

**НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
імені ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»
ІНЖЕНЕРНО-ФІЗИЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ
КАФЕДРА ФІЗИКИ МЕТАЛІВ**

«На правах рукопису»
УДК _____

«До захисту допущено»
В.о. завідувача кафедри
_____ Є. В. Іващенко
«__» _____ 2019 р.

**Магістерська дисертація
на здобуття ступеня магістра
Зі спеціальності 132 Матеріалознавство
на тему: «Вплив вільної поверхні на дифузійні характеристики поверхневих шарів Pt»**

Виконав:
студент II курсу, групи ФМ-81мп
Магера Віктор Вікторович _____

Керівник:
Ст. викладач КФМ,
Конорев С. І. _____

Консультант з оформлення стартап – проекту:
Доцент, к.е.н.,
Петренко К. В. _____

Консультант з охорони праці та безпеки в
надзвичайних ситуаціях:
Професор, д.т.н.,
Левченко О. Г. _____

Консультант з нормоконтролю:
Асистент КФМ,
Шаповалова Н. А. _____

Рецензент:

Засвідчую, що у цій магістерській дисертації немає
запозичень з праць інших авторів без відповідних
посилань.

Студент _____

Київ – 2019 року

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»
Інженерно-фізичний факультет
Кафедра фізики металів

Рівень вищої освіти – другий (магістерський) за освітньо-професійною програмою
Спеціальність (спеціалізація) – 132 Матеріалознавство («Металофізичні процеси та їх комп'ютерне моделювання»)

ЗАТВЕРДЖУЮ

В.о. завідувача кафедри

_____ Є. В. Іващенко

«___» _____ 2019 р.

ЗАВДАННЯ

на магістерську дисертацію студенту

Магері Віктору Вікторовичу

1. Тема дисертації «Вплив вільної поверхні на дифузійні характеристики поверхневих шарів Pt», науковий керівник дисертації Конорев Сергій Ігорович, старший викладач кафедри, затверджені наказом по університету від «12» листопада 2019 р. № 3890-с.
2. Термін подання студентом дисертації _____
3. Об'єкт дослідження: процеси структурних змін в моделі Pt під дією вільної поверхні для граней (100), (110), (111) при температурах 1400 К, 1500 К та 1600 К, та їх вплив на дифузійні характеристики в поверхневих шарах.
4. Вихідні дані: МЕАМ потенціал Pt, літературні дані по параметрам структури, результати особистих експериментів з минулих робіт.
5. Перелік завдань, які потрібно зробити: 1) Провести МД моделювання монокристалів платини з вільною поверхнею для граней (100), (110), (111); 2) Визначити величини та характер напружень індукованих вільною поверхнею; 3) Визначити рівноважний розподіл вакансій в поверхневих шарах Pt в залежності від кристалічної орієнтації поверхні та температури; 4) Зробити висновки про відмінність дифузійних параметрів в поверхневих шарах від об'ємних за отриманими даними.
6. Орієнтовний перелік графічного (ілюстративного) матеріалу: 15 рисунків, 17 таблиць та презентація.
7. Орієнтовний перелік публікацій

8. Консультанти розділів дисертації

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		завдання видав	завдання прийняв
Охорона праці та безпека в надзвичайних ситуаціях	Професор, д.т.н. Левченко О. Г.		
Оформлення стартап – проекту	Доцент, к.е.н. Петренко К. В.		
Нормоконтроль	Асистент, Шаповалова Н. А.		

9. Дата видачі завдання _____

Календарний план

№ з/п	Назва етапів виконання магістерської дисертації	Термін виконання етапів магістерської дисертації	Примітка
1	Аналіз літературних джерел		
2	Опанування нових методик та підходів		
3	Визначення напружень індукованих вільною поверхнею		
4	Обрахування розподілу вакансій по шарам		
5	Розрахунок енергії утворення вакансії		
6	Аналіз та оформлення результатів дослідження		
7	Попередній захист		
8	Захист		

Студент

Науковий керівник дисертації

В. В. Магера

С. І. Конорев.

РЕФЕРАТ

Магістерська дисертація: 77 с., 17 табл., 17 рис., 37 джерел.

ВІЛЬНА ПОВЕРХНЯ, МОЛЕКУЛЯРНА ДИНАМІКА, МОДЕЛЮВАННЯ,
ПОВЕРХНЕВА СТРУКТУРА, ТОЧКОВІ ДЕФЕКТИ, ДИФУЗІЯ

Об'єкт дослідження – процеси структурних змін в моделі Pt під дією вільної поверхні для граней (100), (110), (111) при температурах 1400 К, 1500 К та 1600 К, та їх вплив на дифузійні характеристики в поверхневих шарах.

Мета роботи – теоретично дослідити вплив вільної поверхні на дифузійні характеристики в поверхневих шарах Pt при температурах 1400 К, 1500 К та 1600 К.

Методи дослідження – метод молекулярної динаміки (МД).

Для теоретичного дослідження впливу вільної поверхні на дифузійні характеристики в поверхневих шарах Pt була обрана методика створення моделей плоскошаруватих систем з вільною поверхнею. Було створено 9 моделей (3 грані, 3 температури) і проведено моделювання методом МД з використанням MEAM потенціалу за допомогою програмного забезпечення LAMMPS.

Використовуючи результати моделювання була досліджена зміна дефектності структури під впливом вільної поверхні для граней (001), (011), (111) Pt. Для аналізу ступеня дефектності в приповерхневих відрелаксованих шарах були побудовані та проаналізовані: розподіл вакансій по шарах, обраховані напруження для кожної грані. Дослідження проводились при температурах 1400 К, 1500 К і 1600 К.

ABSTRACT

Master thesis: 77 p., 17 tab., 17 draws, 37 sources.

FREE SURFACE, MOLECULAR DYNAMICS, SIMULATION, SURFACE STRUCTURE, POINT DEFECT, DIFFUSION

The object of the research – processes of structural changes in the Pt model under the influence of free surface for faces (100), (110), (111) at temperatures 1400 K, 1500 K and 1600 K, and their effect on diffusion characteristics in surface layers.

Work purpose – theoretical research of the diffusion characteristics of Pt monocrystal surface induced by free surface on the (001), (011), (111) planes at 1400 K, 1500 K and 1600 K temperatures.

Method of research – the method of molecular dynamics (MD).

For a theoretical research of the influence of the free surface on diffusion characteristics in the surface layers of Pt, a technique for creating models of plane-layer systems with a free surface for MD simulation was selected. 9 models (3 orientations and 3 temperatures) were created and simulated by the MD method. MEAM potential and LAMMPS software were used in modeling.

Change of structural defectivity of the (001), (011), (111) planes of the Pt surface was explored using the results of modeling. Distribution of vacancies in depth from the surface and tensions of each plane were determined and analyzed for the researches of degree of defectivity in near-surface relaxed layers. The simulations were conducted at temperatures of 1400 K, 1500 K and 1600 K.

ЗМІСТ

1 ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД.....	11
1.1 Основи методу молекулярної динаміки.....	11
1.1.1 Фізична основа методу молекулярної динаміки	11
1.1.2 Коротка історія розвитку методу МД.....	12
1.1.3 Огляд основних завдань, що вирішуються за допомогою МД.....	13
1.1.4 Обмеження класичної МД	14
1.2 Модифікований метод зануреного атома (МЕАМ)	16
1.3 Висновки до розділу 1.....	17
2 МАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИКА.....	18
2.1 Розрахунок термодинамічних величин в методі молекулярної динаміки	18
2.1.1 Загальні співвідношення.....	18
2.1.2 Потенціальна, кінетична і повна енергія.....	19
2.1.3 Температура	20
2.1.4 Підтримка температури	21
2.2 Методика перевірки потенціалу	22
2.3 Методика визначення оптимального кроку моделювання	22
2.4 Методика визначення рівноважних параметрів ґратки.....	24
2.5 Створення моделей плоскошарових систем.....	25
2.6 Методика визначення рівноважної концентрації вакансій.	27
2.7 Висновки до розділу 2.....	28
3 ТЕОРЕТИЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ ТА ОБГОВОРЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ.....	29
3.1 Напруження індуковані вільною поверхнею.....	29
3.2 Розподіл вакансій по шарам	32
3.2.1 Грань (001) Pt	32
3.2.2 Грань (011) Pt	34
3.2.3 Грань (111) Pt	37

3.3 Дифузійні характеристики поверхневих шарів	39
3.4 Висновки до розділу 3	41
4 РОЗРОБКА СТАРТАП-ПРОЕКТУ	42
4.1 Опис ідеї стартапу	42
4.2 Розрахунок планової кошторисної собівартості НДР	43
4.2.1 Визначення вартості матеріалів, необхідна для проведення досліджень.....	44
4.2.2 Визначення вартості спеціального обладнання і приладів	44
4.2.3 Визначення заробітної плати науково-виробничого персоналу.....	44
4.2.4 Визначення розміру єдиного соціального внеску	45
4.2.5 Визначення вартості робіт і послуг сторонніх організацій.....	46
4.2.6 Визначення витрат на службові відрядження	46
4.2.7 Визначення інших прямих нарахованих витрат.....	46
4.2.8 Визначення накладних витрат по темі дипломної роботи	46
4.2.9 Визначення планової кошторисної вартості НДР	47
4.3 Ефективність проведення НДР	48
4.4 Технологічний аудит ідеї проекту	53
4.5 Аналіз ринкових можливостей запуску стартап-проекту	54
4.6 Висновки до розділу 4.....	56
5 ОХОРОНА ПРАЦІ ТА БЕЗПЕКА В НАДЗВИЧАЙНИХ СИТУАЦІЯХ.....	57
5.1 Аналіз шкідливих і небезпечних виробничих факторів.....	57
5.1.1 Шум та вібрація	57
5.1.2 Інфразвук	58
5.1.3 Ультразвук.....	58
5.1.4 Електромагнітне випромінювання.....	58
5.1.5 Іонізація повітря.....	60
5.1.6 Електростатичне поле між екранам і операторам.....	60
5.1.7 Аналіз параметрів приміщення та мікроклімату в приміщенні	60
5.1.8 Виробниче випромінювання.....	62
5.1.9 Вимоги до організації робочого місця	63

5.2 Інженерні рішення для забезпечення безпеки праці.....	64
5.2.1 Електробезпека	64
5.2.2 Аналіз освітленості приміщення.....	65
5.3 Вентиляція.....	66
5.3.1 Розрахунок продуктивності системи вентиляції.....	66
5.4 Безпека в надзвичайних ситуаціях.....	68
5.4.1 Пожежна безпека	69
5.4.2 Вимоги безпеки в аварійних ситуаціях	71
5.5 Висновки до розділу 5.....	71
ВИСНОВКИ.....	72
CONCLUSIONS.....	73
СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ.....	74

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

МД – молекулярна динаміка

ФРР – функція радіального розподілу

NVE – мікроканонічний ансамбль (кількість атомів, об'єм і енергія – константи)

NVT – канонічний ансамбль (кількість атомів, об'єм і температура – константи)

ВСТУП

Створення наперед заданого складу і структури з метою отримання нових необхідних властивостей і нових поєднань властивостей є основною задачею сучасного металознавства тонких плівок. Перехід до високих технологій неможливо реалізувати без "конструювання" на атомному рівні, що обумовлює постановку великої кількості нових задач.

Сучасні мікро- і наноприладобудування вимагають нових поєднань фізичних властивостей, технічних і експлуатаційних характеристик тонких плівок, чого не можна досягти лише застосуванням однокомпонентних матеріалів, зокрема – металів. Тому зростає число компонентів в плівкових металевих матеріалах, ускладнюються шаруваті композиції.

Тонкі металеві плівки знаходять застосування в різноманітних поєднаннях з неметалевими матеріалами: інтерфейсах "металева плівка – неметалевий матеріал", контактах до різних матеріалів – елементах мікро- і наноприладів, металомістких складних складах, з'єднань на основі металів. Металеві плівки знайшли свою нішу в ролі контактів в мікро- і наноприладобудуванні.

Методи молекулярної динаміки (МД), надають можливість ефективно досліджувати дефекти в ідеальних кристалічних структурах, визначати структуру атомів, зміну енергії, напруження в цілому та в окремих складових складних систем. Застосування методів МД в нанотехнологіях може бути використаним для вивчення процесів на поверхні твердих тіл: осадження, перебудови поверхні, а також для вивчення структури і властивостей кластерів і наночастинок, великих молекул, в тому числі біологічних.

1 ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД

1.1 Основи методу молекулярної динаміки

1.1.1 Фізична основа методу молекулярної динаміки

Методом молекулярної динаміки (МД) називається метод моделювання, який заснований на розрахунку еволюції системи взаємодіючих частинок (атомів, молекул) шляхом інтегрування рівнянь їх руху. МД може бути класичною або квантовою [1].

У класичній МД вирішується система рівнянь II закону Ньютона:

$$m_i \vec{a}_i = \vec{F}_i, \quad (1.1)$$

де m_i – маса частинки,

a_i – її прискорення,

F_i – сила, що діє на неї.

МД є детерміністичним методом: якщо відомі початкові координати і швидкості частинок, в принципі може бути описана еволюція системи в будь-які моменти часу. У той же самий час, МД являє собою метод статистичної фізики. Комп'ютер розраховує траєкторію системи в $6N$ – мірному фазовому просторі ($3N$ координат і $3N$ імпульсів). Однак ця траєкторія сама по собі інтересу не представляє. Головний сенс використання методу полягає в тому, що генерується сукупність конфігурацій, розподілених за певними законами розподілу, тобто статистичний ансамбль. Прикладами таких ансамблів є канонічний ансамбль, який відповідає розподілу ймовірностей в фазовому просторі, що забезпечує збереження енергії, або канонічний ансамбль, в якому температура є постійною. Траєкторія, отримана МД, дає таку сукупність конфігурацій. Таким чином, вимір будь-якої фізичної величини шляхом моделювання зводиться до усереднення різних миттєвих значень, прийнятих цією величиною в різні послідовні моменти часу.

Статистична фізика є сполучною ланкою між мікроскопічною поведінкою і термодинамікою. В рамках дуже великих проміжків часу моделювання, можна очікувати, що всі точки фазового простору будуть відвідані системою відповідно до їх ймовірностей, і тоді усереднення призвело б до визначення термодинамічних величин. На практиці, однак, МД моделювання проводиться в обмежений часовий інтервал, тому такий розрахунок повинен бути зроблений з обережністю, і з аналізом, чи досягнуто рівноважний стан системи чи ні. Таким чином за допомогою МД визначаються рівноважні термодинамічні величини і вивчається, наприклад, фазова діаграма матеріалів. Крім цього, за допомогою МД вивчаються також нерівноважні процеси, як, наприклад, дифузія. І, нарешті, МД може бути використана для визначення рівноважних структур (для чого використовується також викладена вище молекулярна статика), причому в багатьох випадках МД дозволяє долати локальні мінімуми і знаходити глобальний мінімум.

1.1.2 Коротка історія розвитку методу МД

Вперше метод МД був використаний Алдером і Уейнрайтом (Alder, Weinwright) в 1957 р. В їх роботі була досліджена фазова діаграма системи твердих сфер, тобто переходи між рідким і твердим станами цих систем. Розрахунки були проведені на комп'ютері IBM-704 (що має об'єм оперативної пам'яті 4 Кб).

У 1960 р. Гібсоном, Голандом, Мілграмом і Віньярдом в Брукхавенській національній лабораторії було проведено МД моделювання радіаційного дефектоутворення в міді. Було вперше використано МД з безперервним потенціалом і кінцево-різницевою інтеграцією рівнянь руху. Розрахунки для системи в 500 атомів були проведені на комп'ютері IBM-704 і займали близько 1 хв. на один крок за часом.

Рамен (Rahman, Аргонська нац. лаб.) – один з відомих піонерів в МД. У 1964 р. він вивчив за допомогою потенціалу Леонарда-Джонса властивості рідкого Ar. Розглядалася система з 864 атомів на комп'ютері CDC-3600. Л. Верле

(Verlet) в 1967 р. також вивчав властивості рідкого Ar, в цих дослідженнях він ввів поняття списку сусідів, а також метод інтегрування рівнянь руху, так званий алгоритм Верле, який в даний час широко використовуються.

У 1981 р. Парінелло (Parinello) і Рамен запропонували метод МД при постійному тиску, в 1984 р. Нозе (Nosé) запропонував метод МД при постійній температурі. Тепер ці методи є класичними [2].

Зі збільшенням можливостей комп'ютерів росли також розміри модульованих систем і спектр завдань, що вирішуються за її допомогою. У 1993 р. Ломдалем (Lomdahl) було реалізовано моделювання росту тріщини в системі, що містить 250 млн. атомів, а вже в 2000 р. була змодельована система з 5 млрд. атомів.

1.1.3 Огляд основних завдань, що вирішуються за допомогою МД

Неможливо перелічити всі завдання фізики конденсованих середовищ, які вирішуються за допомогою МД.

Розвиток МД почався з моделювання рідин, і в даний час цей метод є одним з основних. Розробка потенціалів для нових систем дозволяє вивчати як прості, так і багатокомпонентні рідини; вивчаються як рівноважні системи, так і нерівноважні процеси, такі як в'язкість, теплопровідність, дифузія і т.п.

Інший напрямок використання МД, розпочатий на зорі розвитку методу – вивчення дефектів в кристалах – до сих пір є надзвичайно важливим напрямом. За допомогою МД визначається структура і енергія, напруги різних дефектів: вакансій і міжвузельних атомів, дислокацій, дефектів упаковки, границь зерен і т.п. Триваючий розвиток міжатомних потенціалів дозволяє вивчати ці дефекти з новим ступенем подробиць і точності.

Крім вивчення структури, все більшого розповсюдження набуває вивчення за допомогою МД процесів в твердих тілах: пластичної деформації, руйнування, дифузії, тертя.

Вивчення фазових перетворень, в тому числі між агрегатними станами однієї і тієї ж речовини, побудова фазових діаграм також складають один із напрямів застосування МД.

Для нанотехнологій великий інтерес представляє можливість використання МД для вивчення процесів на поверхні твердих тіл: перебудови поверхні, осадження матеріалів, а також для вивчення структури і властивостей кластерів та наночастинок, великих молекул, в тому числі біологічних.

1.1.4 Обмеження класичної МД

У МД квантове рівняння Шредінгера замінюється класичними рівняннями Ньютона. Ця заміна справедлива, коли довжина хвилі Де-Бройля λ , яка відповідає тепловому руху атома, набагато менше найкоротшої міжатомної відстані, а саме: $b \approx 3 \times 10^{-10}$ м. Для довжини хвилі Де-Бройля і швидкості теплового руху частинок маємо формули:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{Mv}, \quad v = \sqrt{\frac{3kT}{M}}, \quad (1.2)$$

де M – маса частинок,

T – температура.

Підставляючи значення фізичних констант в співвідношення (1.3), можна показати, що класичні рівняння справедливі, якщо $M/m_p \gg 0.2$. З умови $\lambda \ll b$ можна отримати співвідношення, що визначає придатність класичного опису:

$$\frac{M}{m_p} \gg \frac{4\pi^2\hbar^2}{3kTb^2m_p}, \quad (1.3)$$

де m_p – маса протона (рівна приблизно 1 а.е.м.)

Це означає, що для всіх атомів, за винятком найбільш легких, застосування класичних рівнянь руху виправдано. Класичне МД застосовується для таких легких елементів, як H_2 , He, Ne.

Крім того, квантові ефекти стають суттєвими при низьких температурах. Наприклад, нижче температури Дебая відбувається падіння теплоємності, аномально поводить теплове розширення. Отже, в цій області температур класична МД не може бути використана для вивчення динаміки решітки (спектра коливань). Але для вивчення структури матеріалів МД може бути застосовано при всіх температурах [3].

Крім цих, фізично обґрунтованих умов, існують також обмеження, пов'язані з можливостями інтегрування рівнянь руху. Ці обмеження зводяться до обмеження розмірів досліджуваних систем і проміжків часу, протягом яких можуть розглядатися процеси. У типових завданнях на сьогоднішній день розглядаються системи, що містять мільйони атомів, і час процесів порядку 1 нс. Для систем меншого розміру проміжки часу можуть бути збільшені до сотень наносекунд, і, відповідно, для менших проміжків часу розміри системи можуть бути збільшені до декількох мільярдів. Для того щоб уявити масштаб такої системи, відзначимо, що для нікелю, атомний об'єм якого дорівнює приблизно 10^{-2} м^3 , система з 1 млрд. атомів займає обсяг куба зі сторонами приблизно 300 нм.

Різні релаксаційні процеси в твердих тілах мають різні часи релаксації. Для визначення рівноважних властивостей необхідно дочекатися встановлення термодинамічної рівноваги, тобто час моделювання повинен перевищувати час релаксації. Тому за допомогою МД можуть моделюватися досить малі системи (розміром не більше 300 нм) і мають досить малий час релаксації процеси (не більше 100 нс). Наприклад, дифузія в твердих тілах має час релаксації багато годин або навіть років – тому цей процес при низьких температурах не має сенсу безпосередньо моделювати за допомогою МД.

1.2 Модифікований метод зануреного атома (МЕАМ)

Схема потенціалів модифікованого зануреного атома (МЕАМ) була розроблена як узагальнення методу зануреного атома. На відміну від останнього, потенціали МЕАМ включають кутові взаємодії, які слідує з теорії електронної щільності. В результаті ці потенціали можуть описати направлений зв'язок, який найбільш притаманний для таких ковалентних матеріалів, як кремній і алмаз [4].

У той час як здебільшого застосовуються прості аналітичні форми і кутова взаємодія, що обмежена першими найближчими сусідами, формулу МЕАМ можна легко розширити, включаючи більшу кількість сусідів та застосовуючи загальні функціональні форми (наприклад, сплайни) [5]. Відповідно до класифікації Карлсона [6] потенціали МЕАМ відносяться до категорії функціональних кластерів, яка також включає потенціал порядку аналітичного зв'язку.

Загальною формою для повної енергії є:

$$E = \sum_{ij} V(r_{ij}) + \sum_i F(\rho_i), \quad (1.4)$$

де кутова залежність слідує з терміну електронної щільності

$$\rho_i = \sum_j \rho(r_{ij}) + \sum_{jk} f(r_{ij})f(r_{ik})g(\cos(\theta_{ijk})) \quad (1.5)$$

Другий член у рівнянні і є ключовою різницею порівняно з ЕАМ.

Як і у випадку потенціалів ЕАМ, були запропоновані різні функціональні форми для V , F , g , f , ρ .

У цій реалізації можна скласти функціональні форми, використовуючи математичний аналіз. Це дозволяє не тільки копіювати будь-яку з вихідних форм, але й визначати практично довільні функціональні форми.

1.3 Висновки до розділу 1

1. Вільна поверхня є дефектом кристалічної ґратки і відповідно призводить до виникнення структурних деформацій в поверхневих шарах, які супроводжуються певними напруженнями. Для різних матеріалів і різних граней глибина впливу вільної поверхні має різний характер. Коли розмір структурних елементів більше нанометрового діапазону впливом вільної поверхні можна знехтувати. Але коли розмір структурних елементів знаходиться у нанометровому діапазоні поверхня відіграє важливу, а іноді і вирішальну роль.

2. Використання методів молекулярної динаміки (МД) дає можливість ефективно досліджувати дефекти в кристалічних структурах. Тому вважаємо доцільним використання методів МД для теоретичного дослідження процесів на поверхні твердих тіл: структурної перебудови поверхні, вивчення структури і властивостей кластерів і наночастинок.

2 МАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИКА

2.1 Розрахунок термодинамічних величин в методі молекулярної динаміки

2.1.1 Загальні співвідношення

Коли після певного числа кроків МД в системі встановилася рівновага, можна "вимірювати" її термодинамічні параметри. Для цього значення відповідних динамічних величин усереднюють по часу. Фізичні властивості динамічних величин, як правило, є функціями координат і швидкостей. Припустимо, миттєве значення деякої фізичної величини в момент часу t дорівнює:

$$A(t) = f(\vec{r}_1(t), \dots, \vec{r}_N(t), \vec{v}_1(t), \dots, \vec{v}_N(t)). \quad (2.1)$$

Тоді її середнє значення дорівнює:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{N_T} \sum_{k=1}^{N_T} A(k), \quad (2.2)$$

де k – індекс, який пробігає кроки за часом від 1 до деякого великого числа N_T .

Є два еквівалентних шляхи практичної реалізації такого усереднення.

1. $A(t)$ розраховується на кожному кроці за часом в процесі "прогонки" програми МД. Сума також оновлюється після кожного кроку. В кінці роботи програми МД середнє значення знаходиться відразу діленням суми на число кроків. Цей спосіб кращий, коли розрахунок величини простий, або дуже важливий. Наприклад, температура системи повинна розраховуватися таким чином.

2. У процесі роботи програми МД координати (i / або швидкості) періодично записуються в файл. Окрема програма, яка запускається після МД, обробляє записані дані, розраховуючи необхідні середні значення.

Цей спосіб вимагає великого обсягу на диску, так як пов'язаний зі збереженням $6N$ величин (координат і проєкцій швидкостей всіх часток) для кожного з великого числа кроків. Однак він зручний в іншому відношенні: програма МД проганяється тільки один раз, а її результати можуть бути багато разів використані для розрахунку різних термодинамічних величин. Цей метод використовується, якщо розраховуються величини складні, пов'язані з використанням даних в різні моменти часу і т.д.

2.1.2 Потенціальна, кінетична і повна енергія

Середня потенційна енергія U визначається усередненням її миттєвих значень, які обраховуються в кожен момент часу в процесі розрахунку сил, що діють на атоми. Наприклад, у випадку парних потенціалів:

$$U = \left\langle \sum_i \sum_{j>i} \varphi(|\vec{r}_i(t) - \vec{r}_j(t)|) \right\rangle. \quad (2.3)$$

Хоча для інтегрування рівнянь руху середня потенційна енергія не потрібна, вона потрібна для розрахунку повної енергії і перевірки її збереження. Остання є важливою перевіркою будь-якого МД-моделювання.

Розрахунок середньої кінетичної енергії дуже простий:

$$K = \langle K(t) \rangle = \left\langle \frac{1}{2} \sum_i m_i v_i^2(t) \right\rangle. \quad (2.4)$$

Повна енергія замкнутої системи $E = K + U$ в класичній механіці є величина постійна. Однак зазвичай на кожному кроці ця величина розраховується, і перевіряється її збереження.

Іншими словами, при моделюванні енергія безперервно "перетікає" з кінетичної в потенційну і навпаки, викликаючи флуктуації близько їх середніх значень, тоді як їх сума залишається незмінною. Насправді можуть мати місце невеликі флуктуації повної енергії порядку 10^4 eV від середнього значення або менше, пов'язані з похибками в інтегруванні рівнянь руху. Ці флуктуації можуть бути зменшені скороченням кроку за часом.

При дуже великих часах моделювання можливо також повільне відхилення повної енергії в одну сторону, яке може бути пов'язане із занадто великим кроком по часу. Таке відхилення – більш небажане явище, ніж флуктуації, так як призводить до зміни термодинамічного стану системи, в зв'язку з чим середні значення величин за часом по тривалому проміжку часу не відповідають одному стану. Якщо відхилення мають місце, їх можна уникнути шляхом поділу всього тривалого проміжку часу на більш короткі інтервали і відновлення заданого значення енергії перед кожним з коротких прогонів. Для відновлення енергії зазвичай змінюється кінетична енергія шляхом множення всіх швидкостей на необхідний множник.

Хоча шляхом зменшення тимчасового кроку можна досягти більш точного збереження енергії, занадто сильне зменшення призводить до втрати комп'ютерного часу. Тому зазвичай досягають компромісу між невеликими флуктуаціями енергії і, можливо, слабким її відхиленням, і досить великими інтервалами часу, які потрібно моделювати.

2.1.3 Температура

Температура T безпосередньо пов'язана з кінетичною енергією добре відомої теоремою про рівномірний розподіл кінетичної енергії за ступенями свободи. Так як система N частинок має $3N$ ступенів свободи, їх кінетична енергія дорівнює:

$$K = \frac{3}{2} Nk_B T. \quad (2.5)$$

Отже, температура розраховується безпосередньо з середньої кінетичної енергії K . Для практичних цілей корисно буває також визначити "миттєву температуру" $T(t)$, пропорційну миттєвій кінетичній енергії $K(t)$.

2.1.4 Підтримка температури

Молекулярна динаміка виконується в мікроканонічному ансамблі постійних змінних NVE (кількість атомів, об'єм і енергія константи) і технічно також загального імпульсу P . Температуру ми можемо оцінити, використовуючи термодинамічні середні значення.

Температура підраховується як кінетична енергія поділена на деяке число ступенів свободи (і константу Больцмана):

$$\langle E \rangle = \langle \frac{1}{2} m v^2 \rangle = \frac{3}{2} k_B T, \quad (2.6)$$

або

$$T = \frac{2\langle K \rangle}{k_B n_{DOF}}. \quad (2.7)$$

Так як кінетична енергія це функція швидкості частинок, то часто виникає необхідність розрізнити дифузійну швидкість частинки і їх термальну швидкість (теплові коливання). Сума цих двох факторів і є загальною швидкістю частинки.

Проте часто бажано задавати температуру апіорно і виконувати симуляцію в канонічному ансамблі. Зазвичай цільова температура (і тиск) задаються користувачем і термостат (і баростат) намагаються врівноважити систему до бажаних T (і/ чи P).

Є кілька підходів до цього:

1. підтримувати правильну термодинаміку, тобто правильний розподіл мікростану в канонічному ансамблі;

2. підтримувати реалістичну динаміку, тобто рівняння руху можуть бути використані для точного обчислення величин переміщення.

LAMMPS має декілька можливостей (команд) для підрахунку температури.

2.2 Методика перевірки потенціалу

Дослідження проводились методом молекулярної динаміки (МД) з використанням програмного забезпечення LAMMPS [7] і потенціалу MEAM [4].

Перевірка потенціалу шляхом обрахування відомих констант (табл. 2.1) показала, що він може бути використаний для моделювання методом МД.

Таблиця 2.1 – Порівняння розрахованих констант для Pt

	Значення отриманні в роботі	Данні з літератури
Параметр ґратки $a, \text{Å}$	3,9253	3,9241 [8]
Коефіцієнт термічного лінійного розширення $\alpha, \times 10^{-6} \text{ 1/K}$	11,343	8,8 [9] (Для масивних полікристалічних зразків)
Когезивна енергія $e_{\text{coh}}, \text{ eV/atom}$	5,6981	5,84 [10]
Енергія утворення вакансії $E_f, \text{ eV}$	1,226	1,35 [11]

2.3 Методика визначення оптимального кроку моделювання

Для визначення оптимального кроку за часом dt створено моделі розміром $5 \times 5 \times 5$ елементарних комірок та періодичними граничними умовами по осям X, Y, Z для температур 1400 К, 1500 К, 1600 К. Після чого проводилось моделювання в якому крок за часом dt поступово збільшувався на 10^{-15} с після

кожних 1000 кроків, починаючи з 10^{-15} с. Оптимальним кроком по часу обирали мінімальний крок при якому енергія системи залишалась стабільною (рис. 2.1).

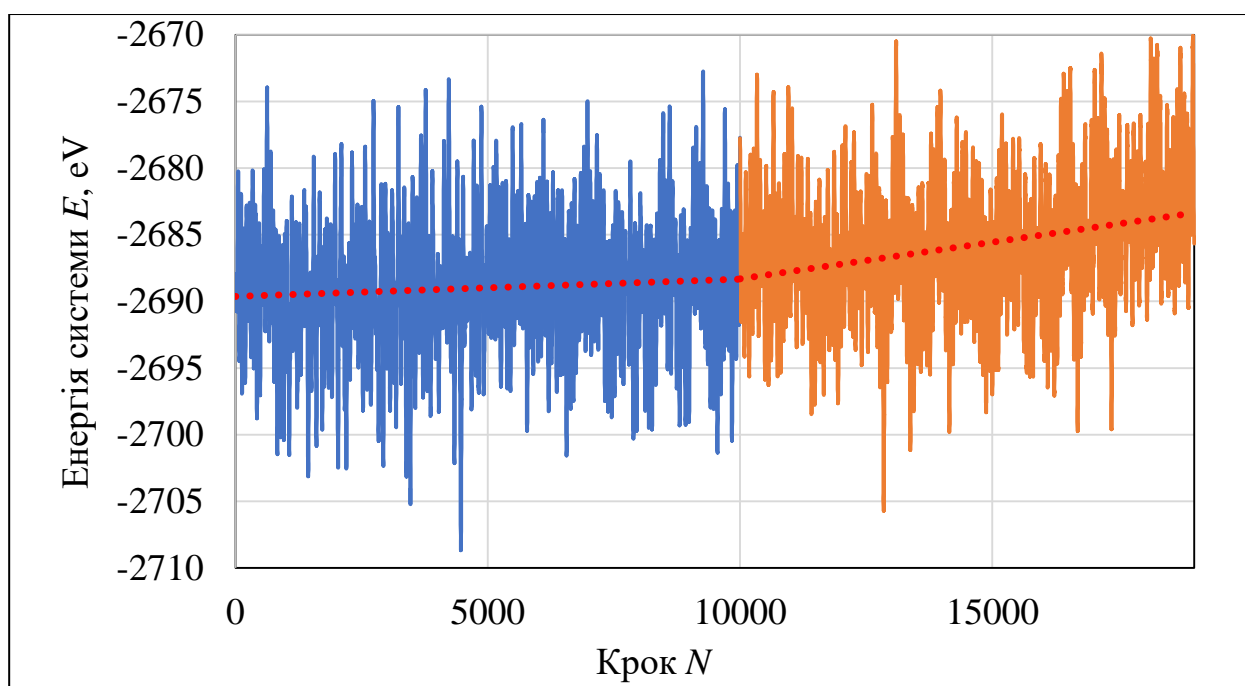


Рисунок 2.1 – Енергія системи Pt 1600 К при поступовому збільшенні параметру dt

Визначенні кроки за часом наведені в таблиці 2.2

Таблиця 2.2 – Отриманий крок за часом в залежності від температури

Температура t , К	Крок за часом dt , с ⁻¹⁵
1400	12
1500	12
1600	10

Так як атоми найбільш рухливі при температурі 1600 К, було прийняте рішення в подальшому використовувати такий крок за часом для усіх моделей (10^{-14} с).

2.4 Методика визначення рівноважних параметрів ґратки

Для визначення рівноважного параметру ґратки a були використані такі ж моделі. Після релаксації протягом 1000 кроків, оцінювались напруження в системі. Обирались такі значення a при якому загальні напруження системи приблизно дорівнювали нулю (рис. 2.2).

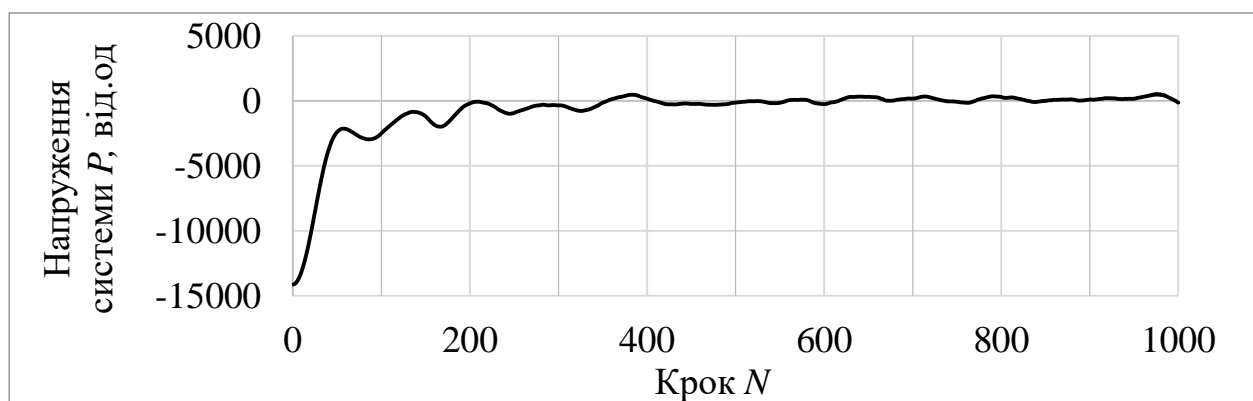


Рисунок 2.2 – Напруження системи Pt 1400 К при підбраному значенні a

Отримані значення рівноважних параметрів ґраток для температур 1400 К, 1500 К та 1600 К наведені в табл. 3.2.

Таблиця 3.2 – Рівноважні параметри ґратки для температур 1400 К, 1500 К та 1600 К

Температура T, К	Параметр ґратки a , Å
1400	3,9597
1500	3,9629
1600	3,9661

2.5 Створення моделей плоскошарових систем

Для теоретичного дослідження були створені за алгоритмом [8] моделі кристалу Pt з вільною поверхнею для граней (001), (011), (111) для температур 1400 К, 1500 К та 1600 К. В кожній моделі було додано джерело вакансій у вигляді недосконалого першого шару (відлік від вільної поверхні). В ньому було створено заглиблення (глибиною 1 атом) з діаметром $1/2$ від довжини найменшої сторони (рис. 2.3). Також в приповерхневих шарах (з 3 по 11 включно) було довільно розміщено вакансії концентрацією близько 2,5 ат.%.

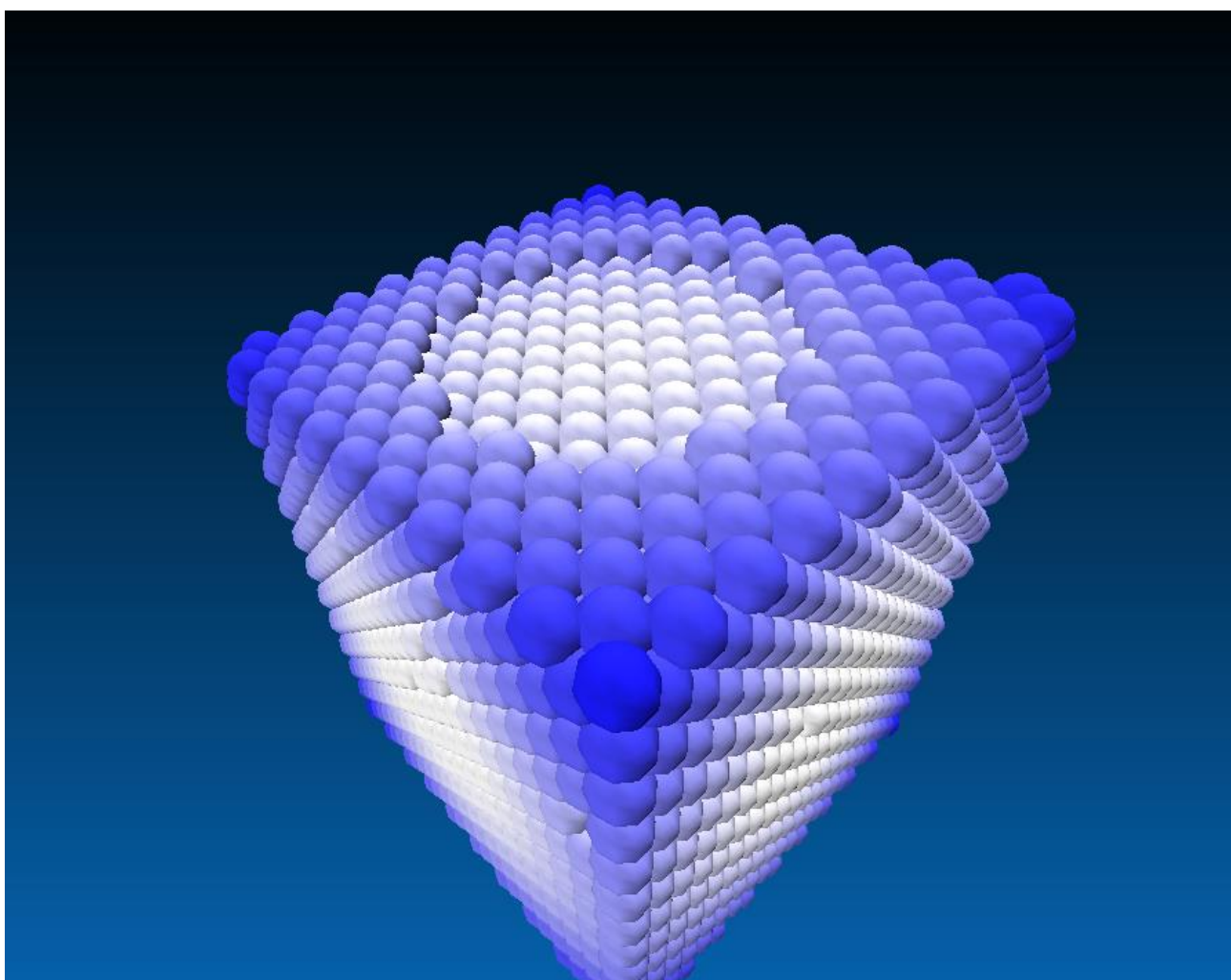


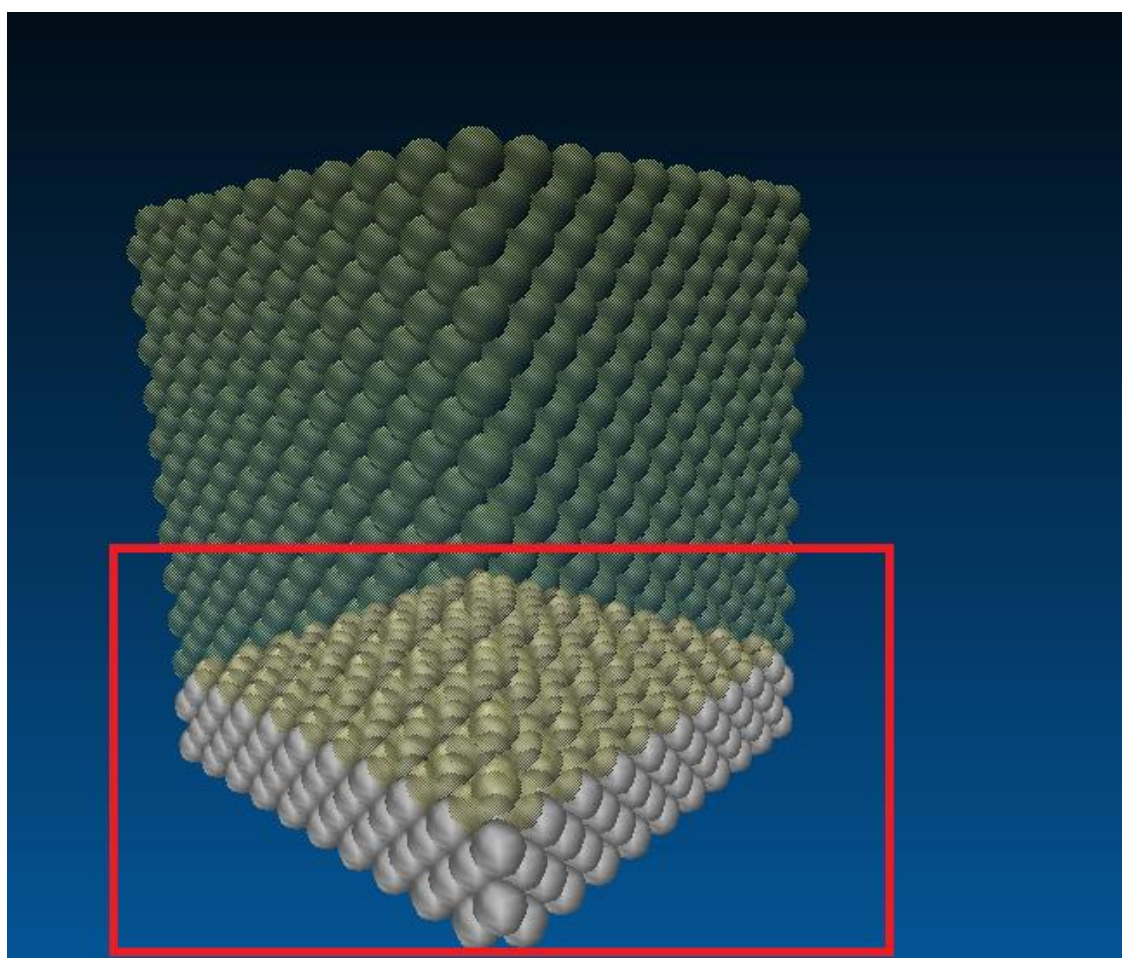
Рисунок 2.3 – Джерело вакансій у вигляді недосконалого першого шару

Напрямки кристалографічної орієнтації по осям вибирались таким чином, щоб отримати на поверхні площини з бажаною орієнтацією. Отримані параметри моделей наведено в табл. 2.3.

Таблиця 2.3 – Параметри моделей Pt

Модель	Грань	Кількість атомів	Число заморожених шарів	Напрямок		
				Вісь X	Вісь Y	Вісь Z
1, 4, 7	001	4800	4	100	010	001
2, 5, 8	011	4800	4	100	01-1	011
3, 6, 9	111	4855	4	01-1	-211	111

Для реалізації вільної поверхні по осям X та Y були обрані періодичні граничні умови, по осі Z – фіксовані та додано вільний простір. Для уникнення другої вільної поверхні по осі Z з одного боку декілька шарів були заморожені (рис. 2.4).

Рисунок 2.4 – Заморожені шари по осі Z

Їх кількість обиралась таким чином, щоб товщина замороженого матеріалу була більша радіусу відсікання. Для нашого випадку це 4 шари.

2.6 Методика визначення рівноважної концентрації вакансій.

Для визначення рівноважної концентрації вакансій (X_d) використовувалася широковідома формула [9]:

$$X_d \approx \exp(-E_v/k_B T), \quad (2.8)$$

де E_v – енергія утворення вакансії,

k_B – константа Больцмана,

T – температура.

Тобто для визначення X_d необхідно лише з достатньо великою точністю визначити E_v . Для визначення E_v також скористалися широковідомим підходом [10], який полягає в тому, що визначається загальна енергія бездефектної системи (E_i) і загальна енергія системи з одним дефектом (в даному випадку вакансією) і різниця цих енергій з урахуванням кількості атомів дасть нам енергію утворення дефекту (в даному випадку вакансії):

$$E_v = E_d - E_i \frac{N - 1}{N}, \quad (2.9)$$

де N – загальна кількість атомів в бездефектній системі.

Параметри систем з якими проводилось моделювання по визначенню E_v : ОЦК ґратка для заліза, ГЦК ґратка для платини і сплавів, загальний об'єм – 12x12x12 елементарних комірок, NVT ансамбль, періодичні граничні умови в усіх напрямках, крок моделювання 9^{-15} с, 500000 кроків, загальний час моделювання склав 4,5 нс, температура в системах від 300 К до 1600 К.

Для чистих заліза та платини моделювалися по дві системи – бездефектна та з однією вакансією, для сплавів по три – бездефектна, з однією вакансією на місці заліза та з однією вакансією на місці платини.

Для забезпечення статистичної достовірності результатів кожен дослід повторювався 5 разів з різними випадковими початковими швидкостями атомів.

2.7 Висновки до розділу 2

1. Вище описана методика розрахунку термодинамічних величин при теоретичних дослідженнях методами МД підходить для використання в системах з плоскошаровою структурою та вільною поверхнею.

2. Для дослідження плоскошарових систем з вільною поверхнею необхідно проводити моделювання канонічного ансамблю, тобто температура, об'єм, та кількість атомів повинні залишатися постійними протягом всього часу моделювання.

3. Потенціал модифікованого методу зануреного атома (МЕАМ) показав найкращі результати і доцільно використовувати його для моделювання систем, які досліджуються в даній роботі.

3 ТЕОРЕТИЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ ТА ОБГОВОРЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ

Найбільш щільноспакованою площиною в ГЦК гратці є площина (111). Для Pt щільність пакування цієї грані за кімнатної температури становить $1,5 \times 10^{-15}$ атом/см². Для зручності будемо використовувати щільність пакування відносно площини (111). Відповідно для площини (111) ця величина буде дорівнювати 1, для площини (001) – 0,866, для площини (011) – 0,612.

3.1 Напруження індуковані вільною поверхнею

Для грані (111) Pt (рис. 3.1) напруження викликані вільною поверхнею спостерігаються лише на першому поверхневому шарі та складають 4,8 відн. од. для 1400 К, 4,65 відн. од. для 1500 К та 4,6 відн. од. для 1600 К. Як бачимо напруження мають стискаючий характер (додатні значення) і зменшуються зі зростанням температури.

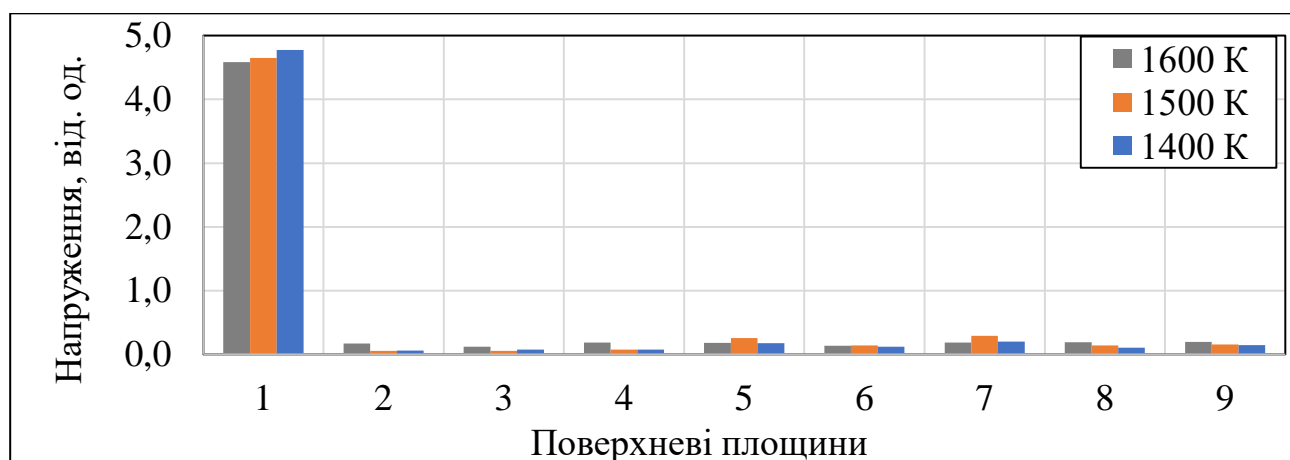


Рисунок 3.1 – Залежність напружень в поверхневих площинах для грані (001) Pt при температурах 1400 К, 1500 К та 1600 К

Для грані (001) Pt (рис. 3.2) напруження помітні вже на перших двох шарах і характеризуються максимальними напруженнями на рівні 3,2 відн. од. для першого шару при температурі 1400 К, та 3 відн. од. при 1500 К і 1600 К. Напруження як і для грані (111) Pt мають стискаючий характер.

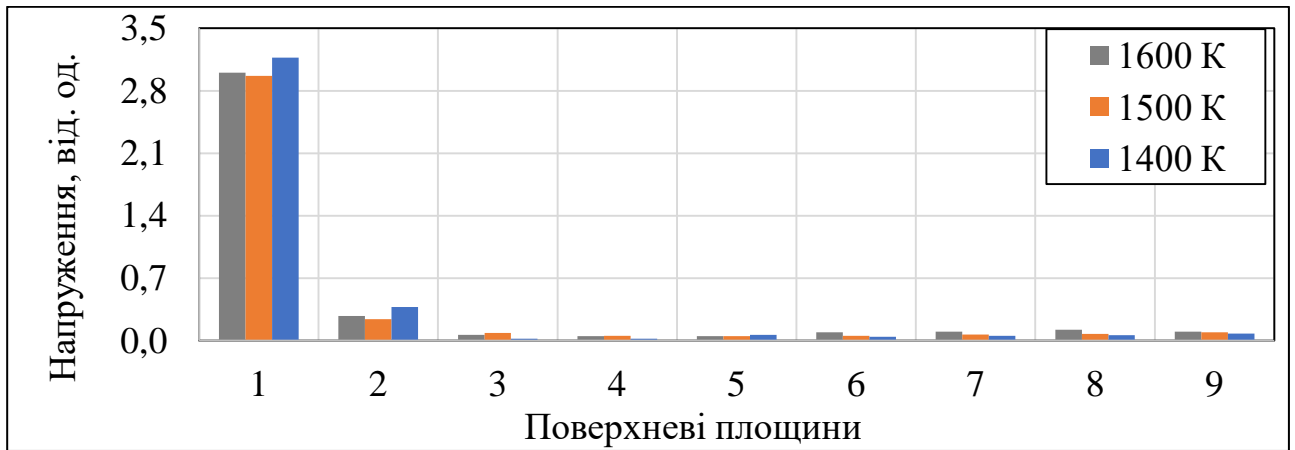


Рисунок 3.2 – Залежність напружень в поверхневих площинах для грані (001) Pt при температурах 1400 К, 1500 К та 1600 К

Грань (011) Pt (рис. 3.3) має найменшу щільність пакування з трьох нами розглянутих, і це відповідним чином впливає на напруження.

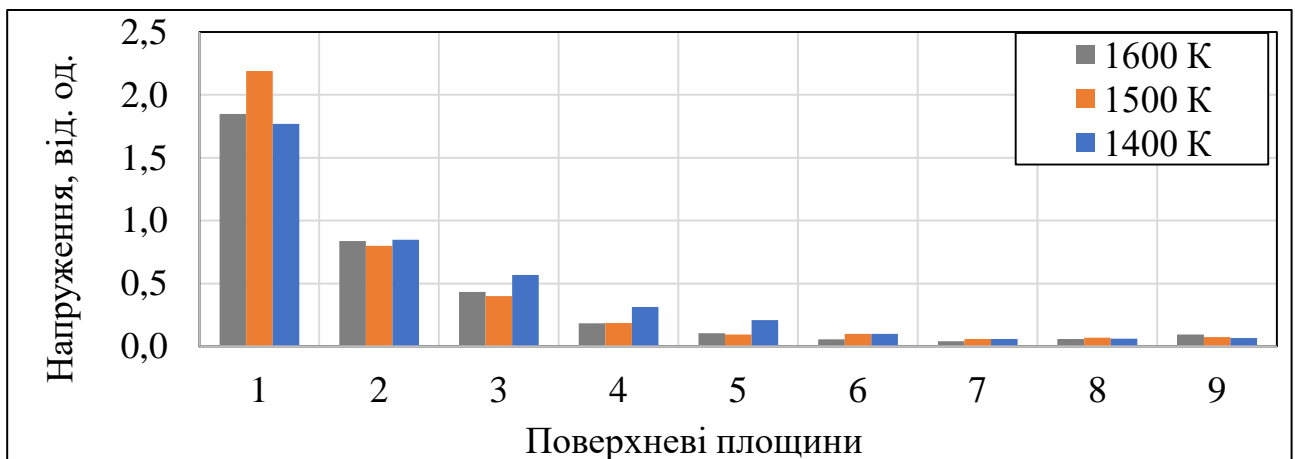


Рисунок 3.3 – Залежність напружень в поверхневих площинах для грані (001) Pt при температурах 1400 К, 1500 К та 1600 К

Максимальне напруження спостерігається для першого шару і становить 2,1 відн.од. для температури 1500 К і 1,8 відн.од. для температур 1400 К та 1600 К. Напруження від вільної поверхні розповсюджується на 6 поверхневих шарів. З віддаленням від поверхні напруження поступово зменшуються і для шостого шару вже майже дорівнюють нулю.

На рисунку 3.4 наведена залежність кількості поверхневих площин, що перебувають під напруженням в залежності від щільності пакування.

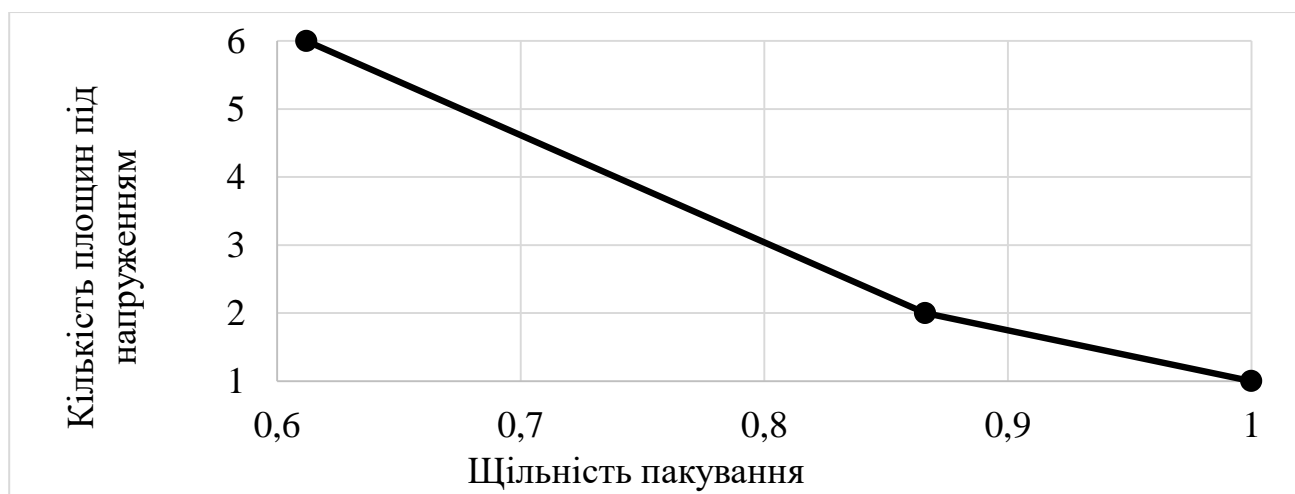


Рисунок 3.4 – Залежність кількості площин, що перебувають під напруженням від щільності пакування

На рисунку 3.5 представлена залежність максимально зафіксованих величин напруження від щільності пакування.

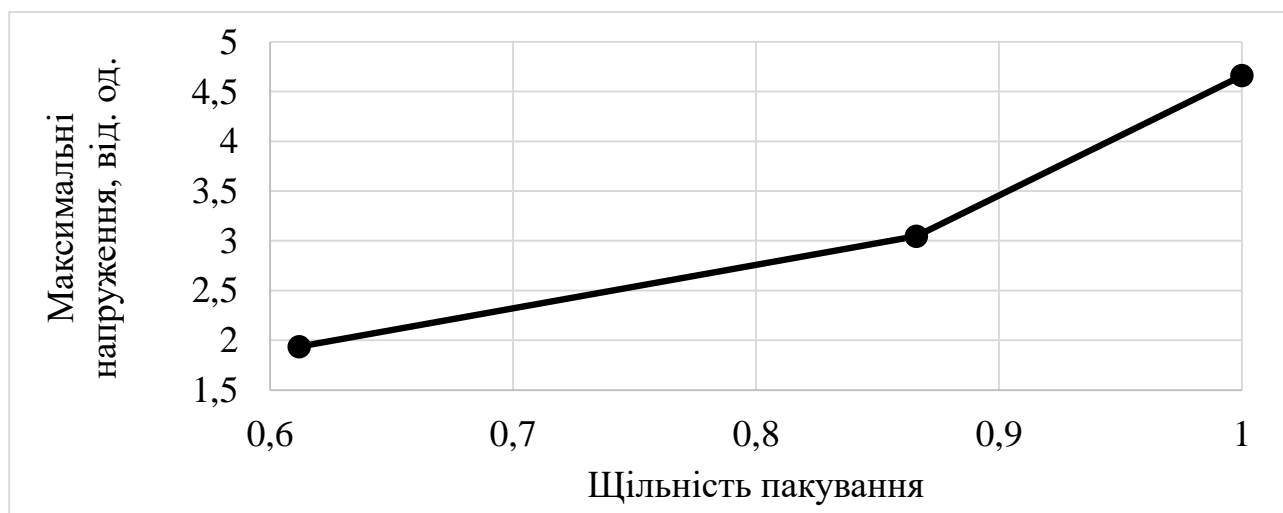


Рисунок 3.5 – Залежність максимально зафіксованих величин напруження від щільності пакування

Кількість площин, що перебувають під напруженням в поверхневих шарах P_t корелюється зі щільністю пакування цих шарів. Зі збільшенням

щільності пакування кількість таких шарів спадає. Максимальні напруження в поверхневих шарах також залежать від щільності пакування. Чим більша щільність пакування, тим більші напруження.

3.2 Розподіл вакансій по шарам

Нагадуємо, для того щоб прискорити процес переходу до рівноважного “не ідеального” стану ми додали до наших граней окрім джерела дефектів (у вигляді напівплощини) на поверхні, ще певну концентрацію вакансій у шарах (загалом 2,5% для шести шарів).

3.2.1 Грань (001) Pt

Як бачимо з рисунку 3.6, який показує динаміки зміни кількості вакансій, кількість точкових дефектів в об’ємі зменшується з часом, для кожної з температур прямуючи до рівноважного стану. При тому видно що з підвищенням температури шари активніше відновлюються. При температурі 1400 К рівноважна концентрація вакансій в поверхневих шарах при 1400 К склала 1,85%, при 1500 К – 1,1%, при 1600 К – 1%.

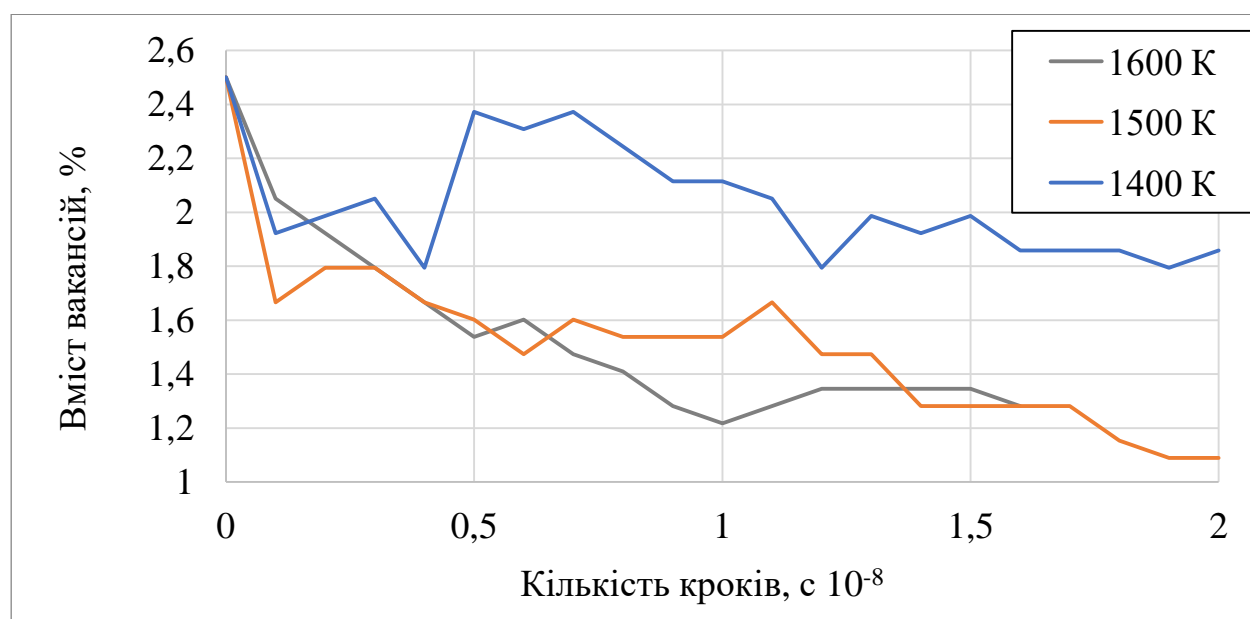


Рисунок 3.6 – Відношення кількості вакансій у об’ємі Pt до кількості кроків.

В процесі моделювання перший напівшар змішався з наступним шаром, що не дозволяє правильно визначити кількість вакансій в них, то ми будемо розглядати далі цю характеристику для шарів з 3-го по 6 (рис. 3.7).

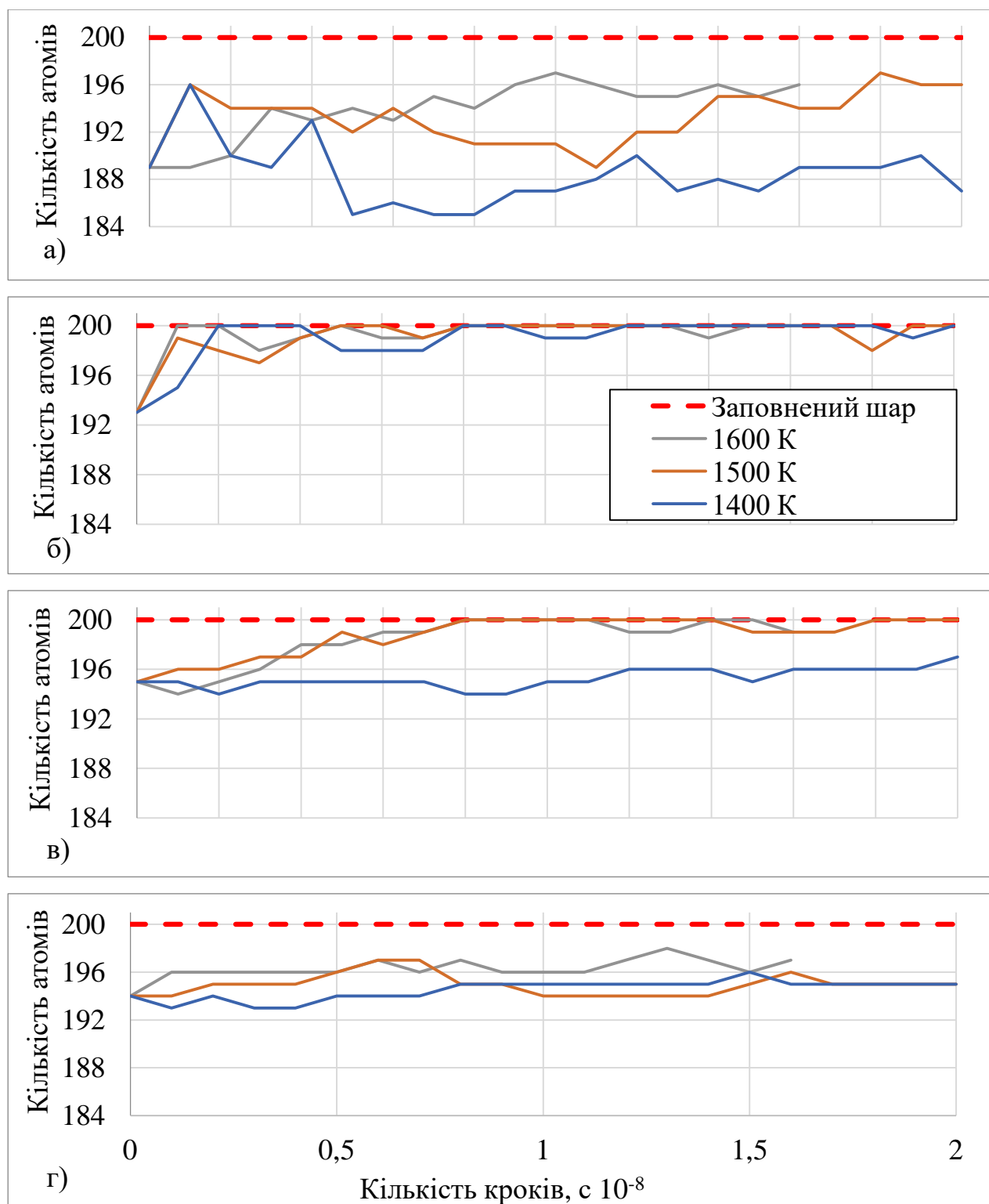


Рисунок 3.7 – Залежність кількості атомів у поверхневих шарах Pt від часу для 3-го (а), 4-го (б), 5-го (в), 6-го (г) шару при температурах 1400 К, 1500 К та 1600 К

3 шар: після переходу до рівноважного стану, тримається більш-менш постійна концентрація вакансій, яка складає за температури 1600 К – 1,5%, 1500 К – 2%, 1400 – 5,5%.

4 шар: при усіх температурах даний шар швидко заповнюється атомами і в подальшому містить не більше 1 вакансії на шар.

5 шар: при температурах 1500 К та 1600 К аналогічно 4 шару. При 1400 К тримається певна кількість вакансій, можливо вони не встигають вийти з нього оскільки рухливість атомів при 1400 К менше ніж при 1500 К та 1600 К, але це тільки припущення, яке потребує перевірок.

6 шар: за всіх температур тримається приблизно постійна концентрація вакансій. Такий стан потребує подальшого вивчення.

3.2.2 Грань (011) Pt

Так само як і для грані 001 кількість точкових дефектів в об'ємі зменшується з часом прямуючи до рівноважного стану, для кожної з температур. На відміну від попереднього випадку більша кількість спотворених шарів (3 замість 2) тому розрахунки концентрації вакансій представлені для 4-го – 7-го шарів.

Як бачимо з рис. 3.8 з підвищенням температури атоми в шарах проявляють більшу рухливість. При температурі 1400 К рівноважна концентрація вакансій в поверхневих шарах при 1400 К склала 0,93%, при 1500 К – 0,81%, при 1600 К – 0,64%.

В процесі моделювання перший напівшар змішався з наступними двома шарами, що не дозволяє правильно визначити кількість вакансій в них, то ми будемо розглядати далі цю характеристику для шарів з 4-го по 7.

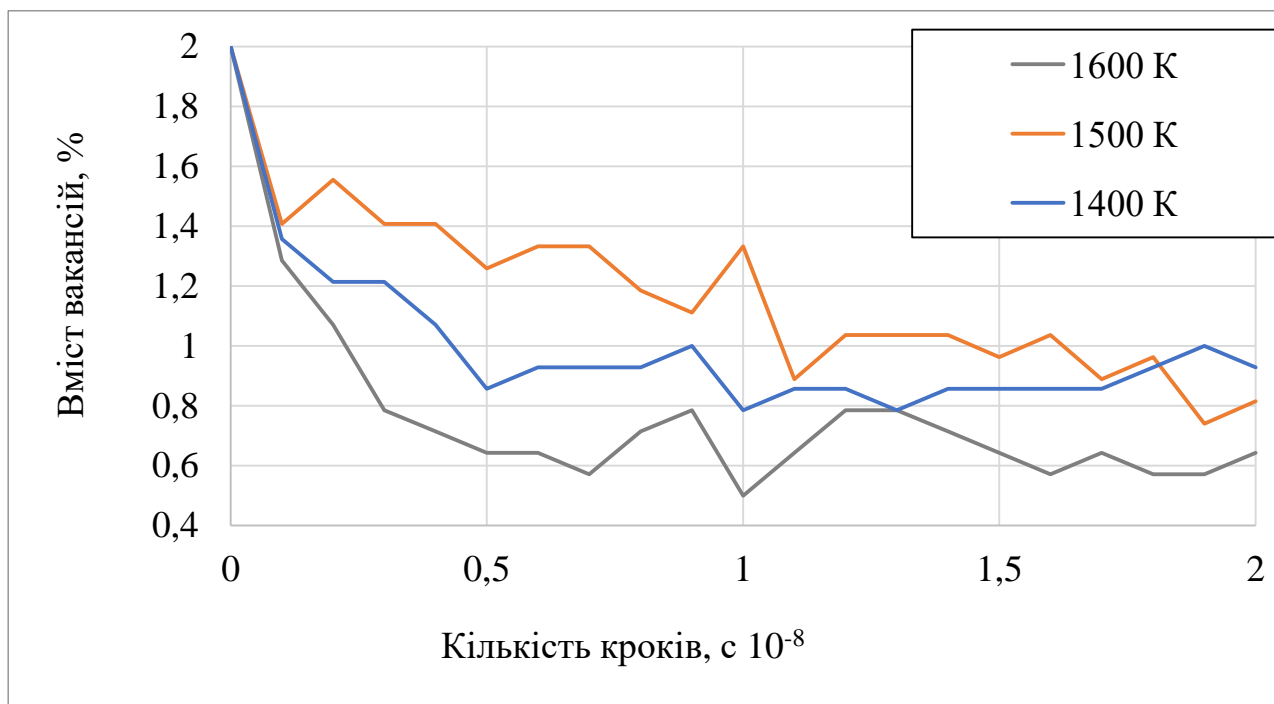


Рисунок 3.8 – Відношення кількості вакансій у об'ємі Pt до кількості кроків.

4 шар: після переходу до рівноважного стану, тримається більш-менш постійна концентрація вакансій, яка складає за температури 1600 K – 1%, 1500 K – 0,5%, 1400 – 0,5% (рис. 3.9).

5 шар: при усіх температурах даний шар швидко заповнюється атомами і в подальшому містить не більше 1 вакансії на шар.

6 шар: при температурах 1500 K та 1600 K аналогічно 4 шару. При 1400 K тримається певна кількість вакансій, можливо вони не встигають вийти з нього оскільки рухливість атомів при 1400 K менше ніж при 1500 K та 1600 K, але це тільки припущення, яке потребує перевірок.

7 шар: при усіх температурах даний шар швидко заповнюється атомами і в подальшому містить не більше 1 вакансії на шар, на відміну від 5-го шару проявляє меншу активність.

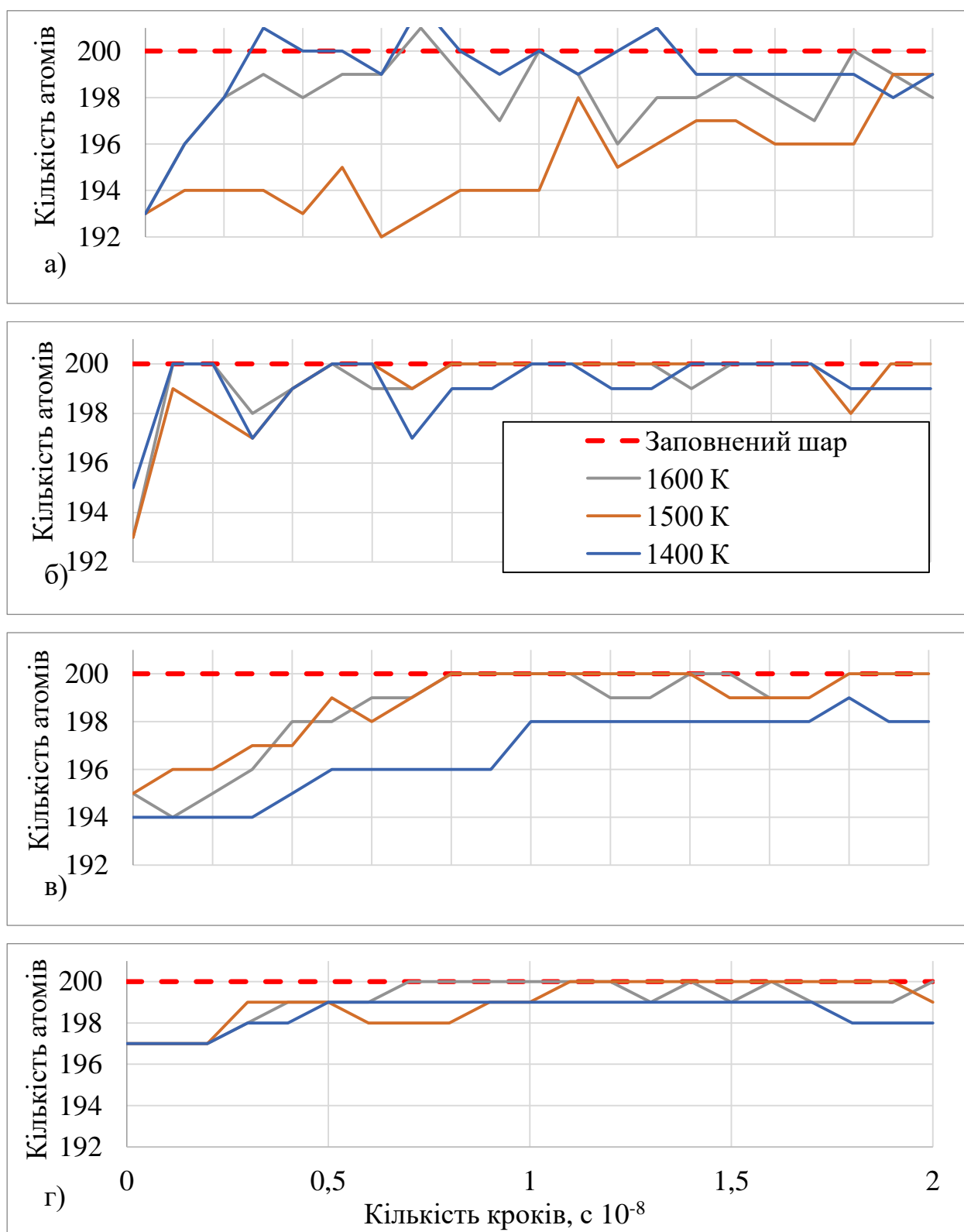


Рисунок 3.9 – Залежність кількості атомів у поверхневих шарах Pt від часу для 4-го (а), 5-го (б), 6-го (в), 7-го (г) шару при температурах 1400 К, 1500 К та 1600 К

3.2.3 Грань (111) Pt

Як бачимо з рисунку 3.10, який показує динаміки зміни кількості вакансій, кількість точкових дефектів в об'ємі зменшується з часом, для кожної з температур прямуючи до рівноважного стану. При тому видно що з підвищенням температури шари активніше відновлюються. При температурі 1400 К рівноважні концентрація вакансій в поверхневих шарах при 1400 К склала 1,65%, при 1500 К – 1,4%, при 1600 К – 1,37%.

В даній грані шари найбільш щільноспаквані і відстань між ними максимальна серед розглянутих орієнтацій. Тому тут спостерігається найбільший відсотковий вміст вакансій після досягнення рівноважного стану.

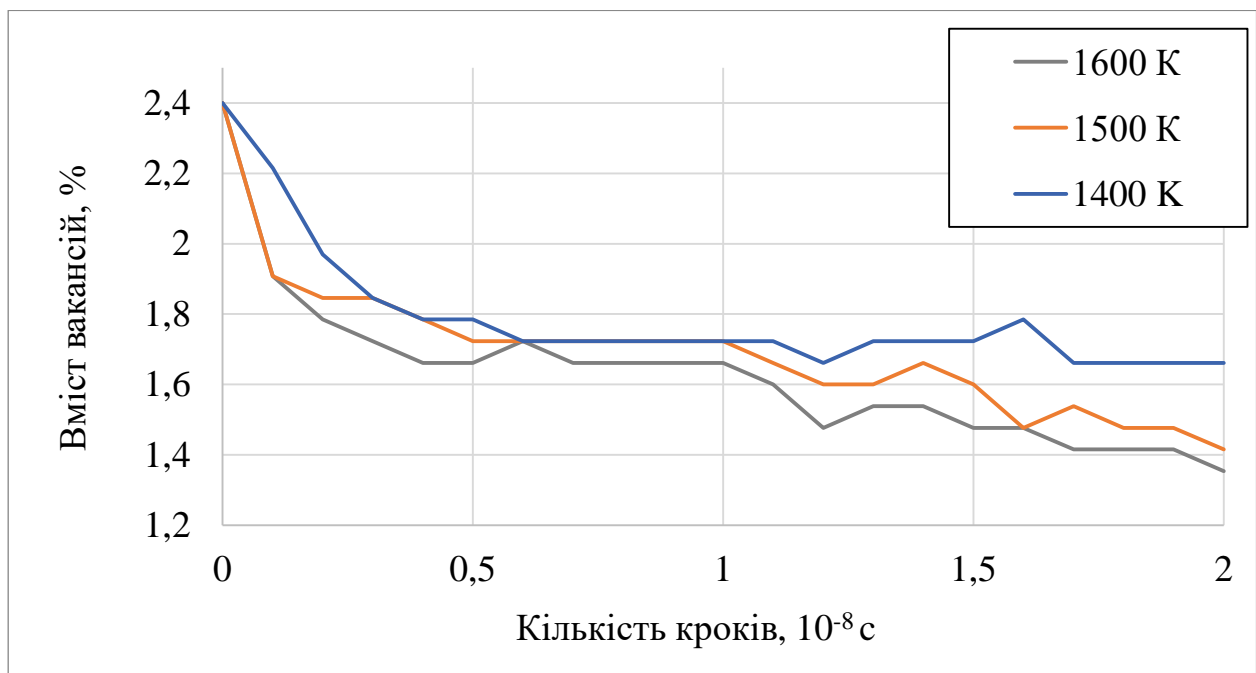


Рисунок 3.10 – Відношення кількості вакансій у об'ємі Pt до кількості кроків

В кожен конкретний момент часу можна чітко зафіксувати кожен з шарів. Як і для попередніх розділів ми будемо розглядати шари в об'ємі з 3-го по 6 (рис. 3.11). Для даної орієнтації притаманна розбіжність в числі атомів в одному шарі (для кожного шару вона своя і ці шари чергуються з певною періодичністю), тому на графіках нижче значення заповненого шару відрізняються один від одного.

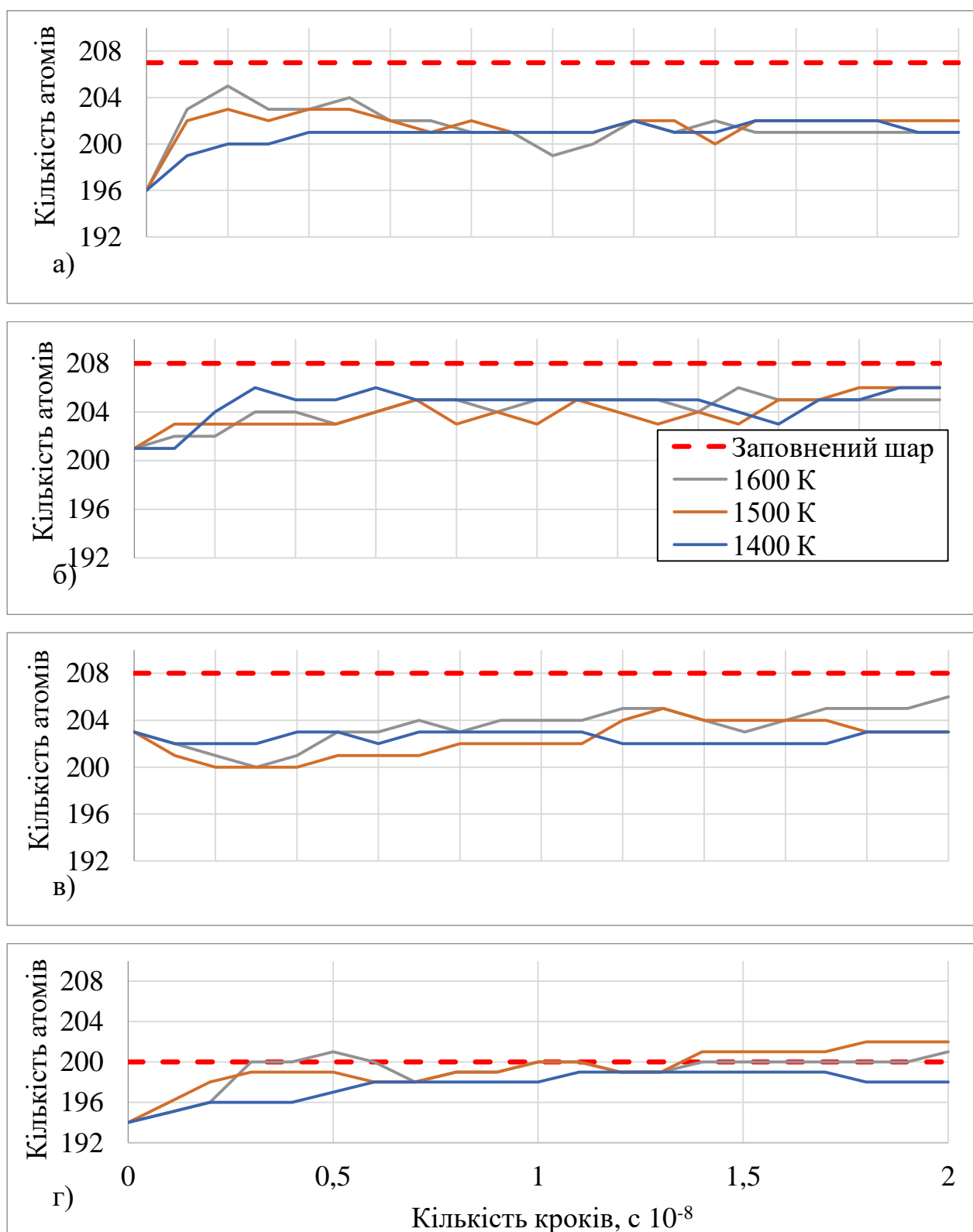


Рисунок 3.11 – Залежність кількості атомів у поверхневих шарах Pt від часу для 3-го (а), 4-го (б), 5-го (в), 6-го (г) шару при температурах 1400 К, 1500 К та 1600 К

3 шар: після переходу до рівноважного стану, тримається більш-менш постійна концентрація вакансій, яка складає за температури 1600 К – 2,9%, 1500 К – 2,4%, 1400 – 2,9%.

4 шар: після переходу до рівноважного стану, тримається більш-менш постійна концентрація вакансій і в подальшому містить не більше 1 вакансії на шар.

5 шар: після переходу до рівноважного стану, тримається більш-менш постійна концентрація вакансій.

6 шар: при усіх температурах даний шар швидко заповнюється атомами і в подальшому містить не більше 1 вакансії на шар.

3.3 Дифузійні характеристики поверхневих шарів

Як відомо дифузія залежить ввід ступеня дефектності структури матеріалу. Нами було доведено, що вільна поверхня для ідеального кристалу є дефектом, який спричиняє появу напружень. Ці напруження, в свою чергу, спричиняють появу нових дефектів – вакансій. Оскільки напруження викликані вільною поверхнею з'являються тільки в декількох поверхневих шарах, то і кількість вакансій збільшується саме в цих шарах. А оскільки коефіцієнт дифузії прямо пропорційний концентрації вакансій, то ми можемо стверджувати, що вільна поверхня впливає на дифузійні характеристики поверхневих шарів.

Детально розглянемо зміну дифузійних характеристик для кожної грані Pt, які моделювались.

Для порівняння була обрахована рівноважна концентрація вакансій в об'ємі. Для чого були розраховані енергія утворення вакансій за методикою п.2.6 (формула 2.9) з якої за формулою 2.8 безпосередньо була обрахована рівноважна концентрація вакансій.

Енергія утворення вакансій в об'ємі Pt склала для 1400 К – 1,65 +/- 0,05 eВ, для 1500 К – 1,67 +/- 0,05 eВ, для 1600 К – 1,7 +/- 0,05 eВ.

Відповідно рівноважна концентрація вакансій для всіх температур склала близько 0,003 +/- 0,001%. Така велика похибка пояснюється малою кількістю

експериментів які ми встигли зробити, але для нашого випадку нам важливий порядок величини і ми його отримали.

В таблиці 3.1 представлені значення найбільших рівноважних концентрацій серед поверхневих шарів, які ми отримали в попередньому розділі.

Таблиця 3.1 – Значення рівноважної концентрації вакансій в об'ємі

Температура К	Рівноважна концентрація в об'ємі %	Найбільша рівноважна серед поверхневих шарів, %		
		Грань (111)	Грань (001)	Грань (011)
1400	0,003	1,66	1,85	0,93
1500	0,003	1,42	1,09	0,81
1600	0,003	1,35	1,01	0,64

Як бачимо, для всіх граней спостерігається тенденція до зменшення концентрації вакансій зі зменшенням температури. Хоча, як відомо, зі збільшенням температури рівноважна концентрація вакансій повинна збільшуватись.

Ми це пояснюємо тим, що в нашому випадку головною рушійною силою виникнення вакансій є напруження викликані вільною поверхнею, а не температура. І в нашому випадку напруження зменшується з температурою.

Для грані (111) Pt найбільша концентрація вакансій склала від 1,66% при 1400 К до 1,35% при 1600 К, що в 550 – 450 разів більше за рівноважну концентрацію вакансій в об'ємі Pt і відповідно за коефіцієнт дифузії.

Для грані (001) Pt найбільша концентрація вакансій склала від 1,85% при 1400 К до 1,01% при 1600 К, що в 600 – 340 разів більше за рівноважну концентрацію вакансій в об'ємі Pt і відповідно за коефіцієнт дифузії.

Для грані (011) Pt найбільша концентрація вакансій склала від 0,93% при 1400 К до 0,64% при 1600 К, що в 310 – 20 разів більше за рівноважну концентрацію вакансій в об'ємі Pt і відповідно за коефіцієнт дифузії.

Вакансії, для всіх розглянутих граней, мають переважно шарувате розташування, як і напруження. Тому вищезгадані коефіцієнти дифузії для розглянутих граней мають переважні напрямки розташовані в площинах паралельних поверхні. В площинах перпендикулярних поверхні, коефіцієнт дифузії буде близький до об'ємного.

3.4 Висновки до розділу 3

1. Вільна поверхня впливає на дифузійні характеристики поверхневих шарів Pt, викликаючи в них напруження, які частково релаксують за рахунок виникнення в них додаткових вакансій, які в свою чергу впливають на коефіцієнт дифузії.

2. Коефіцієнт дифузії в поверхневих шарах Pt при температурах 1400 К – 1600 К приблизно на 2 порядки перевищує коефіцієнт дифузії в об'ємі.

3. З підвищенням температури напруження в поверхневих шарах зменшуються, що призводить до зменшення концентрації вакансій і зменшення відношення коефіцієнта дифузії на поверхні до коефіцієнта дифузії в об'ємі.

4. Коефіцієнти дифузії для розглянутих граней Pt мають переважні напрямки розташовані в площинах паралельних поверхні.

4 РОЗРОБКА СТАРТАП-ПРОЕКТУ

Стартап як форма малого ризикового (венчурного) підприємництва впродовж останнього десятиліття набула широкого розповсюдження у світі через зниження бар'єрів входу в ринок (із появою Інтернету як інструменту комунікацій та збуту стало простіше знаходити споживачів та інвесторів, займатись пошуком ресурсів, перетинати кордони між ринками різних країн), і вважається однією із наріжних складових інноваційної економіки, оскільки за рахунок мобільності, гнучкості та великої кількості стартап-проектів загальна маса інноваційних ідей зростає.

Метою розділу є формування інноваційного мислення, підприємницького духу та формування здатностей щодо оцінювання ринкових перспектив і можливостей комерціалізації основних науково-технічних розробок, сформованих у попередній частині магістерської дисертації у вигляді розроблення концепції стартап-проекту в умовах висококонкурентної ринкової економіки глобалізаційних процесів [22].

4.1 Опис ідеї стартапу

Ідея проекту (табл. 4.1) направлена на здешевлення та економію ресурсів при дослідженні процесів що відбуваються в поверхневих шарах платини, під дією дефектів, за рахунок створення інтерактивної бази знань. Вона могла б підбирати необхідну орієнтацію та кількість атомарних шарів для мікроструктур з наперед заданими властивостями, для галузі електроніки (мікропроцесори, контролери та ін.), відновлювальної енергетики (сонячні батареї).

Таблиця 4.1 – Опис ідеї стартап-проекту

Зміст ідеї	Напрями застосування	Вигоди для користувача
Створення бази знань розподілу вакансій для платини в залежності від температури, розміру, відстані від поверхні, з метою використання даних	Наукові дослідження сплавів на основі титану.	Економія від зменшення кількості експериментальних досліджень необхідних для підбору технологічних параметрів
для підбору технологічних параметрів для виготовлення та експлуатації нанорозмірних пристроїв.	Електроніка, сонячна енергетика	Економія від зменшення кількості експериментальних досліджень необхідних для підбору технологічних параметрів

4.2 Розрахунок планової кошторисної собівартості НДР

Науково-дослідницька робота проведена на кафедрі Фізики металів КПІ ім. Ігоря Сікорського. Планова собівартість визначається за наступними видатковими статтями:

- вартість матеріалів, що необхідні для виконання НДР;
- вартість обладнання для проведення експерименту;
- заробітна плата науково-виробничого персоналу;
- єдиний соціальний внесок;
- роботи і послуги сторонніх організацій;
- службові відрядження;
- інші прями невраховані витрати;
- накладні витрати.

4.2.1 Визначення вартості матеріалів, необхідна для проведення досліджень

Робота носить теоретичний характер та передбачає моделювання процесів дифузії в монокристалі Pt. Матеріали в процесі дослідження не використовувалися.

4.2.2 Визначення вартості спеціального обладнання і приладів

Всі роботи виконуються на вже наявному обладнанні. Витрати на утримання та експлуатацію обладнання відносяться до накладних витрат.

4.2.3 Визначення заробітної плати науково-виробничого персоналу

Витрати на оплату праці розраховують на основі даних про трудомісткість окремих робіт по темі та посадових окладів безпосередніх їх виконавців (враховуючи кількість виконавців, їхню кваліфікацію і завантаженість роботою на різних етапах НДР) [23].

При виконанні даної НДР приймали участь два виконавці: старший науковий співробітник та інженер-дослідник. Для КПІ ім. Ігоря Сікорського тарифні ставки сумарної місячної заробітної плати складають:

- старшого наукового співробітника – 10746 грн.;
- інженера-дослідника – 5491.

Середньоденна заробітна плата за категоріями виконавців розраховується шляхом ділення їх посадового місячного окладу на 21,2 (де 21,2 – усереднене число робочих днів за місяць). Вона становить:

- інженер-дослідник – 259,01 грн.;
- старший науковий співробітник – 506,88.

Трудомісткість різних етапів виконання НДР встановлюється на базі експертних оцінок, які дають провідні фахівці. При цьому НДР розглядається як сукупність макроетапів, аналіз кожної окремої операції не проводиться. Результати експертної оцінки трудомісткості етапів НДР наведені в таблиці 4.2.

Величина заробітної плати виконавців (ЗП) обчислюється як сума добутоків трудомісткості і денної заробітної плати кожного з них:

$$\Phi ЗП = 506,88 \times 42 + 259,01 \times 75 = 40714,71 \text{ грн}$$

Таблиця 4.2 – Заробітня плата науково-виробничого персоналу

Макроетапи НДР	Трудомісткість, люд.-дні	
	Старший науковий співробітник	Інженер-дослідник
1. Аналіз фахових публікацій з теми	7	10
2. Обґрунтування мети та напрямів досліджень	4	7
3. Проведення теоретичного експерименту	6	10
4. Побудова та аналіз: залежності розподілу атомів по глибині, функції радіального розподілу, міжплощинних відстаней та напружень	18	25
5. Обговорення результатів НДР	6	8
6. Оформлення результатів	1	15
Всього	42	75

4.2.4 Визначення розміру єдиного соціального внеску

Єдиний внесок на загальнообов'язкове державне соціальне страхування обов'язковий платіж до системи загальнообов'язкового державного соціального страхування, що справляється в Україні з метою забезпечення страхових виплат за поточними видами загальнообов'язкового державного соціального страхування.

Згідно з діючим законодавством єдиний соціальний внесок складає 22% від заробітної плати [24].

$$V_C = 0,22 \times 40714,71 = 8957,24 \text{ грн.}$$

Відповідно він складає 8957,24 грн.

4.2.5 Визначення вартості робіт і послуг сторонніх організацій

При виконанні даної НДР сторонні організації не залучались.

4.2.6 Визначення витрат на службові відрядження

Згідно з планом даної НДР службові відрядження не передбачаються.

4.2.7 Визначення інших прямих нарахованих витрат

Витрати по цій статті визначаються у розмірі 10% від суми всіх врахованих планових прямих витрат по темі:

$$C_{\text{інш}} = 0,1 \times (\text{ФЗП} + V_C + C_M), \quad (4.1)$$

де ФЗП – фонд заробітної плати;

V_C – єдиний соціальний внесок;

C_M – повна сума витрат на матеріали

$$C_{\text{інш}} = 0,1 \times (40714,71 + 8957,24 \text{ грн.}) = 4967,19 \text{ грн.}$$

4.2.8 Визначення накладних витрат по темі дипломної роботи

До накладних витрат відносять:

- адміністративну заробітну плату - управлінського персоналу, господарського та обслуговуючого персоналу з нарахуванням органам страхування;
- витрати на придбання експериментального обладнання та приладів;
- витрати по охороні праці та на техніку безпеки;

- амортизація приладів, устаткування та установок;
- виграти на воєнізовану охорону;
- інші загальногосподарські та дослідницькі витрати, тощо.

Норматив відрахувань на накладні витрати (Нв) для КПІ ім. Ігоря Сікорського встановлений в розмірі 16% планової сумарної вартості виконання НДР [44]. Розраховуємо величину накладних витрат наступним чином:

$$H_B = 0,16 \times (\Phi ЗП + B_C + C_M + C_{\text{інш}}), \quad (4.2)$$

де ФЗП – фонд заробітної плати;

B_C – єдиний соціальний внесок;

C_M – повна сума витрат на матеріали;

$C_{\text{інш}}$ – інші прямі невраховані витрати

$$H_B = 0,16 \times (40714,71 + 8957,24 + 4967,19) = 8742,26 \text{ грн}$$

4.2.9 Визначення планової кошторисної вартості НДР

Зроблені розрахунки дозволяють визначити загальну планову кошторисну вартість виконання НДР. Плановий кошторис витрат по темі досліджень наведено в табл. 4.3.

Таблиця 4.3 – Калькуляція планової кошторисної вартості НДР

Стаття витрат	Позначення	Сума	
		грн.	%
1	2	3	4
1. Фонд заробітної плати виконавців теми	ФЗП	40714,71	64,24

Продовження табл. 4.3

1	2	3	4
2. Єдиний соціальний внесок	V_c	8957,24	14,13
3. Матеріали, що необхідні для виконання НДР	C_M	—	—
4. Спеціальне обладнання для наукових робіт	$C_{об}$	—	—
5. Роботи і послуги сторонніх організацій	$C_{стор}$	—	—
6. Витрати на службові відрядження	$C_{від}$	—	—
7. Інші прямі невраховані витрати	$C_{інш}$	4967,19	7,84
8. Накладні витрати	H_B	8742,26	13,79
Всього		63381,40	100

4.3 Ефективність проведення НДР

Дослідження, що проводяться в даній роботі, мають пошуковий та теоретичний характер. У такому випадку слід використовувати бальну систему оцінки економічної ефективності за наступними показниками [23]:

- важливість розробки;
- можливість використання результатів;
- теоретичне значення та рівень новизни дослідження;
- складність дослідження.

Частку сумарного річного економічного ефекту, що утвориться за кожною з перелічених шкал, позначають умовно відповідним номеру шкали коефіцієнтом (K_1, K_2, K_3, K_4).

Коефіцієнт K_1 може приймати наступні значення:

- а) ініціативна робота, яка не входить до складу комплексної програми та не є завданням директивних органів – 1 бал;
- б) робота виконується за угодою про науково-технічне співробітництво – 3 бали;
- в) робота являє собою частину відомчої програми – 5 балів;
- г) робота являє собою частину комплексної міжвідомчої програми з елементами впровадження результатів – 7 балів;
- д) робота є частиною міжнародної комплексної програми – 8 балів.

Коефіцієнт K_2 може приймати такі значення:

- а) результати розробки можна використати тільки в даному підрозділі – 1 бал;
- б) результати розробки можуть бути використані тільки однією організацією – 3 бали;
- в) результати розробки можуть бути використані багатьма організаціями – 5 балів.
- г) результатами розробки можуть користуватися в масштабах однієї галузі – 8 балів;
- д) результатами розробки можуть користуватися в різних галузях – 10 балів.

Коефіцієнт K_3 може приймати такі значення:

- а) робота являє собою аналіз, узагальнення або класифікацію відомої інформації, подібні результати раніше були відомі в досліджуваній галузі – 2 бали;
- б) під час виконання роботи отримана нова інформація, яка доповнює уявлення про сутність досліджуваних процесів – 3 бали;
- в) внаслідок виконання роботи отримана нова інформація, яка частково змінює уявлення про природу досліджуваних процесів – 5 балів;

г) внаслідок виконання НДР створені нові теорії, методики або що-небудь подібне – 6 балів;

д) отримана інформація формує принципово нові уявлення, які не були відомі раніше – 8 балів.

Коефіцієнт K_4 може приймати такі значення:

а) роботу виконує один підрозділ, витрати до 10 000 гривень – 1 бал;

б) роботу виконує один підрозділ, витрати від 10 000 до 50 000 гривень – 3 бали;

в) роботу виконує один підрозділ, витрати від 50 000 до 100 000 гривень – 5 балів;

г) робота виконується багатьма підрозділами, витрати від 100 000 до 200 000 гривень – 7 балів;

д) робота виконується багатьма організаціями, витрати більше 200 000 гривень – 9 балів.

Бальна оцінка економічної ефективності даної науково-дослідницької роботи наведена у табл. 4.4.

Загальна оцінка в балах (Б) визначається наступною формулою:

$$B = K_1 \times K_2 \times K_3 \times K_4, \quad (4.3)$$

де K_1 – показник важливості роботи;

K_2 – показник можливості використання результатів;

K_3 – показник вагомості теоретичного значення та рівня новизни дослідження;

K_4 – показник складності дослідження

В нашому випадку бальна оцінка ефективності згідно табл. 4.4 становить:

$$B = 1 \times 8 \times 5 \times 5 = 200$$

Умовний річний економічний ефект науково-дослідницької роботи визначається:

$$У_{\text{ЕНДР}} = 500 \times Б - E_{\text{Н}} \times В_{\text{НДР}}, \quad (4.4)$$

де 500 – умовна вартість одного балу, грн.;

$E_{\text{Н}}$ – нормативний коефіцієнт економічної ефективності ($E_{\text{Н}} = 0,1 / 0,5$, для нашого розрахунку обираємо $E_{\text{Н}} = 0,2$);

$В_{\text{НДР}}$ – витрати на виконання НДР (планова річна кошторисна вартість виконання НДР, для нашого розрахунку $В_{\text{НДР}} = 63381,40$ грн.)

Таблиця 4.4 – Бальна оцінка ефективності НДР

Показник оцінки ефективності НДР	Умовне позначення показника	Характеристики даної роботи	Кількість балів
1. Складність дослідження	K_4	Роботу виконує один підрозділ, витрати від 50 000 до 100 000 гривень	5
2. Можливість використання результатів розробки	K_2	Результатами розробки можуть користуватися споживачі в межах однієї галузі	8
3. Важливість розробки	K_1	Робота ініціативна, не є завданням будь-яких директивних органів або частиною комплексної програми	1
4. Теоретична значимість та рівень новизни розробки	K_3	Внаслідок виконання роботи отримана нова інформація, яка частково змінює уявлення про природу досліджуваних процесів	5

Таким чином, умовний економічний ефект відповідно (4.4) становить:

$$Y_{\text{ЕНДР}} = 500 \times 200 - 0,2 \times 63381,40 = 87323,72 \text{ грн}$$

Коефіцієнт економічної ефективності НДР визначається за формулою:

$$E_{\text{ЕНДР}} = Y_{\text{ЕНДР}} / B_{\text{ЕНДР}} \quad (4.5)$$

Підставивши значення у формулу (4.5) знайдемо коефіцієнт економічної ефективності:

$$E_{\text{ЕНДР}} = 87323,72 / 63381,40 = 1,38$$

Отримана розрахункова величина коефіцієнта економічної ефективності НДР ($E_{\text{ЕНДР}}$) свідчить про доцільність виконання даної роботи.

Визначення сильних, слабких та нейтральних характеристик ідеї проекту наведено в таблиці 4.5.

Таблиця 4.5 – Визначення сильних, слабких та нейтральних характеристик ідеї проекту

№	Техніко-економічні характеристики ідеї	Товари/концепції конкурентів		W	N	S
		Мій проект	Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова			
1	2	3	4	5	6	7
1	Розподіл дефектів	Розподіл дефектів тільки для нанорозмірних систем, при ідеальній поверхні	Складність проведення експерименту	+		

Продовження табл. 4.5

1	2	3	4	5	6	7
2	Ціна	Незначні витрати на електроенергію і обчислювальний кластер	Велика кількість експериментів на дорогому обладнанні над коштовними зразками з їх можливим знищенням			+
3	Час	Пропорційний розміру систем	Пропорційний складності системи		+	

Примітка: W - слабка сторона, N - нейтральна сторона, S - сильна сторона.

За рахунок низької ціни за рахунок використання персональних комп'ютерів, ідея проекту матиме підґрунтя для формування конкурентоспроможності.

4.4 Технологічний аудит ідеї проекту

Технологічна здійсненність проекту наведена в таблиці 4.6.

Таблиця 4.6 – Технологічна здійсненність ідеї проекту

№ п/п	Ідея проекту	Технології її реалізації	Наявність технологій	Доступність технологій
1	Створення бази знань розподілу вакансій	За допомогою комп'ютерного моделювання.	Технологія наявна, добре вивчена та випробувана	Доступне

При обраній технології можлива реалізації ідеї проекту, при наявності необхідного обсягу інвестицій. Варто відмітити легкодоступність та низьку собівартість даного дослідження.

4.5 Аналіз ринкових можливостей запуску стартап-проекту

Характеристика потенційних клієнтів стартап-проекту наведено в таблиці 4.7.

Таблиця 4.7 – Характеристика потенційних клієнтів стартап-проекту

№ п/п	Потреба, що формує ринок	Цільова аудиторія (цільові сегменти ринку)	Відмінності у поведінці різних потенційних цільових груп клієнтів	Вимоги споживачів до товару
1	Готові бази знань з вакансійним розподілом	Наукові інститути, енергетика, електроніка	енергетика та електроніка будуть потребувати найбільшої наповненості баз знань	Наявність значень дифузійних характеристик для платини

Після визначення потенційних груп клієнтів проведено аналіз стану ринкового середовища (табл.4.8 та 4.9): розроблені таблиці факторів, котрі сприяють ринковому впровадженню проекту та його реалізації, а також факторів, що йому перешкоджають.

Таблиця 4.8 – Фактори загроз стартап-проекту – розробка бази знань вакансійного розподілу в шарах платини та інших металів

№ п/п	Фактор	Зміст загрози	Можлива реакція компанії
1	Нестабільність політичної та економічної ситуації	Зменшення темпів інвестування	Приймання участі у програмах, в тому числі міжнародних, для залучення додаткових інвестицій.
2	Розвиток принципово нових технологій (спінтроніка чи інше)	Зникнення існуючих клієнтів пов'язане з повною втратою їх релевантності	Перекваліфікація, та дослідження матеріалів необхідних новій галузі

Таблиця 4.9 – Фактори можливостей стартап-проекту – розробка бази знань вакансійного розподілу в шарах платини та інших металів

№ п/п	Фактор	Зміст можливості	Можлива реакція компанії
1	Зменшення собівартості досліджень розподілу вакансій	Зменшення енерго- та матеріальних затрат, чи підвищення продуктивності при тих самих витратах	Зростання темпів дослідження

Перелік ринкових загроз та ринкових можливостей розроблений на основі аналізу факторів загроз та факторів можливостей маркетингового середовища. Ринкові загрози та ринкові можливості є наслідками впливу факторів, і, на

відміну від них, ще не є реалізованими на ринку та мають певну ймовірність здійснення.

Заключним етапом ринкового аналізу можливостей впровадження проекту є складання SWOT-аналізу (матриці аналізу сильних (Strength) та слабких (Weak) сторін, загроз (Troubles) та можливостей (Opportunities) який наведений в таблиці 4.10.

Таблиця 4.10 – SWOT-аналіз стартап-проекту

<p style="text-align: center;">Сильні сторони:</p> <ul style="list-style-type: none"> – наявність великої кількості інформації стосовно МД та малі енерговитрати 	<p style="text-align: center;">Слабкі сторони:</p> <ul style="list-style-type: none"> – вузька область застосування – розподіл вакансій розрахований лише для платини
<p style="text-align: center;">Можливості:</p> <ul style="list-style-type: none"> – розробка нових, модернізованих технологій виробництва – розвиток альтернативних джерел енергії 	<p style="text-align: center;">Загрози:</p> <ul style="list-style-type: none"> – відсутність висококваліфікованих працівників – політична та економічна криза в країні, відсутність інвестицій в енергетику та електроніку

4.6 Висновки до розділу 4

1. Аналіз ринкової спроможності стартап-проекту «Створення бази знань дифузійних характеристик платини» показав, що даний напрямок є актуальним і перспективним.

2. Конкурентні технології, які використовуються на сьогодні, не в змозі забезпечити всіх тих переваг, які дозволяє досягти запропонована у стартап-проекті методика. Це залишає шанси на впровадження, при покращенні вихідних умов.

5 ОХОРОНА ПРАЦІ ТА БЕЗПЕКА В НАДЗВИЧАЙНИХ СИТУАЦІЯХ

Метою даного розділу є забезпечення належних умов праці під час дослідження процесів структурних змін в поверхневих шарах Pt на гранях (001), (011), (111) під дією точкових дефектів та вільної поверхні.

У даному розділі розглянуто засоби охорони праці під час виконання досліджень, що переважно проводились на персональному комп'ютері.

5.1 Аналіз шкідливих і небезпечних виробничих факторів

Під час роботи за ПЕОМ можливий вплив таких шкідливих факторів:

- шум та вібрація;
- інфразвук;
- ультразвук;
- електромагнітне випромінювання;
- виробниче випромінювання;
- іонізація повітря.

5.1.1 Шум та вібрація

Створюються у результаті роботи таких елементів комп'ютерів, як жорсткий диск, вентилятори блоку живлення, охолодження мікропроцесора; швидкісні CD-ROM (DVD-ROM); механічні сканери; механічні частини принтера. Також діють й інші зовнішні джерела шуму, не пов'язані з роботою ПК.

Рівні звукового тиску в октавних смугах частот, рівні звуку та еквівалентні рівні звуку на робочих місцях, обладнаних ВДТ ЕОМ і ПЕОМ, мають відповідати вимогам НПАОП 0.00-1.31-99 [25].

Виробничі приміщення для роботи з ВДТ (операторські, диспетчерські) не повинні межувати з приміщеннями, в яких рівні шуму і вібрації перевищують допустимі значення (виробничі цехи, майстерні тощо). Нормування здійснюється за ДСН 3.3.6.037-99 [26] та ДСН 3.3.6.039-99 [27].

5.1.2 Інфразвук

Причиною є вентилятори та інші рухомі елементи обладнання із частотою рухів менше ніж 20 Гц або 1200 об/хв.

5.1.3 Ультразвук

Супутній фактор під час експлуатації технологічного та вентиляційного устаткування. Устаткування, що становить джерело шуму (аналого-цифрові перетворювачі (АЦП), принтери, сканери тощо), слід розташовувати поза приміщенням для роботи ВДТ ЕОМ і ПЕОМ.

Для забезпечення допустимих рівнів шуму на робочих місцях слід застосовувати засоби звукопоглинання, вибір яких має обґрунтовуватись спеціальними інженерно-акустичними розрахунками.

Як засоби шумопоглинання потрібно застосовувати негорючі або важкогорючі спеціальні перфоровані плити, панелі, мінеральну вату з максимальним коефіцієнтом звукопоглинання в межах частот 31,5 – 8000 Гц, або інші матеріали аналогічного призначення. Крім того, необхідно застосовувати підвісні стелі з аналогічними властивостями.

Звукоізоляція огорожувальних конструкцій приміщень із ВДТ має забезпечувати параметри шуму, що відповідають вимогам ДСН 3.3.6.037-99 [26].

Під час виконання робіт із ВДТ ЕОМ і ПЕОМ у виробничих приміщеннях значення характеристик вібрації на робочих місцях не повинні перевищувати допустимих, відповідно до ДСН 3.3.6.039-99 [27].

5.1.4 Електромагнітне випромінювання

Дисплеї, сконструйовані на основі електронно-променевої трубки, є джерелами низькочастотного, наднизькочастотного та високочастотного електромагнітного випромінювань, м'якого рентгенівського, ультрафіолетового, видимого та інфрачервоного випромінювань, а також електростатичного поля.

Джерелами електромагнітних випромінювань також є мережі живлення (частота 50 Гц), система рядкового розгорнення (2400 кГц), блок модуляції

променя (5-10 МГц).

Згідно із НПАОП 0.00-1.31-99 «Правила охорони праці під час експлуатації електронно-обчислювальних машин» характеристики електромагнітного поля на робочих місцях із ВДТ (як у зоні екрана дисплея, так і на поверхнях обладнання, клавіатури, друкувального пристрою) не повинні перевищувати граничнодопустимих.

Іонізуючі електромагнітні (рентгенівські) випромінювання на відстані 0,05 м від екрана до корпусу відео терміналу за будь-яких положень регульовальних пристроїв не повинні перевищувати $7,74 \cdot 10^{-12}$ А/кг, що відповідає еквівалентній дозі 0,1 мбер/год (100 мкР/год) відповідно до НРБУ №58.

Теплові випромінювання впливають на створення несприятливих Мікрокліматичних умов у виробничих приміщеннях і, як наслідок, на організм людини. Ефективність такого впливу залежить від густини потоку енергії інфрачервоних випромінювань, довжини хвилі, тривалості й зони (ділянки) впливу. Останній може бути загальним і локальним.

Небезпеку теплового впливу на організм людини оцінюють за густиною потоку енергії інфрачервоних випромінювань. Повітря для інфрачервоних випромінювань теплопрозоре. Інтенсивність теплового опромінювання людини від нагрітих поверхонь технологічного устаткування, освітлювальних приладів, інсоляції на постійних і непостійних робочих місцях не повинна перевищувати 35 Вт/м^2 у разі опромінення 50% поверхні тіла, 70 Вт/м^2 – у разі опромінення від 25% до 50% та 100 Вт/м^2 – у разі опромінення до 25% поверхні тіла.

Допустима напруженість електричного поля ВДТ – 20 кВ/м.

У разі дії на повітряне середовище радіоактивного, рентгенівського та ультрафіолетового випромінювань, у залах електронно-обчислювальних машин (ЕОМ), у приміщеннях з відеодисплейними терміналами необхідно контролювати іонізацію повітря робочої зони [28].

5.1.5 Іонізація повітря

Іонізація повітря – це процес перетворення нейтральних атомів і молекул повітряного середовища на електрично заряджені іони (частинки).

Нормативні величини (значення) іонізації повітряного середовища приміщень для роботи з ВДТ ЕОМ та ПЕОМ повинні відповідати НПАОП 0.00-1.31-10 [29].

5.1.6 Електростатичне поле між екраном і оператором

Напруженість електростатичного поля між екраном дисплея та оператором переважно становить 5 – 15 кВ/м, що не перевищує норми, але це призводить до зменшення кількості негативних іонів у повітрі приміщення. Електростатичні заряди утворюються на поверхні клавіатури та миші персонального комп'ютера в результаті тертя і можуть досягати значень 12 – 20 кВ/м.

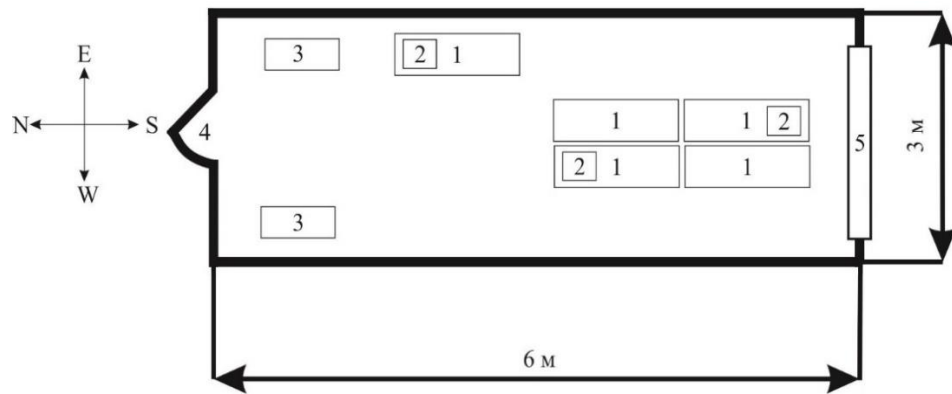
5.1.7 Аналіз параметрів приміщення та мікроклімату в приміщенні

Науково-дослідницька робота виконувалась на кафедрі фізики металів КПП ім. Ігоря Сікорського в аудиторії № 504, 5 поверху, корпусу № 9. Схематичне зображення аудиторії, а також розташування всіх елементів представлено на рис. 5.1.

Вимірювання приміщення аудиторії та вікон дали наступні результати:

- розміри аудиторії: ширина – 3 м, довжина – 6 м, висота – 2,7 м.
- розміри вікон: ширина – 2,7 м, висота – 2,5 м.

Аудиторія, в якій працює двоє чоловік має площу 18 м^2 , об'єм 49 м^3 . Площа, яка приходить на одну людину – 9 м^2 , об'єм $\sim 24,5 \text{ м}^3$. Таким чином площа та об'єм аудиторії, згідно з ДБН В.2.2-28-2010, де на одну людину повинно приходитись не менше 6 м^2 площі та 20 м^3 об'єму, відповідають нормам [30].



1 – робочий стіл; 2 – комп'ютер; 3 – шафа; 4 – двері; 5 – вікно

Рисунок 5.1 – Схема аудиторії в якій виконувалася науково-дослідницька робота

Для забезпечення оптимального мікроклімату «Санітарні норми мікроклімату виробничих приміщень» ДСН 3.3.6.042-99 встановлюють оптимальні і допустимі температуру, відносну вологість та швидкість руху повітря в робочій зоні в залежності від пори року та категорії важкості робіт [31].

Згідно ДСН 3.3.6.042-99 категорія важкості робіт – I а. Ця категорія містить легкі фізичні роботи до 120 Ккал/год., що виконуються сидячи і не потребують фізичного напруження. Результати дослідження та нормовані величини параметрів мікроклімату в робочій зоні аудиторії № 504 наведені в табл. 5.1.

Таблиця 5.1 – Нормовані величини параметрів мікроклімату в робочій зоні

Категорія робіт	Параметр мікроклімату	Період року	Нормовані значення		Дані вимірювань	Вентиляція
			Оптимальне	Допустиме		
1	2	3	4	5	6	7
Легка 1 а	Температура, °С	Теплий	23-25	21-28	25	Природна

Продовження табл. 5.1

1	2	3	4	5	6	7
Легка 1 а	Температура, °С	Холодний	22-24	20-24	22	Природна
	Відносна вологість повітря, %	Теплий	40-60	<60	42	Природна
		Холодний	40-60	<75	55	Природна
	Швидкість руху повітря, м/с	Теплий	0,1	0,1-0,2	0,25	Природна
		Холодний	0,1	<0,1	0,25	Природна

Відповідно до даних таблиці та даних наведених в нормативно-правових актах можна зробити висновок, що аудиторія в якій проводилась дана НДР відповідає вимогам санітарних норм.

5.1.8 Виробниче випромінювання

Нормування даних про виробничі випромінювання виконується за документом: Санітарні правила і норми «Гігієнічні вимоги до відеодисплейних терміналів і ПЕОМ і організації роботи» ДСанПіН 3.3.2-007-98 [33]. При роботі з ЕОМ, яка входить в устаткування, виникає небезпека впливу на організм робітника:

- невикористаного рентгенівського випромінювання;
- ультрафіолетового випромінювання;
- електростатичного поля.

Для попередження соматичних та генетичних наслідків у відповідності з СП 1960-79 для побутової радіоелектронної апаратури (РЕА) встановлені норми потужності експозиційної дози рентгенівського випромінювання, яке не повинно перевищувати $2,78 \times 10^{-12}$ мкР/с (100 мкР/год) в будь-якій точці на відстані 5 см

від зовнішньої поверхні, яка обернена до оператора. Потужність експозиційної дози НРВ в будь-якій точці простору на відстані 0,05 м від корпусу установки не повинна перевищувати 0,07 мкР/с при робочому тижні 41 год. Враховуючи що робота більшою частиною проводиться за ЕОМ, запропоновано щоб час роботи за монітором не перевищував 4 години за зміну, з технологічними перервами [32].

5.1.9 Вимоги до організації робочого місця

Вимоги до організації роботи з візуальними дисплейними терміналами електронно-обчислювальних машин ДСанПН 3.3.2.007-98. Ці правила призначені для запобігання несприятливої дії на працівників шкідливих факторів, які супроводжують роботу з ВДТ, пов'язаною з зоровим і нервово-емоційним напруженням, що виконується у вимушеній робочій позі при локальному напруженні верхніх кінцівок на фоні обмеженої загальної м'язової активності (гіподинамії) під впливом комплексу фізичних факторів шуму, електростатичного поля, неіонізуючих та іонізуючих електромагнітних випромінювань.

Конструкція робочого місця користувача ПК повина забезпечувати підтримання оптимальної робочої пози з такими ергономічними характеристиками: ступні ніг – на підлозі або на підставці для ніг; стегна – в горизонтальній площині; передпліччя – вертикально; лікті – під кутом 70° – 90° до вертикальної площини; зап'ястя зігнуті під кутом не більше 15° – 20° відносно вертикальної площини [33].

Кут між поздовжніми осями основного та приставного столів має бути 90° – 140° . Висота робочої поверхні столу для ПУ має бути в межах 680 – 800 мм, а ширина – забезпечувати можливість виконання операцій в зоні досяжності моторного поля. Рекомендовані розміри столу: висота – 725 мм, ширина – 600 мм – 1400 мм глибина – 800 мм – 1000 мм [32]. Робочий стіл для ПК повинен мати простір для ніг висотою не менше 600 мм, шириною не менше 500 мм, глибиною на рівні колін не менше 450 мм, на рівні витягнутої ноги – не менше 650 мм [29].

5.2 Інженерні рішення для забезпечення безпеки праці

5.2.1 Електробезпека

При виконанні даної НДР використовувались такі електроприлади як комп'ютери та організаційна техніка (принтер). Живлення відбувається від джерела змінного струму з напругою 220 В та частотою 50 Гц. В аудиторії струмонепровідна підлога та низька вологість, тобто відноситься до приміщень без підвищеної небезпеки згідно з діючими правилами з точки зору небезпеки враження людини електричним струмом.

Головними чинниками ураження електричним струмом є: клас приміщення за ступенем безпеки враження електричним струмом, сила враження, опір людини, сила струму, величина напруги, тривалість дії струму, шлях проходження через тіло, вплив навколишнього середовища.

Дія електричного струму на організм людини:

- термічна дія. Характеризується нагрівом тканин, опіками;
- електролітична дія. Характеризується розкладанням органічних рідин, в тому числі крові;
- біологічна дія. Проявляється в порушенні біоелектричних процесів та супроводжується подразненням та збудженням живих тканин та скороченням м'язів.

Людина потрапляє під дію електричного струму:

- у разі випадкового дотикання до струмопровідних частин електроустановки або наближення до цих частин на неприпустимо близьку відстань;
- під час виникнення в електроустановці аварійного режиму (ушкодження ізоляції, обрив проводів тощо).

Аналізуючи умови виникнення електричного кола через тіло людини, розрізняють безпосередній контакт людини зі струмопровідними частинами і опосередкований. Непрямий контакт настає під час пробою ізоляції на корпусі обладнання. Найчастішим і найхарактернішим випадком дотикання людини до струмопровідних частин є однофазне дотикання.

При однофазному дотиканні в мережі з глухозаземленою нейтраллю струм, що проходить через тіло людини, піде по ланцюгу: фаза – тіло людини – долівка (грунт) – заземлювач нейтралі – нейтраль (нульова точка джерела живлення). Під час двухфазного дотикання незалежно від режиму нейтралі людини буде під лінійною напругою мережі. Двухфазне дотикання надзвичайно небезпечне.

Основні технічні засоби і заходи забезпечення електробезпеки при нормальному режимі роботи електроустановок включають:

- ізоляцію струмовідних частин;
- недоступність струмовідних частин;
- блоківки безпеки;
- засоби орієнтації в електроустановках;
- виконання електроустановок, ізольованих від землі;
- захисне розділення електричних мереж;
- компенсацію ємнісних струмів замикання на землю;
- вирівнювання потенціалів.

У аудиторії, де проводилися дослідження, правильно виконане захисне заземлення корпусів, електроустаткування і приладів. Робочі місця розташовані таким чином, щоб виключити можливість одночасного доторкання до корпусів, електроустаткування і приладів.

5.2.2 Аналіз освітленості приміщення

Освітлення може бути природнім (прямі сонячні промені) та штучним (електричні джерела освітлення). При невідповідності нормам, природнє освітлення може доповнюватись штучним. В залежності від характеристики зорової роботи, найменшого розміру об'єкта розрізнення, розряду зорової роботи (I-VIII), системи освітлення, характеристики фону, контрасту об'єкта розрізнення з фоном відбувається регламентація відповідно до ДБН В.2.5.28-2006 [34].

Природнє освітлення поділяється на: бокове (одно- або двостороннє), що здійснюється через світлові отвори (вікна) в зовнішніх стінах; верхнє – через

ліхтарі та отвори в дахах і перекриттях; комбіноване – поєднання верхнього та бокового освітлення.

Погане освітлення робочих місць є однією з причин низької продуктивності праці. При недостатньому освітленні очі працюючого напружені, при цьому складно відрізнити оброблювані предмети, знижується темп роботи, погіршується загальний стан організму людини.

Дана НДР виконувалась в аудиторії в № 504 9 корпусу. В даній аудиторії знаходиться одне джерело природнього бокового освітлення а саме вікном з північного боку. Відстань до місця основної роботи складає 3 м. Виконувану роботу можна віднести до роботи середньої точності (четвертий розряд зорових робіт). Освітлення в аудиторії поєднує в собі природні та штучні джерела. Для місцевого освітлення використовуються лампи розжарювання, для загального – люмінесцентні ЛБ-40 (10 одиниць у аудиторії).

5.3 Вентиляція

Вентиляцією називають організований і регульований повітрообмін, що забезпечує видалення з приміщення забрудненого повітря і подачу на його місце свіжого. Задачею вентиляції є забезпечення чистоти повітря і заданих метеорологічних умов у виробничих приміщеннях. За способом переміщення повітря розрізняють системи природної, механічної і змішаної вентиляції. Головним параметром вентиляції є повітрообмін, тобто обсяг повітря, що видаляється (L_v) або надходить у приміщення (L_n).

Обсяг припливу повітря L_n у приміщення повинний відповідати обсягу витяжки L_v . Різниця між цими обсягами не повинна перевищувати 10% – 15%. Система вентиляції повинна бути надійною в експлуатації і економічною.

5.3.1 Розрахунок продуктивності системи вентиляції

У аудиторії, де проводились дослідження – природна система вентиляції. Досліди виконувались з використання обрахункових потужностей чотирьох персональних комп'ютерів. При максимальних навантаженнях вони здатні

генерувати значну кількість тепла. Тому необхідний повітрообмін L_B визначався з умов асиміляції тепла за формулою [35]:

$$L_B = \frac{Q_{\text{над}}}{\rho_{\text{пр}} c_{\text{п}} (t_{\text{вид}} - t_{\text{пр}})}, \quad (5.1)$$

де $Q_{\text{над}}$ – надлишкові тепловиділення,

$\rho_{\text{пр}}$ – густина припливного повітря,

$c_{\text{п}}$ – теплоємність повітря,

$t_{\text{вид}}$ – температура повітря, що видаляється,

$t_{\text{пр}}$ – температура припливного повітря.

Відомо що тепловиділення одного персонального комп'ютера 250 ватт, 1 ккал/год = 1,163 ватт. Тобто надлишкові тепловиділення для 4 комп'ютер:

$$Q_{\text{над}} = \frac{250 \times 4}{1,163} = 859 \text{ ккал/год.}$$

Густина сухого повітря за температури 10° С і при нормальному тиску (760 мм. рт. ст.) становить 1,248 кг/м³. Температура, повітря що видаляється – 70° С. Температура припливного повітря – 10° С. Теплоємність сухого повітря 0,24 ккал/(кг·град).

Підставивши усі дані у формулу 5.1 отримаємо:

$$L_B = \frac{859}{1,248 \times c_{\text{п}}(70 - 10)} = 47,8 \text{ м}^3/\text{год.}$$

Отже необхідний повітрообмін, який повинен видалятися дорівнює 47,8 м³/год.

Провітрювання приміщення відбувалось шляхом аерації (організованої природної загальнообмінної вентиляції приміщень в результаті надходження і видалення повітря через фрамуги вікон). З частотою один раз на годину, тобто кратність повітрообміну K становить 1.

Для визначення припливного повітрообміну скористаємось розрахунком по кратності:

$$L_{\text{п}} = K \times V, \quad (5.2)$$

де V – об'єм приміщення.

З попередніх підрозділів відомо, що об'єм аудиторії становить 49 м^3 . Підставивши дані у формулу 5.2 отримаємо:

$$L_{\text{п}} = 1 \times 49 \text{ м}^3/\text{год.}$$

Тобто, обсяг припливу повітря складає $49 \text{ м}^3/\text{год.}$

Знайдемо співвідношення між обсягом припливу повітря та обсягом витяжки за формулою відсоткового співвідношення:

$$N = \frac{|L_{\text{п}} - L_{\text{в}}|}{L_{\text{п}}} \times 100\% \quad (5.3)$$

Підставивши значення в формулу 5.3 отримаємо:

$$N = \left| \frac{49 - 47,8}{49} \right| \times 100\% = 2,5 \%$$

Отже співвідношення між цими обсягами дорівнює $2,5\%$. З цього можна зробити висновок, що система вентиляції аудиторії, в якій проводились дослідження відповідає встановленим нормам.

5.4 Безпека в надзвичайних ситуаціях

Запобігання виникненню надзвичайних ситуацій техногенного та природного характеру – підготовка і реалізація комплексу правових, соціально-економічних, політичних, організаційно-технічних, санітарно-гігієнічних та інших заходів, спрямованих на регулювання техногенної та природної безпеки, проведення оцінки рівнів ризику, завчасне реагування на загрозу виникнення надзвичайної ситуації техногенного та природного характеру на основі даних моніторингу, експертизи, досліджень та прогнозів щодо можливого перебігу

подій з метою недопущення їх переростання у надзвичайну ситуацію техногенного та природного характеру або пом'якшення її можливих наслідків.

Під час виконання науково-дослідницької роботи можливе виникнення наступних надзвичайних ситуацій: пожежі, землетрусу, вибуху, аварії на електроенергетичних системах, руйнування будівлі.

5.4.1 Пожежна безпека

Пожежа відноситься до 1 класу надзвичайних ситуацій – ситуацій техногенного характеру. Визначення категорії приміщення проводиться з урахуванням показників пожежовибухонебезпечності речовин та матеріалів, що там знаходяться (використовуються) та їх кількості. Відповідно до НАПБ Б.03.002-2007 приміщення за вибухопожежною та пожежною небезпекою поділяються на п'ять категорій (А, Б, В, Г, Д).

Категорія А. Горючі гази, легкозаймісті рідини з температурою спалаху не більше 28 °С. Категорія Б. Горючий пил або волокна, легкозаймісті рідини з температурою спалаху більше 28 °С. Категорія В. Горючі та важкогорючі рідини, тверді горючі та важкогорючі речовини і матеріали. Категорія Г. Негорючі речовини та матеріали в гарячому, розжареному або розплавленому стані, процес обробки яких супроводжується виділенням променистого тепла, іскор, полум'я. Категорія Д. Негорючі речовини та матеріали в холодному стані [36].

Приміщення аудиторії 504-9 за пожежонебезпекою можна класифікувати як категорію «Д» (в аудиторії є кабельні електропроводки до обладнання, окремі предмети меблів на місцях). Найбільш пожежонебезпечними місцями можна вважати місця розміщення комп'ютерної техніки та місця де проходять лінії електропроводки.

Потенційним джерелом загоряння можна вважати коротке замикання в електропроводці [37]. План евакуації в разі виникнення пожежі наведено на рис. 5.2.

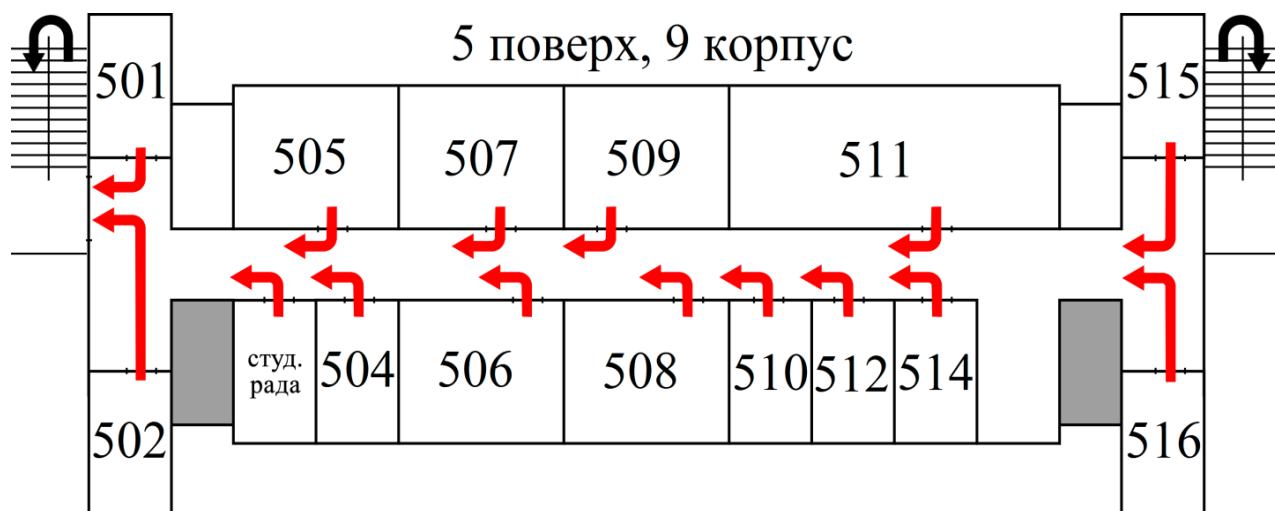


Рисунок 5.2 – План евакуації

За класом зон аудиторія відноситься до категорії П-Ша, за ДНАОП 0.001.32.-01. Ступінь вогнетривкості будови, в якому знаходяться аудиторія-І (з межею вогнетривкості несучих елементів більше 1,5 години).

Для усунення потенційних пожеж в аудиторії присутні наступні засоби для гасіння пожежі: вода із загальної мережі водопроводу, порошкові вогнегасники. Із засобів пожежогасіння у аудиторії є вогнегасники ОУБ-2 (вуглекислотоброметиловий). Умови роботи задовольняють обмеженням на використанні вогнегасників цих типів (напруга електропристроїв не більше, ніж 1000 В). Засобами виявлення й оповіщення про пожежу є автоматичні датчики-сигналізатори про пожежу типу ДТІ. Засобом оповіщення співробітників про пожежу служить внутрішній службовий зв'язок. На випадок пожежі є план евакуації працівників з будівлі.

Основними заходами профілактики пожежної безпеки є:

- регулярна перевірка працездатності засобів гасіння пожежі і систем пожежної сигналізації;
- не допускання паління у непризначених для цього місцях та поблизу легкозаймистих речовин;
- перевірка виправності електричної проводки;
- щорічне випробування опору ізоляції підвищеною напругою

близько 500 В.

5.4.2 Вимоги безпеки в аварійних ситуаціях

У випадку пробою електричної напруги на корпус електродугового агрегату необхідно відключити рубильник і довести до відома про це майстра або начальника дільниці.

У випадку потрапляння кого-небудь під напругу, необхідно відключити електродуговий агрегат від мережі, покласти потерпілого на дерев'яний настил, підклавши під голову ватник, викликати лікаря за телефоном 103 і, якщо це необхідно, зробити потерпілому штучне дихання.

У випадку загорання електродугового агрегату необхідно відключити рубильник і приступити до гасіння пожежі за допомогою вогнегасника.

Кожен робітник і службовець, що виявив пожежу або загорання, зобов'язаний:

- негайно сповістити про це в заводську пожежну охорону за телефоном 101;
- приступити до гасіння вогню пожежі наявними в цеху (на дільниці) засобами пожежогасіння (вогнегасник, пісок, пожежний кран тощо);
- викликати до місця пожежі посадових осіб (начальника цеху, дільниці).

У випадку одержання травми необхідно довести до відома про це майстра, начальника дільниці та звернутися в медпункт.

5.5 Висновки до розділу 5

1. Проведено оцінку основних параметрів робочого середовища, згідно якої умови проведення даної НДР задовольняють нормам, які вказані в основних нормативних документах.

2. Проведено оцінку вентиляції в робочій аудиторії, згідно з якою показники відповідають нормам.

3. Для уникнення шкоди для здоров'я в процесі виконання НДР були запропоновані заходи профілактики.

ВИСНОВКИ

1. Використання методів молекулярної динаміки (МД) дає можливість ефективно досліджувати дефекти в кристалічних структурах, зокрема вплив вільної поверхні.
2. Вільна поверхня впливає на дифузійні характеристики поверхневих шарів Pt. Коефіцієнт дифузії в поверхневих шарах Pt при температурах 1400 К – 1600 К приблизно на 2 порядки перевищує коефіцієнт дифузії в об'ємі.
3. З підвищенням температури відношення коефіцієнта дифузії на поверхні до коефіцієнта дифузії в об'ємі зменшується, що пояснюється зменшенням напружень викликаних вільною поверхнею.
4. Коефіцієнти дифузії в поверхневих шарах граней (001), (011), (111) Pt мають переважні напрямки розташовані в площинах паралельних поверхні.
5. Аналіз ринкової спроможності стартап-проекту «Створення бази знань розподілу вакансій для платини в залежності від температури, розміру, відстані від поверхні» показав, що даний напрямок є перспективним, актуальним та має шанси на впровадження.
6. Мікроклімат, організація робочого місця та вентиляція в лабораторії відповідають вимогам регламентованих санітарних норм. Рівень шуму, вібрацій та випромінювання не перевищує допустимих норм.

CONCLUSIONS

1. The use of molecular dynamics (MD) methods makes it possible to effectively research defects in crystalline structures, in particular the influence of the free surface.

2. The free surface affects the diffusion characteristics of the Pt surface layers. The diffusion coefficient in Pt surface layers at 1400 K – 1600 K is approximately 100 times greater than the volumetric diffusion coefficient.

3. As the temperature increases, the ratio of the diffusion coefficient on the surface to the diffusion coefficient in the volume decreases, which is explained by the decrease in stresses caused by the free surface.

4. The diffusion coefficients in the surface layers of faces (001), (011), (111) Pt have preferred directions located in planes parallel to the surface.

5. The analysis of the market capacity of the start-up project “Creating a knowledge base for the distribution of vacancies for platinum depending on temperature, size, distance from the surface” showed that this direction is promising, relevant and has the potential for implementation.

6. The microclimate, organization of the workplace and ventilation in the laboratory meet the requirements of regulated sanitary standards. Noise, vibration and radiation levels do not exceed the limits.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Валуев А.А. Метод молекулярной динамики: теория и приложения / А.А. Валуев, Г.Э. Норман, В.Ю. Подлипчук // В кн.: Математическое моделирование. Физико-химические свойства вещества. М.: Наука, 1989. стр. 5 – 40.
2. Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. / Д. В. Хеерман // М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1990. – стр.50 – 75.
3. Гулд Х. Компьютерное моделирование в физике (в 2-х томах)/ Х. Гулд Я. Тобочник // М.: Мир, 1990. Стр. 97 – 160.
4. Baskes M. Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities / M. Baskes. // Physical Review. – 1992. – №46. – С. 2727.
5. Baskes M. Application of the Embedded-Atom Method to Covalent Materials: A Semiempirical Potential for Silicon / M. Baskes. // Physical Review Letters. – 1987. – №59. – С. 2666.
6. Carlsson A. E. Beyond Pair Potentials in Transition Metals and Semiconductors / A. Carlsson. // Solid State Physics. – 1990. – №43. – С. 1.
7. Сайт програми LAMMPS [Електронний ресурс] – Режим доступу – <http://lammps.sandia.gov> – Дата доступу: 26.09.2019.
8. Гривнак А. О. Методика побудови моделей плоскошаруватих структур для дослідження методом МД. Десята міжнародна конференція студентів, аспірантів та молодих вчених «Перспективні технології на основі новітніх фізико-матеріалознавчих досліджень та комп'ютерного конструювання матеріалів» Тези доповіді / А. О. Гривнак, С. І Конорев. // Київ 20.04.2017, стр. 269.
9. Mehrer H. Diffusion in Solids: Fundamentals, Methods, Materials, Diffusion-Controlled Processes / Helmut Mehrer. – Berlin: Springer-Verlag Berlin and Heidelberg GmbH & Co. KG, 2009. – 654 с.
10. Waseda D. HighTemp.-High Pressures / D. Waseda, K. Hirata, M. Ohtani., 1975. С. 221.

11. Lide D. CRC Handbook of Chemistry and Physics / David Lide. – Florida: Taylor & Francis Group, 2008. – 201 с.
12. Kittel C. Introduction to Solid State Physics / Charles Kittel. – Hoboken: John Wiley & Sons, 2005. – 675 с.
13. Zetts J. S. The vacancy formation energy in platinum / J. S. Zetts, J. Bass. // The Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics. – 1974. – №31. – С. 419–440.
14. Науковий портал KnowledgeDoor [Електронний ресурс] – Режим доступу – <http://www.knowledgedoor.com> – Дата доступу: 25.09.2019.
15. Stillinger F. H. Computer simulation of local order in condensed phases of silicon / F. H. Stillinger, T. A. Weber. // Physical Review. – 1985. – №31. – С. 5262.
16. Лагарьков А. Н. Метод молекулярної динаміки в статистическій фізиці / А. Н. Лагарьков, В. М. Сергеев., 1978. – 409 с.
17. Коломыткін В. В. Моделирование на ЭВМ дефектов в кристаллах / В. В. Коломыткін, Ю. Р. Кеворкян. – Л., 1979.
18. Полухин В. А. Компьютерное моделирование динамики и структуры жидких металлов / В. А. Полухин, В. Ф. Ухин, М. М. Дзугутов. – М.: Наука, 1981.
19. Streett W. B. Multiple time-step methods in molecular dynamics / W. B. Streett, D. J. Tildesley, G. Saville. // Mol Phys. – 1978. – №35. – С. 639–648.
20. Tuckerman M. E. Molecular dynamics algorithm for multiple time scales: systems with long range forces. / M. E. Tuckerman, B. J. Berne, G. J. Martyna. // Chem Phys.. – 1991. – №94. – С. 6811–6815.
21. Tuckerman M. E. Reversible multiple time scale molecular dynamics / M. E. Tuckerman, B. J. Berne, G. J. Martyna. // Chem Phys.. – 1992. – №97. – С. 1990 – 2001.
22. Розроблення стартап-проекту [Електронний ресурс]: Методичні рекомендації до виконання розділу магістерських дисертацій для студентів інженерних спеціальностей / За заг. ред. О.А. Гавриша. – Київ: НТУУ «КПІ», 2016. – 28 с.

23. Гавриш О.А. Методичні рекомендації до розробки економічної частини дипломних проектів і робіт / О.А. Гавриш, В.І. Кривда, С.В. Нараєвський – К.: ІВЦ “Політехніка”. – 2010. – 54 с.
24. Закон України "Про збір та облік єдиного внеску на загальнообов'язкове державне соціальне страхування" від 08.07.2010 № 2464-VI.
25. НПАОП 0.00-1.31-99 – Правила охорони праці під час експлуатації електронно-обчислюваних машин.
26. ДСН 3.3.6.037-99 – Санітарні норми виробничого шуму, ультразвуку та інфразвуку.
27. ДСН 3.3.6.039-99 – Державні санітарні норми виробничої загальної та локальної вібрації.
28. Безпека життєдіяльності та цивільний захист: підручник для студ. Спеціальностей з природничих, соціально-гуманітарних наук та інженерно-комунікаційних технологій / О. Г. Левченко, О. В. Землянська, Н. А. Проховнік, В. В. Зацарний. – Київ: Каравела, 2019. – 268 с.
29. НПАОП 0.00-1.31-10 – Правила охорони праці під час експлуатації електронно-обчислювальних машин новий.
30. ДСТУ 8604:2015 – Дизайн і ергономіка. Робоче місце для виконання робіт у положенні сидячи. Загальні ергономічні вимоги.
31. ДСН 3.3.6.042-99 – Санітарні норми мікроклімату виробничих приміщень.
32. ПУЕ-86 – Правила устрою електроустановок.
33. ДСанПіН 3.3.2.007-98 – Державні санітарні правила і норми роботи з візуальними дисплейними терміналами (ВДТ) електронно-обчислювальних машин".
34. ДБН В.2.5-28 2006 – Норми природного і штучного освітлення.
35. Розділ з охорони праці та безпеки в надзвичайних ситуаціях у магістерських дисертаціях: Рекомендації до виконання [Електронний ресурс]: навч. посіб. для студ. спеціальності 132 «Матеріалознавство» / КПІ ім. Ігоря Сікорського; уклад.: О. Г. Левченко. – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2019. – 24 с.

36. НАПБ Б.03.002-2007 – Норми визначення категорій приміщень, будинків та зовнішніх установок за вибухопожежною та пожежною небезпекою.
37. Желібо Є. П. Безпека життєдіяльності: Навчальний посібник для студентів вищих навчальних закладів освіти України I-IV рівнів акредитації. / Є. П. Желібо, Н. М. Заверуха, В. В. Зацарний // Київ: «Каравела». – 2001. – 320 с.