

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

Институт: Физико-технический
Направление подготовки: Техническая физика
Кафедра: Экспериментальной физики

МАГИСТЕРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
Исследование процессов распыления и ионной имплантации при осаждении тонких плёнок оксидов и нитридов титана методом реактивного магнетронного напыления

УДК 539.216.2:621.793.7:669.295.065

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОДМ51	Шурен Жазира Бакытбеккызы		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент каф. ЭФ ФТИ ТПУ	Евдокимов К.Е.	к.ф.-м.н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент каф.менед. ИСГТ	Рыжакина Т.Г.	к.э.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент кафедры ПФ	Гоголева Т.С.	к.ф.-м.н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Зав. кафедрой	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
ЭФ ФТИ	Кривобоков В.П.	д.ф.-м.н., профессор		

Томск – 2017 г.

**Результаты обучения магистров
направления 16.04.01 «Техническая физика»
(профиль «Пучковые и плазменные технологии»)**

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)	Требования ФГОС, критериев и/или заинтересованных сторон
<i>Профессиональные компетенции</i>		
Р1	Демонстрировать и использовать теоретические и практические знания фундаментальных и прикладных наук, составляющих основу современной технической физики, вскрывать физическую сущность проблем, возникающих при проектировании и реализации радиационных и плазменных технологий.	Требования ФГОС (ОПК-2). Критерий 5 АИОР, согласованный с требованиями международных стандартов EUR-ACE и FEANI
Р2	Профессионально эксплуатировать современное научное и технологическое оборудование и приборы в процессе создания и реализации радиационных и плазменных технологий	Требования ФГОС (ОПК-1). Критерий 5 АИОР, согласованный с требованиями международных стандартов EUR-ACE и FEANI
Р3	Заниматься научно-исследовательской деятельностью в различных отраслях технической физики, связанных с современными радиационными и пучково-плазменными технологиями, критически анализировать современные проблемы, ставить задачи и разрабатывать программу исследований, выбирать адекватные методы решения задач, интерпретировать, представлять и применять полученные результаты	Требования ФГОС (ОПК-5, ПК-5, ПК- 8). Критерий 5 АИОР, согласованный с требованиями международных стандартов EUR-ACE и FEANI
Р4	Самостоятельно выполнять физико-технические научные исследования для прогнозирования результатов воздействия различных радиационных и плазменных потоков на вещество, а также оптимизации параметров радиационных и пучково-плазменных технологий, с использованием современных физико-математических методов, стандартных и специально разработанных инструментальных и программных средств.	Требования ФГОС (ПК-6, 7). Критерий 5 АИОР, согласованный с требованиями международных стандартов EUR-ACE и FEANI
Р5	Разрабатывать и оптимизировать современные пучковые и плазменные технологии с учетом экономических и экологических требований, проводить наладку и испытания технологических установок и аналитического оборудования, решать прикладные инженерно-технические и технико-экономические задачи с помощью пакетов прикладных программ.	Требования ФГОС (ПК-12,13,14). Критерий 5 АИОР, согласованный с требованиями международных стандартов EUR-ACE и FEANI
Р6	Участвовать в проектно-конструкторской деятельности, формулировать технические задания, составлять техническую документацию, разрабатывать и использовать средства автоматизации, анализировать варианты проектных, конструкторских и технологических решений, разрабатывать проекты и проектную документацию для создания оборудования, реализующего пучковые и плазменные технологии.	Требования ФГОС (ПК-15, 16). Критерий 5 АИОР, согласованный с требованиями международных стандартов EUR-ACE и FEANI
Р7	Заниматься научно-педагогической деятельностью в области технической физики, участвовать в разработке программ учебных дисциплин, проводить учебные занятия, обеспечивать практическую и научно-исследовательскую работу обучающихся, применять и разрабатывать новые образовательные технологии	Требования ФГОС (ПК-9, 10, 11). Критерий 5 АИОР, согласованный с требованиями международных стандартов EUR-ACE и FEANI
Р8	Заниматься организационно-управленческой деятельностью, владеть приемами и методами работы с персоналом, находить оптимальные решения при реализации технологий и создании продукции, управлять программами освоения новой продукции и технологий.	Требования ФГОС (ПК-17, 18, 19). Критерий 5 АИОР, согласованный с требованиями международных стандартов EUR-ACE и FEANI
Р9	Осуществлять научно-инновационную деятельность,	Требования ФГОС (ПК-1, 2, 3,

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)	Требования ФГОС, критериев и/или заинтересованных сторон
	анализировать и систематизировать научно-техническую информацию, передовой отечественный и зарубежный опыт в области радиационных и пучково-плазменных технологий, внедрять новые наукоемкие технологии, готовить документы по защите интеллектуальной собственности, разрабатывать планы и программы организации инновационной деятельности, осуществлять технико-экономическое обоснование инновационных проектов.	4). Критерий 5 АИОР, согласованный с требованиями международных стандартов EUR-ACE и FEANI
<i>Универсальные компетенции</i>		
P10	Развивать свой интеллектуальный и общекультурный уровень, в течение всей жизни самостоятельно обучаться новым методам исследований, пополнять свои знания в области современной технической физики и смежных наук, расширять и углублять свое научное мировоззрение.	Требования ФГОС (ОК-1, 2, 6). Критерий 5 АИОР, согласованный с требованиями международных стандартов EUR-ACE и FEANI
P11	Активно общаться в научной, производственной и социально-общественной сферах деятельности, свободно и грамотно пользоваться русским и иностранными языками как средством делового общения	Требования ФГОС (ОК-3, ОПК - 4). Критерий 5 АИОР, согласованный с требованиями международных стандартов EUR-ACE и FEANI
P12	Участвовать в организации научно-исследовательских и научно-производственных работ, проявлять инициативу, брать на себя всю полноту ответственности, уметь находить творческие, нестандартные решения профессиональных и социальных задач.	Требования ФГОС (ОК-4, 5, ОПК-3). Критерий 5 АИОР, согласованный с требованиями международных стандартов EUR-ACE и FEANI

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

Физико-технический институт
Направление подготовки – Техническая физика
Кафедра экспериментальной физики

УТВЕРЖДАЮ:
Зав. кафедрой

(Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

магистерской диссертации

Студенту:

Группа	ФИО
ОДМ51	Шурен Жазира Бакытбеккызы

Тема работы:

Исследование процессов распыления и ионной имплантации при осаждении тонких плёнок оксидов и нитридов титана методом реактивного магнетронного напыления	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	

Срок сдачи студентом выполненной работы:

--	--

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе	<ol style="list-style-type: none">1. Среднечастотная вакуумная установка «УВН-200МИ»2. Компьютерная программа SRIM3. Компьютерная программа SIMTRA
Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов	<ul style="list-style-type: none">- проведение литературного обзора;- изучение работы в программной среде SRIM- расчет полных, парциальных коэффициентов распыления, а также knock-on коэффициентов; определения профилей ионной имплантации для нитридов и оксидов титана;- изучение распространения распыленных частиц в камере магнетронной распылительной системы с помощью программы SIMTRA

<p>Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей)</p>	<ul style="list-style-type: none"> - титульный лист; - актуальность работы; - цель работы и решаемые задачи; - физика процесса распыления; - ионная имплантация; - исходные данные к работе - расчетная часть; - программа SRIM; - программа SIMTRA; - заключение
--	---

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы

Раздел	Консультант
Литературный обзор	Евдокимов К.Е., доцент кафедры ЭФ ФТИ ТПУ
Экспериментальная часть	Евдокимов К.Е., доцент кафедры ЭФ ФТИ ТПУ
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Рыжакина Т.Г., доцент каф. МЕН ИСГТ ТПУ
Социальная ответственность	Гоголева Т.С., ассистент каф. ПФ ФТИ ТПУ
Иностранный язык	Зяблова Н.Н., ст. преп. каф. ИЯ ФТИ ТПУ
Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:	1) Теоретическая часть 2) Материалы и методики исследований 3) Расчетная часть 4) Materials and methods of research

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

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент кафедры ЭФ ФТИ ТПУ	Евдокимов К.Е.	к.ф.-м.н		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОДМ51	Шурен Ж.Б.		

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

Студенту:

Группа	ФИО
ОДМ51	Шурен Ж.Б.

Институт	ФТИ	Кафедра	Экспериментальной физики
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	16.04.01 «Техническая физика»

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

<i>1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	Стоимость сырья и материалов Размер окладов и выплат исполнителям проекта
<i>2. Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	Согласно проектной документации
<i>3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	Отчисления во внебюджетные фонды

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке

<i>1. Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ</i>	Разработка анализа конкурентоспособности
<i>2. Разработка устава научно-технического проекта</i>	Планирование работ; построение иерархической структуры ВКР
<i>3. Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок</i>	График проведения ВКР – диаграмма Ганта
<i>4. Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности</i>	Оценка сравнительной и финансовой эффективности

Перечень графического материала

<i>1. Оценка конкурентоспособности технических решений</i>
<i>2. Матрица SWOT</i>
<i>3. График проведения и бюджет НТИ</i>
<i>4. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НТИ</i>

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент каф.менед. ИСГТ	Рыжакина Т.Г.	к.э.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОДМ51	Шурен Ж.Б.		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
ОДМ51	Шурен Жазира Бакытбеккызы

Институт	ФТИ	Кафедра	Экспериментальной физики
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	16.04.01 «Техническая физика»

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

<i>1. Описание рабочего места (рабочей зоны,) на предмет возникновения:</i>	<ul style="list-style-type: none"> – возможных вредных факторов: вредные вещества, шумы, электромагнитные поля и ионизирующее излучение от ЭВМ; – опасные факторов: вероятность поражения электрическим током, вероятность возникновения пожара и взрыва.
<i>2. Знакомство и отбор законодательных и нормативных документов по теме</i>	<ul style="list-style-type: none"> – электробезопасность; – пожаровзрывобезопасность; – требования охраны труда при работе на ПЭВМ;

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

<i>1. Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности:</i>	<ul style="list-style-type: none"> – действие фактора на организм человека; – приведение допустимых; – предлагаемые средства защиты .
<i>2. Анализ выявленных опасных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности:</i>	<ul style="list-style-type: none"> – электробезопасность (в т.ч. статическое электричество, средства защиты); – пожаровзрывобезопасность (причины, профилактические мероприятия, первичные средства пожаротушения).

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент каф.ПФ	Гоголева Т.С.	к.ф.-м.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОДМ51	Шурен Жазира Бакытбеккызы		

РЕФЕРАТ

Данная выпускная квалификационная работа содержит 116 страниц, 34 рисунков, 32 таблиц и 44 литературных источников.

Целью данной работы является изучить зависимости полного и парциальных коэффициентов распыления, профилей ионной имплантации от энергии налетающих ионов рабочего газа и состава поверхности при реактивном магнетронном напылении оксидов и нитридов титана. А также провести анализ профиля распределения распыленных атомов, достигающих поверхность подложки.

В работе представлены теоретические основы по тонким плёнкам и методах их получения, компьютерная программа SRIM для моделирования процессов распыления и ионной имплантации, а также программа SIMTRA для моделирования профилей осаждения подложки, полуэмпирические уравнения и формула Зигмунда для расчёта коэффициентов распыления.

В ходе работы были определены зависимости полных, парциальных коэффициентов распыления и knock-on коэффициентов от энергии налетающих ионов. Были определены средний пробег ионов при ионной имплантации. А также определены профили осаждения подложки. Полученные данные позволяют определить область наибольших значений скорости осаждения частиц.

Ключевые слова: тонкие плёнки, оксид и нитрид титана, реактивное магнетронное напыление, ионная имплантация, коэффициент распыления.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	13
1. ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ.....	14
1.1 Классификация тонких плёнок.....	14
1.2 Тонкие плёнки оксидов и нитридов титана.....	14
1.3 Реактивное магнетронное напыление.....	15
1.4 Физика процесса распыления.....	16
1.4.1 Коэффициенты распыления.....	18
1.4.2 Коэффициенты распыления для соединений.....	20
1.5 Ионная имплантация.....	22
1.5.1 Профили ионной имплантации: пробег ионов и их среднеквадратичное отклонение.....	24
2 МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ.....	27
2.1 Установка импульсного магнетронного осаждения “УВН- 200МИ”.....	27
2.2 Программа SRIM.....	29
2.3 Алгоритм работы в программной среде SRIM.....	30
2.4 Программа SIMTRA.....	34
2.4.1 Алгоритм работы в программе SIMTRA.....	35
3 РАСЧЁТНАЯ ЧАСТЬ. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЯ.....	40
3.1 Расчёт полных и парциальных коэффициентов распыления с помощью программы SRIM.....	40
3.2 Расчёт коэффициентов распыления для титановой мишени при бомбардировке ионами аргона для разных значений энергии налетающих ионов.....	44
3.3 Расчёт knock-on коэффициентов для разных типов мишени.....	45

3.4	Расчёт профилей ионной имплантации для разных случаев	47
3.5	Расчёт профилей осаждения подложки.....	51
3.6	Расчёт полных и парциальных коэффициентов распыления по полуэмпирическим уравнениям и формулам Зигмунда	54
4	ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ	56
4.1	Предпроектный анализ	56
4.1.1	Потенциальные потребители результатов исследования	56
4.1.2	Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.....	56
4.1.3	SWOT-анализа	57
4.2	Оценка готовности проекта к коммерциализации	61
4.3	Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования	63
4.4	Инициация проекта	64
4.4.1	Организационная структура проекта	66
4.4.2	Ограничения и допущения проекта.....	67
4.5	Планирование управления научно-техническим проектом	67
4.5.1	Иерархическая структура работ проекта	67
4.5.2	Контрольные события проекта	69
4.6	Планирование управления научно-техническим проектом	69
4.6.1	План проекта	69
4.7	Бюджет научного исследования	71
4.7.1	Основная заработная плата	72
4.7.2	Основная заработная плата	72

4.7.3	Дополнительная заработная плата научно-производственного персонала	73
4.7.4	Отчисления на социальные нужды.....	73
4.7.5	Организационная структура проекта	73
4.8	Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	74
4.8.1	Динамические методы экономической оценки инвестиций	75
4.8.2	Чистая текущая стоимость (NPV).....	75
4.8.3	Дисконтированный срок окупаемости	77
4.8.4	Внутренняя ставка доходности (IRR).....	77
4.9	Индекс доходности (рентабельности) инвестиций (PI).....	79
4.9.1	Оценка сравнительной эффективности исследования.....	80
5	СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ.....	84
5.1	Анализ опасных и вредных производственных факторов.....	84
5.2	Обоснование и разработка мероприятий по снижению уровней опасного и вредного воздействия и устранению их влияния при работе на ПЭВМ.....	85
5.2.1	Требования к ПЭВМ и организация работы организационные мероприятия.	85
5.3	Технические мероприятия.....	86
5.4	Условия безопасной работы.....	88
5.5	Электробезопасность.....	92
5.6	Пожарная и взрывная безопасность	94
	ЗАКЛЮЧЕНИЕ	97

Список литературы.....	100
Приложение А.....	103

ВВЕДЕНИЕ

Существуют разные методы получения тонких плёнок, одним из которых является метод реактивного магнетронного напыления. Реактивное распыление, это ионное распыление элементарной (металлической) мишени в среде, содержащей газы, которые вступают в реакцию с материалом мишени, образуя химическое соединение. [1]. С помощью этого метода можно наносить плёнки различных сплавов металлов, полупроводников и диэлектриков, используя сложные по составу или конструкции мишени.

При реактивном магнетронном напылении имеет важную роль процесс распыления мишени. Интенсивность данного процесса характеризуется коэффициентом распыления. Имеются многочисленные формулы для расчётов этого параметра. Но существует одна проблема: эти формулы расчёта коэффициентов распыления обычно, предназначены для больших значений (от 1 кэВ) энергии налетающих ионов.

С помощью программного моделирования SRIM можно решить данную проблему. Данная программа позволяет рассчитывать коэффициенты распыления для ионов с энергией от 50 эВ. Кроме того, программа даёт возможность извлекать данные о профилях ионной имплантации и др.

При изучении процесса магнетронного напыления важным является также информация о распределении и плотности потока распыленного материала внутри камеры распылительной системы. С помощью компьютерного моделирования в программе SIMTRA можно провести анализ распределения материала покрытия, а именно профиля распределения распыленных атомов, достигающих поверхность подложки.

1. ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ

1.1 Классификация тонких плёнок

В последние десятилетия популярность тонкопленочных материалов стремительно растёт. Тонкие плёнки широко применяются в качестве различных функциональных покрытий для повышения прочности, коррозионной стойкости, улучшения магнитных и электрических свойств материалов, используемых в авиационной и космической технике, машиностроении, медицине, энергетике, цифровой микроэлектронике.

Изучение тонких пленок представляет большой интерес с научной точки зрения.

Известно, что пленки могут быть аморфными, монокристаллическими и поликристаллическими. Для аморфных плёнок характерно отсутствие дальнего порядка в расположении атомов, присущего кристаллическому состоянию. Монокристаллические пленки образуются при эпитаксии, эпитаксиальная плёнка воспроизводит кристаллическую структуру подложки. Поликристаллические плёнки демонстрируют наибольшее разнообразие микроструктуры, которая характеризуется размером и кристаллографической ориентацией кристаллитов (зерен).

1.2 Тонкие плёнки оксидов и нитридов титана

Нитрид титана

Нитрид титана (TiN) — это перспективный материал, который обладает уникальной совокупностью физико-химических параметров: низкое удельное сопротивление, достаточно высокий коэффициент пропускания в видимой части спектра, высокая твердость, высокая износостойкость, высокая химическая инертность и стойкость к коррозии.

Нитрид титана используется в оптических фильтрах, тонкопленочных резисторах, защитных и декоративных покрытиях.

Плѐнки нитрида титана (TiN) известны уже давно, но они не теряют своей актуальности, и обнаруживаются новые сферы их применения. Со временем совершенствуются способы получения плѐнок для достижения наилучших характеристик.

Для получения плѐнок TiN применяют в основном два способа: либо электродуговое распыление титанового катода в атмосфере реакционного газа азота, либо магнетронное распыление титановой мишени в атмосфере азота.

Оксид титана.

Оксиды являются важным классом материалов для покрытия, поскольку они обычно образуют химически и экологически устойчивые плѐнки с хорошими показателями преломления и спектральных диапазонов с высокой передачей.

Тонкие плѐнки диоксида титана (TiO₂) обладают целым набором замечательных физических свойств: высокая диэлектрическая постоянная, механическая и химическая стабильности, хорошие изоляционные свойства. Благодаря высоким значениям показателя преломления и оптического коэффициента пропускания света в видимом диапазоне, TiO₂ используется в качестве материала для просветляющих покрытий и защитных слоѐв в оптических покрытиях [3]. Одним из способов осаждения плѐнок оксидов титана является метод реактивного магнетронного напыления, которое обладает рядом технологических преимуществ перед остальными способами осаждения: высокие скорости осаждения, высокая чистота, хорошая адгезия [4].

1.3 Реактивное магнетронное напыление

Нанесение тонких плѐнок металлов с помощью магнетронного распыления – простой и хорошо известный способ, используемый с семидесятых годов прошлого века [5]. За прошедшее время с его помощью

научились наносить плёнки различных сплавов металлов, полупроводников и диэлектриков, используя сложные по составу или конструкции мишени.

Реактивное напыление, это распыление элементарной (металлической) мишени в среде, содержащей газы, например азот или кислород, которые вступают в реакцию с материалом мишени, образуя химическое соединение.

По мере увеличения расхода химически активного газа, состав поверхностного слоя мишени изменяется, доля металла уменьшается, а доля соединения, например оксида или нитрида, растёт. Режим, при котором напыляется преимущественно металл, называется металлическим. Режим преимущественного напыления соединения называется режимом соединения (оксидным, нитридным), а также отравленным режимом.

При реактивном напылении параметры процесса, такие как расход реактивного газа, давление в камере и т.д., могут оказывать существенное влияние как на стехиометрию, так и на скорость осаждения. Поэтому, изучение процесса реактивного напыления вызывает большой интерес с научной и коммерческой точки зрения.

1.4 Физика процесса распыления

Распыление, т.е. удаление поверхностных атомов при бомбардировке твёрдого тела ускоренными частицами, происходит в результате столкновений между бомбардирующими частицами и атомами в граничных, т.е. приповерхностных слоях последнего.

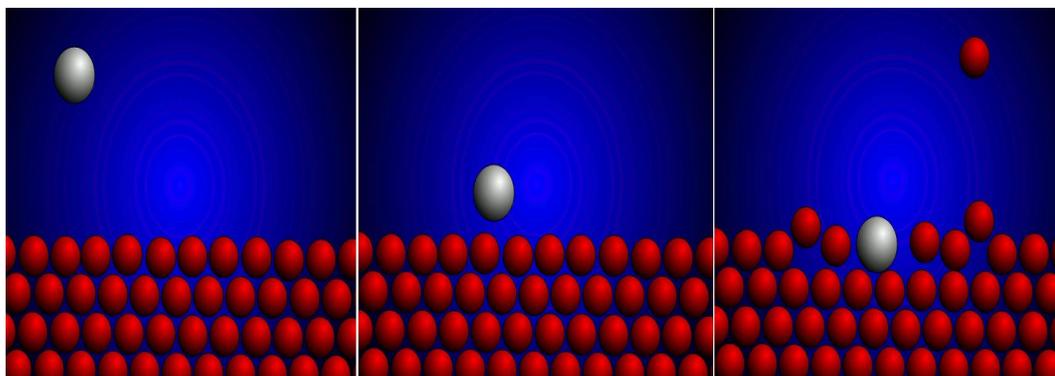


Рисунок 1.1– Процесс распыления мишени

Интенсивность процесса распыления характеризуют коэффициентом распыления, Y , равным среднему числу удаленных атомов, приходящихся на одну падающую частицу

$$Y = N_A/N_i,$$

где N_A - число удаленных атомов, а N_i - число падающих ионов.

При подсчёте числа удалённых атомов учитывают только атомы твёрдого тела, а первичные частицы, которые претерпели отражение или повторную эмиссию, не принимают во внимание

Подобные разделение не может быть произведено при самораспылении, т.е. при бомбардировке ионами тех атомов, из которых состоит само твёрдое тело.

Напыление обусловлено взаимодействием падающих частиц с атомами поверхности мишени. На распыление будут влиять следующие факторы:

- энергия падающих частиц
- материалы мишени
- углы наклона частиц
- кристаллическая структура поверхности мишени

Коэффициент распыления можно измерить следующими способами:

- потеря массы мишени
- уменьшение толщины мишени
- осаждение напылённых частиц
- обнаружение распылённых частиц в полете.

Распыление является хорошо зарекомендовавшим себя методом осаждения тонких плёнок. Данный процесс коммерчески используется для крупномасштабного производства, поскольку с помощью него можно производить равномерные плёнки на больших подложках, размером в несколько квадратных метров.

При распылении подложка помещается вблизи катода, чтобы распыленные атомы осаждались на неё. Обычно в плёнках, получаемых распылением, существуют сжимающие напряжения, тогда как в осаждённых методом испарения плёнках действуют растягивающие напряжения. Увеличение давления газа в камере может снизить напряжения в плёнках, так как оно способствует их кристаллизации.

1.4.1 Коэффициенты распыления

При нормальном падении, обобщение теории Зигмунда [10] дает следующую формулу для коэффициента распыления Y [6,9]

$$Y = \frac{C \cdot Q}{U_0} \frac{\alpha \cdot S_n(E)}{1 + A \cdot s_e(\varepsilon)} \left(1 - \left(\frac{E_{th}}{E} \right)^{1/2} \right)^{2.8}, \quad (1.1)$$

где $S_n(E)$ - это тормозное сечение одного атома, а U_0 - поверхностная энергия связи атомов. Обычно U_0 принимают равно энергии сублимации распыленных атомов. Коэффициент C равен $0,042 \text{ \AA}^{-2}$. Здесь, тормозное ядерное сечение определяется следующим образом [15]

$$S_n(E) = 4\pi \cdot Z_1 Z_2 \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0} a_{12} \frac{M_1}{M_1 + M_2} s_n(\varepsilon), \quad (1.2)$$

здесь Z_1 и M_1 – это атомный номер и масса первичного иона, а Z_2 и M_2 атомный номер и молярная масса атомов мишени, e_0 - заряд электрона и ϵ_0 - диэлектрическая проницаемость вакуума. Отсюда параметр a_{12} равен

$$a_{12} = \left(\frac{9\pi^2}{128} \right)^{1/3} \frac{a_0}{\left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3} \right)^{1/2}} \quad (1.3)$$

где a_0 - радиус Бора, который равен $0,529 \text{ \AA}$ [20]. Для теории Линдхарда и Шиотта [21]

$$s_n(\varepsilon) = \frac{3,441 \cdot \varepsilon^{1/2} \ln(\varepsilon + 2,718)}{1 + 6,355\varepsilon^{1/2} + \varepsilon(6,882\varepsilon^{1/2} - 1,708)} \quad (1.4)$$

Преобразование уравнения (2) даёт следующее

$$S_n(E) = \frac{84,78 \cdot Z_1 Z_2}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}} \cdot \frac{M_1}{M_1 + M_2} s_n(\varepsilon) \quad (1.5)$$

если энергия даётся в эВ, то ε находим через данную формулу

$$\varepsilon = \frac{0,03255}{Z_1 Z_2 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}} \cdot \frac{M_2}{M_1 + M_2} \cdot E \quad (1.6)$$

В уравнении (1), $s_e(\varepsilon)$ – неупругая электронная тормозная мощность рассчитывается следующим образом

$$s_e(\varepsilon) = k\varepsilon^{1/2} \quad (1.7)$$

где k равно

$$k = G^{1/2} \frac{(M_1 + M_2)^{3/2}}{M_1^{3/2} \cdot M_2^{1/2}} \cdot \frac{Z_1^{2/3} \cdot Z_2^{1/2}}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/4}} \quad (1.8)$$

здесь $G = 0,00629 u$ (u представляет единую атомную единицу массы). Согласно [5] Коэффициент A определяется так

$$A = D \cdot U_0 \quad (1.9)$$

где $D = 0,35 \text{ эВ}^{-1}$. Затем рассчитывается α

$$\alpha = 0,08 + 0,164(M_2 / M_1)^{0,4} + 0,0145(M_2 / M_1)^{1,29} \quad (1.10)$$

Далее определяется E_{th} – пороговая энергия для процесса распыления

$$E_{th} / U_0 = 1,9 + 3,8(M_1 / M_2) + 0,134(M_2 / M_1)^{1,24} \quad (1.11)$$

Таким образом

$$Qr^3 = g^3 \left\{ \exp \left[-\frac{(M_2 - b)^2}{2c^2} \right] \right\} + h^3 \left\{ 1 - \exp \left[-\frac{(M_2 - d)^2}{f^2} \right] \right\} \quad (1.12)$$

где $b = 15,483$ мкм, $c = 19,83$ мкм, $d = 16$ мкм, $f = 50$ мкм, $g = 0,274$ нм и $h = 0,281$ нм. Среднее межатомное расстояние, r , задаётся формулой

$$r^3 = \frac{M_2 \cdot 10^{24}}{1000\rho \cdot N} \quad (1.13)$$

Величина r^3 является наиболее значительной частью при определении Q и является частью теории Зигмунда [11]. Плотность мишени ρ определяется в $\text{кг} \cdot \text{м}^{-3}$, а N - это число Авогадро. Эти уравнения дают результаты расчётов коэффициентов распыления для всех элементов.

1.4.2 Коэффициенты распыления для соединений

Зигмунд [20] отмечает, что формулы расчетов коэффициента распыления имеют некоторые неточности, особенно при расчёте, когда M_I является промежуточным между двумя широко различными массами M_{2A} и M_{2B} . Точно так же Малобрэ [23] в своём тщательном и обширном обзоре результатов расчёта напыления составного полупроводника приводит широкий спектр уравнений и предлагает вычислять мишени со средним атомным номером $Z_2 = X_A Z_{2A} + X_B Z_{2B}$, где X_A - атомная доля A в соединении $A + B$ и т. д. Средняя атомная масса M_2 рассчитывается аналогично.

При вычислении коэффициентов распыления для соединений, значения основных параметров из уравнении (1.1) интерполируются по их значениям для отдельных элементов, чтобы найти эффективное значение. К интерполированным параметрам относятся: Qr^3 , α , $S_n(E)$, E_{th} и k из уравнений (1.12), (1.10), (1.5), (1.11) и (1.8), но среднее межатомное расстояние, r оценивают по объёмной плотности соединения, если не указано иное. Значение U_o обсуждается ниже. В результате интерполяции, например, $Q_{2A}r_{2A}^3$ и $Q_{2B}r_{2B}^3$ для M_{2A} и M_{2B} вычисляются из уравнения (1.12), а затем Qr^3 берётся как сумма $X_A (Q_{2A}r_{2A}^3) + X_B (Q_{2B}r_{2B}^3)$ для среднего значения M_2 . Так, например, тормозная способность представляет собой среднюю тормозную способность

составляющих. Для любого эффекта, который является линейной функцией от M или Z , разность будет равна нулю.

В обзорах этой области есть два других уравнения. Первый относится к составу поверхностно-изменённого слоя при линейном распылении с или без гиббсовской сегрегации [25], X_A^S и X_B^S

$$\frac{X_A^S}{X_B^S} = \frac{X_A}{X_B} \cdot \frac{Y_B^S}{Y_A^S} \quad (1.14)$$

где Y_A^S – коэффициент распыления атомов A из изменённого слоя [23,24]. Это просто вытекает из ограничения распыления материала в правильной стехиометрии. Ко второму соотношению, полученному Зигмундом, относится следующее [22,26,29]

$$\frac{Y_A^S}{Y_B^S} = \left(\frac{M_{2B}}{M_{2A}} \right)^{2m} \cdot \left(\frac{U_B^S}{U_A^S} \right)^{1-2m} \quad (1.15)$$

где $0 \leq m \leq 0,2$ и где U_A^S и U_B^S – минимальная энергия для распыления атомов A и B с поверхности соединения. Существует различные модели, однако Малейбрэ и Одендаль [28] находят, что модель уравнения Зигмунда (15) является наилучшим описанием для составных материалов. В этой приближённой модели использовались выражения Келли [25] для U_A^S и U_B^S , полученные из теории парных связей с учётом отсутствия теплоты смешивания в соединении и случайности системы. В результате мы имеем два уравнения:

$$U_A^S = X_A^S U_A + 0.5 X_B^S (U_A + U_B) \quad (1.16)$$

$$U_B^S = X_A^S U_B + 0.5 X_A^S (U_A + U_B) \quad (1.17)$$

Здесь U_A и U_B – минимальные энергии удаления атомов A и B из поверхности материала мишени. Эти уравнения предназначены для мишени с изменённым слоем, толщина которого может быть больше монослоя.

Процесс распыления делает предположение о случайности более обоснованным. Если в уравнении (1.15) m равно нулю, то из уравнений (1.14) и (1.15) получаем результат Андерса и Урбасека [29]

$$\frac{X_A^S}{X_B^S} = \frac{X_A}{X_B} \cdot \frac{U_A^S}{U_B^S} \quad (1.18)$$

Комбинируя уравнения (16), (17) и (18) вместе с уравнением $X_A^S + X_B^S = 1$ и $X_A + X_B = 1$, получаем выражение для X_A^S :

$$X_A^S = \frac{[p^2 + (1 - p^2)X_A]^{0,5} - p}{1 - p} \quad (1.19)$$

где $p = U_B / U_A$. Из уравнений (1.16) и (1.17) можно получить значения U_A^S и U_B^S .

1.5 Ионная имплантация

Ионная имплантация - это введение примесных атомов в твёрдое тело, с целью модифицирования его физических свойств.

Ионная имплантация является эффективным технологическим инструментом для введения одиночных примесей в поверхностный слой субстрата на глубину в несколько микрон. Степень поверхностной модификации материалов зависит от их индивидуальных химических и структурных свойств, а также от вариаций параметров имплантации, такие как тип и энергия имплантата, плотность тока в ионном пучке, температуры субстрата и т. д. Наиболее критическим параметром является доза ионов Φ_0 , определяющая количество внедряемого имплантата. В зависимости от модификации материалов, таких как TiO_2 , при облучении ионная имплантация может быть условно разделена на низкие дозы и высокие дозы процессов.

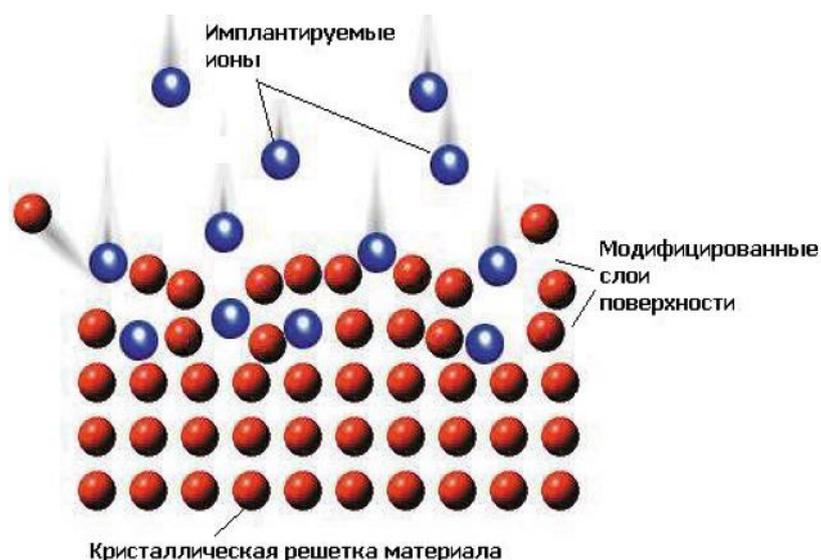


Рисунок 1.2 – Ионная имплантация

Для этой цели особый интерес представляет имплантация при низких и средних энергиях, поскольку это приводит к ультратонким композитным слоям. Одна из важных и сложных задач при экспериментальной имплантации состоит в том, чтобы определить геометрические параметры глубинных профилей концентрации примесей в мишень. С помощью таких данных, можно определить дозу имплантации, характерный для образование наночастиц в имплантированном слое; толщину модифицированного слоя и концентрацию предельной имплантированной примеси, достигаемая при условиях данной имплантации. Так как все эти параметры важны, проблему можно рассмотреть с помощью компьютерного моделирования торможение ускоренных ионов в мишени (TRIM). Однако имеющиеся в литературе таблицы данных рассчитанные параметры профиля глубины, которые в основном для ионной имплантации однокомпонентных материалов (Si, Ge, Cu и т. д.) и программное обеспечение как TRIM (перенос ионов в материи) или SRIM (торможение и диапазон ионов в твердых телах) [30] дают хороший результат только для ионной имплантации с низкой дозой, но они не могут быть применены при высоких дозах ионной имплантации ($> 10^{15}$ ионов / см^2).

1.5.1 Профили ионной имплантации: пробег ионов и их среднее квадратичное отклонение

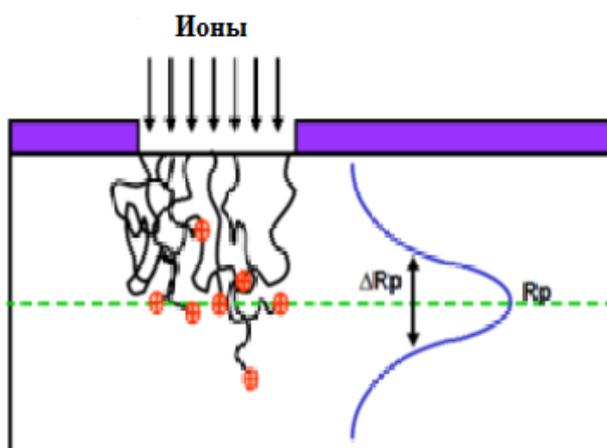


Рисунок 1.3 – Пробег ионов

Вследствие торможения и рассеяния каждый отдельный падающий ион образует случайную траекторию как показано на рисунке 1.3.

Концентрация внедренных атомов примеси имеет некоторое распределение по глубине, которое в общем случае можно описать гауссовым распределением со средним проецируемым пробегом R_p и стандартным отклонением ΔR_p .

Траектория иона представляет собой сложную ломаную линию, состоящую из отрезков пути между элементарными актами рассеяния на большие углы. Функция распределения стабилизированных ионов по глубине образца имеет максимум расстояние точки максимума от поверхности определяется величиной среднего пробега ионов данной энергии.

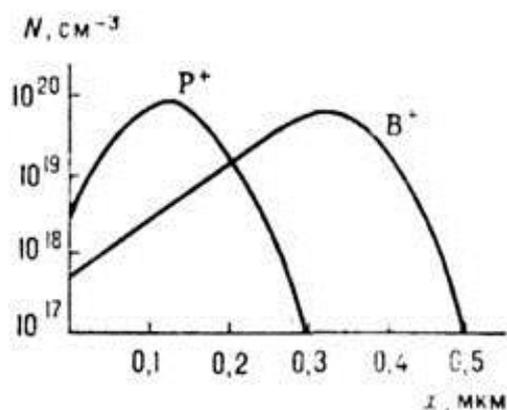


Рисунок 1.4 – Пример распределения по глубине x ионов B и P

Ионную имплантацию в металлы применяют с целью повышения их твёрдости, износоустойчивости, коррозионной стойкости, создания катализаторов, изменения коэффициента трения и т. п. При больших дозах, когда концентрация внедрённой примеси сравнима с n_0 , возможно образование новых соединений. Ионная бомбардировка позволяет вводить примесь не только из пучка, но и из плёнки, предварительно нанесённой на поверхность мишени (имплантация атомов отдачи и ионное перемешивание). Бомбардировка ионами может сопровождаться наращиванием имплантируемого материала. Плёнки, полученные ионным осаждением, имеют высокую плотность и хорошую адгезию к подложке.

Достоинства ионной имплантации:

1. Возможность вводить (имплантировать) любую примесь, любой элемент периодической Таблицы.
2. Возможность легировать любой материал.
3. Возможность вводить примесь в любой концентрации независимо от её растворимости в материале подложки.
4. Возможность вводить примесь при любой температуре подложки, от гелиевых температур до температуры плавления включительно.
5. Возможность работать с легирующими веществами технической чистоты и даже с их химическими соединениями (тоже любой чистоты).

6. Изотопная чистота легирующего ионного пучка (т.е. возможность легировать не только исключительно данным элементом, но и исключительно данным изотопом этого элемента).

7. Легкость локального легирования (с помощью хотя бы элементарного механического маскирования).

8. Малая толщина легированного слоя (менее микрона).

9. Большие градиенты концентрации примеси по глубине слоя, недостижимые при традиционных методах с неизбежным диффузионным размыванием границы.

10. Легкость контроля и полной автоматизации технологического процесса.

11. Совместимость с планарной технологией микроэлектроники.

2 МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

2.1 Установка импульсного магнетронного осаждения “УВН-200МИ”

Для получения плёнок TiO_2 и TiN использовалась установка импульсного магнетронного осаждения —УВН-200МИ. Фотография данной установки представлена на рисунке 2.1.

Параметры установки среднечастотного магнетронного напыления УВН-200МИ:

Вакуумная камера: диаметр – 380 мм, длина – 450 мм

Напряжение на катоде: 320 В

Эффективная скорость откачки: 75 л/с

Мишень: материал – Ti



Рисунок 2.1 – Установка УВН-200МИ

Главной задачей установки является нанесение оксидных (TiO_2) и оксинитридных ($Ti-O-N$) покрытий на различные материалы, например изделия медицинского назначения, в частности на внутрисосудистые стенты. Блок-схема установки импульсного магнетронного напыления показана на рисунке 2.1. Эта установка заключается из следующих основных частей:

цилиндрическая вакуумная камера с расположенным в ней магнетроном, высоковакуумная система откачки, источник импульсного питания магнетрона, трёхканальная система подачи газа, автоматизированная система управления установкой, содержащая блок периферийных контроллеров, управляющий контроллер и персональный компьютер.

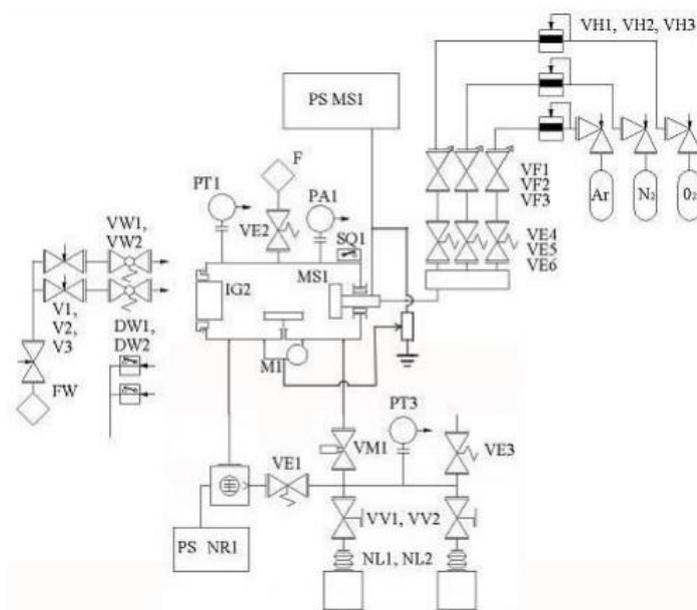


Рисунок 2.2 – Блок-схема установки УВН-200МИ

Вакуумная камера располагается горизонтально, размеры камеры составляют: диаметр – 380 мм, длина – 450 мм, объём камеры составляет $0,51\text{ м}^3$. Камера имеет двери на торцевых сторонах поверхности цилиндра и боковой отвод с фланцем, на котором смонтирован турбомолекулярный насос. На крышке бокового отвода камеры смонтирован датчик высокого вакуума ДВЭ-0/7-007. Внутри камеры расположен магнетрон и стол для образцов с приводом вращения и системой подачи отрицательного электрического смещения на стол.

Вакуумная система включает низковакуумную и высоковакуумную откачку. Высокий вакуум создаётся в два этапа: сначала двумя форвакуумными насосами 2НВР-5ДМ (NL_1 и NL_2) до давления 10 Па, затем турбомолекулярным насосом ТМН-150 (NR_1) до 10^{-2} Па.

2.2 Программа SRIM

Для расчёта пробега ионов в твердых телах используются различные программы компьютерного моделирования. Наибольшую популярность имеет программный пакет SRIM [31], который наряду с возможностью расчёта пробегов позволяет получить и другую важную информацию: распределение вакансий в мишени, атомов отдачи и т.д.

На основе программы SRIM лежит метод Монте-Карло. Суть данного метода заключается в розыгрыше через генератор случайных чисел важных для какого-либо процесса параметров. В случае ионной имплантации такими параметрами являются свободный пробег между столкновениями для падающего иона и его прицельное расстояние перед столкновением с атомом мишени. Остальные величины, такие как плотность и состав мишени, атомные массы, начальная энергия иона, энергия смещения атомов мишени, толщина мишени, задаются постоянными на первых шагах реализации программы. Компьютер прослеживает траекторию каждого упавшего иона, последовательно решая задачу о столкновении двух заряженных частиц. При этом каждый раз регистрируются следующее: потеря энергии на участке свободного пробега, потеря энергии при столкновении с атомом мишени, угол отклонения от первоначального направления, вылет атома мишени из узла (если энергия отдачи больше энергии смещения). Затем ситуация разыгрывается заново с учетом произошедшего столкновения. В качестве критерия остановки обычно полагают условие: остаточная кинетическая энергия движущегося иона не превышает энергию смещения атома мишени. На этом этапе компьютер фиксирует координаты иона.

Современные версии программы SRIM позволяют получать информацию не только о распределении внедрённой примеси, но о произведённых смещениях, о распределении вакансий и междоузельных атомов, о распылении мишени. Для получения параметров распределения имплантированной примеси

и точечных дефектов необходимо выполнить большую серию подобных испытаний, обычно рекомендуется несколько тысяч (число испытаний задается в начале программы).

Интерфейс программы SRIM представлен на рисунке 2.3.

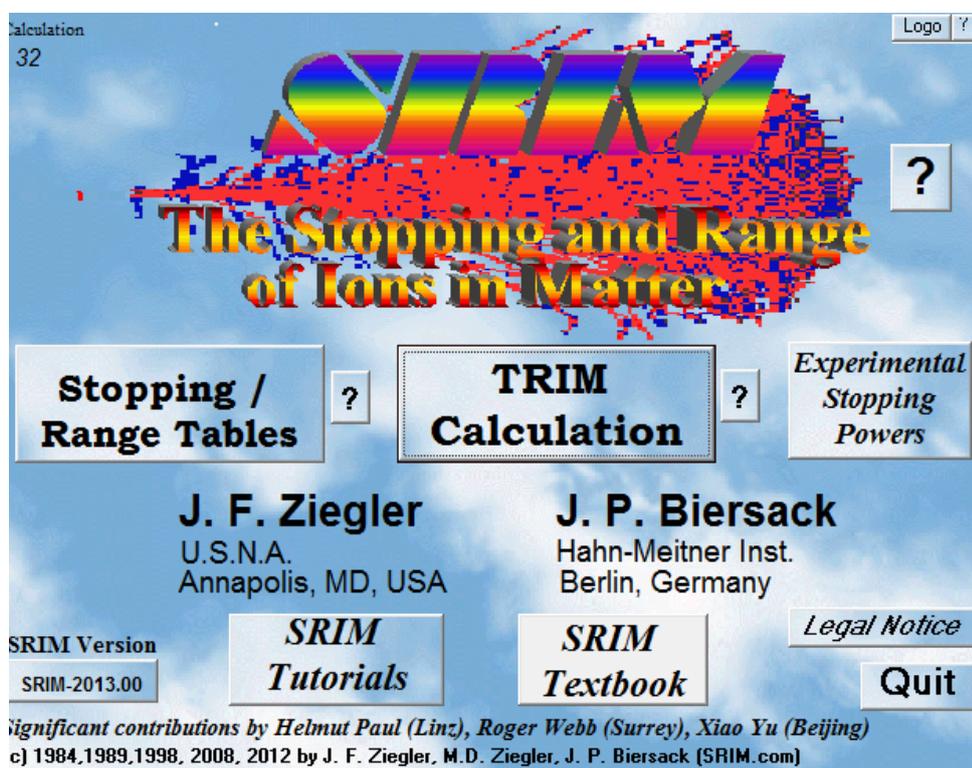


Рисунок 2.3 – Интерфейс главного меню программы SRIM

2.3 Алгоритм работы в программной среде SRIM

При запуске данной программы имеется одна значительная проблема – необходимость изменения региональных стандартов, из-за несовместимости разрядности знаков и символов [32]. С целью настоящего следует осуществить следующий ход шагов: *Пуск* → *Панель управления* → *Язык и Региональные стандарты* и во вкладке *Форматы* переменить параметры на *Английский (США)*.

С целью расчёта профилей распределения ионов нажимаем на кнопку **TRIM Calculation**, в дальнейшем на экране представится меню выбора параметров и характеристик расчёта (рис. 2.4).

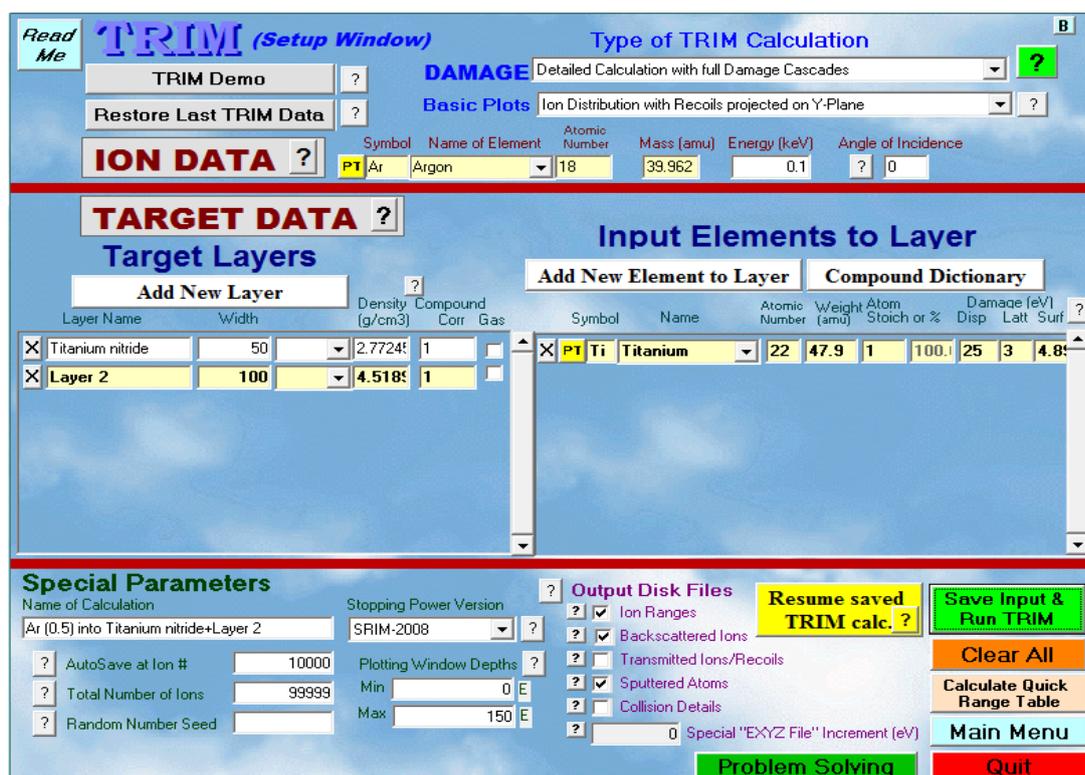


Рисунок 2.4 – Меню выбора параметров расчёта

В правом верхнем звене окна следует подобрать вид расчёта из числа приведённых ниже:

Ion Distribution and Quick Calculation of Damage - данный режим применяется, в случае если выполняется расчёт окончательного распределения ионов в мишени, потери энергии иона на ионизацию атомов мишени, передача энергии атомам отдачи, а кроме того отслеживаются упруго отражённые и прошедшие ионы. В этом режиме подробно не рассматриваются процессы, связанные с распылением мишени и поведением атомов отдачи;

Detailed Calculation with full Damage Cascades – в данном режиме дополнительно отслеживается каждый отдельный атом отдачи до тех пор, пока его энергия не станет меньше энергии смещения того или иного атома мишени из равновесного состояния;

Monolayer Collision Steps / Surface Sputtering – в данном режиме сверх того выполняется учёт распыления атомов в поверхностном слое и процессов взаимодействия этих атомов с падающими ионами.

Для расчёта коэффициентов распыления и профилей ионной имплантации, выберем 2-ой режим (*detailed calculation with full damage cascades*).

В последующем выпадающем перечне **Basic Plots** есть возможность выбрать соответствующие режимы визуализации траектории движения ионов.

Необходимо отметить то, что система координат TRIM подразумевает, что ось X ориентирована в глубину мишени перпендикулярно её плоскости.

Ниже располагается раздел **Ion Data**, в котором задаётся тип бомбардирующего иона, его энергия (в кэВ), а также угол наклона первичного пучка относительно поверхности. Выбор иона производится путем нажатия на кнопку **PT**, которая вызывает Периодическую таблицу, а выбор угла – путём ввода значения (0-89,9°) в поле **Angle of Incidence**. В этом разделе выбираем в качестве бомбардирующих ионов- **Ar**.

В разделе **Target Data** задаются характеристики мишени. Слева, в разделе **Layers**, задается количество слоёв мишени. Добавление слоя производится с помощью кнопки **Add New Layer**, а удаление – крестиком слева от названия слоя. В поле **Layer Name** вводится название слоя, в поле **Width** – толщина слоя (в ангстремах, нм, мкм, мм, см, км), в поле **Density** – плотность мишени, **Compound Correction** – поправка, связанная с образованием химических соединений между атомами мишени. Пункт **Gas** выбирается в случае работы с газообразными веществами.

Для выбора веществ мишени есть два пути. Первый – это создание мишени из отдельных веществ. Другой путь предполагает выбор соединения из списка имеющихся в программе. Для добавления вещества служит кнопка **Compound Dictionary**.

После добавления элементов можно изменять стехиометрию полученного соединения с помощью пункта **Atom Stoich** (в частях или в процентах), а также изменять установленные по умолчанию энергию смещения атома из равновесия (**Disp**), энергию связи с решеткой (**Latt**) и энергию связи атомов с поверхностью (**Sput**).

В разделе **Output Disk Files** выбираем те файлы, которые необходимо сохранить:

Ion Ranges – распределение ионов в мишени;

Backscattered Ions – данные об упруго отраженных ионах;

Transmitted Ions / Recoils – данные об ионах, пролетевших мишень насквозь;

Sputtered Atoms – распыленные атомы мишени;

Collision Details – информация о каскадах атомов отдачи.

После того, как были выбраны все вышеперечисленные параметры, нажимаем кнопку *Save Input & Run TRIM*. В результате запускается окно вычислений, которое представлено на рис. 2.5.

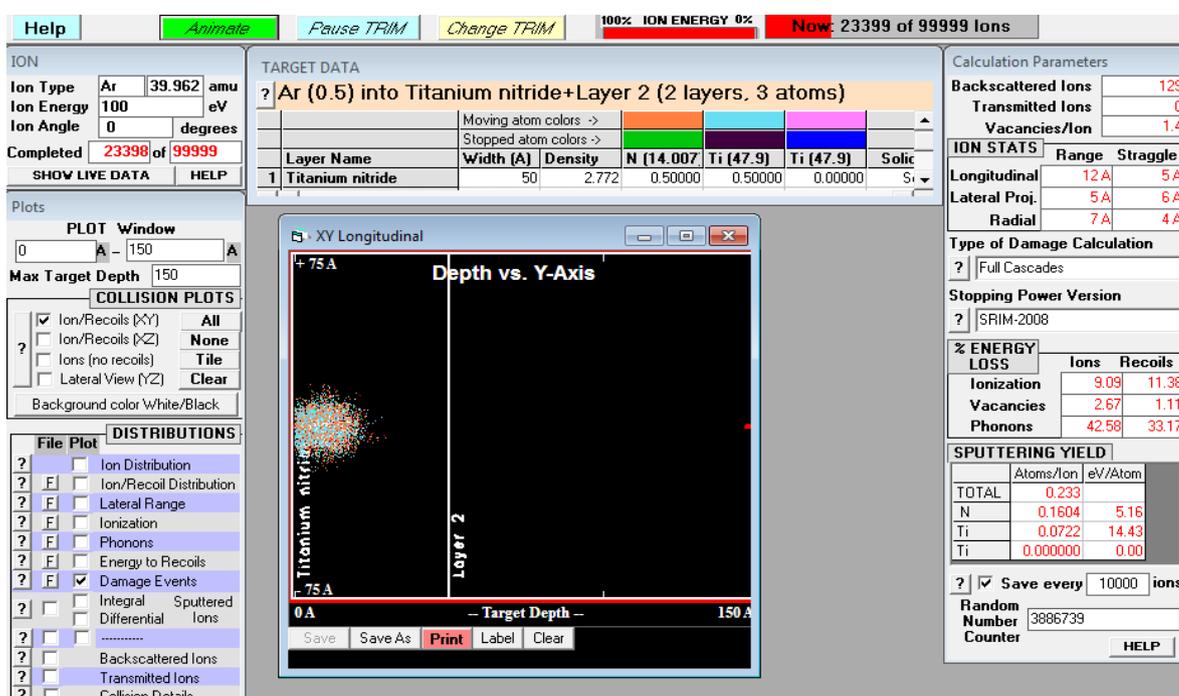


Рисунок 2.5 – Окно расчёта параметров

Чтобы определить профили ионной имплантации, в разделе *Distributions* нажимаем кнопку *Ion Distributions*. После чего на экране появляется окно, где распределение ионов выражается в виде графика. По окончании расчета график можно сохранить. Для этого нажимаем кнопку *Save As*, которая располагается в нижней части данного окна.

Для точности данных, расчёт проводим до 99999 ионов. По окончании этого процесса, все необходимые данные сохраняются. Все необходимые данные извлекаем из раздела *Output Disk Files*. Данные сохраняются в виде файлов *txt*. Ниже приведены некоторые из них:

Range_3d.txt - заключительное трёхмерное расположение всех ионов, которые останавливаются в мишени. Этот файл может быть запрошен только в программе настройки TRIM.

Backscat.txt - кинетика всех отражённых ионов (энергия, расположение и траектория).

Transmit.txt - кинетика всех переданных ионов (энергия, местоположение и траектория).

Sputter.txt - кинетика всех распылённых атомов из мишени.

Collison.txt - таблица всех атомных столкновений ион / мишени, которые приводят к повреждению мишени.

2.4 Программа SIMTRA

SIMTRA (*Simulation of the metal flux*) - моделирование металлического потока [33].

Эта программа позволяет моделировать перенос распыленных частиц в поток газа при напылении методом Монте-Карло. Столкновения атомов в газовой фазе влияют на распределение энергии и профиль осаждения распыленных атомов.

Используя определённые поверхности можно создать их геометрические представления и экспериментальную установку, которая визуализируется на графическом пользовательском интерфейсе. Движение заряженных частиц, генерируемых с начальными условиями (позиция, энергия и направление) от поверхности мишени, отслеживается до того, как они пересекут одну из заданных поверхностей. Доступны некоторые варианты для настройки

генерации частиц и переноса через газовую фазу, таких как: настраиваемые зоны эрозии, исходные энергетические и угловые распределения.

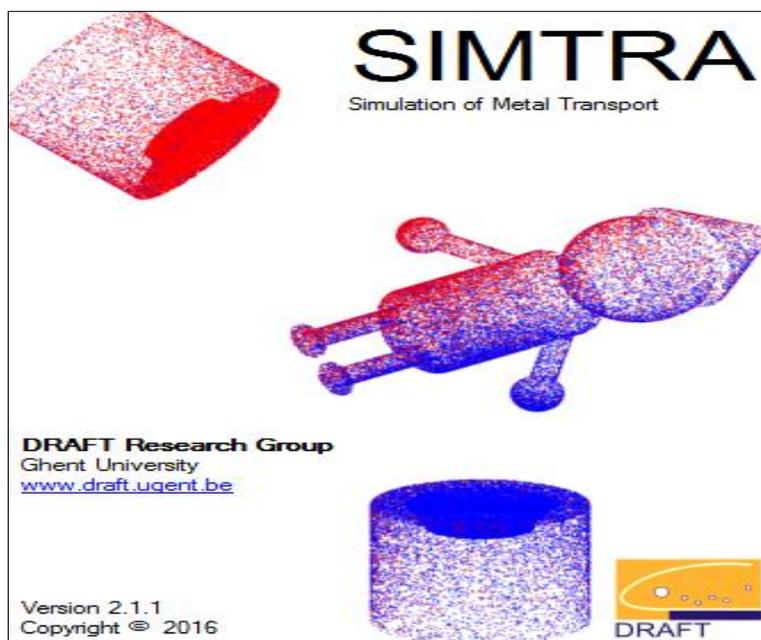


Рисунок 2.6 – Интерфейс программы SIMTRA

Для начала процесса моделирования нужно ввести настройки, т.е. основы моделирования SIMTRA. В SIMTRA конфигурация установки включает следующие объекты:

1. вакуумная камера, которая определяет внешние границы движения распылённых частиц;
2. магнетрон, содержащий мишень и определяющий начальное положение частиц;
3. подложка, на которую напыляется покрытие.

2.4.1 Алгоритм работы в программе SIMTRA

1) *Вакуумная камера*

В главном меню окна выбираем *Объект* → *Новый* → *Вакуумная камера*. Откроется окно *Конструкция вакуумной камеры* (рис. 4). Нужно выбрать форму камеры (параллелепипед или цилиндр), ввести размеры камеры, далее

необходимо выбрать вид, давления и температуру газа. Также можно сохранить отдельный файл, где находятся данные о профиле осаждения на стенках камеры. Для извлечения информации о каждой частице, которая осаждается на стенку камеры, выбираем **Сохранить индивидуальные данные**. Окончательный дизайн камеры изображается в окне визуализации.

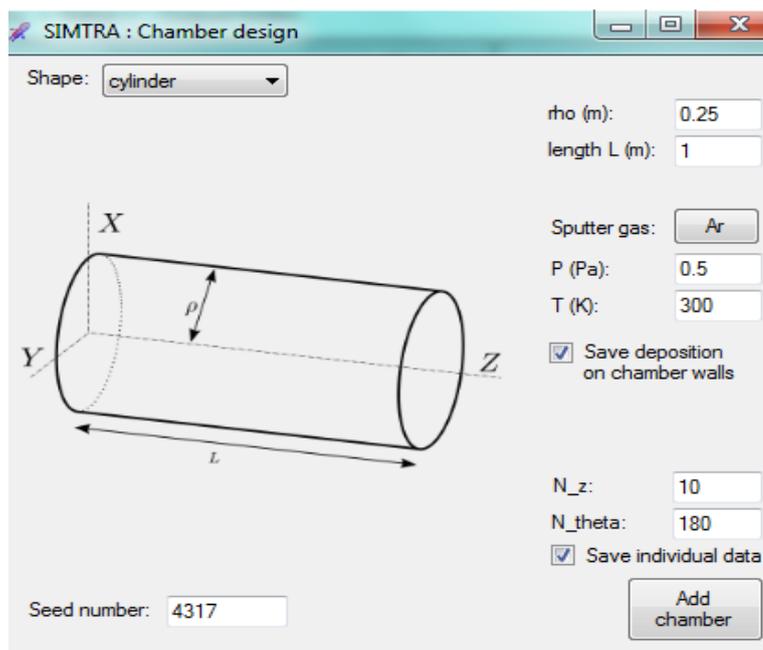


Рисунок 2.7 – Дизайн камеры

2) Магнетрон

Для добавления магнетрона в установку выполняем следующие команды: **Объект**→**Новый**→**Магнетрон**. Главное окно дизайнера объектов открывается в режиме магнетрон с тремя подокнами: окно геометрии, окно визуализации мишени и параметры переноса частиц. Геометрия объекта может быть установлена, путем добавления любого количества поверхностей и введения их размеров и ориентации. Здесь можно выбрать вид магнетрона. Нажимаем на кнопку **Создать объект** для формирования необходимых поверхностей. Далее выбираем вид мишени и общее количество падающих частиц на мишень. В разделе **Energy distribution** нужно задать максимальную энергию налетающих ионов.

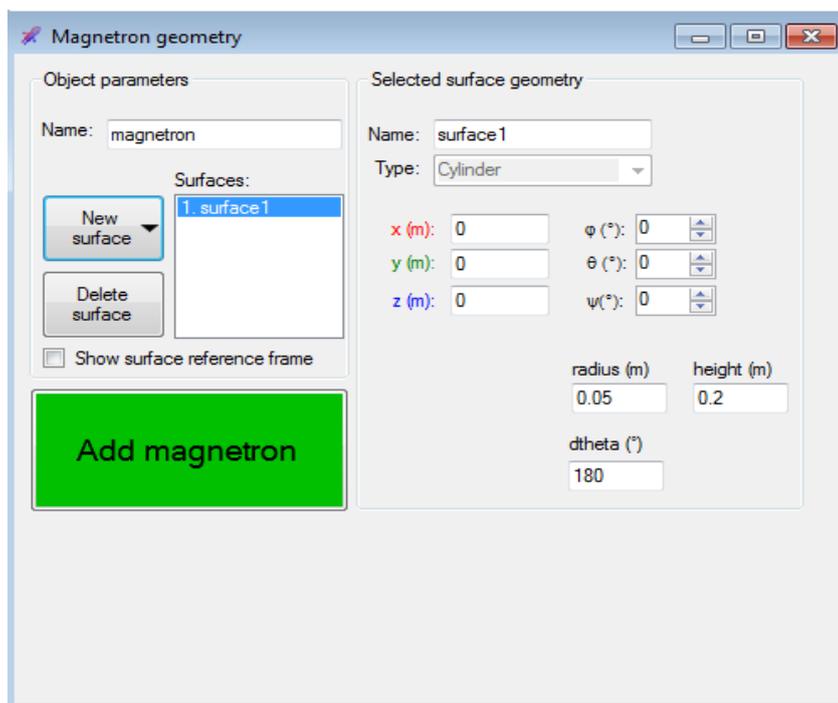


Рисунок.2.8 – Окно геометрии магнетрона со списком шести поверхностей для планарного магнетрона

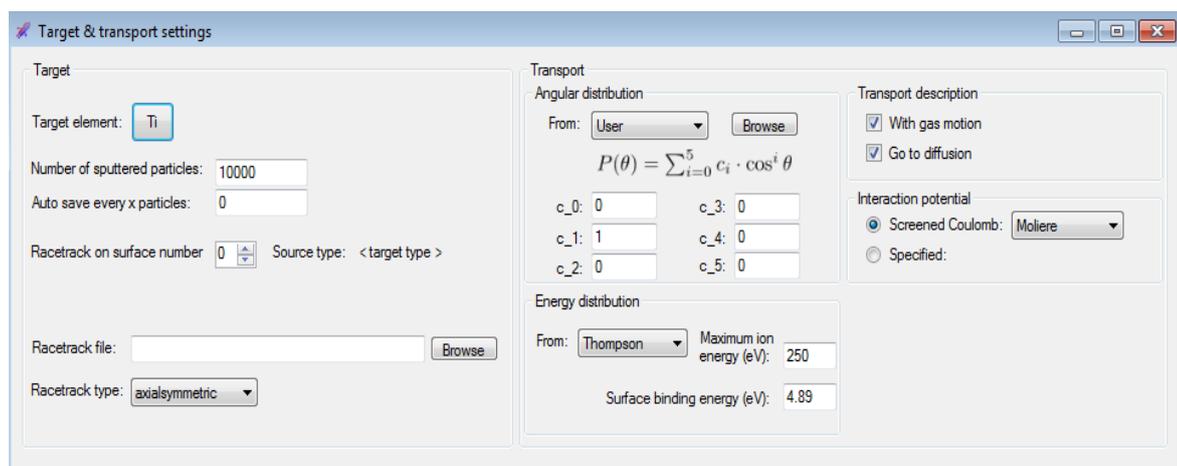


Рисунок 2.9 – Окно настройки мишени и параметров переноса частиц

3) Подложка

Подложка представляет собой фиктивный объект, состоящий из одной поверхности. В главном окне выбираем **Объект** → **Новый** → **Объект-фиктивный**. В окне **Геометрия объекта**, вводим название объекта подложки. Здесь необходимо ввести размеры подложки, а также его расстояние от мишени.

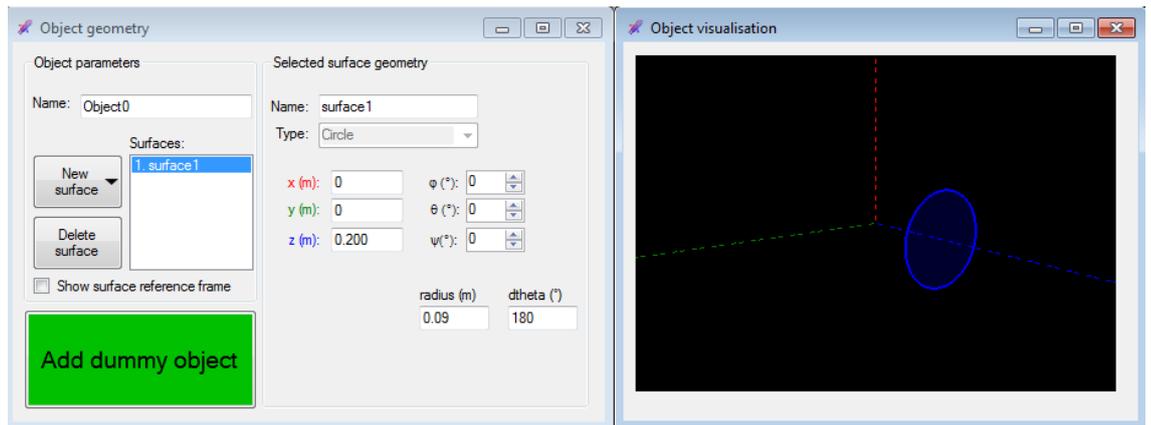


Рисунок 2.10 – Пример визуализации подложки

По окончании моделирования можно увидеть конечную иллюстрацию установки, которое изображено на рисунке 2.11

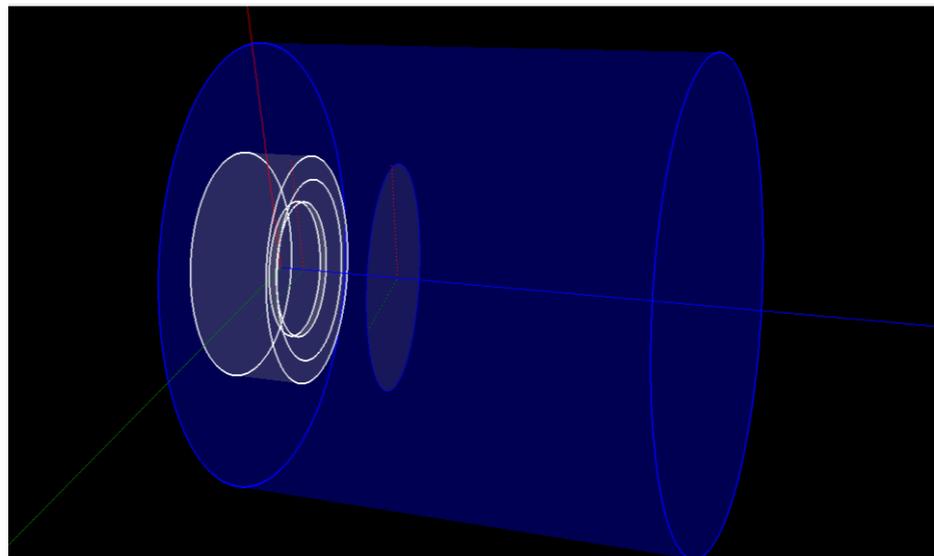


Рисунок 2.11 – Конечная визуализация магнетронной распылительной системы

Профили осаждения подложки можно найти в виде *txt* файла, которая сохраняется в папке данных. В данном случае этот файл содержит 10 строк и 10 столбцов, соответствующих сетке установленных в окне объекта конфигурации.

	10	10	10000	Number of arriving particles					
0	0	12	31	32	28	23	7	0	0
0	3	28	34	31	35	27	29	18	0
12	20	28	45	43	36	45	37	27	5
27	26	29	35	51	31	37	32	28	28
23	29	39	44	42	47	50	35	45	21
26	45	41	49	35	39	38	32	37	20
26	28	47	36	42	55	34	35	43	22
7	34	38	28	36	43	37	38	23	7
0	18	25	38	35	29	37	24	19	0
0	0	11	18	30	32	20	6	0	0

Рисунок 2.12 – Пример выходного файла программы SIMTRA, содержащего общее количество частиц, поступивших каждой ячейке подложки

4) Средние значения частиц

При проверке средних значений частиц, на подложка с размером $N_1 \times N_2$ будут вычисляться средние значения частицы, прибывающие к каждой ячейке. В зависимости от вида и различных параметров поверхности подразделяются на ячейки N_1 и N_2 для получения однородной сетки.

Таким образом, в конце моделирования создаются следующие выходные файлы:

- *E.txt*: средняя энергия частиц (эВ)
- *Flight.txt*: среднее время между распылением и осаждением частиц (с)
- *Ksi.txt*: средний косинус угла падения относительно к нормали поверхности
- *N.txt*: общее количество частиц, которые были осаждены на поверхности
- *Ncoll.txt*: среднее число столкновений частиц
- *Path.txt*: среднее расстояние частиц между столкновениями и испарением.

3 РАСЧЁТНАЯ ЧАСТЬ. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЯ

3.1 Расчёт полных и парциальных коэффициентов распыления с помощью программы SRIM

В данной работе были проведены расчёты коэффициентов распыления и определены профили ионной имплантации для следующих случаев:

- 1) металлическая поверхность, материал мишени: Ti; энергия налетающих ионов, эВ: 100, 320, 500;
- 2) поверхность, покрытая оксидом, материал мишени: TiO₂; энергия налетающих ионов, эВ: 100, 320, 500;
- 3) поверхность, покрытая нитридом, материал мишени: TiN; энергия налетающих ионов, эВ: 100, 320, 500;

В таблице 3.1 приведены данные коэффициентов распыления для всех трёх случаев.

Таблица 3.1

Тип мишени	Энергия, эВ	Полные коэффициенты распыления при бомбардировке			Парциальные коэффициенты распыления при бомбардировке		
		O ₂ ⁺	N ₂ ⁺	Ar ⁺	N ₂ ⁺	O ₂ ⁺	Ar ⁺
Ti	100	0,1903	0,2088	0,2183	-	-	-
	320	0,427	0,4542	0,466	-	-	-
	500	0,5412	0,5602	0,636	-	-	-
TiO ₂	100	0,3884	0,399	0,4387	0, 3139 (O ₂), 0,0745 (Ti)	0,3072 (O ₂), 0,0918 (Ti)	0,3189 (Ar), 0,1198 (Ti)

	320	0,9567	0,9257	1,107	0,7766 (O ₂), 0,1801(Ti)	0,6542 (O ₂), 0,2715 (Ti)	0,8175 (O ₂), 0,2893 (Ti)
	500	1,227	1,2172	1,3973	0,9782 (O ₂), 0,239 (Ti)	0,949 (O ₂), 0,278 (Ti)	1,10 (O ₂), 0,2973(Ti)
TiN	100	0,413	0,3899	0,4279	0,2746 (N), 0,1384 (Ti)	0,2625 (N), 0,1274 (Ti)	0,3527 (O ₂), 0,0752 (Ti)
	320	0,9459	0,9408	1,2053	0,6312 (N), 0,3147 (Ti)	0,6368 (N), 0,3040 (Ti)	0,9829 (O ₂), 0,2224 (Ti)
	500	1,2152	1,2166	1,6408	0,8125 (N), 0,4028 (Ti)	0,8193 (N), 0,3973 (Ti)	1,34 (O ₂), 0,3008 (Ti)

По полученным данным были построены зависимости полного и парциальных коэффициентов распыления от энергии ионов для каждого типа мишени (рисунке 3.1).

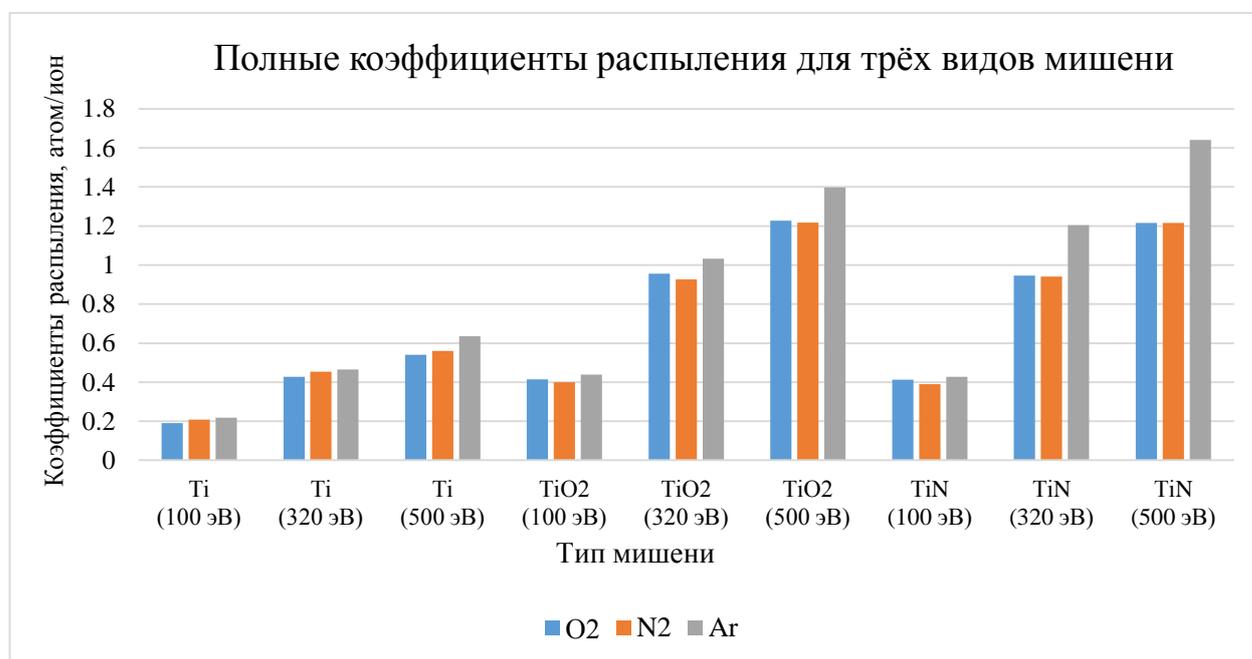


Рисунок 3.1 – Полные коэффициенты распыления для титана, оксида титана и нитрида титана при бомбардировке ионами: O₂, N₂, Ar с энергиями 100, 320, 500 эВ

Значения коэффициентов распыления для каждого типа мишени близки между собой. Для титановой мишени коэффициенты распыления при

бомбардировке ионами кислорода минимальны, а коэффициенты распыления при бомбардировке ионами аргона – максимальны. Коэффициент распыления при бомбардировке ионами азота отличается от коэффициентов для ионов кислорода и аргона на 8 % и 3 % соответственно.

Для мишени из оксида титана коэффициенты распыления при бомбардировке ионами азота минимальны, а коэффициенты распыления при бомбардировке ионами аргона – максимальны.

Для мишени из оксида титана коэффициенты распыления при бомбардировке ионами азота минимальны, а коэффициенты распыления при бомбардировке ионами аргона – максимальны. Коэффициент распыления при бомбардировке ионами кислорода отличается от коэффициентов распыления ионами азота и аргона на 4 % и 6 % соответственно.

Для мишени из нитрида титана коэффициенты распыления при бомбардировке ионами азота наименьшие, а коэффициенты распыления при бомбардировке ионами аргона имеют наибольшее значения. Коэффициент распыления при бомбардировке ионами кислорода отличается от коэффициентов распыления при бомбардировке ионами азота и аргона на 6 % и 3 % соответственно.

Из рисунка 3.1 можно увидеть, что из трёх видов ионов, коэффициенты распыления при бомбардировке ионами аргона являются наибольшими. Это можно объяснить тем, что молярная масса аргона имеет наибольшее значение для трёх рассмотренных случаев, коэффициент распыления растёт с увеличением массы и энергии падающих ионов.

Далее по данным из таблицы 3.1 построены графики парциальных коэффициентов распыления для оксида титана при разных значениях налетающих ионов. График представлен на рисунке 3.2.

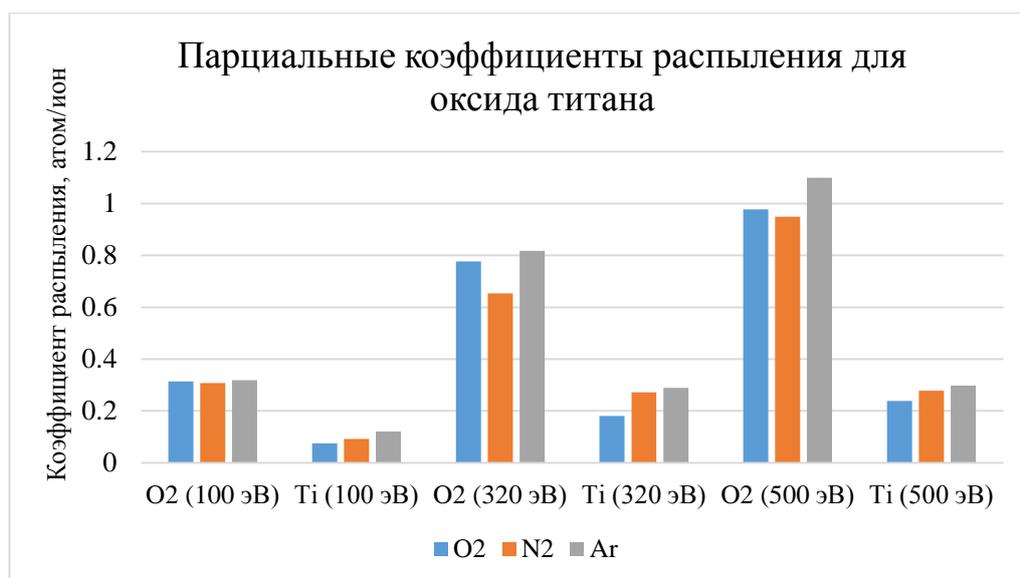


Рисунок 3.2 – Парциальные коэффициенты распыления для нитрида титана, при бомбардировке ионами: O₂, N₂, Ar с энергиями 100, 320, 500 эВ

Из рисунка 3.2 видно, что для оксида титана парциальные коэффициенты распыления кислорода при бомбардировке ионами азота минимальны, а при бомбардировке ионами аргона - максимальны. Это объясняется тем, что у аргона самое высокое значение молярной массы.

А значения парциальных коэффициентов распыления титана ионами кислорода – наименьшие, при бомбардировке ионами аргона по-прежнему – максимальны.

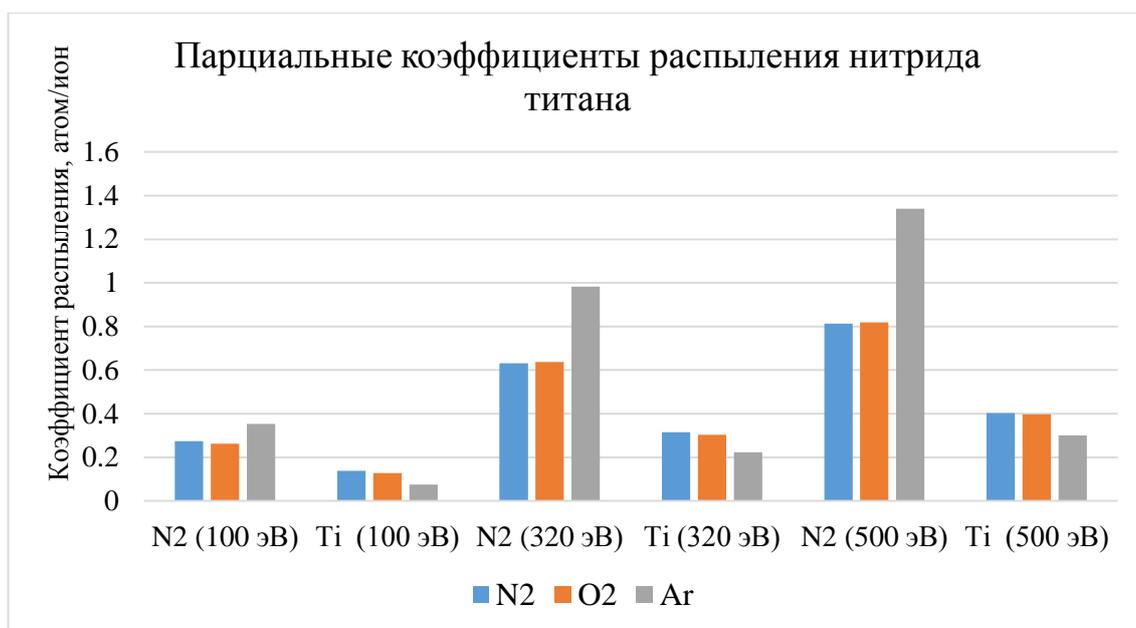


Рисунок 3.3 – Парциальные коэффициенты распыления для нитрида титана при бомбардировке ионами: O₂, N₂, Ar с энергиями 100, 320, 500 эВ

Из графика можно увидеть, что для нитрида титана парциальные коэффициенты распыления при бомбардировке ионами кислорода и парциальные коэффициенты распыления при бомбардировке ионами азота имеют почти одинаковое значение. А парциальные коэффициенты распыления при бомбардировке ионами аргона по-прежнему максимальны.

Значения парциальных коэффициентов распыления титана при бомбардировке ионами кислорода и азота почти равны по значению, а для ионов аргона имеют наименьшие значения.

Кроме того, нужно отметить, что для нитрида титана значения парциальных коэффициентов распыления азота в два раза больше значений парциальных коэффициентов распыления титана.

3.2 Расчёт коэффициентов распыления для титановой мишени при бомбардировке ионами аргона для разных значений энергии налетающих ионов

Был проведён расчёт коэффициентов распыления титановой мишени для разных значений энергий ионов от 50 эВ до 500 эВ, шаг был равен 50 эВ.

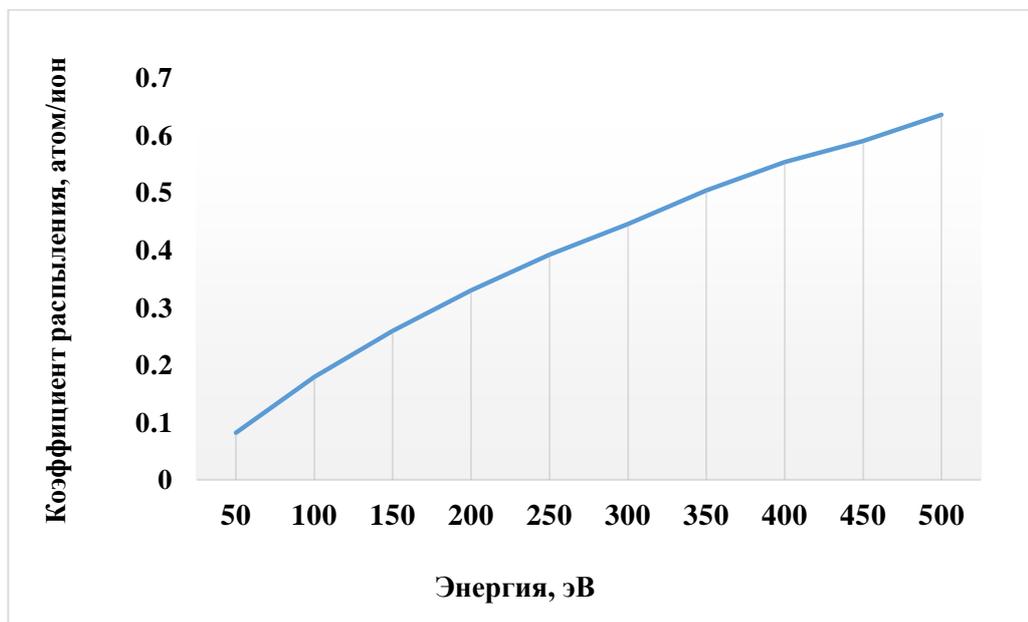


Рисунок 3.4 – Зависимость коэффициентов распыления для титановой мишени при бомбардировке ионами аргона для разных значений энергий

Из рисунка 3.4 видно, что значения коэффициенты распыления возрастает с ростом энергии бомбардирующих ионов. График имеет плавный возрастающий вид. Это объясняется тем, что с возрастанием энергии ионов коэффициент распыления также растёт, так как у иона с наибольшим значением энергии имеется высокая возможность разорвать энергии связи атомов в кристаллической решетке.

3.3 Расчёт knock-on коэффициентов для разных типов мишени

С помощью программы SRIM проведен расчёт knock-on коэффициентов для следующих случаев:

1. Поверхность, покрытая оксидом

Мишень: Слой 1: TiO_2 , толщина 5 Å

Слой 2: Ti, толщина 100 Å

Ион: Аргон Ar⁺

Энергия налетающих ионов, эВ: 320

2. Поверхность, покрытая нитридом

Мишень: Слой 1: TiN, толщина 5 Å

Слой 2: Ti, толщина 100 Å

Ион: Аргон Ar⁺

Энергия налетающих ионов, эВ: 320

Коэффициент knock-on - это средняя вероятность того, что после столкновения с налетающим ионом, атом перемещается с поверхности мишени в её глубину.

В таблице 3.2 приведены данные о knock-on коэффициентов и парциальных коэффициентов распыления для двух случаев.

Таблица 3.2

Тип мишени	Энергия, эВ	Парциальные коэффициенты распыления	Knock-on коэффициенты
Поверхность, покрытая оксидом Мишень: слой 1: TiO ₂ , толщина 5 Å слой 2: Ti, толщина 100 Å Ион: Аргон Ar ⁺	320	0,13 (Ti); 0,57 (O2)	0,3213
Поверхность, покрытая нитридом Мишень: слой 1: TiN, толщина 5 Å	320	0,2 (Ti); 0,42 (N)	0,4228

слой 2: Ti, толщина 100 Å Ион: Аргон Ar ⁺			
--	--	--	--

Из данной таблицы можно сделать следующий вывод, что knock-on коэффициент для поверхности, покрытой нитридом титана, отличается от knock-on коэффициента для поверхности, покрытой слоем оксида титана, на 24%.

3.4 Расчет профилей ионной имплантации для разных случаев

Далее с помощью программы SRIM проведён расчёт профилей ионной имплантации и определены средний пробег и среднеквадратичное отклонение для следующих случаев:

1 Металлическая поверхность

Мишень: Ti

Ион: Кислород O₂⁺

Энергия налетающих ионов, эВ: 320

2 Металлическая поверхность

Мишень: Ti

Ион: Азот N₂⁺

Энергия налетающих ионов, эВ: 320

3 Поверхность, покрытая оксидом

Мишень: Слой 1: TiO₂, толщина 5 Å

Слой 2: Ti, толщина 100 Å

Ион: Аргон Ar⁺

Энергия налетающих ионов, эВ: 320

4 Поверхность, покрытая нитридом

Мишень: Слой 1: TiN, толщина 5 Å

Слой 2: Ti, толщина 100 Å

Ион: Аргон Ar⁺

Энергия налетающих ионов, эВ: 320.

Был проведён расчёт профилей ионной имплантации для всех вышеперечисленных случаев. На рисунках 3.5-3.8 приведены их примеры расчётов в программе SRIM.

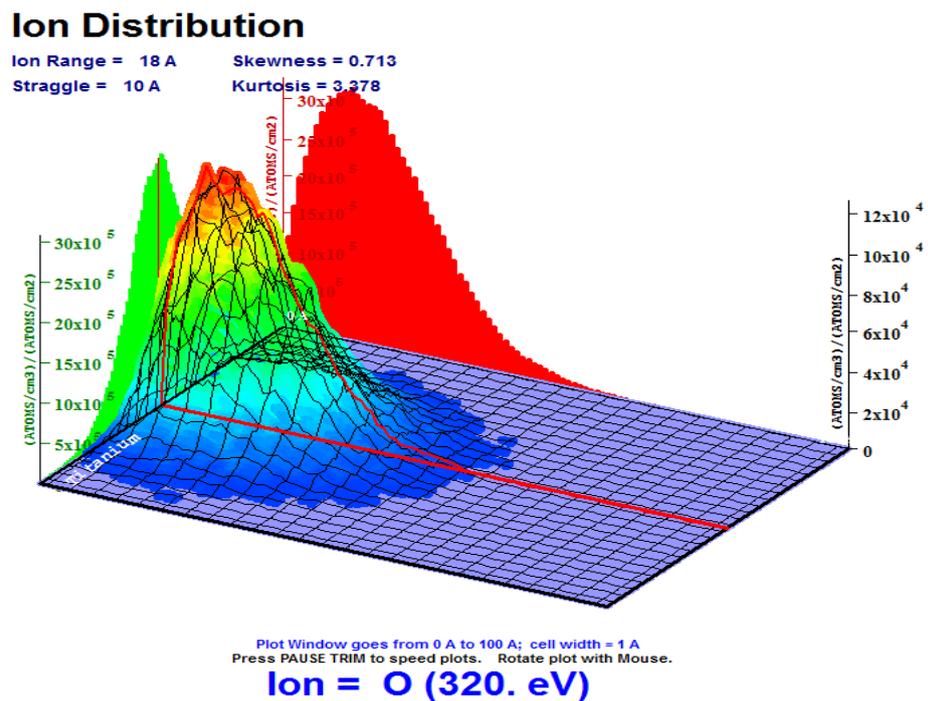
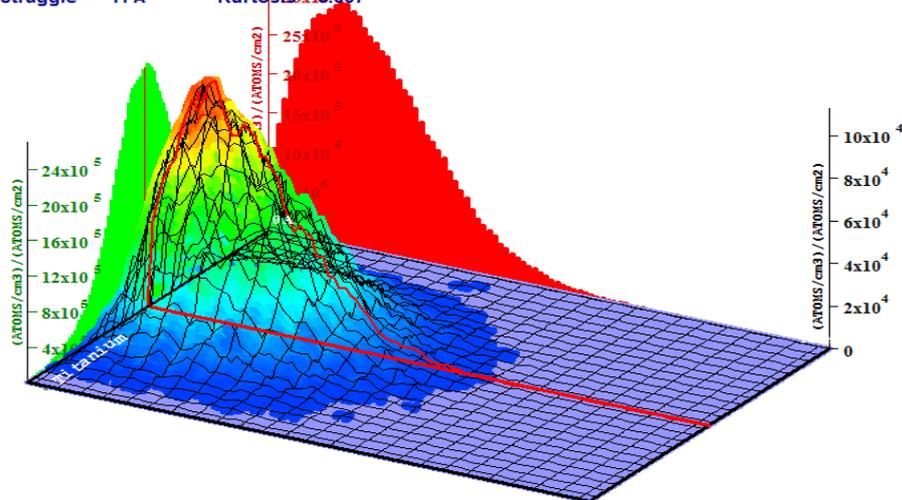


Рисунок 3.5 – Профили ионной имплантации для титановой мишени при бомбардировке ионами кислорода

Ion Distribution

Ion Range = 19 A Skewness = 0.709
Straggle = 11 A Kurtosis = 3.307

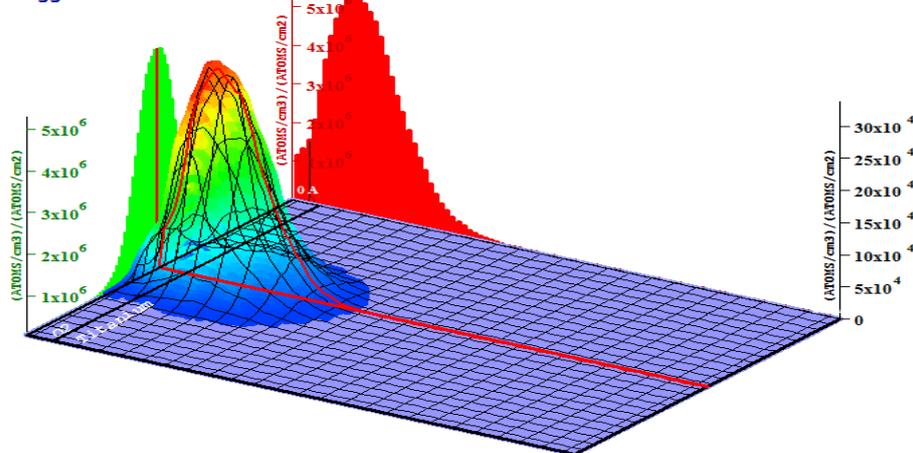


Ion = N (320. eV)

Рисунок 3.6 – Профили ионной имплантации для титановой мишени при бомбардировке ионами азота

Ion Distribution

Ion Range = 14 A Skewness = 0.455
Straggle = 7 A Kurtosis = 3.125



Ion = Ar (320. eV)

Рисунок 3.7 – Профили ионной имплантации для оксида титана при бомбардировке ионами аргона

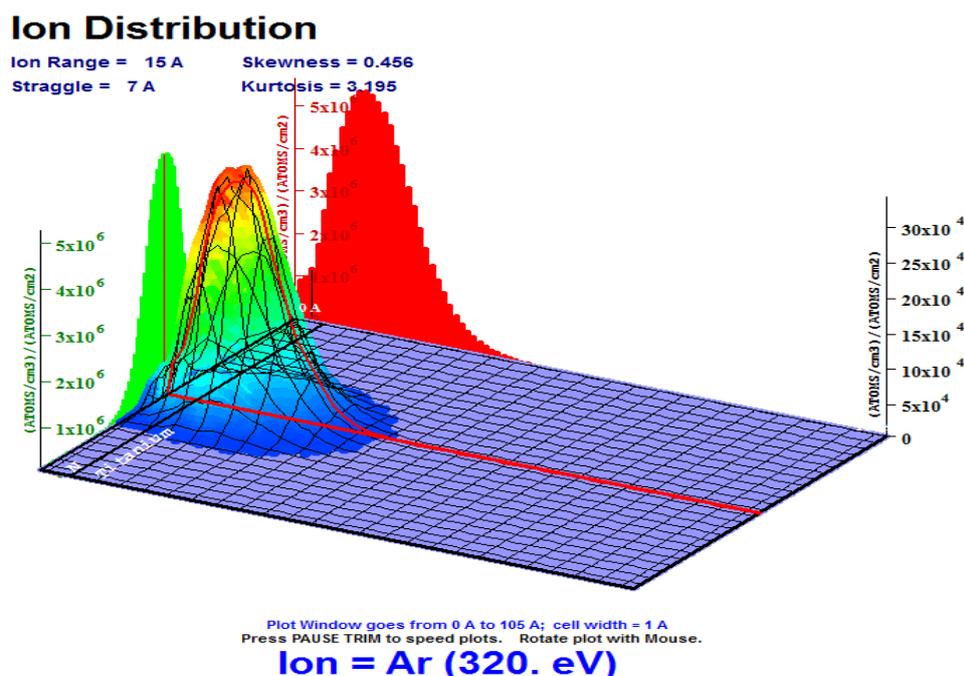


Рисунок 3.8 – Профили ионной имплантации для нитрида титана при бомбардировке ионами аргона

В таблице 3.3 представлены данные о среднем пробеге и среднеквадратичном отклонении ионов для разных видов мишени и бомбардирующих ионов.

Таблица 3.3

Вид мишени	Налетающие частицы	Средний пробег (ангстрем)	Среднеквадратичное отклонение (ангстрем)
Титан	O ₂ ⁺	18	10
Титан	N ₂ ⁺	19	11
Оксид титана	Ar	14	7
Нитрид титана	Ar	15	7

По полученным данным можно сделать следующие выводы: для титановой мишени при бомбардировке ионами азота, средний пробег и среднеквадратичное отклонение имеют максимальные значения – 19 А и 10 А соответственно. А для оксида титана при бомбардировке ионами аргона

средний пробег и среднеквадратичное отклонение имеют минимальные значения – 14 А и 7 А.

3.5 Расчет профилей осаждения подложки

С помощью программы SIMTRA были проведены расчёты профилей осаждения подложки, по полученным данным построены графики зависимости, которые приведены ниже. Расчеты проводились для титановой мишени при бомбардировке ионами аргона.

1) Средняя энергия частиц (эВ): $P(Ar)=0.2 Pa$, $T=300K$

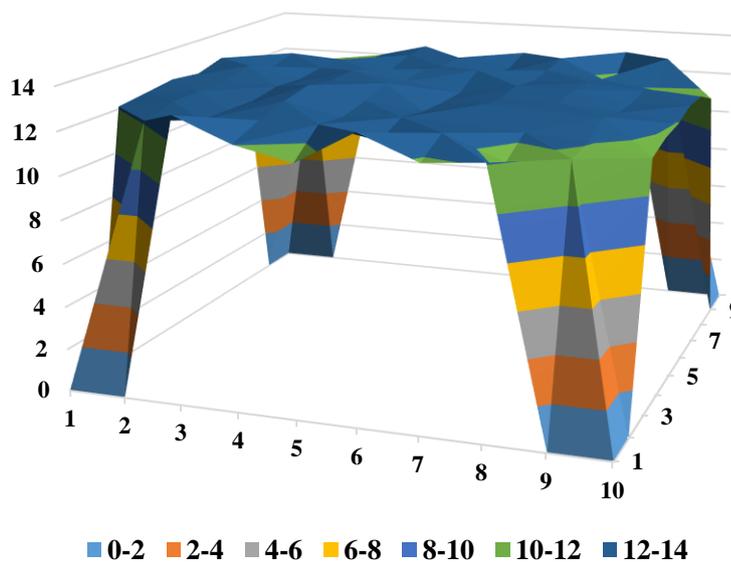


Рисунок 3.9 – Средняя энергия частиц

Из рисунка 3.9 видно, что значения средней энергии распыленных атомов имеет равномерное распределения на подложке и составляет около 13 эВ.

2) Средний косинус угла падения относительно к нормали поверхности

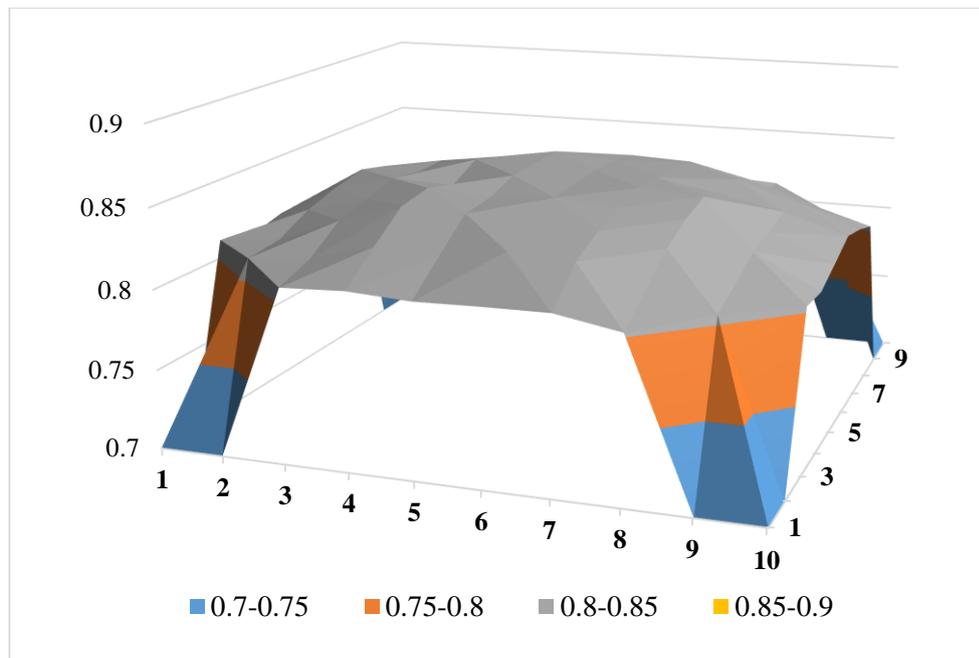


Рисунок 3.9 – Средний косинус угла падения относительно к нормали поверхности

Средний косинус угла падения частиц к нормали поверхности подложки имеет равномерное распределение, а значения косинуса угла лежит в районе от 0,8-0,9.

3) Общее количество частиц, которые были осаждены на поверхности подложки

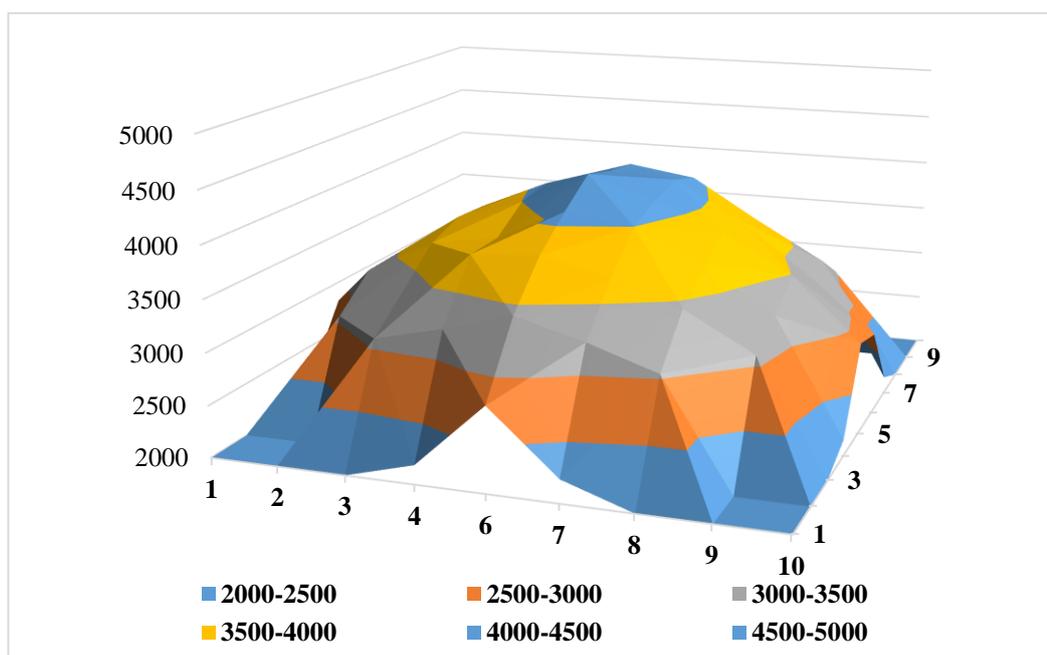


Рисунок 3.10 – Общее количество частиц, которые были осаждены на поверхности подложки

Общее количество частиц участвующих процессе составляет 100000. Из них в центральной области подложки находится наибольшее количество частиц и оно составляет 4500 атомов. В направлении к краю подложки количество осаждённых частиц уменьшается на 33 % и составляет около 3000 частиц.

Кроме того, из этого же графика можно предположить, что скорость напыления имеет наибольшее значения в середине подложки, а к краю скорость уменьшается.

4) Среднее число столкновений частиц при перемещении к подложке

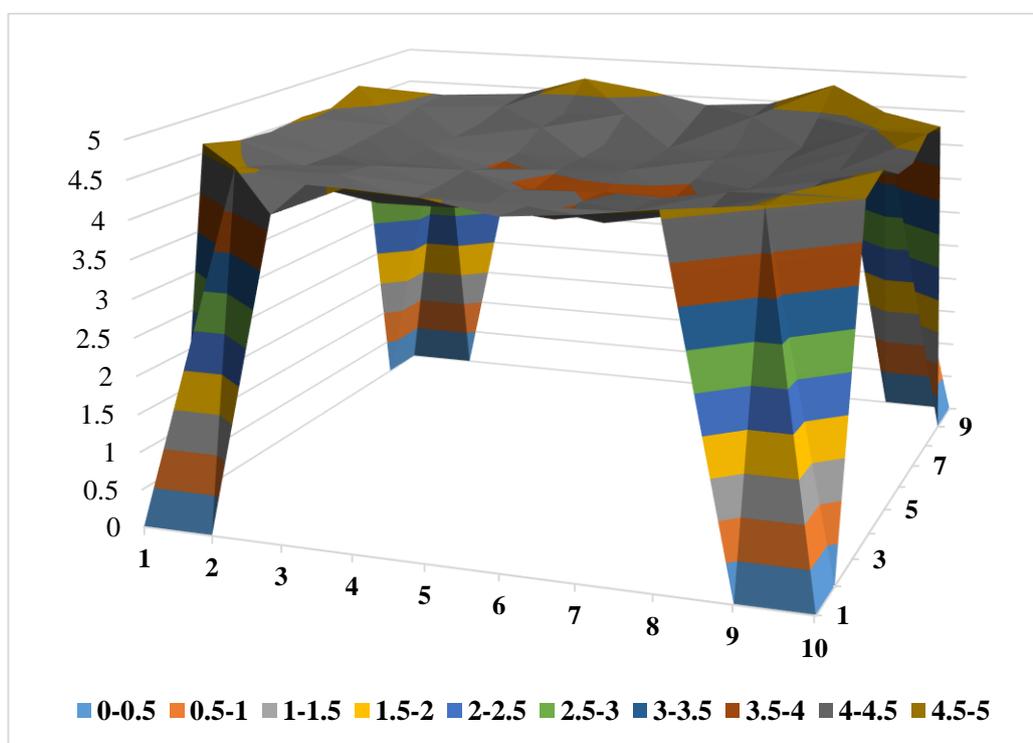


Рисунок 3.11 – Среднее число столкновений частиц при перемещении к подложке

Среднее число столкновений атомов мишени с бомбардирующими ионами по пути к подложке составляет 4,5. А в центральной области – 3,5.

5) среднее время между распылением и осаждением частиц, (с)

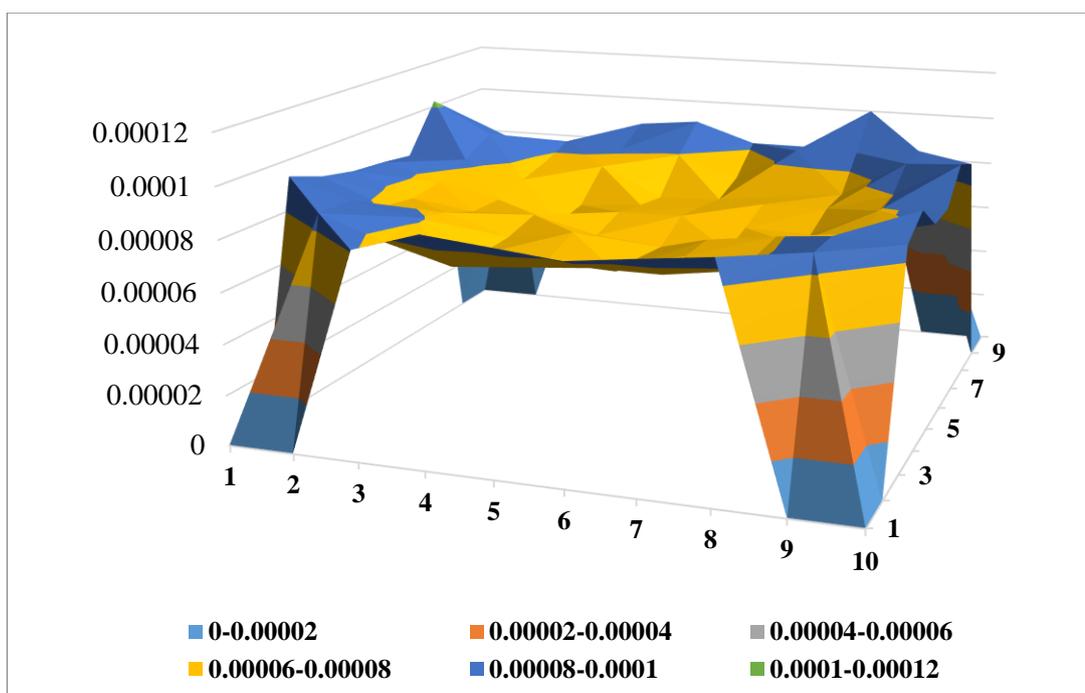


Рисунок 3.12 – Среднее время между распылением и осаждением частиц, (с)

К краю подложки время между распылением и осаждением частиц составляет около 0,00012 с. А в центре подложки- 0,00008 с. Разность значения времени составляет 33 %.

3.6 Расчёт полных и парциальных коэффициентов распыления по полуэмпирическим уравнениям и формулам Зигмунда

По формулам, приведённым в первой главе работы, были рассчитаны коэффициенты распыления для титана, оксида титана и нитрида титана при бомбардировке ионами аргона, кислорода и азота с энергией 320 эВ. Эти расчёты проводились с целью сравнения значений с программными расчётами. Результаты приведены в таблице 3.4.

Таблица 3.4

Вид ионов	Полные коэффициенты распыления для мишеней					
	Ti		TiO_2		TiN	
	Расчёт по формулам	Отличия от программного расчёта SRIM	Расчёт по формулам	Отличия от программного расчёта SRIM	Расчёт по формулам	Отличия от программного расчёта SRIM
Ar	0,423	9 %	0,8647	22 %	1,07	12 %

O_2	0,34	20 %	0,727	24 %	0,698	26 %
N_2	0,36	21 %	0,667	28 %	0,693	26 %

Расчёты проводились для налетающих частиц с энергией 320 эВ. По полученным расчётам видно, что для трёх видов мишеней при бомбардировке ионами аргона коэффициенты распыления имеют наибольшие значения. А это в свою очередь соответствует теории.

Сравнивая два вида расчетов, можно отметить следующее: данные расчетов, полученных с помощью полуэмпирических формул отличаются от расчетов программного моделирования. Расчеты в программе SRIM несёт вероятностный характер, что во многих случаях могут иметь отличия с расчетными данными из известных литературных источников.

Также нужно отметить, что данные формулы для расчётов коэффициента распыления имеют некоторые неточности при расчёте коэффициентов распыления для составных мишеней. Кроме того, в этих полуэмпирических формулах энергия связи атомов, молярная масса мишени, её плотность и атомный номер берутся из среднего значения двух составных, что может быть причиной неточности расчётов.

4 ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСООФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ

4.1 Предпроектный анализ

4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Главная задача составляет создание биосовместимых покрытий на основе оксидов и нитридов титана методом реактивного магнетронного напыления, при этом обработана измерение зондовых параметров. Данные были обработаны на программе Wolfram Mathematic. Результат исследование имеет хороший перспектив и потенциал.

4.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

Таблица 4.1 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок)

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		Б _ф	Б _{к1}	Б _{к2}	К _ф	К _{к1}	К _{к2}
1	2	3	4	5	6	7	8
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
1. Повышение производительности труда пользователя	0,2	5	4	3	1	0,8	0,6
2. Удобство в эксплуатации (соответствует требованиям потребителей)	0,06	5	3	3	0,3	0,18	0,18
3. Надежность	0,05	5	4	3	0,25	0,2	0,15
4. Простота эксплуатации	0,07	5	3	3	0,35	0,21	0,21
5. Качество	0,09	5	3	3	0,45	0,27	0,27

интеллектуального интерфейса							
Экономические критерии оценки эффективности							
1. Конкурентоспособность продукта	0,06	5	4	3	0,3	0,24	0,18
2. Уровень проникновения на рынок	0,07	4	5	5	0,28	0,35	0,35
3. Цена	0,09	5	4	4	0,45	0,36	0,36
4. Предполагаемый срок эксплуатации	0,07	5	5	5	0,35	0,35	0,35
5. Послепродажное обслуживание	0,06	5	3	2	0,3	0,18	0,12
6. Финансирование научной разработки	0,05	4	5	4	0,12	0,15	0,12
7. Срок выхода на рынок	0,05	5	4	4	0,2	0,16	0,16
8. Наличие сертификации разработки	0,08	4	5	4	0,24	0,3	0,24
Итого	1	62	52	46	4,59	3,75	3,29

4.1.3 SWOT-анализа

Для исследования коммерциализации проекта и для расчета бюджета необходимо провести SWOT-анализ.

Анализ проводится в несколько этапов.

Первый этап SWOT-анализа заключается в описании сильных (Strengths) и слабых (Weaknesses) сторон проекта, в раскрытии возможностей (Opportunities) и угроз (Threats) для реализации проекта, которые могут появиться в его внешней среде.

Результаты первого анализа представлены в таблице 4.3.

После того как сформулированы четыре области SWOT переходят к реализации второго этапа.

Таблица 4.2 – SWOT-анализ

	Сильные стороны научно-исследовательского проекта:	Слабые стороны научно-исследовательского проекта:
	<p>С1. Заявленная экономичность технологии.</p> <p>С2. Экологичность технологии.</p> <p>С3. Квалифицированный персонал.</p> <p>С4. Более низкая стоимость производства по сравнению с другими технологиями.</p>	<p>Сл1. Длительный период при некоторых видах исследований.</p> <p>Сл2. Отсутствие необходимого оборудования для проведения исследований</p> <p>Сл3. Недостаток финансовых средств</p> <p>Сл4. Отсутствие инжиниринговой компании, способной построить производство под ключ</p>
Возможности:		
<p>В1. Интерес к подобным исследованиям со стороны иностранных партнеров</p> <p>В2. Использование научно-исследовательские достижения ТПУ</p> <p>В3. Ценовая стабильность на рынке товаров-конкурентов</p>		
Угрозы:		

У1. Отсутствие спроса на новые технологии производства У2. Ограничения на экспорт технологии У3. Несвоевременное финансовое обеспечение научного исследования со стороны государства		
--	--	--

После того как сформулированы четыре области SWOT переходят к реализации второго этапа.

Второй этап заключается в выявлении соответствия сильных и слабых сторон научно-исследовательского проекта внешним условиям окружающей среды. Это соответствие или несоответствие должны помочь выявить степень необходимости проведения стратегических изменений. Использование интерактивной матрицы помогает разобраться с различными комбинациями взаимосвязей областей SWOT.

Таблица 4.3 – Интерактивная матрица работы

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

Анализ интерактивных таблиц представляется в форме записи сильно коррелирующих сильных сторон и возможностей, или слабых сторон и возможностей и т.д. следующего вида: B1C1C2C3; B2C1C2C3. Каждая из записей представляет собой направление реализации проекта. В таблице факторы помечаются: соответствие сильных сторон возможностям знаком плюс

«+»); слабое соответствие знаком минус«-»); если есть сомнения в том, что поставить «+» или «-» - знак«0» (таблица 4.3).

Третий этап включает в себя итоговую матрицу SWOT-анализа, которая приводится в магистерской диссертации (таблица 4.4).

Результаты SWOT-анализа учитываются при разработке структуры работ, выполняемых в рамках научно-исследовательского проекта.

Таблица 4.4 – SWOT анализ

	Сильные стороны научно-исследовательского проекта:	Слабые стороны научно-исследовательского проекта:
	<p>С1. Заявленная экономичность технологии.</p> <p>С2. Экологичность технологии.</p> <p>С3. Квалифицированный персонал.</p> <p>С4. Более низкая стоимость производства по сравнению с другими технологиями.</p>	<p>Сл1. Длительный период при некоторых видах исследований.</p> <p>Сл2. Отсутствие необходимого оборудования для проведения исследований</p> <p>Сл3. Недостаток финансовых средств</p> <p>Сл4. Отсутствие инжиниринговой компании, способной построить производство под ключ</p>
Возможности:		
<p>В1. Интерес к подобным исследованиям со стороны иностранных партнеров</p> <p>В2. Использование научно-исследовательские достижения ТПУ</p> <p>В3. Ценовая стабильность на рынке товаров-конкурентов</p>	<p>При использовании научно-исследовательских достижений ТПУ можно повысить снизить стоимость производимой продукции и тем самым заявить об экономичности, экологичности технологии, а также повышении квалификации персонала.</p>	<p>Научно-исследовательские достижения ТПУ могут быть использованы при отсутствии необходимого оборудования и недостатке финансирования.</p>

Угрозы:		
У1. Отсутствие спроса на новые технологии производства У2. Ограничения на экспорт технологии У3. Несвоевременное финансовое обеспечение научного исследования со стороны государства	Заявленная экономичность и энергоэффективность может быть не оправдана при отсутствие спроса на новые технологии, ограничении на экспорт и несвоевременном финансировании научного исследования.	Отсутствие необходимого оборудования и длительность периода исследований может привести к отсутствию спроса на новые технологии.

Результаты SWOT-анализа учитываются при разработке структуры работ, выполняемых в рамках научно-исследовательского проекта.

Приведённый анализ показал, что технология, находясь на этапе разработки, имеет хорошие шансы на коммерциализацию, с учетом проявляемого интереса партнеров и удачных исследований. При этом, если переход разработки в стадию коммерциализации затянется, то возможна потеря спроса на готовую технологию.

4.2 Оценка готовности проекта к коммерциализации

Ниже представлена таблица степени готовности к коммерциализации научной разработки, а также компетенция разработчика научного проекта. Оценка осуществляется по шкале от 1 до 5 приведена в таблице 4.5.

Таблица 4.5 – Бланк оценки степени готовности научного проекта к коммерциализации

№ п/п	Наименование	Степень проработанности научного проекта	Уровень имеющихся знаний у разработчика
1.	Определен имеющийся научно-технический задел	5	4
2.	Определены перспективные направления коммерциализации	3	4

	научно-технического задела		
3.	Определены отрасли и технологии (товары, услуги) для предложения на рынке	2	2
4.	Определена товарная форма научно-технического задела для представления на рынок	1	1
5.	Определены авторы и осуществлена охрана их прав	1	2
6.	Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности	1	1
7.	Проведены маркетинговые исследования рынков сбыта	1	1
8.	Разработан бизнес-план коммерциализации научной разработки	1	1
9.	Определены пути продвижения научной разработки на рынок	1	1
10.	Разработана стратегия (форма) реализации научной разработки	1	1
11.	Проработаны вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок	1	1
12.	Проработаны вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот	1	2
13.	Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	2	3
14.	Имеется команда для коммерциализации научной разработки	2	2
15.	Проработан механизм реализации научного проекта	1	1
	ИТОГО БАЛЛОВ	24	26

Перспективность проекта ниже среднего, следовательно, для реализации проекта необходимо привлечь специалистов в сфере маркетинга, продумать вопросы финансирования со стороны предприятий. Также необходимо привлечь/обучить специалистов, работающих в области

радиационных технологий и обладающими навыками работы на вакуумных установках.

4.3 Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования

При коммерциализации научно-технических разработок продавец (а это, как правило, владелец соответствующих объектов интеллектуальной собственности), преследует вполне определенную цель, которая во многом зависит от того, куда в последующем он намерен направить (использовать, вложить) полученный коммерческий эффект. Это может быть получение средств для продолжения своих научных исследований и разработок (получение финансирования, оборудования, уникальных материалов, других научно-технических разработок и т.д.), одноразовое получение финансовых ресурсов для каких-либо целей или для накопления, обеспечение постоянного притока финансовых средств, а также их различные сочетания.

При этом время продвижения товара на рынок во многом зависит от правильности выбора метода коммерциализации. Задача данного раздела магистерской диссертации – это выбор метода коммерциализации объекта исследования и обоснование его целесообразности. Для того чтобы это сделать необходимо ориентироваться в возможных вариантах.

Выделяют следующие методы коммерциализации научных разработок.

1. *Торговля патентными лицензиями*, т.е. передача третьим лицам права использования объектов интеллектуальной собственности на лицензионной основе. При этом в патентном законодательстве выделяющие виды лицензий: исключительные (простые), исключительные, полные лицензии, сублицензии, опционы.

2. *Передача ноу-хау*, т.е. предоставление владельцем ноу-хау возможности его использовать другим лицом, осуществляемое путем раскрытия ноу-хау.

3. *Инжиниринг* как самостоятельный вид коммерческих операций предполагает предоставление на основе договора инжиниринга одной стороной, именуемой консультантом, другой стороне, именуемой заказчиком, комплекса или отдельных видов инженерно-технических услуг, связанных с проектированием, строительством и вводом объекта в эксплуатацию, с разработкой новых технологических процессов на предприятии заказчика, усовершенствованием имеющихся производственных процессов вплоть до внедрения изделия в производство и даже сбыта продукции.

4. *Франчайзинг*, т.е. передача или переуступка (на коммерческих условиях) разрешения продавать чьи-либо товары или оказывать услуги в некоторых областях.

5. *Организация собственного предприятия.*

6. *Передача интеллектуальной собственности* в уставной капитал предприятия.

7. *Организация совместного предприятия*, т.е. объединение двух и более лиц для организации предприятия.

8. *Организация совместных предприятий*, работающих по схеме «российское производство – зарубежное распространение».

Перспективность данного научного исследования выше среднего, поэтому не все аспекты рассмотрены и изучены. Таким образом, для организации предприятия этого не достаточно (пункт 4 – 8 не подходят). Но так как основной научно-технический задел определен, этого достаточно для коммерциализации для следующих методов (пункты 1 - 3): Торговля патентной лицензией; передача ноу-хау и инжиниринг. Степени проработанности научного проекта и уровень знаний разработчика достаточно для реализации пунктов, которые были выбраны.

4.4 Инициация проекта

Группа процессов инициации состоит из процессов, которые выполняются для определения нового проекта или новой фазы существующего.

В рамках процессов инициации определяются изначальные цели и содержание и фиксируются изначальные финансовые ресурсы. Определяются внутренние и внешние заинтересованные стороны проекта, которые будут взаимодействовать и влиять на общий результат научного проекта. Данная информация закрепляется в уставе проекта.

Ниже, в таблицах 5, 6, 7 представлены все необходимые данные, которые входят в устав проекта.

Таблица 4.6 – Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидания заинтересованных сторон
ТПУ, кафедра экспериментальной физики	Зондовые измерения параметров плазмы при осаждении тонких пленок оксидов и нитридов титана методом реактивного магнетронного напыления.

Таблица 4.7 – Цели и результат проекта

Цели проекта:	Исследовать методику обработки данных с зонда Ленгмюра и провести расчеты для установки магнетронного напыления оксинитридов титана в различных режимах.
Ожидаемые результаты проекта:	Получение различными методами вольт-амперную характеристики двойного зонда Ленгмюра при различных режимах.
Критерии приемки результата проекта:	Законченная научно-исследовательская работа.
Требования к результату проекта:	Требование:
	Результат проекта должен иметь актуальное теоретическое и практическое значение
	Наглядные иллюстрации (графики и диаграммы)
	Выполнения проекта в срок

4.4.1 Организационная структура проекта

На данном этапе работы необходимо решить следующие вопросы: кто будет входить в рабочую группу данного проекта, определить роль каждого участника в данном проекте, а также прописать функции, выполняемые каждым из участников и их трудозатраты в проекте. Эту информацию представить в табличной форме (табл. 7)

Таблица 4.8 – Рабочая группа проекта

№ п/п	ФИО, основное место работы, должность	Роль в проекте	Функции	Трудо-затраты, час.
1	Евдокимов Кирилл Евгеньевич кафедра ЭФ, доцент,	Руководитель	Координация деятельности проекта	440
2	Назарбекова Назерке Кайраткызы, НИ ТПУ, кафедра ЭФ, студентка	Исполнитель	Выполнение исследовательской работы	784
ИТОГО:				1224

4.4.2 Ограничения и допущения проекта.

Таблица 4.9 – Ограничения проекта

Фактор	Ограничения/ допущения
3.1. Бюджет проекта	220 507,06
3.1.1. Источник финансирования	НИ ТПУ кафедра ЭФ
3.2. Сроки проекта:	30.01.17-14.06.17
3.2.1. Дата утверждения плана управления проектом	30.01.17
3.2.2. Дата завершения проекта	14.06.17

4.5 Планирование управления научно-техническим проектом

4.5.1 Иерархическая структура работ проекта

Группа процессов планирования состоит из процессов, осуществляемых для определения общего содержания работ, уточнения целей и разработки последовательности действий, требуемых для достижения данных целей.

План управления научным проектом должен включать в себя следующие элементы:

- иерархическая структура работ проекта;
- контрольные события проекта;
- план проекта;
- бюджет научного исследования.

Иерархическая структура работ (ИСР) – детализация укрупненной структуры работ. В процессе создания ИСР структурируется и определяется содержание всего проекта. На рис. № 2 представлен шаблон иерархической структуры.



Рисунок 4.1 – Иерархическая структура по ВКР

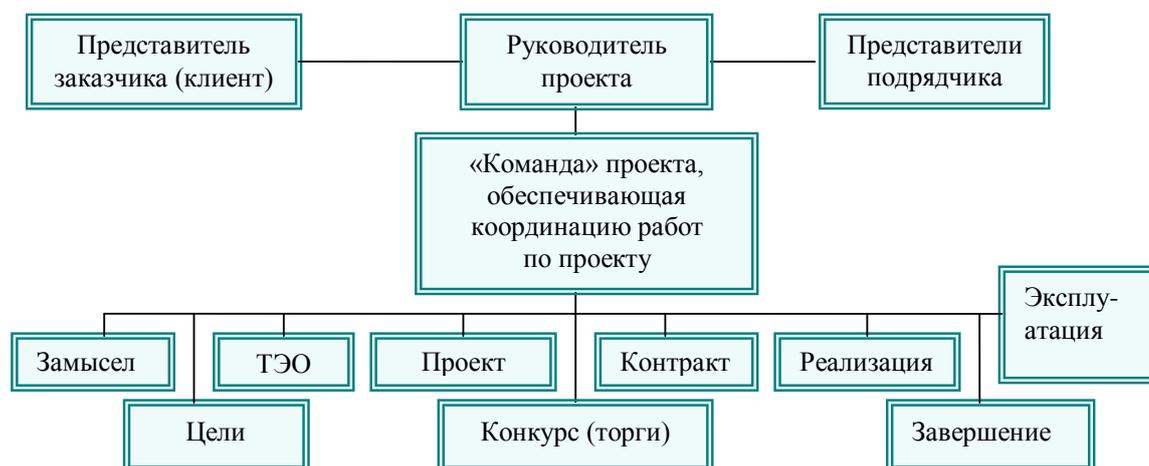


Рисунок 4.2 – Проектной структуры проекта

Будем использовать проектную структуру проекта, так как она подходит больше, потому что технология является новая и не исследуемой ранее, сложность проекта высока.

4.5.2 Контрольные события проекта

В рамках данного раздела необходимо определить ключевые события проекта, определить их даты и результаты, которые должны быть получены по состоянию на эти даты. Эту информацию необходимо свести в таблицу (таблица 4.10).

Таблица 4.10 – Контрольные события проекта

№ п/п	Контрольное событие	Дата	Результат (подтверждающий документ)
1	Разработка ТЗ на ВКР	17.03.2017	Приказ о ВКР
1.1	Составление и утверждение технического задания	27.03.2017	Техническое задание
2	Выбор направления исследования и способов решения задач	31.03.2017-03.04.2017	Методы решения задач
2.1	Сбор и изучение научно-технической литературы	04.04.2017-21.04.2017	Список литературы
2.2	Моделирование технологического процесса на компьютере	24.04.2017-8.05.2017	Графики
3	Разработка методики экспериментальных исследований	12.05.2017-14.05.2017	Методика
3.1	Проведение экспериментальных Исследований	15.05.2017-20.05.2017	Отчет
3.2	Анализ и обработка полученных результатов	21.05.2017-23.05.2017	Графики
4	Обобщение и оценка результатов	24.05.2017	Расчеты и графики
4.2	Оформление пояснительной записки	25.05.2017-02.06.2017	Пояснительная записка
4.3	Подготовка к защите ВКР	02.06.2017-15.06.2017	Презентация

4.6 Планирование управления научно-техническим проектом

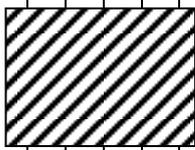
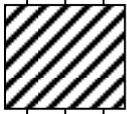
4.6.1 План проекта

В рамках планирования научного проекта необходимо построить календарный и сетевой графики проекта. Сроки проведения НИР представлены в таблицах 4.11 и 4.12

Таблица 4.11 – Календарный план проекта

Код работ	Название	Длительность, дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников (ФИО ответственных исполнителей)
1	Определение темы исследовательской работы	5	01.02	05.02	руководитель, исполнитель, (магистрант)
2	Ознакомление с теоретическими данными	20	08.02	04.03	исполнитель, руководитель
3	Расчет на математической модели	4	07.03	12.03	исполнитель (магистрант)
4	Обсуждение полученных результатов	30	14.03	22.04	исполнитель
5	Оформление выводов	11	25.04	11.05	Руководитель, Исполнитель.
6	Оформление пояснительной записки	20	12.05	01.06	исполнитель
7	Подготовка к защите	12	02.06	14.06	исполнитель
Итого:		102	01.02	14.06	

Таблица 4.12 – Календарный план-график проведения НИОКР по теме

Вид работ	Исполнители	Т _к , кал, дн.	Продолжительность выполнения работ																		
			январь			февраль			март			апрель			май			июнь			
			2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3		
Изучение литературы, составление литературного обзора	Магистрант	36																			
Расчет на математической модели	Магистрант	20																			

600	32 000	140 000	14 000	40 000	226 600
-----	--------	---------	--------	--------	---------

В результате было получено, что бюджет затрат НИИ составит 220 507,06 руб. При этом затраты у конкурентов составляют 226 600 рублей, из чего можно сделать вывод что полученный продукт будет экономичней, чем у конкурентов.

4.7.1 Основная заработная плата

В настоящую статью включается основная заработная плата научных и инженерно-технических работников, рабочих макетных мастерских и опытных производств, непосредственно участвующих в выполнении работ по данной теме (таблица 4.14).

Таблица 4.14 - Сырье, материалы, комплектующие изделия и покупные полуфабрикаты

Наименование	Марка, размер	Кол-во	Цена за единицу, руб.	Сумма, руб.
Тетрадь	48 листов	2	60	120
Ручка		4	20	80
Карандаш		2	12	24
Всего за материалы				224
Транспортно-заготовительные расходы (3-5%)				67
Итого по статье C_m				291

Таблица 4.15 – Расчет затрат по статье «Спецоборудование для научных работ»

№ п/п	Наименование оборудования	Кол-во единиц оборудования	Цена единицы оборудования, тыс.руб.	Общая стоимость оборудования, тыс.руб.
1.	Компьютер	1	25	25

4.7.2 Основная заработная плата

Таблица 4.16 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Магистр
Календарное число дней	151	151

Количество нерабочих дней	43	43
- выходные дни	11	11
- праздничные дни		
Потери рабочего времени		
- отпуск	24	-
- невыходы по болезни		
Действительный годовой фонд рабочего времени	73	97

Таблица 4.17 – Расчёт основной заработной платы

Исполнители	З _б , руб.	k _р	З _м , руб.	З _{дн} , руб.	T _р , раб.дн.	З _{осн} , руб.
Руководитель	30000,00	1,3	39000	1772,73	73	129409,29
Магистрант	2750	1,3	2275	103,41	97	10030,77

4.7.3 Дополнительная заработная плата научно-производственного персонала

Таблица 4.18 – Заработная плата исполнителей НИИ

Заработная плата	Руководитель	Магистрант
Основная зарплата	129409,29	10030,77
Дополнительная зарплата	12940,929	-
Итого по статье С _{зп}	128611,31	10030,77

4.7.4 Отчисления на социальные нужды

Статья включает в себя отчисления во внебюджетные фонды.

$$C_{\text{внеб}} = k_{\text{внеб}} \cdot (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}) \quad (4.1)$$

где $k_{\text{внеб}} = 30\%$ коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.).

Таблица 4.19 – Отчисления на социальные нужды

	Руководитель	Магистрант
Зарплата	129409,29	10030,77
Отчисления на социальные нужды	44646,204	3009,2

4.7.5 Организационная структура проекта

Таблица 4.20 – Выбор организационной структуры научного проекта

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

Вывод: на основе проведенного анализа выбора организационной структуры научного проекта, было выявлено, что наиболее выгодной является проектная структура.

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

Эффективность научного ресурсосберегающего проекта включает в себя социальную эффективность, экономическую и бюджетную эффективность. Показатели общественной эффективности учитывают социально-экономические последствия осуществления инвестиционного проекта как для общества в целом, в том числе непосредственные результаты и затраты проекта, так и затраты, и результаты в смежных секторах экономики, экологические, социальные и иные внеэкономические эффекты.

Показатели экономической эффективности проекта учитывают финансовые последствия его осуществления для предприятия, реализующего

данный проект. В этом случае показатели эффективности проекта в целом характеризуют с экономической точки зрения технические, технологические и организационные проектные решения.

Бюджетная эффективность характеризуется участием государства в проекте с точки зрения расходов и доходов бюджетов всех уровней.

4.8.1 Динамические методы экономической оценки инвестиций

Динамические методы оценки инвестиций базируются на применении показателей:

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

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

4.8.2 Чистая текущая стоимость (NPV)

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

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

$$NPV = \sum_{t=1}^n \frac{ЧДП_{опt}}{(1+i)^t} - I_0 \quad (4.2)$$

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

I_0 – разовые инвестиции, осуществляемые в нулевом году;

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

n – горизонт расчета;

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

Таблица 4.21 - Расчет чистой текущей стоимости по проекту в целом

№	Наименование показателей	Шаг расчета				
		0	1	2	3	4
1.	Выручка от реализации, тыс.руб	0	264,6	264,6	264,6	264,6
2.	Итого приток	0	264,6	264,6	264,6	264,6
3.	Инвестиционные издержки, тыс.руб.	-220,5	0	0	0	0
4.	Операционные затраты, тыс. руб С+Ам+ФОТ	0	35,5	35,5	35,5	35,5
	Налогооб прибыль=1-4		229,1	229,1	229,1	229,1
5.	Налоги Выр-опер=донал.приб*20%	0	45,8	45,8	45,8	45,8
6.	Итого отток Опер.затр+налоги	-220,5	81,3	81,3	81,3	81,3
7.	Чистый денежный поток ЧДП=Пчист+Ам Пчист=Пдонал.-налог	-220,5	139,2	139,2	139,2	139,2
8.	Коэффициент дисконтирования (приведения при $i=0,20$)	1,0	0,833	0,694	0,578	0,482
9.	Дисконтированный чистый денежный поток ($c7*c8$)	-220,5	115,9	96,6	80,45	67,09
10.	То же нарастающим итогом ($NPV = 139,5$)	-220,5	-104,6	-8	72,45	139,5

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

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

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

Таким образом, чистая текущая стоимость по проекту в целом составляет 139.5 тыс. руб что позволяет судить о его эффективности.

4.8.3 Дисконтированный срок окупаемости

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

Этот недостаток устраняется путем определения дисконтированного срока окупаемости.

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

Наиболее приемлемым методом установления дисконтированного срока окупаемости является расчет кумулятивного (нарастающим итогом) денежного потока (см. табл. 4.22).

Таблица 4.22 – Дисконтированный срок окупаемости

№	Наименование показателя	Шаг расчета				
		0	1	2	3	4
1.	Дисконтированный чистый денежный поток ($i=0,20$)	-220,5	115,9	96,6	80,45	67,09
2.	То же нарастающим итогом	-220,5	-104,6	-8	72,45	139,5
3.	Дисконтированный срок окупаемости	$PP_{диск} = 2 + 8/80,45 = 2,1$ года				

4.8.4 Внутренняя ставка доходности (IRR)

Для установления показателя чистой текущей стоимости (NPV) необходимо располагать информацией о ставке дисконтирования, определение которой является проблемой, поскольку зависит от оценки экспертов. Поэтому, чтобы уменьшить субъективизм в оценке эффективности инвестиций на

практике широкое распространение получил метод, основанный на расчете внутренней ставки доходности (IRR).

Между чистой текущей стоимостью (NPV) и ставкой дисконтирования (i) существует обратная зависимость. Эта зависимость следует из таблицы 20 и графика, представленного на рисунке 2.

4.23 – Зависимость NPV от ставки дисконтирования

№ п/п	Наименование показателя	0	1	2	3	4	NPV
1	Чистые денежные потоки	-220.5	115.9	96.6	80.45	67.09	
2	коэффициент дисконтирования						
	i=0,1	1	0,909	0,826	0,751	0,683	
	i=0,2	1	0,833	0,694	0,578	0,482	
	i=0,4	1	0,714	0,51	0,364	0,26	
	i=0,5	1	0,667	0,444	0,295	0,198	
3	Дисконтированный денежный поток						
	i=0,1	-220.5	105.35	79.79	60.41	45.82	70.87
	i=0,2	-220.5	96.5	67.04	46.50	32.33	21.87
	i=0,4	-220.5	82.75	49.26	29.28	17.44	-41.77
	i=0,5	-220.5	77.30	42.89	23.73	13.28	-63.3

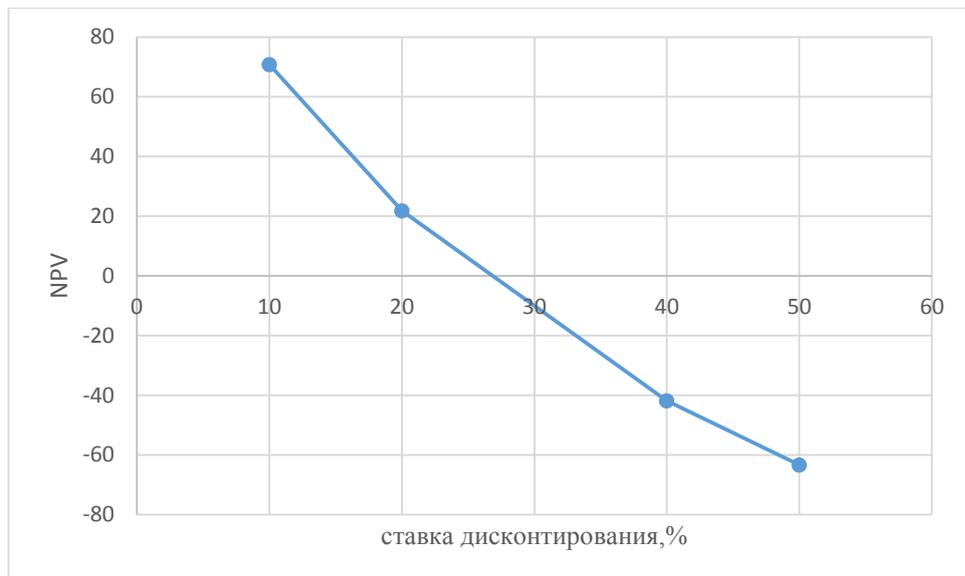


Рисунок 4.3 – Зависимость NPV от ставки дисконтирования

Из таблицы и графика следует, что по мере роста ставки дисконтирования чистая текущая стоимость уменьшается, становясь отрицательной. Значение ставки, при которой NPV обращается в нуль, носит название «внутренней ставки доходности» или «внутренней нормы прибыли». Из графика получаем, что IRR составляет 0,28.

4.9 Индекс доходности (рентабельности) инвестиций (PI)

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

Расчет этого показателя осуществляется по формуле

$$PI = \sum_{t=1}^n \frac{ЧПД_t}{(1+i)^t} / I_0, \quad (4.3)$$

где I_0 – первоначальные инвестиции.

$$PI = \frac{115,9 + 96,6 + 80,45 + 67,09}{220,5} = 1,63$$

$PI = 1,63 > 1$, следовательно, проект эффективен при $i = 0,2$;

4.9.1 Оценка сравнительной эффективности исследования

Таблица 4.24 – Группировка затрат по статьям аналогов разработки

Вариант исполнения аналога №	Сырье, материалы (за вычетом возвратных отходов), покупные изделия и полуфабрикаты	Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	Основная заработная плата	Отчисления на социальные нужды	Итого плановая себестоимость
1	500	100000	144674	43402,2	288576,2
2	1000	150000	160845	48253,5	360098,5

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\Phi}^p = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{max}} = \frac{276150}{360098,5} = 0,76$$

$$I_{\Phi}^{a1} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{max}} = \frac{288576,2}{360098,5} = 0,80$$

$$I_{\Phi}^{a2} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{max}} = \frac{360098,5}{360098,5} = 1$$

где I_{Φ}^p - интегральный финансовый показатель разработки; Φ_{pi} – стоимость i -го варианта исполнения; Φ_{max} – максимальная стоимость исполнения научно-исследовательского проекта (в т.ч. аналоги).

Полученная величина интегрального финансового показателя разработки отражает соответствующее численное удешевление стоимости разработки в разы.

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

$$I_m^a = \sum_{i=1}^n a_i b_i^a, \quad I_m^p = \sum_{i=1}^n a_i b_i^p \quad (4.4)$$

где I_m – интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов; a_i – весовой коэффициент i -го параметра;

b_i^a, b_i^p – бальная оценка i -го параметра для аналога и разработки, устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания;

n – число параметров сравнения.

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности рекомендуется проводить в форме таблицы, пример которой приведен ниже.

Таблица 4.25 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Критерии	Весовой коэффициент параметра	Текущий проект	Аналог 1	Аналог 2
1. Способствует росту производительности труда пользователя	0,15	5	4	3
2. Удобство в эксплуатации (соответствует требованиям потребителей)	0,15	4	3	4
3. Помехоустойчивость	0,1	5	4	3
4. Энергосбережение	0,2	5	4	2
5. Надежность	0,30	5	5	5
6. Материалоемкость	0,1	1	2	3
ИТОГО	1	25	22	20

$$I_m^p = 5 * 0.15 + 4 * 0.15 + 5 * 0.1 + 5 * 0.2 + 5 * 0.30 + 1 * 0.1 = 4.45$$

$$I_1^A = 4 * 0.15 + 3 * 0.15 + 4 * 0.1 + 4 * 0.2 + 5 * 0.30 + 2 * 0.1 = 3.95$$

$$I_2^A = 3 * 0.15 + 4 * 0.15 + 3 * 0.1 + 2 * 0.2 + 5 * 0.30 + 3 * 0.1 = 3.55$$

Интегральный показатель эффективности разработки ($I_{финр}^p$) и аналога ($I_{финр}^a$) определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле:

$$I_{финр}^p = \frac{I_m^p}{I_\phi^p} = \frac{4,45}{0,76} = 5,85$$

$$I_{финр}^{a1} = \frac{I_m^{a1}}{I_\phi^{a1}} = \frac{3,95}{0,80} = 4,93$$

$$I_{финр}^p = \frac{I_m^{a2}}{I_\phi^{a2}} = \frac{3,55}{1} = 3,55$$

Сравнение интегрального показателя эффективности текущего проекта и аналогов позволит определить сравнительную эффективность проекта. Сравнительная эффективность проекта:

$$\mathcal{E}_{ср} = \frac{I_{финр}^p}{I_{финр}^{a1}} = \frac{5,85}{4,93} = 1,18$$

$$\mathcal{E}_{ср} = \frac{I_{финр}^p}{I_{финр}^{a2}} = \frac{5,85}{3,55} = 1,64$$

где $\mathcal{E}_{ср}$ – сравнительная эффективность проекта; I_m^p – интегральный показатель разработки; I_m^a – интегральный технико-экономический показатель аналога.

Таблица 4.26 – Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Аналог 1	Аналог 2	Разработка
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,80	1	0,76
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	3,95	3,55	4,45
3	Интегральный показатель эффективности	5,85	4,93	3,55
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1,18		1,64

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

В ходе проведения анализа показателей, была получена чистая текущая стоимость (NPV) –220,5 тыс. руб. Таким образом, данный инвестиционный проект можно считать выгодным, NPV является положительной величиной. Дисконтированный срок окупаемости проекта ($PP_{\text{диск}}$) составляет 2,1 года. Внутренняя ставка доходности (IRR) – 0,28, что позволяет признать инвестиционный проект экономически оправданным, так как выполняется условие неравенства $IRR > i$, индекс доходности (PI) – 1,63, и, основываясь на том, что данная величина превышает единицу, можно утверждать, что данная инвестиция приемлема.

5 СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ

Данный раздел посвящен вопросам обеспечения нормативных условий труда (санитарно-гигиенические условия, защита от опасных производственных факторов, обеспечение пожарной безопасности) в соответствии с действующими нормативными документами.

В современных условиях развития общества решение проблем, связанных с обеспечением безопасной жизнедеятельности человека во всех сферах его деятельности от опасных и вредных факторов, является актуальным. Опасным фактором является фактор процесса, воздействие которого на работающего приводит к травме или резкому ухудшению здоровья. Вредные факторы - это неблагоприятные факторы трудового процесса или условий окружающей среды, которые могут оказать вредное воздействие на здоровье и работоспособность человека. Длительное воздействие на человека вредного производственного фактора приводит к заболеванию. Вредный производственный фактор может стать опасным в зависимости от уровня и продолжительности воздействия на человека.

В настоящей выпускной работе ведется исследование биосовместимых покрытий на основе оксидов и нитридов титана методом реактивного магнетронного напыления, при этом были рассчитаны коэффициенты распыления и профили ионной имплантации для разных видов мишеней. Все расчеты были проведены с помощью программы SRIM.

5.1 Анализ опасных и вредных производственных факторов

Производственные условия на рабочем месте характеризуются наличием опасных и вредных факторов, которые классифицируются по группам элементов: физические, химические, биологические, психофизиологические.

При работе на ПЭВМ, воздействуют следующие факторы:

- физические:

- температура и влажность воздуха;
- шум;
- статическое электричество;
- электромагнитное поле низкой частоты;
- освещённость;
- наличие излучения;
- психофизиологические:

Психофизиологические опасные и вредные производственные факторы, делятся на: физические перегрузки (статические, динамические) и нервно-психические перегрузки (умственное перенапряжение, монотонность труда, эмоциональные перегрузки).

5.2 Обоснование и разработка мероприятий по снижению уровней опасного и вредного воздействия и устранению их влияния при работе на ПЭВМ.

5.2.1 Требования к ПЭВМ и организация работы организационные мероприятия.

Весь персонал обязан знать и строго соблюдать правила техники безопасности. Обучение персонала технике безопасности и производственной санитарии состоит из вводного инструктажа и инструктажа на рабочем месте ответственным лицом.

Проверка знаний правил техники безопасности проводится квалификационной комиссией после обучения на рабочем месте. Проверяемому, присваивается соответствующая его знаниям и опыту работы квалификационная группа по технике безопасности и выдается специальная удостоверение.

Лица, обслуживающие электроустановки не должны иметь увечий и болезней, мешающих производственной работе. Состояние здоровья устанавливается медицинским освидетельствованием.

5.3 Технические мероприятия

Технические мероприятия Рациональная планировка рабочего места предусматривает четкий порядок и постоянство размещения предметов, средств труда и документации. То, что требуется для выполнения работ чаще должно располагаться в зоне легкой досягаемости рабочего пространства, как показана на рисунке 5.1.

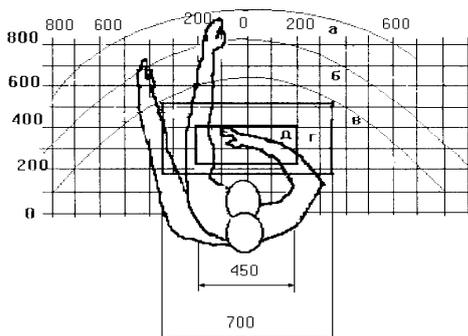


Рисунок 5.1 - Зоны досягаемости рук в горизонтальной плоскости

(а - зона максимальной досягаемости рук; б - зона досягаемости пальцев при вытянутой руке; в - зона легкой досягаемости ладони; г - оптимальное пространство для грубой ручной работы; д - оптимальное пространство для тонкой ручной работы.)

Оптимальное размещение предметов труда и документации в зонах досягаемости рук: дисплей размещается в зоне а (в центре); клавиатура в зоне г/д; системный блок размещается в зоне б (слева); принтер находится в зоне а (справа); документация: в зоне легкой досягаемости ладони в (слева) - литература и документация, необходимая при работе; в выдвижных ящиках стола - литература, не используемая постоянно.

При проектировании письменного стола должны быть учтены следующие требования.

Высота рабочей поверхности стола рекомендуется в пределах 680 - 800 мм. Высота рабочей поверхности, на которую устанавливается клавиатура, должна быть 650 мм. Рабочий стол должен быть шириной не менее 700 мм и

длиной не менее 1400 мм. Должно иметься 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.

Рабочее кресло должно быть подъёмно-поворотным и регулируемым по высоте и углам наклона сиденья и спинки, а так же расстоянию спинки до переднего края сиденья. Рекомендуется высота сиденья над уровнем пола 420-550 мм. Конструкция рабочего кресла должна обеспечивать: ширину и глубину поверхности сиденья не менее 400 мм; поверхность сиденья с заглублённым передним краем.

Монитор должен быть расположен на уровне глаз оператора на расстоянии 500-600 мм. Согласно нормам угол наблюдения в горизонтальной плоскости должен быть не более 45° к нормали экрана. Лучше если угол обзора будет составлять 30° . Кроме того должна быть возможность выбирать уровень контрастности и яркости изображения на экране.

Должна предусматриваться возможность регулирования экрана:

- по высоте +3 см;
- по наклону от 10 до 20 градусов относительно вертикали;
- в левом и правом направлениях.

Клавиатуру следует располагать на поверхности стола на расстоянии 100-300 мм от края. Нормальным положением клавиатуры является её размещение на уровне локтя оператора с углом наклона к горизонтальной плоскости 15. Более удобно работать с клавишами, имеющими вогнутую поверхность, четырёхугольную форму с закруглёнными углами. Конструкция клавиши должна обеспечивать оператору ощущение щелчка. Цвет клавиш должен контрастировать с цветом панели.

При однообразной умственной работе, требующей значительного нервного напряжения и большого сосредоточения, рекомендуется выбирать неяркие, малоконтрастные цветочные оттенки, которые не рассеивают внимание (малонасыщенные оттенки холодного зеленого или голубого цветов). При работе, требующей интенсивной умственной или физической

напряженности, рекомендуются оттенки тёплых тонов, которые возбуждают активность человека.

5.4 Условия безопасной работы

Основные параметры, характеризующие условия труда это: микроклимат, шум, вибрация, электромагнитное поле, излучение, освещённость.

Микроклимат - комплекс физических факторов внутренней среды помещений, оказывающий влияние на тепловой обмен организма и здоровье человека. К микроклиматическим показателям относятся температура, влажность и скорость движения воздуха, температура поверхностей ограждающих конструкций, предметов, оборудования, а также некоторые их производные.

Неблагоприятные условия могут вызывать перенапряжение механизма терморегуляции, что ведет к перегреву или переохлаждению организма. Высокая температура приводит к быстрой утомляемости работника, может привести к перегреву организма, тепловому удару. А низкая температура может вызвать местное или общее охлаждение организма, и привести к простудному заболеванию либо обморожению. Высокая относительная влажность при высокой температуре воздуха способствует перегреванию организма, при низкой температуре увеличивается теплоотдача с поверхности кожи. Низкая влажность вызывает неприятные ощущения в виде сухости слизистых оболочек дыхательных путей работающего.

Вычислительная техника является источником существенных тепловыделений, что может привести к повышению температуры и снижению относительной влажности в помещении. В помещениях, где установлены компьютеры, должны соблюдаться определенные параметры микроклимата.(табл.5.1) В санитарных нормах СН-245-71 установлены величины параметров микроклимата, создающие комфортные условия. Эти

нормы устанавливаются в зависимости от времени года, характера трудового процесса и характера производственного помещения [36].

Таблица 5.1 – Оптимальные и допустимые параметры микроклимата.

Период года	Категория работ по уровням энергозатрат, Вт	Параметр микроклимата	Величина
Холодный	Iб (140-174)	Температура воздуха в помещении Относительная влажность Скорость движения воздуха	21-23°C 40-60% до 0,1м/с
Теплый	Iб (140-174)	Температура воздуха в помещении Относительная влажность Скорость движения воздуха	22-24°C 40-60% 0,1-0,2м/с

Научно-исследовательская работа выполнялась с помощью персональных компьютеров. При этом основным вредным фактором для инженера-исследователя является электромагнитное излучение, которое влияет на костные ткани, ухудшает зрение, повышает утомляемость, а также может вызвать ослабление памяти и возникновение онкологических заболеваний.

Таблица 5.2 – Временные допустимые уровни (ВДУ) электромагнитных полей, создаваемых ПЭВМ на рабочих местах

Наименование параметров		ВДУ
Напряженность электрического поля	в диапазоне частот 5 Гц - 2 кГц	25 В/м
	в диапазоне частот 2 кГц - 400 кГц	2,5 В/м
Плотность магнитного потока	в диапазоне частот 5 Гц - 2 кГц	250 нТл
	в диапазоне частот 2 кГц - 400 кГц	25 нТл
Напряженность электростатического поля		15 кВ/м

Безопасные уровни излучений регламентируются нормами СанПиН 2.2.2/2.4.1340–03 и представлены в таблице 5.2. Для того, чтобы снизить

вредное влияние электромагнитного излучения при работе с ПК необходимо соблюдать следующие общие гигиенические требования:

1. Продолжительность непрерывной работы взрослого пользователя не должна превышать 2 ч, ребенка – 10 - 20 мин, в зависимости от возраста. В процессе работы желательно менять тип и содержание деятельности, например, чередовать редактирование и ввод данных и их считывание. Санитарными нормами предусматриваются обязательные перерывы в работе на ПК, во время которых рекомендуется делать простейшие упражнения для глаз, рук и опорно-двигательного аппарата.

2. Рабочее место с ПК должно располагаться по отношению к оконным проемам так, чтобы свет падал сбоку, предпочтительнее слева. При наличии нескольких компьютеров расстояние между экраном одного монитора и задней стенкой другого должно быть не менее 2 м, а расстояние между боковыми стенками соседних мониторов – 1,2 м. Экран монитора должен находиться от глаз пользователя на оптимальном расстоянии 60÷70 см, но не ближе 50 см.

3. Для ослабления влияния рассеянного рентгеновского излучения (предельно допустимая доза облучения 0,5-0,7 мбэр) от монитора ПК рекомендуется использовать защитные экраны из металлической сетки и металлических прутков в виде навесов, козырьков, и допустимая величина защитного сопротивления заземления экранирующих устройств не должна быть более 4 Ом.

Шум – совокупность аperiodических звуков различной интенсивности и частоты. С физиологической точки зрения шум – это всякий неблагоприятный воспринимаемый звук [35].

Шум ухудшает условия труда оказывая вредное действие на организм человека. Работающие в условиях длительного шумового воздействия испытывают раздражительность, головные боли, головокружение, снижение памяти, повышенную утомляемость, понижение аппетита, боли в ушах и т. д. Такие нарушения в работе ряда органов и систем организма человека могут вызвать негативные изменения в эмоциональном состоянии человека вплоть до

стрессовых. Под воздействием шума снижается концентрация внимания, нарушаются физиологические функции, появляется усталость в связи с повышенными энергетическими затратами и нервно-психическим напряжением, ухудшается речевая коммутация.

Основными источниками шума при выполнении исследовательской работы в помещении являются принтер, компьютер, вентиляторы системы охлаждения.

Уровень шума на рабочем месте инженеров, работающих с компьютером не должен превышать 50дБА, а в залах обработки информации на вычислительных машинах - 65дБА. Для снижения уровня шума стены и потолок помещений, где установлены компьютеры, могут быть облицованы звукопоглощающими материалами. Уровень вибрации в помещениях вычислительных центров (ВЦ) может быть снижен путем установки оборудования на специальные виброизоляторы [36].

Важное место в комплексе мероприятий по созданию условий труда, работающих с ПЭВМ, занимает создание оптимальной световой среды, т.е. рациональная организация естественного и искусственного освещения помещения и рабочих мест.

Правильно спроектированное и выполненное производственное освещение улучшает условия зрительной работы, снижает утомляемость, способствует повышению производительности труда, благотворно влияет на производственную среду, оказывая положительное психологическое воздействие на работающего, повышает безопасность труда и снижает травматизм.

Недостаточность освещения приводит к напряжению зрения, ослабляет внимание, приводит к наступлению преждевременной утомленности. Чрезмерно яркое освещение вызывает ослепление, раздражение и резь в глазах. Неправильное направление света на рабочем месте может создавать резкие тени, блики, дезориентировать работающего.

Требования к освещенности в помещениях, где установлены компьютеры:

- при выполнении зрительных работ высокой точности общая освещенность должна составлять 300лк, а комбинированная 750лк; аналогичные;

- при выполнении работ средней точности 200 и 300лк соответственно.

Кроме того, все поле зрения должно быть освещено достаточно равномерно – это основное гигиеническое требование. Иными словами, степень освещения помещения и яркость экрана компьютера должны быть примерно одинаковыми, т.к. яркий свет в районе периферийного зрения значительно увеличивает напряженность глаз и, как следствие, приводит к их быстрой утомляемости.

5.5 Электробезопасность

В зависимости от условий в помещении опасность поражения человека электрическим током увеличивается или уменьшается. Не следует работать с ЭВМ в условиях повышенной влажности (относительная влажность воздуха длительно превышает 75%), высокой температуры (более 35°C), наличии токопроводящей пыли, токопроводящих полов и возможности одновременного прикосновения к имеющим соединение с землёй металлическим элементам и металлическим корпусом электрооборудования. Оператор ЭВМ работает с электроприборами: компьютером (дисплей, системный блок и т.д.) и периферийными устройствами. Существует опасность электропоражения в следующих случаях:

-при непосредственном прикосновении к токоведущим частям во время ремонта ЭВМ;

-при прикосновении к нетоковедущим частям, оказавшимся под напряжением (в случае нарушения изоляции токоведущих частей ЭВМ);

-при прикосновении с полом, стенами, оказавшимися под напряжением;

-при коротком замыкании в высоковольтных блоках: блоке питания и блоке дисплейной развёртки.

Поражение электрическим током происходит, когда человеческий организм вступает в контакт с источником напряжения. Коснувшись проводника, который находится под напряжением, человек становится частью электросети, по которой начинает протекать электрический ток. Как известно, организм человека состоит из большого количества солей и жидкости, что является хорошим проводником электричества, поэтому действие электрического тока на организм человека может быть летальным.

Последствия, которые возникнут в результате **действия электрического тока на человека** зависят от многих факторов, а именно:

- от величины и рода протекающего тока, переменный ток является более опасным, чем постоянный;

- продолжительности его воздействия, чем больше время **действия тока на человека**, тем тяжелее последствия;

- пути протекания, самую большую опасность представляет ток, протекающий через головной и спинной мозг, область сердца и органов дыхания(легкие);

- от физического и психологического состояния человека. Организм человека обладает неким сопротивлением, это сопротивление варьируется в зависимости от состояния человека.

Минимальная величина тока, которую способен почувствовать человеческий организм составляет 1 мА.

Мероприятия по обеспечению электробезопасности электроустановок: - отключение напряжения с токоведущих частей, на которых или вблизи которых будет проводиться работа, и принятие мер по обеспечению невозможности подачи напряжения к месту работы;

- вывешивание плакатов, указывающих место работы;

- заземление корпусов всех установок через нулевой провод, покрытие металлических поверхностей инструментов надежной изоляцией;

- недоступность токоведущих частей аппаратуры (заключение в корпуса электропоражающих элементов, заключение в корпус токоведущих частей).

5.6 Пожарная и взрывная безопасность

Согласно, в зависимости от характеристики используемых в производстве веществ и их количества, по пожарной и взрывной опасности помещения подразделяются на категории А, Б, В, Г, Д. Так как помещение по степени пожаровзрывоопасности относится к категории В, т.е. к помещениям с твердыми сгорающими веществами, необходимо предусмотреть ряд профилактических мероприятий [39].

Возможные причины загорания:

- неисправность токоведущих частей установок;
- работа с открытой электроаппаратурой;
- короткие замыкания в блоке питания;
- несоблюдение правил пожарной безопасности;
- наличие горючих компонентов: документы, двери, столы, изоляция кабелей и т.п.

Мероприятия по пожарной профилактике разделяются на: организационные, технические, эксплуатационные и режимные.

Организационные мероприятия предусматривают правильную эксплуатацию оборудования, правильное содержание зданий и территорий, противопожарный инструктаж рабочих и служащих, обучение производственного персонала правилам противопожарной безопасности, издание инструкций, плакатов, наличие плана эвакуации. (рис.5.2)

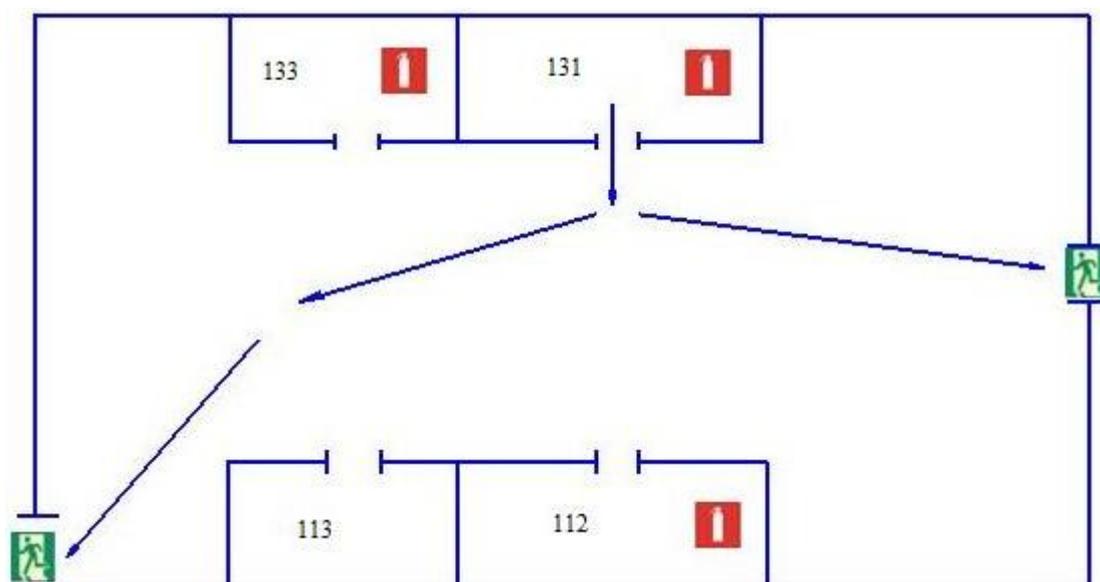


Рисунок 5.2 – План эвакуации из рабочего помещения

К техническим мероприятиям относятся: соблюдение противопожарных правил, норм при проектировании зданий, при устройстве электропроводов и оборудования, отопления, вентиляции, освещения, правильное размещение оборудования.

К режимным мероприятиям относятся, установление правил организации работ, и соблюдение противопожарных мер. Для предупреждения возникновения пожара от коротких замыканий, перегрузок и т. д. необходимо соблюдение следующих правил пожарной безопасности:

- исключение образования горючей среды (герметизация оборудования, контроль воздушной среды, рабочая и аварийная вентиляция);

- применение при строительстве и отделке зданий негорюемых или трудно сгораемых материалов;

- правильная эксплуатация оборудования (правильное включение оборудования в сеть электрического питания, контроль нагрева оборудования);

- правильное содержание зданий и территорий (исключение образования источника воспламенения - предупреждение самовозгорания веществ, ограничение огневых работ);

- обучение производственного персонала правилам противопожарной безопасности;

- издание инструкций, плакатов, наличие плана эвакуации;
- соблюдение противопожарных правил, норм при проектировании зданий, при устройстве электропроводов и оборудования, отопления, вентиляции, освещения;
- правильное размещение оборудования;
- своевременный профилактический осмотр, ремонт и испытание оборудования.

При возникновении аварийной ситуации необходимо:

- сообщить руководству (дежурному).
- позвонить в соответствующую аварийную службу или МЧС—тел. 112.
- принять меры по ликвидации аварии в соответствии с инструкцией.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Были исследованы зависимости коэффициентов распыления от энергии ионов в программной среде SRIM.

Из трёх видов ионов, коэффициенты распыления при бомбардировке ионами аргона являются наибольшими. Для титановой мишени коэффициенты распыления ионами кислорода и азота меньше коэффициента распыления для аргона на 8 % и 4 % соответственно. Для мишени оксида титана полные коэффициенты распыления ионами кислорода и азота меньше коэффициента распыления для аргона на 12 % и 9 % соответственно. Для нитрида титана полные коэффициенты распыления ионами кислорода и азота меньше коэффициента распыления для аргона на 3 % и 9 % соответственно.

Парциальные коэффициенты распыления кислорода для мишени оксида титана при бомбардировке ионами аргона являются наибольшими. И больше по значению от парциальных коэффициентов распыления ионами азота и кислорода на 4 % и 2 % соответственно. Для этой же мишени парциальные коэффициенты распыления титана ионами кислорода и азота меньше парциального коэффициента распыления аргона на 6 % и 21 % соответственно.

Для нитрида титана значения парциальных коэффициентов распыления азота при бомбардировке ионами аргона – наибольшие. А парциальные коэффициенты распыления азота ионами кислорода и азота почти равны по значению. Парциальные коэффициенты распыления титана для мишени нитрида титана ионами аргона - наименьшие. А при бомбардировке ионами кислорода и азота близки по значению.

2. Построена зависимость коэффициентов распыления от значений энергии налетающих ионов. С ростом энергии соответственно растут и значения коэффициентов распыления. Это объясняется тем, что у иона с наибольшим значением энергии имеется высокая возможность разорвать

энергии связи атомов в кристаллической решётке и выбить атом из своего равновесия.

3. Были рассчитаны knock-on коэффициенты для двух типов поверхности: оксида и нитрида титана. По полученным данным можно отметить, что разность knock-on коэффициентов для поверхности покрытой нитридом титана от поверхности покрытой слоем оксида титана составляет 24 %.

4. Был проведён расчёт профилей ионной имплантации, определены средний пробег и среднеквадратичное отклонение ионов. Для титановой мишени при бомбардировке ионами азота, средний пробег и среднеквадратичное отклонение имеют максимальные значения – 19 А и 10 А соответственно. А для оксида титана при бомбардировке ионами аргона средний пробег и среднеквадратичное отклонение имеют минимальные значения – 14 А и 7 А.

5. С помощью программы SIMTRA были определены профили осаждения подложки, построены графики: среднего числа столкновений частиц при перемещении к подложке; общего количества частиц, которые были осаждены на поверхности подложки, а также средней энергии частиц, среднего времени между распылением и осаждением частиц и среднего косинуса угла падения относительно к нормали поверхности. Из полученных данных видно, что распределение средней энергии распылённых атомов по подложке имеет равномерный вид, со средним значением около 13 эВ. Средний косинус угла падения частиц к нормали поверхности подложки имеет равномерное распределение, а значения косинуса угла лежит в районе от 0,8-0,9.

Общее количество частиц участвующих процессе составляет 100000. Из них в центральной области подложки находятся наибольшее количество частиц и оно составляет 4500 атомов. В направлении к краю подложки количество осаждённых частиц уменьшается на 33 % и составляет около 3000 частиц.

Кроме того, из этого же графика можно предположить, что скорость напыления имеет наибольшее значения в середине подложки, а к краю скорость уменьшается.

Среднее число столкновений атомов мишени с бомбардирующими ионами по пути к подложке составляет 4,5. А в центральной области – 3,5. Время между распылением и осаждением частиц на краю подложки составляет около 0,00012 с, а в центре подложки отличается на 33 % и составляет 0,00008с.

6. При сравнении двух методов расчёта (расчёты по полуэмпирическим уравнениям и формулам Зигмунда с расчётами в программной среде SRIM) нужно отметить следующее: данные формулы для расчётов коэффициента распыления имеют некоторые неточности при расчёте коэффициентов распыления для составных мишеней. Кроме того, в этих полуэмпирических уравнениях энергия связи атомов, молярная масса мишени, её плотность и атомный номер берутся из среднего значения двух составных, что может быть причиной неточности расчётов.

Список литературы

1. J. Ebert / *Surface and Coatings Technology* // – 1990. – Vol.43/44.– P. 950.
2. S. Hofmann / *Thin Solid Films* //. – 1990. – Vol.193–194. – P. 648.
3. K. Steenbeck, E. Steinbeib, K. D. Ufert // *Thin Solid Films*. –1982. –Vol. 92 №4. –P. 371.
4. I. Petrov, L. Hultman, U. Helmersson, J.E. Sundgren, J.E. Greene // *Thin Solid Films*. 1989. – Vol.169. – P. 299-314.
5. Wagner T., Wang J. Y. and Hofmann S. / *Surface Analysis by Auger and X-ray Photoelectron Spectroscopy* eds D. Briggs and J. T. Grant // Chichester: I. M. Publications and Surface Spectra. 2003. – P. 619-649.
6. Seah M.P., Clifford C.A., Green F.M. and Gilmore I.S. // *Surf. Interface Anal.* 2005. – Vol.37. – P. 444-458.
7. Seah M.P. / *Nucl. Instrum. Methods B*. 2005. – Vol. 229. – P. 348-358.
8. Seah M.P. / *Nucl. Instrum. Methods B*. 2005. – Vol. 239. – P. 286-287.
9. *At. Data Nucl. Data Tables* / Matsunami N., Yamamura Y., Hikawa Y., Itoh N., Kazumata Y., Miyagawa S., Morita K., Shimizu R. and Tawara H. – 2001. – Vol. 31. – P.1-80.
10. Sigmund P. / *Phys. Rev.* 1969. – Vol.184. –P. 383-416.
11. Yamamura Y., Itakawa Y. and Itoh N. //*Institute of Plasma Physics Report IPPJ-AM-26: Nagoya: University Press*. 1983.
12. Zimmermann S. and Urbassek H. M. /*Int. J. Mass Spectrom.* 2008. – V.272. – P. 91-97.
13. Szymczak W. and Wittmaack K. /*Nucl. Instrum. Meths. B*. 1993. – Vol.82. – P. 220-233.
14. Seah M. P. / *Surf. Interface Anal.* 2007. – Vol.39. – P. 634-643.
15. Sigmund P. and Claussen C. J. *Appl. Phys.* 1981. – Vol.52. – P. 990-993.
16. Bouneau S., Brunelle A., Della Negra S., Depauw J., Jacquet D., Le Beyec Y., Pautrat M., Fallavier M., Poizat J. C. and Andersen H.H. // *Phys. Rev. B*. 2002. – Vol.65. – P. 144.

17. Samela J., Kotakoski J., Nordlung K. and Keinonen J. 2005 // Nucl. Instrum. Methods B. 2005. – V.239. – P. 331-346.
18. Seah M.P., Spencer S.J., Cumpson P.J. and Johnstone J.E. // Surf. Interface Anal. 2000. – Vol.29. – P. 782-790.
19. Lindhard J., Scharff M. and Schiott H.E. // Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 1963. – V.33. – P. 1-42.
20. Matsunami N., Yamamura Y., Itakawa Y., Itoh N., Kazumata Y., Miyagawa S., Morita K. and Shimizu R. // Radiat. Eff. Lett. 1980. – Vol.57. – P. 15-21.
21. Bragg W.H. and Kleeman R. // Philos. Mag. 1995. – V.10. P. 318-340.
22. Sigmund P. // Topics in Applied Physics 47: Sputtering by Particle Bombardment I. ed R. Behrisch, Berlin: Springer. 1981. P. 9-71.
23. Malherbe J.B. / Crit. Revs. in Solid State Mater. Sci. 1994. V.19. P. 55-127.
24. Ziegler J.F. and Manoyan J.M. // Nucl. Instrum. Methods, B. 1988. V. – 35. P. – 215-228.
25. Kelly R. / Surf. Interface Anal. 1985. V.7. P. 1-7
26. Betz G. and Wehner G.K. // Topics in Applied Physics 52: Sputtering by Particle Bombardment II ed R. Behrisch, Berlin: Springer. 1983. P. – 11-90.
27. Malherbe J.B. / Crit. Revs. in Solid State Mater. Sci. 1994. V.19. P. 129-195.
28. Malherbe J.B. and Odendaal R.Q. // Surf. Interface Anal. 1998. Vol. – 26. P. – 841-850.
29. Anders C. and Urbassek H. M. // Nucl. Instrum. Methods B. 2005. V. 228. P. 84-91
30. A. L. Stepanov, Ion-synthesis of metal nanoparticles and their optical properties. – Nova Sci. Publ., New York, 2011.
31. J.F. Ziegler, J.P. Biersak and U. Littmark, The stopping and range of ions in solids. – Pergamon, New York, 1996.
32. <http://www.srim.org/index.htm>
33. Карзанов В.В., Королев Д.С. ИОННОЕ ЛЕГИРОВАНИЕ КРЕМНИЯ: Практикум. Нижний Новгород: Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, 2013. – 21 с.

34. Van Aeken, K. The metal flux from a rotating cylindrical magnetron: a Monte Carlo simulation / K. Van Aeken, S. Mahieu, D. Depla // Journal of Physics D: Applied Physics. –2008. – Т. 41. – № 20. – С. 205–307.
35. ГОСТ 12.1.007-76. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности.
36. ГОСТ 12.3.002-75. Процессы производственные. Общие требования безопасности.
37. ГОСТ 12.1.003 – 83. ССБТ. Шум. Общие требования безопасности.
38. Безопасность жизнедеятельности: Учебник/Под ред. проф. Э.А. Арустамова. – 10-е изд., перераб. и доп. – М.: Издательско-торговая корпорация «Дашков и Ко», 2006.
39. Безопасность жизнедеятельности. /Под ред. Н.А. Белова - М.: Знание, 2000 - 364с.
40. СНиП 23 – 05 –95. Нормы проектирования. Естественное и искусственное освещение. М.: Минстрой России, 1995.
41. Справочная книга для проектирования электрического освещения. / Под ред. Г.Б. Кнорринга. – Л.: Энергия, 1976.
42. ГОСТ 12.3.002-75. Процессы производственные. Общие требования безопасности
43. Федеральный Закон №214-ФЗ от 24.07.2007: «О драгоценных металлах и драгоценных камнях» (п. 2, ст. 20)
44. СанПиН: 2.2.2/2.4.1340-03 "Гигиенические требования к персональным вычислительным машинам и организации работы".

Приложение А

Раздел 1

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РАСПЫЛЕНИЯ И ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ ПРИ ОСАЖДЕНИИ ТОНКИХ ПЛЁНОК ОКСИДОВ И НИТРИДОВ ТИТАНА МЕТОДОМ РЕАКТИВНОГО МАГНЕТРОННОГО НАПЫЛЕНИЯ

Студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОДМ51	Шурен Ж.Б.		

Консультант кафедры ЭФ:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
профессор	Блейхер Г.А.	д.ф. – м.н.		

Консультант-лингвист кафедры ИЯФТ:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ст.преподаватель каф. ИЯФТ	Зяблова Н.Н.	канд.филол.наук.		

2. Materials and methods

2.1 Description of installation UVN-200MI

For the production of TiO_2 and TiN films, the pulsed DC magnetron deposition system UVN-200MI was used. The photograph of this installation is shown in Fig.2.1.

Parameters of the installation UVN-200MI:

Vacuum chamber: diameter - 380 mm, length - 450 mm

Voltage at the cathode: 320 V

Effective pumping speed: 75 l / s

Target: material – Ti



Fig.2.1 – Installation UVN-200MI

The main objective of the installation is to deposit a complex oxide (TiO_2) and oxynitride (Ti -O-N) coatings on various materials such as medical products, in particular intravascular stents. The block diagram of the installation of pulsed magnetron sputtering is shown in the figure. The installation consists of the following main parts: a cylindrical vacuum chamber with a magnetron located in it, a high vacuum evacuation system, a magnetron power source, a three-channel gas supply

system, an automated control system for the installation including a peripheral controller unit, a control controller and a personal computer.

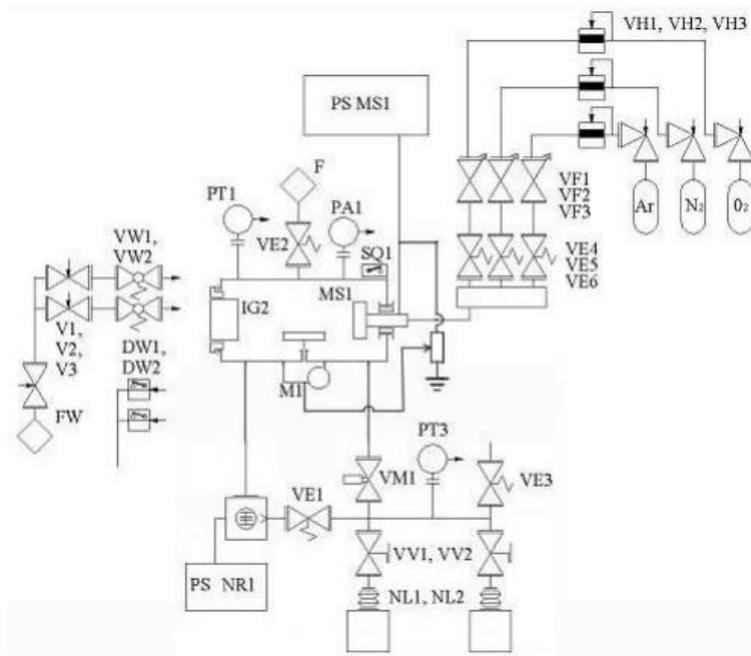


Fig.2.2 – Block diagram of the installation UVN-200MI

The vacuum chamber is located horizontally, the chamber dimensions are: diameter - 380 mm, length - 450 mm, chamber volume is 0.51 m³. The chamber has doors on the end surfaces of the cylinder and a side outlet with a flange on which a turbomolecular pump is mounted. On the side cover of the chamber there is mounted a high vacuum gauge. Inside the chamber there is a magnetron and a sample table with a rotation drive and a negative electric displacement system on the table.

The vacuum system includes low-vacuum and high-vacuum pumping. A high vacuum is created in two stages: first with two fore-vacuum pumps 2NVR-5DM (NL1 and NL2) to a pressure of 10Pa, then with a turbomolecular pump TMN-150 (NR1) up to 10⁻²Pa.

2.2 Program SRIM

For calculating the range of ions in solids, different programs are used for computer simulation. Most popular is SRIM software package, which, along with the

possibility of calculating the runs allows to obtain other important information: distribution of vacancies in the target atoms recoil, etc.

On the basis of the program lies SRIM Monte-Carlo. The essence of this method lies in the drawing via a random number generator is important for any process parameters. In the case of ion implantation are such parameters free path between collisions for an incident ion and its sighting distance before collision with target atom. Other quantities such as the density and composition of the target, atomic mass, the initial energy of the ion, the energy of displacement of atoms of the target material, target thickness, are set constant in the first steps of implementation of the program. The computer traces the trajectory of each ion falling, consistently solving a problem about the collision of two charged particles. Each time recorded the following: the energy loss on the phase free path, the energy loss in the collision with the atom of the target, the angle of deflection from the original direction, the departure of an atom of target from host (if the recoil energy more energy offsets). Then the situation is played again taking into account the occurred collision. As the stopping criterion usually suggested condition: the residual kinetic energy of the moving ion does not exceed the displacement energy of an atom of the target. At this point, the computer records the coordinates of the ion.

The modern version of the program SRIM provide information not only on the distribution of the introduced impurities, but about the offsets on the distribution of vacancies and interstitial atoms on the sputtering target. To obtain the parameters of the distribution of implanted impurities and point defects it is necessary to perform a large series of similar tests, usually recommended by several thousand (the number of tests is set at the beginning of the program).

The SRIM program interface is shown in Figure 2.3.

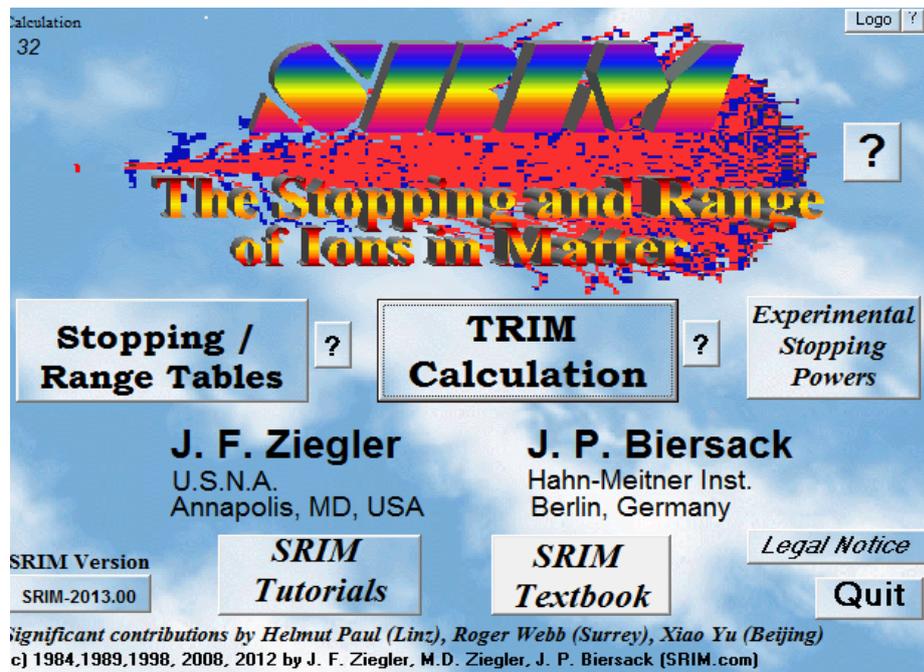


Figure 2.3 – Main menu Interface

2.3.1 The Algorithm works with the software SRIM

When you run this program, there is one significant problem – the need to change the regional standards, because of the incompatibility of the bit characters and symbols. With the purpose to implement the following steps: start → control Panel → Regional and Language options in the Formats tab change the settings to English (US).

To calculate the distribution profiles of the ions push the button TRIM Calculation, the screen will have a menu selection of parameters and characteristics calculation (Fig. 2.4).

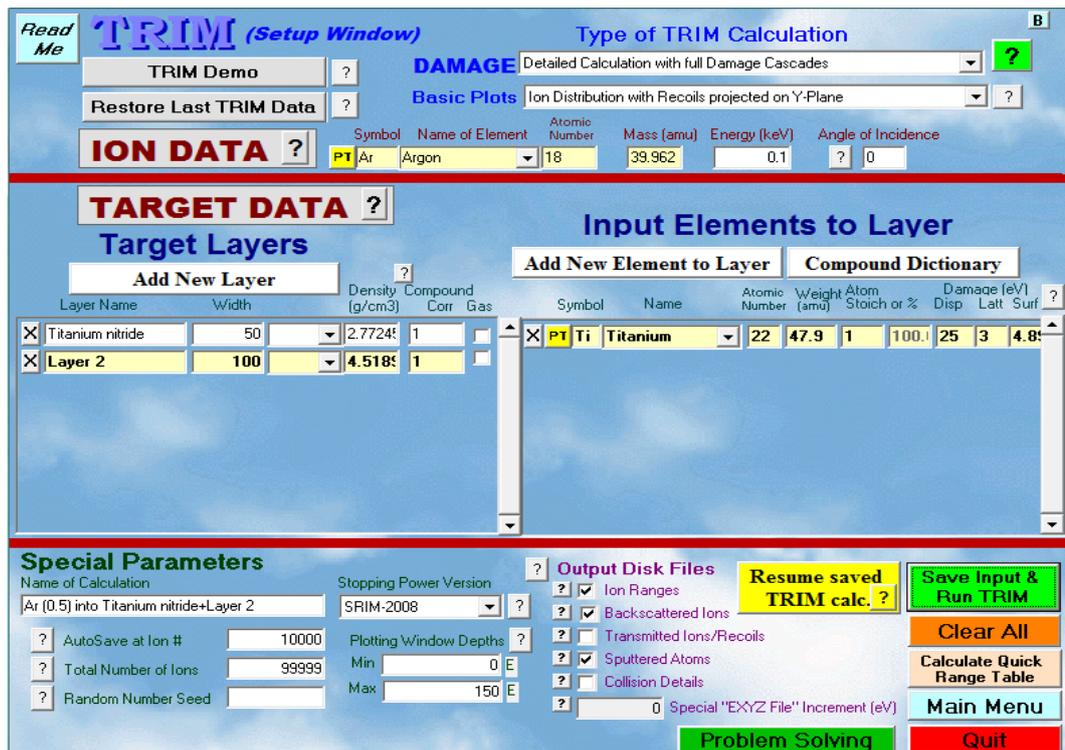


Fig. 2.4 – A selection of calculation parameters

Ion distribution and quick calculation of damage - this mode is used if the calculation of the final distribution of ions in the target, the energy loss of the ion in ionisation of the target atoms, transfer energy to recoil atoms, and in addition tracked elastically reflected and passed ions. In this mode are not described in detail the processes associated with sputtering of the target and the behavior of recoil atoms;

A detailed calculation with full damage cascades – in this mode tracked each individual atom to recoil until its energy drops below the energy of displacement of a target atom from the equilibrium state.

Monolayer collision steps / spraying – in this mode, moreover accounting is performed sputtering of atoms in the surface layer and the processes of interaction of these atoms with the incident ions.

To calculate the sputtering yields and ion implantation profiles, we choose the second mode (a detailed calculation with full damage cascade).

The following list of Basic Plots is the ability to choose appropriate modes of visualization of the trajectory of the ions.

It should be noted that the TRIM system of coordinates implies that the X-axis oriented in the depth of the target perpendicular to its plane, the Y-axis, Z – in the lateral plane.

Below is sect Ion Data, which specifies the type of the bombarding ion, its energy (in Kev) and the angle of the primary beam relative to the surface. The ion selection is made by clicking on the PT, which causes the Periodic table, and the choice of an angle by entering a value (0-89,9°) in the Angle of Incidence. In this section you choose as the bombarding ions - Ar.

In the Target section Data set characteristics of the target. On the left, under Layers, specify the number of layers of the target. Adding a layer is done using the button Add New Layer, and removal is a cross to the left of the layer name. In the field Layer Name enter the layer name, field Width – the thickness of the layer (in Angstrom, nm, micron, mm, cm, km), the field Density is the density of the target Compound Correction – the correction that is associated with the formation of chemical compounds between the atoms of the target. Item Gas is selected in the case of gaseous substances.

For the determination of substances of target there are two ways. The first is the establishment of targets of individual substances. Another path involves the connection from the list available in the program. To add substance press Compound the Dictionary.

After you add items you can change the stoichiometry of the resulting compound using Atom Stoich (in parts or percent), and change the default displacement energy of atom from equilibrium (Disp), the binding energy with the lattice (Latt) and the binding energy of the atoms and the surface (Sput).

In the **Output Disk Files** select the files you want to keep:

Ion Ranges – distribution of ions in the target;

Backscattered Ions – data on ions elastically reflected;

Transmitted Ions / Recoils – data on ions that passed through the target;

Sputtered Atoms – sprayed atoms of a target;

Collision Details – information about cascades of recoil atoms.

After you have selected all the above options, press the button **Save Input & Run TRIM**. This will start the calculation window, which is shown in Fig. 2.5.

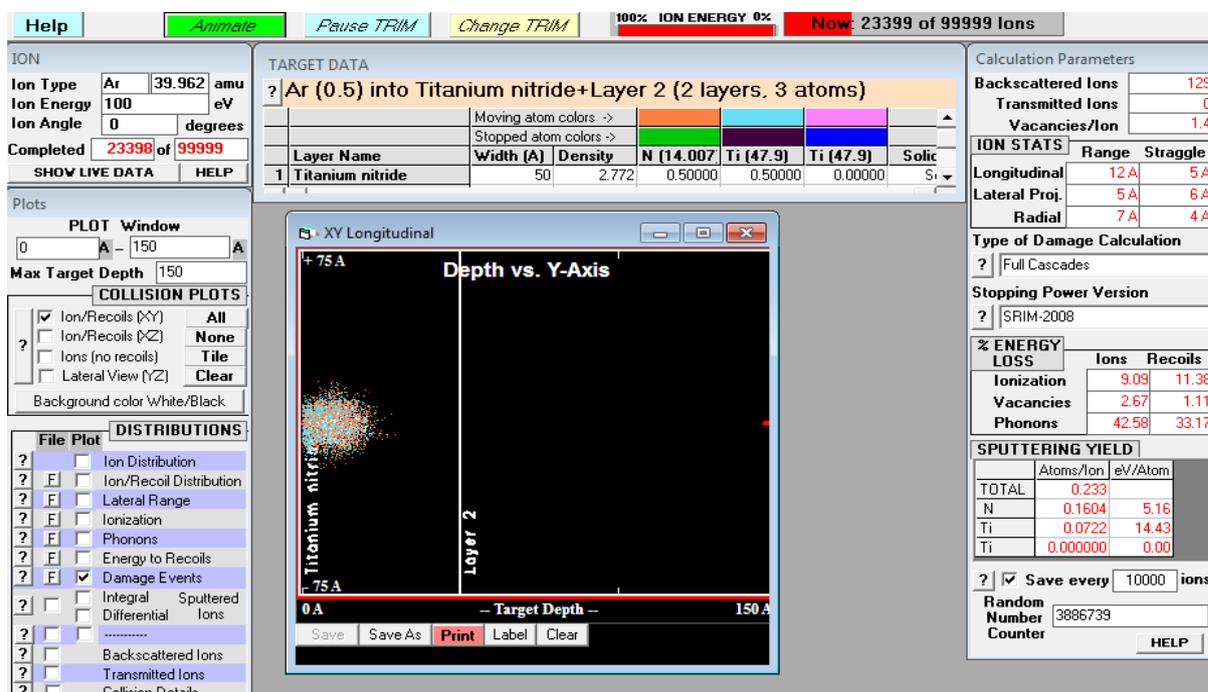


Fig. 2.5 – The window calculation parameters

To determine the profile of ion implantation, in the section **Distributions** click **Ion Distributions**. Then on the screen appears a window, where the distribution of ions is expressed as a graph. At the end of the schedule calculation can be saved. To do this, click the Save As button located in the bottom of this window.

For accuracy, calculation of the spend up to 99999 ions. At the end of this process, all necessary data is saved. All necessary data is extracted from partition Output Disk Files. Data is saved in txt file. Below are some of them:

RANGE_3D.TXT - the final three-dimensional location of all the ions that stop in the target. This file can only be requested at the setup TRIM.

BACKSCAT.TXT - the kinetics of all of the reflected ions (energy, location and trajectory).

TRANSMIT.TXT - the kinetics of all transmitted ions (energy, location and trajectory).

SPUTTER.TXT - all kinetics of the sputtered atoms from the target.

COLLISON.TXT - a table of all atomic collisions ion / target, which damage the target.

2.4 The SIMTRA program

SIMTRA- simulation of the metal flux.

This program allows to simulate the transport of sputtered particles into a gas stream when deposited by the Monte Carlo method. Collisions of atoms in the gas phase affect the energy distribution and the deposition profile of atomized atoms.

Using predefined surfaces the user can create a geometrical representation of his or her experimental setup which is visualized by the graphical user interface. The movement of a number of particles, generated with initial conditions (position, energy and direction) from a target surface, is tracked until they cross one of the defined surfaces. Several options are available to customize the particle generation and transport through the gas phase such as: custom racetracks, initial energy and angular distributions.

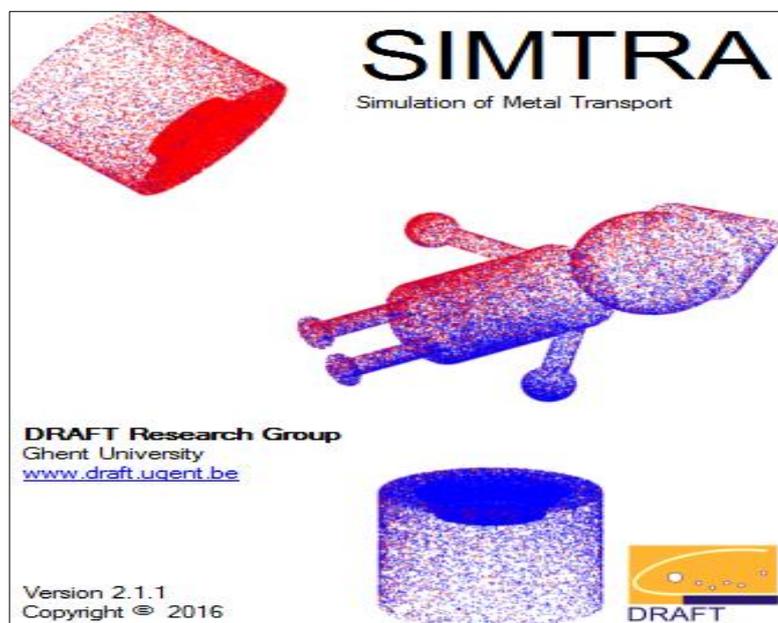


Figure 2.6 – The SIMTRA interface

To begin the simulation process, you need to enter the settings, i.e. SIMTRA simulation basics. A SIMTRA configuration consists of three parts:

1. a vacuum chamber, defining the outer boundaries for the sputtered particles;
2. a magnetron object, containing a target which determines the starting position of the particles;
3. any number of other 'dummy' objects on which the particles can be deposited, in this case on single square substrate surface.

2.4.1 The algorithm of work in the program SIMTRA

The vacuum chamber

In the main window menu, click **Object**→**New**→ **Vacuum Chamber**. This opens the Chamber Design window (Figure 4). Select the shape of the chamber (cuboid or cylinder), fill out the dimensions, click the button below the dimensions to select the sputter gas, enter the gas pressure and gas temperature. In case you are interested in the deposition profile on the chamber walls, check the save deposition on chamber walls box and enter the grid size for each dimension. If you want specific info on each particle that is deposited on the any of the chamber walls, check the box save individual data. Click Add chamber to add the chamber to the configuration.

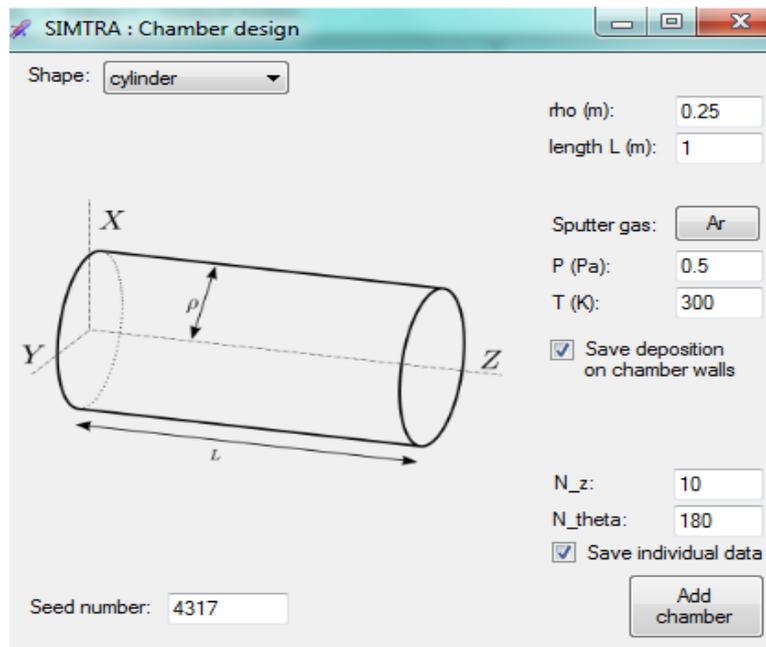


Figure 2.7 – The Chamber Design window

The magnetron

Again in the main window menu, click **Object**→**New** → **Magnetron**. The Object Designer main window opens in magnetron mode with three subwindows: the geometry window, the visualization window and the target and transport settings. A custom object geometry can be defined by adding any number of surfaces and setting their dimensions and orientation. For now we will use a template of a planar magnetron. In the designer main menu, click Geometry Template Magnetron Planar. The planar magnetron template window opens, enter a name for the object and edit the dimensions as you wish. Click Create object to generate the necessary surfaces. Six different surfaces are now listed in the geometry window (Figure 5). By selecting any of them, you can inspect their position, orientation and dimensions. The selected surface is highlighted in blue in the visualization window.

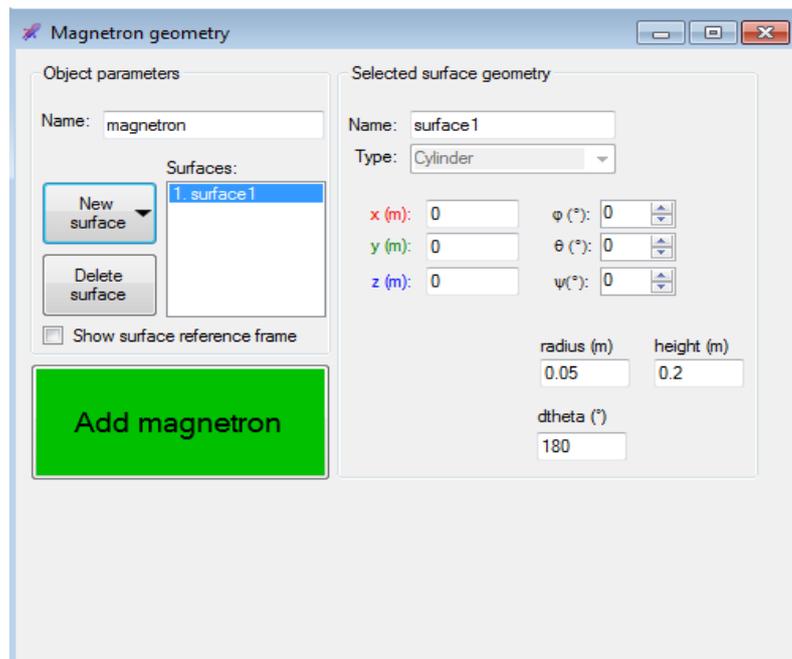


Figure 2.8 – The magnetron geometry window listing the six surfaces of a predefined planar magnetron.

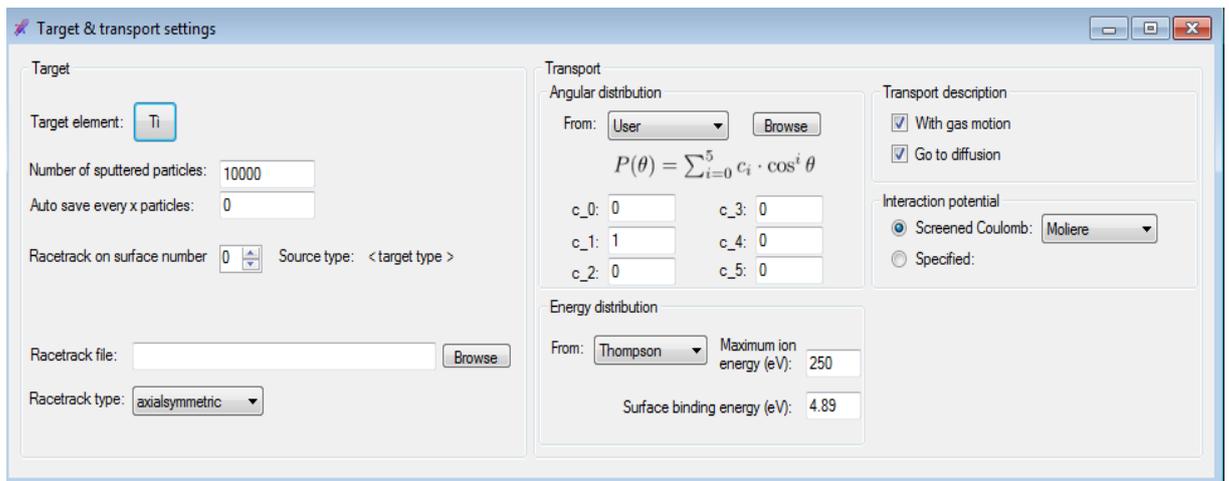


Figure 2.9 – The Chamber Design window.

Geometry, target and transport settings are now configured. Click **Add magnetron** to add the magnetron to the setup and close the **Designer window**. The substrate with chamber and magnetron defined, only a substrate is still missing. This will be a dummy object consisting of a single surface. In the main window, click **Object**→**New**→**Dummy object**. In the **Object**→**Geometry window**, enter a name for the substrate object. Click **New surface**→**circle** and enter the dimensions of the substrate. Click **Add dummy object** to add the substrate to the setup and close the **Designer**.

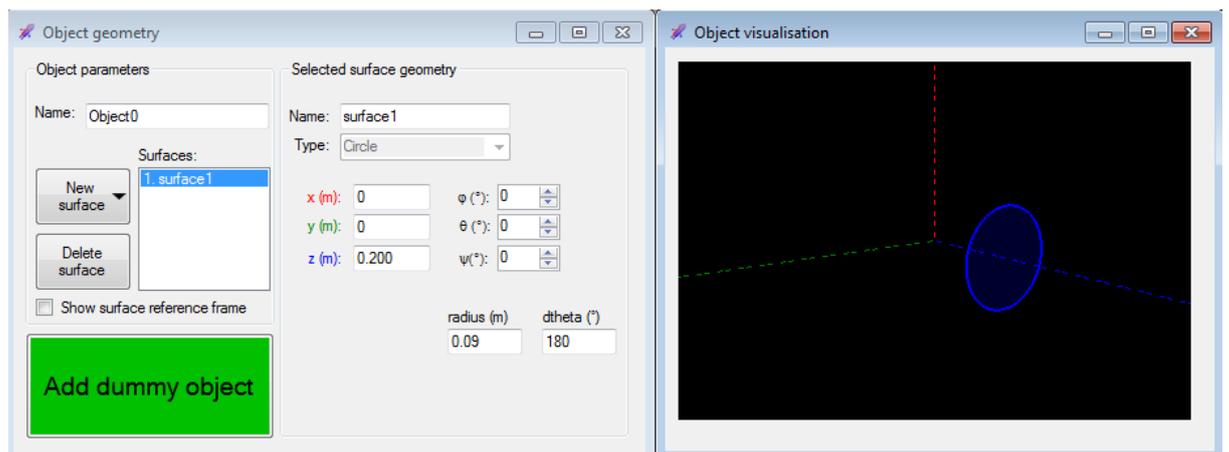


Figure 2.10 – Example of substrate visualization

At the end of the simulation, you can see the final illustration of the installation, which is depicted in Fig. 2.11 below.

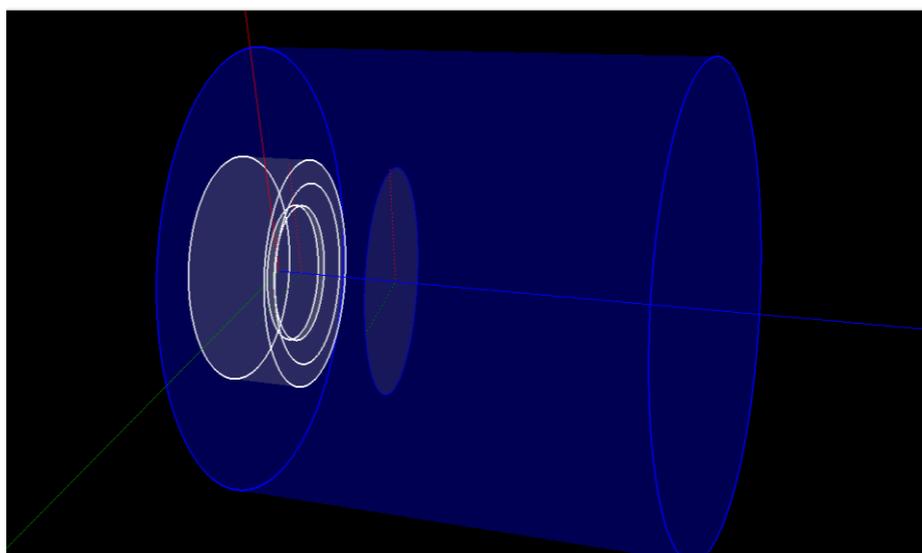


Figure 2.11 – The final visualization of the magnetron sputtering system

The substrate deposition profiles can be found in the form of a txt file, which is saved in the data folder. In our case, this file contains 10 rows and 10 columns corresponding to the grid installed in the window of the configuration object.

Файл	Правка	Формат	Вид	Справка	Number of arriving particles						
10	10	10000									
0	0	12	31	32	28	23	7	0	0		
0	3	28	34	31	35	27	29	18	0		
12	20	28	45	43	36	45	37	27	5		
27	26	29	35	51	31	37	32	28	28		
23	29	39	44	42	47	50	35	45	21		
26	45	41	49	35	39	38	32	37	20		
26	28	47	36	42	55	34	35	43	22		
7	34	38	28	36	43	37	38	23	7		
0	18	25	38	35	29	37	24	19	0		
0	0	11	18	30	32	20	6	0	0		

Figure 2.12 – Example of an output file containing the total number of particles that have arrived in each cell of the substrate

Average particle data

When average particle data is checked, a grid of size $N_1 \times N_2$ will be defined on the surface and the average data of particles arriving in each cell will be calculated. Depending on the surface type different surface parameters will be subdivided by N_1 and N_2 to obtain a homogeneous grid.

The following output files are generated:

E.txt: average particle energy (eV)

Flight.txt: the average time between particle emission and deposition (s)

Ksi.txt: average cosine of the angle of incidence with respect to the surface normal

N.txt: total number of particles that have been deposited per surface cell

Ncoll.txt: average number of collisions the particles have undergone

Path.txt: the average distance the particles have traveled between emission and deposition.