

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

Школа Инженерная школа ядерных технологий

Направление подготовки 03.03.02 «Физика»

Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
Моделирование процесса ионной имплантации методом молекулярной динамики

УДК 539.2:539.1:539.19.001.5

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б51	Ли Биньчэнь		

Руководитель

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

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

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

По разделу «Социальная ответственность»

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

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

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

Томск – 2019 г.

Запланированные результаты обучения по программе

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

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

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

Школа Инженерная школа ядерных технологий
 Направление подготовки 03.03.02 «Физика»
 Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

УТВЕРЖДАЮ:
 Руководитель ООП
 _____ Лидер
А.М.
 (Подпись) (Дата)
 (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ

на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

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

Студенту:

Группа	ФИО
150Б51	Ли Биньчэнь

Тема работы:

Моделирование процесса ионной имплантации методом молекулярной динамики	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	

Срок сдачи студентом выполненной работы:

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе <i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i>	Математическая модель процесса ионной имплантации, реализованная в программе моделирования методом молекулярной динамики
---	--

Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов <i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i>	– Обзор литературных источников; – Разработка алгоритма процесса ионной имплантации; – Моделирование ионной имплантации в системах Cu-Fe и Al-Ti; – Построение распределения имплантированных атом и дефектов по глубине – Анализ полученных результатов; – Заключение.
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы	
Раздел	Консультант
Социальная ответственность	Скачкова Л.А.
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Конотопский В.Ю.
Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:	
Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	

Задание выдал руководитель:

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

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б51	Ли Биньчэнь		

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

Студенту:

Группа	ФИО		
150Б51	Ли Биньчэнь		
	Инженерная школа ядерных технологий		Отделение экспериментальной физики
Уровень образования	Бакалавр	Направление/специальность	Физика

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

1. <i>Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	
2. <i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	
3. <i>Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. <i>Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения</i>	
2. <i>Планирование и формирование бюджета научных исследований</i>	
3. <i>Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования</i>	
Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):	
1. <i>Оценка конкурентоспособности технических решений</i>	
2. <i>Альтернативы проведения НИ</i>	
3. <i>График проведения и бюджет НИ</i>	
4. <i>Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИ</i>	

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Конотопский Владимир Юрьевич			

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б51	Ли Биньчэнь		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа		ФИО	
150Б51		Ли Биньчэнь	
Школа	ИЯТШ	Отделение (НОЦ)	ОЭФ
Уровень образования	бакалавр	Направление/специальность	Физика

Тема ВКР:

Моделирование процесса ионной имплантации методом молекулярной динамики	
Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	<i>Исследования для материалов Al-Ti. Алюминий обладает высокой тепло- и электропроводностью, стойкостью к коррозии за счёт быстрого образования прочных оксидных плёнок, защищающих поверхность от дальнейшего взаимодействия. Титан характеризуется легким весом, высокой прочностью, металлическим блеском и хорошей коррозионной стойкостью. В настоящее время широко используется в различных областях промышленности</i>
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности: — специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; — организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.	-инструкция № 2-08 по охране труда при работе с ПЭВМ и ВДТ -СанПиН 2.2.2/2.4 -ГОСТ Р 50948-01 -СанПиН 2.2.4.1191—03 -ГОСТ 54 30013-83 --Электромагнитные излучения СВЧ. -СНиП 23-05-95 "Естественное и искусственное освещение -ГОСТ Р 12.1.019-2009. -ГОСТ 12.1.038-82. -НПБ 105-03. -ГОСТ 12.1.004-91. -ГОСТ 12.1.004-91.

2. Производственная безопасность: 2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов 2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия	вредные и опасные факторы: -Микроклимат; -Электромагнитные поля -Статическое электричество -Шум -Недостаточное освещение -Электрическое напряжение; -Воздействие высокой температуры;
3. Экологическая безопасность:	Факторы рабочего места, влияющие на окружающую среду: - Выброс в атмосферу рабочего газа; - Выброс в атмосферу химических веществ;
4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:	возможные ЧС при разработке и эксплуатации : - Возникновение возгорания; - Поражение оператора установки электрическим током; наиболее типичную ЧС : Поскольку существует множество электроприборов, наиболее типичным ЧС является пожар.

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

Задание выдал консультант:

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

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б51	Ли Биньчэнь		

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

Школа Инженерная школа ядерных технологий
Уровень образования бакалавриат
Направление подготовки 03.03.02 «Физика»
Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики
Период

выполнения

Форма представления работы:

бакалаврская работа

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

КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН
выполнения выпускной квалификационной работы

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
01.03.2018	Аналитический обзор литературы	15
01.09.2018	Разработка программы для моделирования процесса ионной имплантации.	15
30.12.2018	Моделирование ионной имплантации для систем Cu-Fe и Al-Ti.	20
30.04.2019	Анализ результатов	15
25.05.2019	Социальная ответственность	15
25.05.2019	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	15
25.05.2019	Заключение	5

Составил преподаватель:

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

СОГЛАСОВАНО:

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

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа содержит 88 страницы, 39 рисунков, 19 таблицы, 28 литературный источник.

Ключевые слова: Метод молекулярной динамики, пакет LAMMPS, ионная имплантация, механические свойства, дефекты кристаллической решетки.

Объект исследований – молекулярно динамическая модель процесса ионной имплантации. Расчеты выполнены для систем медь – железо и алюминий – титан.

Цель работы: Изучение изменений структуры и механических свойств металла в процессе ионной имплантации на атомном уровне

Задачи :

1. Разработать алгоритм процесса ионной имплантации для реализации методом молекулярной динамики в программе LAMMPS.
2. Провести моделирование ионной имплантации для систем Cu-Fe и Al-Ti.
3. Построить распределение частиц по глубине и провести анализ дефектов в зависимости от энергии и дозы имплантированных частиц.
4. Рассчитать модуль упругости материала до и после ионной имплантации.

Область применения: Результаты работы могут способствовать пониманию механизмов упрочнения материала на атомном уровне.

Оглавление

РЕФЕРАТ.....	11
Введение	14
ГЛАВА 1. Ионная имплантация и методы исследования	16
1.1. Ионная имплантация.....	16
1.2. Моделирование процесса ионной имплантации.	18
ГЛАВА 2. Метод моделирования процесса ионной имплантации..	33
2.1.Метод молекулярной динамика.....	33
2.2 Межатомные потенциалы.....	37
2.2.1Потенциал Леннарда-Джонса	37
2.2.2 Потенциал Морзе	38
2.3 LAMMPS	39
ГЛАВА 3 Моделирование ионной имплантации Al в Ti.....	41
3.1Построение структуры Al в Ti	41
3.2Построение структуры Cu в Fe	50
3.3 Расчет модуля упругости.....	58
Глава 4.Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	63
4.1 Организация и планирование работ	63
4.1.1 Продолжительность этапов работ	64
4.2 Расчет сметы затрат на выполнение проекта	71
4.2.1 Расчет затрат на материалы	71
4.2.2 Затраты на амортизацию оборудования.....	71
4.2.3 Расчет затрат на электроэнергию	72
4.2.4 Расчет заработной платы	72
4.2.5 Расчет затрат на социальный налог.....	73
4.2.6 Расчет прочих расходов.....	73
4.2.7 Стоимость всего проекта.....	73
4.2.8 Оценка экономической эффективности проекта	74
ГЛОВА 5.СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ.....	75
5.1. Характеристика объекта исследования и области его применения.....	75

5.2. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности.	76
5.2.2. Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.	77
5.3. Профессиональная социальная безопасность.	78
5.3.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов.....	78
5.3.2 Обоснование мероприятий по снижению воздействия.....	83
5.4 Экологическая безопасность.....	84
5.5 Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....	84
5.6 Вывод.....	85
Заключение	86
Список литературы.	87

Введение

На фоне роста стоимости сложного экспериментального оборудования, а также достигнутого уровня производительности современных вычислительных средств, технология компьютерного моделирования постепенно стала эффективным и удобным методом моделирования при низких затратах. Метод молекулярной динамики также является классическим методом изучения молекулярного движения. Используя компьютер, результаты моделирования могут быть получены с высокой скоростью и высокой эффективностью. В нормальных условиях он может быть хорошо согласован с экспериментами и может уменьшить экспериментальные затраты. Данная работа посвящена исследованию процессов ионной имплантации методом молекулярной динамики. Ионная имплантация играет важную роль в разработке материалов в настоящее время и в будущем. Особенно в области полупроводников она часто используется в интегральных схемах для изготовления секретных приборов. Ионная имплантация улучшает свойства материала путем впрыскивания ионов других элементов в другой материал, такой как твердость, высокая термостойкость, коррозионная стойкость и тому подобное. В этой работе я буду учиться об этом и выполнять простое моделирование молекулярной динамики. Мы выбрали пакет программа LAMMPS.

Цель работы: Изучение изменений структуры и механических свойств металла в процессе ионной имплантации на атомном уровне

Задачи :

1. Разработать алгоритм процесса ионной имплантации для реализации методом молекулярной динамики в программе LAMMPS.

2.Провести моделирование ионной имплантации для систем Cu-Fe и Al-Ti.

3.Построить распределение частиц по глубине и провести анализ дефектов в зависимости от энергии и дозы имплантированных частиц.

4.Рассчитать модуль упругости материала до и после ионной имплантации.

ГЛАВА 1. Ионная имплантация и методы исследования

1.1. Ионная имплантация

Ионная имплантация — способ модификации материала для введения ионов легирующей примеси в твердое тело. Процесс ионной имплантации состоит в том, чтобы облучать (впрыскивать) в твердый материал ионы или атомы, тем самым формируя специальную область в выбранной (то есть, впрыскиваемой) области - поверхностный слой (инъекционный слой)

Основные характеристики ионной имплантации: 1 чистое легирование, ионная имплантация проводится в вакуумной системе, и используется масс-анализатор высокого разрешения, чтобы гарантировать, что легирующие ионы имеют очень высокую чистоту. 2 Концентрация легирующих ионов не ограничена равновесной растворимостью твердого вещества. В принципе, различные элементы могут быть легированными элементами и могут достигать концентрации легирования, которая не может быть достигнута обычными способами. Для тех элементов, которые не могут быть легированы обычными методами, методы ионной имплантации не являются трудными для достижения точной контролируемой концентрации и распределения по глубине 3 имплантированных ионов. Количество имплантированных ионов зависит от накопленного тока пучка, а распределение по глубине контролируется ускоряющим напряжением, эти два параметра могут быть точно измерены и строго контролироваться внешней системой. 4 Температура подложки может быть свободно выбрана при имплантации ионов. Он может быть легирован при высокой температуре или легирован при комнатной или низкой температуре по мере необходимости. Это очень ценно в практических приложениях. 5

больших площадей равномерно вводятся. Устройство сканирования луча в системе ионной имплантации может обеспечить высокую однородность легирования на большой площади. В ионной имплантации глубина легирования мала. Обычно в течение 1 мкс . Например, типичный диапазон для среднего диапазона ионов 100 кэВ составляет около $0,1\text{ мкм}$.

Технология ионной имплантации позволяет нам вводить любой химический элемент заданной дозы на указанную глубину. Таким образом, эта технология может быть реализована при любой температуре, и мы можем реализовать сплав, который раньше было невозможно инжектировать при высоких температурах, и мы можем сделать это, используя этот метод. И можно создавать композитные системы с уникальными структурами и характеристиками, которые значительно отличаются от предыдущих.

Когда падающие ионы и электроны сталкиваются с ядром-мишенью, ионы легирующей примеси теряют энергию и в конечном итоге останавливаются на определенной глубине. Для пучков с энергией от 10 до 500 кэВ глубина проникновения может достигать 1 микрона . Существует много факторов, которые влияют на распределение имплантата на поверхности образца, который является примерно гауссовским. Кроме того, когда в материал вводятся ионы, материал появляются структурные дефекты. Наконец, появятся большие дислокации и дислокационные кластеры.

Преимущества и применение ионной имплантации.

Основные преимущества технологии ионной имплантации:

- 1) отсутствие термодинамических ограничений по составу образующихся в поверхностных слоях сплавов и химических соединений. Используя

ионную имплантацию, принципиально возможно получение систем сложного состава с любым сочетанием компонентов;

2) при ионной имплантации формируются неравновесные метастабильные структуры, которые в ряде случаев имеют уникальные физико-механические свойства. Данная особенность обусловлена тем, что процессы структурообразования протекают в условиях очень быстрого охлаждения (скорость охлаждения может достигать значений $\sim 10^6$ K/c);

3) универсальность и гибкость процесса; методом ионной имплантации удается получить слои с необходимым профилем концентраций легирующих элементов, структурным состоянием. Часто для регулирования характера распределения имплантированных атомов в поверхностном слое используется дополнительная термообработка;

4) высокая чистота процесса (процесс осуществляется в высоком вакууме); высокая автоматизация; широкие возможности в управлении ионным пучком, возможность локальной обработки;

5) возможность осуществления процесса при различных условиях и режимах, в том числе и при относительно низкой температуре поверхности;

6) возможность создания поверхностных слоев с высокими физико-механическими свойствами, которые трудно или даже невозможно получить другими методами обработки. [5]

1.2. Моделирование процесса ионной имплантации.

В работе [1] представлена модель процесса ионной имплантации в технологии Smart-cut. Ионы водорода имплантируются в донорскую пластину, покрытую слоем SiO₂. Чтобы количественно проанализировать

эффекты энергии имплантации (E), дозы ионов водорода (D) и температуры имплантации (TI) на распределение ионов водорода в донорной пластине и скорости дефекта, вызванной ионной имплантацией, они использовали метод молекулярной динамики и построили график. Потом сравнить расчетного значения с экспериментальным значением. Рассмотрим возможность этого метода для этого исследование.

В принципе, процесс Smart-Cut состоит из четырех основных этапов [6 8 9]:

- (1) Имплантация ионов - ионы водорода имплантируются в донорскую пластину, покрытую слоем SiO₂.
- (2) Вафельное склеивание - имплантированная донорская пластина очищается и скрепляется с пластиной ручки через метод склеивания пластины при комнатной температуре.
- (3) Отжиг - две склеенные пластины сначала испытывают отжиг 400-600 °C, чтобы разделить донорскую пластину, что дает пластину SOI. Затем подложка SOI подвергается процессу отжига ≈ 1100 °C для удаления остаточных ионов и усиления интерфейсных связей.
- (4) Полировка - пластина SOI полируется для достижения высококачественной поверхности.

В процессе Smart-Cut ионная имплантация является наиболее важным этапом, когда зарождение дефектов и начальный рост происходят в наномасштабе. Тем не менее, количественный и теоретический анализ в наномасштабном процессе имплантации до сих пор до сих пор не сообщается в литературе. в этой работе мы проводим систематические моделирование MD для исследования процесса имплантации ионов водорода в технологии Smart-Cut. Затем количественно проанализировать эффекты энергии имплантации (E),

дозы ионов водорода (D) и температуры имплантации (TI) на распределение ионов водорода в донорной пластине и скорости дефекта, вызванной ионной имплантацией.

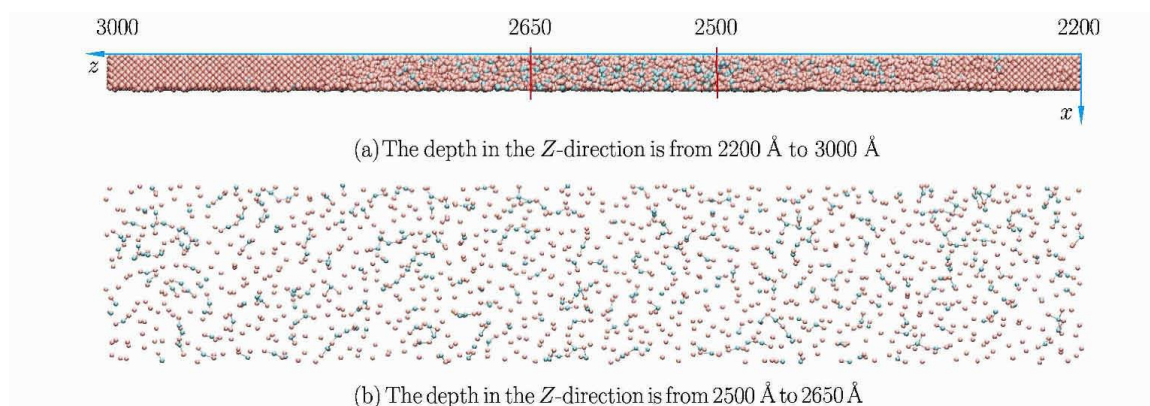


Рис.1.1 Вид плоскости кристалла Si-имплантированного Si в случае, когда 3685 атомов H имплантированы энергией 10 кэВ. (Красный: атомы Si, зеленый: атомы H).[1]

Это реальная симуляция, мы видим, что кремний и водород объединяются для образования связей и приближенного распределения водорода

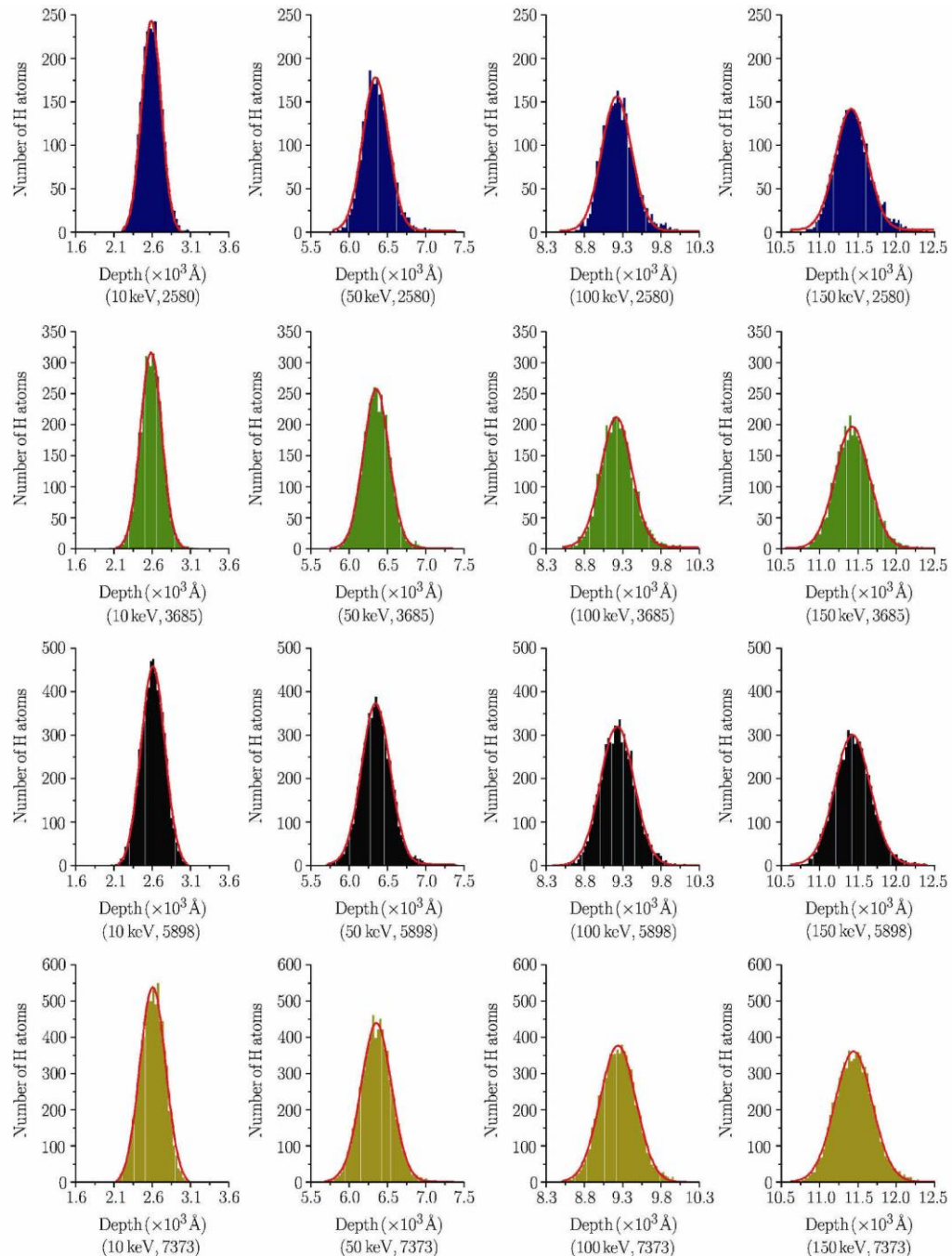


Рис 1.2 Распределение атомов Н в Si кристаллическом, когда имплантируется различное количество атомов Н с разной энергией. [1]

Можно видеть, что распределения атомов Н во всех случаях показывают сходные тенденции и примерно следуют за гауссовскими распределениями, как это подчеркивалось кривыми на красном рис. Когда энергия имплантации изменяется от 10 кэВ до 150 кэВ, толщина

области концентрации водорода изменяется от 1000 до 2000 ° А. Более того, для любого заданного числа атомов Н увеличение энергии имплантации приводит к большей площади концентрации водорода, а также к более глубокому положению максимальной концентрации водорода, но уменьшает величину максимальной концентрации водорода. Это связано с тем, что атомы Н с более высокой энергией имплантации движутся на большее расстояние до того, как они оказались в кристалле Si. Как следствие, вероятность дисперсии атомов Н становится выше, что рассеивает одинаковое число атомов Н в более широкой области. Однако для некоторой энергии имплантации доза атомов Н мало влияет на размер области концентрации водорода и положение максимальной концентрации водорода, хотя ожидается, что величина максимальной концентрации водорода будет возрастать с увеличением ионного дозировать.

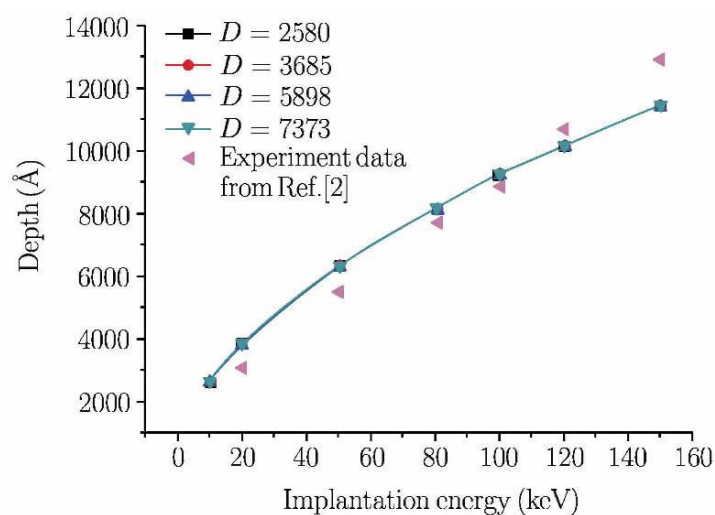


Рис 1.3 Глубина максимальной концентрации водорода vs. энергия имплантации для разных имплантационных доз Н при комнатной температуре.[1]

На рисунке 1.3 явно показано хорошее совпадение результатов моделирования МД с экспериментальными измерениями, а также независимость глубины максимальной концентрации водорода от дозы ионов водорода.

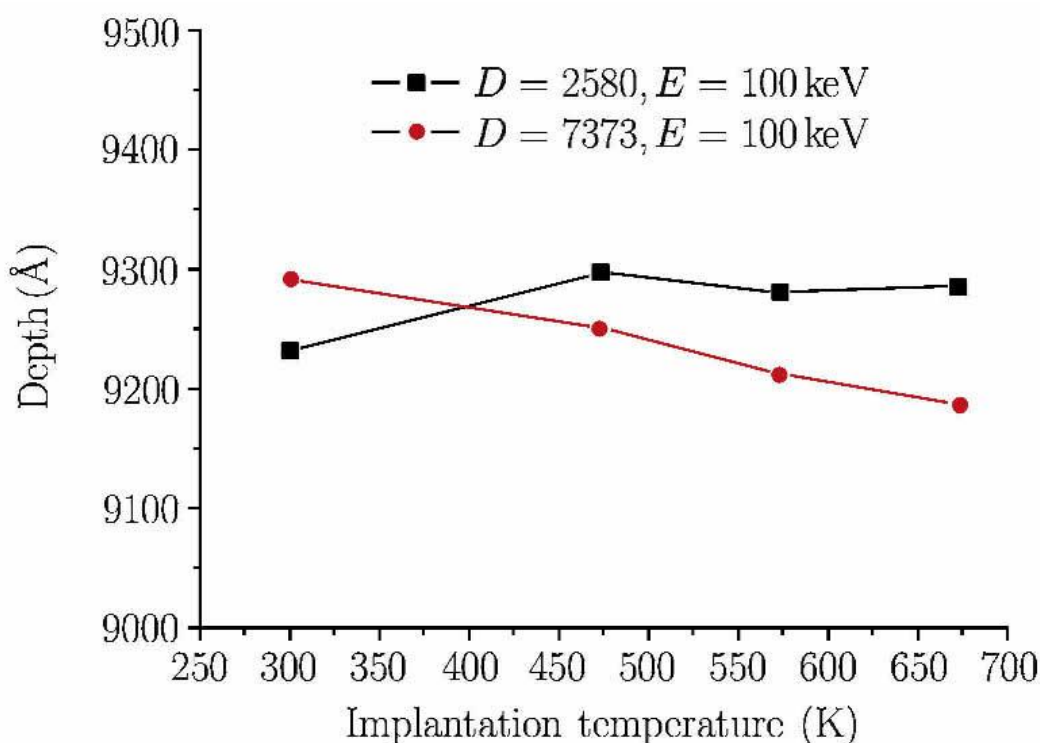


Рис 1.4. Глубина максимальной концентрации водорода по сравнению с температурой имплантации для различной имплантации доза атомов Н с энергией 100 кэВ.[1]

Он также оценивает температуру имплантации на основе моделирования МД, где температура установлена равной 300 К, 473 К, 573 К и 673 К. Обнаружено, что температура имплантации имеет незначительное влияние на глубину максимального водорода, так как показанном на рис. 1.5, для случаев, когда атомы 2580 и 7373Н заплавлены с энергией 100 кэВ. Трудно вычислить скорость дефекта с

помощью экспериментальных измерений, не говоря уже о для количественной оценки влияния параметров обработки, таких как энергия имплантации, доза иона водорода

температура имплантации по частоте дефектов. В этой работе мы вводим новый параметр скорости дефекта, α , чтобы количественно характеризовать скорость дефекта и влияние параметров обработки. На основе факты, что дефект зарождения и роста всегда сопровождается разрывом связей Si-Si и образование соединений Si-H, скорость дефекта определяется изменением числа атомов Si до и во время процесса имплантации в выбранном регионе. Таким образом, скорость дефекта может быть выражена как

$$\alpha = \frac{N_{Si}^B - N_{Si}^I}{N_{Si}^B} \times 100\%$$

где N_{Si}^B N_{Si}^I представляют числа атомов Si до и во время процесса имплантации в выбранной области, соответственно.

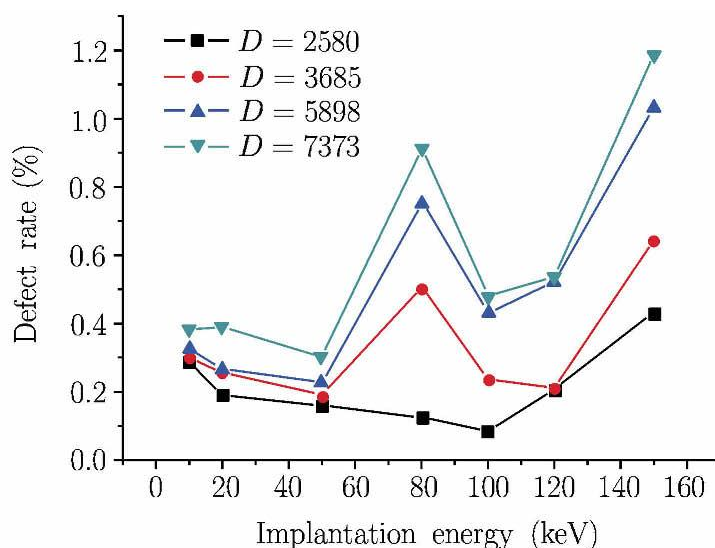


Рис 1.5. Частота дефектов в статистической области в имплантированный Si по сравнению с энергией имплантации для

различных имплантационные дозы атомов Н при комнатной температуре.[1]

=

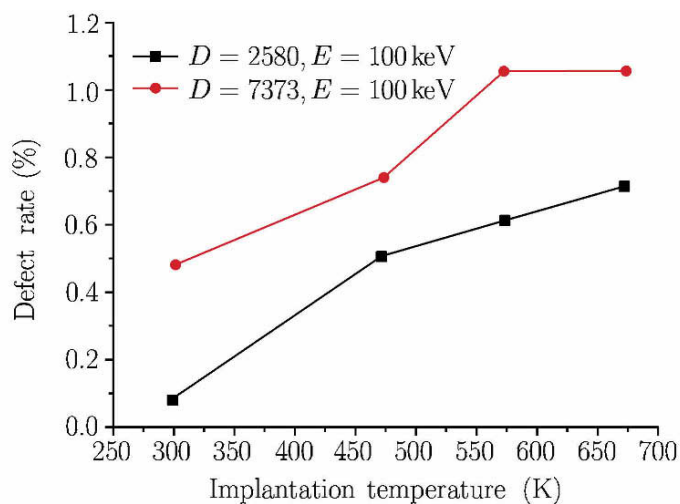


Рис.1.6 Частота дефектов в статистической области в имплантированный Si по сравнению с температурой имплантации для разных имплантационные дозы атомов Н с энергией 100 кэВ.[1]

В статье [2] исследовали моделирование для комбинации ион-мишень: Cu-Fe, чтобы изучать процесс ионной имплантации и лучше знать метод молекулярной динамики.

Ион-мишень: Cu-Fe	
Энергии налетающих атомов, keV	
5	7
Размер ячейки моделирования, Å: 85.98x85.98x1433.0	
Число итераций	
8500	10500
Число налетающих атомов: 2000	
Температура, К: 300	
Скорости налетающих атомов, Å/picosecond	
430	508,7
Файл межатомного потенциала [2]: FeCuNi.eam.alloy	

Таблица 1.1 Условия эксперимента

	Cu-Fe	
	5keV	7keV
вакансии	1646	810
включения	5775	3800

Таблица.1.2 Количество вакансий и включений в мишени из железа после проведения ионной имплантации

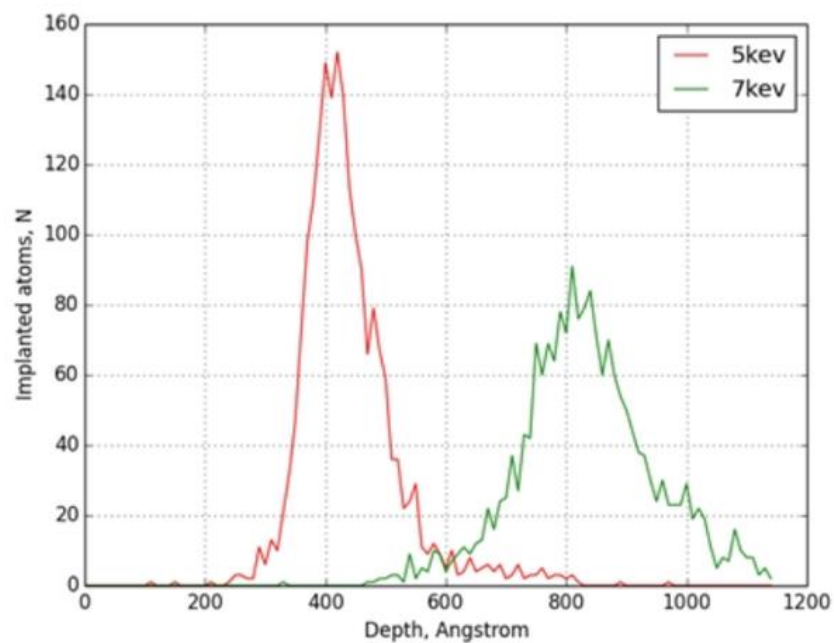


Рис.1.7 Распределение атомов меди по глубине мишени из железа

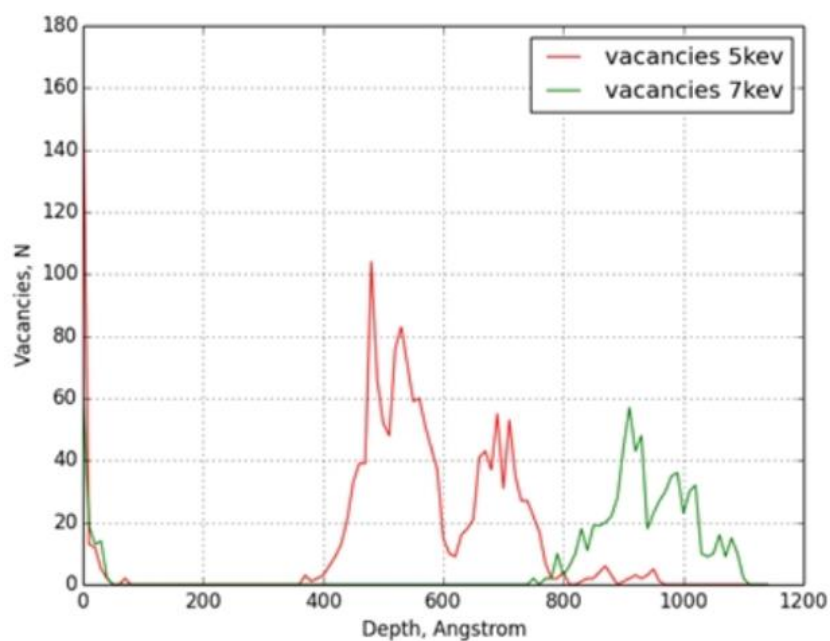


Рис.1.8 Распределение вакансий по глубине мишени из железа

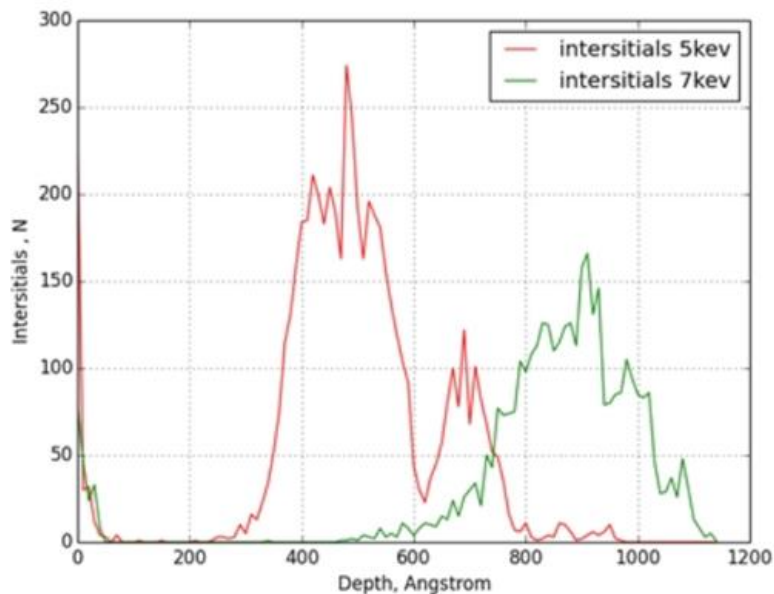


Рис.1.9 Распределение включений по глубине мишени из железа

В результате моделирования отмечено, что при увеличении энергии бомбардирующих атомов максимум концентрации примеси смещается вглубь мишени и становится более растянутым. Однако, работа не содержит сравнения с экспериментом.

Работа [3] посвящена изучению поведения нанопоры в чистых ОЦК и ГЦК металлах и с примесью водорода при одноосном растяжении и ионном облучении.

Кристаллиты начальной конфигурации соответствуют температуре 300К. Параметры решетки определяются условия минимальной потенциальной энергии. Шаг по времени $\tau = 2 \cdot 10^{-15}$ секунд. На самом деле моделирование растяжения состоит из четырех этапов, характеризующихся относительным удлинением Образец: 12,5%; 25%; 37,5%; 50%.

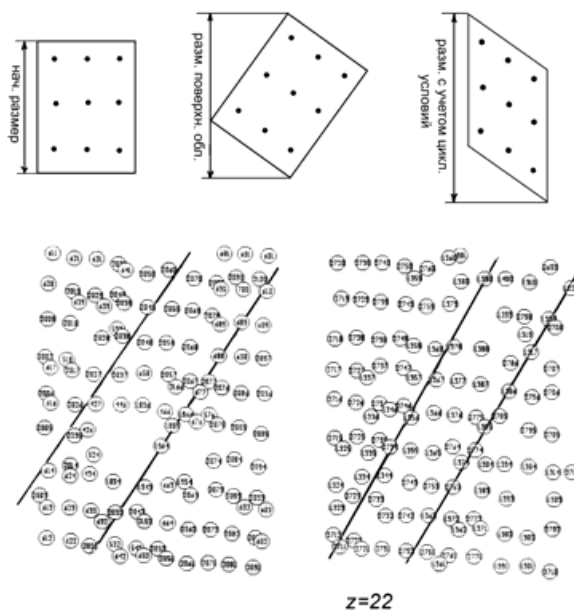


Рис.1.20 Изменение размеров элементарной ячейки в модельном кристаллите при растяжении

Из представленных рисунков видно, что увеличение длины кристаллита произошло за счет двух механизмов: удлинение элементарной ячейки первоначального образца и возникновение дислокационных дефектов.

Кроме того, толщина исследуемой пленки после растяжения на 25% уменьшилась приблизительно на 8%, что свидетельствует об изменении размера элементарной ячейки в направлении $[001]$.

Толщина пленки в направлении $[001]$ при растяжении на 37,5% уменьшилась на 25%.

Толщина пленки в направлении $[001]$ при растяжении на 37,5% уменьшилась на 25%.

В работе [4] исследовано изменение твердости и модуля упругости поверхности сплава Э110 после облучения ионами металлов. Этот эксперимент был проведен для полиэнергетических ионов Al^+ , Mo^+ и Zr^+ проникающих в поверхность сплава Э110. Эта работа позволяет нам

наблюдать изменения модуля упругости и твердости поверхности объекта при ионной имплантации из более интуитивных данных.

На рис. 1.21 показаны расчетный и экспериментально полученный профили залегания Al по глубине сплава Zr1%Nb после облучения ионами Al⁺ с энергией 15 ÷ 45 кэВ и дозой ионного облучения 1018 ион/см².

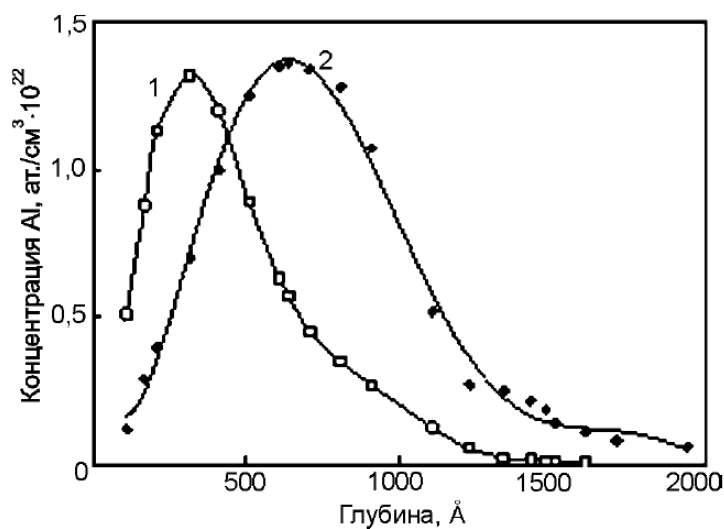


Рис. 1.21 Профиль распределения атомов Al в образце из сплава Zr1%Nb после облучения ионами Al⁺ с энергией 15÷45 кэВ и дозой ионного облучения 1018 ион/см². 1 – расчетный профиль, полученный с помощью компьютерного моделирования; 2 – экспериментально полученный профиль.[4]

Из рисунка видно, что результаты, полученные в эксперименте по моделированию, имеют слой модификации поверхности имплантированных атомов, достигающий 200 нм. Этот результат имеет определенный разрыв с экспериментом. Все мы знаем, что максимальное положение ионной имплантации и распределение имплантированных атомов зависят от Доза облучения ионов и температура облучаемого материала в эксперименте. Как известно [28], положение максимума распределения имплантированных уровней зависит от дозы ионного облучения и температуры облучаемого материала.

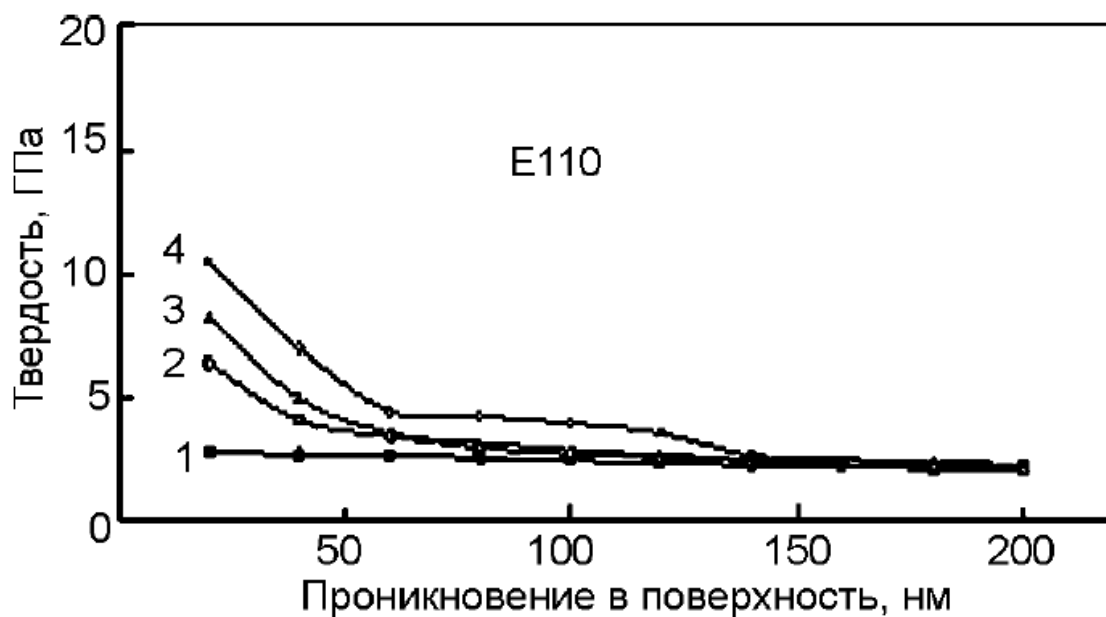


Рис1.22 Зависимость твердости поверхности сплава Э110 от глубины проникновения индентора для исходного (1) и имплантированных ионами Mo^+ (2), Al^+ (3) и Zr^+ (4) образцов.

С помощью метода наноиндентирования были получены зависимости твердости и модуля упругости поверхности сплава Э110 от глубины проникновения индентора для исходного и облученных образцов. На рис. 3 представлена зависимости твердости поверхности сплава Э110 от глубины проникновения индентора для имплантированных ионами Mo^+ , Al^+ и Zr^+ образцов.[4]

В результате видно, что инъекция ионов приводит к увеличению твердости поверхностного слоя материала.

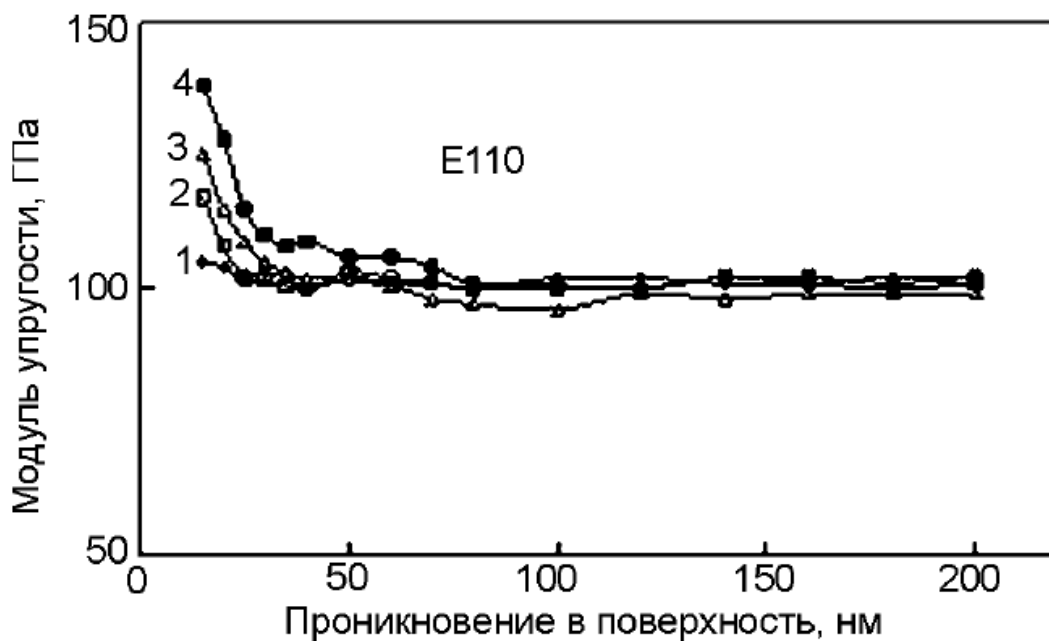


Рис. 1.23 Зависимость модуля упругости поверхности образцов из сплава Э110 от глубины проникновения индентора для исходного (1) и имплантированных ионами Mo⁺ (2), Al⁺ (3) и Zr⁺ (4) образцов.[4]

Из рисунка 1.21 видно, что большинство атомов Al имплантированы на глубине около 200 Å. Тогда смотри рисунок 3.22 около максимальной глубины модуль упругости поверхности материала увеличивается. Увеличение составляет около 20% -30%.Максимум достиг 140ГПа-150Гпа.

ГЛАВА 2. Метод моделирования процесса ионной имплантации

2.1. Метод молекулярной динамика

Физическая основа метода молекулярной динамики

Молекулярная динамика (МД) представляет собой сочетание физики, математики и химии. Молекулярная динамика - это набор методов молекулярного моделирования, основанный на ньютоновской механике для моделирования движения молекулярных систем, состоящих из различных состояний молекулярных систем, и, таким образом, вычисления интеграла конфигурации системы. На основе результатов интегрирования дополнительно рассчитываются термодинамические величины и другие макроскопические свойства системы.

Классическая молекулярная динамика

В классической МД решается система уравнений II закона Ньютона:

$$F = ma \quad (2.1)$$

МД является детерминистическим методом: если известны начальные координаты и скорости частиц, в принципе может быть описана эволюция системы в любые моменты времени. [7]

Краткая история развития метода МД

1957: метод молекулярной динамики на основе жесткой сферы

1964: Система частиц - Расширение (Рахман)

1977: метод динамики ограничения (Rychaert et al.)

1980: кинетические методы в условиях постоянного давления

1983: метод неравновесной динамики (Гиллан и Диксон)

1984: кинетический метод в условиях постоянной температуры

1985: первый принцип молекулярной динамики

1991: метод молекулярной динамики макроинтеграции (Cagin и Pettit)

Основные шаги при моделировании методом МД

(1) Начальная конфигурация

Первым шагом в моделировании молекулярной динамики является определение начальной конфигурации. Исходная конфигурация с более низкой энергией является основой для молекулярного моделирования. Начальная конфигурация типичной молекулы в основном основана на экспериментальных данных или квантово-химических расчетах.

После определения начальной конфигурации назначаются отдельные атомные скорости составляющих молекул, которые генерируются случайным образом в соответствии с распределением Больцмана. Поскольку распределение скоростей соответствует статистике Больцмана, на данном этапе температура системы составляет постоянная. Кроме того, после случайной генерации скорости движения каждого атома необходимо выполнить настройку таким образом, чтобы сумма импульсов системы во всех направлениях была равна нулю, то есть система не имела поступательного смещения.

(2) Фаза баланса (получение системы с минимальной энергией – оптимальной структуры)

Молекулярная фаза, установленная на предыдущем этапе, используется для построения сбалансированной фазы, а такие параметры, как конфигурация и температура, контролируются во время построения равновесной фазы.

(3) Расчет

На этом этапе молекулы в системе и атомы в молекуле начинают двигаться в соответствии с начальной скоростью. Возможно, что произойдут притяжение, отталкивание и даже столкновение. В это время, в соответствии с ньютоновской механикой и заранее определенным потенциалом взаимодействия между частицами Траектория частицы рассчитывается, при этом полная энергия системы постоянна, но внутренняя потенциальная энергия и кинетическая энергия молекулы непрерывно преобразуются, а температура системы также постоянно изменяется. В течение всего процесса система будет проходить через различные точки на поверхности потенциальной энергии. Рассчитанный образец извлекается во время этого процесса.

(4) Результаты расчета

Используя различные состояния системы выборки, вычисляется потенциальная энергия системы в это время, а затем вычисляется интеграл конфигурации.

(5) Потенциал действия и расчет динамики

Выбор потенциала тесно связан с расчетом кинетики. Выбираются разные потенциалы. Поверхность потенциальной энергии системы будет иметь разные формы. Траектории молекулярного движения и внутреннего движения кинетики будут разными, что повлияет на выборку. Результаты и расчет потенциальной энергии результатов выборки в основном используют потенциал двух тел модели жесткого

шарика при расчете взаимосвязи между макроскопическим объемом и микрокомпонентом. При расчете взаимосвязи между энергией системы и энтропией, на ранней стадии используется модель потенциала двух тел, такая как Леннард-Джонс и потенциал Морзе. Для расчета металла в основном используется потенциал Морзе. Однако, поскольку контраст, установленный экспериментом, легко приводит к соотношению Коши, которое не согласуется с экспериментом, в более позднем моделировании предлагается принять модель потенциала нескольких тел, такую как EAM, или использовать результат вычисления из первых принципов, который будет определен определенным физическим методом. Комбинированная функция потенциала тела. Однако, по сравнению с моделью потенциала двух тел, потенциалу многих тел часто не хватает четких выражений, многих параметров, а скорость сходимости моделирования очень низкая, что создает большие трудности для приложения. Следовательно, в общих приложениях, применение результатов вычисления из первых принципов, чтобы соответствовать L-J потенциальной функции, применение эквипотенциальной модели Морзе все еще очень обширно.

Применение

Молекулярную динамику можно использовать для расчета таких ансамблей, как NPT, NVE, NVT и т. Д. Это термодинамический метод расчета, основанный на детерминизме ньютоновской механики, который по сравнению с методом Монте-Карло обладает более высокой точностью и эффективностью при макроскопических вычислениях. Может широко использоваться в различных областях, таких как физика, химия, биология, материалы, медицина и т. Д.

2.2 Межатомные потенциалы

Наиболее простым видом межатомных потенциалов являются парные потенциалы. Строго говоря, эти потенциалы не имеют квантовомеханического обоснования. Однако ввиду своей простоты они часто использовались ранее при моделировании. В приближении парных потенциалов энергия системы частиц представляется в виде суммы потенциальных энергий взаимодействия всех пар атомов[27]:

$$U(r_1 \dots r_N) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \varphi(r_{ij}) \quad (2.1)$$

Наиболее распространенными парными потенциалами являются потенциалы Леннарда-Джонса и Морзе.

Основное преимущество парных потенциалов – простая форма уравнения, но у них есть существенный недостаток – они не учитывают влияние соседних атомов на энергию парного взаимодействия. Эта проблема решается с помощью многочастичных потенциалов.

2.2.1 Потенциал Леннарда-Джонса

Потенциальная функция Леннарда-Джонса (также известная как функция потенциальной энергии L-J или функция потенциальной энергии 6-12) является функцией, используемой в вычислительной химии для моделирования потенциальной энергии между двумя молекулами. Впервые он был предложен математиком Джоном Леннардом-Джонсом в 1931 году. Он широко используется из-за своей простой аналитической формы, особенно для описания взаимодействия между молекулами инертного газа.

Потенциал Ланны-Джонса имеет расстояние в два тела как единственную переменную и содержит два параметра. В форме

$$\varphi(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (2.2)$$

ε равна глубине потенциальной энергетической ямы, а σ - расстояние между двумя телами, когда потенциальная энергия взаимодействия точно равна нулю. В практических применениях параметры ε и σ часто определяются путем подбора известных экспериментальных данных или точных результатов квантовых расчетов.

2.2.2 Потенциал Морзе

Потенциал Морзе имеет форму

$$\varphi(r) = \varepsilon [\exp(-2\alpha(r - r_0)) - 2 \exp(-\alpha(r - r_0))] \quad (2.3)$$

Потенциал Морзе, названный в честь физика Филиппа М. Морзе, представляет собой простую аналитическую модель для потенциальной энергии между двухатомными молекулами. С одной стороны, потенциальное решение Морса Уравнение Шредингера имеет аналитическое решение для облегчения анализа проблемы, с другой стороны, поскольку оно неявно включает в себя явление разрыва связи, оно имеет хорошее приближение для тонкой структуры молекулярной вибрации. Потенциал Морзе содержит характеристики, которые отсутствуют в модели гармонического осциллятора, то есть состояние несвязывания. По сравнению с моделью квантового гармонического осциллятора потенциал Морса более реалистичен, поскольку он может описывать ангармонический эффект, умножение частоты и объединенную частоту. Множители встречаются при переходах $n \pm 2$

или более, в то время как объединенные частоты являются результатом добавления или удаления двух или более моделей.

2.3 LAMMPS

LAMMPS - это классический код молекулярной динамики, который имитирует ансамбль частиц, твердых частиц и паров в жидкости. Он может использовать различные силовые поля и граничные условия для моделирования всехатомных, полимерных, биологических, металлических, зернистых и грубых материальных систем. LAMMPS может рассчитывать системы размером от нескольких частиц до миллионов или даже сотен миллионов частиц.

LAMMPS может работать на однопроцессорном настольном компьютере и ноутбуке с высокой вычислительной эффективностью, но он специально разработан для параллельных компьютеров. Он может работать на любой платформе с установленным компилятором C++ и MPI, который, конечно, включает в себя распределенные и совместно используемые параллельные машины и кластерные машины типа Beowulf.

LAMMPS - это вычислительная программа, которую можно изменять и расширять, например, можно добавлять новые силовые поля, атомные модели, граничные условия и диагностические функции.

В общем, LAMMPS объединяет уравнения движения Ньютона для молекул, которые взаимодействуют через силы ближнего и дальнего действия, наборы атомных и макроскопических частиц, основываясь на различных граничных условиях и начальных условиях. Высокоэффективный расчетный LAMMPS отслеживает соседние частицы, используя соседние списки. Эти списки оптимизированы для ближней взаимной силы между частицами, чтобы предотвратить

слишком высокую локальную плотность частиц. На параллельных машинах LAMMPS использует методы пространственной декомпозиции для выделения моделируемых областей, разделяя все пространство моделирования на небольшие трехмерные небольшие пространства, каждое из которых может быть выделено на одном процессоре. Различные процессоры связываются друг с другом и хранят информацию об «призрачных» атомах на каждой небольшой границе пространства. LAMMPS (параллельный случай) наиболее эффективен при моделировании трехмерного блока моментов и наличии почти однородной системы плотности.

ГЛАВА 3 Моделирование ионной имплантации Al в Ti

3.1 Построение структуры Al в Ti

Сначала нам нужно построить модель, написать соответствующую команду на LAMMPS и извлечь соответствующие данные. Ниже приведены команды, которые мы написали, я объясню значение каждой команды одну за другой и приведу извлеченные данные.

```
units metal # Определить тип в LAMMPS
dimension 3#Определить размер
boundary p p p#Периодическое граничное условие
atom_style atomic #Атомная модель
lattice custom 2.951 a1 1 0 0 a2 0 1.732 0 a3 0 0 1.587 &
                                basis 0.0 0.0 0.0 &
                                basis 0.5 0.5 0.0 &
                                basis 0.5 0.8333333 0.5&
                                basis 0.0 0.33333333 0.5

#Постоянная решетки Ti
region box1 block 0 40 0 40 0 100
#Определите размер области 1 в направлении хуz
create_box 2 box1
# Создайте вышеуказанную область 1
mass 1 47.867
mass 2 26.982
# определить атомной масс
region box2 block 0 40 0 40 1 80
#Определите размер области 2 в направлении хуz
create_atoms 1 region box2
```

```

# Создайте полные атомы 1 в области 1

region box3 block 10 30 10 30 85 90
create_atoms 2 random 100 123456 box3

#region box3 block 15 25 15 25 85 85
#create_atoms 2 random 1 123456 box3
#Определите размер области 3 в направлении xuz
# Создайте атом

pair_style eam/alloy
#здесь мы выбрали парой потенциал EAM
pair_coeff * * Zope-Ti-Al-2003.eam.alloy Al Ti
# Определить имя потенциального файла EAM
neighbor 2.0 bin
neigh_modify delay 10 check yes
reset_timestep 0
#Начальный шаг
timestep 0.001
#Размер шага
thermo 100
#Выходные данные каждые 100 шагов
thermo_style custom step temp press

thermo_modify lost ignore flush yes
#Здесь мы игнорируем отсутствующие атомы
group 2 region box3
velocity 2 set 0 0 -150
fix m1 2 nve
#Определить скорость атома
group 1 region box2

```

```
fix m0 1 nvt temp 1.0 1.0 5.0
#Правильно под изотермическим изостатическим давлением

dump Out0 all atom 100 Al-Ti.*.txt
dump Out 2 custom 100 z(Al-Ti).*.txt zs vz c_3
# Файл вывода

run 3000

#Выполнение 3000 шагов

unfix 1

# Конец операции
```

На рисунке представлено начальное состояние системы.

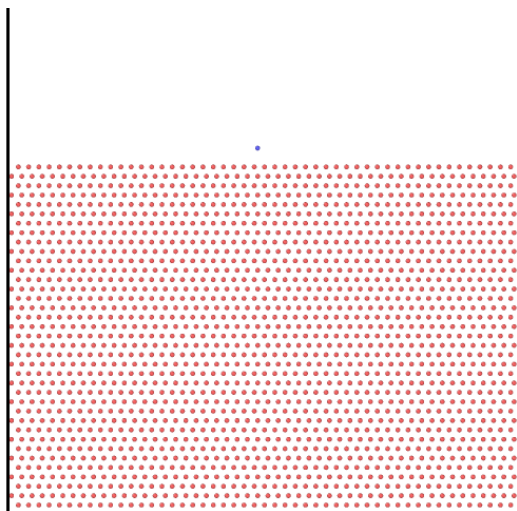


Рис.3.1 Начальная позиция атома в случае 1 Al атома($E=5$ кэВ)

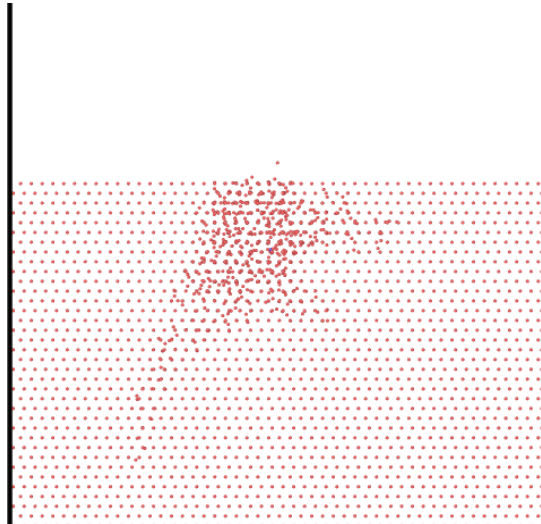


Рис.3.2 Процесс инжекции атомов Al в решетку Ti (шаг 2000) в случае 1 Al атома($E=5$ кэВ)

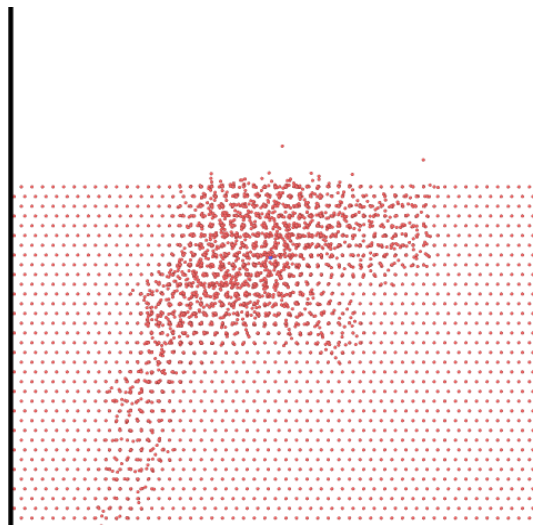


Рис. 3.3 Процесс инжекции атомов Al в решетку Ti (шаг 3500) в случае 1 Al атома($E=5$ кэВ)

Из карты траектории атома мы видим, что введение атома приносит огромные дефекты, а количество дефектов увеличивается со временем и распространяется вокруг.

Мы моделировали его несколько раз на скоростях 25 50 75 100 125 150 175 200 решетки / пс, ниже мы даем мне таблицу энергии-скорости-глубины

Таб.3.1 Зависимость глубины от энергии

Энергия Е/эВ	Глубина/ Å (0-374.659)
34.003	3.507
136.012	5.839
306.027	9.443
544.048	14.505
850.075	22.375
1224.11	29.131
1666.15	30.397
2176.19	36.262

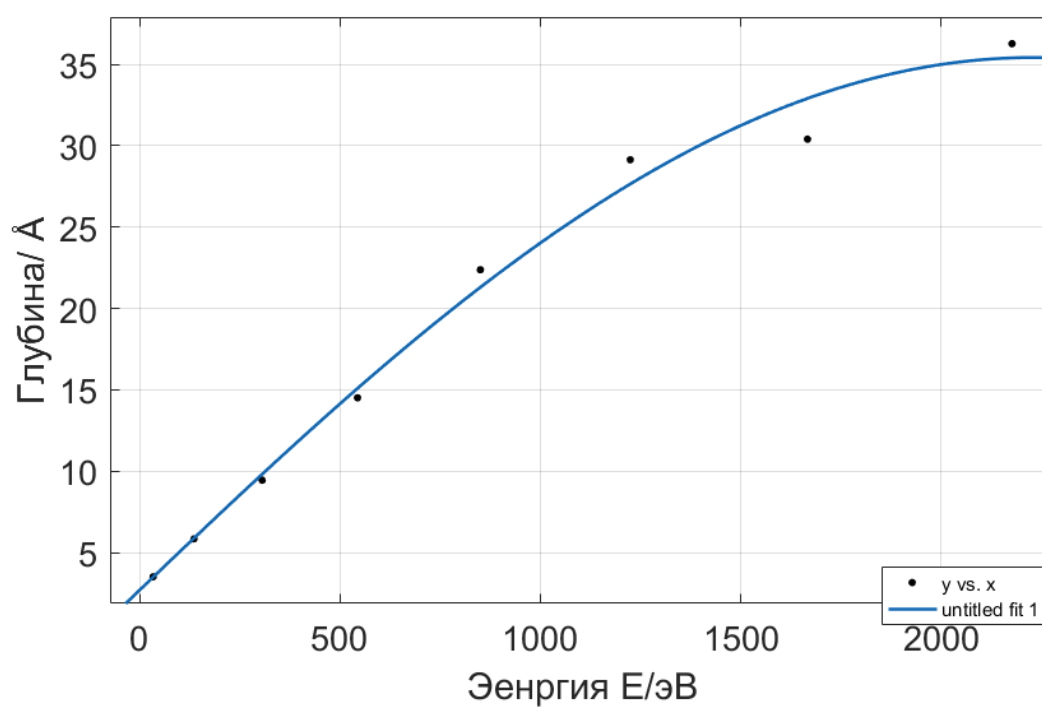


Рис.3.4 Глубина имплантации с энергией для Al-Ti

Из рисунка видно, что глубина имплантации увеличивается с увеличением энергии имплантации, мы видим, что глубина последней точки уменьшается, что может быть связано с сильной силой реакции имплантации, когда при ударе глубина имплантации уменьшается.

Таб.3.2 Число дефектовм с глубине

	Глубина/ Å (0-374.659)	Число вакансий (число междоузлий)
25	3.507	9
50	5.839	41
100	14.505	111
125	22.375	183
150	29.131	220
170	30.072	166
175	30.397	154
180	32.19	187

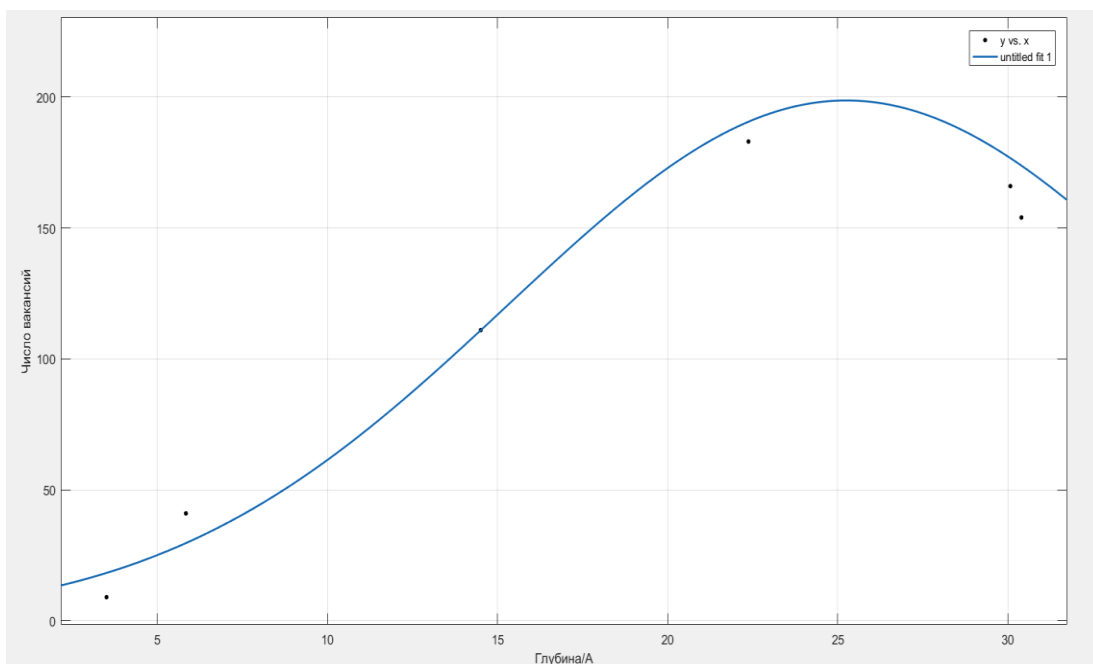


Рис.3.5 Вакансии с глубиной имплантации для Al -Ti

Далее производится моделирование имплантации 100 атомов Al.

Просто поменять команду 'create_atoms 2 random 1 123456 box3' на команду 'create_atoms 2 random 100 123456 box3'. Далее мы продолжаем давать соответствующее изображение моделирования

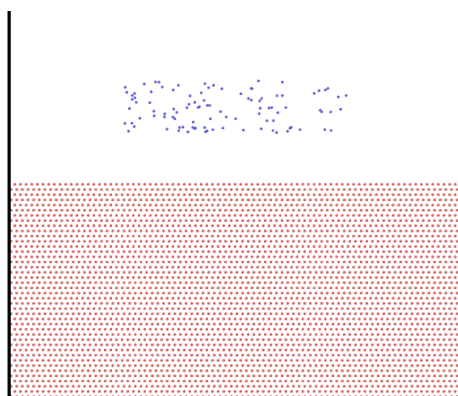


Рис.3.6 Начальная позиция атома в случае 100 Al атома

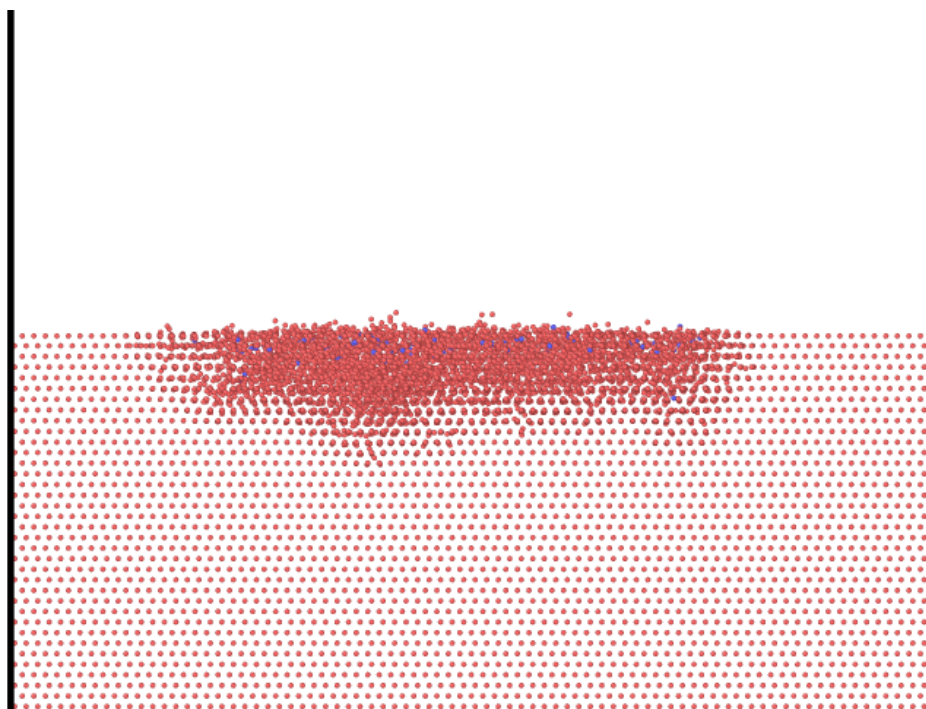


Рис.3.7 Процесс инжекции атомов Al в решетку Ti в случае 100 Al атома(500 шагов)

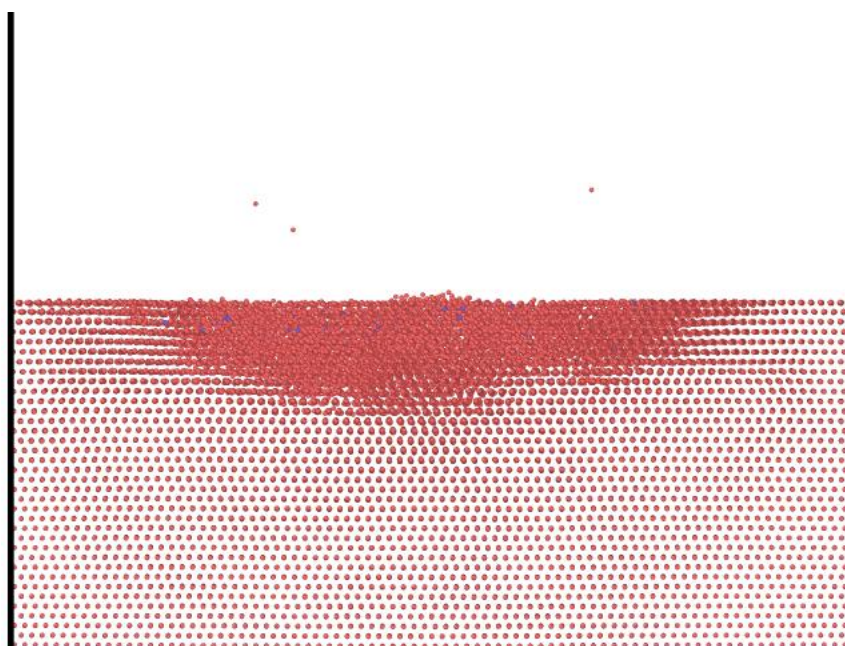


Рис.3.8 Процесс инжекции атомов Al в решетку Ti в случае 100 Al атома(2000 шагов)

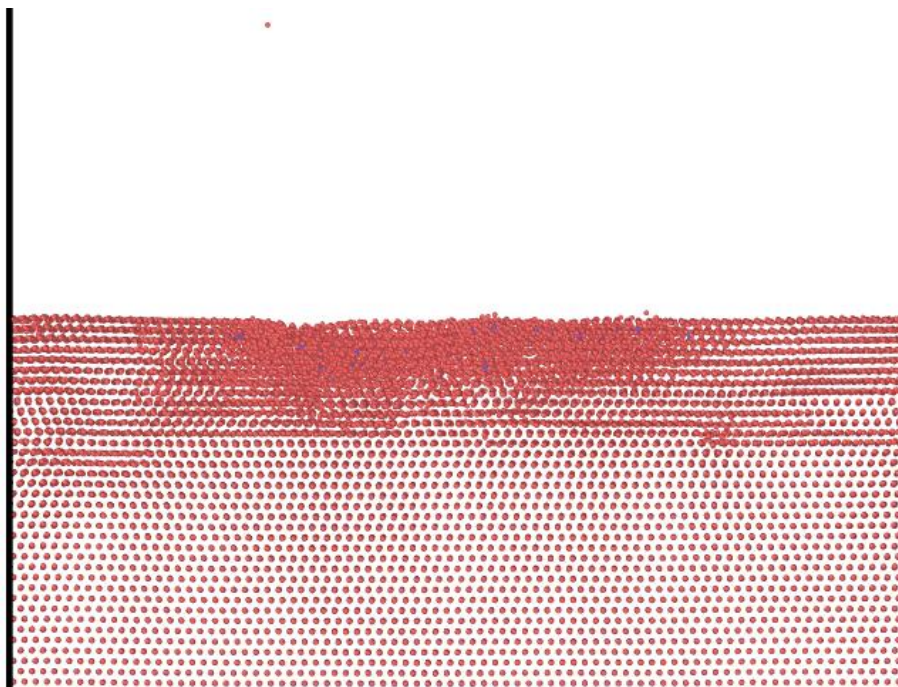


Рис.3.9 Процесс инъекции атомов Al в решетку Ti в случае 100 Al атома(10000шагов)

Из рисунка видно, что 100 атомов Al нанесли большой ущерб решеточной структуре Ti, и, таким образом, было создано много дефектов. И с течением времени повреждение атомов кристаллической решеткой увеличивается все больше и больше.

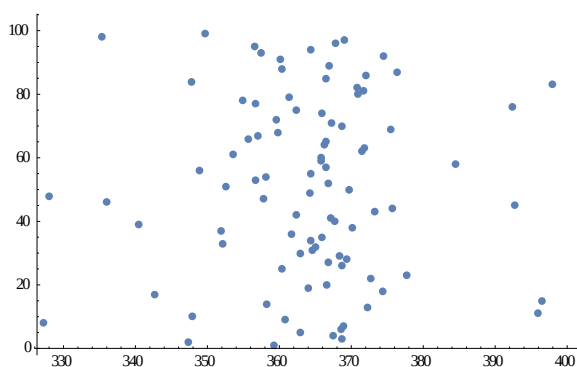


Рис.3.10 Распределение z координат по глубине Al-Ti

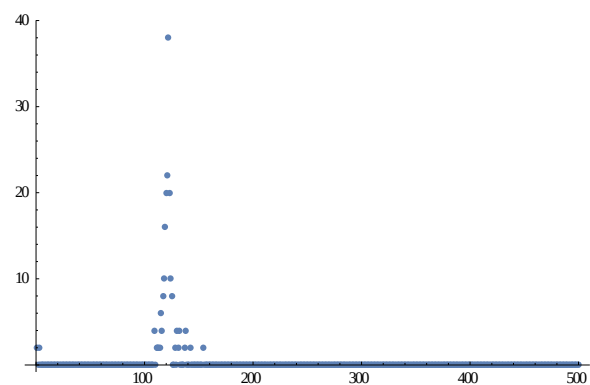


Рис.3.11 Число частицы с глубиной Al-Ti

3.2 Построение структуры Cu в Fe

Как вше мы получил

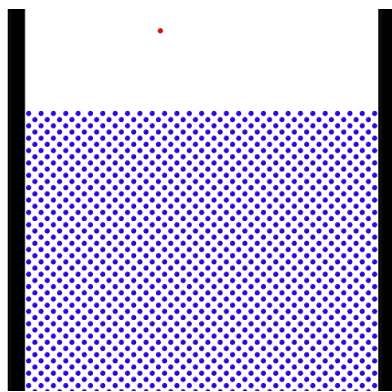


Рис.3.12 Начальная позиция атома в случае 1 Cu атома($E=1k$ эВ)

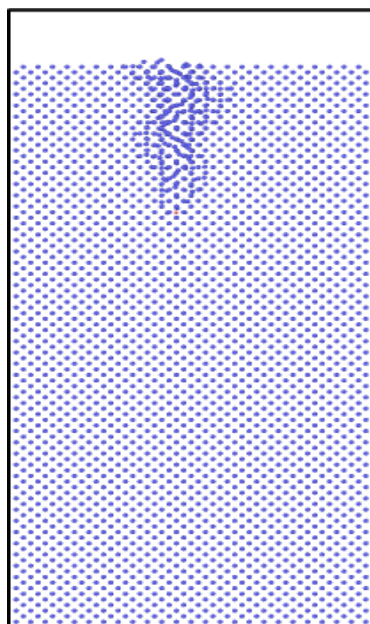


Рис.3.13 Процесс инъекции атомов Al в решетку Ti (2000 шагов) в случае 1
Cu атома ($E=1k$ эВ)

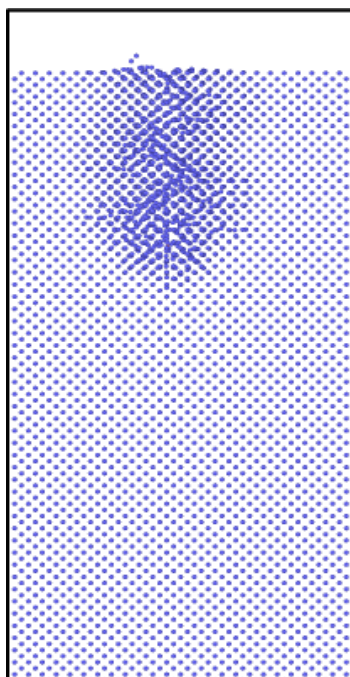


Рис.3.14 Процесс инъекции атомов Al в решетку Ti (шаг 5000) в случае 1 Cu
атома($E=1k$ эВ)

Таб .3.3 Зависимость глубины имплантации от энергии

	Энергия E/эВ	Глубина/ Å ((0-1421))
100	276	4
200	1107	36.24
250	1730.9	90.25
275	2094.39	154.67
300	2492.5	477.303
375	3392.57	560.781

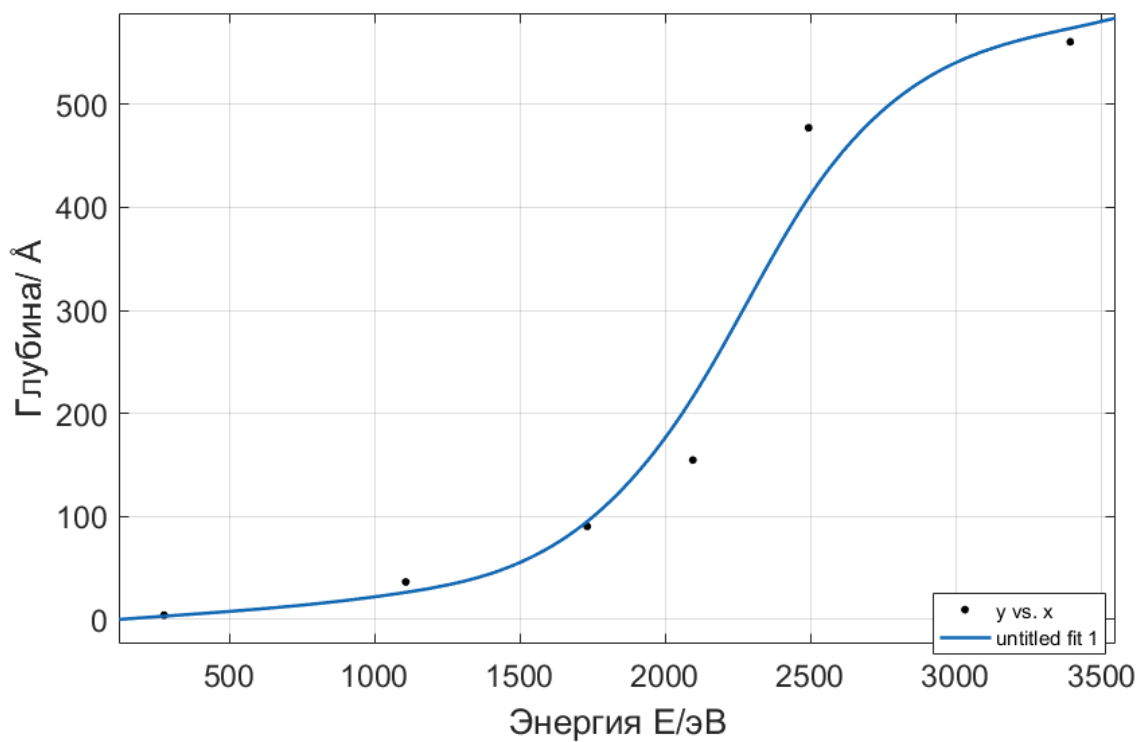


Рис3.15 Глубина имплантации с энергией для Cu-Fe

Таб.3.4 Число дефектовм с глубине для Cu-Fe

	Глубина/ Å	Число вакансий
100	4	29

200	36.24	65
250	91.86	86
275	155	91
290	192	131
295	452	74
300	477.303	77
375	575.893	36

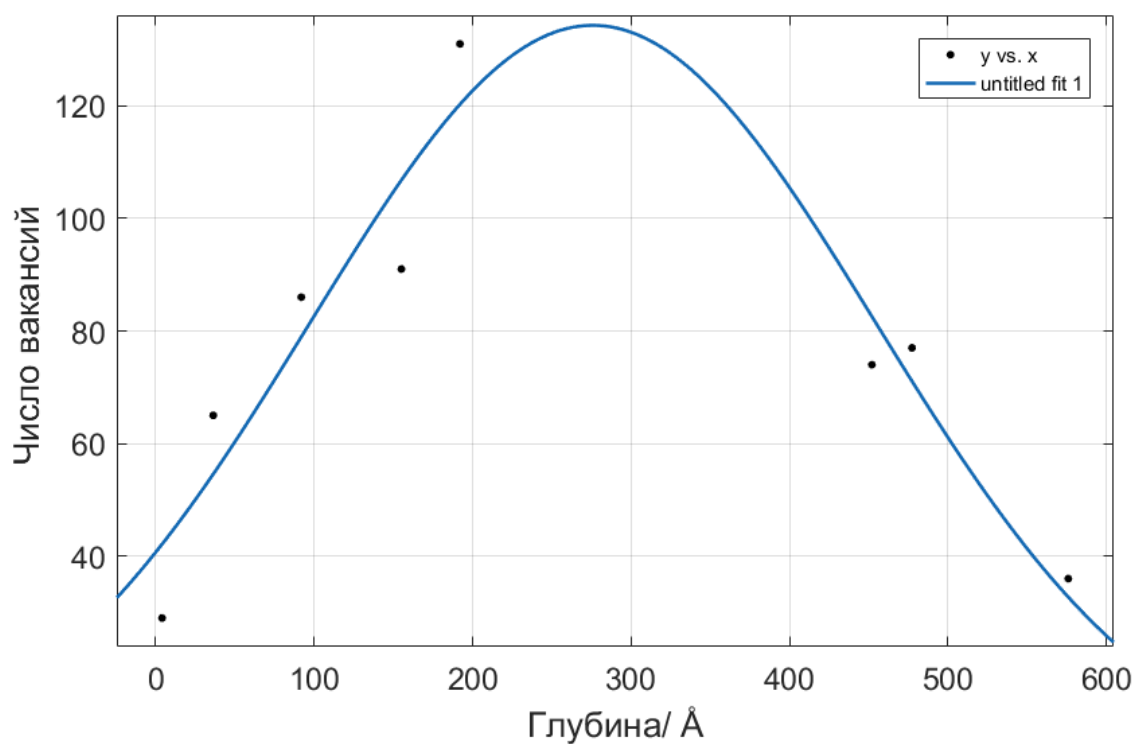


Рис.3.16 Вакансии с глубиной имплантации для Cu-Fe

Таб.3.4 Число дефектов от времени для Cu-Fe(при 1700 эВ)

шаг	Число вакансий
0	0

300	1
600	9
900	20
1200	31
1500	45
1800	55
2100	67
2400	69
2700	70
3000	74

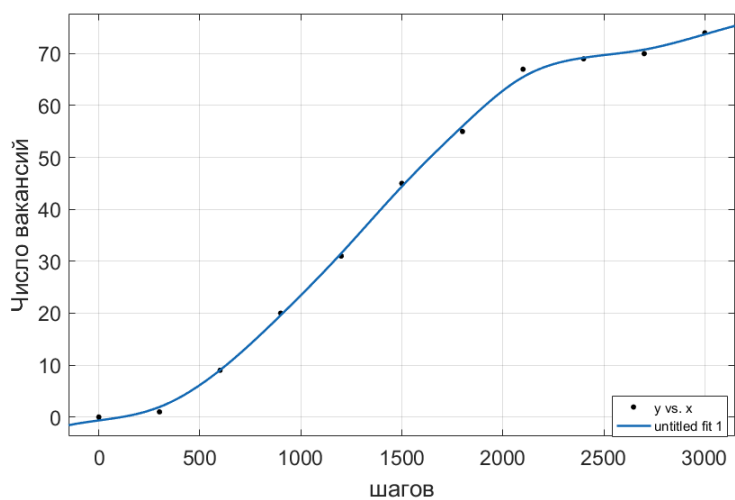


Рис.3.17 Число вакансий от времени при 1700 эВ для Cu-Fe

При 2000 Cu атомов:

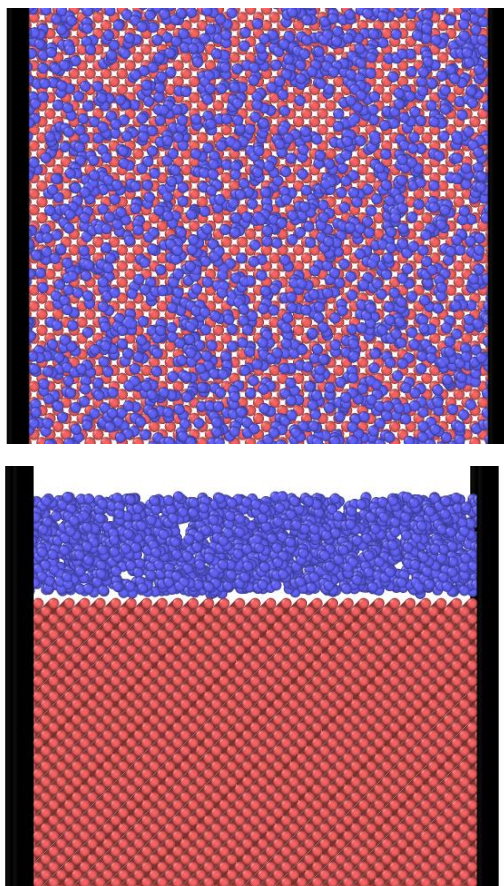


Рис.3.18 Начальная позиция атома в случае 2000 Cu атомов

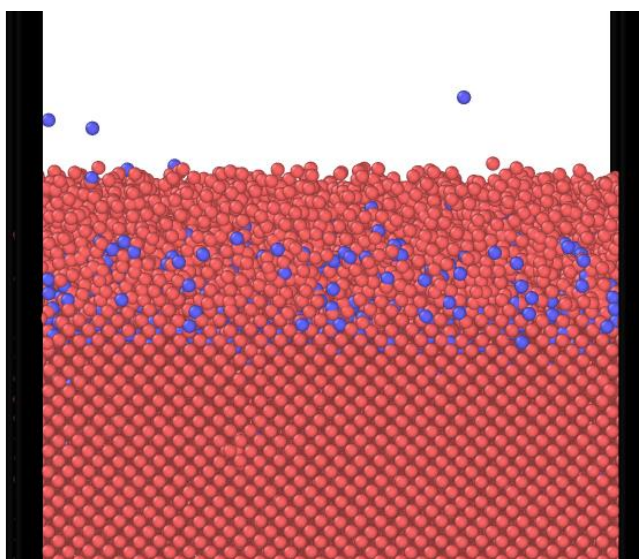


Рис.3.19 Процесс инжекции атомов Cu в решетку Fe (шаг 20) в случае 2000 Cu атомов

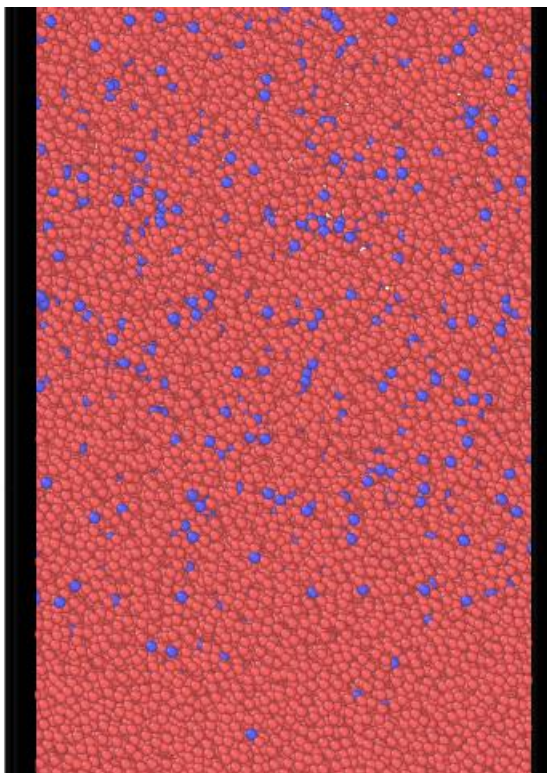


Рис.3.20 Процесс инжекции атомов Cu в решетку Fe (700 шагов) в случае 2000 Cu атомов

Результаты исследования

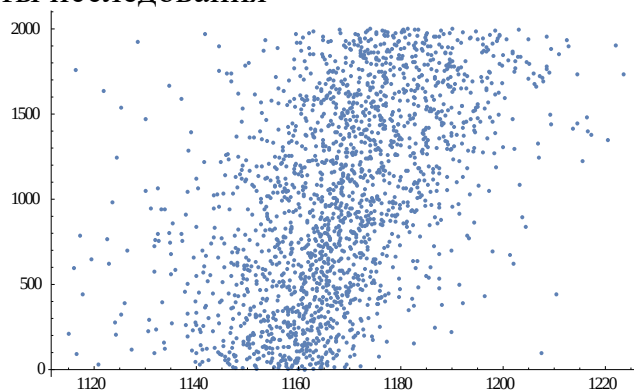


Рис 3.21 Распределение количества имплантации по глубине

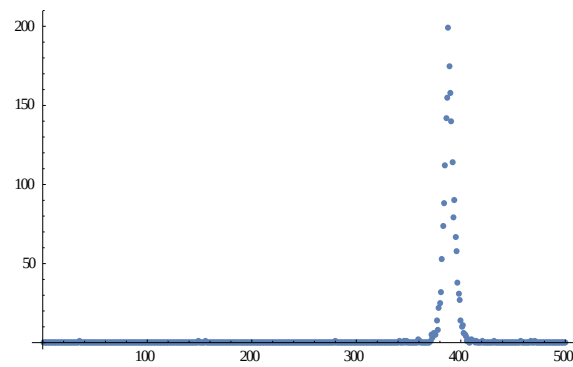


Рис 3.22 Число частицы с глубиной Cu-Fe

Сравнение результатов система Al-Ti с системой Cu-Fe

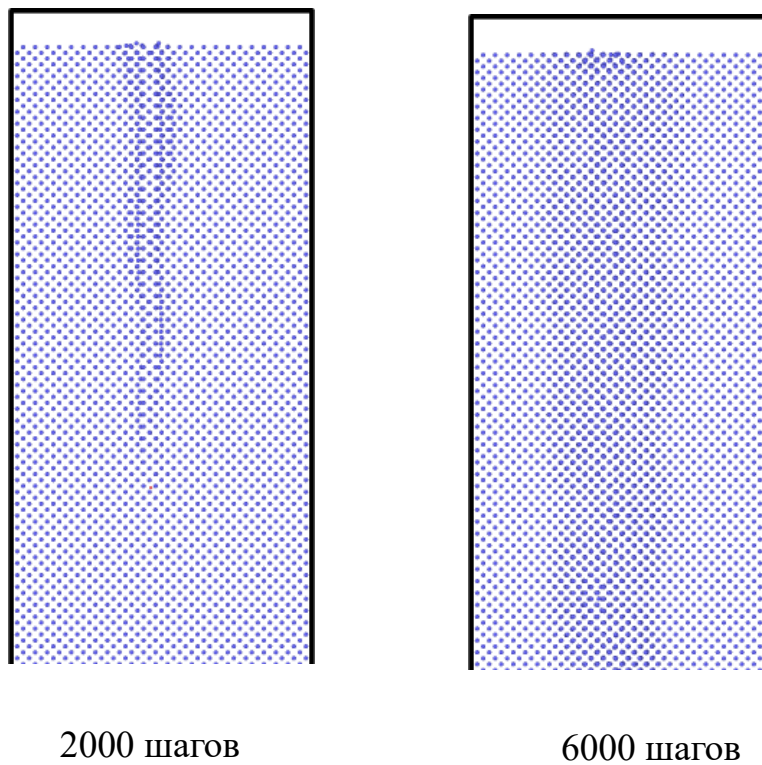
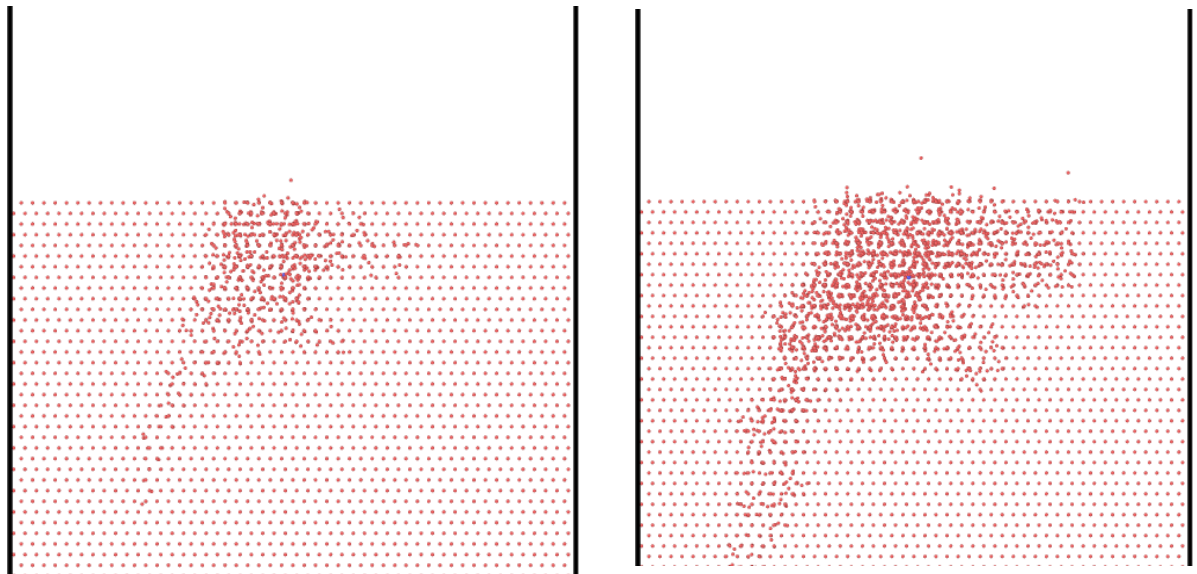


Рис.3.23 Процесс ионной имплантации для системы Cu-Fe (энергии $E=5\text{keV}$)



2000 шагов 3500 шагов
Рис.3.24 Процесс ионной имплантации для системы Al-Ti (энергии $E=5\text{keV}$)

Мы обнаружили, что в титане возникает очень много дефектов в том числе вдоль всего трека и глубина проникновения частиц очень низкая по сравнению с системой Cu-Fe

3.3 Расчет модуля упругости

Сначала мы пытаемся вычислить модуль упругости Zr

Для расчета модуля упругости Zr мы сначала выбираем данный пример, затем модифицируем его индекс решетки и структуру, а затем меняем его выбранную потенциальную энергию.

В итоге ,мы получили

Bulk Modulus = 99.2996365967024 GPa

Shear Modulus 1 = 40.3440919884104 GPa

Shear Modulus 2 = 37.9856537517177 GPa

$$\text{Poisson Ratio} = 0.330362907938514$$

реальные значения:

$$\text{Объемный модуль} = 91.1 \text{ ГПа}$$

$$\text{Модуль сдвига} = 33 \text{ ГПа}$$

$$\text{Коэффициент Пуассона} = 0,34$$

Сравнение:

$$99.2996365967024 \text{ ГПа} > 91.1 \text{ ГПа}$$

$$40.3440919884104 \text{ ГПа} > 37.9856537517177 \text{ ГПа} > 33 \text{ ГПа}$$

$$0.330362907938514 \approx 0,34$$

Сравнивая экспериментальные данные с фактическими, мы обнаружили, что модуль сдвига и модуль объема превышают фактическое значение, и коэффициент Пуассона является аналогичным.

Затем мы рассчитываем модуль упругости после имплантации для Cu-Fe

Таб.3.5 Изменение модуля упругости после ионной имплантации Cu-Fe

шаг	Модуль упругости В/ГПа
0	160.81
1000	160.60
2000	162.09
3000	164.32
4000	166.44

5000	175.79
6000	183.53
7000	193.32
8000	206.37
9000	200.76
10000	206.68

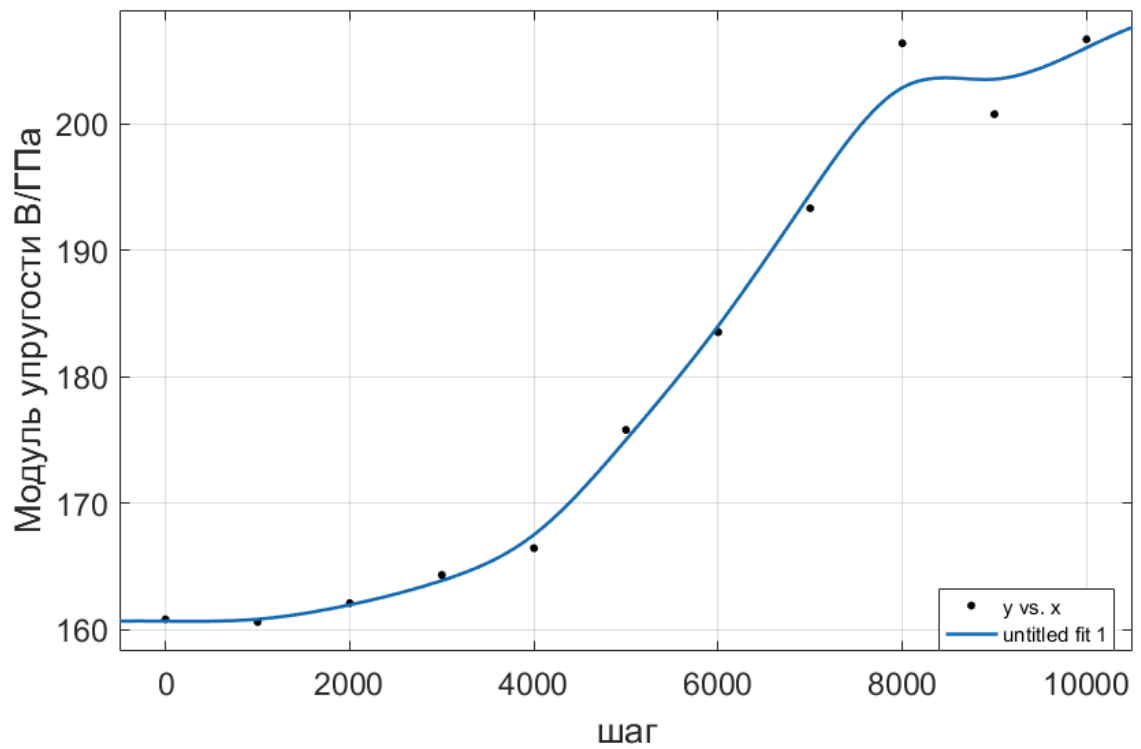


Рис3.25. Изменение модуля упругости после ионной имплантации Cu-Fe

Таб.3.6 Изменение модуля упругости после ионной имплантации
Al-Ti

шаг	Модуль упругости В/ГПа
0	122.75
1000	122.75

2000	122.75
3000	122.77
4000	122.788
5000	123.35
6000	122.795
7000	123.27
8000	126.31
9000	127.30
10000	127.89
11000	129.09
12000	131.43
13000	135.67
14000	140.40
15000	145.23
16000	147.52
17000	147.37
18000	148.62
19000	147.53
20000	148.09

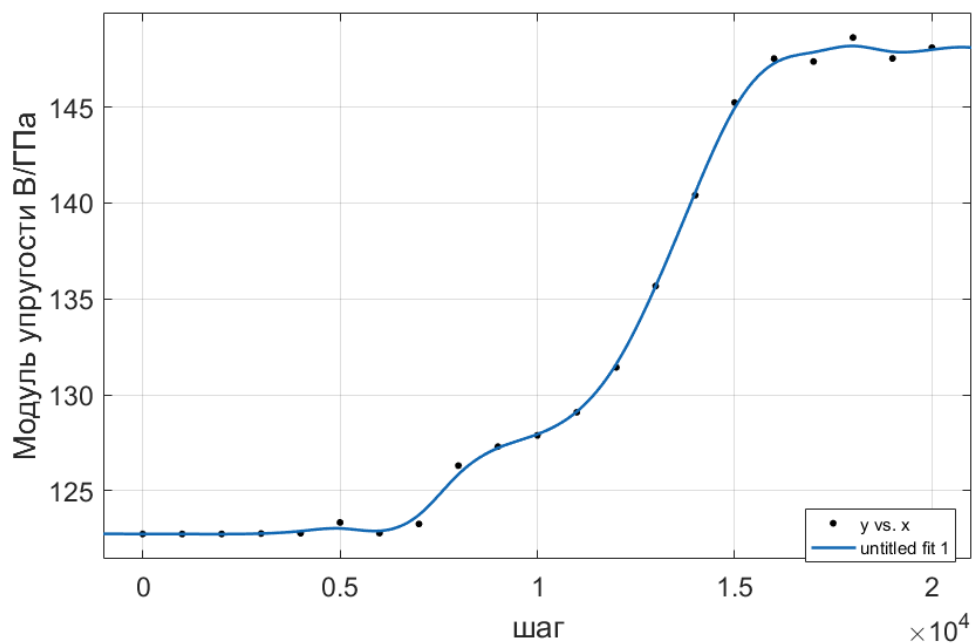


Рис3.26 Изменение модуля упругости после ионной имплантации Al-Ti

Как видно из рисунка, после имплантации модуль упругости увеличивается со временем, а увеличение модуля упругости означает, что твердость объекта увеличивается, что является основным результатом ионной имплантации для изменения свойств поверхности.

Глава 4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

4.1 Организация и планирование работ

В процессе организации реализации конкретных проектов необходимо разумно планировать ситуацию с занятостью участников и рабочее время каждого человека. В следующей таблице 4.1 перечислены люди и имена, вовлеченные в работу.

Таблица 4.1 Участники проекта

№ раб.	Исполнители	Имя
1	Научный руководитель (НР)	Чистякова Надежда Владимировна
2	Исполнитель (И)	Ли Биньчэнь

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

Таблица 4.2 Перечень работ и продолжительность их выполнения

Этапы работы	Исполнители	Загрузка исполнителей
Постановка целей и задач	НР	НР – 100%
Составление и утверждение ТЗ	НР, И	НР – 100% И – 10%
Выбор направления исследований	НР, И	НР – 30% И – 100%
Разработать экспериментальный план и график	НР, И	НР – 100% И – 10%
Обсуждение литературы	НР, И	НР – 30% И – 100%
Выбор структурной схемы устройства	НР, И	НР – 100% ИП – 70%
Выбор принципиальной схемы устройства	НР, И	НР – 100% И – 80%
Экспериментальное моделирование	И	И – 100%

Экспериментальный анализ данных	И	И – 100%
Оформление графического материала	И	И – 100%
Обсуждение экспериментальных результатов	И	И – 100%
Подведение итогов	НР, И	НР – 60% И – 100%

4.1.1 Продолжительность этапов работ

Расчет продолжительности этапов работ может осуществляться двумя методами:

- технико-экономическим;
- опытно-статистическим.

Первый применяется в случаях наличия достаточно развитой нормативной базы трудоемкости планируемых процессов, что в свою очередь обусловлено их высокой повторяемостью в устойчивой обстановке. Так как исполнитель работы зачастую не располагает соответствующими нормативами, то используется опытно-статистический метод, который реализуется двумя способами:

- аналоговый;
- экспертный.

Аналоговый способ привлекает внешней простотой и околонулевыми затратами, но возможен только при наличии в поле зрения исполнителя НИР не устаревшего аналога, т.е. проекта в целом или хотя бы его фрагмента, который по всем значимым параметрам идентичен выполняемой НИР. В большинстве случаев он может применяться только локально – для отдельных элементов (этапов работы).

Экспертный способ используется при отсутствии вышеуказанных информационных ресурсов и предполагает генерацию необходимых количественных оценок специалистами конкретной предметной области,

опирающимися на их профессиональный опыт и эрудицию. Для определения вероятных (ожидаемых) значений продолжительности работ $t_{ож}$ применяется по усмотрению исполнителя одна из двух формул.

$$t_{ож} = \frac{3 \cdot t_{\min} + 2 \cdot t_{\max}}{5} \quad (4.1-a)$$

$$t_{ож} = \frac{t_{\min} + 4t_{\text{prob}} + t_{\max}}{6} \quad (4.1-б)$$

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

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

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

Вторая формула дает более надежные оценки, но предполагает большую «нагрузку» на экспертов.

Для выполнения перечисленных в таблице 4.1 работ требуются специалисты:

- инженер – в его роли действует исполнитель НИР (ВКР);
- научный руководитель.

Для построения линейного графика необходимо рассчитать длительность этапов в рабочих днях, а затем перевести ее в календарные дни. Расчет продолжительности выполнения каждого этапа в рабочих днях ($T_{рд}$) ведется по формуле:

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

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

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

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

Расчет продолжительности этапа в календарных днях ведется по формуле:

$$T_{\text{КД}} = T_{\text{РД}} \cdot T_{\text{К}} \quad (4.3)$$

где $T_{\text{КД}}$ – продолжительность выполнения этапа в календарных днях;

$T_{\text{К}}$ – коэффициент календарности, решение по формуле:

$$T_{\text{К}} = \frac{T_{\text{КАЛ}}}{T_{\text{КАЛ}} - T_{\text{ВД}} - T_{\text{ПД}}} = \frac{365}{365 - 52 - 14} = 1,22 \quad (4.4)$$

где $T_{\text{КАЛ}}$ – календарные дни ($T_{\text{КАЛ}} = 365$);

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

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

В таблице 5.2 приведен пример определения продолжительности этапов работ и их трудоемкости по исполнителям, занятым на каждом этапе. В столбцах (3–5) реализован экспертный способ по формуле (4.1-а), при использовании формулы (4.1-б) необходимо вставить в таблицу дополнительный столбец для t_{prob} . Столбцы 6 и 7 содержат величины трудоемкости этапа для каждого из двух участников проекта (научный руководитель и инженер) с учетом коэффициента $K_{\text{д}} = 1,2$. Каждое из них в отдельности не может превышать соответствующее значение $t_{\text{ож}} * K_{\text{д}}$. Столбцы 8 и 9 содержат те же трудоемкости, выраженные в календарных днях путем дополнительного умножения на $T_{\text{К}}$ (здесь оно равно 1,212). Итог по столбцу 5 дает общую ожидаемую продолжительность работы над проектом в рабочих днях, итоги по столбцам 8 и 9 – общие трудоемкости для каждого из участников проекта. Две последних величины далее будут

использованы для определения затрат на оплату труда участников и прочие затраты. Величины трудоемкости этапов по исполнителям $T_{\text{КД}}$ (данные столбцов 8 и 9 кроме итогов) позволяют построить линейный график осуществления проекта – см. пример в табл. 4.3.

Таблицы 4.3 Трудозатраты на выполнение проекта

Этап	Исполнители	Продолжительность работ, дни			Трудоемкость работ по исполнителям чел.- дн.			
					$T_{РД}$		$T_{КД}$	
		t_{min}	t_{max}	$t_{ож}$	НР	И	НР	И
1	2	3	4	5	6	7	8	9
Постановка целей и задач	НР	2	4	2.5	2.29	0	2.80	0
Составление и утверждение ТЗ	НР	2	3	2.6	2.38	0.24	2.91	0.29
Выбор направления исследований	НР, И	7	12	9.2	2.53	8.43	10.29	3.09
Разработать экспериментальный план и график	НР, И	2	5	2.6	2.38	0.24	2.91	0.29
Обсуждение литературы	НР, И	5	15	10.2	2.81	9.35	3.42	11.41
Выбор структурной схемы устройства	НР, И	1	5	3.6	3.30	2.31	4.03	2.82
Выбор принципиальной схемы устройства	НР, И	7	9	7.5	6.88	5.50	8.39	6.71
Экспериментальное моделирование	НР,И	30	45	38	0	34.83	0	42.50
Экспериментальный анализ данных	НР, И	10	15	14	0	12.83	0	15.66
Оформление графического материала	НР, И	5	10	7	0	6.42	0	7.83
Обсуждение экспериментальных результатов	НР, И	15	20	17	0	15.58	0	19.01
Подведение итогов	НР, И	5	10	6.5	3.35	5.96	4.36	7.27
Итого:				120.7	25.92	101.69	39.11	116.88

Таблица 4.4 – Календарный план-график

Этап	НР	И	Март			Апрель			Май			Июнь		
			10	20	30	40	50	60	70	80	90	100	110	120
1	3.8 02	-												
2	2.6 84	-												
3	2.7 51	9.1 70												
4	3.1 31	0.3 13												
5	1.4 1	4.6 97												
6	10. 96	5.4 79												
7	7.1 57	5.7 25												
8	40. 08	32. 06												
9	3.8 02	15. 21												

10	2.4 15	4.8 31												
11	13. 42	10. 73												
12	3.2 21	5.3 68												

HP – ; CD – 

4.2 Расчет сметы затрат на выполнение проекта

Стоимость создания проекта включает в себя все затраты, необходимые для реализации каждой из задач, которые составляют эту разработку. Расчет сметной стоимости ее выполнения производится по следующим статьям затрат:

материалы и покупные изделия;

-заработная плата;социальный налог;

-расходы на электроэнергию(без освещения);

-амортизационные отчисления;

-командировочные расходы;

оплата услуг связи.

4.2.1 Расчет затрат на материалы

В процессе планирования бюджета научного исследования должно обеспечивать полное и достоверное отражение всех видов планируемых расходов, которые необходимы для выполнения проекта. В настоящей разработке планируемые расходы включают в себе затраты на спецоборудование и электроэнергию; основную и дополнительную заработную плату исполнителей работы; отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления).

Расчет затрат на спецоборудование для научных работ.При расчете бюджета были учтены затраты, связанные с приобретением специального оборудования необходимого для проведения работ по теме проекта.

Таблица4.5- Расчет затрат по статье «Спецоборудование для научных работ»

Наименование оборудования	Количество единиц оборудования	Цена единицы оборудования, тыс.руб.	Общая стоимость оборудования, тыс.руб.
Персональный компьютер	2	32	64

4.2.2 Затраты на амортизацию оборудования

Средства на приобретение компьютера не затрачивались, т.к. он уже был в наличии. Необходимо рассчитать амортизационные отчисления для данного оборудования

Так как, срок полезного использования персонального компьютера составляет 5

лет, поэтому норма амортизации равна:

$$H_a = \frac{1}{n} \times 100 = \frac{1}{2.5} \times 100 = 40\%$$

где H_a – норма амортизации в процентах; n – срок полезного использования в годах.

Первоначальная стоимость оборудования - 64 000 руб. Следовательно, годовая сумма амортизации составит:

$$A_{\Gamma} = \frac{F_{\Pi} \times H_a}{100} = \frac{64000 \times 40}{100} = 25600 \text{ (руб.)}$$

где F_{Π} – первоначальная стоимость.

Сумма ежемесячных амортизационных отчислений составит :

$$A_m = A_{\Gamma 12} = \frac{25600}{12} = 2133 \text{ (руб.)}$$

С учетом календарного план-графика проекта (таблица) было принято, что на работы по проекту с использованием компьютера было затрачено 4 месяца. За все время разработки сумма амортизации равна:

$$C_{am} = A_m \times 4 = 8532 \text{ (руб.)}$$

4.2.3 Расчет затрат на электроэнергию

При расчете затрат на электроэнергию были приняты следующие допущения: с учетом календарного план-графика проекта, было принято, что на работу было затрачено 120.7 дня (вычтены 25 выходных). Средняя мощность компьютера составляет около 300 Вт/час. Длительность работы с компьютером средней мощности – 5 часов/день. Для выполнения дипломной работы время использования компьютеров составляет часов. Стоимость электроэнергии в Томске равна 5,748 руб. за 1 кВт/час. Следовательно, потребление электроэнергии компьютером в течение работы составляет:

$$300 \frac{\text{Вт}}{\text{час}} \times 478.5 \text{ час} = 143.55 \text{ (кВт)}$$

Таким образом, затрат на электроэнергию был:

$$143.55 \times 5,748 = 825.13 \text{ (руб.)}$$

4.2.4 Расчет заработной платы

Среднедневная тарифная заработная плата рассчитывается по следующей формуле:

$$З_{\text{дн}} = \frac{О_{\text{мес}}}{Д_{\text{мес}}} \quad (4.5)$$

где $З_{\text{дн}}$ – среднедневная тарифная заработная плата;

$О_{\text{мес}}$ – месячный оклад;

$Д_{\text{мес}}$ – среднемесячные рабочие дни;

Считаем, что рабочие дни в год $Д_{\text{год}} = 365 - 52 - 10 = 303$ дн. Тогда среднемесячные рабочие дни составляет $Д_{\text{мес}} = Д_{\text{год}}/12 = 25.25$ дн.

Для учёта в составе премий, дополнительной зарплаты и районной надбавки используется следующий ряд коэффициентов – $К_{\text{пр}} = 1.1$; $К_{\text{доп}} = 1.188$; $К_{\text{р}} = 1.3$. Таким образом, для перехода от тарифной (базовой) суммы заработка исполнителя, связанной с участием в проекте, к соответствующему полному заработку (зарплатной части сметы) необходимо первую умножить на интегральный коэффициент $К_{\text{и}} = 1,1 * 1,188 * 1,3 = 1,699$

Таблицы 4.5 Перечень заработных плат

Исполнитель	Оклад, руб./мес.	Среднедневная ставка, руб./раб.день	Затраты времени, раб.дни	Коэффициент	Фонд з/платы, руб.
НР	33 664	1122.1	39.11	1,699	74561.18
И	15 470	515.7	116.88	1,62	97645.53
Итого:					172206.71

4.2.5 Расчет затрат на социальный налог

Затраты на единый социальный налог (ЕСН), включающий в себя отчисления в пенсионный фонд, на социальное и медицинское страхование, составляют 30 % от полной заработной платы по проекту.

$$С_{\text{соц.}} = С_{\text{зп}} * 0,3 = 172206.71 * 0,3 = 51662.013 \text{ руб.}$$

4.2.6 Расчет прочих расходов

$$С_{\text{проч.}} = (С_{\text{мат}} + С_{\text{зп}} + С_{\text{соц}} + С_{\text{эл.об.}} + С_{\text{ам}}) * 0,1 = 29342.47 \text{ руб}$$

4.2.7 Стоимость всего проекта

Консолидировать и суммировать расходы по вышеуказанным разделам. Все

затраты на этот эксперимент представлены в таблице 4.8 ниже.

Таблицы 4.8 Смета затрат на разработку проекта

Статья затрат	Условное обозначение	Сумма, руб.
Затраты на электроэнергию	$C_{\text{эл.об}}$	825.13
Затраты на амортизацию оборудования	$C_{\text{ам}}$	8532
Заработные платы	$C_{\text{зп}}$	172206.71
Затраты на социальный налог	$C_{\text{соц}}$	51662.013
Прочие затраты	$C_{\text{пз}}$	29342.47
Итого:		253211.2

Расчёт прибыли:

$253211.2 \cdot 0.2 = 50642.24$ руб.

Расчёт НДС:

$(253211.2 + 50642.24) \cdot 0.2 = 60770.688$ руб.

Цена разработки НИР:

$253211.2 + 50642.24 + 60770.688 = 304461.146$ руб.

4.2.8 Оценка экономической эффективности проекта

В экспериментальном процессе изучаются только изменения структуры и механических свойств материала при ионной имплантации. Этот эксперимент не имеет непосредственного промышленного значения. Следовательно, оценка их экономической эффективности невозможна.

ГЛОВА 5.СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ

5.1. Характеристика объекта исследования и области его применения

Алюминий - металл, сферы потребления которого постоянно расширяются. В ряде областей промышленности он успешно вытесняет традиционно применяемые металлы и сплавы. Бурное развитие потребления алюминия обусловлено замечательными его свойствами, среди которых в первую очередь следует назвать высокую прочность в сочетании с малой плотностью, удовлетворительную коррозионную стойкость, хорошую способность к формоизменению путем литья, давления и резания; возможность соединения алюминиевых деталей в различных конструкциях с помощью сварки, пайки, склеивания и других способов; способность к нанесению защитных и декоративных покрытий. В наши дни трудно найти отрасль промышленности, где бы ни использовался алюминий или его сплавы - от микроэлектроники до тяжёлой металлургии. Это обуславливается хорошими механическими качествами, лёгкостью, малой температурой плавления, что облегчает обработку, высоким внешними качествами, особенно после специальной обработки. Учитывая перечисленные и многие другие физические и химические свойства алюминия, его неисчерпаемое количество в земной коре, можно сказать, что алюминий - один из самых перспективных материалов будущего.

Титан является химическим элементом, химический символ Ti, атомный номер 22, представляет собой серебристо-белый переходный металл, характеризующийся легким весом, высокой прочностью, металлическим блеском и хорошей коррозионной стойкостью. Титан может быть сплавлен с другими элементами, такими как железо, алюминий, ванадий или молибден, для создания высокопрочных легких сплавов, которые используются в широком диапазоне применений, включая космическую навигацию (реактивные двигатели, ракеты и космические корабли), военные, промышленные процессы. (химические и нефтепродукты, опреснение и изготовление бумаги), автомобилестроение, агропродовольство, медицина (протезы, ортопедические и

стоматологические инструменты и наполнители), спортивные товары, ювелирные изделия и мобильные телефоны и т. д.

5.2. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности.

В этом разделе мы в основном объясняем правила, которые мы должны соблюдать в законе. Эти законы будут в значительной степени защищать нашу личную безопасность и законные права. Это обеспечивает нам защиту от важного аспекта, поэтому мы на работе. Ознакомьтесь с этими законами, чтобы наша работа была лучше. Например, присутствие людей в рабочей зоне разрешается в течение 8 часов. При выявлении неисправностей, не допускается проводить ремонт самостоятельно, необходимо доложить руководителю лаборатории. Работа с суперкомпьютером должна производиться в чистом помещении, свободном от пыли, паров, кислот и щелочей, агрессивных газов и других вредных примесей, вызывающих коррозию. Недопустимо наличие открытого огня около прибора. Эти важны для нас.

5.2.1. Специальные (характерные для проектируемой рабочей зоны)
правовые нормы трудового законодательства.

(1) инструкция № 2-08 по охране труда при работе с ПЭВМ и ВДТ

(2). СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03. Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организация работы

(3). ГОСТ Р 50948-01. Средства отображения информации индивидуального пользования. Общие эргономические требования и требования безопасности;

(4). ГОСТ Р 50949-01. Средства отображения информации индивидуального пользования. Методы измерений и оценки эргономических параметров и параметров безопасности;

(5). СанПиН 2.2.4.1191—03. Электромагнитные поля в производственных условиях

(6). ГОСТ 54 30013-83 Электромагнитные излучения СВЧ. Предельно

допустимые уровни облучения. Требования безопасности

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

(8). СНиП 23-05-95 "Естественное и искусственное освещение

(9). ГОСТ Р 12.1.019-2009. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты.

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

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

(12). ГОСТ 12.1.004-91. Пожарная безопасность. Общие требования.

5.2.2. Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.

организационные и технические мероприятия--только при их эксплуатации.

Выбор технических способов и СЗ для обеспечения электробезопасности зависит от вида опасности:

- от опасного и вредного действия электротока и электрической дуги;
- от электромагнитного поля
- от статического электричества
- от разрядов и воздействия атмосферного электричества.

Электрические установки, к которым относится все оборудование ПЭВМ, представляют для человека потенциальную опасность. Воздействие тока может привести к электрической травме, то есть повреждению организма электрическим током или электрической дугой.

Также обосновываются организационные мероприятия, обеспечивающие безопасную эксплуатацию компьютера: присутствие людей в рабочей зоне разрешается в течение 8 часов. Для обеспечения безопасности перед началом

работы необходимо правильно надеть спецодежду, подготовить для работы необходимый инструмент и приспособления, приготовить рабочий стол. Также необходимо проверить отсутствие внешних повреждений электрооборудования, наличие и исправность контрольных, измерительных и сигнальных приборов, компьютера, тумблеров, переключателей и т.п. При выявлении неисправностей, не допускается проводить ремонт самостоятельно, необходимо доложить руководителю лаборатории. Наладка прибора и его ремонт осуществляется только сервис-инженерами.

Запрещается приступать к работе, если выявлены неисправности любого используемого оборудования, если персонал не прошел в установленном порядке обучение и проверку знаний безопасности труда.

Работа с суперкомпьютером должна производиться в чистом помещении, свободном от пыли, паров, кислот и щелочей, агрессивных газов и других вредных примесей, вызывающих коррозию. Недопустимо наличие открытого огня около прибора.

5.3. Профессиональная социальная безопасность.

5.3.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов

Работа компьютера осуществляется за счет питания от сети переменного тока напряжением 220 В. При выполнении работ на компьютере возможно воздействие следующих вредных факторов:

- Микроклимат;
- Электромагнитные поля
- Статическое электричество
- Шум
- Недостаточное освещение

Также возможно воздействие таких опасных производственных факторов как:

- Электрическое напряжение;
- Воздействие высокой температуры;

(1) Микроклимат

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

Основными факторами, характеризующими микроклимат производственной среды, являются: температура, подвижность и влажность воздуха.

Эти параметры являются ориентировочными, если разница в течение Генеральной Ассамблеи вызывают личный дискомфорт, серьезные и даже привести к шоку, например, работа в условиях высокой температуры сопровождается интенсивным потоотделением, что приводит к обезвоживанию организма, потере минеральных солей и водорастворимых витаминов, вызывая серьезные и стойкие изменения в деятельности сердечно-сосудистой системы, увеличивая частоту дыхания, а также оказывая влияние на функционирование других органов и систем (ослабление внимания, ухудшение координации движений, замедление реакции тела и т.д.).

Таким образом, мы должны работать в соответствии с климатическими условиями региона, принять необходимые меры, то есть необходимо проведение мероприятий по контролю способов и средств защиты от высоких и низких температур, системы отопления, вентиляции и кондиционированию воздуха, искусственное освещение и т.п.

Мы можем настроить в соответствии с таблицей 5.1 ниже

Таблица 5.1 – Оптимальные показатели микроклимата на рабочих местах производственных помещений (СанПиН 2.2.4.548-96)

Период года	Категория работ по уровню энергозатрат, Вт	Температура воздуха, °С	Температура поверхности, °С	Относительная влажность воздуха, %	Скорость движения воздуха, м/с
Холодный	Ia (до 139)	22-24	21-25	60-40	0,1
Теплый	Ia (до 139)	23-25	22-26	60-40	0,1

(2) Электромагнитные поля

Дипломная работа выполнялась с применением персональных компьютеров (ПЭВМ) типа IBM PC. Основным вредным фактором, воздействию которого подвергается инженер-исследователь при работе за компьютером, является электромагнитное излучение. Безопасные уровни излучений регламентируются нормами СанПиН 2.2.2/2.4.1340–03 и представлены в таблице 5.2.

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

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

Вредное воздействие ПЭВМ на организм человека проявляется в нагрузке на зрение, заболевании кожи лица, нервных и психических заболеваниях и т.д..

Допустимая напряжённость электрического поля: 25 В/м (5Гц-2кГц) и 2,5 В/м (2-400 кГц). Для защиты от электромагнитных полей используются различные фильтры. Ориентация светопроёмов должна быть северо-восточной или северной. Источники искусственного освещения: люминесцентные лампы типа ЛБ и ДРЛ. Оптимальные параметры микроклимата. При работе с ПЭВМ уровень звука не должен превышать значений, установленных для данных видов работ. Кроме этого, для ослабления влияния рассеянного рентгеновского излучения от монитора ПК рекомендуется использовать защитные фильтры (экраны).

(3) Шум

Воздействие шума связано с несколькими негативными последствиями для здоровья. В зависимости от продолжительности и уровня воздействия шум может вызвать или увеличить вероятность потери слуха, высокого кровяного давления, ишемической болезни сердца, нарушений сна, травм и даже снижения школьной успеваемости. Существует также причинно-следственная связь между шумом и психологическими эффектами, такими как раздражение, психические расстройства и последствия для психосоциального благополучия.

Таблица 5.3 – Допустимые уровни звукового давления

Уровни звукового давления, дБ, в октавных полосах со среднегеометрическими частотами	Полоса частот, Гц	31.5	63	125	250	500	1000	2000	4000	8000
	Уровни звука, дБ	86	71	61	54	49	45	42	40	38
уровни звука и эквивалентные уровни звука (дБА)	50									

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

Поскольку в компьютере только один компьютер, шум обычно не превышает 50 дБ, поэтому мы не принимаем никаких мер для предотвращения воздействия шума на нас. Это может иметь большое влияние на нас только при одновременном запуске нескольких компьютеров. В этом случае мы можем избежать повреждения только с помощью следующих мер, таких как противошумные наушники, беруши, антифоны.

(4) Недостаточное освещение

Рациональное освещение рабочего места позволяет предупредить травматизм и многие профессиональные заболевания. Правильно организованное освещение создает благоприятные условия труда, повышает работоспособность и увеличивает производительность труда. Освещение на рабочем месте должно быть таким, чтобы человек мог без напряжения выполнять свою работу. Существуют три вида освещения: естественное, искусственное, совмещенное.

К системам производственного освещения предъявляются следующие требования:

- соответствие уровня освещенности характеру выполняемой работы;
- достаточно равномерное распределение яркости на рабочих поверхностях и в окружающем пространстве;
- оптимальная направленность излучаемого световыми приборами светового потока;
- долговечность, экономичность, электро- и пожаробезопасность, эстетичность, удобство и простота эксплуатации.

В соответствии с СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03, искусственное освещение в помещениях осуществляется системой общего равномерного освещения.

В производственных и административно-общественных помещениях, в случаях преимущественной работы с документами, разрешено применение системы комбинированного освещения (к общему освещению дополнительно

устанавливаются светильники местного освещения, предназначенные для освещения зоны расположения документов).

Зрительная работа программиста характеризуется как работа очень высокой степени точности. Что требует освещенности в 300—500 лк. Допускается установка светильников местного освещения для подсветки документов, но с таким условием, чтобы оно не создавало бликов на поверхности экрана и не увеличивало освещенность экрана более чем на 300 лк. Светильники местного освещения должны иметь не просвечивающий отражатель с защитным углом не менее 40 градусов.

В качестве источников света при искусственном освещении должны применяться преимущественно люминесцентные лампы типа ЛБ. Освещение следует выполнять в виде сплошных или прерывистых линий светильников, расположенных сбоку от рабочих мест, параллельно линии зрения пользователя при рядном расположении персональных электронно-вычислительных машин (ПЭВМ). При расположении компьютеров по периметру помещения линии светильников должны располагаться локализовано над рабочим столом, ближе к его переднему краю, обращенному к оператору.

Согласно СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03, естественное освещение осуществляется посредством проемов, ориентированных преимущественно на север и северо-восток и обеспечивающих коэффициент естественной освещенности (КЕО) не менее 1,5 %.

Для обеспечения нормируемых значений освещенности в помещениях использования ЭВМ следует проводить чистку светильников не реже двух раз в год и проводить своевременную замену перегоревших ламп на аналогичные.

5.3.2 Обоснование мероприятий по снижению воздействия

Наиболее важной целью реализации защитных мер является защита безопасности работников с целью снижения вероятности возникновения опасностей, и такие меры могут повысить эффективность работы, а

эффективность работы будет значительно улучшена в комфортных условиях. Таким образом, мы можем достичь лучших результатов работы.

5.4 Экологическая безопасность.

Лабораторная работа всегда связана с постоянным образованием различных отходов: отходы инструмента, технологической оснастки, абразивных материалов, отходы бумаги и т.д.

При работе с суперкомпьютером возможно образование отходов: бумага. Бумагу используют для записи результатов экспериментов. Эти отходы могут вызвать загрязнение литосферы. Для охраны поверхностных и подземных вод от загрязнения и истощения, можно использовать бумагу повторно.

5.5 Безопасность в чрезвычайных ситуациях.

При обнаружении неисправной работы суперкомпьютера необходимо прекратить работу, выйти из программы, отключить питание компьютера, отключить насос, суперкомпьютеру от электросети и известить об этом руководителя.

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

Чтобы избежать опасности пожара и взрыва, можно принять следующие мероприятия:

- 1) планирование защиты населения и территорий от пожара и взрыва на уровне предприятия;
- 2) эвакуация работающих;
- 3) создание запасов средств индивидуальной защиты и поддержание их в готовности;
- 4) проектирование, размещение, строительство и эксплуатация объектов инфраструктуры, в том числе и потенциально опасных;
- 5) инженерное обеспечение защиты населения – строительство защитных

сооружений (средств коллективной защиты).

В лаборатории обязательно показан план эвакуации: Заранее разработанный план (схема), в котором указаны пути эвакуации, эвакуационные и аварийные выходы, установлены правила поведения людей, порядок и последовательность действий в условиях чрезвычайной ситуации.

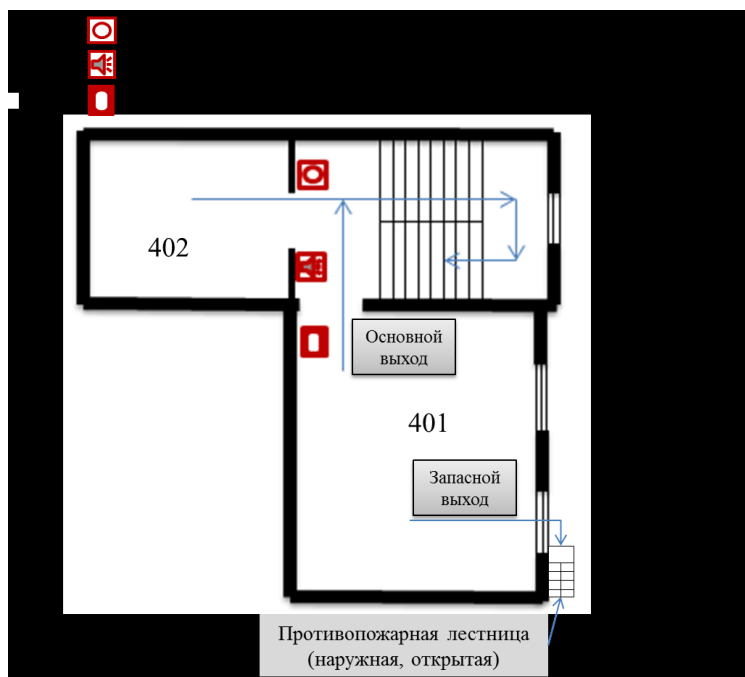


Рис.5.1. План эвакуации из лабораторий.

5.6 Вывод

После оценки опасностей всей работы ясно видно, что преимущества симуляционного эксперимента не могут тратить материал, и загрязнение практически не возникает по сравнению с традиционным экспериментом. Мы можем даже проводить симуляционные эксперименты дома, только Необходим компьютер, и он требует меньше времени, поэтому современные эксперименты по моделированию используются в широком спектре приложений с минимальным количеством материалов.

Заключение

В этой работе можно сделать следующие выводы:

Глубина проникновения частиц увеличивается с ростом энергии частицы. Большинство дефектов локализованы в области точки остановки частицы. Частицы распределены по глубине согласно распределению Гаусса. Для системы медь – железо, если энергия частицы высокая, на значительной области вдоль трека дефектов нет. Однако в системе алюминий – титан, атомы алюминия неглубоко проникают в титан и образуют большое число дефектов вдоль трека. Модуль упругости материала увеличивается после ионной имплантации. Вероятно это связано с увеличением числа дефектов в структуре.

Список литературы.

1. Bing Wang Bin Gu Hongbin Zhang Xiqiao Feng, Molecular Dynamics Simulation on Hydrogen Ion Implantation Process in Smart-Cut Technology, *Acta Mechanica Solida Sinica*, Vol. 29, No. 2, April, 2016, ISSN 0894-9166
2. Сундукова О.А., Белова И.М. Методика проведения компьютерного моделирования процесса ионной имплантации методом молекулярной динамики с помощью пакета программ для классической молекулярной динамики LAMMPS, *электронный научный журнал*, 2017. №3 (32)
3. Дроздов А Ю. Моделирование динамики развития нанодефектов в металлах при ионной имплантации и деформации[D]. , 2007.
4. Белоус В А, Носов Г И, Хороших В М, et al. Изменение твердости и модуля упругости поверхности сплава Э110 после облучения ионами металлов[J]. *Физическая инженерия поверхности*, 2010.
5. <https://works.doklad.ru/view/ITSTqqkkMc0.html> Основные преимущества процесса ионной имплантации
6. Ercolessi F. A molecular dynamics primer// Spring College in Computational Physics/ ICTP, Trieste, June 1997.
7. Bruel, M., Silicon on insulator material technology. *Electronics Letters*, 1995, 31(14): 1201-1202.
8. <http://lammps.sandia.gov/-LAMMPS Molecular Dynamics Simulator>
9. Bruel, M., Application of hydrogen ion beams to silicon on insulator material technology. *Nuclear Instruments and Methods in Physical Research Section B*, 1996, 108(3): 313-319.
10. Aspar, B., Bruel, M., Moriceau, H., Maleville, C., Pouneyrol, T. and Papon, A. M., Basic mechanisms involved in the Smart-Cut process. *Microelectronic Engineering*, 1997, 36: 233-240.
11. Hochbauer, T., Misra, A., Nastasi, M. and Mayer, J. W., Physical mechanisms behind the ion-cut in hydrogen implanted silicon. *Journal of Applied Physics*, 2002, 92(5): 2335-2342.
12. Maleville, C., Aspar, B., Poumeyrol, T., Moriceau, H., Bruel, M., Auberton-Hervé, A. J. and Bargeb, T., Wafer bonding and H-implantation mechanisms involved in the Smart-Cut R technology. *Materials Science and Engineering B*, 1997, 46(1): 14-19.
13. Varma, C. M., Hydrogen-implant induced exfoliation of silicon and other crystals. *Applied Physics Letters*, 1997, 71(24): 3519-3521.
14. Wang, J., Xiao, Q. H., Tu, H. L., Shao, B. L. and Liu, A. S., Microstructure evolution of hydrogen-implanted silicon during the annealing process. *Microelectronic Engineering*, 2003, 66(1): 314-319.
15. Zheng, Y., Lau, S. S., Hochbauer, T., Misra, A., Verda, R., He, X. M., Nastasi, M. and Mayer, J. W., Orientation dependence of blistering in H-implanted Si. *Journal of Applied Physics*, 2001, 89(5): 2972-2978.
16. L. Himics, S. Tóth, M. Veres, A. Tóth, M. Koós Effective implantation of light emitting centers by plasma immersion ion implantation and focused ion beam methods into nanosized diamond in *Applied Surface Science*, No 328, 2015, Pp.

577–582.

17. Lisa Gamer, Christoph E. Düllmann, Christian Enss, Andreas Fleischmann, Loredana Gastaldo, Clemens Hassel, Sebastian Kempf, Tom Kieck, Klaus Wend Simulation and optimization of the implantation of holmium atoms into metallic magnetic microcalorimeters for neutrino mass determination experiments in Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A, No 854, 2017, Pp. 139 - 148.
18. S.K. Sharma, P.K. Pujari Embedded Si nanoclusters in α -alumina synthesized by ion implantation: An investigation using depth dependent
19. Doppler broadening spectroscopy in Journal of Alloys and Compounds, No 715, 2017, Pp. 247 – 253.
20. Robles M., Mustonen V., Kaskiz K. Molecular dynamic study of a single dislocation in a two-dimensional Lennard-Jones system// Int. J. of Mod. Phys. 2003. V. C14, N 4. P. 407.
21. Shimizu A., Tachikawa H. Molecular dynamics simulation on diffusion of lithium atom pair in C₁₅₀H₃₀ cluster model for glassy carbon at very low temperatures// Electrochimica Acta. 2003. V. 48. P. 1727.
22. Мейер Дж., Эрикссон Л., Дэвис Дж. - М. Ионное легирование полупроводников (кремний и германий), Мир, 1973. - 296с.
23. Ф. Ф. Комаров, А. П. Новиков, А. Ф. Буренков. - Минск, Университетское, Ионная имплантация 1994. - 303 с
24. Кривцов А.М., Кривцова Н.В. Метод частиц и его использование в механике деформируемого твердого тела // Дальневосточный математический журнал. – 2002. – Т. 3, № 2. – С. 254–254–276.
25. Волегов П С, Герасимов Р М, Давлятшин Р П. Модели молекулярной динамики: обзор ЕАМ-потенциалов. Часть 1: Потенциалы для однокомпонентных систем[J]. Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика, 2017 (4).
26. Белащенко Д К, Смирнова Д Е, Островский О И. Молекулярно-динамическое моделирование теплофизических свойств жидкого урана[J]. Теплофизика высоких температур, 2010, 48(3): 383-395.
27. Назаров А А, Мулюков Р Р. Атомистическое моделирование материалов, наноструктур и процессов нанотехнологии[J]. Уфа: РИО БашГУ, 2010, -14с
28. Musil J., Polakova H. Hard nanocomposite Zr-Y-N coating, correlation between hardness and structure// Surf. And Coatings Technol. – 2000.– Vol.127. – P.99-106.