатов подобных исследований, для разработки методов создания новых материалов на основе углеродных нанотрубок и серных цепочек, используемых при экстремальных условиях.

Экономическая эффективность/значимость работы заключается в разработке и создании материалов на основе углеродных нанотрубок и одномерных цепочек, позволяющих трансформировать свою структуру или быть стабильными при достаточно экстремальных условиях эксплуатации.

В будущем планируется исследовать влияние давления на стабильность элементов S₈, разработать и оптимизировать дальнейшие эксперименты

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	13
ГЛАВА 1 ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ОДНОМЕРНЫХ СЕРНЫХ ЦЕПОЧЕК С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ.....	15
1.1 Одномерные цепочки серы в конфайнменте углеродных трубок	15
1.2 Влияние высокого давления и температуры на структуру материи	18
ГЛАВА 2 ПОДГОТОВКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ОБРАЗЦОВ И ОПРЕДЕЛЕНИЕ ИХ ХАРАКТЕРИСТИК.....	21
2.1 Экспериментальные материалы и оборудование.....	21
2.1.1 Устройство "алмаз-на-наковальне" (DAC).....	21
2.1.2 Лазерный нагрев	25
2.1.3 Рамановская спектроскопия.....	26
2.2 Экспериментальные образцы	30
2.2.1 Рамановские спектры одномерных цепочек серы	30
ГЛАВА 3 РАМАНОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ОДНОМЕРНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК С СЕРНОЙ ЦЕПОЧКОЙ.....	34
3.1 Эксперименты с высоким давлением и комнатной температуре на одномерных серных цепочках в ограниченной области углеродных трубок	34
3.1.1 Экспериментальный метод	34
3.1.2 Экспериментальный анализ и выводы	34
3.2 Эксперименты при высоких температурах и высоком давлении на углеродных трубках одномерной серной цепочки с ограниченным углеродом	36
3.2.1 Экспериментальный метод	36
3.3 Эксперименты по лазерному нагреву одномерных цепочек серы в	

ограниченной области углеродных трубок	38
3.3.1 Экспериментальные методы	38
3.3.2 Экспериментальный анализ и выводы	39
3.4 Выводы по главе	40
ГЛАВА 4 ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ	43
4.1 Потенциальные потребители результатов исследования.....	43
4.2 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научного исследования с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.....	44
4.2.1 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	44
4.2.2 SWOT – анализ	48
4.3 Планирование научно-технического исследования.....	52
4.4 Бюджет научного исследования	62
4.4.1 Расчет материальных затрат НТИ	62
4.4.2 Расчет затрат на специальное оборудование для научных работ	63
4.4.3 Расчет затрат на электроэнергию	64
4.4.4 Расчет затрат на научные и производственные командировки и накладные расходы	65
4.4.5 Формирование бюджета затрат НТИ	66
4.5 Ресурсоэффективность.....	66
Выводы по главе	69
ГЛАВА 5 СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ	73
5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	73
5.1.1 Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя) правовые нормы трудового законодательства.....	73
5.1.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны	

исследователя	74
5.2 Производственная безопасность	75
Исследование выполнялось в лаборатории сверхтвердых материалов Цзилиньского университета. Для проведения исследования применяли рамановский спектрометр.....	75
5.2.1 Анализ опасных и вредных производственных факторов.....	75
Рекомендуемая литература.....	87
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	88
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....	90

ВВЕДЕНИЕ

Изучение методов получения и свойств веществ с низкой микроструктурой является передовой областью исследований в физике конденсированных сред и материаловедении. В последние годы, после успешного изготовления ряда одномерных ограниченных структур, одномерные кристаллы смогли стабильно существовать в ограниченном пространстве, открывая путь к изучению одномерной материи. С уменьшением размера и усилением эффекта квантового удержания, одномерные атомные цепочки проявляют множество уникальных электрических, тепловых, оптических, магнитных и механических свойств, демонстрируя большой потенциал в таких областях, как электронные и оптоэлектронные устройства, датчики и катализаторы. В настоящее время наиболее широко рассмотрены одномерные конфайнмент-системы, синтезированные из углеродных нанотрубок в качестве конфайнмент-шаблонов. Квазиодномерные углеродные нанотрубки обеспечивают значительное пространственное ограничение для молекул, заключенных внутри трубки, и полагаются на силы Ван-дер-Ваальса для стабилизации и защиты внутренних молекул. Экспериментально было установлено, что внутри углеродных нанотрубок атомы могут быть выровнены в одном измерении, образуя настоящие одномерные атомные структуры, такие как одномерные углеродные цепи, серные цепи и графеновые наноленты, которые невозможно получить в обычных условиях.

Высокие температуры и давления широко используются как средство обеспечения экстремальных условий для синтеза новых материалов и исследования структуры. Сочетание экспериментального изучения системы доменов, ограниченных углеродными нанотрубками, с методами получения высокого давления и температуры не только помогает углубить понимание новых свойств углеродных материалов и взаимодействия между их носителями и объектами, раскрыть физический механизм их фазового

перехода при высоком давлении, но и дает нам новые идеи и способы создания углеродных материалов с новыми структурами и свойствами.

Таким образом, целью данной работы является исследование структурной трансформации углеродных нанотрубок с ограниченным доменом сложной одномерной системы серных цепочек при высоких давлениях и температуре.

Для достижения данной цели были поставлены следующие задачи:

1. Изучить особенности формирования серных цепочек в ограниченной области углеродных нанотрубок возможное влияние критических условий эксплуатации подобных систем согласно литературным данным;
2. Исследовать структурную трансформацию углеродных нанотрубок с серными цепочками при высоких давлениях и комнатной температуре с использованием ячейки с алмазными наковальнями методом рамановской спектроскопии;
3. Исследовать структурную трансформацию углеродных нанотрубок с серными цепочками при высоких давлениях и температуре 400°C с использованием ячейки с алмазными наковальнями и внешним нагревательным кольцом методом рамановской спектроскопии;
4. Исследовать структурную трансформацию углеродных нанотрубок с серными цепочками при высоких давлениях и температуре 400°C с использованием ячейки с алмазными наковальнями и лазерного нагрева методом рамановской спектроскопии;
5. Анализ полученных результатов

ГЛАВА 1 ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ОДНОМЕРНЫХ СЕРНЫХ ЦЕПОЧЕК С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ

Одномерная структура внутри углеродных нанотрубок в ограниченной доменной среде может проявлять новые структуры и свойства [1], отличные от структуры и свойств объемных материалов. Высокие давления могут эффективно регулировать межатомные расстояния, тем самым влияя на их взаимодействия и формы связей, что в свою очередь приводит к изменению структуры и свойств веществ и является важным средством синтеза новых материалов и открытия новых явлений.

В замкнутой доменной системе углеродных нанотрубок изучение структурных фазовых переходов вещества в ограниченном пространстве нанотрубок является одной из актуальных проблем в исследованиях по физике конденсированного состояния вещества. Взаимодействие между углеродными нанотрубками и наполнителями приводит к тому, что при высоком давлении поведение носителя и объекта существенно отличается по сравнению с поведением индивидуально каждого. Это стало новой областью исследований для изучения изменения материи в одномерной системе удержания углеродных трубок. Исследования высокого давления в системах конфайнмента углеродных нанотрубок могут не только раскрыть новый механизм физического фазового перехода материи под действием наноконфайнмента и углубить понимание ее новых свойств, но и дать идеи для создания новых функциональных материалов.

1.1 Одномерные цепочки серы в конфайнменте углеродных трубок

Сера является элементом группы VIA, который при атмосферном давлении и температуре демонстрирует различные трехмерные структурные изомеры. Из них ромбоэдрическая сера является наиболее стабильной структурой при атмосферном давлении, состоящей из циклических молекул S₈

с силами Ван-дер-Ваальса, которые являются изолирующими при атмосферном давлении и претерпевают структурный фазовый переход в металлическую фазу только при очень высоких давлениях 90 ГПа и более. Мономеры серы ограничены ограниченным одномерным пространством в углеродных нанотрубках, что приводит к образованию трех типов одномерных серных цепей: спиральных, зубчатых и линейных, которые демонстрируют более высокую электропроводность, чем объемная сера при атмосферном давлении.

Одномерные серные цепи (далее именуемые серными цепями) в основном получают путем сублимации мономеров, используя углеродные нанотрубки в качестве наноразмерных реакционных сосудов. Кристаллы мономера и углеродные нанотрубки вакуумируются в кварцевых или стеклянных трубках и нагреваются до температуры, которая позволяет мономеру сублимироваться и попасть в углеродные нанотрубки, где он задерживается и формируется одномерная структура.

В 2013 году Фуджимори и др. впервые успешно синтезировали одномерные серные цепи длиной до 160 нм, которые были заключены в одностенные углеродные нанотрубки с высокой термической стабильностью. Расчеты плотности наводнения показали, что эти серные цепочки электропроводны при атмосферном давлении. Микрофотографии одномерных серных цепочек в углеродных нанотрубках получены с помощью просвечивающей электронной микроскопии. В одностенной углеродной нанотрубке диаметром 1,1 нм две линии, расположенные на расстоянии 0,32 нм друг от друга, представляют собой параллельные одноатомные цепочки серы. В двустенных углеродных нанотрубках диаметром 0,7 нм были обнаружены одномерные пилообразные серные цепи со средним расстоянием между осевыми периодами $0,33 \pm 0,03$ нм и линейные серные цепи со средним расстоянием между осевыми периодами $0,18 \pm 0,02$ нм [2].

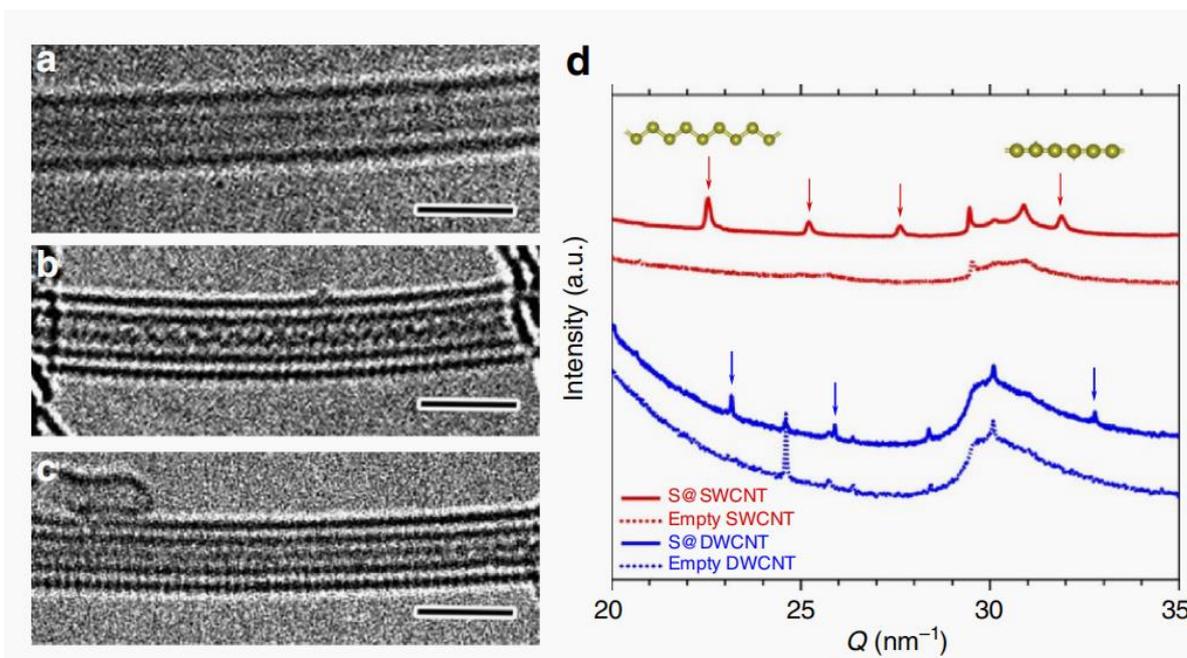


Рисунок 1.1 – Структурная идентификация 1D цепочек серы внутри УНТ. (a) HRTEM-изображение S@SWCNT. Две линии соответствуют 1D цепочкам серы, инкапсулированным внутри SWCNT. (b) HRTEM-изображение S@DWCNT с 1D цепочкой серы в зигзагообразной конформации. (c) Линейная цепочка 1D внутри DWCNT. Масштабная линейка – 2 нм. (d) Профили XRD S@SWCNTs, пустых SWCNTs, S@DWCNTs и пустых DWCNTs. Стрелки указывают на пики Брэгга 1D цепочек серы.

Однако в 2015 году Ли и др. утверждали, что структура из двух параллельных цепочек внутри одностенных углеродных нанотрубок малого диаметра, наблюдаемая с помощью просвечивающей электронной микроскопии, является не параллельной одноатомной серной цепочкой, а спиралевидной полимерной серной цепочкой из мономеров серы, распавшихся на молекулы S_2 внутри углеродных нанотрубок, и предложили структуру, представленную на рисунке 1.2.

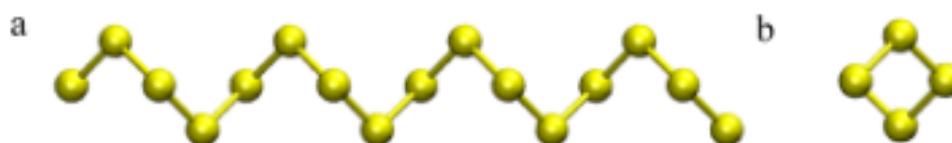


Рисунок 1.2 – Структура спиральных цепочек серы в одномассовых нанотрубках

В 2021 году Насименто и др. наблюдали высокий выход серных цепочек, выращенных в одностенных углеродных нанотрубках металлического типа малого диаметра путем заполнения серой двух одностенных углеродных нанотрубок разного диаметра, а также сигналы серных цепочек, усиленные комбинационным рассеянием. Было обнаружено, что линейные цепочки серы нестабильны как в виде отдельных цепочек, так и заключенные в углеродные нанотрубки, при этом цепочки серы, заключенные в одностенные углеродные нанотрубки, имеют спиралевидную форму [3].

1.2 Влияние высокого давления и температуры на структуру материи

Высокое давление, как экстремальное физическое состояние, может эффективно изменять расстояния между атомами в веществе. Высокое давление может быть классифицировано как статическое или динамическое в зависимости от того, как оно создается. Одним из основных устройств для создания сверхвысоких статических давлений является наковальня с алмазным наконечником (DAC, Diamond anvil cell), где поверхность наковальни размером в несколько сотен микрон создает условия высокого давления при сжатии. Динамические высокие давления используют ударные волны, генерируемые взрывами (например, ядерными взрывами, взрывами пороха), сильными электрическими разрядами и т.д., которые могут мгновенно и очень быстро повысить внутреннее давление объекта до десятков ГПа и более, а в некоторых случаях до нескольких тысяч ГПа, но с резким повышением температуры.

Когда давление повышается, это приводит к сокращению расстояний между атомами в веществе, увеличению перекрытия электронных орбиталей, новым способам связи между атомами и усилению меж- и внутримолекулярных взаимодействий, что приводит к появлению множества

уникальных структур и новых свойств при высоких давлениях, предоставляя человечеству мощные инструменты для понимания структуры и фазовых изменений вещества, регулирования свойств вещества и синтеза новых веществ в астрофизике, геофизике и материаловедении.

Температура, как важный термодинамический параметр, играет ключевую роль в регулировании структуры и свойств материалов. Объединение экспериментальных методов высокого давления и температуры является основным способом при модуляции структуры и свойств материалов в экстремальных условиях. Лазерный нагрев широко используется для нагрева образцов и изготовления новых структур при экстремальных условиях от десятков до сотен гигапаскалей и тысяч кельвинов. Генерируя высокие температуры при лазерном нагреве возможно изготовление структур с широким спектром исследуемых областей, например фазовые изменения в материалах и химические реакции при экстремальных температурах и давлениях.

Генерирование высоких температур в экспериментах можно разделить на два способа: прямой нагрев и косвенный нагрев. Прямой нагрев включает в себя следующие способы: применение высоких токов непосредственно к образцу для создания в нем высоких температур около 2000 К или выше, нагрев образца лазером для мгновенного создания высокотемпературного состояния, использование ударных волн для создания высоких температур в образце, а также создание высокого давления. Косвенный нагрев включает в себя вставку нагревательной трубки (графитовой, Pt, Ta, Mo или из другого металла, устойчивого к высоким температурам) в экспериментальную камеру высокого давления и применение токов высокой мощности для генерации джоулевого тепла в трубке для нагрева образца до 2000 К, а также внешний нагрев в камере высокого давления [1, 4]

Высокая температура и давление играют важную роль в поиске новых материалов и искусственных заменителей природных веществ. Этот метод можно использовать для изучения синтеза, структуры и свойств новых

материалов. Например, сверхтвердые и высокотемпературные сверхпроводящие материалы, могут быть получены с помощью методов синтеза при высокой температуре и давлении. Кроме того, методы высокой температуры и давления могут быть использованы для модификации кристаллической структуры и физических свойств материалов, тем самым улучшая их свойства и расширяя области применения.

ГЛАВА 2 ПОДГОТОВКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ОБРАЗЦОВ И ОПРЕДЕЛЕНИЕ ИХ ХАРАКТЕРИСТИК

2.1 Экспериментальные материалы и оборудование

2.1.1 Устройство "алмаз-на-наковальне" (DAC)

Одним из основных устройств для создания сверхвысоких гидростатических давлений является алмазная наковальня (DAC, (Diamond anvil cell)), разработка которой позволила исследователям погрузиться в богатую науку высоких давлений. Наиболее часто используемый сегодня пресс с алмазной наковальней типа Мао-Белл был разработан Мао и Беллом в Геофизической лаборатории Карнеги в 1950-х годах и был предназначен для зажатия образца между двумя противоположными алмазами, создавая чрезвычайно высокое гидростатическое давление в десятки или даже сотни ГПа. Благодаря превосходному светопропусканию алмаза, метод DAC может быть использован для проведения измерений *in situ* обычных инструментов для определения характеристик конденсированных веществ (таких как спектроскопия и рентгеновская дифракция) при высоких давлениях, что значительно расширяет границы изучения физических свойств при высоких давлениях. Высокое давление может сократить расстояния между атомами, что, в свою очередь, может изменить длину связей, конфигурацию молекул, координационные профили и электронные взаимодействия, и при соответствующих условиях происходят химические реакции, которые было бы трудно осуществить при атмосферном давлении. Это позволяет использовать методы DAC для изучения структуры, свойств и фазовых переходов материи в экстремальных условиях и играет важную роль в исследованиях в области наук о Земле, физики, химии, материаловедения и даже биологических наук [5].

Устройство с алмазной наковальней, использованное в данном эксперименте, представляет собой ячейку с алмазными наковальнями типа Гросс-Белл, как показано на рисунке 2.1.

Пара алмазов одинаковой массы, с наковальнями одинакового размера (границы наковален параллельны и обращены друг к другу), закрепляются на опорной площадке внутри корпуса устройства, находящегося под давлением, что позволяет перемещаться только граням наковален вершин буровых алмазов в противоположных направлениях – вверх и вниз, без горизонтального относительного перемещения, обеспечивая тем самым безопасное высокое давление. Во время эксперимента два буровых алмаза разделены герметизирующей прокладкой, в отверстия которой помещаются образец, среда передачи давления и вещество-маркер.

Алмазные наковальни имеют размер от нескольких десятков до нескольких сотен микрон, и чем меньше поверхность наковальни, тем легче создать высокое давление. Во время эксперимента давление медленно увеличивается путем медленного затягивания подпружиненного нажимного винта шестигранным ключом.

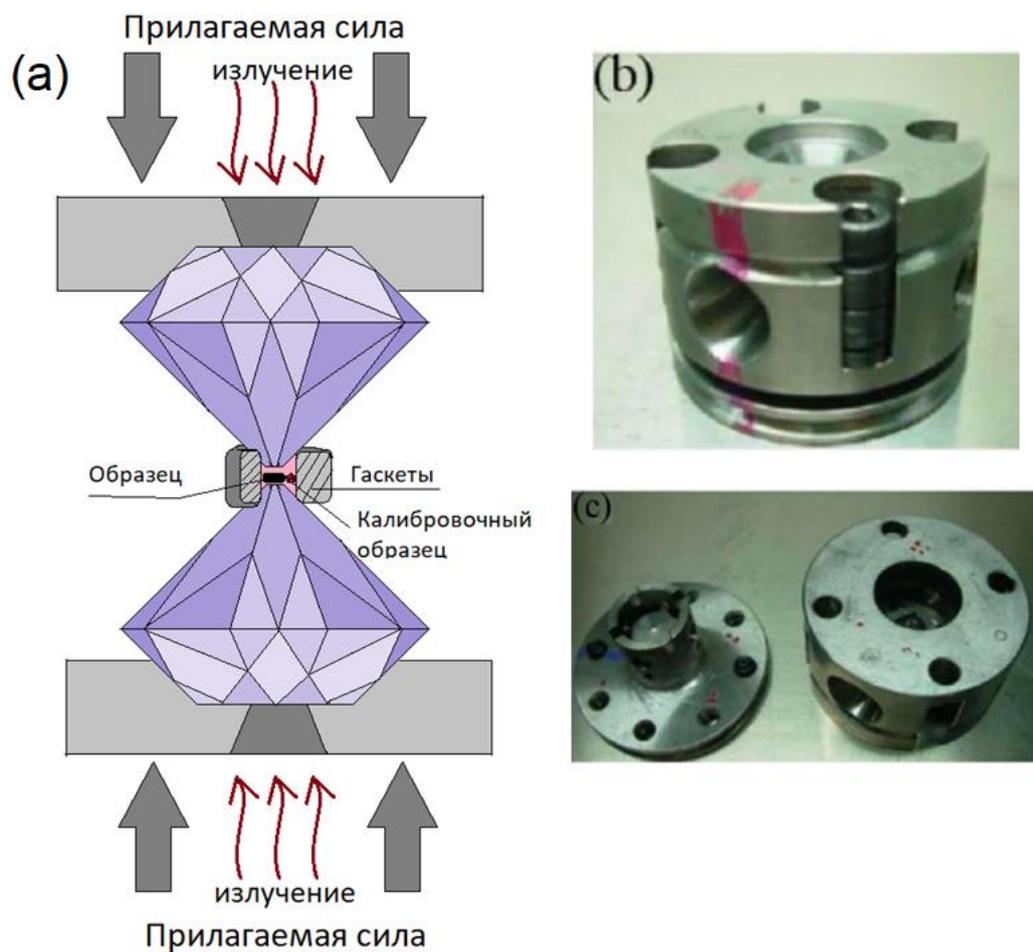


Рисунок 2.1 – (а) Принципиальная схема установки с алмазными наковальнями

(b) и (c) внешний вид ячейки с алмазной наковальней для прессования с поршневым роликом

В связи с различными экспериментальными требованиями могут быть выбраны различные шайбы, средства передачи давления и методы маркировки. Обычно используются шайбы из стали Т301, рения и бериллия. Без добавления среды для передачи давления внутренняя часть DAC становится одноосным полем давления, создавая негидростатическую среду. При добавлении среды передачи давления создается гидростатическая среда для обеспечения равномерного сжатия образца. В зависимости от экспериментальных требований могут быть выбраны различные среды передачи давления. Среда передачи давления обычно делится на твердые среды передачи давления, такие как хлорид натрия и бромид калия; жидкие среды передачи давления, такие как

силиконовое масло и смеси метанола 4:1; и газообразные среды передачи давления, такие как Ne, He, Xe, N₂ и Ar. Из них твердые среды передачи давления просты для экспериментов, а среды передачи давления, такие как сильфон из бромида калия, имеют хорошее светопропускание и подходят для измерений абсорбционной спектроскопии, но имеют плохие гидростатические свойства и могут создавать более низкий диапазон статического давления; жидкие и газообразные среды переноса давления имеют лучшие свойства статического давления, такие как водородные и гелиевые среды переноса давления.

Помимо поддержания гидростатического давления в полости камеры давления, среды переноса давления могут также использоваться в качестве тестовых реактивов, например, при гидрогенизации графена под высоким давлением с использованием водорода в качестве среды переноса давления и при синтезе нитридов металлов под высоким давлением с использованием азота в качестве среды переноса давления [6].

В экспериментах с высоким давлением важно иметь точную калибровку значений давления, при котором находится образец. Три распространенных метода, которые могут быть использованы в установках ДАС, - это метод изменения фазы, метод уравнения состояния и спектроскопический метод. Метод изменения фазы использует точку, в которой вещество претерпевает фазовый переход при известном давлении для калибровки давления, может использоваться только в определенных точках давления и не подходит для экспериментов с непрерывным давлением. Метод уравнения состояния требует простой кристаллической структуры образца и использует уравнение состояния для получения значения внешнего давления путем измерения изменения структуры решетки вещества под давлением. Наиболее часто используемым методом калибровки давления в оборудовании ДАС является спектроскопия, причем наиболее широко используются алмазная спектроскопия Рамана и рубиновая флуоресцентная спектроскопия. В первом случае используется положение рамановского пика при 1333 см⁻¹ на

алмазной наковальне как функция давления, а во втором - рубин, помещенный в полость образца, при этом два пика флуоресценции R1 (694,3 нм) и R2 (692,8 нм) рубина являются функцией давления [7].

Для экспериментов в данной работе использовались два пресса: обычное устройство DAC, как описано выше, и устройство DAC с нагревательным кольцом, помещенным вокруг алмаза, как на рис. 2.2, для проведения экспериментов с внешним нагревом.



Рисунок 2.2 – Экспериментальная ячейка с алмазными наковальнями с нагревательным кольцом

2.1.2 Лазерный нагрев

Технология лазерного нагрева - это метод, использующий лазерную энергию для нагрева веществ. Она обладает такими преимуществами, как высокая скорость нагрева, равномерный нагрев и контролируемый диапазон нагрева, и широко используется в обработке материалов, биомедицине и физических исследованиях.

В области обработки материалов технология лазерного нагрева может использоваться для таких операций обработки, как резка, штамповка и сварка.

Благодаря таким преимуществам, как высокая скорость нагрева, равномерный нагрев и контролируемый диапазон нагрева, технология лазерного нагрева позволяет достичь высокой точности и эффективности в обработке материалов.

В области физических исследований технология лазерного нагрева может быть использована для проведения исследований структуры и свойств материи. Например, технология лазерного нагрева может быть использована для исследования структуры и свойств материалов с помощью высокой энергии лазера для изучения таких процессов, как фазовые превращения, плавление и испарение.

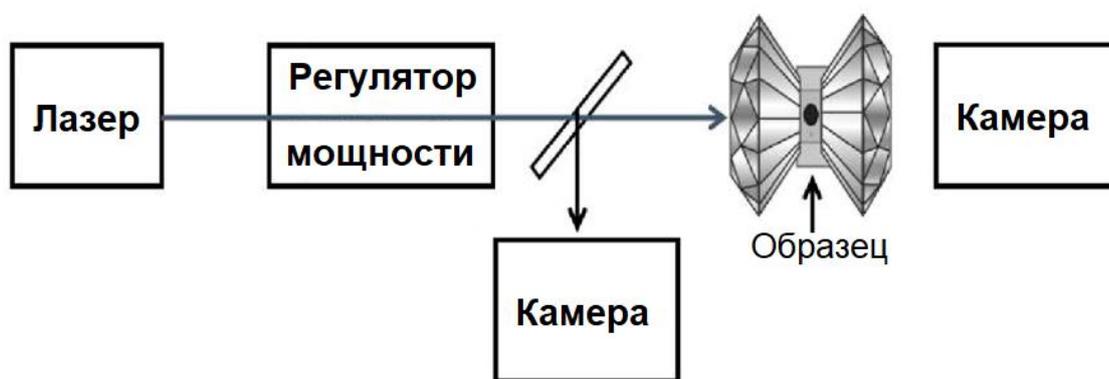


Рисунок 2.3 – Установка для лазерного нагрева, использованная в эксперименте

2.1.3 Рамановская спектроскопия

Рамановская спектроскопия - это аналитический метод, использующий рассеянный свет для измерения колебательной энергии образца. Она названа в честь индийского физика К.В. Рамана, который вместе со своим партнером по исследованиям К.С. Кришнаном впервые наблюдал комбинационное рассеяние в 1928 году. Рамановская спектроскопия извлекает эту информацию путем обнаружения комбинационного рассеяния образца [8].

Когда свет рассеивается молекулой, колеблющееся электромагнитное поле фотона вызывает поляризацию молекулярного электронного облака, что переводит молекулу в более высокое энергетическое состояние, и энергия фотона передается молекуле. Это можно рассматривать как образование очень

скоротечного комплекса между фотоном и молекулой, часто называемого виртуальным состоянием молекулы. Виртуальное состояние не является стабильным, и фотоны почти сразу же испускаются вновь в виде рассеянного света.

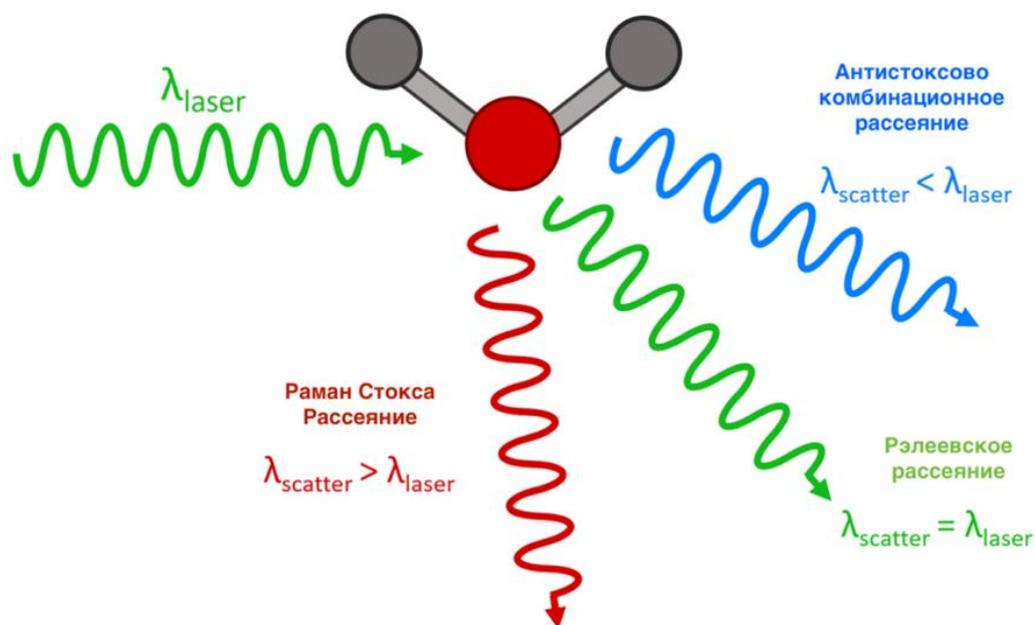


Рисунок 2.4 – Виды рассеяния, происходящие при взаимодействии света с молекулами.

В подавляющем большинстве случаев рассеяния энергия молекулы при взаимодействии с фотоном остается постоянной, а энергия рассеянного фотона и, следовательно, длина волны равны энергии падающего фотона. Это известно как упругое (энергия рассеянных частиц сохраняется) или рэлеевское рассеяние, и оно является доминирующим процессом [9].

Гораздо реже (1 на 10 миллионов фотонов) происходит комбинационное рассеяние, которое представляет собой процесс неупругого рассеяния, при котором происходит передача энергии между молекулой и рассеянным фотоном. Если молекула получает энергию от фотона во время рассеяния (возбуждается на более высокий колебательный уровень), то рассеянный фотон теряет энергию и его длина волны увеличивается, что известно как стоксовское комбинационное рассеяние (по имени Г.Г. Стокса). И наоборот, если молекула теряет энергию, релаксируя на более низкий колебательный

уровень, то рассеянный фотон приобретает соответствующее количество энергии и его длина волны уменьшается; это называется антистоксовым комбинационным рассеянием [10]. С квантово-механической точки зрения, процессы Стокса и анти-Стокса одинаково возможны. Однако в ансамбле молекул, большинство из которых будет находиться на низком уровне колебаний (распределение Больцмана), стоксово рассеяние является статистически более вероятным процессом. Поэтому стоксово комбинационное рассеяние всегда интенсивнее антистоксова рассеяния, и по этой причине стоксово комбинационное рассеяние почти всегда измеряется в спектроскопии комбинационного рассеяния.

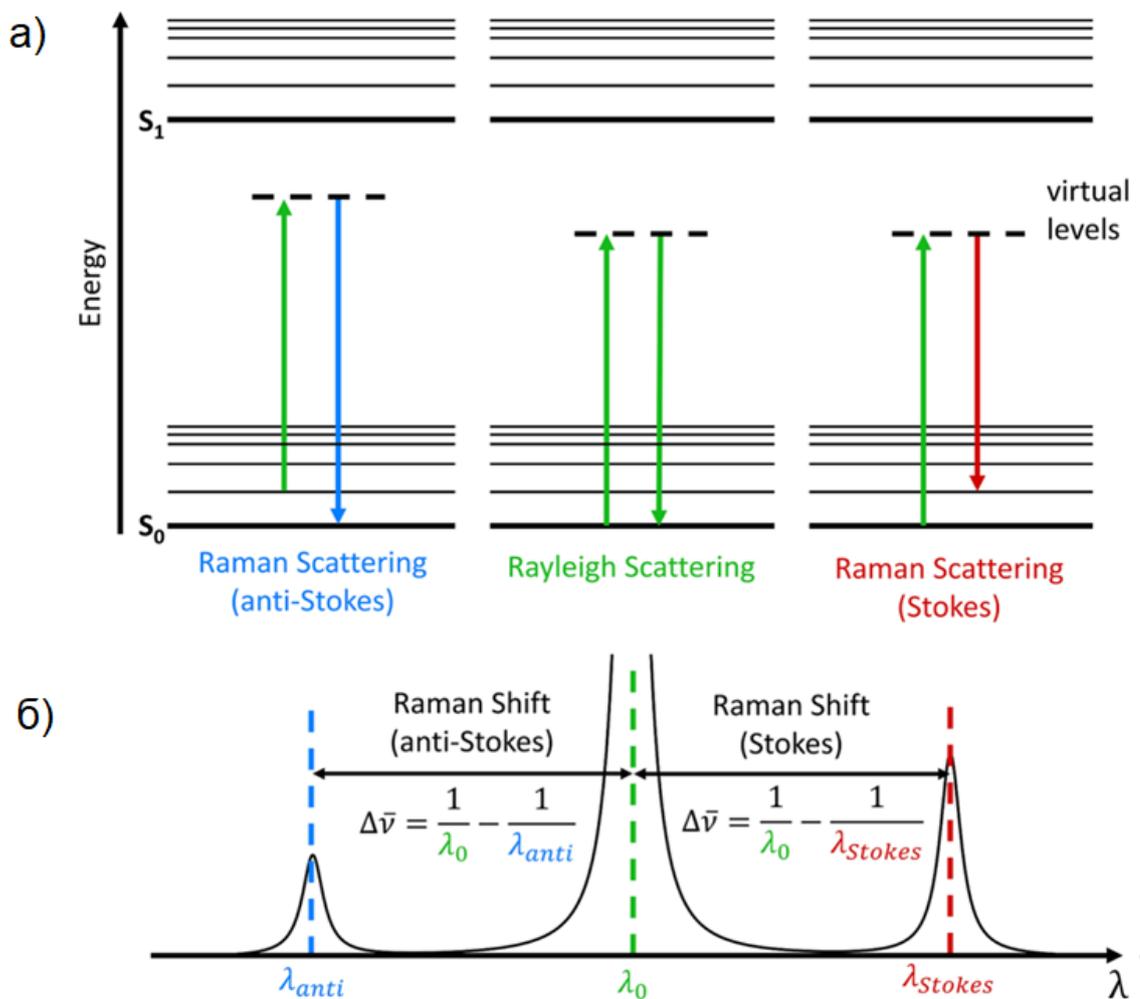


Рисунок 2.5 – Диаграмма Яблонского, показывающая происхождение рэлеевского, стоксовского и антистоксовского комбинационного рассеяния.

На верхнем рисунке 2.5 (а) спектр комбинационного рассеяния измеряет

энергетический зазор между колебательными уровнями молекулы. Рисунок 2.5.(б) иллюстрирует лестницу колебательных уровней для одной колебательной моды молекулы. Многоатомная молекула содержит множество колебательных мод, каждая из которых имеет свою собственную лестницу колебательных уровней.

Для нелинейной молекулы с N атомами число колебательных мод задается следующим уравнением: $3N-6$, где $3N$ - это общее число степеней свободы молекулы, из которого переводится 3 степени свободы, затем вычитается 3 вращательные степени свободы, оставляя $3N-6$ колебательных мод. Для линейной молекулы на одну вращательную степень свободы меньше, поэтому число мод колебаний составляет $3N-5$. Не все моды колебаний могут быть обнаружены с помощью спектроскопии комбинационного рассеяния. Для измерения колебательной моды необходимо, чтобы это была молекула, скорость поляризации которой изменяется во время колебаний [11].

На одноступенчатом спектрометре комбинационного рассеяния *inVia Reflex* (Renishaw) с Ar^+/Kr^+ лазером (514,5 нм, $E = 2,41$ эВ) измерения проводились при нормальных условиях окружающей среды с использованием 50-кратного объектива телеконвертерного микроскопа (числовая апертура 0,5) с решеткой 600 г/мм и спектральным разрешением приблизительно 1 см^{-1} . Мощность лазера поддерживалась ниже 1 мВт, чтобы избежать повреждения образца при нагревании. Измерения проводились путем фокусировки образца лазером таким образом, чтобы диаметр лазерного пятна был минимальным, а яркость - максимальной. Параметры теста были установлены таким образом, чтобы для получения достоверных данных измерялось не менее 2 точек образца, время экспозиции составляло 100 секунд, а диапазон сканирования от 50 до 2000 см^{-1} .

2.2 Экспериментальные образцы

2.2.1 Рамановские спектры одномерных цепочек серы

Рамановская спектроскопия может быть использована для определения колебаний цепочек серы. Рамановский спектр синглета S_8 , показанный на рисунке 2.6, демонстрирует сильные характерные пики, которые могут быть использованы для определения наличия синглета серы, прикрепленного к внешней стенке углеродной нанотрубки. Характерные пики, появляющиеся на рисунке при $140-260 \text{ см}^{-1}$ и $400-500 \text{ см}^{-1}$, обусловлены изгибными и растягивающими колебаниями молекулы S_8 соответственно [12]. Рамановские спектры полностью отличаются от спектров синглета S_8 из-за различной структуры цепочек серы.

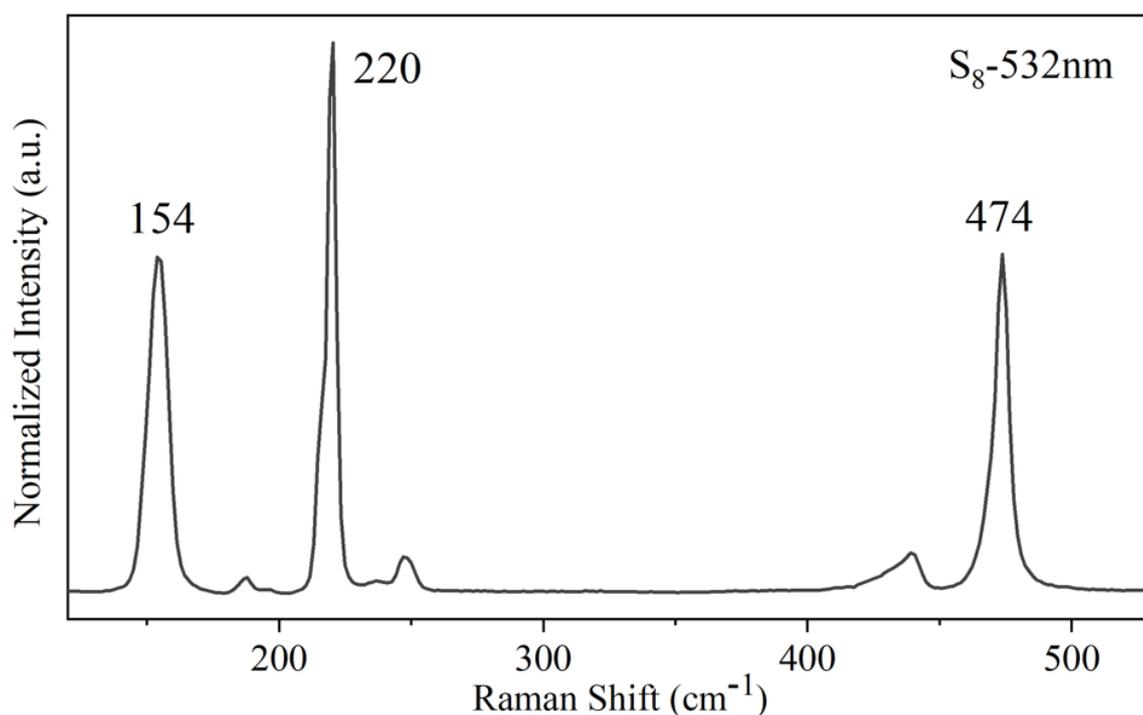


Рисунок 2.6 – Рамановские спектры мономеров S_8

Резонансный рамановский спектр четко идентифицирует характерный рамановский пик, связанный с колебательной модой серной цепи, два характерных пика ($\omega_1 = 321 \text{ см}^{-1}$, $\omega_2 = 393 \text{ см}^{-1}$), в дополнение к пику РДМ (радиальная дыхательная мода), обнаруженному в одностенной углеродной нанотрубки. Как показано на резонансных кривых, два характерных пика ($\omega_1 =$

321 cm^{-1} , $\omega_2 = 393 \text{ cm}^{-1}$) имеют энергии первого оптического перехода 2,35 эВ и 2,34 эВ, соответственно. Энергия (2,37 эВ) почти совпадает с энергией первого оптического скачка серной цепи, что указывает на возможное присутствие серной цепи в этой углеродной нанотрубке.

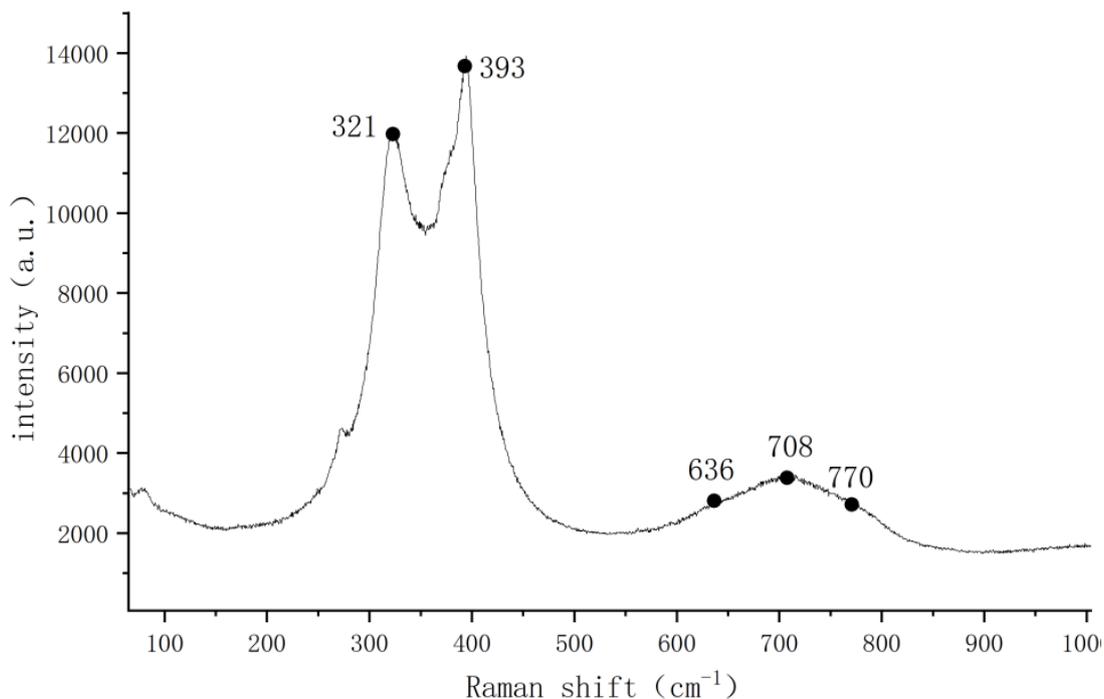


Рисунок 2.7 – Спектры рамановского резонанса предельного домена серных цепочек углеродных трубок

Когда одномерные углеродные трубки с серной цепочкой, приготовленные с помощью CoMoCAT, нагревались лазером, в спектрах комбинационного рассеяния света различных длин волн лазерного излучения четко наблюдались изменения в интенсивности характерных пиков серных цепочек, как результат резонансного комбинационного усиления. Для того чтобы определить характеристики рамановских спектров серных цепочек, их необходимо измерять в резонансных условиях. Резонанс пиков цепочек серы с падающим лазерным светом известен как резонанс падающего излучения [13]. Если энергия падающего фотона равна или подобна разности энергий между двумя резонансными электронными состояниями, интенсивность рамановского сигнала резко возрастает, что указывает на то, что разница в интенсивности между различными пиками также увеличивается. Если условия

резонанса одинаковы, образцы с разными наполнителями можно сравнивать по разнице в интенсивности резонансного комбинационного рассеяния [14].

Также было обнаружено, что рамановский сигнал усиливается, когда цепочки серы находятся внутри углеродных нанотрубок. Это усиление сигнала связано с сильной электронно-фононной связью серных цепочек, заключенных внутри углеродных нанотрубок. В этой гибридной системе падающий фотон в углеродной нанотрубке производит электрон, который переходит в возбужденное состояние, резонирующее с возбужденным состоянием цепочки серы. Это резонансное состояние представляет собой гибридное электронное состояние, возникающее в результате перекрытия орбиталей цепочки серы и углеродной нанотрубки. Это гибридное состояние обычно возникает в одностенных углеродных нанотрубках малого диаметра, когда цепочка серы находится очень близко к стенке трубки, и это усиление сигнала также можно наблюдать в комбинационном рассеянии при высоких давлениях [15].

Экспериментальные этапы

Основными экспериментальными этапами в экспериментах с высокой температурой и высоким давлением в данной диссертации являются: герметизация углеродных нанотрубок, подготовка необходимого образца методом нагретого образца под высоким давлением и разгерметизация *in situ* для исследования спектров комбинационного рассеяния в трех частях, которые подробно описаны ниже.

Исходный образец, используемый в данной работе, представлял собой (6,5) хиральную одностенную углеродную нанотрубку с ограниченным доменом одномерной композитной системы серной цепи. Образец был предварительно спрессован до 100 мкм с помощью пресса с алмазным наконечником и рениевыми чешуйками в качестве укупорочного материала, а отверстие диаметром 100 мкм было пробито лазером в качестве полости для образца с помощью алмазного маркера. Полость для образца опрессовывается путем добавления хлорида натрия, передающего давление, в добавление и

образец образца, добавляя хлорид натрия, передающий давление. По окончании опрессовки до заданного давления помещают нагревательный блок для начала нагрева. После нагрева и охлаждения давление постепенно снималось, и рамановские спектры исследовались *in situ* с помощью рамановского спектрометра при различных давлениях, соответственно.

ГЛАВА 3 РАМАНОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ОДНОМЕРНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК С СЕРНОЙ ЦЕПОЧКОЙ

3.1 Эксперименты с высоким давлением и комнатной температуре на одномерных серных цепочках в ограниченной области углеродных трубок

3.1.1 Экспериментальный метод

Исходный образец, используемый в данной работе, представлял собой композитную систему (6, 5) хиральных одностенных углеродных нанотрубок с ограниченным доменом одномерных цепочек серы. Образец был предварительно спрессован до 100 мкм с помощью пресса с алмазной наковальней с хлопьями рения в качестве укупорочного материала, и отверстие диаметром 100 мкм было пробито лазером в качестве полости для образца с помощью пресса с рубиновым маркером. Полость для образца заполнялась давлением путем добавления образца в полость для образца и добавлением хлорида натрия для передачи давления. По окончании опрессовки давление постепенно снималось, и спектры комбинационного рассеяния анализировались *in situ* с помощью спектрометра комбинационного рассеяния при различных давлениях, соответственно.

3.1.2 Экспериментальный анализ и выводы

При нормальной температуре и давлении рамановские пики одномерных серных цепей в замкнутой области углеродных трубок соответствуют рамановским модам, как показано на рисунке 3.1, с двумя различными рамановскими пиками при 321 см^{-1} и 393 см^{-1} , которые соответствуют колебаниям связи S-S серных цепей, заключенных в углеродные нанотрубки, и двумя различными рамановскими пиками при 636 см^{-1} , 708 см^{-1} и 770 см^{-1} . При 636 см^{-1} , 708 см^{-1} и 770 см^{-1} находятся октавные пики и пики суммы.

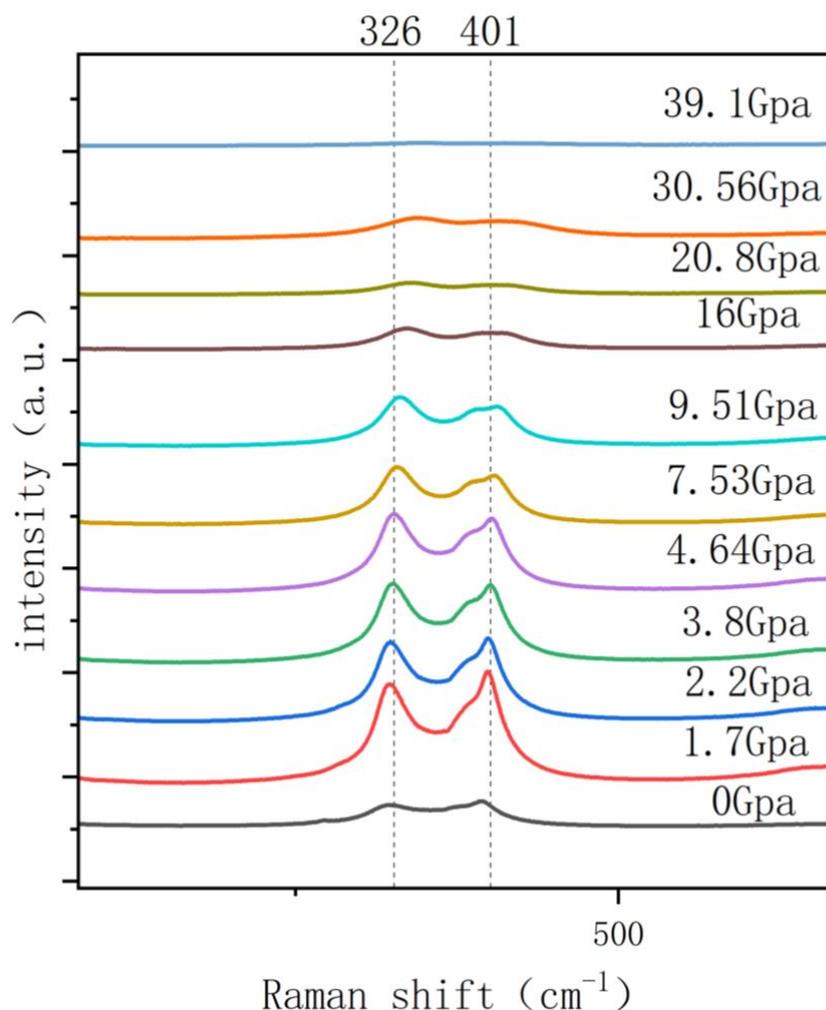


Рисунок 3.1 – Рамановские спектры во время разгрузки после прессования при комнатной температуре

В данном эксперименте два рамановских пика расположены при 326 cm^{-1} и 401 cm^{-1} , как показано на рисунке 3.1. Два рамановских пика смещаются от 321 cm^{-1} и 393 cm^{-1} к 326 cm^{-1} и 401 cm^{-1} соответственно. Смещение в сторону более высоких волновых чисел происходит при высоких давлениях, при этом при опрессовке не появляется новых колебательных пиков, и более выраженных сдвигов при высоких давлениях не наблюдается. Это указывает на то, что условия низкого давления не вызывают значительного изменения фазового сдвига в углеродных трубках одномерной цепочки серы.

3.2 Эксперименты при высоких температурах и высоком давлении на углеродных трубках одномерной серной цепочки с ограниченным углеродом

3.2.1 Экспериментальный метод

Исходный образец, используемый в данной работе, представлял собой композитную систему (6, 5) хиральных одностенных углеродных нанотрубок с ограниченной одномерной цепочкой серы. В качестве укупорочного материала использовался пресс с алмазной наковальней, предварительно спрессованные до 100 мкм чешуйки рения, а в качестве полости для образца лазером пробивалось отверстие диаметром 100 мкм с помощью прессы с алмазным маркером. Полость для образца заполняется под давлением путем добавления образца в полость для образца и добавления хлорида натрия для передачи давления. По окончании опрессовки газ аргон пропускают через нагревательное устройство для удаления воздуха из трубчатой печи и начинают нагрев, нагревая при температуре 400°C в течение одного часа. После охлаждения давление постепенно снималось, и рамановские спектры проверялись *in situ* с помощью рамановского спектрометра при различных давлениях, соответственно.

3.2.2 Экспериментальный анализ и выводы

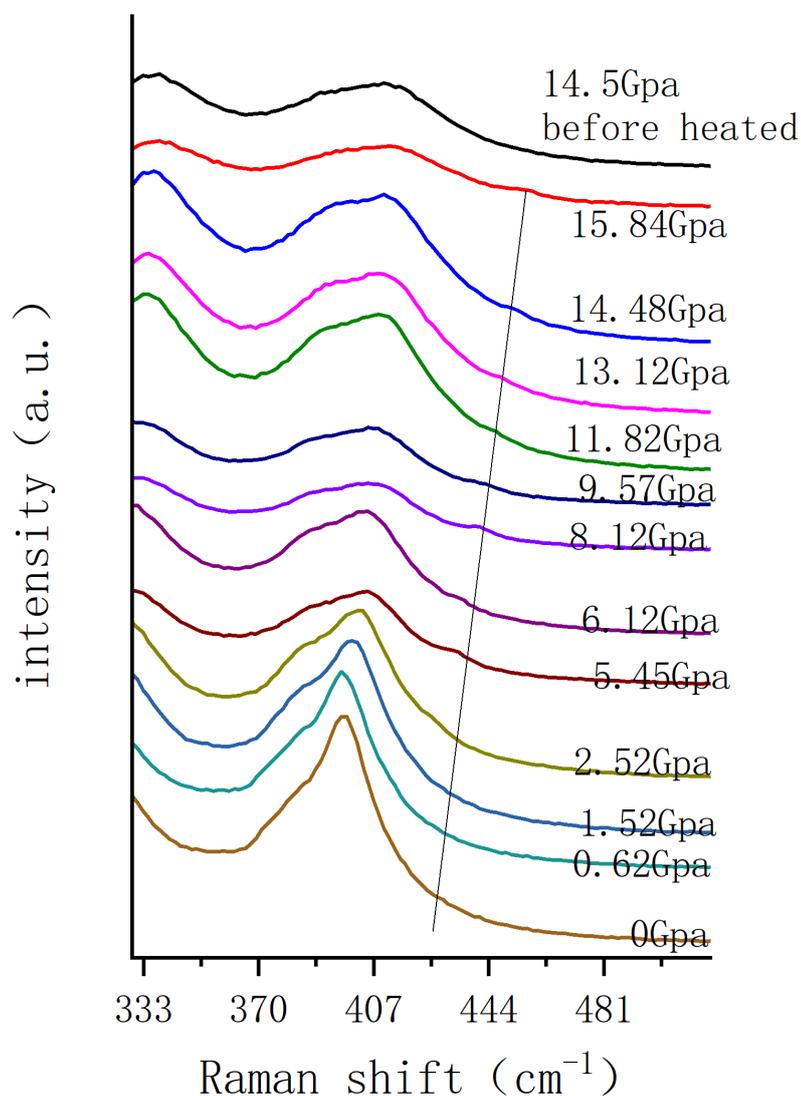


Рисунок 3.2 – Рамановские спектры во время разгрузки при высокой температуре и давлении

Как показано на рисунке 3.2, после нагрева в диапазоне $426 \text{ см}^{-1} - 444 \text{ см}^{-1}$ появился новый рамановский пик при 444 см^{-1} , который был смещен до 426 см^{-1} в процессе разгрузки от $15,84 \text{ ГПа}$ до $2,52 \text{ ГПа}$, но исчез в процессе разгрузки до $2,52 \text{ ГПа}$ и затем до атмосферного давления. В конце эксперимента были измерены рамановские спектры, и в отличие от двух характерных пиков серных цепей в рамановском спектре выше на рисунке 2.7 Рамановские спектры ограниченного доменного резонанса серных цепей углеродных трубок, два рамановских пика переместились с 321 см^{-1} и 393 см^{-1} на 329 см^{-1} и 396 см^{-1} соответственно. Рамановский пик при высоком давлении не только перемещается в направлении высокого волнового

числа, но и не возвращается в положение рамановского пика до обработки высокой температурой и высоким давлением даже после разгрузки до атмосферного давления. Рамановские спектры образцов показали новые пики при различных давлениях после обработки высокой температурой и высоким давлением, что указывает на возникновение новой структуры продукта. Однако новые пики на рамановских спектрах постепенно исчезали во время продолжения процесса разгрузки при различных давлениях. В отличие от рамановского спектра мономера S_8 на рис. 2.6 выше, рамановский пик при 445 см^{-1} также присутствует на рис. 2.6, подобно новому рамановскому пику при 444 см^{-1} в экспериментально измеренном рамановском спектре, который предположительно является рамановским пиком мономера S_8 , что указывает на то, что мономер S_8 появился при испытании при высокой температуре и высоком давлении, но не сохранился после снятия давления до атмосферного. Мы обсудим это позже, чтобы определить источник вновь появившегося колебательного пика.

3.3 Эксперименты по лазерному нагреву одномерных цепочек серы в ограниченной области углеродных трубок

3.3.1 Экспериментальные методы

Исходный образец, используемый в данной работе, представлял собой (6,5) хиральную одностенную углеродную нанотрубку, ограниченную одномерной цепочкой серы, как описано выше. В качестве укупорочного материала использовались предварительно спрессованные до 100 мкм рениевые чешуйки, а в качестве полости для образца с помощью алмазного маркера лазером пробивалось отверстие диаметром 100 мкм. После размещения образца в полости добавлялся хлорид натрия как среда передачи давления. После опрессовки образец внутри DAC нагревается с помощью лазерного источника на основе иттрий-алюминиевого граната, легированного неодимом (Nd:YAG), который формирует лазерный луч с длиной волны 1064

нм и фокусируется непосредственно на внутренней полости пресса от алмаза до верхней наковальни. Температура внутри полости пресса может быть изменена путем регулировки мощности лазера. Лазерное пятно составляет около 5 мкм. Лазера функционирует в режиме TEM00 с мощностью 4 Вт и 9 Вт соответственно. После охлаждения образца до комнатной температуры давление постепенно снималось, и рамановские спектры проверялись *in situ* с помощью рамановского спектрометра при различных давлениях в процессе декомпрессии.

3.3.2 Экспериментальный анализ и выводы

На рисунке 3.4 представлен спектр комбинационного рассеяния после лазерного нагрева в процессе декомпрессии.

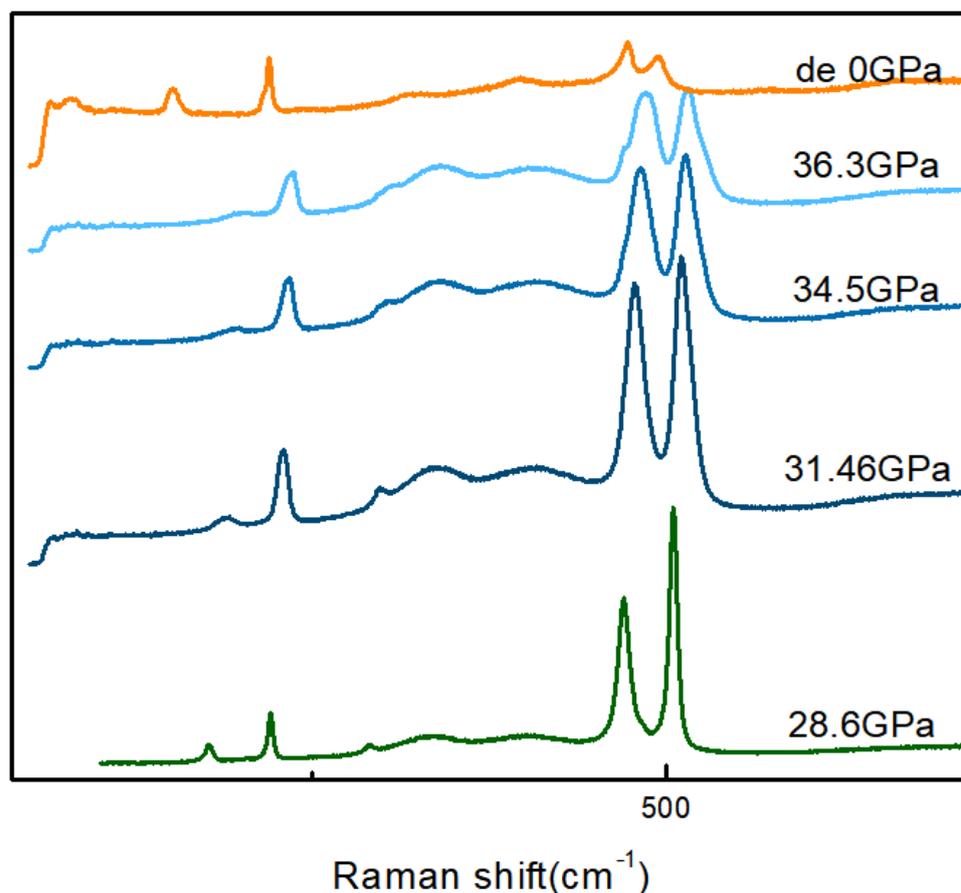


Рисунок 3.4 – Спектры комбинационного рассеяния во время лазерного нагрева и нагнетания давления

Как показано на рисунке 3.4, при атмосферном давлении без нагрева на графике присутствовали несколько характерных рамановских рефлекса. В отличие от двух характерных пиков серных цепей в резонансном рамановском спектре серных цепей углеродной трубки на рисунке 2.7, было зафиксировано несколько новых рамановских пиков, расположенных при 145 см^{-1} , 206 см^{-1} , 318 см^{-1} , 471 см^{-1} и 501 см^{-1} . Новые рамановские пики сохранялись в неизменном виде при дальнейшем продолжении разгерметизации до атмосферного давления и, предположительно, являлись превращениями новых мономеров S_8 по сравнению с рамановскими спектрами мономеров S_8 . Поскольку температура лазерного нагрева была выше, чем температура внешнего нагрева, можно предположить, что чем выше температура, тем полнее происходит превращение серы в S_8 мономеры в 1D углеродных трубках с серной цепочкой.

3.4 Выводы по главе

Для того чтобы исследовать и выявить процесс структурной трансформации ограниченных углеродными трубками 1D серных цепей при высокой температуре и давлении, были представлены три серии экспериментов, которые проводились в условиях комнатной температуры и высокого давления, высокой температуры и высокого давления, а также лазерного нагрева. В условиях холодного давления в ограниченной углеродной трубкой одномерной серной цепи не наблюдалось новых комбинационных пиков, и не наблюдалось значительных структурных изменений; в условиях высокой температуры и высокого давления в ограниченной углеродной трубкой одномерной серной цепи наблюдались новые колебательные пики, и предположительно появился синглет S_8 ; в условиях лазерного нагрева в ограниченной углеродной трубкой одномерной серной цепи наблюдалось больше новых колебательных пиков.

В данном разделе с помощью трех серий экспериментов было установлено, что в высокотемпературных условиях в образцах появляются

новые рамановские пики, что предположительно является появлением синглета S_8 . В ходе экспериментов было обнаружено, что при комнатной температуре давление не оказывает должного влияния на углеродные трубки с 1D серной цепью и не происходят новые трансформации, в то время как высокотемпературные условия, такие как внешний и лазерный нагревы, оказывают большее влияние на углеродные трубки с 1D серной цепью, причем, чем выше температура, тем полнее происходит превращение серной цепи в S_8 мономеры.

Приведенные выше исследования показывают, что углеродные трубки с 1D серной цепочкой претерпевают структурные изменения, появляются новые рамановские пики и S_8 -мономеры после высокой температуры и высокого давления по сравнению с комнатной температурой и высоким давлением. Это говорит о том, что серные цепи в ограниченной области углеродных трубок не стабильны при высоких температурах и претерпевают переход к своей первоначальной структуре.

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

Студенту:

Группа	ФИО
150Б91	Сунь Юйхань

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

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

<i>Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	<i>Затраты на сырьё, размер окладов, затраты на электроэнергию, амортизационные расходы</i>
<i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	<i>Согласно проектной документации. Районный коэффициент 1.3</i>
<i>Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	<i>Отчисления во внебюджетные фонды 30%</i>

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

<i>Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения</i>	<i>Потенциальные потребители результатов исследования; проведение анализа конкурентоспособности.</i>
<i>Планирование и формирование бюджета научных исследований</i>	<i>цели и результаты проекта; организационная структура проекта.</i>
<i>Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования</i>	<i>бюджет научно-технического исследования.</i>

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

<i>Оценка конкурентоспособности НИ; SWOT- анализ; Бюджет затрат научно-технического исследования Основные показатели эффективности НИ</i>

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б91	Сунь Юйхань		

ГЛАВА 4 ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ

Темой настоящей ВКР является: Структурная трансформация систем доменных серных цепей с углеродными трубками при высокой температуре и давлении.

В настоящее время научные исследования должны учитывать не только передовые разработки научных тем, но и коммерческую ценность научных тематических исследований

Целью выполнения финансово-экономической части выпускной квалификационной работы является формирование навыков оценки результата научной работы и поиск источников финансирования для проведения научного исследования. Данный раздел, предусматривает рассмотрение следующих задач:

- Оценка коммерческой ценности исследований и коммерческого потенциала
- Планирование научно-исследовательской работы;
- Расчет бюджета научно-исследовательской работы;
- Определение ресурсной, финансовой, бюджетной эффективности исследования.

4.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Потенциальными группами потребителей результатов данного исследования являются организации аэрокосмического производства, связи, медицины и других областей, а потенциальные группы потребителей, к которым может быть применено данное исследование, должны максимально контролировать затраты, выбирая материалы, которые производятся с низкой себестоимостью, и максимально увеличивать срок службы материалов. Таким образом, потенциальными группами, к которым можно применить данное

исследование, являются крупные промышленные компании и некоторые некоммерческие государственные предприятия.

Для того чтобы определить группы потребителей, которые могут быть заинтересованы в результатах данного исследования, необходимо тщательное изучение и классификация потенциальных потребителей.

Основными характеристиками выбранных групп потребителей являются:

- местоположение – районы с высоким уровнем промышленности;
- отношение к услуге – готовность к внедрению новых технологий в технический процесс;
- принцип закупок – компании, осуществляющие централизованные закупки.

Поскольку в России нет предыдущих исследований, связанных с изучением материалов из углеродного волокна высокого давления, большинство организаций были бы очень заинтересованы в результатах.

4.2 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научного исследования с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.

4.2.1 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

Поскольку для исследований углеродных волокон необходимы одностенные углеродные нанотрубки, в данном эксперименте использовались более дорогие углеродные нанотрубки, что увеличило стоимость эксперимента.

Необходим детальный анализ структурных конструкций, поскольку каждая из них имеет свои преимущества и недостатки. Этот анализ был проведен с помощью оценочной карты. Экспертная оценка проводится на основе технических характеристик и экономических показателей с

использованием 5-балльной шкалы, где 1 - самая низкая оценка, а 5 - самая высокая. Общий вес всех показателей должен быть равен 1. ВК1 – одностенные трубки из углеродного волокна. ВК2 – двустенные трубки из углеродного волокна.

Данный анализ целесообразно проводить с помощью оценочного листа, для чего были выбраны 2 конкурентоспособные разработки. Индекс конкурентоспособности рассчитывался по формуле:

$$K = \sum iB_i \cdot V_i, \quad (4.1)$$

где B_i – бал i -го показателя, V_i – вес показателя (в долях единицы).

Согласно данным таблицы 4.1, конкурентоспособность разработки научных исследований свойств одностенных углеродных нанотрубок с серными цепочками составляет 4,09 (БК1) против 3,67 для исследования свойств двустенных углеродных нанотрубок (БК2). Полученные данные показывают превосходство научно-технической разработки по следующим критериям: удобство использования, устойчивость к помехам, надежность, функциональные возможности и конкурентоспособность изделия. Исследование механических свойств изделий из одностенных углеродных нанотрубок дало больше информации по экспериментальным данным, что контрастирует с конкурирующими принципами и методами исследования механических свойств изделий (БК1). Данный подход имеет более широкое применение в промышленности.

Таблица 4.1 Оценочная карта сравнения конкурентных технических решений

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы		Конкурентоспособность	
		Б ₁	Б ₂	К ₁	К ₂
Технические критерии оценки ресурсоэффективности					
1. Повышение производительности труда пользователя	0.15	4	4	0.4	0.4
2. Удобство в эксплуатации (соответствует требованиям потребителей)	0.1	4	3	0.2	0.15
3. Помехоустойчивость	0.01	4	2	0.2	0.1
4. Энергоэкономичность	0.06	4	4	0.2	0.2
5. Надежность	0.1	4	3	0.4	0.3
6. Уровень шума	0.01	3	3	0.15	0.15
7. Безопасность	0.1	5	5	0.05	0.05
8. Потребность в ресурсах памяти	0.1	4	4	0.4	0.4
9. Функциональная мощность (предоставляемые возможности)	0.01	5	3	0.5	0.3
10. Простота эксплуатации	0.07	4	4	0.2	0.2
11. Качество интеллектуального интерфейса	0.01	4	4	0.2	0.2
12. Возможность подключения в сеть ЭВМ	0.01	5	5	0.05	0.05

Экономические критерии оценки эффективности					
1. Конкурентоспособность продукта	0.05	4	3	0.2	0.15
2. Уровень проникновения на рынок	0.02	5	5	0.1	0.1
3. Цена	0.04	4	4	0.12	0.12
4. Предполагаемый срок эксплуатации	0.03	4	4	0.12	0.12
5. Послепродажное обслуживание	0.01	4	4	0.04	0.04
6. Финансирование научной разработки	0.05	4	5	0.32	0.4
7. Срок выхода на рынок	0.05	4	4	0.2	0.2
8. Наличие сертификации разработки	0.01	4	4	0.04	0.04
Итого	1	83	77	4.09	3.67

4.2.2 SWOT – анализ

SWOT – Strengths (сильные стороны), Weaknesses (слабые стороны), Opportunities (возможности) и Threats (угрозы) – представляет собой комплексный анализ научно-исследовательского проекта.

Сильные стороны – это факторы, которые характеризуют конкурентоспособную сторону научно-исследовательского проекта. Указывают на отличительное преимущество проекта или ресурсы, являющиеся особенными с точки зрения конкуренции.

Слабые стороны – это недостаток, упущение или ограниченность научно-исследовательского проекта, которые препятствуют достижению его целей.

Возможности включают в себя предпочтительную ситуацию в настоящем или будущем, возникающую в условиях окружающей среды проекта, например, тенденцию, изменение или предполагаемую потребность, которая поддерживает спрос на результаты проекта и позволяет руководству проекта улучшить свою конкурентную позицию.

Угроза – это любая нежелательная ситуация, тенденция или изменение в условиях окружающей среды проекта, которая имеет разрушительный или угрожающий характер для его конкурентоспособности в настоящем или будущем.

SWOT-анализ можно осуществить и представить в виде интерактивной матрицы работы, таблица 4.2, а также результирующих таблиц возможностей и угроз НИР, таблицы 5.3.

Каждый фактор таблицы 4.2 помечается либо знаком «+» (означает сильное соответствие сильных сторон возможностям), либо знаком «-» (что означает слабое соответствие); «0» – если есть сомнения в том, что поставить «+» / «-».

Таблица 4.2 Интерактивная матрица проекта

Сильные стороны проекта					
Возможности проекта		C1	C2	C3	C4
	B1	+	+	+	0
	B2	+	-	+	-
	B3	-	-	-	0

Таблица 4.3 SWOT-анализ

	<p>Сильные стороны проекта:</p> <p>C1. Актуальность.</p> <p>C2. Применение современного оборудования.</p> <p>C3. Квалифицированный персонал.</p> <p>C4. Заявленная экономичность и энергоэффективность технологии.</p>		<p>Слабые стороны проекта:</p> <p>Сл1. Высокая стоимость.</p> <p>Сл2. Малый круг потребителей.</p> <p>Сл3. Отсутствие у потенциальных потребителей квалифицированных кадров по работе с научной разработкой.</p> <p>Сл4. Отсутствие прототипа научной разработки.</p>	
Возможности:	Результаты	анализа	Результаты	анализа
B1. Появление	интерактивной	матрицы	интерактивной	матрицы

<p>дополнительного спроса на новый продукт.</p> <p>В2. Снижение таможенных пошлин на сырье и материалы, используемые при научных исследованиях.</p> <p>В3. Повышение стоимости конкурентных разработок.</p>	<p>проекта полей «Сильные стороны и возможности»:</p> <p>1. Обеспечение условий для создания кадров в области создания пористых структур для медицинского применения.</p> <p>2. Появление дополнительного спроса и финансирования, обеспеченных актуальностью тематики.</p>	<p>проекта полей «Слабые стороны и возможности»:</p> <p>1. Необходимо финансирование на модернизацию, что возможно реализовать в условиях вуза.</p> <p>2. Расширение круга потребителей путем модернизации системы.</p>
<p>Угрозы:</p> <p>У1. Отсутствие спроса на новые технологии производства.</p> <p>У2. Развитая конкуренция технологий производства.</p>	<p>Результаты анализа интерактивной матрицы проекта полей «Сильные стороны и угрозы»:</p> <p>1. Благодаря возможностям системы своевременному</p>	<p>Результаты анализа интерактивной матрицы проекта полей «Слабые стороны и угрозы»:</p> <p>1. Относительно высокая стоимость, и ограниченный</p>

<p>У3. Введение дополнительных государственных требований к сертификации продукции.</p>	<p>финансированию продвижение на рынок может стать успешным.</p> <p>2.Повышение конкурентоспособности после модернизации разработки.</p>	<p>круг потребителей может вызвать низкий спрос со стороны заказчиков.</p>
---	--	--

Результаты SWOT-анализа учитываются при разработке структуры работ, выполняемых в рамках научно-исследовательского проекта. Приведённый анализ показал, что технология, находясь на этапе разработки, имеет хорошие шансы на коммерциализацию, с учетом проявляемого интереса партнеров и удачных исследований. При этом если переход разработки в стадию коммерциализации затянется, то возможна потеря спроса на готовую технологию.

4.3 Планирование научно-технического исследования

В данном разделе составлен перечень этапов и работ в рамках проведения научного исследования и проведено распределение исполнителей по видам работ. Планирование комплекса предполагаемых работ осуществлялось в следующем порядке:

- разработка задания;
- теоретические исследования;
- составление порядка эксперимента, выбор технических режимов;
- приобретение необходимых образцов;
- изготовление подготовка исследуемых образцов к исследованиям;
- экспериментальные исследования;
- оценка результатов экспериментов;
- оформление отчёта по ВКР;
- подготовка к защите ВКР.

Порядок составления этапов и работ, распределение исполнителей по данным видам работ приведен в таблице 4.4.

Таблица 4.4. Распределение исполнителей и этапы выполняемых работ

Основные этапы	№ раб	Содержание работ	Должность исполнителя
Разработка технического задания	1	Составление и утверждение технического задания	Руководитель темы
Выбор направления исследований	2	Подбор и изучение материалов по теме	Руководитель, лаборант (дипломник)
	3	Проведение патентных исследований	Руководитель, лаборант
	4	Выбор направления исследований	Руководитель, лаборант
	5	Календарное планирование работ по теме	Руководитель, лаборант
Теоретические и экспериментальные исследования	6	Проведение теоретических расчетов и обоснований	Руководитель, лаборант
	7	Составление порядка эксперимента, выбор технических режимов	Руководитель, лаборант, сотрудник-техник

	8	Изготовление исследуемых образцов	Инженер
	9	Подготовка исследуемых образцов к проведению экспериментов	Инженер
	10	Проведение экспериментов	Руководитель, лаборант, сотрудник-техник
	11	Сопоставление результатов экспериментов с теоретическими исследованиями и подготовка к участию в конференции	Руководитель, лаборант
Обобщение и оценка результатов	12	Оценка эффективности полученных результатов и участие в конференции	Руководитель, лаборант
	13	Определение целесообразности проведения ОКР	Руководитель, лаборант

Данная таблица отображает вклад каждого участника исследовательской работы. Наибольшая часть работы приходится на лаборанта (дипломника).

4.3.1 Определение трудоемкости выполнения работ

Затраты на рабочую силу также являются частью затрат на разработку в исследовании диссертации, поэтому нам нужно определить трудоемкость каждого участника

С целью определения ожидаемого (среднего) значения трудоемкости используем следующую формулу:

$$t_{ож} = \frac{3t_{\min} + 2t_{\max}}{5}, \quad (4.2)$$

где $t_{ож}$ – ожидаемая трудоёмкость выполнения работы, чел.дн.; t_{\min} – минимально возможная трудоёмкость выполнения работы, чел.дн.; t_{\max} – максимально возможная трудоёмкость выполнения работы, чел.-дн. Оценка трудоёмкости выполнения научного исследования для научного руководителя:

$$t_{ож} = \frac{3 \cdot 36 + 2 \cdot 95}{5} = 59.6 \text{ чел. -дн.}$$

Трудоёмкость выполнения научного исследования для сотрудника – техника:

$$t_{ож} = \frac{3 \cdot 8 + 2 \cdot 22}{5} = 13.6 \text{ чел. -дн.}$$

Трудоёмкость выполнения научного исследования для лаборанта:

$$t_{ож} = \frac{3 \cdot 56 + 2 \cdot 134}{5} = 87.2 \text{ чел. -дн.}$$

Далее определим продолжительность каждой работы в рабочих днях T_p , учитывая параллельность выполнения работ несколькими исполнителями, по следующей формуле:

$$T_{pi} = \frac{t_{ожi}}{Ч_i} \quad (4.3)$$

где T_{di} – продолжительность одного этапа работы, раб.дн.; $t_{ожi}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения одной работы, чел.-дн.; $Ч_i$ – численность исполнителей, выполняющих одновременно одну и ту же работу на данном этапе, чел.

Произведем длительно работ в рабочих днях.

Расчёт продолжительности работы выполнения научного исследования для научного руководителя:

$$T_{PD} = \frac{t_{ож}}{K_{ВН}} \cdot K_D = \frac{59.6 \text{ чел. - дн.}}{1} \cdot 1 = 59.6 \text{ раб. дни}$$

Продолжительность работы выполнения научного исследования для сотрудника-техника:

$$T_{PD} = \frac{13.6 \text{ чел. - дн.}}{1} \cdot 1 = 13.6 \text{ раб. дни}$$

Продолжительность работы выполнения научного исследования для лаборанта:

$$T_{PD} = \frac{87.2 \text{ чел. - дн.}}{1} \cdot 1 = 87.2 \text{ раб. дни}$$

Ленточный график проведения научных работ изображается в форме диаграммы Ганта. Для построения диаграммы необходимо перевести рабочие дни в календарные дни, для чего воспользуемся следующим соотношением:

$$T_{КД} = T_{РД} \cdot T_K, \quad (4.4)$$

где $T_{КД}$ – продолжительность выполнения этапа в календарных днях; T_K – коэффициент календарности, определяющийся выражением 4.4.

$$T_K = \frac{T_{кал}}{T_{кал} - T_{ВД} - T_{ПД}}, \quad (4.5)$$

где $T_{кал}$ – количество календарных дней в году; $T_{ВД}$ – количество выходных дней в году; $T_{ПД}$ – количество праздничных дней.

Рассчитаем коэффициент календарности по формуле 4.5:

$$T_K = \frac{365}{365 - 66} = 1.22$$

Построим таблицу по результатам расчётов, в которой укажем трудоёмкости работ, название работы, а также укажем длительность работ в рабочих и календарных днях, таблица 4.5.

Таблица 4.5 – Временные показатели проведения научного исследования

На основе таблицы 4.5, построим календарный план-график. График построим для максимального по

Название работы	Трудоемкость работ									Длит. работ в раб. дни Трд			Длит. работ в кален. дни Ткд		
	t _{min} , чел.-дн			t _{max} , чел.-дн			t _{ож} , чел.-дн			НР	СТ	ЛАБ	НР	СТ	ЛАБ
	НР	СТ	ЛАБ	НР	СТ	ЛАБ	НР	СТ	ЛАБ						
Составление и утверждение технического задания	2	-	-	4	-	-	2.8	-	-	2.8	-	-	3.4	-	-
Подбор и изучение материалов по теме	10	-	10	21	-	30	14.4	-	18	14.4	-	18	17.6	-	21.96
Проведение патентных исследований	5	-	7	8	-	15	6.2	-	10.2	6.2	-	10.2	7.6	-	12.4
Выбор направления исследований	3	-	5	4	-	7	3.4	-	5.8	3.4	-	5.8	4.2	-	7.1
Календарное планирование работ по теме	2	-	3	3	-	4	2.4	-	3.4	2.4	-	3.4	2.9	-	4.2
Проведение теоретических расчетов и обоснований	4	-	7	6	-	10	4.8	-	8.2	4.8	-	8.2	5.9	-	10
Составление порядка эксперимента, выбор технических режимов	1	1	2	3	3	4	1.8	1.8	2.8	1.8	1.8	2.8	2.2	2.2	3.4
Изготовление исследуемых образцов	-	-	2	-	-	3	-	-	2.4	-	-	2.4	-	-	2.9
Подготовка образцов к проведению экспериментов	-	-	7	-	-	12	-	-	9	-	-	9	-	-	11
Проведение экспериментов	5	5	5	15	15	15	9	9	9	9	9	9	11	11	11
Сопоставление результатов экспериментов с теоретическими исследованиями; подготовка к конференции*	5	-	7	10	-	12	7	-	9	7	-	9	8.5	-	11
Оценка эффективности полученных результатов; участие в конференции**	3	-	3	10	-	10	5.8	-	5.8	5.8	-	5.8	7.1	-	7.1
Определение целесообразности проведения ОКР	3	-	3	7	-	7	4.6	-	4.6	4.6	-	4.6	5.6	-	5.6
Итого	43	6	61	91	18	129	62.2	10.8	88.2	62.2	10.8	88.2	75.9	13.2	107.6

длительности исполнения работ в рамках научно-исследовательского проекта, с разбивкой по месяцам и декадам за

период времени дипломирования. Отметим области в зависимости от исполнителей, ответственных за конкретную работу, таблица 4.6.

Таблица 4.6 – Календарный план-график (график Ганта) проведения НИОКР

№ работ	Вид работ	Исполнители	Т _{ки} , кал. дн.	Продолжительность выполнения работ															
				январь			февраль			март			апрель			май		июнь	
				3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	
1	Составление и утверждение технического задания	Руководитель темы	4.88	■															
2	Подбор и изучение материалов по теме	Руководитель	25.6		■	■	■												
		Лаборант (дипломник)	36.6		■	■	■	■											
3	Проведение патентных исследований	Руководитель	9.8				■												
		Лаборант (дипломник)	18.3					■	■										
4	Выбор направления исследований	Руководитель	4.9						■										
		Лаборант (дипломник)	8.5							■									
5	Календарное планирование работ по теме	Руководитель	3.7						■										
		Лаборант (дипломник)	4.9								■	■							
6	Проведение теоретических	Руководитель	7.3							■									
		Лаборант	12.2								■	■							

	расчетов и обоснований	(дипломник)																			
7	Составление порядка эксперимента, выбор технических режимов	Руководитель	3.7																		
		Лаборант (дипломник)	4.9																		
		Сотрудник-техник	3.7																		
8	Изготовление исследуемых образцов	Лаборант (дипломник)	3.7																		
9	Построение 3Д моделей	Лаборант (дипломник)	14.6																		
10	Проведение экспериментов	Руководитель	18.3																		
		Лаборант (дипломник)	18.3																		
		Сотрудник-техник	18.3																		
11	Сопоставление результатов экспериментов с теоретическим и исследованиям и;*	Руководитель	12.2																		
		Лаборант (дипломник)	14.6																		
12	Оценка эффективности и полученных результатов; **	Руководитель	12.2																		
		Лаборант (дипломник)	12.2																		

13	Определение целесообразности проведения ОКР	Руководитель	8.5															
		Лаборант (дипломник)	8.5															

	- Руководитель темы		- Лаборант (дипломник)		- Сотрудник-техник
--	---------------------	--	------------------------	--	--------------------

Таким образом, в ходе данного этапа работы были определены длительности и обозначены сроки выполнения всех запланированных видов работ. Была построена диаграмма Ганта, наглядно демонстрирующая этапы выполнения проекта участниками.

В результате выполнения подраздела был разработан план-график выполнения этапов работ для руководителя и инженера, позволяющий оценить и спланировать рабочее время исполнителей, а также рассчитано количество дней, в течение которых работал каждый из исполнителей.

4.4 Бюджет научного исследования

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

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

4.4.1 Расчет материальных затрат НТИ

В данном разделе составлен полный бюджет научных исследований. Расходы научных исследований состоят из материальных затрат, расходов на специальные оборудования, основной и дополнительной заработной платы, социальные отчисления и накладные расходы.

В статью расходов входят затраты на приобретение материалов,

комплектующих изделий, необходимых для выполнения работ по данному научному исследованию. В таблице 4.7 приведены расходы по данной статье.

Таблица 4.7 – Сырье, материалы, комплектующие изделия

Наименование	Марка, размер	Кол-во	Цена за единицу, руб.	Сумма, руб.
Материалы (одностенные углеродные нанотрубки) для изготовления образцов	статья	5	3000	15000
Канцелярские товары	шт.			1500
Спирт	100 мл	2	45	90
Халат	S	1	500	500
Набор лабораторных инструментов	Малый	1	1000	1000
Чашка Петри	80x17	1	400	400
Всего за материалы				18490
Транспортно-заготовительные расходы (3-5%)				554.7
Итого по статье				19044.7

По полученным данным, наибольшие расходы приходятся на порошок для прессования образцов.

4.4.2 Расчет затрат на специальное оборудование для научных работ

В рамках выполнения исследования использовалось имеющееся в собственности университета оборудование, и закупка дополнительного специального оборудования не производилась. В таком случае затраты на специальное оборудование отсутствуют. Однако в ходе эксплуатации оборудования средства были затрачены в соответствии с амортизационными

отчислениями. Расчет амортизации производится на находящееся в использовании оборудование. В итоговую стоимость проекта входят отчисления на амортизацию за время использования оборудования в статье накладных расходов.

$$H_A = \frac{1}{n} = 0,1, \quad (4.6)$$

где n – срок полезного использования в количестве лет

Амортизация:

$$A_M = \sum \frac{I \cdot H_A}{12} = 19507 \text{ рублей}$$

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

Таблица 4.6 – Амортизационные расходы

№	Наименование оборудования	Ст-ть, руб.	Срок полезного исп., лет	Н _А , %	Время исп., мес.	Амортизационные расходы, руб
2	LabRAM HR Evolution	740000	7	14	1	8757
3	Инструменты рентгеновской спектроскопии	145000	10	10	2	2417
4	Рамановский спектрометр	500000	10	10	2	8333
Итого:						19507

4.4.3 Расчет затрат на электроэнергию

Потребляемая мощность анализатора составляет 7 кВт/час. Длительность еженедельной работы на комплексной технологической установке составляет 2 часа. Стоимость электроэнергии в Томске составляет

5.748 рубля за 1 кВт/час. Стоимость электропотребления за 5 месяцев рассчитывается по формуле:

$$C_{эл.об.} = P_{об} \cdot Ц_{э} \cdot t_{об}, \quad (4.7)$$

где $P_{об}$ – мощность, потребляемая оборудованием, кВт; $Ц_{э}$ – тариф на 1 кВт·час; $t_{об}$ – время работы оборудования, час.

Затраты на электроэнергию для технологических целей приведены в таблице 4.7

Таблица 4.7 – Затраты на электроэнергию

Наименование оборудования	Время работы оборудования	Потребляемая мощность $P_{об}$, кВт	Затраты $C_{эл.об.}$, руб.
Персональный компьютер	646	0.3	1113,96
Комплексная технологическая установка	40	7	1609,44
Итого			2723,4

4.4.4 Расчет затрат на научные и производственные командировки и накладные расходы

Затраты на научные и производственные командировки исполнителей определяются в соответствии с планом выполнения темы и с учетом действующих норм командировочных расходов различного вида и транспортных тарифов, а также организационных взносов на конференции. Расчеты по данному пункту представлены в таблице 4.8.

Накладными расходами учитываются прочие затраты организации, такие как: печать и ксерокопирование проектных документов, оплата услуг связи.

Таблица 4.8 – Расчета на научные и производственные командировки

Наименование мероприятия	Оплата, руб
Конференция «Перспективы развития фундаментальных наук XVIII)	1500
Итого: 1500 руб.	

Накладные расходы определяются:

$$Z_{накл} = \frac{\sum \text{статей} \cdot 1}{7} \cdot k = 3143,45 \text{ рубля}$$

где k – коэффициент, учитывающий накладные расходы ($k = 0,16$).

4.4.5 Формирование бюджета затрат НИИ

Расчет бюджета затрат в результате проведения НИИ представлен в таблице 4.9.

Таблица 4.9 – Бюджет затрат

Наименование статьи	Сумма, руб
Материальные затраты	19044,7
Затраты на специальное оборудование для научных работ	19507
Затраты на электроэнергию	2723,4
Затраты на научные производственные командировки	1500
Накладные расходы	3143,45
Бюджет затрат	45918,55

4.5 Ресурсоэффективность

Определение эффективности происходит на основе расчёта интегрального показателя эффективности научного исследования. Его нахождение связано с определением двух величин: финансовой эффективности и ресурсоэффективности.

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

Интегральный финансовый показатель разработки определяется по следующей формуле:

$$I_{\text{ФИНР}}^{\text{ИСП}i} = \frac{\Phi_{Pi}}{\Phi_{\text{max}}} \quad (4.8)$$

где Φ_{Pi} – стоимость i -го варианта исполнения; Φ_{max} – максимальная стоимость исполнения научно-исследовательского проекта.

Интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов исполнения объекта исследования можно определить по формуле:

$$I_{pi} = \sum a_i \cdot b_i, \quad (4.9)$$

В таблице 4.10 представлена сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта. Данный проект сравнивается с методикой качественного анализа материалов, заложенной в программе как базовая.

Таблица 4.10 – Сравнительная оценка характеристик

Критерии	Весовой коэффициент параметра	Данный проект	Базовая методика качественного анализа материалов
Способствует росту производительности труда	0.25	5	5
Соответствует требованиям потребителей	0.15	4	4
Энергосбережение	0.2	4	3
Надежность	0.2	4	4

Материалоемкость	0.2	5	4
Интегральный показатель ресурсоэффективности		4.45	4.25

Характеристики имеют схожие критерии, так как методики реализованы для одного прибора. Каждая из представленных методик реализована для определённой задачи.

Пример расчёта интегрального показателя ресурсоэффективности:

$$I_p = 0.25 \cdot 5 + 0.15 \cdot 4 + 0.2 \cdot 4 + 0.2 \cdot 4 + 0.2 \cdot 5 = 4.45$$

Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения разработки определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по следующей формуле:

$$I_{ИСП} = \frac{I_{PI}}{I_{ФИНР}}, \quad (4.10)$$

Сравнительная эффективность проекта определяется по следующей формуле:

$$\mathcal{E}_{CP} = \frac{I_{ДЛ}}{I_{ИСП}}, \quad (4.11)$$

В таблице 4.11 представлена сравнительная эффективность данного проекта с базовой методикой качественного анализа материалов.

Таблица 4.11 – Сравнительная эффективность

Показатели	Данный проект	Базовая методика качественного анализа материалов
Интегральный финансовый показатель	1	1
Интегральный показатель ресурсоэффективности	4.45	4.25

Интегральный показатель эффективности	4.45	4.25
Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1.05	0.95

Анализируя данные таблицы 4.11, разработанная методика эффективнее стандартной. Традиционная оценка экономической эффективности полученных результатов невозможны, т.к. они носят чисто научный характер.

Выводы по главе

В ходе выполнения раздела «Финансовый менеджмент» был выполнен анализ конкурентоспособности. Проведён SWOT-анализ проекта, в ходе которого были выявлены потенциальные внутренние и внешние сильные и слабые стороны, возможности и угрозы. Из анализа выяснили, что потенциальных сильных сторон у проекта больше, чем слабостей, что свидетельствует о перспективности исследования. Сильными сторонами можно назвать то, что технология является экономичной, энергоэффективной и экологичной, имеет маленький срок готовых результатов при проведении научного исследования и имеет квалифицированный персонал. К слабым сторонам можно отнести отсутствие прототипа научной разработки, Недостаток финансовых средств, большой срок поставок материалов и комплектующих, используемых при проведении научного исследования.

При планировании научно-исследовательской работы был произведен подсчет бюджета исследования по материальным затратам (10489,5 руб.), затратам на специальное оборудование для научной работы (19507 руб.), затратам на научные и производственные командировки (1500 руб.), затратам на электроэнергию (2723,4 руб.) и накладным расходам (3143,45 руб.). Всего бюджет составил 45918,55 руб.

Проведена оценка результатов ресурсоэффективности, которая

составила 4,38 из 5, что говорит о хорошей эффективности реализации технического проекта.

Проведение такого рода оценки коммерческой ценности необходимо, чтобы оценить состояние и перспективы проводимых научных исследований.

**ЗАДАНИЕ К РАЗДЕЛУ
«СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»**

Обучающемуся:

Группа	ФИО
150Б91	Сунь Юйхань

Школа	ИЯТШ	Отделение (НОЦ)	
Уровень образования	Бакалавр	Направление/ООП/ОПОП	03.03.02 Физика

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

<p>Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения</p>	<p>Объект исследования: молекулы типа сферического волчка Область применения: астрофизика, планетология Рабочая зона: лаборатория Размеры помещения климатическая зона *): 5.3*4.7м Количество и наименование оборудования рабочей зоны: персональный компьютер Рабочие процессы, связанные с объектом исследования, осуществляющиеся в рабочей зоне: анализ и моделирование спектров с помощью компьютерного программного обеспечения</p>
--	--

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

<p>1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности: специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны</p>	<p>ТК РФ Статья 92. Сокращенная продолжительность рабочего времени; ТК РФ Статья 116. Ежегодные дополнительные оплачиваемые отпуска; ТК РФ Статья 108. Перерывы для отдыха и питания; ГОСТ 12.2.032-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования.</p>
<p>2. Производственная безопасность: 2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов 2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия</p>	<p>Опасные факторы: 1. Электробезопасность; 2. Факторы пожарной и взрывной природы . Вредные факторы: 1. Отклонение показателей микроклимата; 2. Недостаточная освещенность рабочей зоны; 3. Превышение уровня шума; 4. Повышенный уровень Требуемые средства коллективной и индивидуальной защиты от выявленных факторов: применить звукопоглощающее покрытие стен, экранировку рабочего места и установить менее шумный кондиционер; применить антистатическую обувь, антистатический халат, заземляющие браслеты. Расчет: расчет системы искусственного освещения, световой поток светильника.</p>

3. Экологическая безопасность:	Лаборатория является не производственной, а это означает, что отсутствует производственный мусор (в том числе и пожароопасный, и вредный для окружающей среды).
4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:	<p>Возможные ЧС: Природные катастрофы (наводнения, цунами, ураган, морозы, диверсия и т.д.); Геологические воздействия (землетрясения, оползни, обвалы, провалы территории и т.д.); Техногенные аварии (отказ систем безопасности; нарушение контроля и управления цепной ядерной реакции в активной зоне реактора; тепловой взрыв с выбросом радиоактивных веществ, пожар)</p> <p>Наиболее типичная ЧС: сильные морозы и диверсия.</p>

Дата выдачи задания к разделу в соответствии с календарным учебным графиком	20.04.2023
---	------------

Задание выдал консультант по разделу «Социальная ответственность»:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Сечин А.И.	д. ф.-м. н., профессор		

Задание принял к исполнению обучающийся:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б91	Сунь Юйхань		

ГЛАВА 5 СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ

Объектом исследования является одностенные углеродные нанотрубки с серными цепочками.

Исследование выполнялось в лаборатории рамановской спектроскопии. Размеры помещения: высота 6 м, ширина 4 м, длина 3 м, площадь 72 м³. Рабочее оборудование спектроскопия комбинационного рассеяния

В процессе проведения исследования выполняли следующее: подготовка образцов, обработка образцов в автоклаве и рамановская спектроскопия

С целью оценки степени безопасности структурной трансформации углеродных нанотрубок с цепочками серы при высокой температуре и давлении в данном разделе ВКР необходимо рассмотреть правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности; потенциальные вредные и опасные факторы и способы снижения их воздействия; экологическую безопасность научного проекта, а также вопросы безопасности в чрезвычайных ситуациях.

5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

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

Организационные меры по обеспечению безопасной работы на компьютере: не следует допускать людей в рабочую зону на срок до восьми часов. Для обеспечения безопасности перед началом работы необходимо надеть соответствующую защитную одежду, подготовить необходимые для работы инструменты и оборудование, а также подготовить верстак. Необходимо также проверить электрооборудование на наличие внешних повреждений и убедиться в исправности контрольно-измерительных и

сигнальных приборов, компьютеров и тумблеров. Если обнаружена неисправность, вы не имеете права самостоятельно выполнять ремонт и должны сообщить об этом ответственному за лабораторию. Регулировка и ремонт оборудования могут производиться только сервисным инженером. При обнаружении неисправности используемого оборудования запрещается приступать к работе, если ответственное лицо не прошло соответствующее обучение и проверку знаний по охране труда. Работы на суперкомпьютере должны проводиться в чистом помещении, свободном от пыли, паров, кислот, щелочей, агрессивных газов и других вредных примесей, которые могут вызвать коррозию. Не допускается наличие открытого огня вблизи машины.

5.1.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя

Рабочее место располагается в подвале в лаборатории сверхтвердых материалов Цилиньского университета, лаборатория представляет собой комнату размером 6 м на 4 м, высотой 3 м, в лаборатории находится 3 окна (с видимым светом), постоянно присутствует 1 человек.

При проведении лабораторных работ работник лаборатории находится в положении стоя или сидя. Следовательно, при организации рабочего места лаборанта требуется соблюдение нормативов ГОСТ 12.2.032-78 [2] и ГОСТ 12.2.033-78 [3].

Лаборатория оснащена отоплением и вентиляцией. Для отделки помещений используют диффузно-отражающие материалы. Поверхность пола соответствует следующим требованиям: ровность, удобство для очистки, наличие антистатических свойств, отсутствие выбоин. В помещении держат аптечку первой медицинской помощи и огнетушитель. Расположение рабочего стола обеспечивает удобство работы за ним и дает возможность осмотра, а также ремонта находящегося на нем оборудования.

5.2 Производственная безопасность

Исследование выполнялось в лаборатории сверхтвердых материалов Цзилиньского университета. Для проведения исследования применяли рамановский спектрометр.

5.2.1 Анализ опасных и вредных производственных факторов

Для идентификации потенциальных факторов использован ГОСТ 12.0.003-2015 [4]. Перечень выявленных возможных опасных и вредных факторов представлен в таблице 5.1.

Таблица 5.1–Возможные опасные и вредные факторы

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015)	Этапы работ			Нормативные документы
	Ра зработк	И зготовле	Э ксплуат	
1. Превышение уровня шума		+		ГОСТ 12.1.003-2014 [5] СН 2.2.4/2.1.8.562-96 [6] ГОСТ 12.1.029-80. ССБТ [7]
2. Отклонение показателей микроклимата	+	+		ГОСТ 12.1.005-88 [8] ГОСТ 12.1.007-76. ССБТ [9] СанПиН 1.2.3685-21 [10] ГОСТ 12.4.011-89 [11]
3. Повышенное значение напряжения в электрической цепи, замыкание которой может произойти через тело человека	+	+	+	ГОСТ 12.1.038-82 [12] ГОСТ Р 12.1.019-2009 [13]
4. Недостаточная освещенность рабочей зоны	+	+		СанПиН 1.2.3685-21 [10]

Питание компьютера осуществляется от сети переменного тока 220 В. При работе с компьютером человек может подвергаться следующим опасностям:

- микроклимат;
- электромагнитные поля;
- статическое электричество;
- шум;
- несоответствующее освещение;
- электрическое напряжение.

Гигиенические нормативы по шуму устанавливаются национальным законодательством [5].

В таблице 5.2 показаны допустимые уровни шума представленные в Санитарных нормах [6].

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

Категория напряженности трудового процесса	Категория тяжести трудового процесса				
	легкая физическая нагрузка	средняя физическая нагрузка	тяжелый труд 1 степени	тяжелый труд 2 степени	тяжелый труд 3 степени
Напряженность легкой степени	80	80	75	75	75
Напряженность средней степени	70	70	65	65	65
Напряженный труд 1 степени	60	60	-	-	-
Напряженный труд 2 степени	50	50	-	-	-

Работа инженера в лаборатории относится к категории работ с легкой степенью напряженности и с легкой физической нагрузкой. Для рабочих мест

таких работников предельно допустимый уровень шума составляет 80 дБА.

Длительное воздействие шума является причиной возникновения определенных заболеваний нервной системы.

С воздействием шума, превышающего норму, связано повышение артериального давления, снижение слуха, и т. п. [15].

Показатели уровня шума в лаборатории соответствуют нормативам.

При превышении норм по шуму нужно принимать меры по снижению уровня шума и защите работников от его воздействия в соответствии с [7], используя в том числе такие меры, как:

- применение противошумных наушников;
- оборудование акустических экранов;

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

5.2.1.1 Анализ показателей микроклимата

Показателями микроклимата производственных помещений называются температура и относительная влажность воздуха, скорость движения воздуха [15].

В таблице 5.3 обозначены оптимальные и допустимые показатели микроклимата в рабочей зоне производственного помещения для категории работ «Легкая Ia» по ГОСТ 12.1.005-88 [8].

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

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

Если температуры окружающего воздуха высокие, то это может

приводить к перегреву, обмороку, тепловому удару, обезвоживанию. Если температура окружающего воздуха на рабочем месте слишком низкая, то это может приводить к простудным заболеваниям, снижению иммунитета, замерзанию [16].

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

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

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

Для обеспечения соответствия показателей микроклимата требуемым оптимальным и допустимым нормам следует проводить измерение показателей микроклимата в соответствии с требованиями, представленными в СанПиН 1.2.3685-21 [10].

Чтобы поддерживать требуемые параметры микроклимата в рабочей

зоне, используют защиту от источников теплового излучения, систему вентиляции, кондиционирование воздуха, отопление, влажную уборку, увлажнение воздуха.

В лабораториях материаловедения требуется выполнение санитарно-гигиенических, медико-биологических и организационно-технических мероприятий:

- вентиляция и очистка воздуха;
- кондиционирование воздуха;
- локализация вредных факторов;
- отопление;
- автоматический контроль и сигнализация;
- дезодорация воздуха;
- использование оборудования и препаратов для дезинфекции, оградительных устройств, знаков безопасности;
- применение перчаток и респираторов в качестве средств защиты рук и органов дыхания [11].

5.2.1.2 Анализ электробезопасности

Электрический ток рассматривается в качестве повышенного источника опасности. В таблице 5.4 выделены предельно допустимые значения электрического тока при неаварийном режиме работы электрооборудования [12].

Таблица 5.4 – Предельно допустимые значения напряжений прикосновения и токов

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

Основными источниками поражения электрическим током являются

поврежденная проводка, розетка, выключатель и открытые металлические участки электроприборов.

К основным причинам воздействия тока на человека относятся ситуации: 1) человек случайно прикасается или приближается на опасное расстояние к токоведущим частям; 2) в результате повреждения изоляции или ошибочных действий персонала на металлических частях оборудования появляется напряжение; 3) напряжение появляется на отключённых токоведущих частях, где работают люди, в связи с ошибочным включением установки; 4) провод замыкается на землю, в результате чего появляется шаговое напряжение на поверхности земли [17].

Электрический ток оказывает на человека следующие виды воздействия:

1) термическое – приводит к ожогам, нагреву кровеносных сосудов и других органов, вследствие чего в них появляются функциональные расстройства;

2) электролитическое – для электролитического действия тока характерно разложение крови и других органических жидкостей, что приводит к нарушениям их физико-химического состава;

3) механическое – повреждения (разрыв, расслоение и др.) различных тканей организма в результате электродинамического эффекта;

4) биологическое – может являться причиной нарушения и полного прекращения деятельности органов дыхания и кровообращения [18].

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

– выполнение электроустановок в соответствии с требованиями электробезопасности;

– использование электрического разделения;

– применение системы защитных проводов; применение электрического разделения сети [18].

5.2.1.3 Анализ показателей освещенности рабочей зоны

Нормы освещения лабораторий по [10] представлены в таблице 5.5.

Таблица 5.5 – Нормируемые показатели естественного, искусственного и совмещенного освещения в лабораториях

Рабочая поверхность и плоскость нормирования КЕО и освещённости (Г – горизонтальная, В – вертикальная) и высота плоскости над полом, м	Естественное освещение КЕО e_n , %		Совмещённое освещение КЕО e_n , %		Искусственное освещение				
	при верхнем или комбинированном освещении	при боковом освещении	при верхнем или комбинированном освещении	при боковом освещении	Освещённость, лк		Показатель дискомфорта, М, не более	Коэффициент пульсации освещённости, КЕО e_n , % не более	
					при комбинированном освещении	при общем освещении			
					всего	от общего			
Г-0,8	2.4	1.9	2.0	0.5	97	55	367	37	37

В результате неблагоприятных условий освещения может утомляться зрительный анализатор, снижаться работоспособность, могут появляться профессиональные заболевания [19].

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

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

Для правильного освещения в лаборатории необходимо верно выбирать вид освещения, количество и расположение ламп, тип осветительных приборов. Лаборатория должна быть освещена верхним общим освещением.

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

5.3 Экологическая безопасность

В ходе исследования были изучены структурные изменения углеродных нанотрубок с серными цепочками при высокой температуре и давлении

Защита селитебной зоны. Специальных средств для защиты жилых районов при проведении исследования не потребовалось. Лаборатория соответствует нормативным документам [20].

Защита атмосферы. Специальных средств для защиты атмосферы при проведении исследований не требуется. Лаборатория соблюдает нормативный документ [13].

Защита водного круга. Используйте воду для промывки образцов, экспериментальной аппаратуры и т.д. во время экспериментов и используйте воду в качестве охлаждающей жидкости во время высокотемпературных экспериментов. Все инструменты после эксперимента промываются проточной водой из-под крана, что может нанести вред гидросфере. Для создания замкнутых систем водоснабжения промышленные сточные воды подвергаются очистке механическими, химическими, физико-химическими, биологическими и термическими методами до необходимого качества. Для очистки сточных вод от органических растворителей используют методы экстракции, ректификации, абсорбция, обратный осмос и ультрафильтрация и др.

Превышение ПДК может оказать пагубное влияние на употребляющих такую воду людей, скот и растения. Концентрация в воде отходов, образовавшихся в процессе исследования, настолько мала, что вреда окружающей среде не принесет.

Защита литосферы. Попадая в литосферу, порошковые материалы могут менять микробиологическую и ферментативную активность почв, активно вступая во взаимодействие с живыми организмами, обитающими в этой среде. Утилизация отходов должна осуществляться в соответствии с действующим законодательством. Твердые отходы, а также порошковые системы собираются в специальные сборники и увозятся для уничтожения. Утилизация одноразовых средств индивидуальной защиты должна проходить в специальные герметичные контейнеры.

Таким образом, можно сказать, что в работе применены малоотходные технологии, исключающие попадание в атмосферу, гидросферу и литосферу вредных веществ в количестве, превышающем ПДН.

При написании ВКР вредных выбросов в атмосферу, почву и водные источники не производилось, радиационного заражения не произошло, чрезвычайные ситуации не наблюдались, поэтому не оказывались существенные воздействия на окружающую среду, и никакого ущерба окружающей среде не было нанесено.

Объект исследования является теоретическим, но разрабатывается в компьютере. Поэтому с точки зрения влияния на окружающую среду рассмотрим влияние компьютерной техники, использованной при его разработке.

Компьютерная техника потребляет сравнительно небольшое количество электроэнергии, поэтому по затратам на электроэнергию оно не оказывает существенной опасности для окружающего мира.

Компьютеры, утратившие потребительские свойства относятся к IV

классу опасности (малоопасные отходы). Обезвреживание и размещение отходов I–IV классов опасности проводятся организациями, имеющими лицензию на осуществление этой деятельности. При неправильной утилизации компьютера может значительно пострадать экология, поэтому предлагается следующий порядок утилизации:

- 1) удаление всех опасных компонентов,
- 2) удаление всех крупных пластиковых частей. Оставшиеся после разборки части отправляют в большой измельчитель, и все дальнейшие операции автоматизированы.

- 3) Измельченные в гранулы остатки компьютеров подвергаются сортировке. Сначала с помощью магнитов извлекаются все железные части. Затем приступают к выделению цветных металлов, которых в ПК значительно больше.

Все полученные в ходе переработки материалы могут вторично использоваться в различных производственных процессах.

5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

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

К основным причинам возникновения чрезвычайных ситуаций относятся две категории:

- 1) внешние – стихийные бедствия, неожиданное прекращение подачи электроэнергии, воды, технологических продуктов и т. д.;

- 2) внутренние – сложность технологий, недостаточная квалификация персонала, проектно-конструкторские недоработки, физический и моральный износ оборудования, низкая трудовая и технологическая дисциплина и т. п.

В лаборатории наиболее вероятно возникновение чрезвычайных ситуаций (ЧС) техногенного характера. ЧС техногенного характера называются ситуации, которые возникают в результате производственных

аварий и катастроф на объектах; пожаров, взрывов на объектах; загрязнения атмосферы отравляющими веществами. Следствием ЧС техногенного характера могут быть внезапное обрушение зданий и сооружений, нарушение работы энергетических сетей, коммунального жизнеобеспечения, очистных сооружений, технологических линий и т. д.

В случае возникновения ЧС на предприятии, в лаборатории необходимо выполнить следующий комплекс мероприятий:

- 1) эвакуация;
- 2) укрытие людей в защитных сооружениях;
- 3) обеспечение индивидуальными средствами защиты;
- 4) организация медицинской помощи пострадавшим.

В качестве наиболее распространенной вероятной ЧС в лаборатории выделяют пожар.

Помещение лаборатории по степени пожароопасности относится к классу П-II, так как в нем т. к. в нём присутствует выделение пыли и волокон во взвешенном состоянии [21].

Причины возникновения пожара могут быть электрического и неэлектрического характера.

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

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

Для устранения причин возникновения пожаров в помещении лаборатории должны проводиться следующие мероприятия: а) сотрудникам лаборатории необходимо пройти противопожарный инструктаж; б) необходимо знание сотрудниками расположения средств пожаротушения и

умение ими пользоваться; в) требуется обеспечить правильный тепловой и электрический режим работы оборудования; г) пожарный инвентарь и первичные средства пожаротушения необходимо содержать в исправном состоянии и располагать на видном и легко доступном месте.

Если в организации возник пожар, то после его ликвидации определяется возможность дальнейшего использования оборудования и имеющихся коммуникаций. В лаборатории исследовательское оборудование, трубопроводы, электрооборудование проверяются на соответствие их состояния нормам пожарной безопасности. В случае отсутствия повреждений можно продолжать работу [22].

Выводы по разделу

В результате проведенных исследований в рамках раздела «Социальная ответственность» были изучены правовые нормы трудового законодательства при исследовании структурной трансформации углеродных нанотрубок с серными цепочками при высокой температуре и давлении.

Проанализированы основные вредные и опасные факторы, которые могут возникать в процессе исследований, при разработке и эксплуатации проекта: показатели микроклимата, уровень шума, освещенность рабочей зоны, значения опасности электрической цепи, потенциальные опасности пожара. Были описаны мероприятия по снижению уровней воздействия данных факторов.

Рассмотрен характер воздействия проектируемого решения на окружающую среду. В процессе выполнения исследования было выявлено, что отходы, полученные в ходе исследований, не оказывали влияние на гидросферу и литосферу. Во избежание загрязнения окружающей среды отходы утилизировались в строгом соответствии с соответствующими документами.

Проанализированы природные и технические чрезвычайные ситуации,

которые могут возникнуть в лаборатории. Для предотвращения чрезвычайных ситуаций были разработаны превентивные меры, а также разработаны процедуры для обработки чрезвычайных ситуаций. Таким образом, при проведении лабораторных исследований могут применяться требования и меры, указанные в работе, а также порядок действий при чрезвычайных ситуациях также может быть задействован на производстве.

Рекомендуемая литература

1. СП 52.13330.2016 Естественное и искусственное освещение. Актуализированная редакция СНиП 23-05-95*
2. Оценка условий труда на рабочем месте инженера- электронщика/Уфа 2007г.
3. Санитарные нормы микроклимата производственных помещений*(утв. Главным государственным санитарным врачом СССР 31 марта 1986 г. № 4088-86)ГОСТ 12.1.004-91 ССБТ. Пожарная безопасность. Общие требования
4. ГОСТ Р 57552-2017 Техника пожарная. Извещатели пожарные мультикритериальные. Общие технические требования и методы испытаний
5. СНиП 2.06.15-85 от 1986-07-01.Инженерная защита территории от затопления и подтопления
6. ГОСТ Р 22.0.03-95 Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Природные чрезвычайные ситуации. Термины и определения

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Данная работа иллюстрирует явления, происходящие в углеродных трубчатых одномерных серных цепях после трех различных условий давления, и анализирует структурные изменения образцов с помощью спектроскопии комбинационного рассеяния света и т.д. Были исследованы структурные изменения углеродных трубчатых одномерных серных цепей в различных условиях высокой температуры, высокого давления и лазерного нагрева.

В условиях низкого давления в спектрах комбинационного рассеяния наблюдались пики комбинационного рассеяния, смещающиеся в сторону высоких волновых чисел, но новые пики комбинационного рассеяния не появлялись, что указывает на отсутствие очевидной трансформации нового материала; в условиях высокой температуры и высокого давления в спектрах комбинационного рассеяния наблюдались не только пики комбинационного рассеяния, смещающиеся в сторону высоких волновых чисел, но и появление новых пиков комбинационного рассеяния, однако эти новые пики комбинационного рассеяния не сохранялись при разгрузке до атмосферного давления. Это указывает на то, что серные цепи в одномерной серной цепи в ограниченной области углеродной трубки превращаются в S_8 мономеров, но не являются стабильными; в условиях лазерного нагрева не только наблюдаются пики Рамана, смещенные в сторону высоких волновых чисел в спектре Рамана, но и появляется несколько новых пиков Рамана, и чем выше температура, тем более полно трансформируются S_8 мономеров в отличие от спектра Рамана в условиях высокой температуры и высокого давления.

Исчезновение S_8 -мономеров в процессе разгрузки остается ключевым вопросом для будущих исследований, и дальнейшие эксперименты должны быть разработаны и проанализированы на основе того, как давление влияет на стабильность S_8 -мономеров.

Используя нанолокализованное пространство углеродных трубок,

можно синтезировать множество одномерных атомных цепочек и допированных ими материалов. Экспериментальные исследования, сочетающие замкнутую доменную систему углеродных нанотрубок со средствами высокого давления и высокой температуры, позволяют раскрыть физические механизмы их фазовых переходов при высоком давлении, а также дают нам новые идеи и способы создания углеродных материалов с новыми структурами и свойствами.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Gao Yuxiang. High-temperature and high-pressure synthesis of gallium-nitrogen compounds [D]. Jilin University, 2022
2. Kudryavtsev Y P, Heimann R B, Evsyukov S E. Carbynes: advances in the field of linear carbon chain compounds [J]. Journal of Materials Science, 1996, 31 (21): 5557-5571.
3. Heimann R B, Evsyukov S E, Koga Y. Carbon allotropes: a suggested classification scheme based on valence orbital hybridization [J]. Carbon, 1997, 35 (10-11): 1654-1658.
4. Wang Z X, Ke X Z, Zhu Z Y, et al. Carbon-atom chain formation in the core of nanotubes [J]. Physical Review B, 2000, 61 (4): R2472-R2474.
5. Wang Y, Huang Y, Yang B, et al. Crystal orbital study on carbon chains encapsulated in armchair carbon nanotubes with various diameters [J]. Carbon, 2008, 46 (2): 276-284.
6. Fujimori T, Morelos-Gomez A, Zhu Z, et al. Conducting linear chains of sulphur inside carbon nanotubes [J]. Nature Communications, 2013, 13 (1): 2162.
7. Januszewski J A, Tykwinski R R. Synthesis and properties of long [n] cumulenes ($n \geq 5$) [J]. Chemical Society Reviews, 2014, 43 (9): 3184-3203.
8. Akahama, Kobayashi, Kawamura. Pressure-induced structural phase transition in sulfur at 83 GPa [J]. Physical review. B, Condensed matter, 1993, 48 (10): 6862-6864.
9. Shi L, Rohringer P, Wanko M, et al. Electronic band gaps of confined linear carbon chains ranging from polyynes to carbyne [J]. Physical Review Materials, 2017, 1 (7): 075601.
10. Kang C-S, Fujisawa K, Ko Y-I, et al. Linear carbon chains inside multi-walled carbon nanotubes: Growth mechanism, thermal stability and electrical properties [J]. Carbon, 2016, 107: 217-224.
11. Eisler S, Slepikov A D, Elliott E, et al. Polyynes as a model for carbyne:

Synthesis, physical properties, and nonlinear optical response [J]. *Journal of the American Chemical Society*, 2005, 127 (8): 2666-2676.

12. Pino T, Ding H, Güthe F, et al. Electronic spectra of the chains HC_{2n}H ($n=8-13$) in the gas phase [J]. *Journal of Chemical Physics*, 2001, 114 (5): 2208-2212.

13. Szczepanski J, Fuller J, Ekern S, et al. Electronic absorption and resonance Raman spectra of large linear carbon clusters isolated in solid argon [J]. *Spectrochimica Acta Part A-Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2001, 57 (4): 775-786.

14. Giltner T, Hampel F, Gisselbrecht J P, et al. End-cap stabilized oligoynes: Model compounds for the linear sp carbon allotrope carbyne [J]. *Chemistry-a European Journal*, 2002, 8 (2): 408-432.

15. Nascimento V V, Neves W Q, Alencar R S, et al. Origin of the giant enhanced raman scattering by sulfur chains encapsulated inside single-wall carbon nanotubes [J]. *ACS Nano*, 2021, 15 (5): 8574-8582.