

Школа Инженерная школа ядерных технологий

Направление подготовки 03.03.02 «Физика»

Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
Моделирование процесса формирования металлических покрытий при осаждении из газовой фазы

УДК 621.793:66.065.001.5

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б51	Ляо Цзицин		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель	Чистякова Надежда Владимировна	к.ф.-м.н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Конотопский Владимир Юрьевич	к.э.н. доцент		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель	Скачкова Лариса Александровна	к.х.н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Руководитель ОЭФ	Лидер А.М.	д.т.н., доцент		

Томск – 2019 г.

Запланированные результаты обучения по программе

Код результата	Результат обучения (выпускник способен)	Требования ФГОС, критериев и/или заинтересованных сторон
<i>Общекультурные компетенции</i>		
P1	Использовать основные этапы и закономерности исторического развития общества, основы философских, экономических, правовых знаний для формирования мировоззренческой, гражданской позиций и использования в различных сферах жизнедеятельности	Требования ФГОСЗ+ (ОК-1, ОК-2, ОК-3, ОК-4)
P2	К самоорганизации и самообразованию, работать в коллективе, к коммуникации в устной и письменной формах, в том числе на иностранном языке, толерантно воспринимать социальные, этические и культурные различия, использовать методы и средства физической культуры, приёмы первой помощи и методы защиты в условиях ЧС.	Требования ФГОСЗ+ (ОК-5, ОК-6, ОК-7, ОК-8, ОК-9)
<i>Общепрофессиональные компетенции</i>		
P3	Использовать в профессиональной деятельности базовые естественнонаучные знания, современные концепции и ограничения естественных наук, использовать фундаментальные знания разделов общей и теоретической физики, математики для создания моделей и решения типовых профессиональных задач, в том числе с использованием знаний профессионального иностранного языка.	Требования ФГОСЗ+ (ОПК-1, ОПК-2, ОПК-3, ОПК-7)
P4	Понимать сущность и значение информации, соблюдать основные требования информационной безопасности, использовать методы, способы, средства получения и хранения информации, решать стандартные задачи на основе информационной и библиографической культуры.	Требования ФГОСЗ+ (ОПК-4, ОПК-5, ОПК-6)
P5	Получить организационно-управленческие навыки при работе в научных группах, критически переосмысливать накопленный опыт, изменять при необходимости профиль своей профессиональной деятельности, нести ответственность за последствия своей инженерной деятельности.	Требования ФГОСЗ+ (ОПК-8, ОПК-9)

<i>Профессиональные компетенции</i>		
P6	<u>Научно-исследовательская деятельность</u> Проводить научные теоретические и экспериментальные исследования в областях: материаловедения, атомной и ядерной физики, водородной энергетики, физики плазмы с помощью современной приборной базы с использованием специализированных знаний физики и освоенных профильных дисциплин.	Требования ФГОС3+ (ПК-1, ПК-2)
P7	<u>Научно-инновационная деятельность</u> Применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований, а также профессиональные знания и умения в результате освоения профильных дисциплин для проведения физических исследований в инновационных областях науки, используя современные методы обработки, анализа и синтеза информации.	Требования ФГОС3+ (ПК-3, ПК-4, ПК-5)
P8	<u>Организационно-управленческая</u> Использовать на практике теоретические основы организации и планирования физических исследований, участвовать в подготовке и составлении научной документации по установленной форме, понимать и применять на практике методы управления в сфере природопользования	Требования ФГОС3+ (ПК-6, ПК-7, ПК-8)
P9	<u>Педагогически-просветительская</u> Проектировать, организовывать, анализировать педагогическую деятельность, владеть последовательностью изложения материала с использованием междисциплинарных связей физики с другими дисциплинами, участвовать в информационно-образовательных мероприятиях по пропаганде и распространению научных знаний	Требования ФГОС3+ (ПК-9)

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

Школа Инженерная школа ядерных технологий

Направление подготовки (специальность) 03.03.02 «Физика»

Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

УТВЕРЖДАЮ:

Руководитель ООП

Лидер А.М.

(Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ

на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Бакалаврской работы

(бакалаврской работы, дипломного проекта/работы, магистерской диссертации)

Студенту:

Группа	ФИО
150Б51	Ляо Цзицин

Тема работы:

Моделирование процесса формирования металлических покрытий при осаждении из газовой фазы
Утверждена приказом директора (дата, номер)

Срок сдачи студентом выполненной работы:

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

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 особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i>	Моделирование процесса нанесения покрытия методом МД
Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов	-Обзор литературных источников; -Моделирование процесса нанесения -Расчет шероховатости поверхности при разных падающих атомных энергий.

<i>(аналитический обзор по литературным источникам 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>	-Расчет шероховатости поверхности когда направление падающих атомов отличается. -Социальная ответственность -Финансовый менеджмент , ресурсоэффективность и ресурсосбережение. -Заключение
--	---

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы

Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Конотопский В.Ю.
Социальная ответственность	Скачкова Л.А.

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

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель	Чистякова Надежда Владимировна	к.ф.-м.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б51	Ляо Цзицин		

«ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту:

Группа		ФИО	
150Б51		Ляо Цзицин	
Институт	Инженерная школа ядерных технологий	Кафедра	Отделение Экспериментальной физики
Уровень образования	Бакалавр	Направление/специальность	03.03.02. Физика

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

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Принять по действующим ценам.
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	Ставки социального налога (30%) и НДС (20%)

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	
2. Планирование и формирование бюджета научных исследований	Выполнить
3. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	Выполнить

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. Оценка конкурентоспособности технических решений
2. Альтернативы проведения НИ
3. График проведения и бюджет НИ
4. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИ

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Конотопский Владимир Юрьевич	к.э.н. доцент		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б51	Ляо Цзицин		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа		ФИО	
150Б51		Ляо Цзицин	
Школа	ИЯТШ	Отделение (НОЦ)	ОЭФ
Уровень образования	бакалавр	Направление/специальность	03.03.02. Физика

Тема ВКР:

Моделирование процесса формирования металлических покрытий при осаждении из газовой фазы	
Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	Алгоритм, осаждение
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
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.	– ТОИ Р-45-084-01 Типовая инструкция по охране труда при работе на персональном компьютере (ПК, ПЭВМ) – ГОСТ 12.1.003-74 "ССБТ. Опасные и вредные производственные факторы.
2. Производственная безопасность: 2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов 2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия	– Микроклимат – Производственный шум – Электромагнитные поля – Освещенность – Электробезопасность
3. Экологическая безопасность:	
4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:	– пожар

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель	Скачкова Лариса Александровна			

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б51	Ляо Цзицин		

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

Уровень образования бакалавриат

Направление подготовки 03.03.02 «Физика»

Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

Период выполнения _____

Форма представления работы:

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

(бакалаврская работа, дипломный проект/работа, магистерская диссертация)

КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН

выполнения выпускной квалификационной работы

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
01.03.2018	Аналитический обзор литературы	15
01.09.2018	Моделирование процесса формирования металлических покрытий	15
30.12.2018	Исследовать шероховатость поверхности покрытий	20
30.04.2019	Анализ результатов	15
25.05.2019	Социальная ответственность	15
25.05.2019	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	15
25.05.2019	Заключение	5

Составил преподаватель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель	Чистякова Надежда Владимировна	к.ф.-м.н.		

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Руководитель ОЭФ	Лидер А.М.	д.т.н.		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа содержит 93 страницы, 51 рисунков, 18 таблицы, 31 литературный источник, 0 приложений.

Ключевые слова: Молекулярно-динамическое моделирование, покрытие.

Объектом исследований являлся процесс нанесения металлических покрытий на металлические подложки. Изучение влияния величины и направления скорости атомов на шероховатость поверхности пленки с помощью молекулярной динамики.

Целью работы является исследовать структуры пленок для систем Cu-Cu, Ni-Cu, в зависимости от условий осаждения методом молекулярной динамики.

Для достижения поставленной цели были определены **следующие задачи**:

1. Разработать алгоритм процесса осаждения атомов металла на металлическую подложку.
2. Провести модулирование роста пленки в зависимости от параметров: направление и скорости частиц, температура подложки.
3. Провести анализ структуры пленок, рассчитать шероховатость

Область применения: результаты работы могут помочь нам улучшить оборудование для нанесения покрытий

Оглавление

Введение.....	12
ГЛАВА 1. Литературный обзор	13
ГЛАВА 2. Методы и программное обеспечение исследования.....	32
2.1 Основные принципы метода молекулярной динамики	32
2.1.1 Основные положения метода молекулярной динамики	32
2.1.2 Ограничения классической МД.....	32
2.1.3 Основные этапы метода моделирования молекулярной динамики	33
2.2 Программное обеспечение для моделирования-LAMMPS.....	35
ГЛАВА 3. Моделирование осаждения никеля на меди и меди на меди. 37	
3.1. Формирование пленок меди на медной подложке	37
3.2 Формирование пленки никеля на медной подложке	54
3.2.1. Исследование влияния энергии адатома на шероховатость поверхности	56
3.2.2. Исследование влияние угла осаждения на шероховатость поверхности.	58
3.2.1. Исследование влияния температуры подложки на шероховатость поверхности	59
ГЛАВА 4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	61
4.1 Организация и планирование работ	61
4.1.1 Продолжительность этапов работ	63
4.2 Расчет сметы затрат на выполнение проекта	67
4.2.1 Расчет затрат на материалы.....	67
4.2.2 Расчет заработной платы	67
4.2.3 Расчет затрат на социальный налог	68
4.2.4 Расчет затрат на электроэнергию	68
4.2.5 Расчет амортизационных расходов	69
4.2.6 Расчет прочих расходов	69
4.2.7 Полная стоимость исследования	70
ГЛАВА 5. Социальная ответственность	71
5.1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности.....	71
5.2. Производственная безопасность.....	73
5.3. Экологическая безопасность.....	86

5.4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....	87
5.5 Вывод:	89
5.6 Список литературы	89
Заключение.....	91
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....	92

Введение

Среди различных текущих технических проблем одной из важных является образование нанопленок и покрытий. Существует много способов нанесения покрытия, однако сообщения о механизмах формирования структуры покрытия встречаются редко. Во многом это связано с ограниченностью экспериментальных методов и условий, и процесс образования пленки не может наблюдаться. На атомном уровне метод молекулярной динамики может моделировать процесс роста пленки, таким образом выявляя механизм роста и эволюцию пленки.

Изучение механизма роста пленок имеет большое значение для выбора оптимальной технологии нанесения.

Структура Ni-Cu используется для создания хранилищ для записи данных. В технологии важно получить покрытия с низкой шероховатостью.

Цель работы:

Молекулярно-динамические исследования процесса формирования никелевой пленки на медной подложке.

Задачи:

Моделирование осаждения никеля на поверхности медных подложек

Исследовать влияние энергии адатомов на шероховатость поверхности

Исследовать влияние угла падения на шероховатость поверхности.

Исследовать влияние температуры на шероховатость поверхности.

ГЛАВА 1. Литературный обзор

В работе [1] с использованием модели молекулярной динамики исследована кристалличность тонких пленок $Mg_xAl_yO_z$ с изменением стехиометрии тонкой пленки в рабочих условиях, аналогичных экспериментальным рабочим условиям системы осаждения с двойным магнетронным распылением. Лучшее понимание роста фильма с помощью моделирования.

Поэтому пленки MgO и $MgAl_2O_4$ использовались в качестве буферных слоев для дальнейшего осаждения высокотемпературных купратных сверхпроводящих пленок и сегнетоэлектрических пленок на полупроводниковые подложки. Пленка Al_2O_3 также используется в качестве буферного слоя для улучшения оптических свойств. Однако экспериментальных исследований структуры и свойств пленок MgO , $MgAl_2O_4$ и Al_2O_3 , нанесенных на Si или SiO_2 различными методами, мало.

Размер расчетной ячейки (17, 17, 17) и параметр $8\text{\AA}$, трехмерные периодические граничные условия. Начальная скорость ионов составляет 0,025 эВ (300 K) в произвольном направлении, а скорость ионов магния и алюминия рассчитывается из сегмента Максвелла с максимально возможной величиной 1 эВ. Расположенный в системе NVE (количество частиц N , объем системы V и полная энергия E остаются неизменными), выполняется двухтысячное моделирование. После осаждения в системе NVT были выполнены две тысячи шагов релаксации.

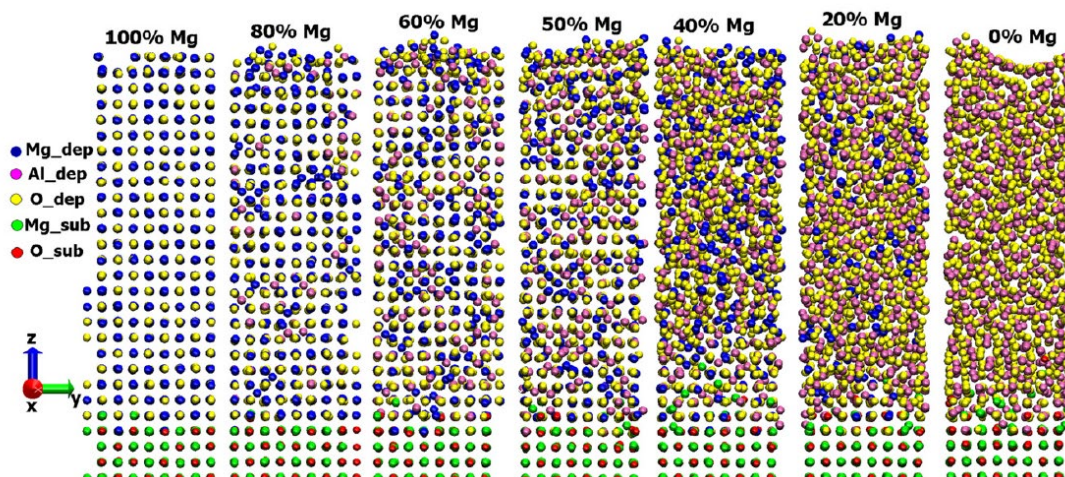


Рис 1. Снимки покрытий Mg – Al – O, нанесенных на кристаллическую подложку MgO (100) при различных соотношениях атомов Mg, Al и O.

Значение разных цветов указано в легенде.

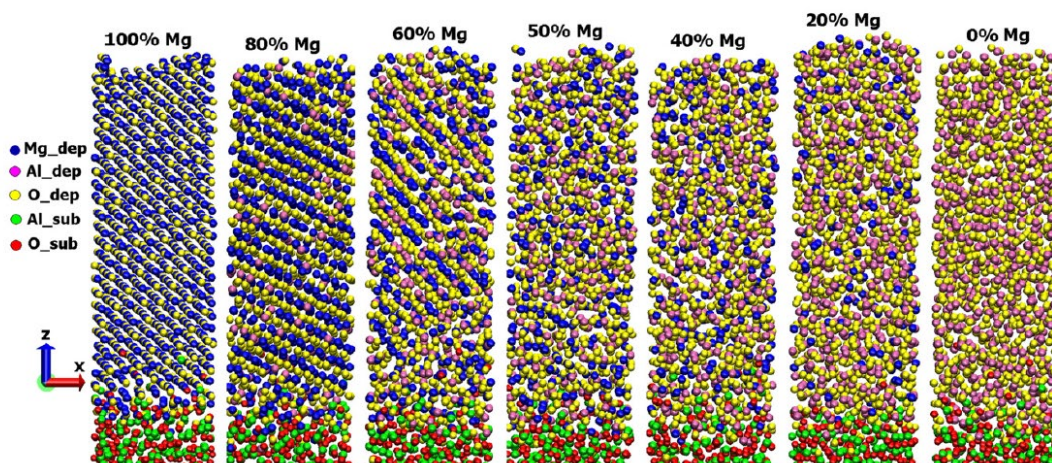


Рис 2. Снимки покрытий Mg – Al – O, нанесенных на аморфную подложку Al_2O_3 при различных соотношениях атомов Mg, Al и O. Значение разных цветов указано в легенде.

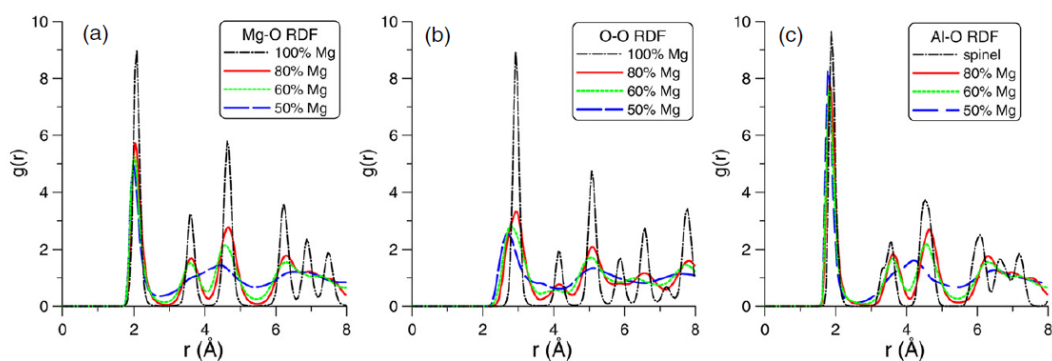


Рис 3. Рассчитанные значения RDF для Mg – O (a), O – O (b) и Al – O (c).

RDF ниже 50% Mg такие же, как RDF при 50% Mg; то есть наблюдается аморфная структура, и поэтому они не показаны на фигуре. РДФ Mg – O и O – O чистой пленки MgO соответствуют РДФ в кристалле MgO. В (c) Al-O RDF шпинели (MgAl_2O_4) также показан для сравнения.

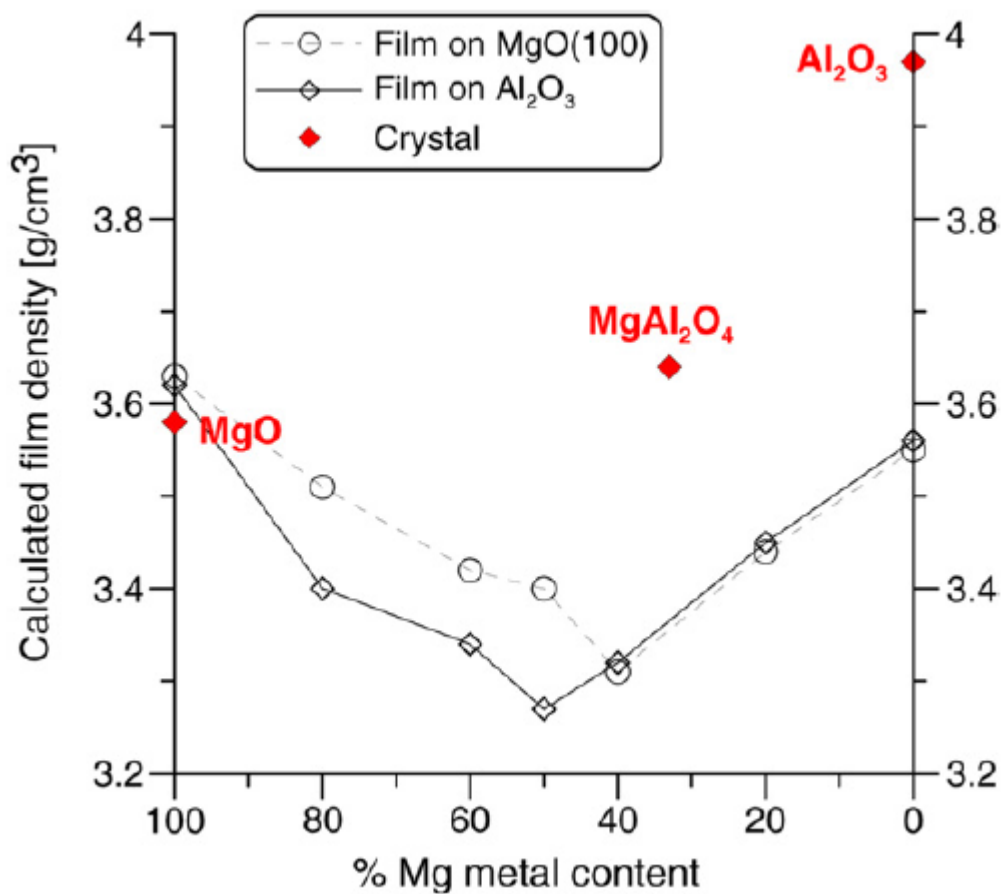


Рис 4. Рассчитанная плотность пленок, нанесенных методом МД моделирования. Для сравнения также показаны плотности кристаллов MgO , MgAl_2O_4 и Al_2O_3 .

Таким образом, RDFs показывают, что переход от кристаллической к аморфной структуре пленок наблюдается, когда содержание металлического Mg уменьшается, независимо от структуры подложки. Однако ориентация пленок разная (см. Рисунки 2 и 3). В случае подложки MgO (1 0 0) все кристаллические пленки имеют такую же ориентацию, что и подложка. В случае аморфной подложки преимущественной ориентации моделируемых пленок не наблюдается. Кроме того, переход в структуре в случае осаждения на кристаллической подложке наблюдается при содержании металла 40% Mg, в то время как в случае осаждения на аморфной подложке переход наблюдается при содержании металла Mg 50%.

Плотности смоделированных пленок рассчитаны и представлены на рис. 4. Для сравнения на рисунке также показаны плотности кристаллов MgO , MgAl_2O_4 и Al_2O_3 . Плотность пленки MgO , то есть $3,62 \text{ г / см}^3$, рассчитывается как очень близкая к данным $3,58 \text{ г / см}^3$, соответствующим кристаллу MgO . Плотности пленок Mg – Al – O и Al_2O_3 рассчитаны так, чтобы быть ниже, чем плотности кристаллов MgAl_2O_4 и Al_2O_3 , поскольку соответствующие пленки имеют аморфную структуру (на основе простого рассуждения о закрытой упаковке). Минимальная плотность пленки наблюдается при 40% и 50% Mg, где также наблюдается переход к аморфной структуре (см. Выше).

В работе [2] исследуется зависимость внутренних растягивающих напряжений от роста пленки и микроструктуры

Собственное механическое напряжение пленки может вызвать серьезные проблемы во многих применениях материалов, особенно если адгезия пленки к подложке плохая, и в этом случае растягивающие напряжения приводят к отслаиванию или растрескиванию, а сжимающие напряжения приводят к образованию складок. В то время как осажденные из паровой пленки пленки тугоплавких металлов, выращенные на подложке при комнатной температуре, имеют растягивающее напряжение, напыленные напылением пленки могут иметь растягивающее или сжимающее напряжение.

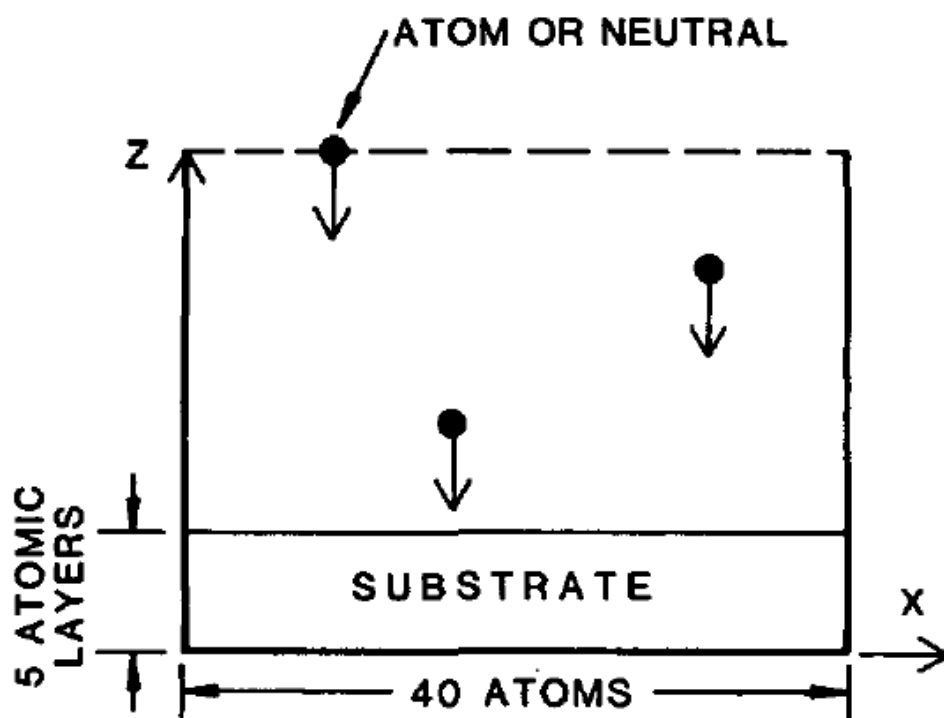


Рис 5. Принципиальная схема, показывающая двумерную открытую ячейку моделирования.

Вводя 500 атомов сверху, подложка состоит из пяти рядов атомов, каждый из которых состоит из сорока атомов, а самый нижний атом является фиксированным.

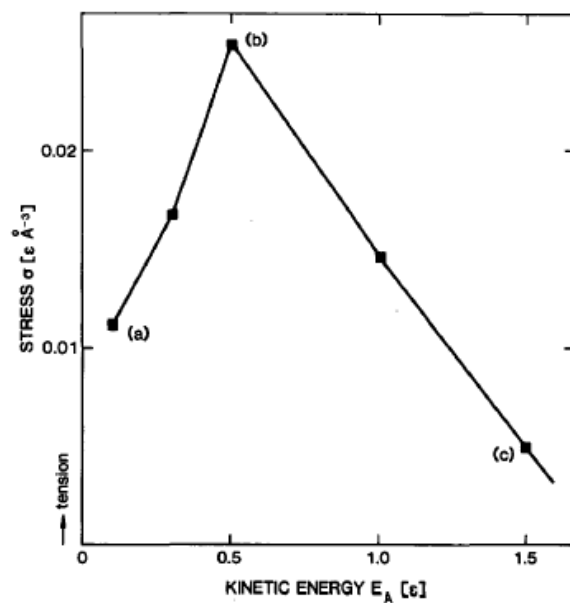


Рис 6. Собственное напряжение пленки зависит от падающей кинетической энергии E_A прибывающих адатомов.

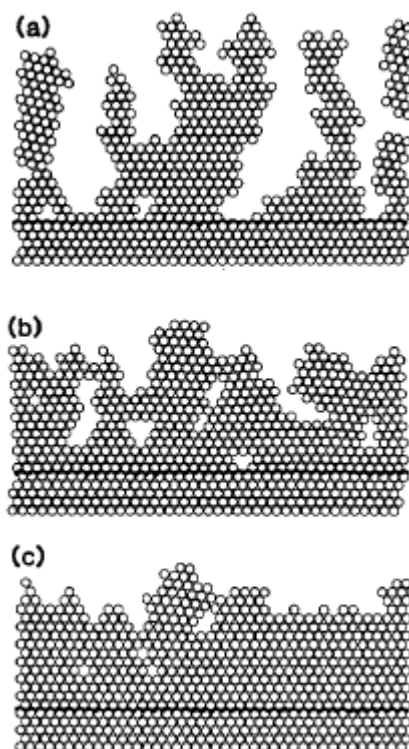


Рис 7. Типичные микроструктуры, развивающиеся, когда моноэнергетические атомы вводятся последовательно со случайными положениями x (а) для падающей кинетической энергии $E_A = 0,02 E$, (b) $E_A = 0,5 E$ и (c) $E_A = 1,5 E$.

При очень низких кинетических энергиях адатомов структура богата дефектами: заметны большие микропоры, открытые пустоты и появление $\dots$. При промежуточных энергиях [рис. 7 (b)], поры становятся меньше и атомная сеть более взаимосвязана. Растягивающее напряжение в такой компактной, но все же пористой сети является максимальным, поскольку притягивающие межатомные силы на малых расстояниях через небольшие дефекты могут действовать наиболее эффективно. При больших падающих энергиях дефекты постепенно

исчезают, и хорошо структурированная кристаллическая структура развивается, что приводит к почти нулевому напряжению

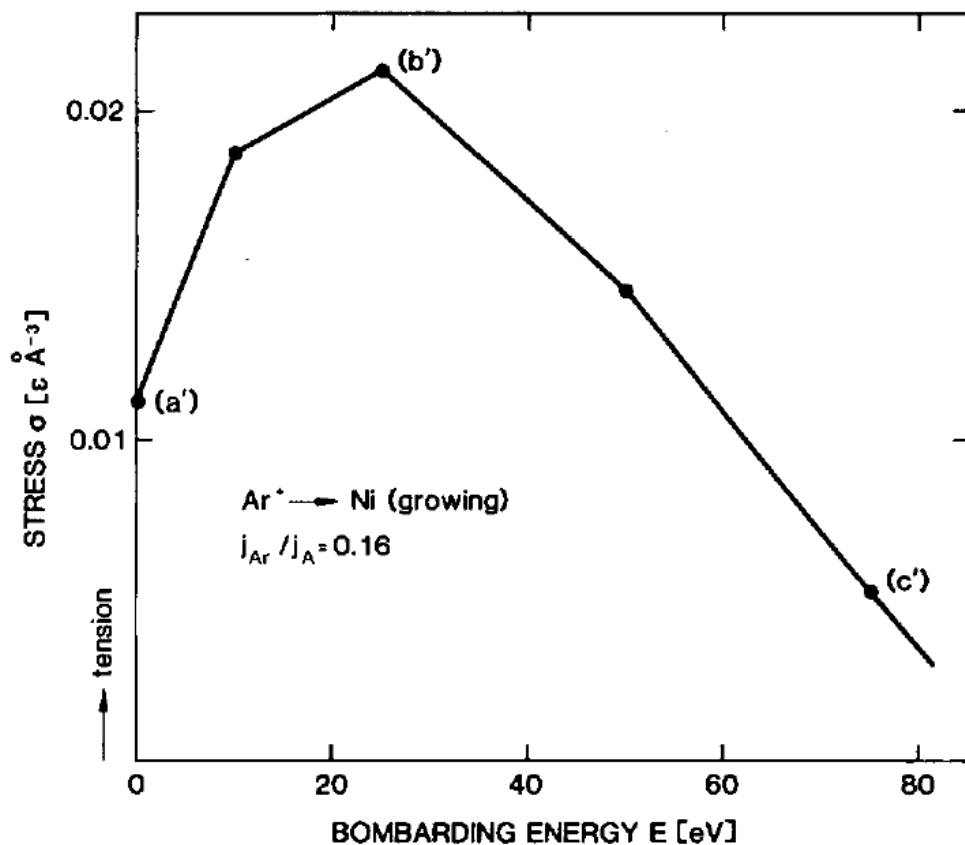


Рис 8. Внутреннее напряжение пленки а против энергии бомбардировки Ar. Соотношение скоростей прибытия Ar в атом составляет $j_{Ar}/j_A = 0,16$. Атомы поступают с кинетической энергией $0,1E$.

На рисунке 8 показано рассчитанное напряжение как функция Ar бомбардинг энергии. Значение отношения скорости поступления аргона к атому j_{Ar} / j_A выбрано как 0,16, что примерно характерно для определенных отложений распыления. Падающая кинетическая энергия конденсирующих атомов

принимается равной $0,1E$ ($E=1.3\text{eV}$). Растягивающее напряжение проходит через максимум около 20 эВ и уменьшается при дальнейшем увеличении энергии бомбардировки. Микроструктуры в точках (a'), (b') и (c') очень похожи на те, которые принадлежат точкам (a), (b) и (c) на рис. 6. Адатомы становятся мобилизованными из-за передачи энергии и импульса от падающих частиц Ar, так что атомы пленки заполняют пустые области. Таким образом, бомбардировка Ar во время роста имитирует более высокую кинетическую энергию поступления адатомов. Из-за чисто отталкивающего взаимодействия атомов Ar-пленки в этих пленках не захватывается Ar.

Цель диссертации [3] определение атомарного механизма формирования тонких пленок.

Нанесение покрытий на металл является одной из основных задач современной науки. Гетероструктура между Ag и Cu изучена экспериментально. Но до сих пор нет теоретического способа объяснить многие правила эксперимента. Например, механизм перехода между муаровой и треугольной суперструктурами неясен. Поэтому изучен процесс молекулярной динамики формирования серебряной пленки на медной подложке. Наблюдайте за движением атома прямо на атомном уровне. Это невозможно в эксперименте.

Создайте прямоугольную подложку из параллелепипеда. Убедитесь, что границы и атомы совпадают.

Уравнений Ньютона используется для определения динамики моделируемых систем.

$$m_a \ddot{r}_i^a = -\frac{\partial U_{in}}{\partial r_i^a} - \frac{\partial U_{ext}}{\partial r_i^a} + \vec{R}_i - \lambda_j p_j^a$$

Где U_{ext} -зависящий от времени внешний потенциал

Где $\vec{R}_i$ -внешний поток энергии случайной природы.

Потенциал взаимодействия

Стиль EAM вычисляет парные взаимодействия для металлов и металлических сплавов, используя потенциалы метода встроенного атома (EAM).

Полная энергия E_i атома I определяется как

$$E_i = F_\alpha \left(\sum_{j \neq i} \rho_\beta(r_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{\alpha\beta}(r_{ij})$$

где F - энергия вложения, которая является функцией атомной электронной плотности ρ , ϕ - парное потенциальное взаимодействие, а α и β - типы элементов атомов I и J . Многочастичная природа потенциала EAM является результатом члена энергии вложения. Обе суммы в формуле находятся по всем соседям J атома I в пределах расстояния отсечки.

Описание запуска атомов

Атомы испускаются из области генерации и осаждаются на подложке. Поскольку это периодическая граница, за границей нет никакого воздействия.

Описание изотермических условий

Чтобы соответствовать постоянным температурным условиям процесса нанесения покрытия, под подложкой требуется термостат. А из-за

энергетического воздействия атомного потока необходимо добавить коэффициент вязкости под подложку.

Результаты:

1. Разработать алгоритм процесса осаждения атомов металла на металлическую подложку.

Причина: На подложке формируется атомный поток. Держите все пространство вакуума. Определите размер и направление атомного потока. Расстояние между локальной областью и подложкой составляет примерно 20 см. Направление движения атома перпендикулярно поверхности подложки, а распределение скоростей выглядит следующим образом

$$\begin{cases} W(V) = \left(1 + \left(mV^2 / 2kT - 1\right) \exp\left(-mV^2 / 2kT\right)\right) \\ W(\varphi) = H(\varphi) \\ W(\theta) = H(\theta - \pi) \end{cases}$$

Где H представляет функцию Хэвисайда. Однако можно показать, что энергия адсорбированных атомов фактически мало влияет на природу осаждения. Поэтому для моделирования процесса молекулярно-лучевой эпитаксии используется простое распределение.

$$\begin{cases} W(V) = H\left(V - \sqrt{9\pi k_B T / 8m}\right) \\ W(\varphi) = H(\varphi) \\ W(\theta) = H(\theta - \pi) \end{cases}$$

2. Частота диффузионного скачка меди удовлетворяет закону Аррениуса в диапазоне температур до 750 К.

Причина: Как показано на рисунке 9, атом тратит много времени на тепловые колебания при низкой потенциальной энергии. Объясните, что время установления баланса намного меньше, чем интервал между переходами. И получается зависимость частоты атомного перехода от температуры.

$$f = f_0 e^{-\frac{\Delta U}{k_B T}}$$

Где f_0 - характеристическая частота, ΔU - активационный барьер, f - частота единичных атомов диффузии за единицу времени.

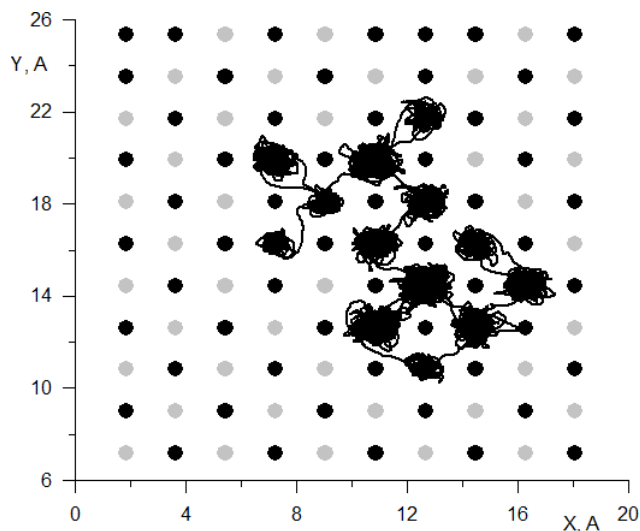
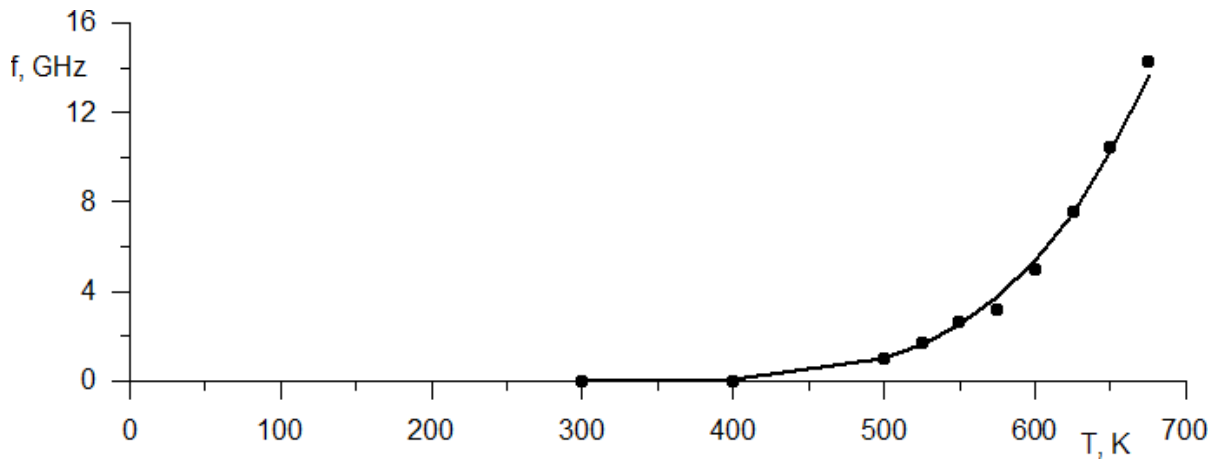


Рис. 9 Траектория адсорбционного атома. (T=675K, черный круг - подложка первого слоя, белый круг - подложка второго слоя)

Подсчитайте движение атома и рассчитайте среднее количество смещений.

Наконец, получена зависимость частоты диффузионного перехода от



температуры. Окончательная зависимость показана на рис.10.

Рис. 10 зависимость частоты диффузионного перехода от температуры.

3. Во время осаждения меди на медную подложку температура повышается в диапазоне от 100 до 750 K, а шероховатость поверхности снижается. Модуль Юнга и предел упругости также увеличиваются с ростом температуры.

Причина :

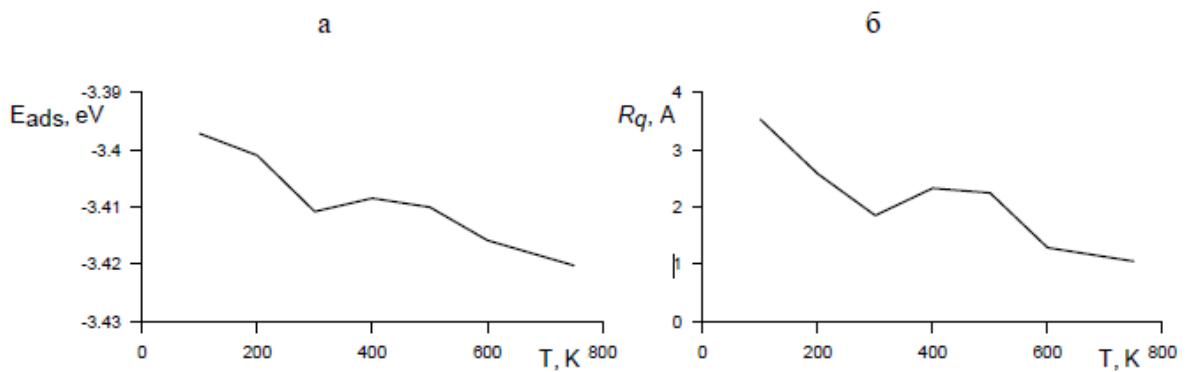


Рис 11. Зависимость шероховатости поверхности и адсорбционной энергии атомов пленки от температуры подложки

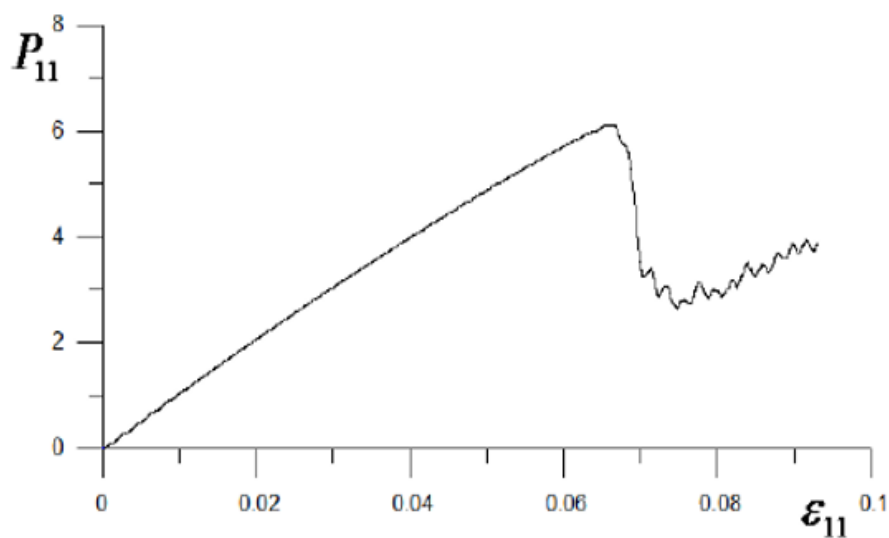


Рис 12. $\sigma - \epsilon$ - Диаграмма деформации структуры Cu / Cu (100). Образуется при температуре 100К

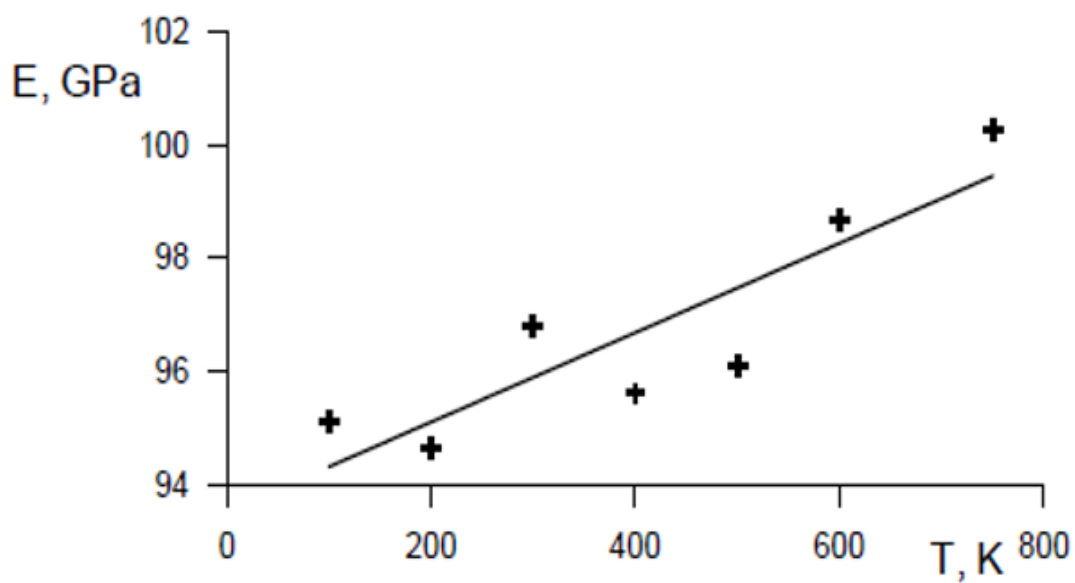


Рис 13. Связь между модулем Юнга структуры Cu / Cu (100) и температурой его образования

4. Когда на поверхности верхней подложки возникает неровность, пленка растет на выступе. Выступы легко разрушаются и смешиваются с покрытыми атомами.

Причина: Модель подложки, как показано на рис. 14, сначала устанавливается. Подложка слегка деформирована на вершине.

На рис.15 показана подложка после нанесения покрытия, и можно видеть, что атомы на выступах диффундируют к основанию, а высота уменьшается. Видно, что атомы на выступах слабее, чем атомы на подложке. Поэтому выпавшие частицы попадают на поверхность дефекта даже при низких температурах.

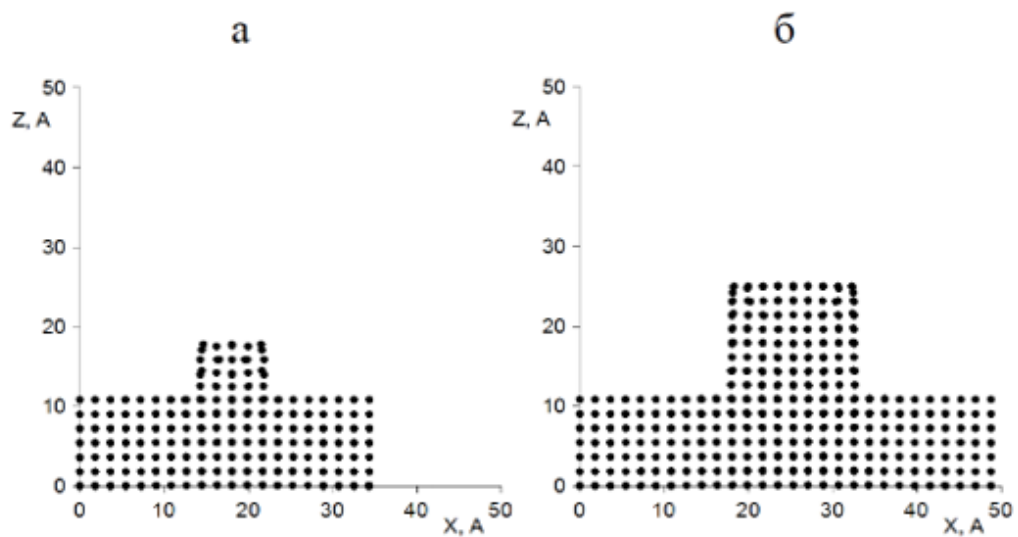


Рис 14. (а) Подложки с высоты 4 и (б) подложки с высоты 8 (проекциях XZ).

Минимизировать энергию.

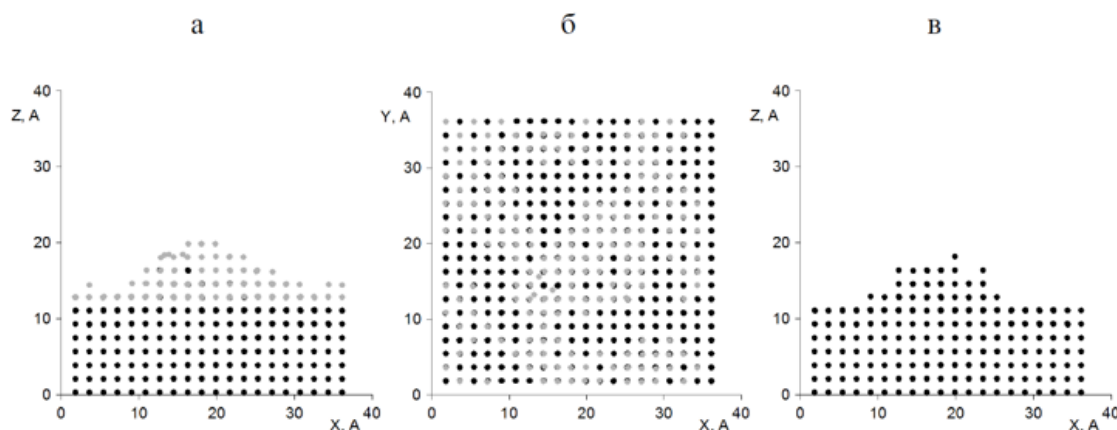


Рис 15. Результат осаждения подложки с выступом высотой 4. Белые кружки обозначают осажденные атомы меди, а черные кружки обозначают атомы матрицы.

Затем мы приходим к тому, что выступающая часть переносится на осажденные атомы. Если дефект выступа достаточно мал, осаждение нанослоя разрушит его и прорастет там. Растет вокруг.

5. Моделирование одного слоя серебра на медной подложке показывает, что структура треугольной границы раздела более энергична, чем структура муара. Этот вывод качественно согласуется с известными экспериментальными данными.

Причина:

На рисунке 16 показаны расчеты структурной энергии для повторяющихся треугольников и муаровых полос. Глубина минимума изменилась, но качество не изменилось. Тогда структура верхнего слоя треугольника более сбалансирована, чем муар.

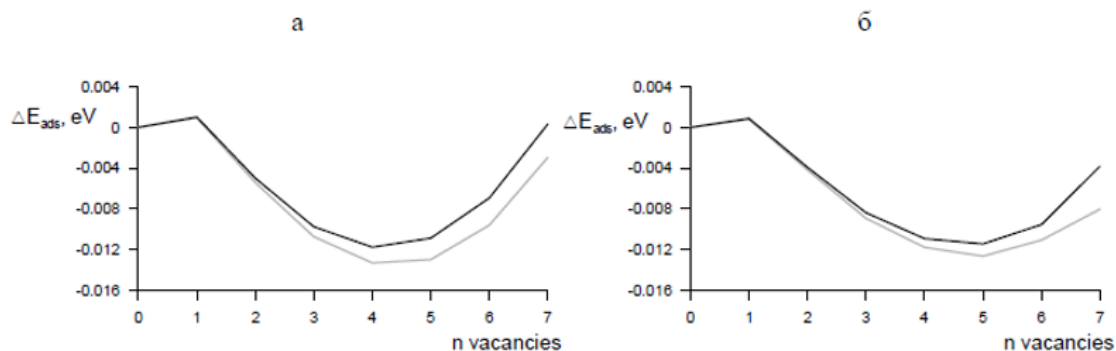


Рис 16. (а) Исследование треугольных структур суперструктуры (10x10). (б) Исследование треугольных структур суперструктура (9x9). Черная линия соответствует гетероструктуре, моделируемой в упругих периодических граничных условиях, а свет соответствует классическому периодическому граничному условию. За точку отсчета берется энергия адсорбции наноструктуры Ag-Cu (111) со сверхрешеткой Муара на границе раздела.

6. При исследовании осаждения серебра на поверхности серебра (Cu) (111) было показано, что существует возможность образования дислокационной петли на поверхности раздела этих материалов в диапазоне температур подложки от 100K до 750K. Статистические оценки показывают, что он достигает своего максимума при температуре формования 400 K, если нет условий смешивания между слоями серебра и меди. При этой температуре самоорганизация треугольной сверхструктуры впервые наблюдалась в рамках метода молекулярной динамики.

Причина: Как показано на рис 17, можно видеть, что число атомов меди, которые были перенесены в пленку, намного больше, чем количество атомов серебра, которые проникли в подложку. Детальное изучение структуры данных

интерфейса показывает, что вследствие образования этих вакансий в верхней плоскости подложки появляются петли дислокаций поверхности.

Также в этом интервале было обнаружено, что треугольная сверхрешетка образовалась при температуре 400К. Интерфейс показан на рис 18. Можно видеть, что даже при условии, что фактическая горизонтальная температура активируется и рассеивается, когда процесс в основном определяется неравновесным механизмом, на границе Ag / Cu (111) может образовываться треугольная сверхструктура.

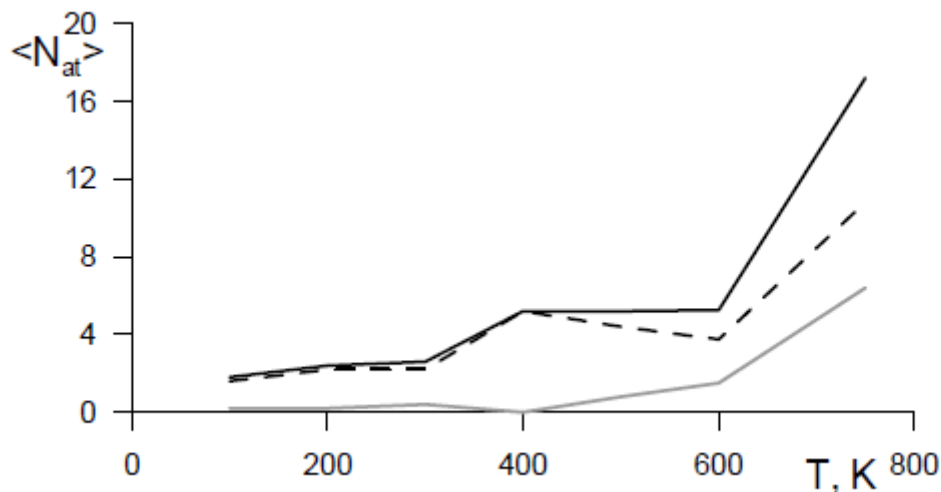


Рис 17. Черные линии-Количество атомов пленки меди, перенесенных на пленку во время осаждения. серые линии-Количество атомов серебра, проникающих в кристаллическую структуру медной подложки. пунктирные линии-Их разница.

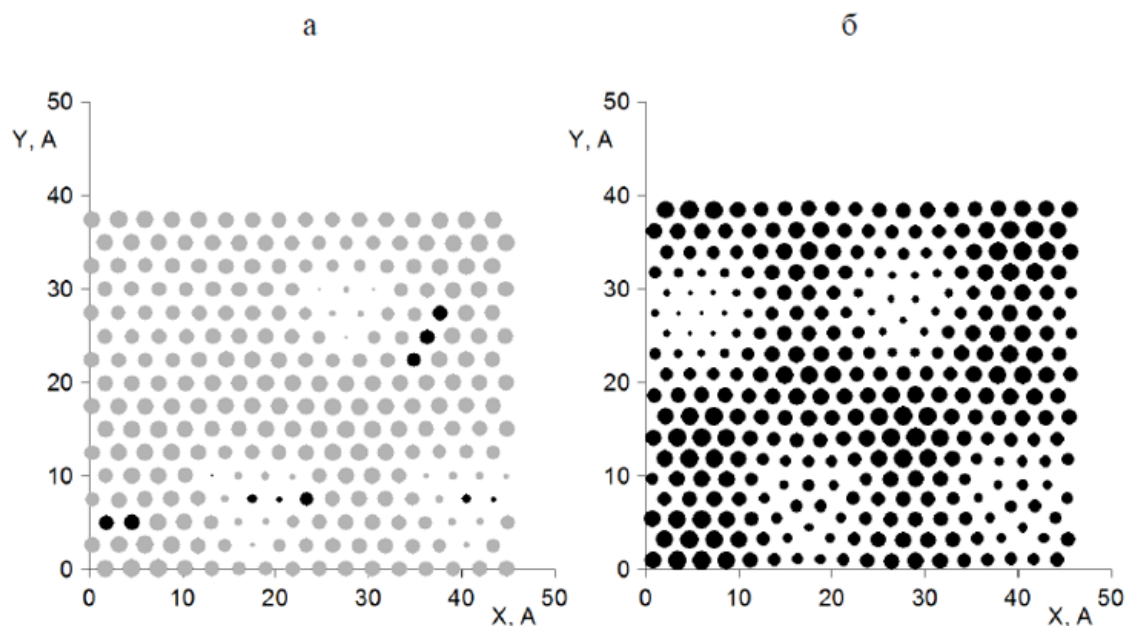


Рис 18. Интерфейс одной из гетероструктур Ag / Cu (III)(400 К, проекции XY). Нижняя плоскость серебряной пленки (а) и верхняя плоскость медной подложки (б) представлены. Яркий кружок указывает на осажденный атом серебра, а темный атом указывает на атом меди. Размер этих маркеров пропорционален координате 1 соответствующего атома.

Прочитав статью, я узнал, как моделировать физические процессы, используя молекулярную динамику. И я знаю, как анализировать модель.

ГЛАВА 2. Методы и программное обеспечение исследования

2.1 Основные принципы метода молекулярной динамики

Метод молекулярной динамики-это метод молекулярного моделирования [4].

С помощью этого метода можно моделировать движение молекулярных и атомных систем на компьютере и исследовать эволюцию системы с течением времени [5].

2.1.1 Основные положения метода молекулярной динамики

- Для описания движения атомов или частиц применяется уравнение движения Ньютона
- Задание потенциальной энергии применяется для определения силы межатомного взаимодействия.
- Для систем, учитывающих квантовые эффекты самих молекул, применяются гибридные алгоритмы Монте-Карло для континуальных интегралов[5].

2.1.2 Ограничения классической МД

- В МД мы используем уравнение движения Ньютона, поэтому длина волны Де Бройля атома(или частицы) должна быть много меньше, чем межатомное расстояние.

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{Mv} \quad v = \sqrt{\frac{3kT}{M}}$$

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{Mv} \ll v = \sqrt{\frac{3kT}{M}}$$

$$\frac{M}{m_p} \gg \frac{4\pi^2 \hbar^2}{3kTb^2 m_p} = 0.2$$

- Кроме того, квантовые эффекты становятся существенными при низких температурах [4].
- Необходимо, чтобы времена, на которых рассматривается поведение системы, были больше чем время релаксации исследуемых физических величин [4].

2.1.3 Основные этапы метода моделирования молекулярной динамики

- Определение начальной конфигурации

Первым шагом в моделировании молекулярной динамики является определение начальной конфигурации. Получение конфигурации с более низкой энергией является основой молекулярного моделирования. Первоначальная конфигурация структуры в основном определяется из экспериментальных данных или расчетов квантовой химии. После определения начальной конфигурации, чтобы каждый атом составлял скорость молекулы, скорость генерируется случайным образом на основе распределения Больцмана, распределения скорости в соответствии с статистикой Больцмана, поэтому на этом этапе температура системы равна постоянной. Кроме того, после случайного генерирования скорости движения каждого атома корректировка должна производиться таким образом, чтобы общий импульс системы во всех направлениях был равен

нулю, то есть обеспечивалось отсутствие трансляционного смещения системы.

- Равновесное состояние.

Из молекулярной массы, установленной на предыдущем этапе, устанавливается равновесная фаза, а конфигурация, температура и другие параметры контролируются при построении фазы равновесия

- Расчет.

После входа в фазу расчета молекулы и молекулы в системе начинают двигаться в соответствии с начальной скоростью. Возможно, они будут притягиваться, отталкиваться и даже сталкиваться в течение этого периода. Тогда, согласно ньютоновской механике и заданному потенциалу взаимодействия между частицами, в этом процессе полная энергия системы постоянна, но внутренняя потенциальная энергия и кинетическая энергия молекул непрерывно трансформируются друг в друга, так что температура системы также постоянно изменяется. В течение всего процесса система проходит все точки на поверхности потенциальной энергии. Именно из этого процесса определяются структуры с минимальной энергией, используемые в расчете.

- Результаты расчета

Потенциальная энергия системы в это время была рассчитана с использованием различных состояний отобранной системы и вычислялся интеграл конфигурации.

2.2 Программное обеспечение для моделирования-LAMMPS

LAMMPS - это классический код молекулярной динамики (MD), который моделирует ансамбли частиц в жидком, твердом или газообразном состоянии и может моделировать атомное, полимерное, биологическое, твердое состояние (металлы, керамика, оксиды), гранулированный, крупнозернистый или макроскопические системы, использующие различные межатомные потенциалы (силовые поля) и граничные условия, которые могут моделировать двумерные или трехмерные системы с несколькими частицами вплоть до миллионов или миллиардов.

LAMMPS может быть построен и работать на ноутбуке или настольном компьютере, но предназначен для параллельных компьютеров, он будет работать на любом параллельном компьютере, поддерживающем библиотеку передачи сообщений MPI, включая блоки с общей памятью, кластеры с распределенной памятью и суперкомпьютеры.

В самом общем смысле LAMMPS объединяет уравнения движения Ньютона для совокупности взаимодействующих частиц или мезоскопического или макроскопического скопления материала. Модели, которые включает в себя LAMMPS, в основном имеют ближний характер, также включены некоторые модели с большим радиусом действия.

Списки оптимизированы для систем с частицами, которые отталкивают на коротких расстояниях, так что локальная плотность частиц никогда не становится слишком большой. Это в отличие от методов, используемых для

моделирования плазмы или гравитации Тела (например, формирование галактики).

На параллельных машинах LAMMPS использует методы пространственной декомпозиции, чтобы разделить область моделирования на небольшие субдомены с одинаковыми вычислительными затратами, одна из которых назначается каждому процессору. Процессоры передают и хранят «атомную» информацию об атомах для атомов, которые граничат с их субэлементами. домен.

Единственным недостатком LAMMPS является невозможность обработки окончательных данных. Нужен ovito для обработки изображений, matlab для построения графиков и C ++ для анализа данных.

ГЛАВА 3. Моделирование осаждения никеля на меди и меди на меди

3.1. Формирование пленок меди на медной подложке

На начальном этапе создается трехмерное пространство и выбираются периодические граничные условия. Затем я выбрал медный потенциал EAM [6], созданный факультетом физики и астрономии Университета Джорджа Мейсона. Параметр решетки меди равен 3,61 ангстрем. Кристаллическая решетка меди гранецентрированная кубическая. Далее были сгенерированы атомы меди в соответствии со структурой. Общее количество атомов составляет 7200. Осаждение происходит на плоскости, нормаль к которой совмещена с осью z. Учитывая, что энергия адсорбированного атома составляет 0,1 эв, для которой характерна молекулярно-лучевая эпитаксия. Угол отклонения начальной скорости изменяется от 0 ° до 75 ° относительно оси z. Эти условия были выбраны, чтобы выявить механизм столкновения атомов и подложки.

Энергия адсорбированных атомов состоит из кинетической энергии и потенциальной энергии. Потенциальная энергия состоит из небольшого количества гравитационной потенциальной энергии и потенциальной энергии между атомами.

Для анализа этого процесса рассмотрим траекторию движения атома и изменение атома.

На первом этапе, движение атомов анализируется с помощью LAMMPS, и выводится энергия адсорбированных атомов.

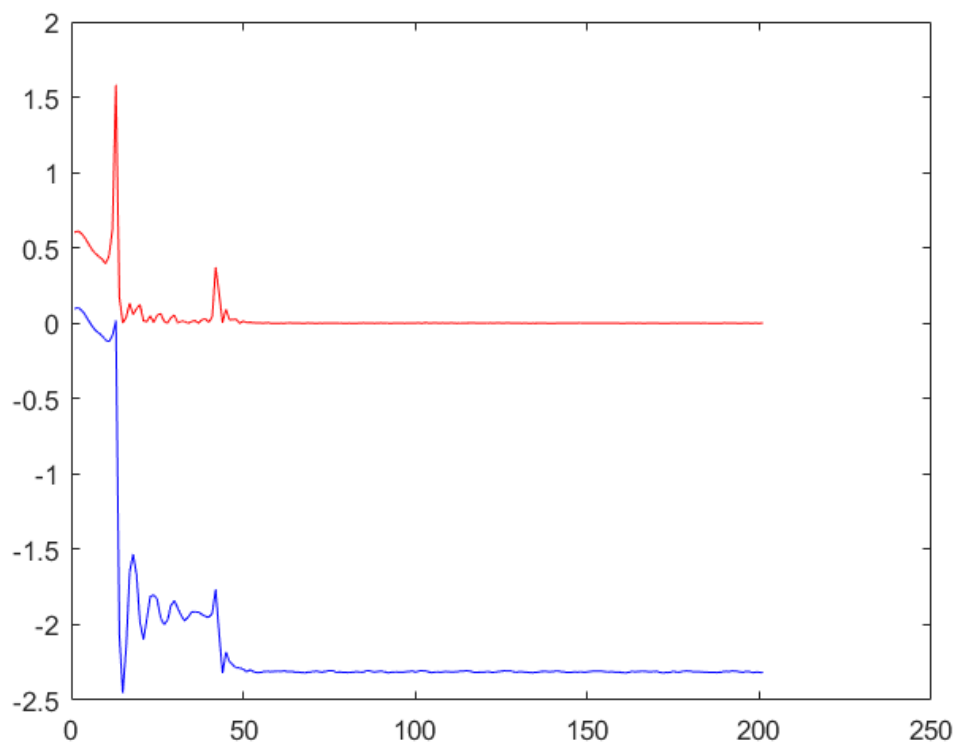


Рис 19. Полная энергия и кинетическая энергия адсорбированных атомов как функция времени (когда начальная скорость равна 0° от оси z). Абсцисса (время, единица измерения = 0,1 пикосекунда) ордината (энергия, единица измерения = эВ). Начальная энергия 0,1 эВ. Красная линия - кинетическая энергия, синяя линия - потенциальная энергия.

Визуализация атомной траектории с помощью программы ovito

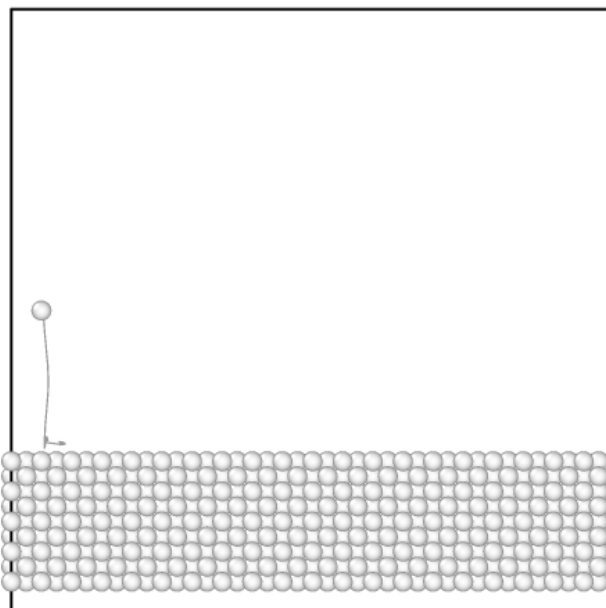


Рис. 20. Траектория атома (вид спереди) Белая сфера представляет собой атом меди. Тонкая линия - это траектория адсорбированных атомов. (Когда начальная скорость составляет 0° от оси Z)

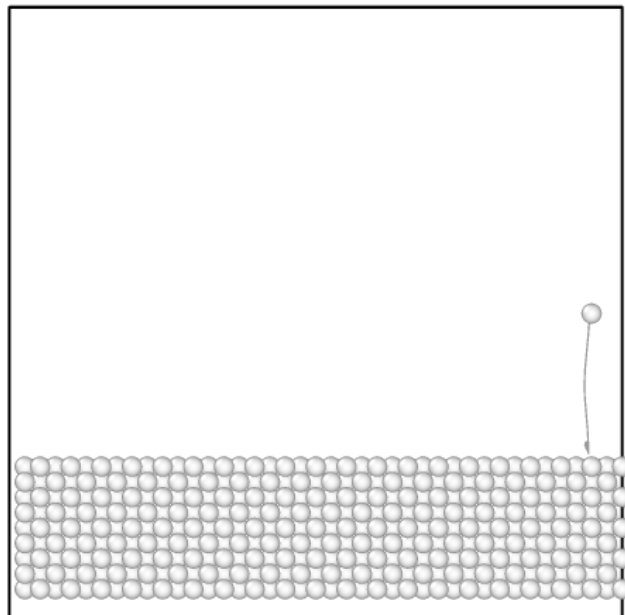


Рис. 21. Траектория атома (вид сбоку) Белая сфера представляет собой атом меди. Тонкая линия - это траектория адсорбированных атомов. (Когда начальная скорость составляет 0° от оси Z)

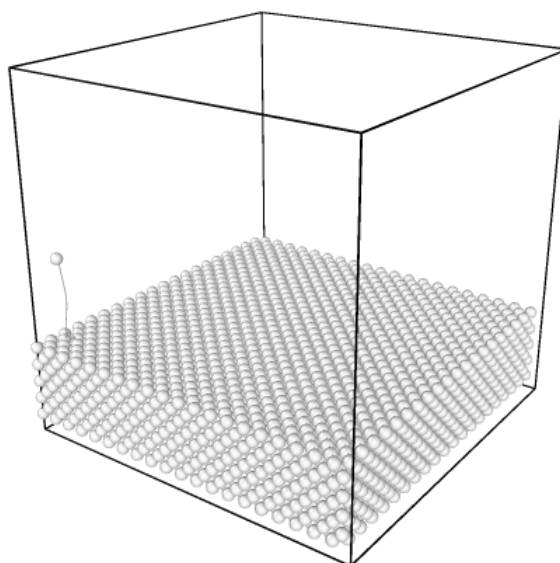


Рис. 22. Карта атомной траектории (стереоскопический вид). Белая сфера - это атом меди. Тонкая линия - это траектория адсорбированных атомов. (Когда начальная скорость составляет 0° от оси Z)

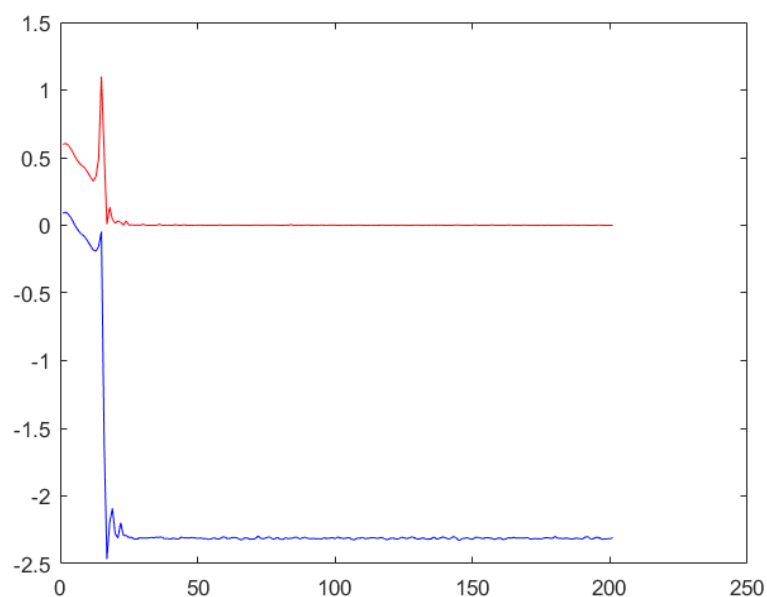


Рис 23. Полная энергия и кинетическая энергия адсорбированных атомов как функция времени (когда начальная скорость равна 30° от оси z). Абсцисса (время, единица измерения = 0,1 пикосекунда) ордината (энергия, единица

измерения = эВ). Начальная энергия 0,1 эВ. Красная линия - кинетическая энергия, синяя линия - потенциальная энергия.

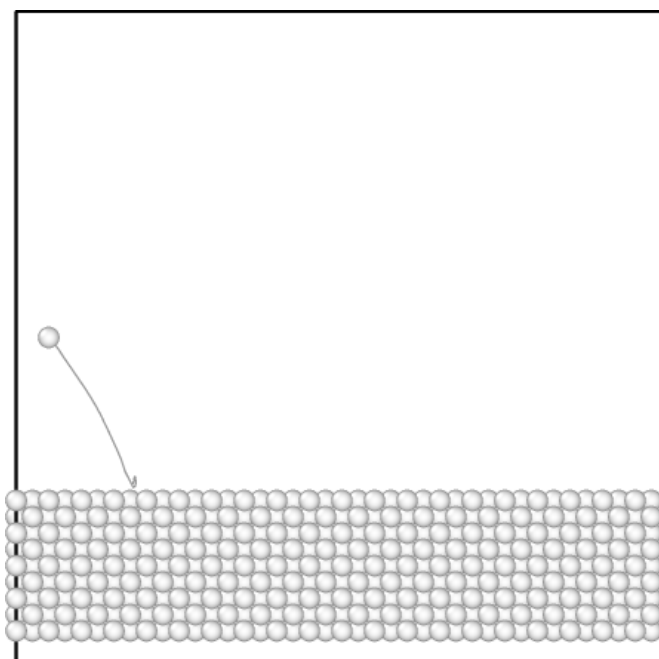


Рис. 24. Карта атомной траектории (вид спереди) Белая сфера - это атом меди. Тонкая линия - это траектория адсорбированных атомов. (когда начальная скорость составляет 30° к оси Z)

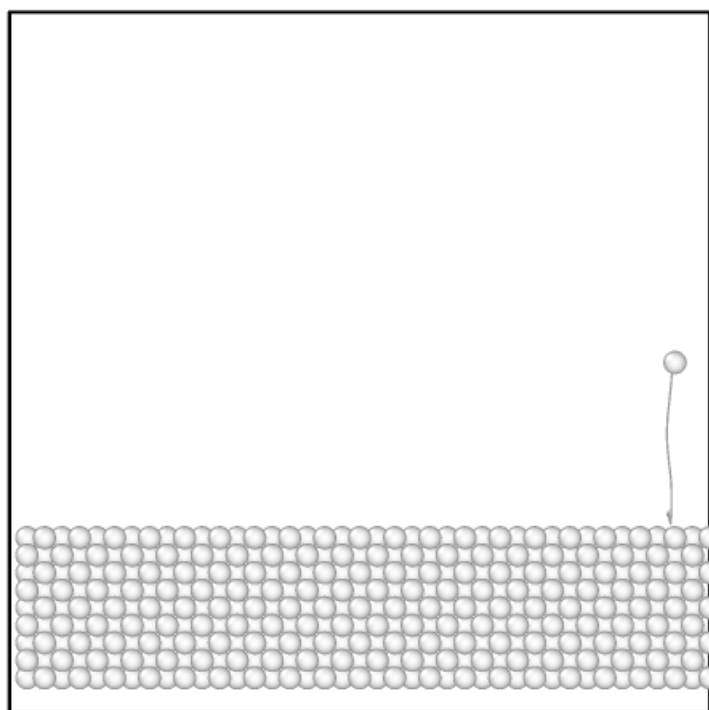


Рис. 25. Траектория атома (вид сбоку) Белая сфера представляет собой атом меди. Тонкая линия - это траектория адсорбированных атомов. (когда начальная скорость составляет 30° к оси Z)

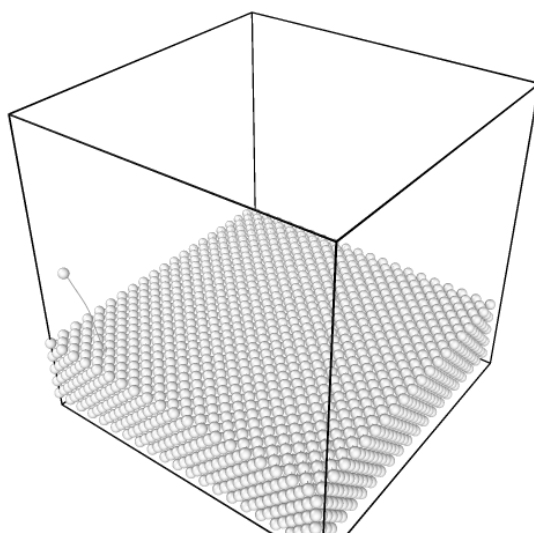


Рис. 26. Карта траектории атома (стереоскопический вид). Белая сфера представляет собой атом меди. Тонкая линия - это траектория адсорбированных атомов. (когда начальная скорость составляет 30° к оси Z)

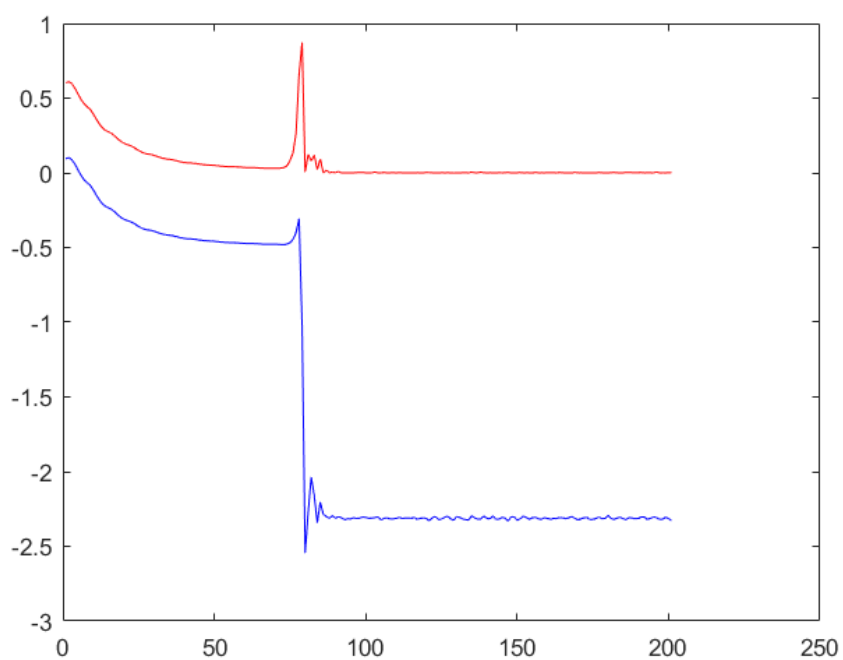


Рис 27. Полная энергия и кинетическая энергия адсорбированных атомов как функция времени (когда начальная скорость равна 75° от оси z). Абсцисса (время, единица измерения $=0,1$ пикосекунда) ордината (энергия, единица измерения $=\text{эВ}$). Начальная энергия $0,1\text{ эВ}$. Красная линия - кинетическая энергия, синяя линия - потенциальная энергия.

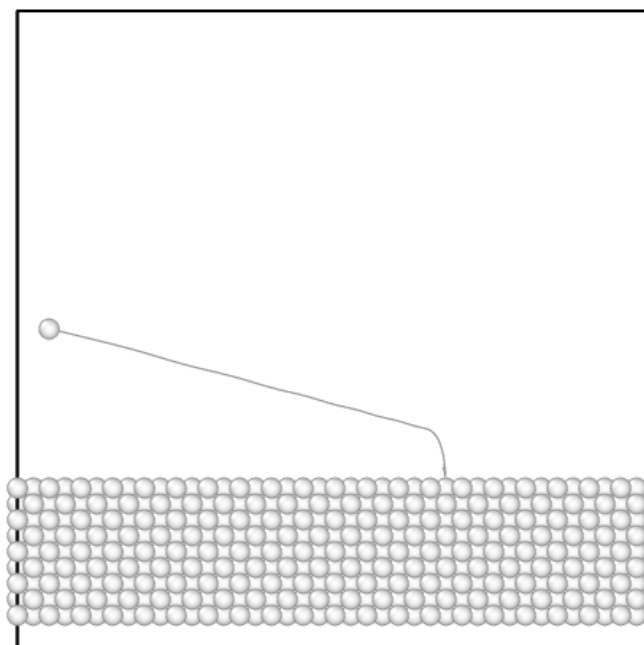


Рис. 28. Карта траектории атома (вид спереди) Белая сфера - это атом меди. Тонкая линия - это траектория адсорбированных атомов. (когда начальная скорость составляет 75° к оси z)

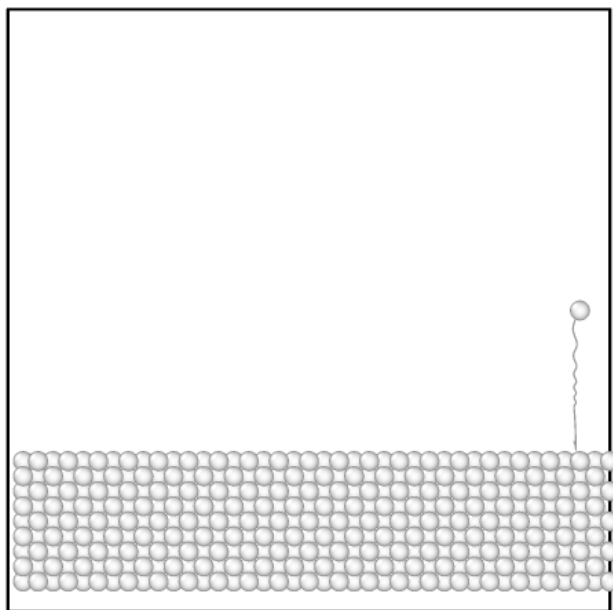


Рис. 29. Атомная траектория (вид сбоку) белой сферы представляет собой атом меди. Тонкая линия - это траектория адсорбированных атомов. (когда начальная скорость составляет 75° к оси z)

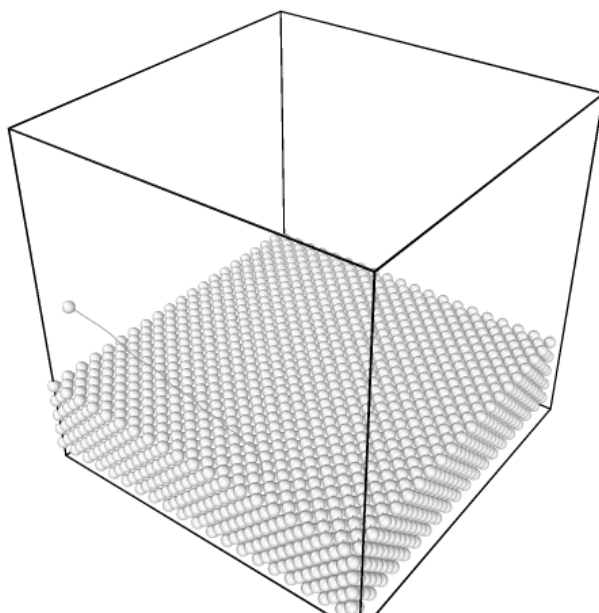


Рис. 30, карта атомной траектории (стереоскопический вид). Белая сфера представляет собой атом меди. Тонкая линия - это траектория адсорбированных атомов. (когда начальная скорость составляет 75° к оси z)

Наблюдая карту атомной траектории, атомы изначально практически не подвержены влиянию подложки. С того момента, как атом входит в поле подложки, он начинает сильно ускоряться, пока ускорение не изменит знак из-за электростатического отталкивания между ядрами. Описанное поведение графически представлено на Рис.19, Рис.23 и Рис.27. Показана зависимость кинетической энергии адсорбции и энергии от временного шага численного интегрирования. Видно, что энергия адсорбированных атомов изменяется на -2,3 эВ после определенного периода колебаний.

Кроме того, из-за многочисленных столкновений с атомами подложки кинетическая энергия адсорбированных атомов быстро рассеивается (Рис.19, Рис.23 и Рис.27). Через некоторое время размер составляет менее 0,001 эВ, и вся система переходит в состояние термодинамического равновесия. В это время шары опускаются между двумя слоями, а затем получают плотную упаковку, и энергия быстро уменьшается до -2,3 эВ (Рис.19, Рис.23 и Рис.27). Наблюдая за процессом моделирования, можно отметить, что кристаллическая структура самой подложки не нарушается.

Энергия присоединенного атома изменяется. Когда энергия присоединенного атома составляет 0,5 эВ, получается следующее изображение.

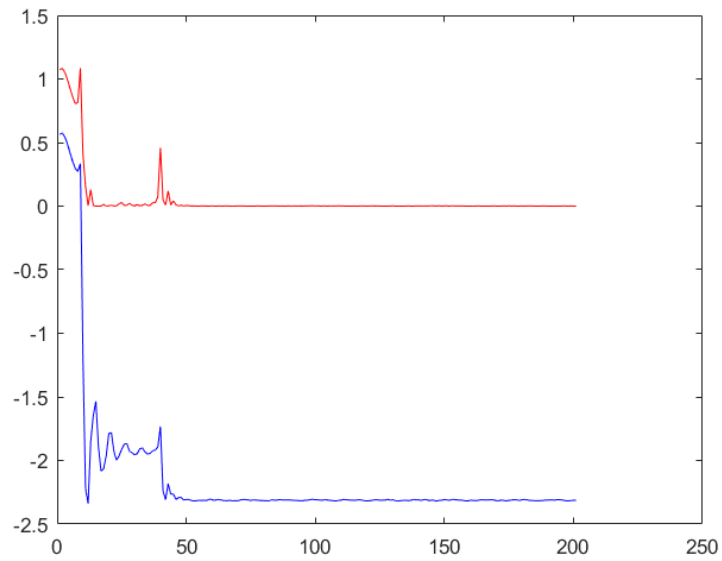


Рис 31. Полная энергия и кинетическая энергия адсорбированных атомов как функция времени (когда начальная скорость равна 0° от оси z). Абсцисса (время, единица измерения = 0,1 пикосекунда) ордината (энергия, единица измерения = эВ). Начальная энергия 0,5 эВ. Красная линия - кинетическая энергия, синяя линия - потенциальная энергия.

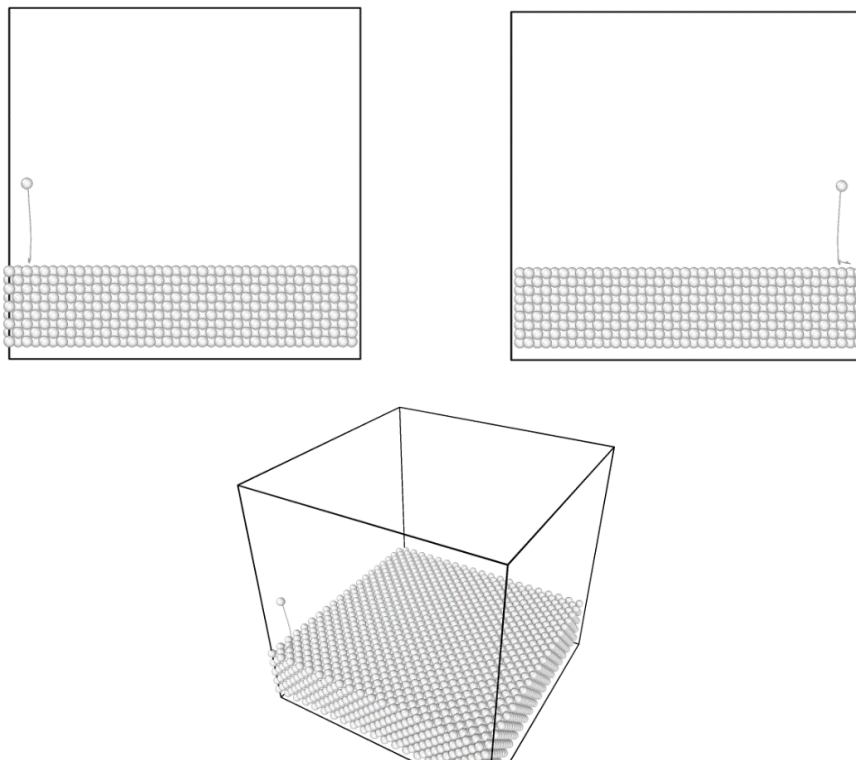


Рис 32. Карта атомной траектории (вид спереди, вид сбоку, вид в перспективе). Белая сфера представляет собой атом меди Тонкая линия - Это траектория адсорбированных атомов (когда начальная скорость составляет 0° к оси z)

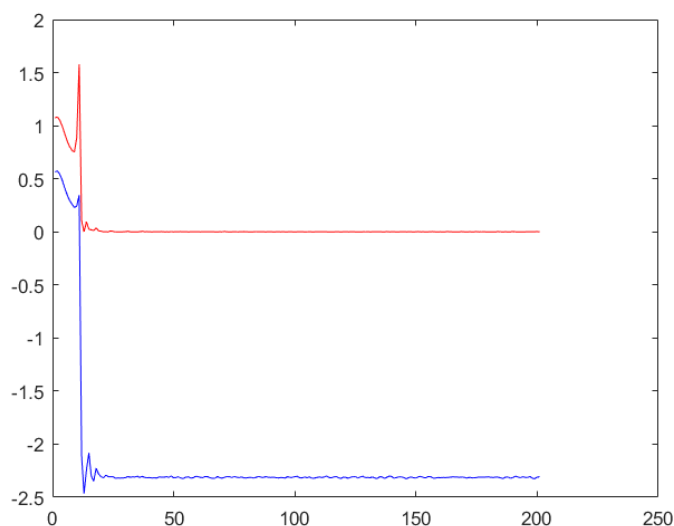
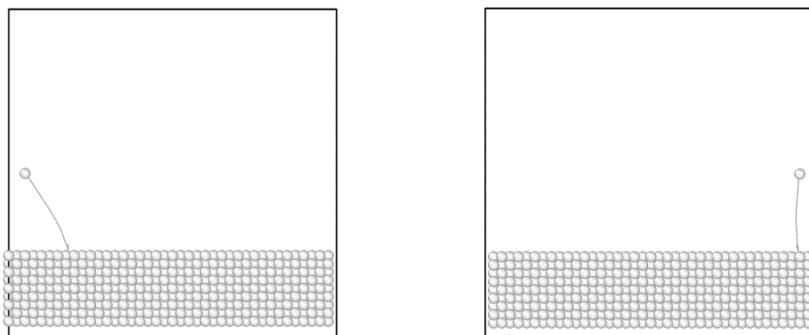


Рис 33. Полная энергия и кинетическая энергия адсорбированных атомов как функция времени (когда начальная скорость равна 30° от оси z). Абсцисса (время, единица измерения = 0,1 пикосекунда) ордината (энергия, единица измерения = эВ). Начальная энергия 0,5 эВ. Красная линия - кинетическая энергия, синяя линия - потенциальная энергия.



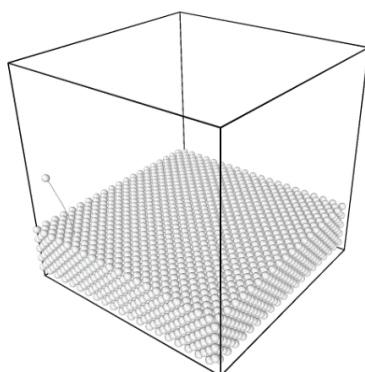


Рис 34. Карта атомной траектории (вид спереди, вид сбоку, вид в перспективе). Белая сфера представляет собой атом меди. Тонкая линия - Это траектория адсорбированных атомов (когда начальная скорость составляет 30° к оси Γ)

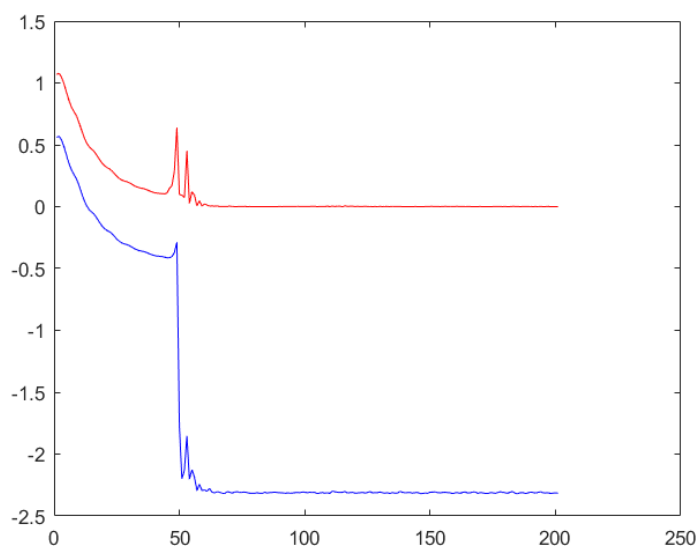


Рис 35. Полная энергия и кинетическая энергия адсорбированных атомов как функция времени (когда начальная скорость равна 75° от оси z). Абсцисса (время, единица измерения = 0,1 пикосекунда) ордината (энергия, единица измерения = эВ). Начальная энергия 0,5 эВ. Красная линия - кинетическая энергия, синяя линия - потенциальная энергия.

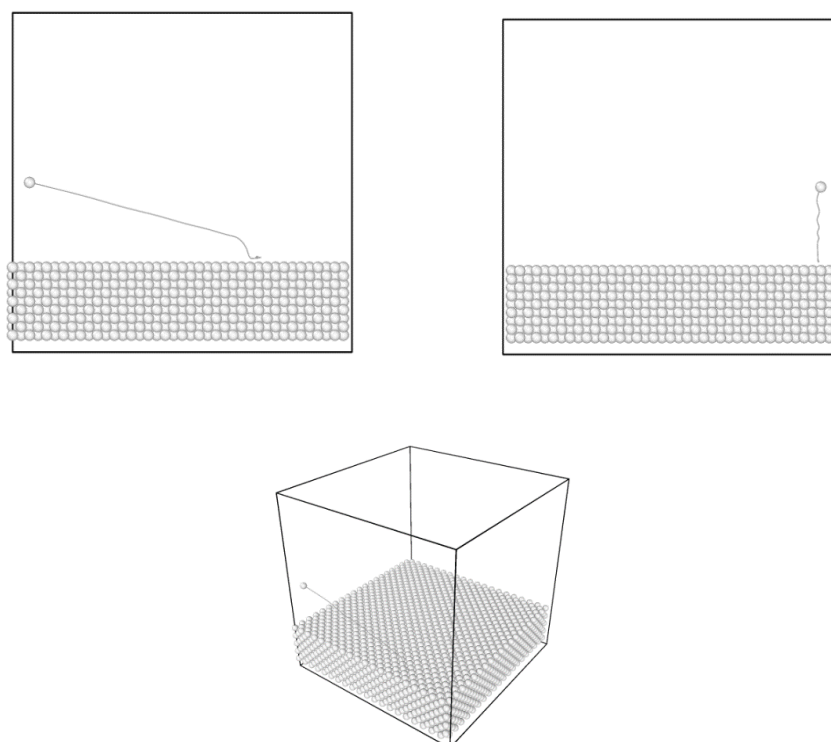


Рис 36. Карта атомной траектории (вид спереди, вид сбоку, вид в перспективе). Белая сфера представляет собой атом меди Тонкая линия -Это траектория адсорбированных атомов (когда начальная скорость составляет 75° к оси Γ)

При ненулевом угле наклона начальной скорости начальная энергия адсорбированных атомов увеличивается до 0,5 эВ, что делает их траектории более плавными. Как показано, это связано с начальной скоростью и относительной величиной скорости, обеспечиваемой полем подложки. В то же время видно, что атомы меди перемещаются в лунки после столкновения с подложкой.

Наблюдая за графиком, из-за увеличенной скорости положение поля подложки достигается быстрее, и время, необходимое для входа в

термодинамическое равновесие, меньше. Но в основном это изображение практически не изменилось по сравнению с 0,1эВ. То есть увеличение энергии адсорбированных атомов не оказывает существенного влияния на процесс их столкновения с подложкой.

Мы сравниваем кривые преобразования энергии присоединенных атомов в разных начальных направлениях скорости.

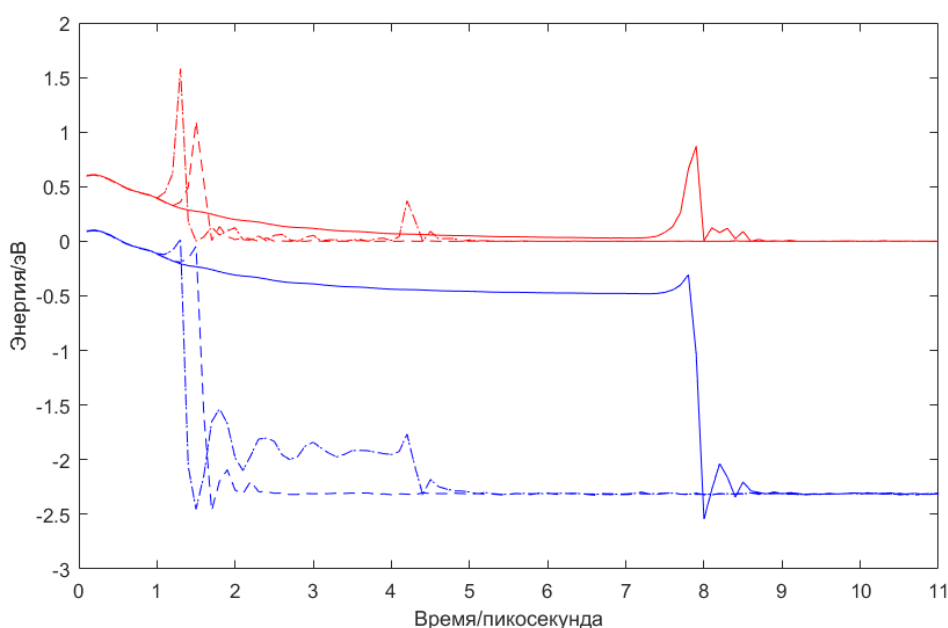


Рис 37. Энергия меняется во времени.(Начальная энергия 0.1эВ) Красная линия - кинетическая энергия адсорбированного атома, синяя линия - энергия адсорбированного атома, сплошная линия - направление 75 градусов, Штриховой пунктир - 30 градусов, Штрихпунктир - 0 градусов.

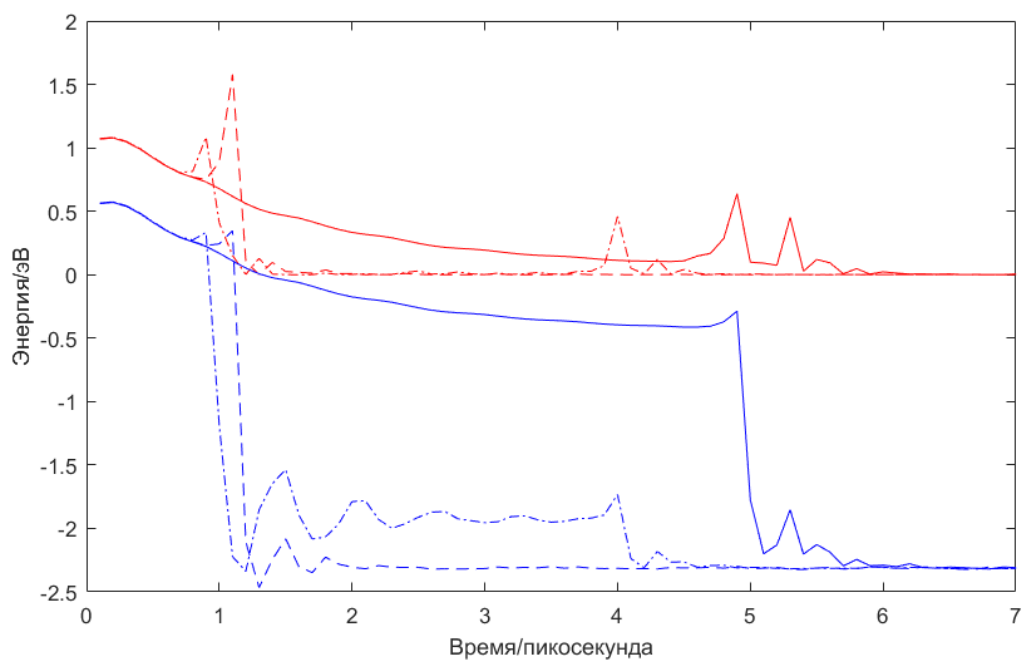


Рис 38. Энергия меняется во времени.(Начальная энергия 0.5эВ) Красная линия - кинетическая энергия адсорбированного атома, синяя линия - энергия адсорбированного атома, сплошная линия - направление 75 градусов, Штриховой пунктир - 30 градусов, Штрихпунктир - 0 градусов.

Как видно из рисунка, когда угол составляет 30 градусов, энергия стабильна в самом быстром темпе.

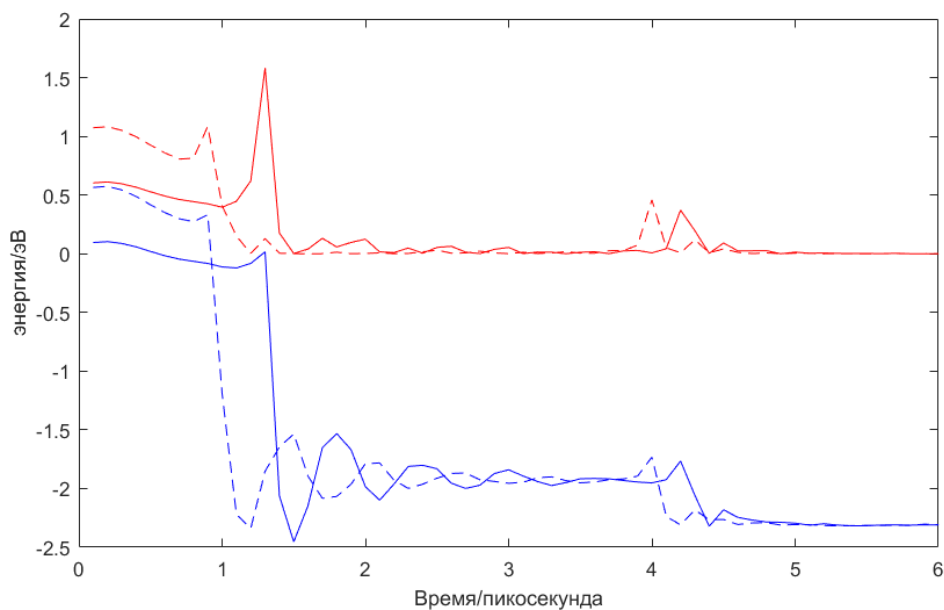


Рис 39. Энергия меняется во времени(0 градус). Красная линия - кинетическая энергия адсорбированного атома, синяя линия - энергия адсорбированного атома, сплошная линия -Начальная энергия 0,1 эв, Штриховой пунктир -Начальная энергия 0,5 эв.

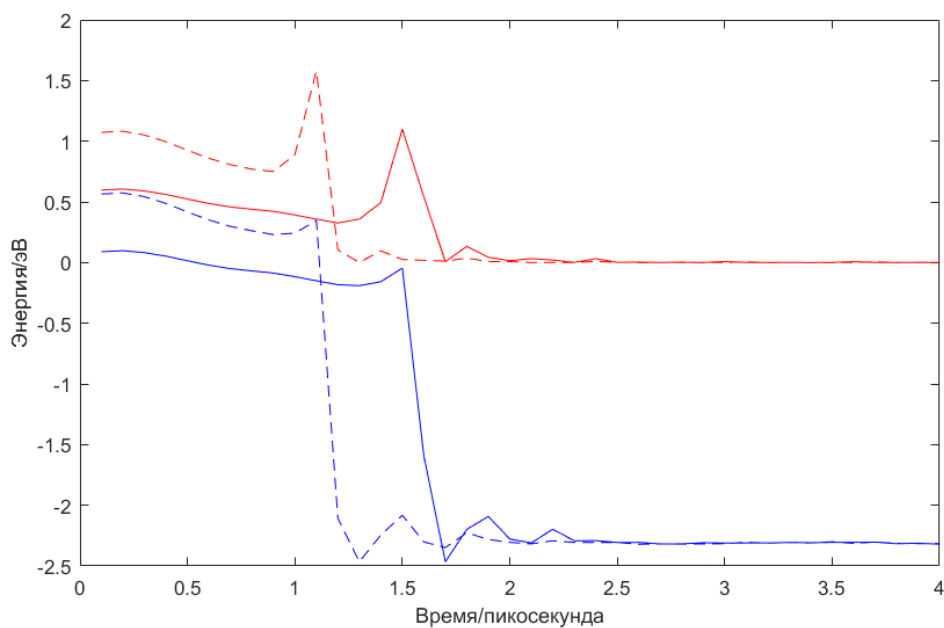


Рис 40. Энергия меняется во времени(30 градус). Красная линия - кинетическая энергия адсорбированного атома, синяя линия - энергия адсорбированного атома, сплошная линия -Начальная энергия 0,1 эв, Штриховой пунктир -Начальная энергия 0,5 эв.

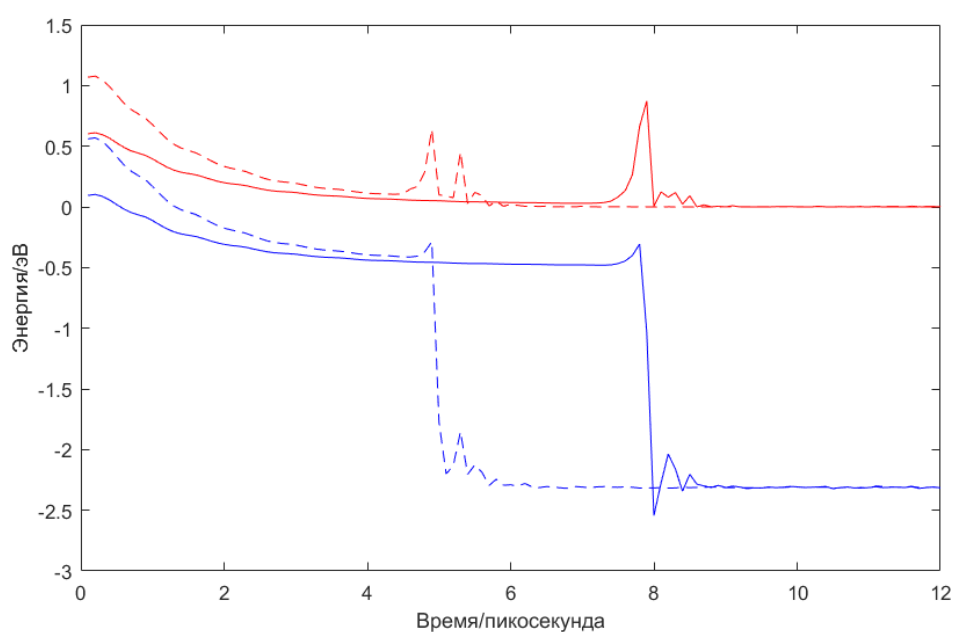


Рис 41. Энергия меняется во времени(75 градус). Красная линия - кинетическая энергия адсорбированного атома, синяя линия - энергия адсорбированного атома, сплошная линия -Начальная энергия 0,1 эв, Штриховой пунктир -Начальная энергия 0,5 эв.

Увеличение энергии адсорбированных атомов не оказывает существенного влияния на процесс, с помощью которого они сталкиваются с подложкой.

3.2 Формирование пленки никеля на медной подложке

Сначала, определим начальные условия. Моделирование проводилось в коробке размером 35 x 35 x 88. Границы x и y рамки используют периодические граничные условия. В коробке есть медная подложка, состоящая из 5400 атомов. Кристаллическая структура ГЦК. Параметр решетки меди 3,61.

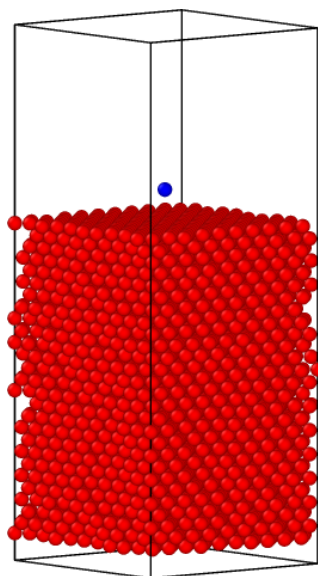


Рис 42. Начальное состояние(Красный- медь
Синий – никель)

Мы осуществили трехслойное покрытие, а затем наблюдали за моделью.

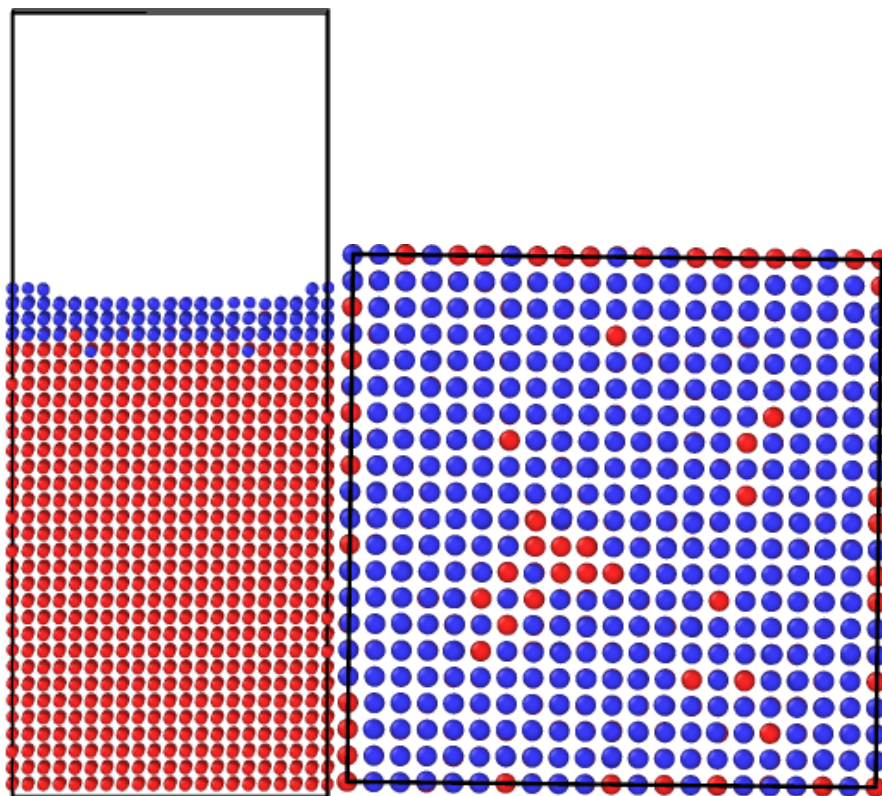


Рис 43. Вид спереди и сверху во время нанесения покрытия

- Атомы расположены аккуратно. Дислокации не найдены
- Уже есть три слоя пленки, и все же часть подложки не покрыта пленкой.

Кристаллическая структура была проанализирована с использованием OVITO.

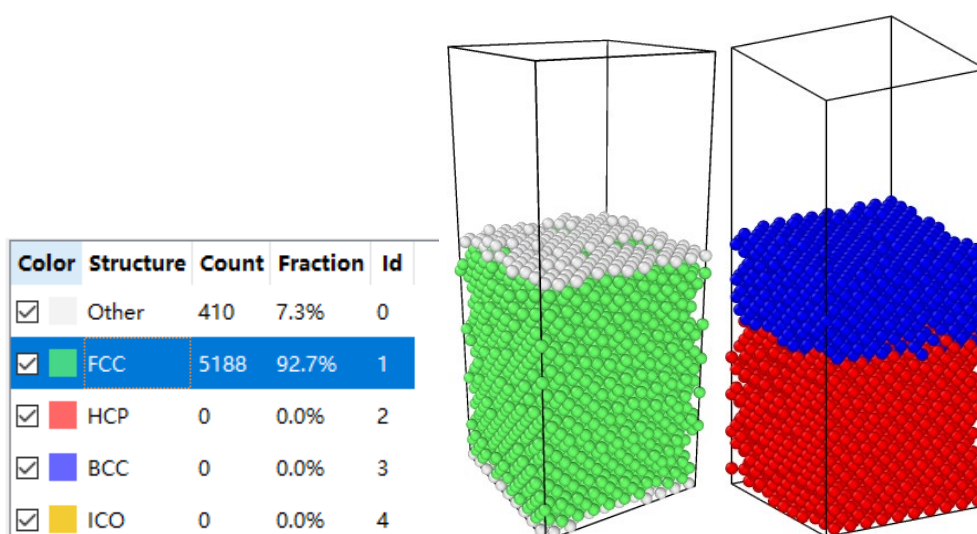


Рис 44. Слева и середина - результат анализа OVITO. Справа - окончательное состояние покрытия(Красный- медь,Синий – никель)

Как видно из рисунка, никелевая пленка образует на подложке структуру ГЦК.

3.2.1. Исследование влияния энергии адатома на шероховатость поверхности

Шероховатость поверхности— совокупность неровностей поверхности с относительно малыми шагами на базовой длине.

Существует много способов расчета шероховатости поверхности. Здесь мы берем обычный R_a

$$R_a = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i|$$

Где y_i -отклонения профиля от средней линии профиля

Таким образом, нам нужно только знать координаты поверхностных атомов, чтобы найти шероховатость

Извлечь поверхностные атомы из OVITO.

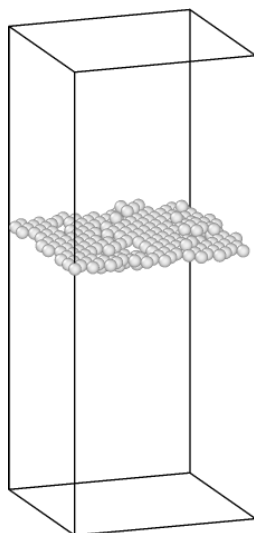


Рис 45. Поверхностный слой

Экспортировать координаты атома

Рассчитать шероховатость с помощью C ++

Таблица 1. Шероховатость поверхности Ra как функция энергии падающего адатома.

энергии	Шероховатость
0.151088	1.205693
0.604352	0.933327
1.35979	0.903481
2.41741	0.920875
3.7772	0.850615
4.99543	0.770052
5.90748	0.781356
6.91372	0.688961

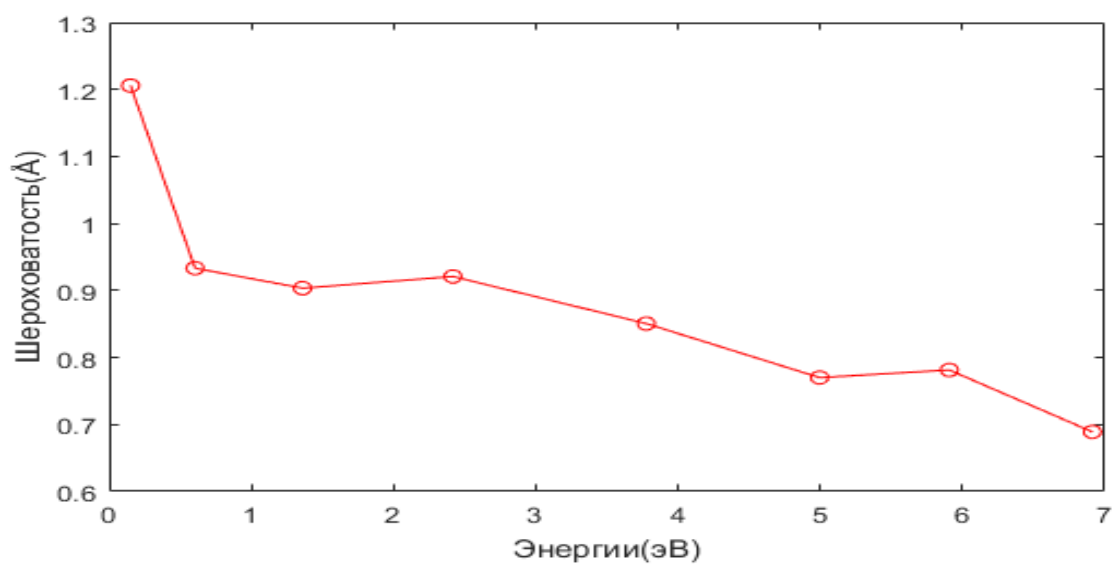


Рис 46. Шероховатость поверхности Ra как функция энергии падающего адатома.

Увеличение энергии падающего излучения от 0,1 до 7,0 эВ значительно снижает шероховатость никеля на медных поверхностях раздела.

3.2.2. Исследование влияние угла осаждения на шероховатость поверхности.

Следуйте предыдущему разделу, так же, как изменение энергии, изменение угла

Используемая атомная скорость составляет 8

Таблица 2. Шероховатость поверхности как функция угла падающего атома

Угол	Шероховатость
0	0.945892
15	0.926928
30	0.896456
45	1.177367
60	2.001349
75	2.71385

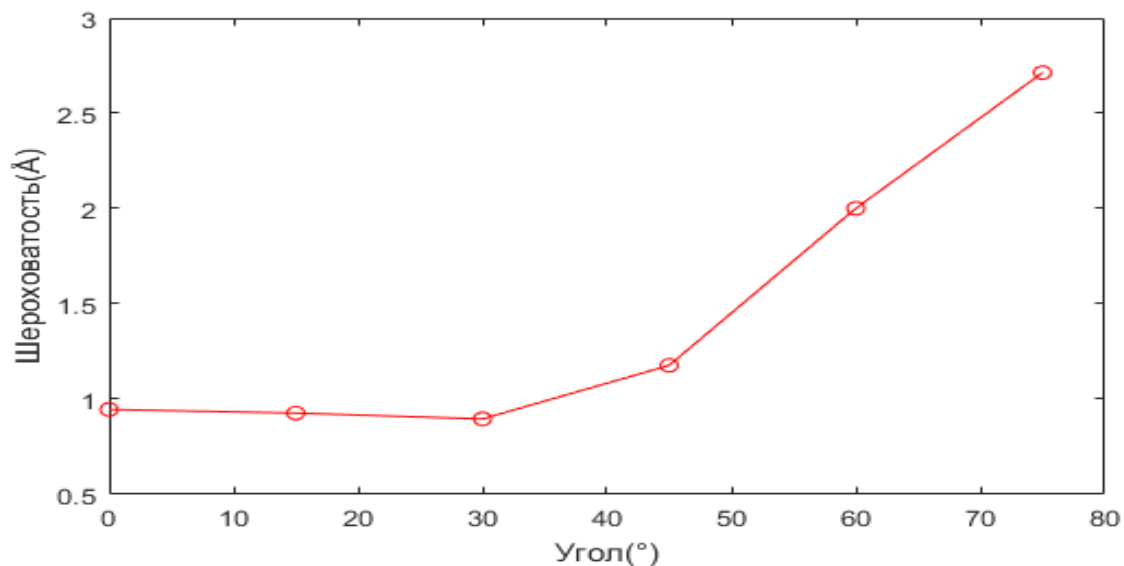


Рис 47. Шероховатость поверхности как функция угла падающего атома

Увеличение угла падающих атомов от 0 до 75 градусов значительно увеличивает шероховатость никеля на поверхности меди.

3.2.1. Исследование влияния температуры подложки на шероховатость поверхности

Таблица 3.Изменение шероховатости поверхности в зависимости от температуры подложки.

Температуры подложки(К)	Шероховатость поверхности
1	1.233927
50	1.146317
100	1.069697
150	0.963850
200	0.603315
250	0.294891
300	0.202596
350	0.424895
400	0.466498
450	0.557445
500	0.596541

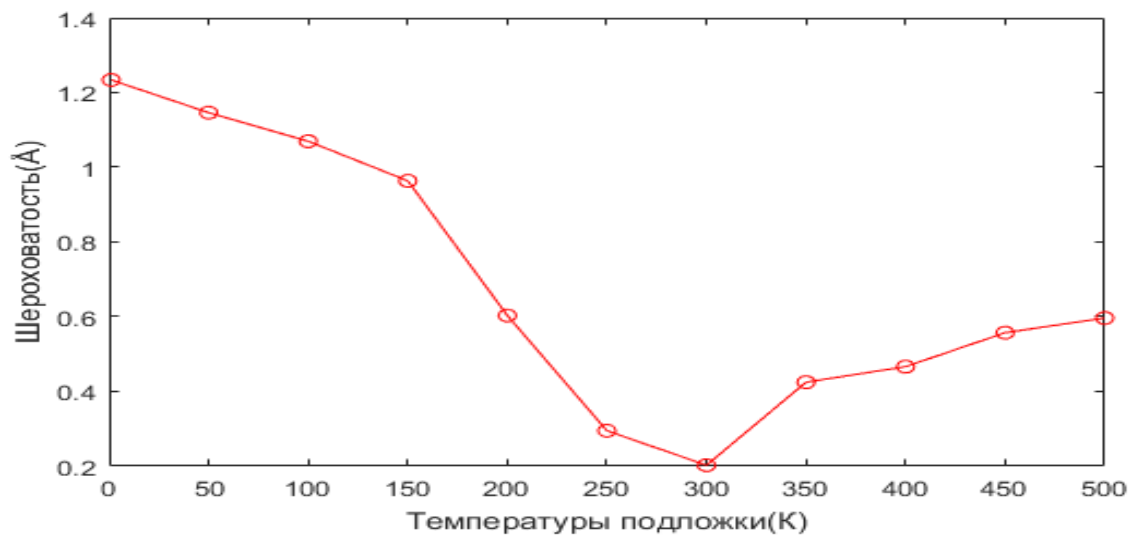


Рис 48. Изменение шероховатости поверхности в зависимости от температуры подложки

Как видно из рисунка, увеличение температура подложки от 0 до 300 К значительно снижает шероховатость никеля на медной подложке.

При увеличении температуры подложки выше 300К шероховатость повышается.

ГЛАВА 4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

4.1 Организация и планирование работ

В процессе поиска источников финансирования для проведения научного исследования и коммерциализации его результатов, оценка коммерческой ценности работы является необходимым условием. При этом разработчики должны представить настоящее состояние и перспективы проводимых ими научных исследований. Помимо превышения технических параметров над предыдущими разработками необходимо понимать коммерческую привлекательность научного исследования.

Целью раздела «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» является проектирование и создание конкурента способных разработок, технологий, отвечающих современным требованиям в области ресурсоэффективности и ресурсосбережения.

В следующей таблице 4.1 перечислены люди и имена, вовлеченные в работу.

Таблица 4.1 Участники проекта

№ раб.	Исполнители	Имя
1	Научный руководитель (НР)	Чистякова Надежда Владимировна
2	Студент-дипломник (СД)	Ляо Цзицин

При проведении исследований в выпускной работе необходимо строить рабочие группы для того, что достигнуть и выполнить конкретную цель. Для разных видов работ установите соответствующую должность исполнителя.

Таблица 4.2 Перечень работ и продолжительность их выполнения

Этапы работы	Исполнители	Загрузка исполнителей
Постановка целей и задач, получение исходных данных	НР	НР – 100%
Составление и утверждение ТЗ	НР	НР – 100%
Определите тему и обсудите фактическое применение, связанное с темой.	НР, СД	НР – 50% И – 100%
Разработать экспериментальный план и график	НР, СД	НР – 100% И – 30%
Обсуждение литературы	НР, СД	НР – 30% И – 100%
Моделирование процесса осаждения	НР, СД	НР – 50% И – 100%
Извлечение данных из результатов моделирования	НР	НР – 10% И – 100%
Проанализируйте данные	НР, СД	НР – 20% И – 100%
Оформление расчетно-пояснительной записки	НР, СД	НР – 40% И – 80%
Оформление графического материала	НР, СД	НР – 50% И – 80%
Подведение итогов	НР,	НР – 60% И – 100%

4.1.1 Продолжительность этапов работ

Существует два способа расчета продолжительности этапа работы.

Первый метод - это технология и экономика: этот метод применим к полностью разработанной нормативно-правовой базе для трудоемкости процесса планирования, что, в свою очередь, обусловлено их высокой воспроизводимостью в стабильной среде. Поскольку подрядчики часто не имеют соответствующих стандартов, мы отказываемся от использования этого метода.

Второй метод - опытно-статистический метод, который может быть реализован двумя способами: 1) аналоговый, 2) экспертный. Аналоговый метод возможен только при наличии устаревшего симулятора в поле зрения исполнителя. В большинстве случаев его можно применять только локально - для отдельных элементов (этап работы). Так что выбирайте экспертный метод для оценки. Экспертные методы пригодны для использования при отсутствии информационных ресурсов, а эксперты в конкретных предметных областях проводят необходимые количественные оценки на основе своего профессионального опыта.

Рассчитайте время, необходимое для каждого шага работы, по следующей формуле:

$$t_{\text{ож}} = \frac{t_{\text{min}} + 4t_{\text{prob}} + t_{\text{max}}}{6} \quad (4,1)$$

где t_{min} – минимальная продолжительность работы, дн.;

t_{max} – максимальная продолжительность работы, дн.;

t_{prob} – наиболее вероятная продолжительность работы, дн.

$$T_{рд} = \frac{t_{ож}}{K_{вн}} \cdot K_{д} \quad (4.2)$$

где $t_{ож}$ – продолжительность работы, дн.;

$K_{вн}$ – коэффициент выполнения работ, $K_{вн} = 1,2$;

$K_{д}$ – коэффициент, учитывающий дополнительное время на компенсацию непредвиденных задержек и согласование работ, $K_{д} = 1,1$

Расчет продолжительности этапа в календарных днях ведется по формуле:

$$T_{кд} = T_{рд} \cdot T_{к} \quad (4,3)$$

где $T_{кд}$ – продолжительность выполнения этапа в календарных днях;

$T_{к}$ – коэффициент календарности, решение по формуле:

$$T_{к} = \frac{T_{кал}}{T_{кал} - T_{вд} - T_{пд}} = \frac{365}{365 - 52 - 14} = 1,22 \quad (4,4)$$

где $T_{кал}$ – календарные дни ($T_{кал} = 365$);

$T_{вд}$ – выходные дни по кадровым вопросам. Вопросы применения ст. 111 ТК РФ, ($T_{вд} = 52$);

$T_{пд}$ – праздничные дни по кадровым вопросам. Вопросы применения ст. 112 ТК РФ, ($T_{пд} = 14$).

Рассчитайте время, необходимое для работы на каждом этапе из таблицы 4.2, и сделайте следующие выводы:

Этап	Исполнители	Продолжительность работ, дни			Трудоемкость работ по исполнителям чел.- дн.			
					$T_{РД}$		$T_{КД}$	
		t_{min}	t_{max}	$t_{ож}$	НР	И	НР	И
1	2	3	4	5	6	7	8	9
Постановка целей и задач, получение исходных данных	НР	2	4	2.8	2.566	-	3.131	-
Составление и утверждение ТЗ	НР	3	6	4.2	3.85	-	4.697	-
Определите тему и обсудите фактическое применение, связанное с темой.	НР, СД	7	10	8.2	3.758	7.516	4.585	9.170
Разработать экспериментальный план и график	НР, СД	3	4	3.4	3.116	0.936	3.802	1.140
Обсуждение литературы	НР, СД	2	3	2.4	0.66	2.2	0.805	2.684
Моделирование процесса осаждения	НР, СД	15	30	20.83	9.54	19.09	11.45	22.90
Извлечение данных из результатов моделирования	НР, СД	4	10	6.4	0.586	5.866	0.715	7.157
Проанализируйте данные	НР, СД	4	8	6	1.1	5.5	1.32	6.6
Оформление расчетно-пояснительной записки	НР, СД	3	6	4.83	1.77	3.54	2.124	4.248
Оформление графического материала	НР, СД	10	15	12	5.5	8.8	6.6	10.56
Подведение итогов	НР, СД	5	6	5.4	2.97	4.95	3.56	5.94
Итого:				65.43	30.36	48.29	31.33	58.44

Этап	НР	И	Март			Апрель			Май			Июнь		
			10	20	30	40	50	60	70	80	90	100	110	120
1	3.13 1	-												
2	4.69 7	-												
3	4.58 5	9.170												
4	3.80 2	1.140												
5	0.80 5	2.684												
6	11.4 5	22.90												
7	0.71 5	7.157												
8	1.32	6.6												
9	2.12 4	4.248												
10	6.6	10.56												
11	3.56	5.94												

Таблицы 4.3 Трудозатраты на выполнение проекта

НР – ; И – 

4.2 Расчет сметы затрат на выполнение проекта

Стоимость создания проекта включает в себя все затраты, необходимые для реализации каждой из задач, которые составляют эту разработку. Расчет сметной стоимости ее выполнения производится по следующим статьям затрат: материалы и покупные изделия; заработная плата; социальный налог; расходы на электроэнергию (без освещения); амортизационные отчисления; командировочные расходы; оплата услуг связи.

4.2.1 Расчет затрат на материалы

Во-первых, расходы включают стоимость электроэнергии, стоимость сети и стоимость черновика. Рассчитать стоимость на основе среднесуточного рабочего времени.

Таблицы 4.4 Расчет затрат на материалы

Наименование	Единица измерения	Количество	Цена за ед., руб.	Затраты на материалы, (Зм), руб.
Бумага	Лис.	150	2	300
Интернет	месяц	4	350	1400
Ручка	Шт.	3	20	60
Тетрадь	Шт.	5	20	100
Итого				1860

+ процент 5% = 1953

4.2.2 Расчет заработной платы

$$ЗП_{дн-т} = \frac{МО}{\frac{298}{12}} = \frac{МО}{24,83}$$

Расчеты затрат на полную заработную плату приведены в таблице 5.6. Затраты времени по каждому исполнителю в рабочих днях с округлением до целого взяты из таблицы 5.2. Для учета в ее составе премий, дополнительной зарплаты и районной надбавки используется следующий ряд коэффициентов: $K_{ПР} = 1,1$; $K_{доп.ЗП} = 1,188$; $K_p =$

1,3. Таким образом, для перехода от тарифной (базовой) суммы заработка исполнителя, связанной с участием в проекте, к соответствующему полному заработку (зарплатной части сметы) необходимо первую умножить на интегральный коэффициент $K_n = 1,1 * 1,188 * 1,3 = 1,699$. Вышеуказанное значение $K_{\text{доп.ЗП}}$ применяется при шестидневной рабочей неделе, при пятидневной оно равно 1,113, соответственно в этом случае $K_n = 1,62$.

Таблицы 4.5 Затраты на заработную плату

Исполнитель	Оклад, руб./мес.	Среднедневная ставка, руб./раб.день	Затраты времени, раб.дни	Коэффициент	Фонд з/платы, руб.
НР	26624	887,4	74	1,699	106381,5
СД	15 470	641,8	74	1,62	76938,9
Итого:					183320,5

4.2.3 Расчет затрат на социальный налог

Затраты на единый социальный налог (ЕСН), включающий в себя отчисления в пенсионный фонд, на социальное и медицинское страхование, составляют 30 % от полной заработной платы по проекту, т.е. $C_{\text{соц.}} = C_{\text{зп}} * 0,3$. Итак, в нашем случае $C_{\text{соц.}} = 183320,5 * 0,3 = 54996,1$ руб.

4.2.4 Расчет затрат на электроэнергию

Накладные расходы учитывают прочие затраты организации, не попавшие в предыдущие статьи расходов: печать и ксерокопирование материалов исследования, оплата услуг связи, электроэнергии, почтовые и телеграфные расходы, размножение материалов и т.д. В нашем случае подсчитаем затраты электроэнерг. Одноставочный тариф на электроэнергию 5,748 руб./кВт.час (в ТПУ).

Результаты расчета нормы амортизации в таблице 4.7

Таблицы 4.7 - Затраты на электроэнергию

№	Наименование оборудования	Мощно сть, кВт/час	Время эксплуата ции, час	Расход электроэнер гии, руб.
---	------------------------------	--------------------------	--------------------------------	------------------------------------

11.	Компьютер	0,7	289	1162.82
	Итого			1162.82

4.2.5 Расчет амортизационных расходов

В учете затрат учитывается не только счет за электроэнергию оборудования, но и амортизация оборудования. Используется формула.

$$C_{AM} = \frac{H_A * Ц_{ОБ} * t_{рф} * n}{F_D}$$

где H_A – годовая норма амортизации; ($H_A=12,5\%$ по приложению 1)

$Ц_{ОБ}$ – балансовая стоимость единицы оборудования с учетом ТЗР.

F_D – действительный годовой фонд времени работы соответствующего оборудования. ($301*24=2400$ ч)

$t_{рф}$ – фактическое время работы оборудования в ходе выполнения проекта, задается исполнителем проекта;

n – число задействованных однотипных единиц оборудования.

Результаты расчета нормы амортизации в таблице 4.7

Таблицы 4.7

№	Наименование оборудования	Количество (n).	Цена единицы оборудования, руб ($Ц_{ОБ}$)	Общая стоимость оборудования, руб.	Время работы $t_{рф}$ (ч)	Амортизация руб
4.	Компьютер	2	70000	140000	289	700.02
	Итого			140000		700.02

4.2.6 Расчет прочих расходов

Пункт «Прочие расходы» отражает стоимость выполненного проекта, которые не учтены в предыдущих статьях. Они должны равняться 10% всех предыдущих затрат, т.е.

$$С_{проч.} = (С_{мат} + С_{зп} + С_{соц} + С_{эл.} + С_{ам} + С_{нр}) \cdot 0,1$$

$$С_{проч.} = (4560 + 183320,5 + 54996,1 + 3218,88 + 2140) \cdot 0,1 = 24669,6 \text{руб.}$$

4.2.7 Полная стоимость исследования

Консолидировать и суммировать расходы по вышеуказанным разделам. Все затраты на этот эксперимент представлены в таблице 5.8 ниже.

Таблицы 4.8 Смета затрат на разработку проекта

Статья затрат	Условное обозначение	Сумма, руб.
Материалы и покупные изделия	$C_{\text{мат}}$	1953
Основная заработная плата	$C_{\text{зп}}$	183320,5
Отчисления в социальные фонды	$C_{\text{соц}}$	54996,1
Расходы на электроэнергию	$C_{\text{эл.}}$	1162.82
Амортизационные отчисления	$C_{\text{ам}}$	700.02
Прочие расходы	$C_{\text{проч}}$	24669,6
Итого:		242132,44

Исследование стоило всего 242132,44 рублей.

4.2.8 Экономическая эффективность

Этот эксперимент не имеет промышленные значения, предназначено только для изучения защиты материалов из сплава циркония в ядерных реакторах. Следовательно, оценка его экономической эффективности невозможна.

Всего бюджет составил 242132,44 руб. Данная оценка затрат необходима, чтобы представлять финансовое состояние и перспективы проводимых научных исследований.

ГЛАВА 5. Социальная ответственность

5.1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности.

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

Конструкция ПЭВМ должна обеспечивать возможность поворота корпуса в горизонтальной и вертикальной плоскости с фиксацией в заданном положении для обеспечения фронтального наблюдения экрана ВДТ. Дизайн ПЭВМ должен предусматривать окраску корпуса в спокойные мягкие тона с диффузным рассеиванием света. Корпус ПЭВМ, клавиатура и другие блоки и устройства ПЭВМ должны иметь матовую поверхность с коэффициентом отражения 0,4 - 0,6 и не иметь блестящих деталей, способных создавать блики. Конструкция ВДТ должна предусматривать регулирование яркости и контрастности.

Минимальная рабочая зона на пользователя составляет 4,5 м².

Компьютер должен быть заземлен. Рабочие места с компьютерами должны размещаться таким образом, чтобы расстояние от экрана одного видеомонитора до тыла другого было не менее 2м, а расстояние между боковыми поверхностями видеомониторов - не менее 1,2м.

Рабочие столы следует размещать таким образом, чтобы видеодисплейные терминалы были ориентированы боковой стороной к световым проемам, чтобы естественный свет падал преимущественно слева.

Оконные проемы в помещениях, где используются персональные компьютеры, должны быть оборудованы регулируемыми устройствами типа: жалюзи, занавесей, внешних козырьков и др. Искусственное освещение в помещениях для эксплуатации ПЭВМ должно осуществляться системой общего равномерного освещения. В производственных и административно-общественных помещениях, в случаях преимущественной работы с документами, следует применять системы комбинированного освещения (к общему освещению дополнительно устанавливаются светильники местного освещения,

предназначенные для освещения зоны расположения документов). Экран видеомонитора должен находиться от глаз пользователя на расстоянии 600 - 700 мм, но не ближе 500 мм с учетом размеров алфавитно-цифровых знаков и символов.

Рабочая мебель для пользователей компьютерной техникой должна отвечать следующим требованиям:

- высота рабочей поверхности стола должна регулироваться в пределах 680-800мм; при отсутствии такой возможности высота рабочей поверхности стола должна составлять 725мм;
- рабочий стол должен иметь пространство для ног высотой не менее 600 мм, шириной - не менее 500 мм, глубиной на уровне колен - не менее 450 мм и на уровне вытянутых ног - не менее 650 мм;
- рабочий стул (кресло) должен быть подъемно-поворотным, регулируемым по высоте и углам наклона сиденья и спинки, а также расстоянию спинки от переднего края сиденья, при этом регулировка каждого параметра должна быть независимой, легко осуществляемой и иметь надежную фиксацию;
- рабочее место должно быть оборудовано подставкой для ног, имеющей ширину не менее 300мм, глубину не менее 400мм, регулировку по высоте в пределах до 150мм и по углу наклона опорной поверхности подставки до 20°; поверхность подставки должна быть рифленой и иметь по переднему краю бортик высотой 10мм;
- клавиатуру следует располагать на поверхности стола на расстоянии 100 - 300 мм от края, обращенного к пользователю, или на специальной, регулируемой по высоте рабочей поверхности, отделенной от основной столешницы.

В помещениях, оборудованных ПЭВМ, проводится ежедневная влажная уборка и систематическое проветривание после каждого часа работы на ПЭВМ. (Типовая инструкция ТОИ Р-45-084-01).

5.1.1. Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя.

а) Отрегулировать освещение на рабочем месте, убедиться в отсутствии

бликов на экране.

- b) Проверить правильность подключения оборудования к электросети.
- c) Проверить исправность проводов питания и отсутствие оголенных участков проводов.
- d) Убедиться в наличии заземления системного блока, монитора и защитного экрана.
- e) Протереть антистатической салфеткой поверхность экрана монитора и защитного экрана.
- f) Проверить правильность установки стола, стула, подставки для ног, пюпитра, угла наклона экрана, положение клавиатуры, положение «мыши» на специальном коврикe, при необходимости произвести регулировку рабочего стола и кресла, а также расположение элементов компьютера в соответствии с требованиями эргономики и в целях исключения неудобных поз и длительных напряжений тела.

5.2. Производственная безопасность.

5.2.1. Анализ вредных и опасных факторов, которые может создать объект исследования.

Моя работа состоит в том, чтобы моделировать процесс распыления с помощью компьютера. Потому что все делается с помощью компьютера. Так что объект исследования нет вредных и опасных факторов.

5.2.2. Анализ вредных и опасных факторов, которые могут возникнуть на рабочем месте при проведении исследований.

Таблица 5.1 - Возможные опасные и вредные факторы

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015)	Этапы работ			Нормативные документы
	Разработка	Изготовление	Эксплуатация	
1.Отклонение показателей микроклимата	+	+	+	Приводятся нормативные документы, которые регламентируют действие каждого выявленного фактора с указанием ссылки на список литературы. Например, требования к освещению устанавливаются СП 52.13330.2016 Естественное и искусственное освещение. Актуализированная редакция СНиП 23-05-95*[59].
2. Превышение уровня шума	+	+	+	
3.Отсутствие или недостаток естественного света				
4.Недостаточная освещенность рабочей зоны				
5.Повышенное значение напряжения в электрической цепи, замыкание которой может произойти через тело человека	+	+	+	

а) Микроклимат

Воздушная среда характеризуется воздействием на человека микроклимата, включающего в себя температуру, относительную влажность, скорость движения воздуха, атмосферное давление, тепловую радиацию нагретых предметов, солнца, и, кроме того, наличием в воздухе вредных веществ.

Неблагоприятное сочетание параметров микроклимата может вызвать перенапряжение механизмов терморегуляции, перегрев или переохлаждение организма. Организм человека начинает перегреваться или переохлаждаться, если параметры внешней среды отклоняются от комфортных условий.

В производственных помещениях, в которых работа с использованием ПЭВМ является основной (диспетчерские, операторские, расчетные, кабины и посты управления, залы вычислительной техники и др.) и связана с нервно-

эмоциональным напряжением, должны обеспечиваться оптимальные параметры микроклимата для категории работа по затрачиваемой работниками энергии (физические энергозатраты меньше 139 Вт). Санитарными нормами микроклимата производственных помещений СанПин 2.2.4.548-96 установлены оптимальные и допустимые нормы температуры, относительной влажности и скорости движения воздуха с учетом тяжести выполняемой работы и периодов года.

Таблица 5.2– Оптимальные показатели микроклимата на рабочих местах производственных помещений

П ериод года	Темпер атура воздуха, °С	Температ ура поверхностей, °С	Относит ельная влажность воздуха, φ%	Скорос ть движения воздуха, м/с
Холо дный	22-24	21-25	40-60	0,1
Тепл ый	23-25	2 2-26		0,1

Таблица 5.3– Допустимые показатели микроклимата на рабочих местах производственных помещений

Период года	Температура воздуха, °С		Температура поверхности t°С	Отн. влажность воздуха, φ%	Скорость движения воздуха, м/с	
	Диапазон ниже оптимальных величин t° _{опт}	Диапазон выше оптимальных величин t° _{опт}			Если t° < t° _{опт}	Если t° > t° _{опт}
Холодный	20 - 22	24- 25	19- 26	15 - 75	0,1	0,1
Теплый	21- 23	25- 28	20- 29	15 - 75	0,1	0,2

К мероприятиям по оздоровлению воздушной среды в производственном помещении относятся: правильная организация вентиляции и кондиционирования воздуха, отопление помещений. Вентиляция может осуществляться естественным и механическим путём. Система отопления должна обеспечивать достаточное, постоянное и равномерное нагревание воздуха. В помещениях с повышенными требованиями к чистоте воздуха должно

использоваться водяное отопление. Параметры микроклимата в используемой лаборатории регулируются системой центрального отопления, и имеют следующие значения: влажность – 40%, скорость движения воздуха – 0,1 м/с, температура летом – от 20 до 25°C, зимой – от 13 до 15°C. В лаборатории осуществляется естественная вентиляция. Воздух поступает и удаляется через щели, окна, двери.

б) Производственный шум

Всякий нежелательный в данный момент звук человек воспринимает как шум. Машины и механизмы, используемые на производстве, являются источниками звуков различной частоты и интенсивности, изменяющихся во времени. Нормирование шума призвано предотвратить нарушение слуха и снижение работоспособности и производительности труда человека. Продолжительное воздействие шума может привести к шумовой болезни – заболеванию организма, которое сопровождается поражением органов слуха и центральной нервной системы. Также шум вызывает головную боль, раздражительность, быструю утомляемость, потерю слуха, повышение артериального давления.

Соответственно санитарным нормам СН 2.2.4/2.1.8.562-96, предельно допустимые уровни звукового давления, уровни звука и эквивалентные уровни звука для программистов вычислительных машин в лабораториях для теоретических работ и обработки данных представлены в таблице 19.

Таблица 5.4 – Допустимые уровни звукового давления

Уровни звукового давления, дБ, в октавных полосах со среднегеометрическими частотами	Полоса частот, Гц	31,5	63	125	250	500	1000	2000	4000	8000
	Уровни звука, дБ	86	71	61	54	49	45	42	40	38

Уровни звука и эквивалентные уровни звука (дБА)	50
---	----

При выполнении работы на ПЭВМ уровень шума на рабочем месте находится в норме (меньше 50 дБА), так как в помещении источником звуков является только компьютер, который не нарушает слух человека.

с) Электромагнитные поля

Дипломная работа была выполнена с использованием персональных компьютеров, которые являются источниками электромагнитного излучения. Экран, видео-кабеля и системные блоки производят электромагнитное излучение. Длительное воздействие электромагнитных полей может вызвать серьезную нагрузку на зрение, нарушение в центральной нервной и сердечно-сосудистых системах. Действие электромагнитных полей может привести к головной боли, ухудшениям памяти, расстройства сна, депрессии, слабости, снижению частоты пульса. Отрицательное воздействие электромагнитного поля возрастает с повышением частоты, интенсивности излучения, продолжительности облучения и также размера облучаемой поверхности тела.

Согласно санитарно-эпидемиологическим правилам оценку электромагнитных полей осуществляют отдельно по напряженности электрического поля и напряженности магнитного поля. Для электромагнитных полей промышленной частоты 50 Гц предельно допустимый уровень напряженности электрического поля на рабочем месте – 5 кВ/м, когда напряженность электрического поля превышает 5 кВ/м, время пребывания в данном поле имеет ограничение. При более высокой напряженности (≥ 25 кВ/м) пребывание в электромагнитном поле должно производиться со средствами защиты. В случае магнитного поля предельно допустимый уровень определяется в зависимости от того, является излучение общим или локальным.

Таблица 5.5 – предельно допустимые уровни воздействия периодического магнитного поля частотой 50 Гц

Время пребывания (час)	Допустимые уровни магнитного поля Н [А/м] /В [мкТл] при воздействии	
	общем	локальном
1	1600/2000	6400 / 8000
2	800/1000	300 / 4000
4	400/500	1600 / 2000
8	80/100	800 / 1000

d) Освещенность

Рациональное освещение помещений и рабочих мест – одно из важнейших условий создания благоприятных и безопасных условий труда. Нерационально организованное освещение может, кроме того явиться причиной травматизма: плохо освещенные опасные зоны, слепящие источник и света и блики от них, резкие тени и пульсации освещенности ухудшают видимость и могут вызвать неадекватное восприятие наблюдаемого объекта. Оптимальные параметры освещения способствуют повышению работоспособности и оказывают положительное влияние на психологическое состояние человека.

В зависимости от источника света освещение может быть трех видов: естественное, искусственное и совмещенное (смешанное).

Основные требования и значения нормируемой освещённости рабочих поверхностей изложены в СНиП 23-05-95.

Таблица 5.6 – Нормы освещённости на рабочих местах
производственных помещений при искусственном освещении (по
СНиП 23-05-95)

Характеристики зрительной работы	Наименьший или эквивалентный размер объекта	Разряд зрительной работы	Подразряд зрительной работы	Контраст объекта с фоном	Характеристика фона	Искусственное освещение		
						Освещённость, лк		
						При системе комбинированного освещения		При системе общего освещения
						всего	в том числе от общего	
Высокой точности	От 0,30 до 0,50	III	а	Малый	Тёмный	2000 1500	200 200	500 400
			б	Малый Средний	Средний Тёмный	1000 750	200 200	300 200
			в	Малый Средний Большой	Светлый Средний Тёмный	750 600	200 200	300 200
			г	Средний Большой «	Светлый « Средний й	400	200	200

Расчёт общего равномерного искусственного освещения горизонтальной рабочей поверхности выполняется методом коэффициента светового потока, учитывающим отраженный от потолка и стен световой поток. Длина помещения $A = 6$ м; ширина $B = 5$ м; высота $H = 3$ м; высота рабочей поверхности над полом $h_{pn} = 0,8$ м.

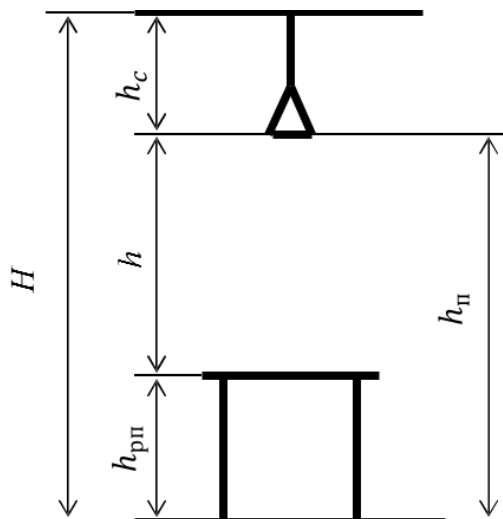


Рис. 49. Основные расчетные параметры Площадь помещения:

$$S = A \cdot B = 6 \cdot 5 = 30 \text{ м}^2.$$

Для искусственного освещения наиболее распространено применяются люминесцентные лампы, так как энергетически более экономичные и обладающие большим сроком службы. В помещении используют лампы типа ЛД с мощностью по 40 Вт и световым потоком 2300 Лм, двухламповые светильники типа ОД–2–40. Длина светильника – 1230 мм, ширина – 266 мм, высота – 158 мм.

Критерий оптимальности расположения светильников – величина λ , для люминесцентных светильников без защитной решетки $\lambda = 1,4$. Расстояние светильников от перекрытия $h_c = 0,158$ м.

Высота светильника над рабочей поверхностью определяется по формуле:

$$h = H - h_{\text{рп}} - h_c = 3 - 0,158 = 2,042 \text{ м}$$

Расстояние между соседними светильниками определяется по формуле:

$$L = \lambda * h = 1,4 * 2,042 = 2,859 \text{ м}$$

Расстояние от рядов светильников до стены определяется по формуле:

$$l = \frac{L}{3} = 0,953 \text{ м}$$

Число рядов светильников в помещении:

$$n_{\text{рп}} = \frac{B - \frac{2}{3} L}{L} + 1 = \frac{5 - \frac{2}{3} * 2,859}{2,859} + 1 \approx 2$$

Число светильников в ряду:

$$n_{\text{CB}} = \frac{A - \frac{2}{3}L}{l_{\text{CB}} + 0,5} = \frac{6 - \frac{2}{3} * 2,859}{1,23 + 0,5} \approx 2$$

Количество ламп, используемых в помещении:

$$N = n_{\text{ряд}} \cdot n_{\text{св}} \cdot 4 = 2 \cdot 2 \cdot 4 = 8$$

На рис. 50 изображен план помещения и размещения светильников с люминесцентными лампами.

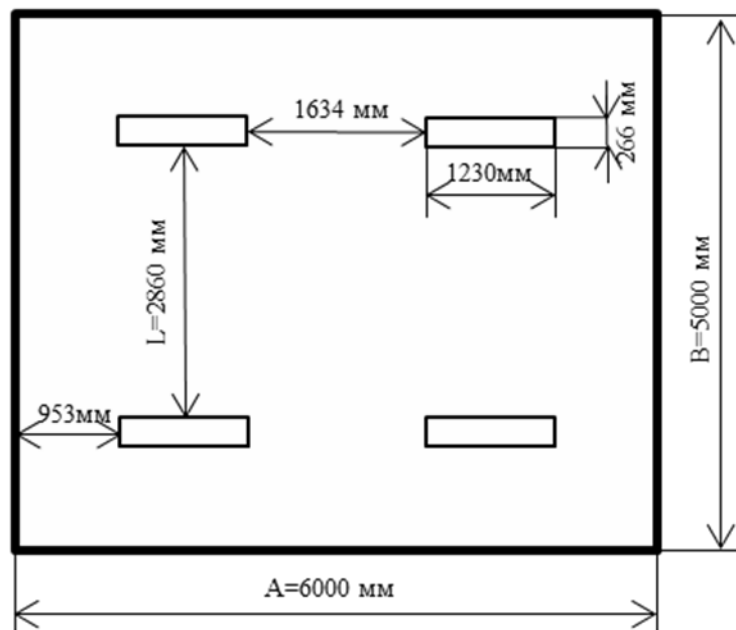


Рис.50. План помещения и размещения светильников с люминесцентными лампами.

Индекс помещения определяется по формуле:

$$i = \frac{S}{h(A+B)} = \frac{30}{2,042 \cdot (6+5)} = 1,34$$

Коэффициент использования светового потока для светильников с люминесцентными лампами при коэффициенте отражения потолка $\rho_{\text{п}} = 70 \%$, коэффициенте отражения стен $\rho_{\text{ст}} = 50 \%$, и индексе помещения $i = 1,34$ равен $\eta = 0,54$.

Потребный световой поток одной люминесцентной лампы светильника определяется по формуле:

$$\Phi_n = \frac{E \cdot S \cdot K_3 \cdot Z}{N \cdot \eta}$$

здесь: E – нормативная освещённость, лк; S – площадь освещаемого помещения, m^2 ; K_3 – коэффициент запаса, учитывающий загрязнение светильника; Z – коэффициент неравномерности освещения; N – число ламп в помещении; η – коэффициент использования светового потока.

$$\Phi_n = \frac{E \cdot S \cdot K_3 \cdot Z}{N \cdot \eta} = \frac{200 \cdot 30 \cdot 1,5 \cdot 1,1}{8 \cdot 0,54} = 2292$$

Делаем проверку выполнения условия:

$$|-10\% \leq \frac{\phi_{\text{станд}} - \phi_{\text{расч}}}{\phi_{\text{станд}}} \cdot 100\% \leq 20\%$$

Получаем:

$$\frac{\phi_{\text{станд}} - \phi_{\text{расч}}}{\phi_{\text{станд}}} \cdot 100\% = \frac{2300 - 2292}{2300} \cdot 100\% = 0,35\%$$

е) Электробезопасность

Электробезопасность представляет собой систему организационных и технических мероприятий и средств, обеспечивающих защиту людей от вредного и опасного воздействия электрического тока.

Воздействие электрического напряжения на человека связано с протеканием через него тока. Действие электрического тока на человека носит сложный и разнообразный характер. При замыкании электрической цепи через организм человека ток оказывает термическое, электролитическое, биологическое и механическое воздействие. Прохождение тока может вызывать

у человека раздражение и повреждение различных органов. По ГОСТ 12.1.038- 82 установлены предельно допустимые уровни напряжений прикосновения и токов, протекающих через тело человека при взаимодействии их с переменным током частотой 50 Гц, соответственно 2В и 0,3 мА.

Для характеристики воздействия переменного тока частотой 50 Гц на человека установлены три степени его воздействия и пороговые значения.

Таблица 5.7 – Пороговые значения токов

Значение порогового тока	ощутимого	неотпускающего	фибрилляционного
Переменный, 50 Гц	0,5 мА – 1,5 мА	10 мА – 15 мА	100 мА – 5 А

Электроустановки классифицируют по напряжению: с номинальным напряжением до 1000 В (помещение без повышенной опасности), до 1000 В с присутствием агрессивной среды (помещение с повышенной опасностью) и свыше 1000 В (особо опасное помещение). Лаборатория относится к помещениям без повышенной опасности поражения электрическим током, в которых отсутствуют условия, создающие повышенную или особую опасность.

5.2.3. Обоснование мероприятий по защите исследователя от действия опасных и вредных факторов.

Для проблем с шумом в помещении можно использовать следующие меры

При значениях выше допустимого уровня необходимо предусмотреть средства коллективной (СКЗ) и индивидуальной защиты (СИЗ). К СКЗ относятся: устранение причин шума или существенное его ослабление в источнике образования; изоляция источников шума от окружающей среды средствами звуко- и виброизоляции, звуко- и вибропоглощения; применение средств, снижающих шум и вибрацию на пути их распространения. К СИЗ – применение спецодежды, спецобуви и защитных средств органов слуха: противошумные наушники, беруши, антифоны.

Для электромагнитных полей можно использовать следующие методы уменьшения излучения.

Ослабление мощности электромагнитного поля достигается путем удаления источника излучения от рабочего места (экран должен находиться на расстоянии не менее 50 см от пользователя); либо путем экранирования источников излучения. Для ослабления влияния излучения от монитора персонального компьютера рекомендуется использовать защитные фильтры (экраны). В качестве индивидуальных средств защиты от электромагнитных полей промышленной частоты применяют комбинезоны, очки, спецобувь, заземляющие браслеты, заземляющие устройства, устройства для увлажнения воздуха, антиэлектростатические покрытия и пропитки, нейтрализаторы статического электричества.

Для предотвращения поражения электрическим током следует проводить следующие мероприятия:

- содержать оборудование в работоспособном состоянии и эксплуатировать его в соответствии с нормативно-техническими документами;

- своевременно проводить техническое обслуживание;

- соблюдать технику безопасности при работе с оборудованием;

- проводить инструктаж для работников

В помещении применяются следующие меры защиты от поражения электрическим током: недоступность токоведущих частей для случайного прикосновения, все токоведущие части изолированы и ограждены. Недоступность токоведущих частей достигается путем их надежной изоляции, применения защитных ограждений, расположения токоведущих частей на недоступной высоте. К СКЗ относятся заземление и разделение электрической сети с помощью трансформаторов – в результате изолированные участки сети обладают большим сопротивлением изоляции и малой емкостью проводов относительно земли, за счет чего значительно улучшаются условия безопасности. В качестве индивидуальных средств защиты от поражения электрическим током применяют диэлектрические перчатки, боты и галоши, ковры, изолирующие подставки и переносные заземления

5.3. Экологическая безопасность.

5.3.1. Анализ возможного влияния объекта исследования на окружающую среду.

Исследования моделирования осаждения мало влияет на окружающую среду. Потому что все работы выполняются на компьютере.

5.3.2. Анализ влияния процесса исследования на окружающую среду.

Черновик бумаги был использован во время исследования. Если эти макулатуры будут оставлены или сожжены, они будут непосредственно влиять на окружающую среду.

5.3.3. Обоснование мероприятий по защите окружающей среды.

Во-первых, производство бумаги способно сильно вредить окружающей среде, особенно, на первых этапах производственного процесса. В окружающую среду попадает множество токсинов (формальдегид, диоксид хлора и другие). Переработка макулатуры — значительно менее опасный для экологии процесс, в атмосферу попадает меньше вредной химии и токсинов. Согласно данным американских экологов, в процессе переработки отходов загрязнение воды и воздуха снижается на 35% и 74% соответственно.

Во-вторых, переработка вторичного пластика и бумаги снижает объем потребляемой энергии предприятиями производства. По разным оценкам, правильно организованный процесс переработки отходов позволяет сократить объем используемой электроэнергии от 40% до 65%.

В-третьих, организация процесса переработки картона, макулатуры, способствует снижению объемов вырубки лесов. По статистике, за последние несколько десятилетий человечество стало использовать больше бумаги в 4-5 раз, ежегодно мы потребляем миллионы тонн бумаги. Более трети всех вырубаемых на планете деревьев направляются на целлюлозно-бумажные фабрики, причем, только 16% из общего количества — это деревья, специально выращенные для промышленности. Переработка тонны, в зависимости от качества и типа, может сохранить от одной до двух тонн древесины.

5.4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях.

5.4.1. Анализ вероятных ЧС, которые может инициировать объект исследований.

Для субъектов исследований и исследовательских площадок единственной чрезвычайной ситуацией является пожар.

5.4.2. Анализ вероятных ЧС, которые могут возникнуть на рабочем месте при проведении исследований.

Согласно НПБ 105-03 по взрывопожарной и пожарной опасности помещения подразделяются на категории А, Б, В, Г и Д. В данном случае, работа проводилась в компьютерном классе, в котором горючие вещества и материалы находятся в твердом состоянии, поэтому помещение относится к категории В. Возникновение пожара при работе с электронной аппаратурой может быть по причинам электрического характера, в том числе: короткое замыкание, перегрузки по току, статическое электричество и т. д.

5.4.3. Обоснование мероприятий по предотвращению ЧС и разработка порядка действия в случае возникновения ЧС.

Для устранения причин возникновения и локализации пожаров в помещении лаборатории должны проводиться следующие мероприятия:

- использование только исправного оборудования;
- проведение периодических инструктажей по пожарной безопасности;
- отключение электрооборудования, освещения и электропитания при предполагаемом отсутствии обслуживающего персонала или по окончании работ;
- содержание путей и проходов для эвакуации людей в свободном состоянии.

Для локализации или ликвидации загорания на начальной стадии используются первичные средства пожаротушения. Первичные средства пожаротушения обычно применяют до прибытия пожарной команды.

Первичные средства пожаротушения включают в себя пожарные рукава, пожарный кран, переносные и передвижные огнетушители. В зависимости от

применяемого огнетушащего вещества огнетушители разделяются: водные, пенные, газовые, порошковые и комбинированные:

Огнетушитель воздушно-пенный передвижной ОВП предназначен для тушения загораний и начинающихся пожаров, различных веществ и материалов, за исключением щелочных металлов, веществ, горение которых происходит без доступа воздуха, электроустановок находящихся под напряжением.

Углекислотные огнетушители применяются для тушения возгораний различных веществ и материалов и заряжены сжиженным углекислотным газом. Углекислота не проводит ток, поэтому углекислотные огнетушители можно применять для тушения пожаров в электроустановках, находящихся под напряжением не более 10000В, с расстояния не менее одного метра.

Порошковые огнетушители предназначены для тушения горящих твердых веществ и электроустановок под напряжением до 1000 В. Кроме того, порошковые применяют для тушения документов.

Огнетушители следует располагать на видных местах вблизи от выходов из помещений. Размещение первичных средств пожаротушения в коридорах, переходах не должно препятствовать безопасной эвакуации людей. Здание должно соответствовать требованиям пожарной безопасности, а именно, наличие охранно-пожарной сигнализации, плана эвакуации, порошковых или углекислотных огнетушителей с поверенным клеймом, табличек с указанием направления к выходу.

При возникновении возгорания необходимо немедленно прекратить работу, выйти из программы и отключить питание компьютера позвонить в подразделение пожарной охраны по телефону 01 или 010, сообщить о случившемся руководителю подразделения и приступить к тушению огня первичными средствами пожаротушения.

На рис.51 представлен план эвакуации из лабораторий, находящихся в аудитории 401 четвертого этажа третьего корпуса ТПУ.

3. СН 2.2.4 / 2.1.8.562-96. Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории жилой застройки.

4. СанПиН 2.2.4.1191-03. Электромагнитные поля в производственных условиях

5. ГОСТ 30013-83 54 электромагнитные излучения СВЧ. Предельно допустимые уровни облучения. Требования безопасности

6. СанПиН 2.2.1 / 2.1.1.1278-03. Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещенному освещению жилых и общественных зданий.

7. СНиП 23-05-95 "Естественное и искусственное освещение"

8. ГОСТ Р 12.1.019-2009. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты.

9. ГОСТ 12.1.038-82. Система стандартов безопасности труда. Электробезопасность. Предельно допустимые значения напряжений прикосновения и токов

10. НПБ 105-03. Определение категорий помещений, зданий и наружных установок по взрывопожарной и пожарной опасности

11. ГОСТ 12.1.004-91. Пожарная безопасность. Общие требования.

12. СНиП 21-01-97. Противопожарные нормы.

12. ТОИ Р-45-084-01 Типовая инструкция по охране труда при работе на персональном компьютере (ПК, ПЭВМ)

Заключение

В работе моделируется процесс нанесения атомов меди и никеля на поверхность медной подложки.

Мы устанавливаем различные направления и энергии для налетающих атомов, чтобы изучить влияние ориентации и энергии атомов меди на процесс нанесения покрытия.

Для разных адсорбированных атомов в направлении начальной скорости они будут ускоряться при входе в поле подложки и постепенно входить в потенциальную яму после столкновения с подложкой. И когда угол составляет 0 градусов, адсорбированные атомы сначала попадают на подложку, но энергия адсорбированных атомов под углом 30 градусов в первую очередь стабильна. Когда угол составляет 30 градусов, скорость нанесения покрытия будет выше.

Увеличение энергии адсорбированных атомов не оказывает существенного влияния на процесс, с помощью которого они сталкиваются с подложкой.

Моделирование молекулярной динамики может четко моделировать процесс нанесения покрытия

Мы исследовали связь между энергией, направлением падающих атомов и температура подложки и шероховатостью поверхности.

Увеличение энергии падающего излучения от 0,1 до 7,0 эВ значительно снижает шероховатость никеля на медных поверхностях раздела.

Увеличение угла падающих атомов от 30 до 75 градусов значительно увеличивает шероховатость никеля на поверхности меди.

Увеличение угла падения атома от 0 до 30 градусов мало влияет на шероховатость поверхности.

Увеличение температура подложки от 0 до 300 К значительно снижает шероховатость никеля на медных поверхностях раздела.

Когда температура превышает 300 К, вакансии и дислокация увеличатся, поэтому шероховатость начинает расти

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Georgieva V., Saraiva M., Jehanathan N., Lebelev O., Depla D. and Bogaerts A., Sputter-deposited Mg–Al–O thin films: linking molecular dynamics simulations to experiments // Journal of Physics D: Applied Physics. 2019. Vol. 42, Iss. 6. P.065107
2. Müller K., Stress and microstructure of sputter - deposited thin films: Molecular dynamics investigations // Journal of Applied Physics. 1987. Vol. 62, Iss. 5. P. 1796-1799.
3. Игошкин А.М., Молекулярно-динамическое исследование формирования наноструктур на поверхности подложки при осаждении паров металла из газовой фазы. Дис. канд. физ. – мат. наук. - Новосибирск, 2015. -171с.,
4. Официальное руководство LAMMPS. [Электр. ресурс]. – Режим доступа: <https://lammps.sandia.gov/doc/Manual.html>
5. Учебные материалы по молекулярной динамике, Лаборатория микроструктур твердого тела, Университет науки и технологии Китая. [Электр. ресурс]. – Режим доступа: <http://micro.ustc.edu.cn/CompPhy/lecturenote/15.pdf>
6. Медный потенциал ЕАМ, созданный факультетом физики и астрономии Университета Джорджа Мейсона. [Электр. ресурс]. – Режим доступа: <https://sites.google.com/site/eampotentials/Home>
7. Zhou X. W., Wadley H. N. G. Atomistic simulations of the vapor deposition of Ni/Cu/Ni multilayers: The effects of adatom incident energy // J. Appl. Phys. 1998. Vol. 84, Iss. 4. P.2301-2315
8. Chen X., Oluwajobi AO., Characterization of Atomic Surface Roughness in Nanometric Machining Molecular Dynamics (MD) Simulations // Curr. Nanoscience. 2016. Vol. 13, Iss. 1. P.31-39.
9. Stukowski, A., Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. 2009. Vol. 18, Iss. 1. P.015012.

10. Yan C., Huang L., He X. D., Molecular dynamics simulation of the effect of incident energy on the growth of Au/Au (111) thin film [Электр. ресурс] . – Режим доступа: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.126801>
11. Nakamura H., Ito A., Molecular dynamics simulation of sputtering process of hydrogen and graphene sheets // Mole. Simu. 2007. Vol. 33, Iss. 1-2. P.121-126.
12. Brault P., Neyts E., Molecular dynamics simulations of supported metal nanocatalyst formation by plasma sputtering // ChemInform. 2015. Vol. 46, Iss. 40. P.no-no.
13. Chuang C., Zepeda-Ruiz L., Han S., Sinno T., Direct molecular dynamics simulation of Ge deposition on amorphous SiO₂ at experimentally relevant conditions // Surf. Sci. 2015. Vol. 641, P.112-120.
14. Wu B., Zhou J., Xue C. and Liu H., Molecular dynamics simulation of the deposition and annealing of NiAl film on Ni substrate // Appl. Surf. Sci. 2015. Vol. 355, P.1145-1152.
15. Chen X., Zhang J. and Zhao Y., Molecular dynamics study of the effect of substrate temperature and Ar ion assisted deposition on the deposition of amorphous TiO₂ films // Appl. Surf. Sci. 2017. Vol. 404, P.409-417.
16. Bahramian A., The effect of heat treatment on the surface structure of polyaniline nanostructured film: an experimental and molecular dynamics approach // Appl. Surf. Sci. 2014. Vol. 311, P.508–520.
17. Медно-никелевый потенциал EAM, this file was provided by Giovanni Bonny (Nuclear Materials Science Institute of SCK-CEN, Belgium) [Электр. ресурс] . – Режим доступа: <https://www.ctcms.nist.gov/potentials/system/Cu-Fe-Ni/>
18. Pailthorpe B., Mitchell D., Bordes N., Thermal diffusion in molecular dynamics simulations of thin film diamond deposition // Thin Solid Films. 1998. Vol. 332, Iss. 1-2. P.109-112.
19. Gilmore C. and Sprague J., Molecular dynamics simulations of thin film growth on Ag (100) and (111) with energetic Ag atoms // Nanostructured Materials. 1993. Vol. 2, Iss. 3. P.301-310.

20. Takano J., Takai O., Kogure Y., Doyama M., Molecular dynamics, Monte Carlo and their hybrid methods: applications to thin film growth dynamics // Thin Solid Films. 1998. Vol. 334, Iss. 1-2. P. 209-213.
21. Mae K., Molecular dynamics aided kinetic Monte Carlo simulations of thin film growth of Ag on Mo (110) with structural evolution // Surf. Sci. 2001. Vol. 482-485, P. 860-865.
22. Klaver T., Thijsse B., Molecular Dynamics simulations of Cu/Ta and Ta/Cu thin film growth // Journal of Computer-Aided Materials Design. 2003. Vol. 10, Iss. 2. P. 61-74.
23. Vasil'ev V., Chernov P., Modeling the growth of thin-film surfaces // Mathematical Models and Computer Simulations. 2012. Vol. 4, Iss. 6. P. 622-628.
24. Schneider M., Schuller I., Rahman A., Molecular-Dynamics Simulation of Thin-Film Growth // MRS Proceedings. 1986. Vol. 77.
25. Cheng Y., Lee C., Simulation of molecular dynamics associated with surface roughness on an Al thin film // Surface and Coatings Technology. 2008. Vol. 203, Iss. 5-7. P. 918-921.
26. Takano, J., Takai, O., Kogure, Y., Doyama, M. Molecular dynamics, Monte Carlo and their hybrid methods: applications to thin film growth dynamics // Thin Solid Films. 1998. Vol. 334, Iss. 1-2. P. 209-213.
27. Sasajima Y., Suzuki K., Ozawa S., Yamamoto R., Molecular Dynamics Study of the Thin Film Formation Process // Molecular Simulation. 1991. Vol. 6, Iss. 4-6. P. 333-342.
28. Zhou, X. and Wadley, H., Atomistic simulation of the vapor deposition of Ni/Cu/Ni multilayers: Incident adatom angle effects / Journal of Applied Physics. 2000. Vol. 87, Iss. 1. P. 553-563.
29. Zhang, P., Zheng, X., Wu, S., Liu, J. and He, D., Kinetic Monte Carlo simulation of Cu thin film growth / Vacuum. 2004. Vol. 72, Iss. 4. P. 405-410.
30. Son, J., Park, M. and Rhee, S. Growth rate and microstructure of copper thin films deposited with metal-organic chemical vapor deposition from

hexafluoroacetylacetonate copper(I) allyltrimethylsilane / Thin Solid Films. 1998. Vol.335, Iss.1-2. P.229-236.

- 31.Xiao-Ping Z., Pei-Feng Z, Jun L., Computer simulation of thin-film epitaxy growth / Acta Phys. Sin., 2004. Vol.53, Iss.8. P.2687-2693.