

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Національний університет «Запорізька політехніка»

Інститут інформатики та радіoeлектроніки
Факультет радіoeлектроніки і телекомунікацій
(повне найменування інституту, факультету)

Кафедра мікро- та нанoeлектроніки
(повне найменування кафедри)

Пояснювальна записка

до магістерської роботи

магістр
(ступінь вищої освіти)

на тему Розмірні ефекти у Ван-дер-ваальсівській взаємодії металевих
наноструктур

Виконав: студент(ка) ІІ курсу, групи РТЗ-319м

Спеціальності

153 - Мікро-та наносистемна техніка
(код і найменування спеціальності)

Освітня програма (спеціалізація)

Мікро- та нанoeлектронні прилади і пристрої

Чиглашвілі С. І.

(прізвище та ініціали)

Керівник Коротун А. В.

(прізвище та ініціали)

Рецензент Сніжной В.Л

(прізвище та ініціали)

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Національний університет «Запорізька політехніка»
(повне найменування закладу вищої освіти)

Інститут, факультет Радіoeлектроніки та телекомунікації
Кафедра Мікро та нанoeлектроніки
Ступінь вищої освіти магістр
Спеціальність 153 «Мікро- та наносистемна техніка»
(код і найменування)
Освітня програма (спеціалізація) «Мікро- та нанoeлектронні прилади і пристрої»
(назва освітньої програми (спеціалізації))

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри
мікро- та нанoeлектроніки
В. В. Погосов
« » 2020 року

**ЗАВДАННЯ
НА МАГІСТЕРСЬКУ РОБОТУ СТУДЕНТКИ**

Чиглашвілі Світлани Ігорівни

(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема проекту (роботи) Розмірні ефекти у Ван-дер-ваальсівській взаємодії металевих наноструктур

керівник проекту (роботи) Коротун Андрій Віталійович, доцент, канд. фіз.-мат. наук

(прізвище, ім'я, по батькові, науковий ступінь, вчене звання)

затверджені наказом закладу вищої освіти від «13» листопада 2020 року №334

2. Строк подання студентом проекту (роботи) 07 грудня 2020 року

3. Вихідні дані до проекту (роботи) _____

4. Зміст розрахунково-пояснювальної записки (перелік питань, які потрібно розробити) _____

5. Перелік графічного матеріалу (з точним зазначенням обов'язкових креслень) _____

6. Консультанти розділів проекту (роботи)

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		завдання видав	прийняв виконане завдання
1-2	Коротун А.В., доцент каф. МіНЕ		
3	Севастьянов Р.В., доцент каф. ПТБД		
4	Якімцов Ю.В., доцент каф. ОПіНС		
Нормо-контроль	Коротун А.В., доцент, канд. фіз.-мат.наук		

7. Дата видачі завдання « 30 » вересня 2020 року.

КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№ з/п	Назва етапів дипломного проекту (роботи)	Строк виконання етапів проекту (роботи)	І. П р и м і т к а
1	Збір і аналіз інформації про Ван-дер-Ваальса у наномасштабі	30.09. – 11.10.	виконано
2	Систематизація літературних даних	12.10. – 18.10.	виконано
3	Складання і затвердження наукового завдання	19.10. – 20.10.	виконано
4	Формування та уточнення наукового завдання	21.10. – 22.10.	виконано
5	Одержання розмірної залежності вільної енергії вандерваальсівської взаємодії	23.10. – 31.10.	виконано
6	Оцінка розмірної залежності параметра Гамакера	01.11. – 08.11.	виконано
7	Одержання чисельних результатів та їх аналіз	09.11. – 12.11.	виконано
8	Аналіз економічної ефективності проекту	13.11. – 17.11.	виконано
9	Розробка заходів по охороні праці	18.11. – 21.11.	виконано
10	Оформлення графічної частини	22.11. – 24.11.	виконано
10	Оформлення ПЗ	25.11. – 30.11.	виконано

Студент(ка)

_____ (підпис)

С.І. Чиглашвілі
(прізвище та ініціали)

Керівник проекту (роботи)

_____ (підпис)

А.В. Коротун
(прізвище та ініціали)

АНОТАЦІЯ

ПЗ: 74 с., 21 рис., 7 табл., 0 додатків, 34 джерел.

Мета роботи: дослідження розмірної залежності параметра Гамакера та вільної енергії вандерваальсівської взаємодії сферичних металевих наночастинок з урахуванням розсіювання електронів на їх поверхнях.

Об'єкт та предмет дослідження: об'єктом дослідження виступають металеві наночастинки, які взаємодіють за посередництвом сил Ван-дер-Ваальса; предметом дослідження є вандерваальсівська взаємодія сферичних металевих наночастинок.

Методи дослідження: розрахунково-аналітичний.

Результати: результатом дослідження є аналітичні вирази для параметра Гамакера та вільної енергії та розрахунки залежностей цих величин від радіусу наночастинок і відстані між ними.

Рекомендації щодо впровадження: робота носить фундаментальний характер, проте деякі її результати можуть бути використані для удосконалення технологій одержання наночастинок і композитів на їх основі.

Практична цінність: досліджено вплив розміру наночастинок і відстані між ними на характеристики вандерваальсівської між металевими наночастинками.

МЕТАЛЕВІ НАНОЧАСТИНКИ, ПАРАМЕТР ГАМАКЕРА,
ВЗАЄМОДІЯ ВАН-ДЕР-ВААЛЬСА, ВІЛЬНА ЕНЕРГІЯ, ЕФЕКТИВНА
ШВИДКІСТЬ РЕЛАКСАЦІЇ

ЗМІСТ

	Вступ	5
1	Взаємодія Ван-дер-Ваальса між наночастинками	7
1.1	Метод зв'язаних осцилюючих диполів	7
1.2	Взаємодія наночастинок різних форм і розмірів	9
1.2.1	Аналіз меж коректності макроскопічних апроксимацій	10
1.2.2	Системи зі складною геометрією	14
1.2.2.1	Взаємодія нанодротів	15
1.2.2.2	Куби з різною орієнтацією	16
1.2.2.3	Моношар і частинка	16
1.2.2.4	Моношар і нанодріт	20
1.2.3	Внески взаємодії багатьох тіл	22
1.3	Адитивне наближення для сил Ван - дер - Ваальса	29
2	Дослідження розмірних залежностей параметра Гамакера та вільної енергії ван-дер-ваальсівської взаємодії для системи двох сферичних металевих наночастинок	36
2.1	Вільна енергія взаємодії та параметр Гамакера для системи двох наночастинок	36
2.2	Результати розрахунків та їх обговорення	46
3	Охорона праці та безпека в надзвичайних ситуаціях	52
3.1	Аналіз потенційних небезпек	52
3.2	Заходи з техніки безпеки	55

3.3	Заходи по забезпеченню виробничої санітарії та гігієни праці	55
3.4	Заходи безпеки у надзвичайних ситуаціях	57
3.4.1	Заходи з пожежної безпеки	57
3.4.2	Заходи по забезпеченню безпеки в надзвичайних ситуаціях	60
4	Техніко-економічне обґрунтування	63
	Висновки	70
	Перелік посилань	71

ВСТУП

Металеві наночастинки привертають значну увагу через свої цікаві оптичні та електронні властивості, що не зустрічаються у їх об'ємних аналогів [1-3]. Причиною подібних відмінностей при зменшенні розмірів до нанорівня є розмірні ефекти.

Доступні на сьогодні методи одержання наночастинок, такі як фотолітографія та електронно-променева літографія, є трудомісткими та такими, що дорого коштують. Потенціально потужною та економічно ефективною альтернативою є самозбірка наночастинок знизу вгору [1,3]. Це, разом із більшістю інших можливих методів виготовлення потребує більш глибокого розуміння взаємодій, у тому числі і дальнодіючих, між наночастинками на нанорівні.

Незважаючи на те, що взаємодія Ван-дер-Ваальса є слабкою, без її врахування неможна всебічно пояснити взаємодію між металевими наночастинками. В рівняннях, що описує взаємодію Ван-дер-Ваальса, точний розрахунок відповідної сили взаємодій залежить від значення постійної Гамакера, знання якої необхідно, наприклад, при описі міжфазних явищ і прогнозування агрегації або дисперсійної поведінки колоїдів. Теоретичне значення постійної Гамакера може бути розраховано з використанням теорії Ліфшиця, що враховує діелектричні або спектральні властивості нанооб'єктів у широкому частотному інтервалі, відомому заздалегідь [3,4]. Проте складнощі, що виникають при одержанні спектральних даних для більшості матеріалів і точне визначення зв'язаних із ними параметрів (наприклад, діелектричної проникності, поляризованості), ускладнюють одержання оцінки постійної Гамакера. Апарат поверхневої сили (SFA) [5] та атомно-силовий мікроскоп (AFM) [6-8] є потужними інструментами для експериментального визначення постійної Гамакера, тоді як результати чутливі до присутності домішок [9] і потребують складної підготовки зразків.

Тому розрахунок розмірної залежності постійної Гамакера для випадку вандерваальсівської взаємодії сферичних наночастинок є актуальною задачею.

У даній роботі розмірна залежність константи Гамакера природно випливає з виразу для вільної енергії взаємодії сферичних наночастинок з урахуванням відомого спектра електромагнітних флуктуацій [10,11].

1 ВЗАЄМОДІЯ ВАН-ДЕР-ВААЛЬСА МІЖ НАНОЧАСТИНКАМИ

1.1 Метод зв'язаних осцилюючих диполів

Для коректного розрахунку вандерваальсівських сил у системах, де характерні розміри і радіуси кривизни можна порівняти з міжатомними відстанями, використовується метод зв'язаних осцилюючих диполів (CFDM), розроблений Ренні і Ніжбуром [12] і покращений Лукасом [13]. У цьому методі кожна компонента досліджуваної системи (наприклад, системи наночастинок) представляється сукупністю елементарних комірок, кожна з яких може бути асоційована з окремим атомом, молекулою або групою атомів залежно від фізичних особливостей системи.

Для розрахунку енергії взаємодії між компонентами системи кожна елементарна комірка розглядається як тривимірний гармонічний осцилятор з масою m_i і частотою ω_i . Рівноважне положення осцилятора збігається з центром комірки. Кожна комірка також характеризується миттєвим дипольним моментом $p_i = \alpha_i E(x_i)$, який визначається залежною від частоти поляризованістю α_i , і локальним електромагнітним полем $E(x_i)$, індукованим усіма іншими диполями.

У границі взаємодій що не спізнюються, CFDM гамільтоніан системи, що містить N комірок, може бути записаний як

$$H = -\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2 \nabla_{\xi_i}^2}{2m_i} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \omega_{0i}^2 \xi_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i (\omega_i^2 - \omega_{0i}^2) \xi_i^2 + \sum_{i>j=1}^N p_i T_{ij} p_j \quad (1.1)$$

Тут ξ_i - відхилення осцилятора від рівноважного положення, ω_{i0} - власна частота i -ї комірки в ізолюваному стані, $\dot{p}_i$ і $\dot{p}_j$ - дипольні моменти комірок, а T_{ij} є матрицею диполь-дипольної взаємодії.

$$\dot{p}_k = e \dot{\xi}_k = \alpha_k \sqrt{m_k \omega_k} \dot{\xi} \quad k \in \{i, j\}$$

$$T_{ij}^{\chi\phi} = (\delta^{\chi\phi} - 3r_{ij}^{\chi}r_{ij}^{\phi}/r_{ij}^2)/r_{ij}^3 \quad (1.2)$$

де r_{ij} - вектор, що зв'язує рівноважні положення i -тої та j -тої комірки, $\alpha_k = e^2/(m_k \omega_k^2)$ поляризованість k -тої комірки.

Останні два члена в гамільтоніані пов'язані з енергією взаємодії всіх комірок в системі. Для розрахунку цієї енергії були розроблені два методи. Перший метод, запропонований Ренні і Ніжбуром [12], заснований на обчисленні власних частот всієї системи осциляторів. Підсумовування енергій всіх мод коливань буде містити як власну енергію осциляторів, так і енергію взаємодії. Ґрунтуючись на роботі Ренні і Ніжбура, Лукас [13] запропонував метод, який дозволяє безпосередньо розраховувати енергію взаємодії для систем, які можуть бути представлені у вигляді сукупності однакових осциляторів. У цьому методі енергія, пов'язана з взаємодією в системі, розраховується як сума ряду:

$$U = \frac{1}{2} \hbar \omega_0 \sum_{n=1}^{\infty} a_n (Tr A^{n+1}), \quad a_n = (-1)^n \frac{(2n-1)!!}{2^{n+1} (n+1)!} \quad (1.3)$$

де A - модифікована матриця взаємодії:

$$A_{ii} = 0; \quad A_{ij} = \sqrt{\alpha_i \alpha_j} T_{ij}; \quad i \neq j, \quad (1.4)$$

а ω_0 - власна частота незбурених осциляторів.

У рівнянні (1.3) n -й член ряду пов'язаний з внеском n -ї взаємодії в повну енергію. Цей метод дозволяє одночасно розраховувати, як повну енергію, так і вклади кожного порядку взаємодії. Як було показано Лукасом, ряд (1.3) збігається для систем з об'ємною поляризованістю меншою за $3/8\pi$. Для значень поляризованості систем, описаних нижче, цей ряд збігається досить швидко. Кількість членів ряду, що потрібна для отримання більш 99.99% точності,

залежить від геометрії системи і не перевищує 20 членів для всіх розглянутих нижче систем.

1.2 Взаємодія наночастинок різних форм і розмірів

Величина енергії, розрахованої методом Лукаса, відповідає енергії вандерваальсівської взаємодії всіх елементарних комірок в системі. У той же час, потрібно розрахувати енергію взаємодії частинок. За визначенням, це енергія по переміщенню частинок з нескінченно віддаленого стану в конкретну конфігурацію системи. Розраховують цю енергію у вигляді:

$$U_{inter} = U_{12} - U_1 - U_2 \quad (1.5)$$

Тут U_{12} , U_1 , U_2 - енергії, розраховані, як суми ряду (1.5) для систем, що містять дві частинки в заданій конфігурації, ізолювану першу частинку і ізолювану другу частинку, відповідно.

Для розрахунків, результати яких будуть наведені, в якості модельної системи був обраний тефлон, для якого вандерваальсівська взаємодія є визначальною. Важливо відзначити, що при переході до наночастинок з інших матеріалів конкретні величини енергії взаємодії можуть змінитися. Проте, ключові особливості поведінки систем, які виявлені для тефлону, збережуться і, таким чином, за цими результатами можна судити про поведінку широкого класу систем.

У розрахунках, за елементарну комірку, відповідну одиничному тривимірному гармонічному осцилятору, була прийнята група ($-C_2F_4-$). Частота осциляторів, що дорівнює $\omega = 1,702 \cdot 10^{16}$ була взята з роботи [14], а поляризованість $\alpha = 3,608 \cdot 10^{-3} \text{ нм}^3$ була розрахована за допомогою рівняння Клаузіуса - Москотті з показника заломлення [14].

Параметр ґратки $l = 0,423 \text{ нм}$, розраховувався з даних про густину. Величини проміжків і відстані на графіках вказані в одиницях l . Характерною

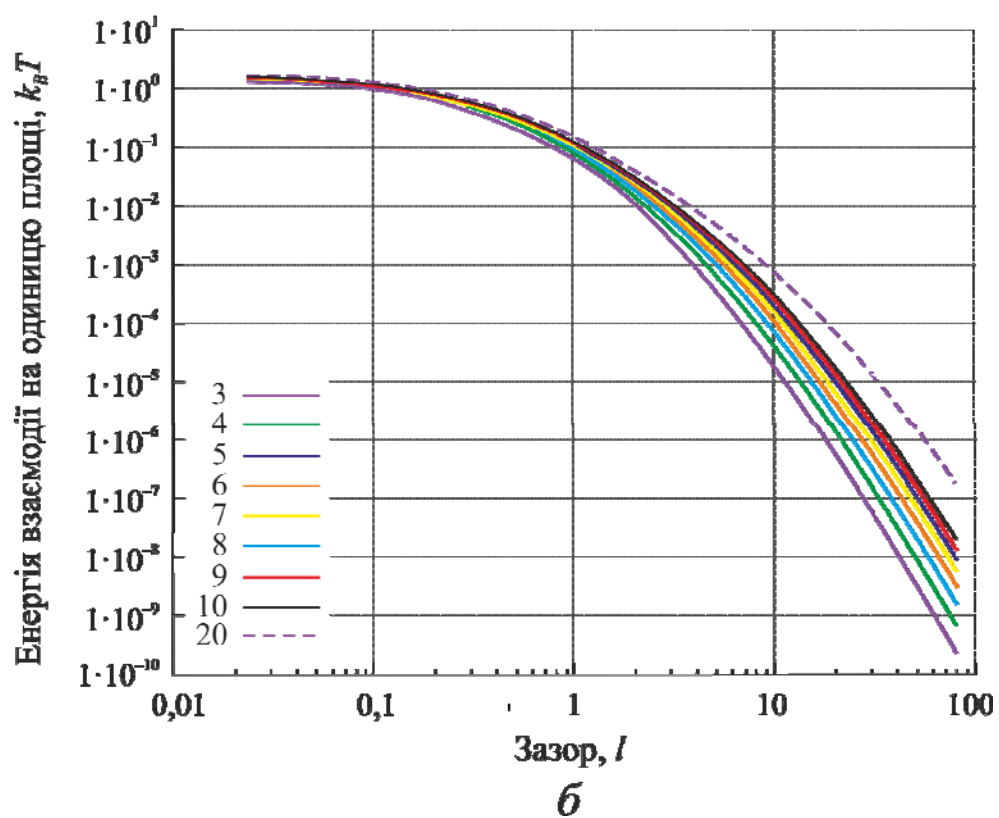
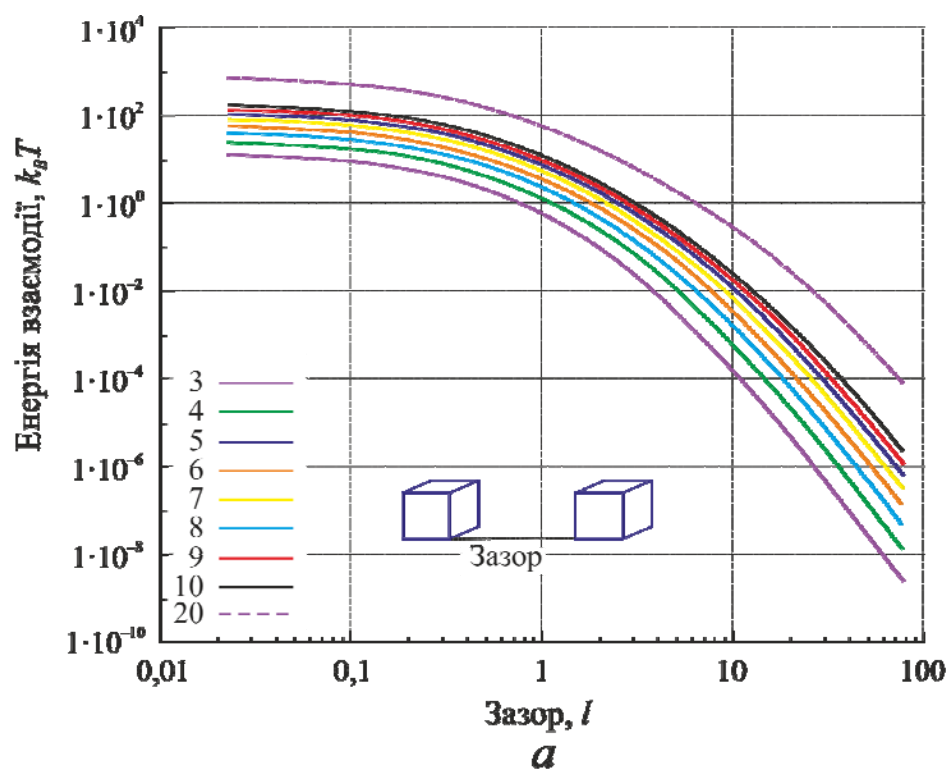
величиною енергії, порівняння з якою вказує на роль вандерваальсова взаємодії наночастинок в їх поведінці, є величина kT , тому всі енергії взаємодії вказані в одиницях kT (при $T = 300K$).

1.2.1 Аналіз меж коректності макроскопічних апроксимацій

Макроскопічні теорії будуються з деякими припущеннями щодо тіл що взаємодіють та їх взаємного розташування. А саме, при розрахунку взаємодії крізь плоскопаралельний прошарок передбачається, що відстань між тілами набагато менша за розміри тіл, але набагато більша за міжатомні відстані. У разі взаємодії тіл з викривленою поверхнею, при перерахунку за методом Дерягіна, вважається також, що радіуси кривизни тіл істотно перевищують радіус дії поверхневих сил. Застосування мікроскопічного підходу, такого як CFDM дозволяє оцінити межу коректності цих припущень для конкретних наносистем.

Як приклад досліджених систем на рис. 1.1 а показано залежність енергії взаємодії кубічних наночастинок різних розмірів від проміжку, а на графіку 1.1 б показана енергія, яка припадає на одиницю площі контакту, тобто енергія взаємодії, віднесена до площі грані куба.

Макроскопічна теорія передбачає, що при виконанні зазначених вище основних наближень, для енергії взаємодії частинок з плоскопаралельним проміжком повинен виконуватися закон зворотних квадратів: $U : 1/h^2$, де h - величина проміжку. З іншого боку, для частинок, що знаходяться на відстані набагато більшому, ніж розміри частинок, макроскопічна теорія передбачає закон зворотної шостої степені: $U : 1/r^6$, де r - відстань між центрами частинок. Дійсно, з графіків 1.1 а і 1.1 б видно, що для кубів усіх розмірів спостерігаються два характерні режими взаємодії.



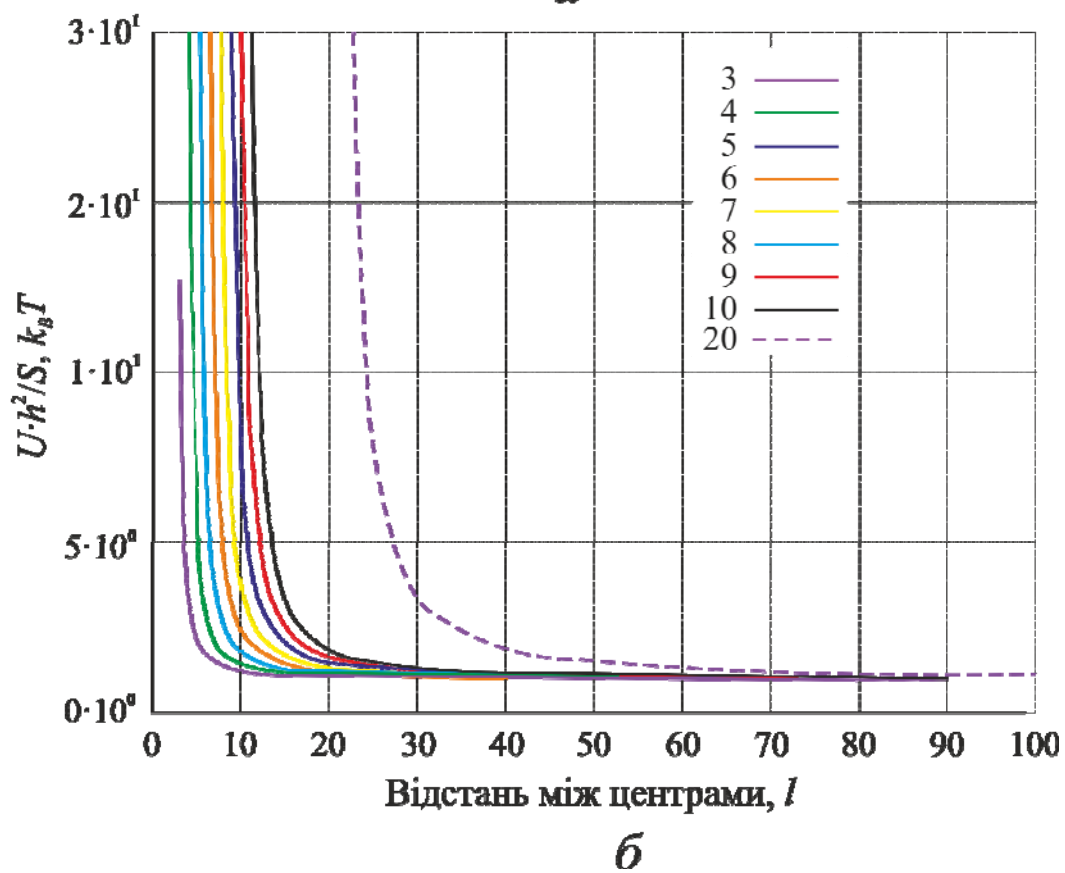
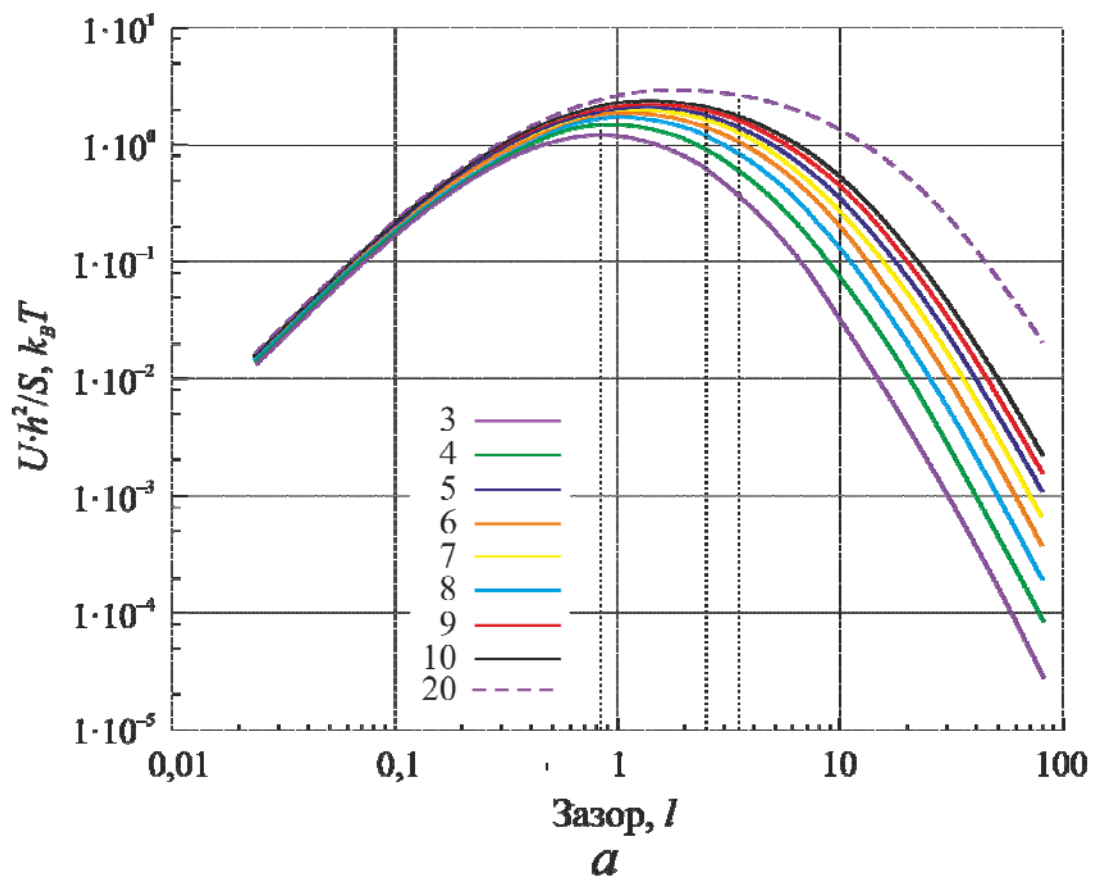
a – як функція величини проміжку;

$б$ – що припадає на одиницю площі контакту проміжку

Рисунок 1.1 – Енергії взаємодії кубічних наночастинок різних розмірів

Для більш наочного уявлення, на рис. 1.2, *а* і 1.2, *б* показано залежності величин $U \cdot h^2$ наведені на одиницю площі і $U \cdot r^6$ від величини проміжку і відстані між частинками, відповідно. У такому поданні, область виконання законів передбачених макроскопічною теорією буде описуватися горизонтальною ділянкою кривої. На рис. 1.2, *а* для кубів з ребром 10l і 20l пунктирними лініями показані інтервали, в яких величина $U \cdot h^2$ відхиляється від максимуму менше ніж на 10%. Видно, що в міру зростання розмірів кубів область виконання закону зворотних квадратів також зростає, причому це зростання забезпечується за рахунок розширення області виконання закону зворотних квадратів в бік великих проміжків. При цьому ліва межа області практично не зміщується і приблизно відповідає товщині одного моношару. Таким чином, можна зробити висновок, що умова «величина проміжку набагато більша за міжмолекулярні відстані» макроскопічної теорії досить слабке і, фактично, «набагато більше» означає, що величина проміжку повинна бути більшою або дорівнювати міжмолекулярній відстані. У той же час, друга умова, «величина проміжку набагато менша за розміри тіл», є набагато сильнішою, і означає, що розміри тіл повинні бути не менше ніж в 5 разів більші за величину проміжку.

Графік на рис. 1.2, *б* дозволяє проаналізувати перехід на великих відстанях до закону зворотної шостої степені. При цьому вихід на режим $U : 1/r^6$ відбувається на відстанях, які в десятки разів перевищують розміри взаємодіючих частинок. Для порівняно великих частинок, з поперечним розміром в десятки атомів, вихід на режим зворотної шостої степені фактично відбувається за межами області взаємодій що не запізнюються, і, таким чином, застосування закону зворотної шостої степені некоректно.



$a - U \cdot h^2$ на одиницю площі контакту, від величини проміжку;
 $b - U \cdot r^6$ на одну елементарну комірку, від відстані між центрами частинок
 Рисунок 1.2 – Приведені величини енергії

1.2.2 Системи зі складною геометрією

Крім оцінки областей коректної застосовності законів, що передбачаються макроскопічної теорією, використовуваний метод дозволив і кількісно оцінити взаємодії в системах зі складною геометрією. В останні роки основний інтерес дослідників, що працюють в області нанотехнологій і науки про нанорозмірний стан речовини, поступово зсувається з проблеми синтезу індивідуальних частинок до задачі впорядкованої організації частинок в ансамблі з утворенням мікро- і макроскопічних систем. Це багато в чому пов'язано з тією обставиною, що в основних напрямках використання наноматеріалів, таких як медична діагностика, доставка ліків, створення сенсорів і електронних пристроїв, тощо, затребувані ансамблі нанооб'єктів, в яких організація індивідуальних нанорозмірних складових визначається призначенням матеріалу. Одним з найбільш багатообіцяючих методів організації частинок в ансамблі є самоорганізація індивідуальних частинок під дією поверхневих сил. Можливість використовувати самоорганізацію в першу чергу спирається на фундаментальне розуміння і інженерне використання взаємодій між наночастинками.

Точні мікроскопічні методи розрахунку вандерваальсівських сил, такі як CFDM і TCFDM, дозволяють досліджувати можливі процеси самоорганізації частинок з геометрією, наближеною до геометрії реальних систем. Використовуючи метод зв'язаних осцилюючих диполів, було визначено закони зміни енергії вандерваальсівської взаємодії зі зміною величини проміжку між частинками для широкого кола наносистем, важливих для практичних застосувань, а також вивчено вплив крайових ефектів і взаємної орієнтації на взаємодію.

У цьому розділі будуть представлені результати дослідження модельних систем, що містять нанодропи (віскерси), лускоподібні наночастинки (моношари), а також кубічні частинки з різним взаємним розташуванням.

1.2.2.1 Взаємодія нанодротів

Аналітичні дослідження [15, 16] систем схрещених і паралельних дротів за допомогою макроскопічного підходу показали, що на проміжках набагато більших за міжмолекулярну відстань енергія взаємодії пропорційна h^{-6} і h^{-5} , відповідно. З використанням TCFDM, було розраховано енергію взаємодії двох нанодротів з перетином у вигляді правильного шестикутника і довжиною в $200l$ при різних взаємних орієнтаціях. Аналіз отриманих результатів показав, що відповідно до висновків макроскопічної теорії в інтервалі великих товщин енергія взаємодії схрещених дротів зменшується повільніше, ніж для паралельних. Проте, в області досліджених товщин вихід на аналітичні закони, отримані в рамках макроскопічного підходу, не відбувається. Розрахунки показали, що і на малих відстанях енергія взаємодії схрещених дротів зменшується повільніше, ніж для паралельних дротів. Так, для величин проміжку порядку l , енергія вандерваальсівської взаємодії паралельних дротів зменшується пропорційно $h^{-3,3}$, а для схрещених - $h^{-2,7}$. Відзначимо, що аналітичний розгляд взаємодії дротів в рамках макроскопічної теорії при малих величинах проміжку є некоректним у зв'язку з зазначеними вище обмеженнями теорії.

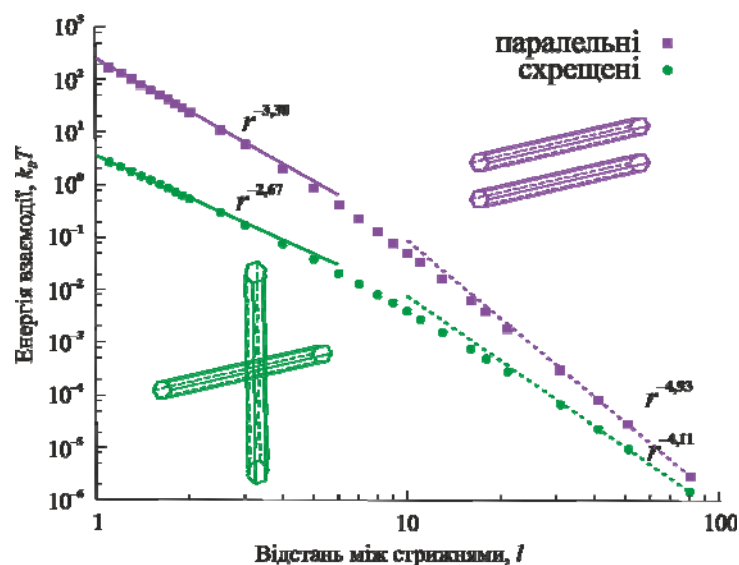


Рисунок 1.3 – Енергії взаємодії схрещених і паралельних дротів як функція відстані між центрами r

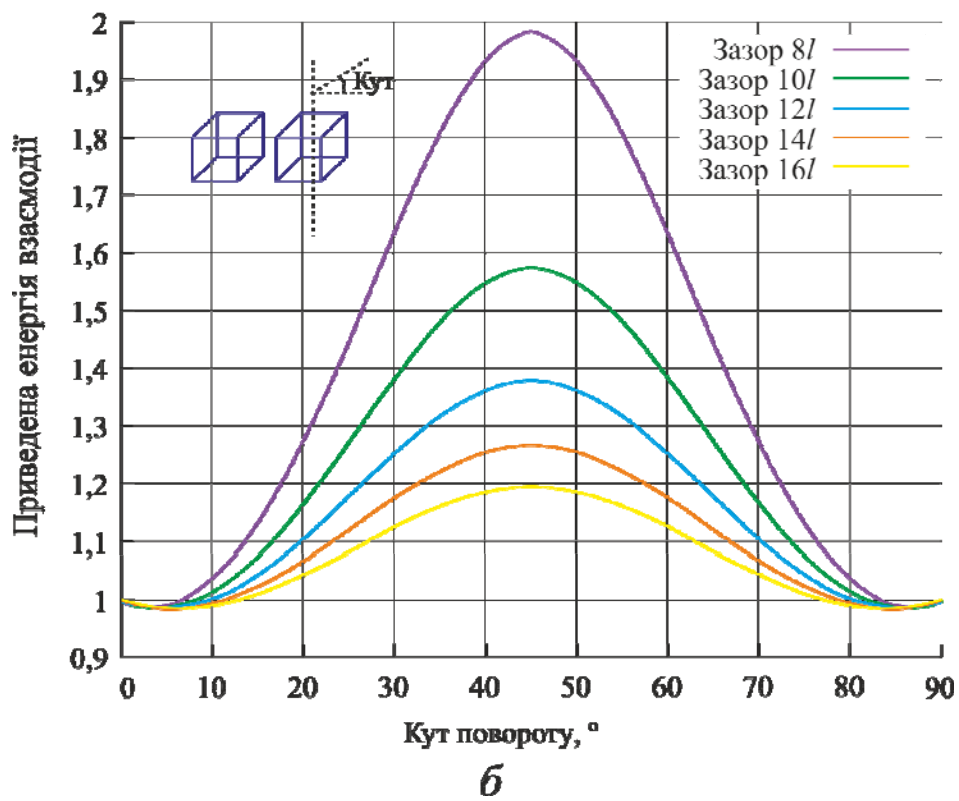
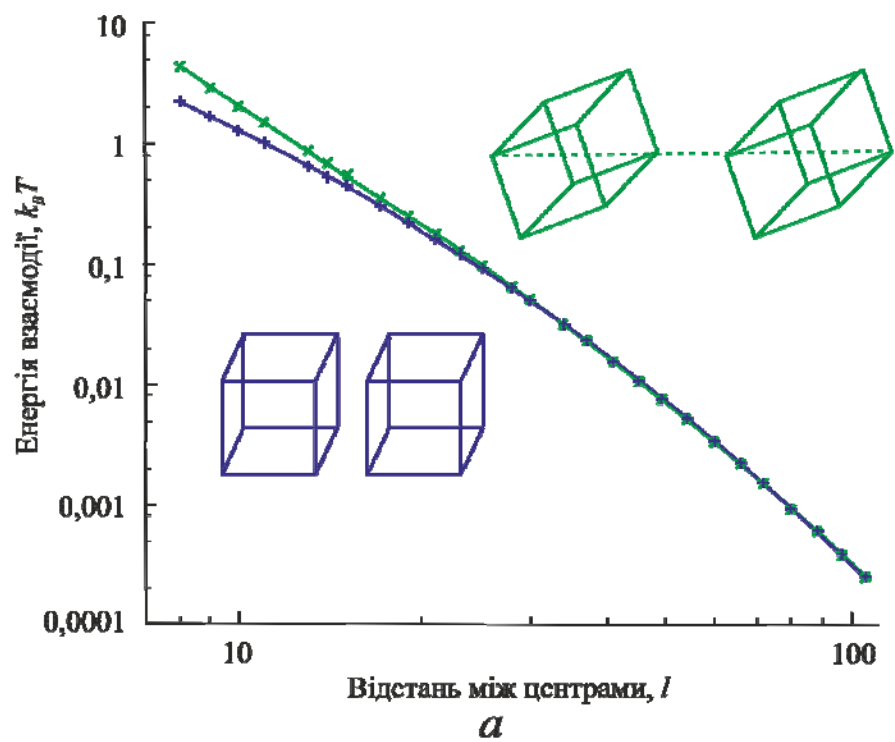
1.2.2.2 Куби з різною орієнтацією

Використовуваний мікроскопічний підхід дозволив також детально проаналізувати вплив взаємної орієнтації частинок. На рис. 1.4, *а* наведено залежності енергії вандерваальсівської взаємодії для кубічних частинок з плоскопаралельним проміжком і для такого взаємного розташування частинок, коли об'ємні діагоналі лежать на одній прямій. Як видно, на великих відстанях вплив взаємної орієнтації досить малий. Проте, цей фактор стає надзвичайно важливим для проміжків в кілька міжатомних відстаней, оскільки енергії при різних орієнтаціях можуть відрізнятися в 2-3 рази. На рис. 1.4, *б* наведені залежності енергії взаємодії кубічних частинок розміром $8 \times 8 \times 8$, які перебувають на різних відстанях, від взаємного кута повороту граней, приведені до енергії частинок з плоскопаралельним проміжком. Аналіз показує, що навіть на відстані, яка вдвічі більша за розміри частинки, варіація енергії взаємодії досягає 20%.

1.2.2.3 Моношар і частинка

Іншою системою, в якій вплив взаємного розташування суттєвий, є система взаємодіючих моношару і частинки.

На рис. 1.5 показані залежності енергій від величини проміжку для кубічної частинки, розташованої над центром просторово обмеженого моношару в формі квадрата і над його кутом. При цьому досліджувалися системи з різними розмірами моношарів, 20×20 , 50×50 і 75×75 , в той час як розмір частинки дорівнював $4 \times 4 \times 4$. З наведених даних випливає, що при малих зазорах порядку l основний внесок у взаємодію вносять взаємодії атомів моношару та відповідних атомів частинки, що лежать навпроти. Таким чином, енергія взаємодії для різних систем на рис. 1.5 практично збігається.



a – з плоскопаралельним прошарком і з об’ємними діагоналями, що знаходяться на одній лінії;

b – на різних відстанях від кута повороту граней (приведена енергія)

Рисунок 1.4 – Енергія взаємодії кубічних наночастинок

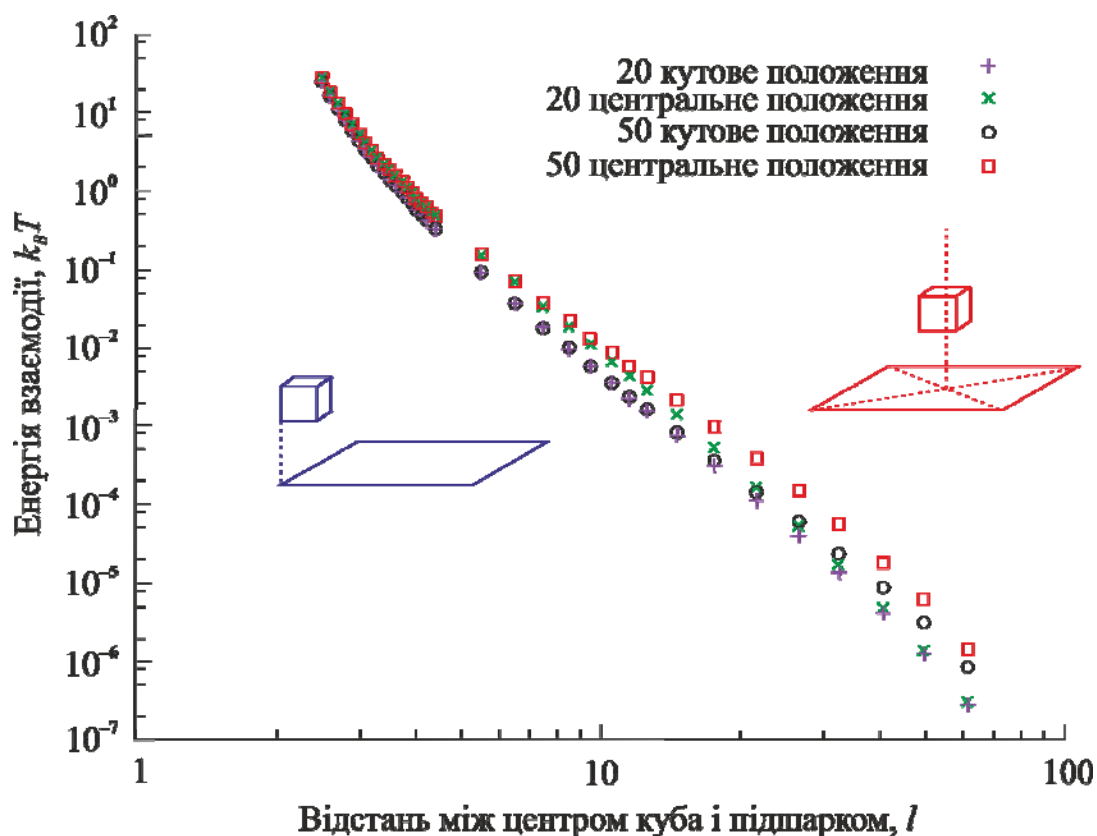


Рисунок 1.5 – Залежність енергії взаємодії кубичної наночастинки і моношару від відстані, для різних орієнтацій і розмірів моношару

При дещо більших величинах проміжків, область моношару, взаємодія з якою дає основний внесок, збільшується, і проявляється відмінність для «центральных» та «кутових» систем. При цьому, оскільки ця область порівняно невелика, енергії взаємодії для моношарів різних розмірів практично збігаються і важливим є лише взаємна орієнтація частинки і моношару. Нарешті, при величинах проміжків, які можна порівняти з розміром моношару, виділити обмежену область в моношарі, яка дає найбільший внесок, неможливо і енергії взаємодії для різних орієнтацій близькі. Основним фактором на цьому інтервалі товщин є розмір моношару.

На рис. 1.6 показано залежність відношення енергій взаємодії від відстані при розташуванні частинки над центром і над кутом моношару. У даній системі це відношення досягає максимуму при відстанях порядку 10-12 параметрів ґратки. При цьому, чим більший розмір моношару, тим сильніше виявляється залежність від взаємного розташування і енергії можуть відрізнятися в 2-3 рази.

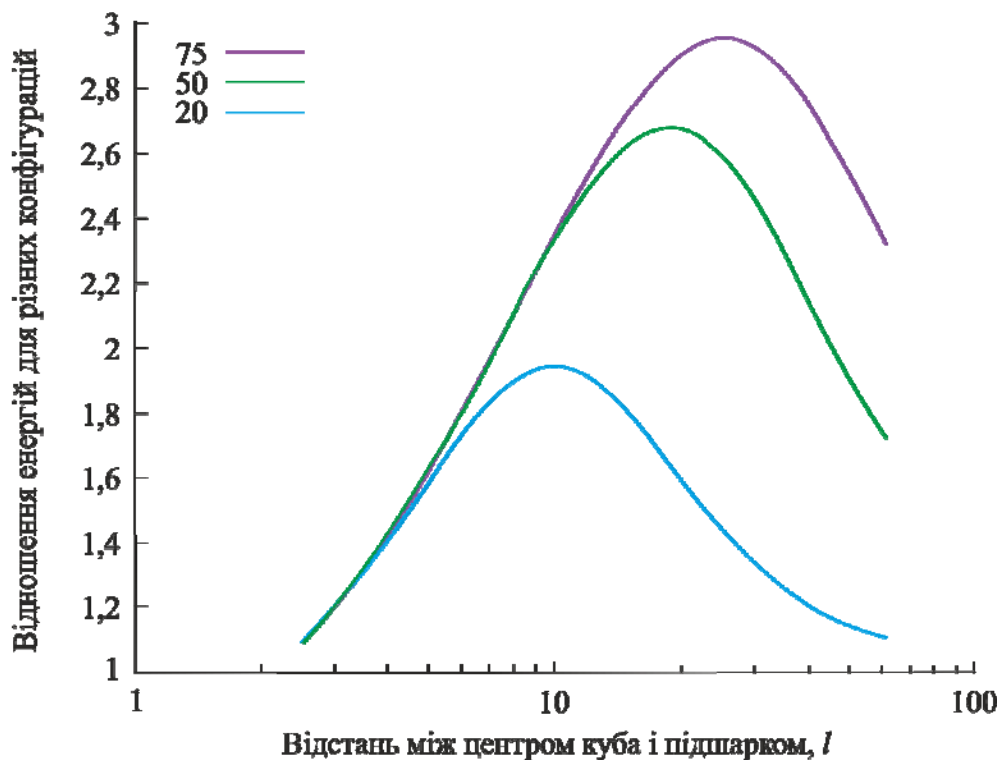


Рисунок 1.6 – Залежність відношення енергій від відстані для різних взаємних положень кубічної частинки і моношару при різних розмірах моношару

Енергія взаємодії центрально-симетрично розташованих частинки і моношару в основному інтервалі товщин добре описується законом: $U : d^{-4,25}$, де d - відстань між центром частинки і моношаром. Для більш наочного уявлення, на рис. 1.7 показано залежності величин $U \cdot d^{4,25}$ від відстані.

У такому поданні, область виконання закону буде описуватися горизонтальною ділянкою кривої. Як впливає з результатів, закон починає описувати енергію взаємодії при відстані більше $4l$ і виконується аж до відстаней вдвічі менших розміру моношару.

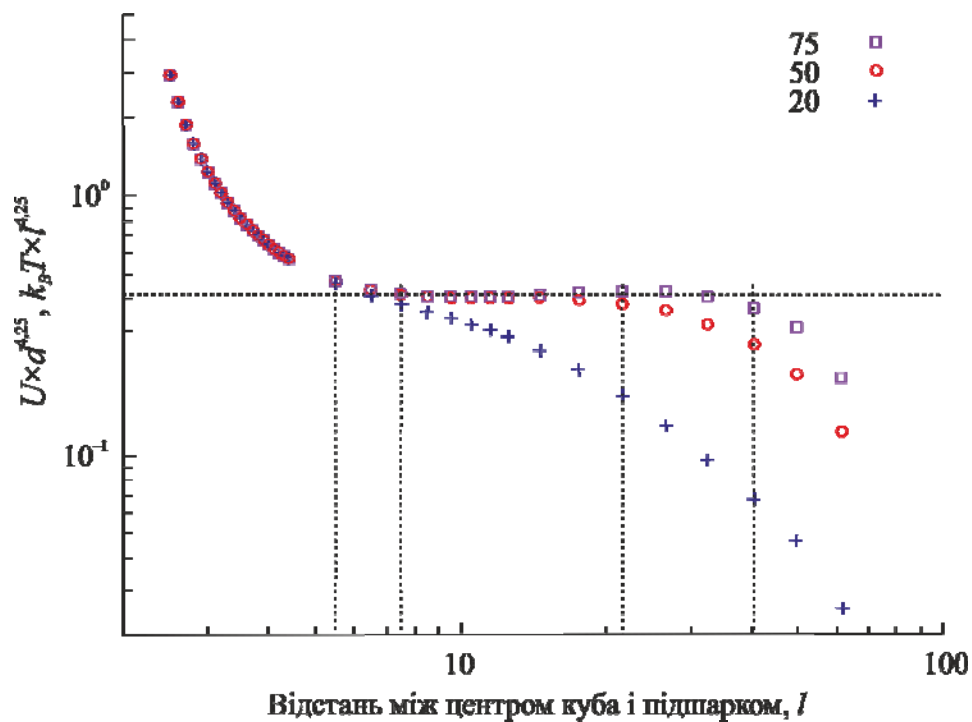
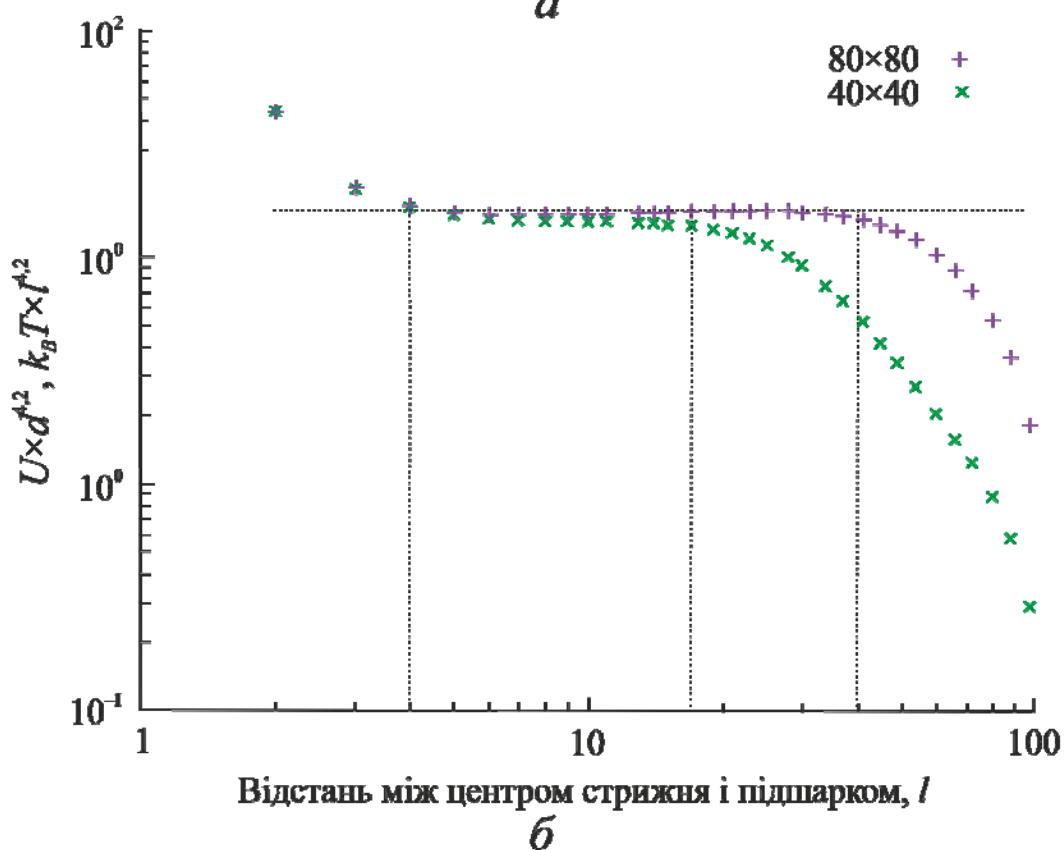
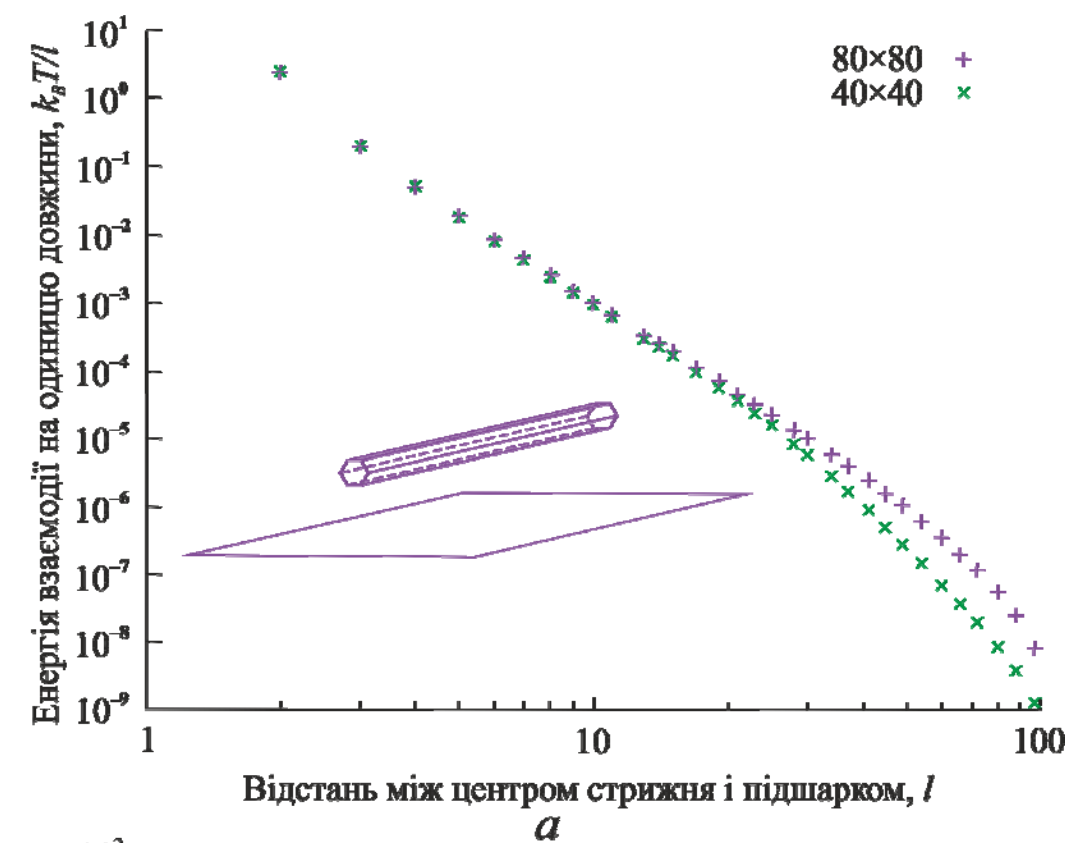


Рисунок 1.7 – Залежності величини $U \cdot d^{4,25}$ від відстані між центром куба і моношаром для різних розмірів моношару

1.2.2.4 Моношар і нанодріт

Аналогічна поведінка проявляється в системі взаємодіючих нанодроту і моношару. Досліджувалися системи з моношарами розміром 40×40 і 80×80 , причому дріт розташовувався над центром моношару паралельно йому, а його довжина збігалася з розмірами моношару. Для цієї системи також вдається виділити область відстаней для яких спостерігається стійке виконання степеневого закону. Так, при відстанях між центром дроту і підкладкою більшою за $4l$ і до відстаней порядку половини довжини моношару виконується закон $U : d^{-4,2}$. На рис. 1.8, а і 1.8, б показано залежності енергії на одиницю довжини дроту від відстані, а також залежність величини $U \cdot d^{4,2}$, відповідно.



a – взаємодії нанодроту і моношару від відстані (на одиницю довжини)

$b - U \cdot d^{4.2}$ від відстані між центром дроту і моношаром для різних розмірів моношару

Рисунок 1.8 – Залежність приведеної енергії

1.2.3 Внески взаємодії багатьох тіл

Важливою перевагою TCFDM підходу є можливість оцінити внески взаємодій багатьох тіл, що дозволить оцінити точність підходів, заснованих на врахуванні тільки парно адитивних взаємодій. З іншого боку, розгляд неадитивних поправок дає можливість більш детально зрозуміти поведінку досліджуваних систем і пояснити відмінності в поведінці систем для різних речовин.

Нарешті, особливості виразів (1.3) і (1.4) дозволяють перераховувати результати, отримані для однієї речовини, для інших речовин. Нехай T_{ij}^{ϕ} і A_{ij}^{ϕ} узагальнені матриці взаємодії:

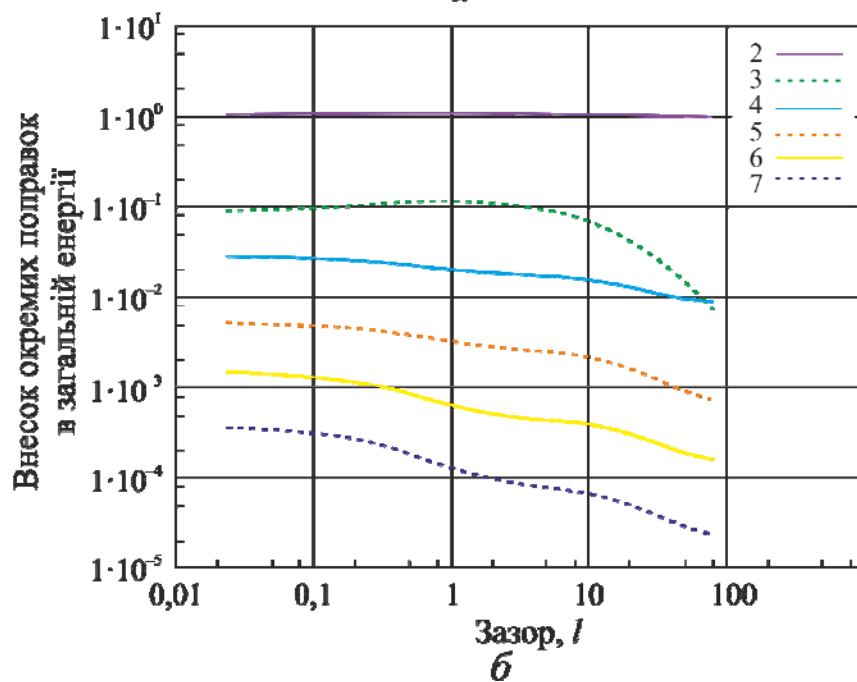
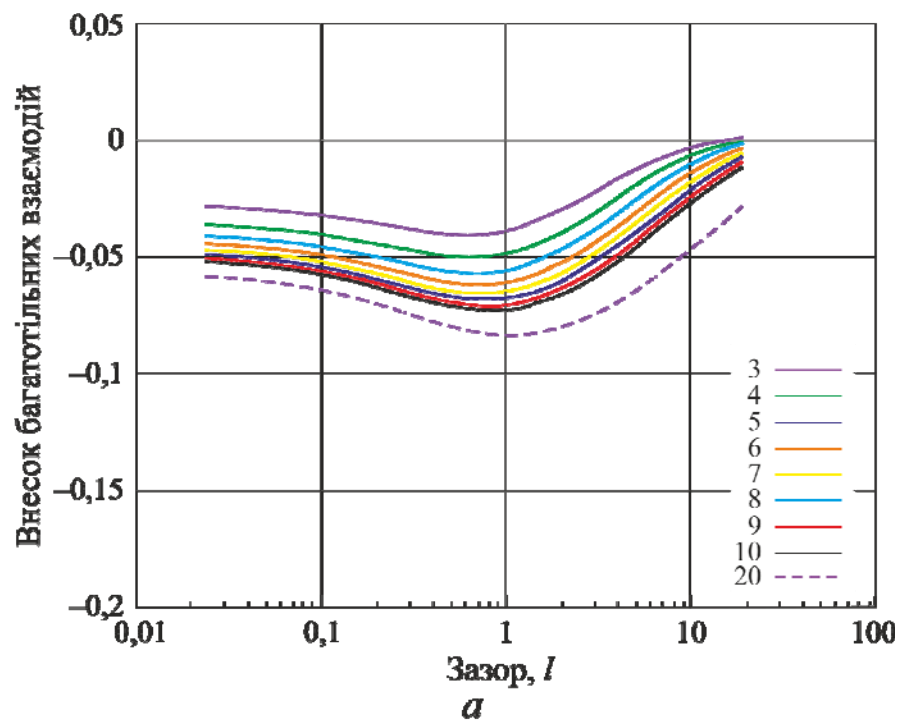
$$A_{ij}^{\phi} = T_{ij}^{\phi} = \left(\delta^{\chi\phi} - 3r_{ij}^{\chi} r_{ij}^{\phi} / r_{ij}^2 \right) l^3 / r_{ij}^3 \quad (1.6)$$

а всі відмінності у властивостях речовин можуть бути виражені в безрозмірному параметрі $\eta = \alpha / l^3$, тоді енергію взаємодії (1.3) можна записати у вигляді:

$$U = \frac{1}{2} \hbar \omega_0 \sum_{n=1}^{\infty} a_n \eta^{n+1} \left(\text{Tr} A^{\eta^{n+1}} \right) \quad (1.7)$$

Заміна у виразі (1.7) η для тефлону, на параметр іншої речовини дозволить без повтору обчислень шпурів великих матриць відразу отримати енергію взаємодії всіх диполів системи. При цьому, при такій заміні, зміняться відносні внески взаємодій багатьох тіл в повну енергію. Таким чином, аналіз неадитивних поправок, що відповідають окремим членам взаємодій багатьох тіл, дозволить також зрозуміти відмінності в поведінці систем для різних речовин.

На рис. 1.9 показано залежність внеску взаємодій багатьох тіл (тобто сума поправок на взаємодію трьох, чотирьох і більшої кількості тіл) від величини проміжку між кубами різних розмірів з гранями, орієнтованими паралельно одна одній.



a – випадок кубічних наночастинок різних розмірів як функція від величини проміжку;

б – випадок кубічних наночастинок $20 \times 20 \times 20$ з плоскопаралельним проміжком

Рисунок 1.9 – Внесок поправок на взаємодію багатьох тіл. Пунктирні лінії відображають поправки, які мають знак, протилежний знаку взаємодій двох тіл.

У такій системі сума взаємодій багатьох тіл має знак, протилежний знаку парних взаємодій, і тому послаблює притягання між частинками. Вплив

неадитивних поправок змінюється немонотонно і максимум ослаблення доводиться на величини проміжків порядку товщини одного моношару, а збільшення розмірів частинок призводить до збільшення ролі взаємодій багатьох тіл. Для кубиків розміром $20 \times 20 \times 20$ внесок взаємодій багатьох тіл досягає 8%, при цьому з наведених результатів можна очікувати, що роль взаємодій багатьох тіл буде зростати при переході від наночастинок до частинок великих розмірів.

Дослідження ролі поправок на взаємодію багатьох тіл різних порядків, наведених на рис. 1.10, показує, що ці поправки мають знаки, які чергуються (для зручності відображення, поправки з іншим знаком відносно випадку взаємодії двох тіл, домножено на -1 і показано пунктиром). При цьому поправки на взаємодію трьох і чотирьох тіл домінують над іншими внесками і взаємно послаблюють одна одну. На малих відстанях, взаємодія трьох тіл значно сильніша взаємодії чотирьох тіл, проте, зі зростанням величини проміжку ситуація змінюється і, оскільки на великих відстанях внесок від взаємодії трьох тіл зменшується швидше, домінуючою стає поправка на взаємодію чотирьох тіл.

При зміні взаємної орієнтації кубічних частинок, внесок взаємодії багатьох тіл також змінюється. На рис. 1.11 показано залежність внеску неадитивних поправок в енергію взаємодії кубів $8 \times 8 \times 8$ при різних величинах проміжку, як функцію від кута взаємної орієнтації граней. При цьому виявляється, що максимальний ефект від взаємодії багатьох тіл, а, отже, і мінімальна енергія взаємодії, відповідають паралельній орієнтації граней кубів.

Для систем зі складною геометрією також характерна немонотонна зміна внеску поправок на взаємодію багатьох тіл із наявністю максимумів і мінімумів.

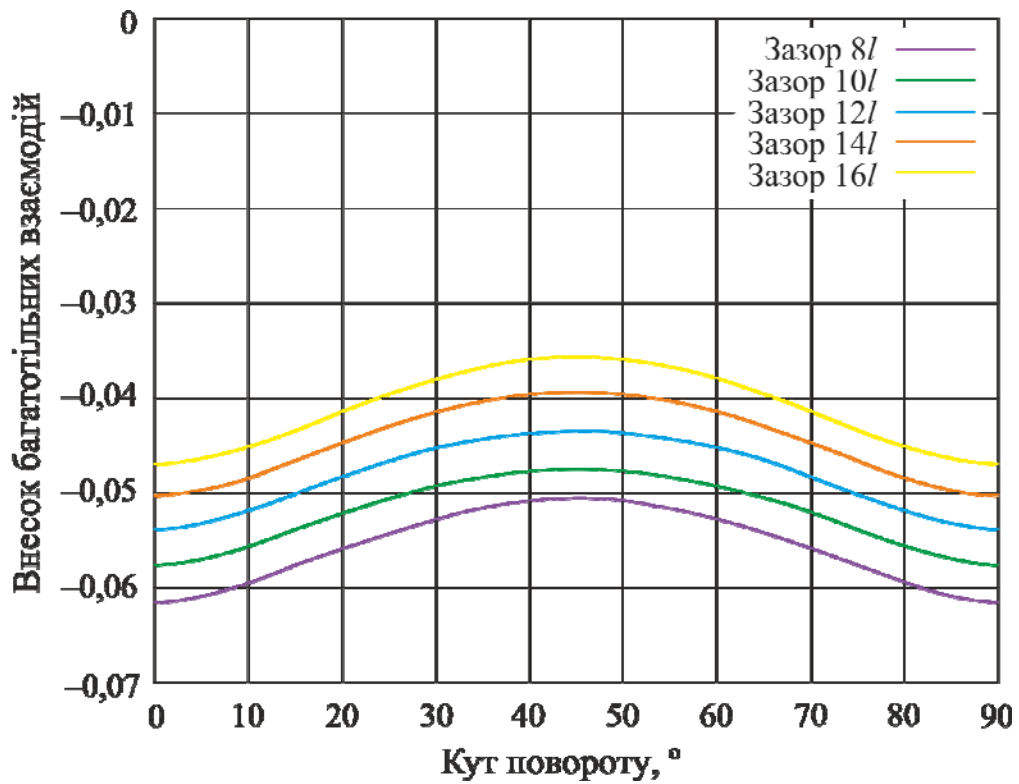


Рисунок 1.10 – Внесок поправок на взаємодію багатьох тіл у випадку кубічних наночастинок на різних відстанях як функція від кута взаємного повороту

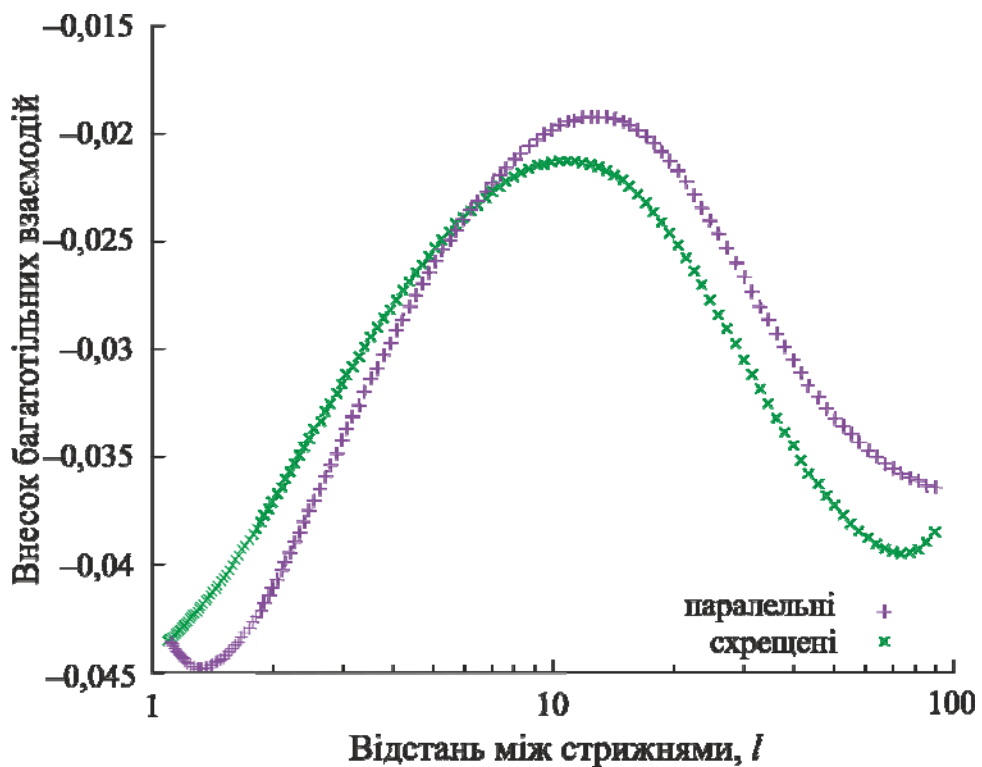


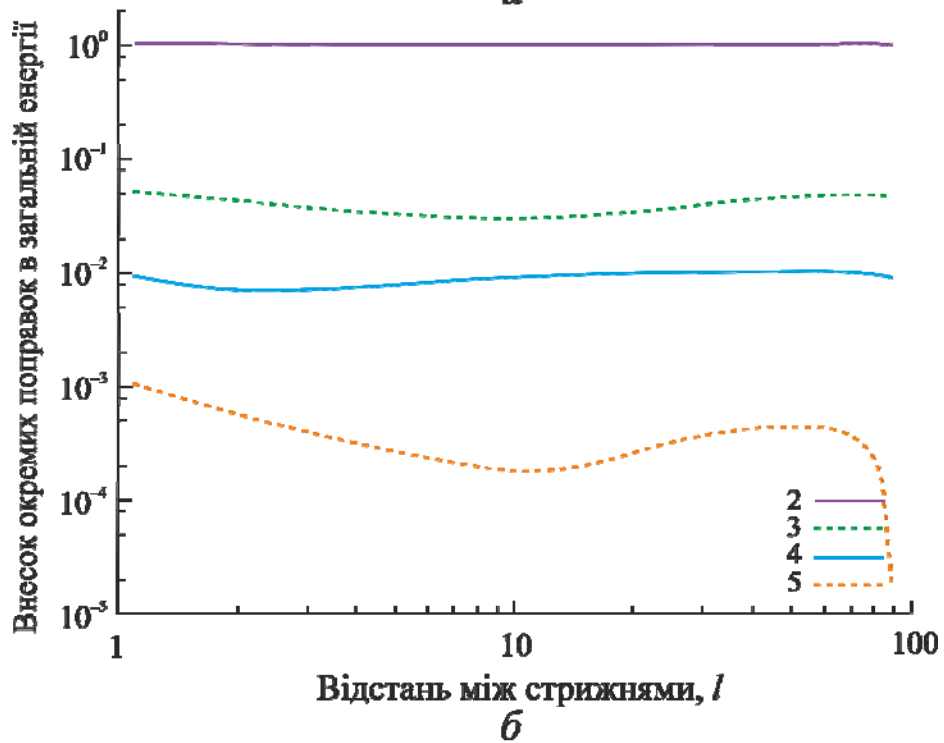
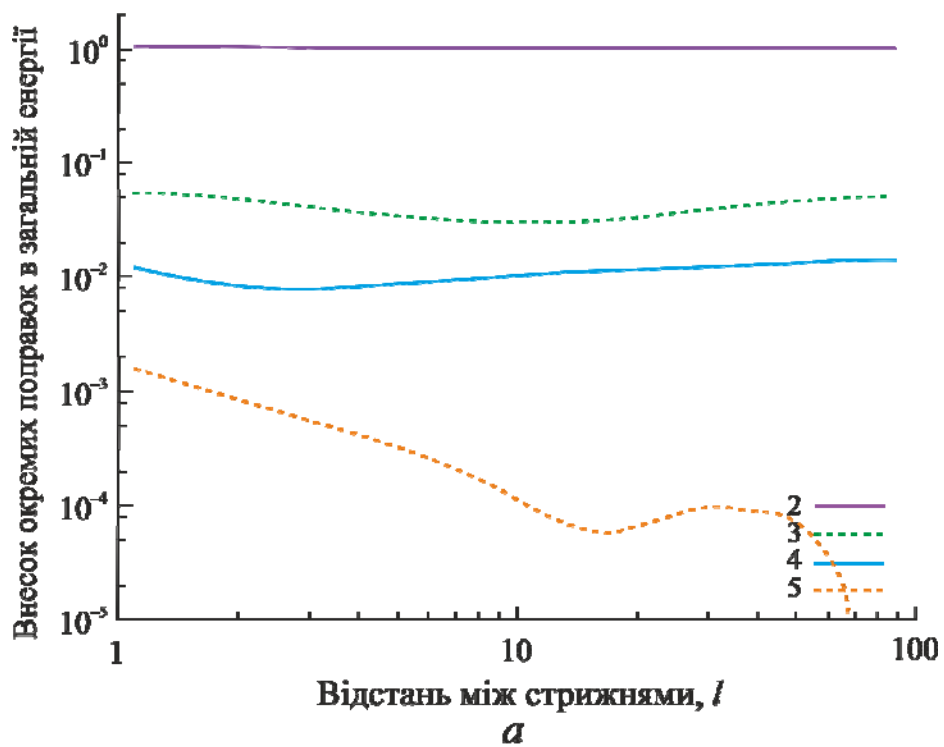
Рисунок 1.11 – Внесок поправок на взаємодію багатьох тіл у випадку паралельних і схрещених дротів як функція від відстані

Так, для систем схрещених і паралельних стрижнів (рис. 1.12) характерний мінімум впливу неадитивних поправок на зазорах порядку $10l$. Така поведінка пояснюється зближенням за абсолютною величиною взаємнокомпенсуючих поправок на потрійні та четверні взаємодії, що в цьому інтервалі товщин мають мінімум і максимум відповідно (рис. 1.13, *a* і *б*).

При цьому, на відміну від систем взаємодіючих кубічних частинок, у випадку нанодротів відносний внесок поправок на взаємодію трьох та чотирьох тіл практично не змінюється зі збільшенням відстані (див. рис. 1.13).

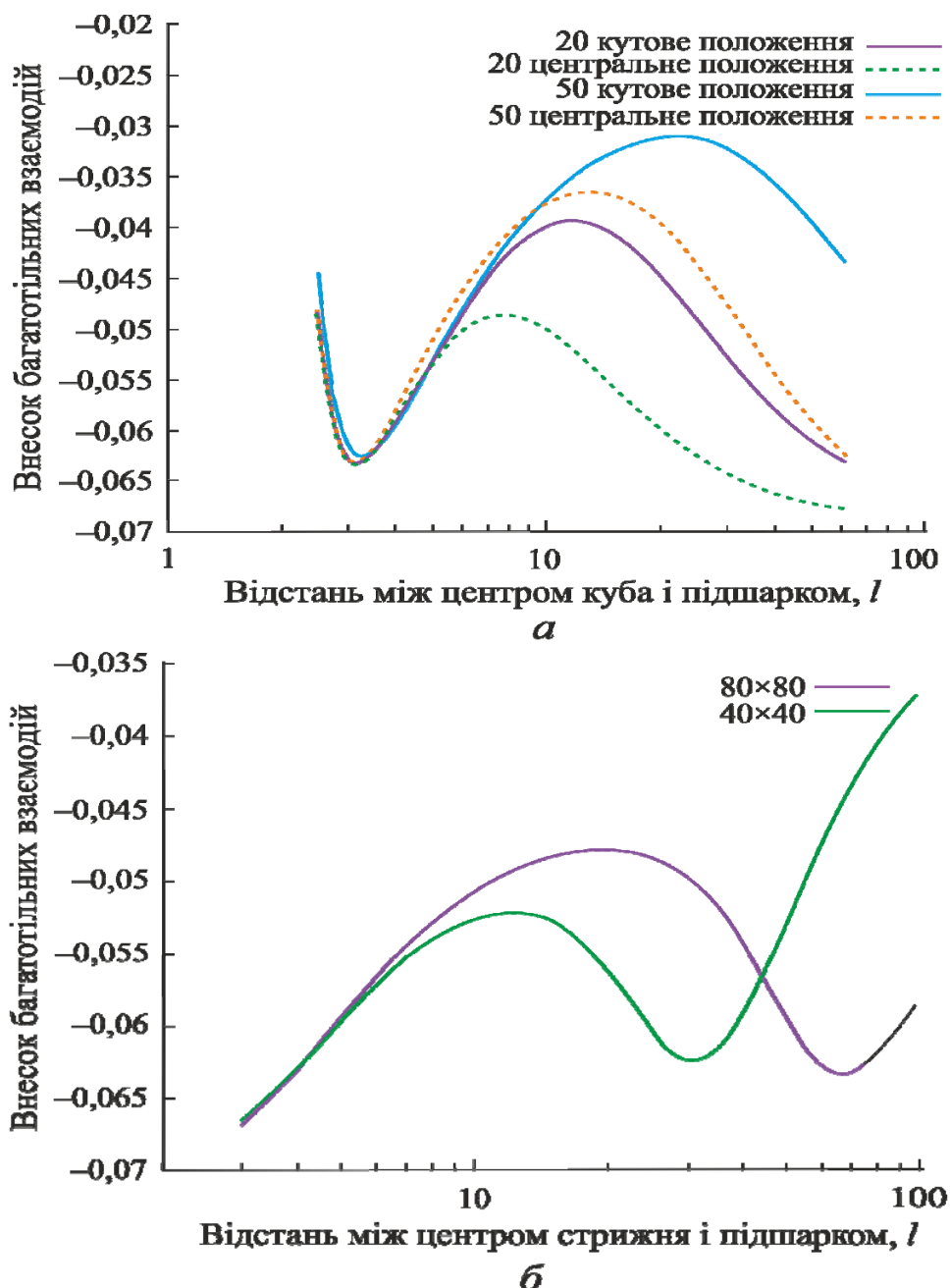
У системах взаємодіючих наночастинки і моношару, а також нанодроту і моношару, внесок поправок на взаємодію багатьох тіл виявляється трохи вище, ніж в системах схрещених дротів і може досягати 7% для розглянутих систем. При цьому для системи, що включає наночастинку і моношар (рис. 1.13, *a*), збільшення розміру моношару призводить до зменшення, а перехід від кутового розташування до центральносиметричного – до збільшення неадитивних внесків у взаємодії на тих самих відстанях. У системі нанодріт-моношар (рис. 1.13, *б*) така поведінка не спостерігається і зміна розмірів системи призводить лише до зміщення вторинного мінімуму в область товщин, що відповідають розмірам моношару.

У системах взаємодіючих наночастинки і моношару, а також нанодроту і моношару, внесок поправок на взаємодію багатьох тіл виявляється трохи вище, ніж в системах схрещених дротів і може досягати 7% для розглянутих систем. При цьому для системи, що включає наночастинку і моношар (рис. 1.13, *a*), збільшення розміру моношару призводить до зменшення, а перехід від кутового розташування до центральносиметричного – до збільшення неадитивних внесків у взаємодії на тих самих відстанях. У системі нанодріт-моношар (рис. 1.13, *б*) така поведінка не спостерігається і зміна розмірів системи призводить лише до зміщення вторинного мінімуму в область товщин, що відповідають розмірам моношару.



a – паралельні дроти; $б$ – схрещені дроти

Рисунок 1.12 – Внесок окремих поправок на взаємодію багатьох тіл у випадку дротів із різним розташуванням. Пунктирні лінії відображають поправки, які мають знак, протилежний знаку взаємодії двох тіл



a – наночастинки і моношару при різних взаємних розташуваннях і розмірах як функція від відстані

$б$ – дроту і моношару при різних розмірах моношару як функція від відстані

Рисунок 1.13 – Внесок поправок на взаємодію багатьох тіл у випадку

Для кожної з розглянутих вище геометрій тефлонових частинок можна, використовуючи співвідношення (1.7), оцінити внески взаємодії багатьох тіл в системах, що містять частинки іншої речовини, але в тій самій геометрії. Для цього, як згадувалося вище, знадобляться тільки літературні дані для поляризованості і густини.

Як приклад, в табл. 1.1 наведено значення величини η [14] для різних речовин, а також максимальний внесок поправок на взаємодію багатьох тіл у випадку симетрично розташованих кубиків з цих речовин, розміром $20 \times 20 \times 20$.

Таблиця 1.1. Максимальний внесок поправок на взаємодію багатьох тіл у випадку симетрично розташованих кубів $20 \times 20 \times 20$ з різних речовин

Речовина	η	Внесок взаємодії багатьох тіл
Тефлон	0.0476	8.3%
Кристалічний кварц	0.0751	12.8%
Плавлений кварц	0.0639	11.0%
Кальцит	0.0858	14.4%
Фторид кальцію	0.0613	10.6%
Полістирол	0.0776	13.1%
Поліізопрен	0.0705	12.0%

1.3 Адитивне наближення для сил Ван - дер - Ваальса

Коректні розрахунки силових взаємодій між зондом АСМ і зразком необхідні для інтерпретації вимірювань в статичних і динамічних режимах АСМ [17-19]. У випадку взаємодії між конічним зондом з сферичним закінченням і товстою пластиною відомі різні вирази для сил Ван-дер-Ваальса [20-22], тому розглянемо це питання більш детально. Аналітичний розрахунок сил Ван-дер-Ваальса між протяжними тілами складної форми, що мають довільні матеріальні властивості, практично неможливий, тому до теперішнього часу точний розв'язок цієї задачі було отримано лише в двох граничних випадках: в геометрії плоскопаралельних пластин з вакуумною щілиною [23] або з щілиною, заповненою деякою іншою речовиною [24], і в разі малої сферичної частинки над пластиною [25]:

$$F_{\text{wdw}} = -\frac{AR}{6z^2}. \quad (1.8)$$

Формула (1.8) також впливає з формули Ліфшиця для взаємодії пластин, якщо застосовується локально - плоске наближення Дєрягіна [26]:

$$F_{\text{wdw}} = 2\pi R u(z), \quad (1.9)$$

де $u(z)$ - густина вільної енергії флуктуаційного електромагнітного поля у вакуумній щілині між пластинами, віднесена до одиниці площі; R - радіус сферичного тіла. З достатньою для потреб АСМ точністю $u(z)$ представляється у вигляді [27]

$$u(z) = -\frac{\eta}{16\pi^2 z^2} \int_0^\infty \frac{\epsilon_1(i\omega) - 1}{\epsilon_1(i\omega) + 1} \frac{\epsilon_2(i\omega) - 1}{\epsilon_2(i\omega) + 1} d\omega = -\frac{A}{12\pi z^2}, \quad (1.10)$$

де $\epsilon_{1,2}(i\omega)$ - діелектричні проникності матеріалів пластин (на уявних частотах), A - константа Гамакера. Комбінуючи (1.9) і (1.10), приходимо до (1.8). Більш простим способом до цієї формули можна прийти за допомогою методу. підсумовування енергії парних міжатомних взаємодій між атомами пластин, $u_0(r) = -C/r^6$. Так, в разі геометрії плоских пластин одержуємо [28]

$$u(z) = -\frac{\pi n_1 n_2 C_6}{12z^2}, \quad (1.11)$$

де n_1 і n_2 - густини атомів матеріалів пластин 1 і 2.

З порівняння (1.10) і (1.11) випливає, що $A = \pi^2 n_1 n_2 C_6$. Отримане співвідношення застосовують, для перенормування розрахунків сил Ван-дер-Ваальса в адитивному наближенні [29]. Для геометрії сфера - площина при малій ширині проміжку z будемо також мати співвідношення (1.8) [30].

Розглянемо вандерваальсівську взаємодію з пластиною у випадку протяжного кінчного зонда АСМ, що закінчується сферичною опуклістю (див. рис. 1.14).

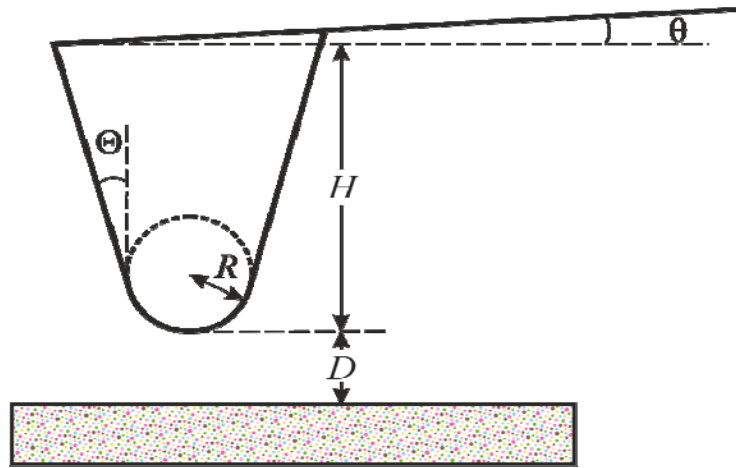


Рисунок 1.14 – Схематичне зображення зонда АСМ на відстані D від плоскої поверхні: R – радіус заокруглення апекса зонда, H – висота зонда, θ – кут напівроствору конічної частини, ϑ – кут нахилу балки кантилевера до поверхні зразка

Автори [20-22], посилаючись на метод адитивного: підсумовування парних потенціалів, наводять, проте, різні вирази для сили Ван-дер-Ваальса. Так, в [21], виходячи з потенціалу що запізнюється $u_0(r) = -A^+/r^7$, отримано наступний вираз для енергії взаємодії зонда зі зразком

$$U_{wdw} = -\frac{\pi^2 n_1 n_2 A^+}{30} \left[\frac{1 + \tan^2 \theta}{z + R(1 - \sin \theta)} + \frac{R - z}{z^2} \right]. \quad (1.12)$$

Сила F_{wdw} надалі знаходиться диференціюванням $F_{wdw} = -\partial U_{wdw} / \partial z$.

Бачимо, що залежність $F_{wdw}(z)$, яку при цьому одержують, принципово відрізняється від (1.8) і виразу з [20]

$$F_{wdw} = -\frac{A}{6} \left[\frac{R}{z^2} + \frac{\tan^2 \theta}{z + R(1 - \sin \theta)} - \frac{R(1 - \sin \theta)}{z(z + R(1 - \sin \theta))} \right]. \quad (1.13)$$

Проте, як легко переконатися, вирази в дужках в (1.18) і (1.13) (див. далі) дорівнюють один одному. Таким чином, формально формула (1.13) впливає з (1.18) при виконанні заміни, хоча (1.13) описує не силу, а енергію взаємодії

зонда з пластиною. Автори [20], приводячи формулу (1.13), посилаються на роботу [22], в якій в наближенні, що не запізнюється, для сили Ван-дер-Ваальса було одержано вираз

$$F_{\text{vdw}} = -\frac{AR^2(1-\sin\theta)((R-z)\sin\theta - R - z)}{6z^2} + \frac{H \tan\theta((R+z)\sin\theta + R \cos 2\theta)}{6 \cos\theta(z + R(1-\sin\theta))^2} \quad (1.14)$$

Бачимо, що в межі $z \ll R$ (1.14) і (1.13) узгоджуються з (1.8). Внаслідок зовнішньої відмінності формул (1.13) і (1.14) виконаємо незалежний розрахунок. В результаті обчислення підтверджують як формулу (1.12), якщо використовується парний потенціал $u_0(r) = -A^+/r^7$, так і формулу (1.13), якщо застосовується потенціал що не запізнюється $u_0(r) = -C/r^6$. Розглянемо другий випадок докладніше.

Спочатку знайдемо взаємодію одного атома з нескінченної тонкою пластиною, яка характеризується однорідною поверхневою густиною атомів n_s (рис. 1.15)

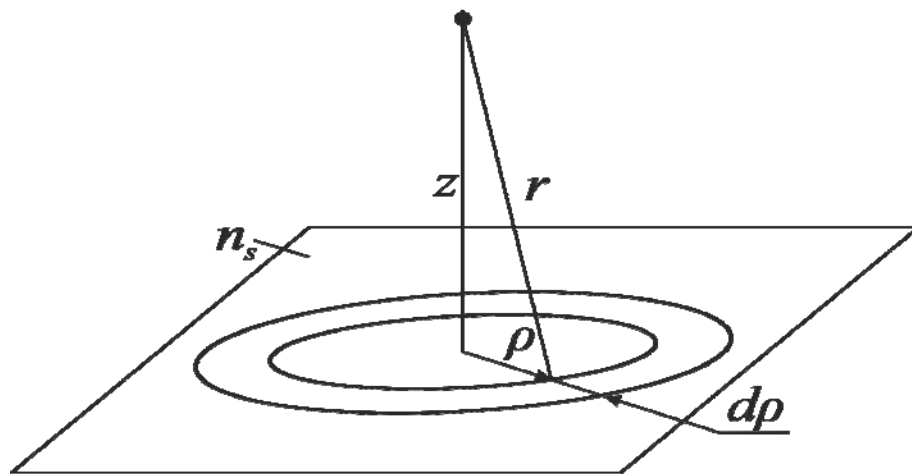


Рисунок 1.15 – Схематичне зображення атома над нескінченно тонкою площиною, z – відстань між атомом і площиною, r – відстань між атомом і довільною точкою на площині, ρ – радіус виділеного кільця і $d\rho$ – нескінченно малий приріст радіуса виділеного кільця

$$u_1(z) = -C_6 \int_0^\infty \frac{2\pi n_s \rho d\rho}{(z^2 + \rho^2)^3} = -\frac{2\pi C_6 n_s}{5z^4}. \quad (1.15)$$

Використовуючи (1.15), легко також знайти енергію взаємодії атома з товстої пластиною, яка характеризується об'ємною густиною атомів n_2 , розбиваючи її на тонкі шари з поверхневою концентрацією n_s . Для цього вважаємо $n_s \rightarrow n_2 dz'$ і інтегруємо $u_1(z)$ в межах від z до ∞ :

$$u_2(z) = n_2 \int_z^\infty u_1(z') dz' = -\frac{2\pi}{15} C_6 n_2 \frac{1}{z^3} = -\frac{C_3}{z^3}. \quad (1.16)$$

На наступному етапі розрахунку замінюємо атом протяжним зондом, що характеризується однорідним розподілом атомів з густиною n_1 . У разі аксіально симетричного зонда у вигляді зрізаного конуса зі сферичною краєм (рис. 1.16) результуючий потенціал вандерваальсівської взаємодії зонда з пластиною буде виражатися інтегралом за висотою z' зонда:

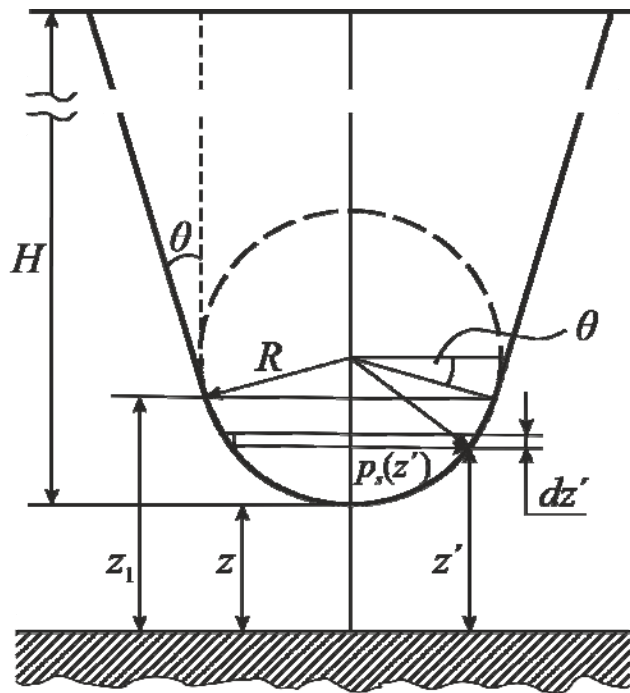


Рисунок. 1.16 – Схематичне зображення конічного зонда зі сферичним закінченням

$$U_{wdw}(z) = C_3 n_2 \left(\int_z^{z_1} \frac{\pi \rho_s^2(z') dz'}{z'^3} + \int_z^{H+z} \frac{\pi \rho_c^2(z') dz'}{z'^3} \right), \quad (1.17)$$

де $z_1 = z + R(1 - \sin \theta)$, R - радіус заокруглення сферичної частини зонда, H - висота зонда, θ - кут напівроствору конуса (рис. 1.16). Сенс підінтегральних функцій в (1.17) зрозумілий: $\pi \rho_{c,s}^2(z') dz'$ є елементарним об'ємом зонда, всі атоми якого віддалені на однакову відстань z' від поверхні пластини. Для сферичної і конічної частин зонда, відповідно, можна записати $\rho_s^2(z') = R^2 - (R + z - z')^2$ і $\rho_c^2(z') = [R \cos \theta + (z' - z_1) \tan \theta]^2$. Сила взаємодії знаходиться диференціюванням (1.17): $F_{wdw} = -\partial U_{wdw} / \partial z$. Після елементарного інтегрування та наступного диференціювання за змінною z виразів в правій частині (1.17), переходячи до границі $H \rightarrow \infty$, остаточно знаходимо

$$F_{wdw} = -\frac{\pi^2 n_1 n_2 C_6}{6} \left[\frac{R}{z^2} + \frac{\tan^2 \theta}{z + R(1 - \sin \theta)} - \frac{R(1 - \sin \theta)}{z(z + R(1 - \sin \theta))} \right]. \quad (1.18)$$

Роблячи в (1.18) заміну $\pi^2 n_1 n_2 C_6 \rightarrow A$, приходимо до формули (1.13). Таким чином, формула (1.13), дійсно, відповідає силі Ван-дер-Ваальса в адитивному наближенні що не запізнюється. В свою чергу, в ідентичності (1.14) і (1.13) можна переконатися аналітично або шляхом чисельного порівняння обох формул.

2 ДОСЛІДЖЕННЯ РОЗМІРНИХ ЗАЛЕЖНОСТЕЙ ПАРАМЕТРА ГАМАКЕРА ТА ВІЛЬНОЇ ЕНЕРГІЇ ВАН-ДЕР-ВААЛЬСІВСЬКОЇ ВЗАЄМОДІЇ ДЛЯ СИСТЕМИ ДВОХ СФЕРИЧНИХ МЕТАЛЕВИХ НАНОЧАСТИНОК

2.1 Вільна енергія взаємодії та параметр Гамакера для системи двох наночастинок

Розглянемо вандерваальсівську взаємодію двох сферичних металевих наночастинок. Вважатимемо, що частинки мають однаковий радіус R і виготовлені з одного металу, властивості якого описуються діелектричною функцією $\epsilon(\omega)$, а відстань між центрами наночастинок d (рис. 2.1).

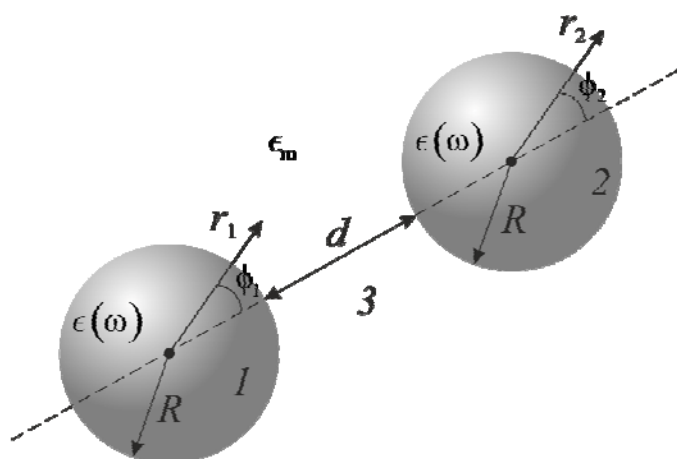


Рисунок 2.1 – Геометрія задачі

Для кожної частинки введемо сферичну систему координат (r_1, ϕ_1, θ_1) і (r_2, ϕ_2, θ_2) . Внаслідок того, що явища в системі не залежать від азимутальних кутів, для Фур'є-компонент скалярного потенціалу в наночастинках (області 1 і 2) і в оточуючому просторі (область 3) з діелектричною проникністю ϵ_m маємо рівняння Гельмгольца

$$\begin{aligned} \left[\frac{1}{r_1^2} \frac{\partial}{\partial r_1} \left(r_1^2 \frac{\partial}{\partial r_1} \right) + \frac{1}{r_1^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi_1^2} \right] \varphi_{1\omega}(\omega, r_1, \phi_1) &= k^2 \varphi_{1\omega}(\omega, r_1, \phi_1), \\ \left[\frac{1}{r_2^2} \frac{\partial}{\partial r_2} \left(r_2^2 \frac{\partial}{\partial r_2} \right) + \frac{1}{r_2^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi_2^2} \right] \varphi_{2\omega}(\omega, r_2, \phi_2) &= k^2 \varphi_{2\omega}(\omega, r_2, \phi_2). \end{aligned} \quad (2.1)$$

Розв'язки рівнянь (2.1) для областей 1 і 2 мають вигляд

$$\begin{aligned} \varphi_{1\omega}(\omega, r_1, \phi_1) &= \sqrt{\frac{\pi}{2kr_1}} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} C_{1m} I_{m+\frac{1}{2}}(kr_1) e^{im\phi_1}, \\ \varphi_{2\omega}(\omega, r_2, \phi_2) &= \sqrt{\frac{\pi}{2kr_2}} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} C_{2m} I_{m+\frac{1}{2}}(kr_2) e^{im\phi_2}, \end{aligned} \quad (2.2)$$

а для області 3

$$\varphi_{3\omega}(\omega, r_1, \phi_1, r_2, \phi_2) = \sqrt{\frac{\pi}{2k}} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \left(\frac{A_{1m}}{\sqrt{r_1}} K_{m+\frac{1}{2}}(kr_1) e^{im\phi_1} + \frac{A_{2m}}{\sqrt{r_2}} K_{m+\frac{1}{2}}(kr_2) e^{im\phi_2} \right), \quad (2.3)$$

де k – хвильове число; $I_{m+\frac{1}{2}}(x)$ та $K_{m+\frac{1}{2}}(x)$ – функції Інфельда та Макдональда напівцілого порядку, а коефіцієнти A_{1m} , A_{2m} , C_{1m} і C_{2m} визначаються з граничних умов неперервності потенціалу і нормальної складової вектора електричної індукції

$$\begin{aligned} \varphi_{1\omega}|_{r_1=R} &= \varphi_{3\omega}|_{r_1=R}, \quad \varphi_{2\omega}|_{r_2=R} = \varphi_{3\omega}|_{r_2=R}; \\ T(\omega) \frac{\partial \varphi_{1\omega}}{\partial r_1} \Big|_{r_1=R} &= T_m \frac{\partial \varphi_{3\omega}}{\partial r_1} \Big|_{r_1=R}; \\ T(\omega) \frac{\partial \varphi_{2\omega}}{\partial r_2} \Big|_{r_2=R} &= T_m \frac{\partial \varphi_{3\omega}}{\partial r_2} \Big|_{r_2=R}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Для одержання залежності потенціалу $\Phi_{3\omega}$ від однієї групи координат, скористаємось теоремою додавання Графа

$$\begin{aligned}\frac{1}{\sqrt{r_1}} K_{n+\frac{1}{2}}(kr_1) e^{in\phi_1} &= \frac{1}{\sqrt{r_2}} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} K_{n+m+1}(kd) I_{m+\frac{1}{2}}(kr_2) e^{im\phi_2}; \\ \frac{1}{\sqrt{r_2}} K_{n+\frac{1}{2}}(kr_2) e^{in\phi_2} &= \frac{1}{\sqrt{r_1}} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} K_{n+m+1}(kd) I_{m+\frac{1}{2}}(kr_1) e^{im\phi_1},\end{aligned}\quad (2.5)$$

Враховуючи співвідношення

$$\begin{aligned}\left. \frac{\partial \Phi_{1\omega}}{\partial r_1} \right|_{r_1=R} &= -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2kR^3}} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} C_{1m} I_{m+\frac{1}{2}}(kR) e^{im\phi_1} + \\ &+ \sqrt{\frac{\pi}{2kR}} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} C_{1m} \frac{d}{dr_1} \left(I_{m+\frac{1}{2}}(kr_1) \right) \Big|_{r_1=R} e^{im\phi_1}; \\ \left. \frac{\partial \Phi_{2\omega}}{\partial r_2} \right|_{r_2=R} &= -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2kR^3}} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} C_{2m} I_{m+\frac{1}{2}}(kR) e^{im\phi_2} + \\ &+ \sqrt{\frac{\pi}{2kR}} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} C_{2m} \frac{d}{dr_2} \left(I_{m+\frac{1}{2}}(kr_2) \right) \Big|_{r_2=R} e^{im\phi_2}; \\ \left. \frac{\partial \Phi_{3\omega}}{\partial r_1} \right|_{r_1=R} &= -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2kR^3}} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \left(A_{1m} K_{m+\frac{1}{2}}(kR) + \sum_{p=-\infty}^{+\infty} A_{2p} K_{p+m+1}(kR) I_{m+\frac{1}{2}}(kR) \right) e^{im\phi_1} + \\ &+ \sqrt{\frac{\pi}{2kR}} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \left(A_{1m} \frac{d}{dr_1} \left(K_{m+\frac{1}{2}}(kr_1) \right) \Big|_{r_1=R} + \sum_{p=-\infty}^{+\infty} A_{2p} K_{p+m+1}(kR) \frac{d}{dr_1} \left(I_{m+\frac{1}{2}}(kr_1) \right) \Big|_{r_1=R} \right) e^{im\phi_1}; \\ \left. \frac{\partial \Phi_{3\omega}}{\partial r_2} \right|_{r_2=R} &= -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2kR^3}} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \left(A_{2m} K_{m+\frac{1}{2}}(kR) + \sum_{p=-\infty}^{+\infty} A_{1p} K_{p+m+1}(kR) I_{m+\frac{1}{2}}(kR) \right) e^{im\phi_2} + \\ &+ \sqrt{\frac{\pi}{2kR}} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \left(A_{2m} \frac{d}{dr_2} \left(K_{m+\frac{1}{2}}(kr_2) \right) \Big|_{r_2=R} + \sum_{p=-\infty}^{+\infty} A_{1p} K_{p+m+1}(kR) \frac{d}{dr_2} \left(I_{m+\frac{1}{2}}(kr_2) \right) \Big|_{r_2=R} \right) e^{im\phi_2}\end{aligned}$$

та підставляючи (2.5) в (2.2) – (2.4), отримуємо

$$\begin{aligned}
C_{1m} I_{m+\frac{1}{2}}(kR) &= A_{1m} K_{m+\frac{1}{2}}(kR) + \sum_{p=-\infty}^{+\infty} A_{2p} K_{p+m+1}(kd) I_{m+\frac{1}{2}}(kR); \\
C_{2m} I_{m+\frac{1}{2}}(kR) &= A_{2m} K_{m+\frac{1}{2}}(kR) + \sum_{p=-\infty}^{+\infty} A_{1p} K_{p+m+1}(kd) I_{m+\frac{1}{2}}(kR); \\
T(\omega) C_{1m} f(kR) &= \left\{ A_{1m} g(kR) + f(kR) \sum_{p=-\infty}^{+\infty} A_{2p} K_{p+m+1}(kd) \right\}_{T_m}; \\
T(\omega) C_{2m} f(kR) &= \left\{ A_{2m} g(kR) + f(kR) \sum_{p=-\infty}^{+\infty} A_{1p} K_{p+m+1}(kd) \right\}_{T_m},
\end{aligned} \tag{2.6}$$

де введено позначення

$$\begin{aligned}
f(kR) &= -I_{m+\frac{1}{2}}(kR) + kR \left(I_{m-\frac{1}{2}}(kR) + I_{m+\frac{3}{2}}(kR) \right); \\
g(kR) &= -K_{m+\frac{1}{2}}(kR) - kR \left(K_{m-\frac{1}{2}}(kR) + K_{m+\frac{3}{2}}(kR) \right).
\end{aligned}$$

Позбавляючись від C_{1m} і C_{2m} у співвідношеннях (2.6), отримаємо систему рівнянь

$$\begin{aligned}
A_{1m} + \Delta_{1m} \sum_{p=-\infty}^{+\infty} A_{2p} K_{m+p+1}(kd) &= 0; \\
A_{2m} + \Delta_{2m} \sum_{p=-\infty}^{+\infty} A_{1p} K_{m+p+1}(kd) &= 0,
\end{aligned}$$

а вирази для $\Delta_{1m} = \Delta_{2m} = \Delta_m$ можна отримати з системи рівнянь (2.6):

$$\Delta_m = \left(T(\omega) - T_m \right) I_{m+\frac{1}{2}}(kR) f(kR) \left\{ T(\omega) f(kR) K_{m+\frac{1}{2}}(kR) - T_m g(kR) I_{m+\frac{1}{2}}(kR) \right\}^{-1}. \tag{2.7}$$

Вираз для вільної енергії вандерваальсівської взаємодії сферичних наночастинок може бути записаний у вигляді

$$F(d) = k_B T V \sum'_{n=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \ln \det(\hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{L}}(i\omega_n, k)), \quad (2.8)$$

де інтегрування ведеться по всьому сферичному $\mathbf{k}$ -простору; k_B – стала Больцмана, T – температура, V – об'єм системи, $\hat{\mathbf{I}}$ – одиничний оператор, а матриця оператора $\hat{\mathbf{L}}$ має вигляд

$$L_{lm} = \sum_{p=-\infty}^{+\infty} \Delta_{1m}(k, i\omega_n) \Delta_{2p}(k, i\omega_n) K_{m+p+1}(kd) K_{l+p+1}(kd). \quad (2.9)$$

Для спрощення формули (2.8) скористаємось тим, що відстань між наночастинками значно більша за їх радіус ($R/d = 1$). Крім того, основний внесок в інтеграл у формулі (2.8) вносить область $kR = 1$. Враховуючи відомі вирази для сферичних функцій Інфельда та Макдональда через елементарні функції

$$I_{m-\frac{1}{2}}(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} z^m \left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^m \operatorname{ch} z,$$

$$K_{m-\frac{1}{2}}(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} z^m \left(-\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^m e^{-z},$$

можна зробити висновок, що всіма членами, крім L_{00} в сумі (2.9) можна знехтувати, а у розкладі

$$\ln \det(\hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{L}}) = -\operatorname{Sp} \hat{\mathbf{L}} - \frac{1}{2} \operatorname{Sp}(\hat{\mathbf{L}}^2) - \frac{1}{3} \operatorname{Sp}(\hat{\mathbf{L}}^3) - \dots$$

врахувати лише перший член.

Оскільки

$$I_v(z) = \sum_{\kappa=0}^{\infty} \frac{(z/2)^{v+2\kappa}}{\kappa! \Gamma(\kappa + v + 1)} \cong \frac{(z/2)^v}{\Gamma(v + 1)},$$

то за малих значень аргументу

$$I_{p-1}(kR) \cong \frac{1}{\Gamma\left(p + \frac{1}{2}\right)} \left(\frac{kR}{2}\right)^{p-\frac{1}{2}}; \quad I_{m-\frac{1}{2}}(kR) \cong \frac{1}{\Gamma\left(m + \frac{1}{2}\right)} \left(\frac{kR}{2}\right)^{m-\frac{1}{2}};$$

$$I_{p+\frac{1}{2}}(kR) \cong \frac{1}{\Gamma\left(p + \frac{3}{2}\right)} \left(\frac{kR}{2}\right)^{p+\frac{1}{2}}; \quad I_{m+\frac{1}{2}}(\kappa\rho_0) \cong \frac{(\kappa\rho_0/2)^{m+\frac{1}{2}}}{\Gamma(m + \frac{3}{2})};$$

$$I_{p+\frac{3}{2}}(kR) \cong \frac{1}{\Gamma\left(p + \frac{5}{2}\right)} \left(\frac{kR}{2}\right)^{p+\frac{3}{2}}; \quad I_{m+\frac{3}{2}}(kR) \cong \frac{1}{\Gamma\left(m + \frac{5}{2}\right)} \left(\frac{kR}{2}\right)^{m+\frac{3}{2}}.$$

У цьому випадку з (2.8) отримаємо співвідношення

$$F(d) = -\frac{k_B TV}{2\pi^2} \sum'_{n=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dk k^2 \text{Sp} \hat{\mathbf{L}} = -\frac{k_B TV}{2\pi^2} \sum'_{n=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dk k^2 \Delta_0^2(k, i\omega_n) K_1^2(kd), \quad (2.10)$$

де у тому ж наближенні

$$\Delta_0(k, i\omega_n) = \frac{\frac{(kR)^3}{3\pi} (\tau(i\omega_n) - \tau_m)}{\tau(i\omega_n) \frac{(kR)^2}{6} + \tau_m (2 + kR)}. \quad (2.11)$$

Підставляючи (2.11) в (2.10), матимемо

$$F(d) = -\frac{k_B TVR^6}{9\pi^4} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\tau(i\omega_n) - \tau_m \right)^2 \int_0^{+\infty} dk \frac{k^8 K_1^2(kd)}{\left[\frac{(kR)^2}{6} \tau(i\omega_n) + (2 + kR)\tau_m \right]^2}. \quad (2.12)$$

Вираз для $\tau(i\omega_n)$ випливає з формули Друде з урахуванням заміни $\omega \rightarrow i\omega_n$ і має вигляд

$$\tau(\omega_n) = \tau(i\omega_n) = \tau^\infty + \frac{\omega_p^2}{\omega_n(\omega_n + \gamma_{\text{eff}})}, \quad (2.13)$$

де ω_p – плазмова частота; γ_{eff} – ефективна швидкість релаксації, що враховує розсіювання в об'ємі та на поверхні наночастинок [31]

$$\gamma_{\text{eff}} = \gamma_{\text{bulk}} + \gamma_s = \gamma_{\text{bulk}} + \mathcal{A} \frac{v_F}{R}, \quad (2.14)$$

а ефективний параметр, що описує ступінь втрати когерентності для сферичних наночастинок можна записати у вигляді [32]

$$\mathcal{A} = \frac{1}{4} \left(\frac{\omega_p}{\omega} \right)^2. \quad (2.15)$$

Оскільки умова $k_B T = \hbar\omega = \hbar c/d$ виконується, то підсумовування в (2.12) можна замінити інтегруванням за ω . Тому, з урахуванням заміни $k_B T \rightarrow \hbar\omega_p$ і співвідношень (2.13) – (2.15), отримаємо вираз

$$F(d) = -\frac{\hbar\omega_p V R^6}{9\pi^4 d^9} \int_0^{+\infty} d\omega \left[T^\infty - T_m + \frac{\omega_p^2}{\omega \left(\omega + \gamma_{\text{bulk}} + \frac{1}{4} \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \frac{v_F}{R} \right)} \right]^2 \times$$

$$\times \int_0^\infty \frac{k^8 K_1^2(x) dx}{\left[\frac{1}{6} \frac{R^2}{d^2} x^2 \left(T^\infty + \frac{\omega_p^2}{\omega \left(\omega + \gamma_{\text{bulk}} + \frac{1}{4} \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \frac{v_F}{R} \right)} \right) + T_m \left(2 + \frac{R}{d} x \right) \right]^2}. \quad (2.16)$$

Змінюючи порядок інтегрування, отримаємо

$$F(d) = -\frac{\hbar\omega_p V R^6}{9\pi^4 d^9} \int_0^\infty dx \times$$

$$\times x^8 K_1^2(x) \int_0^\infty \frac{\left[T^\infty - T_m + \frac{\omega_p^2}{\omega \left(\omega + \gamma_{\text{bulk}} + \frac{1}{4} \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \frac{v_F}{R} \right)} \right]^2}{\left[\frac{1}{6} \frac{R^2}{d^2} x^2 \left(T^\infty + \frac{\omega_p^2}{\omega \left(\omega + \gamma_{\text{bulk}} + \frac{1}{4} \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \frac{v_F}{R} \right)} \right) + T_m \left(2 + \frac{R}{d} x \right) \right]^2} d\omega.$$

Вводячи нові змінні інтегрування $x = kd$ і $y = \omega_p/\omega$, матимемо для вільної енергії вандерваальсівської взаємодії

$$F(d) = -\frac{\hbar\omega_p^2 VR^6}{9\pi^4 d^9} \int_0^\infty x^8 dx K_1^2(x) \int_0^\infty \frac{dy}{y^2} \left[\frac{\tau^\infty - \tau_m + \frac{\omega_p y}{\frac{\omega_p}{y} + \gamma_{\text{bulk}} + \frac{1}{4} \frac{v_F}{R} y^2}}{\tau_m \left(2 + \frac{R}{d} x\right) + \frac{1}{6} \frac{R^2}{d^2} x^2 \left(\tau^\infty + \frac{\omega_p y}{\frac{\omega_p}{y} + \gamma_{\text{bulk}} + \frac{1}{4} \frac{v_F}{R} y^2} \right)} \right]^2,$$

або

$$F(d) = -\frac{\hbar\omega_p VR^6}{9\pi^4 d^9} \int_0^{+\infty} dx x^8 K_1^2(x) \int_0^\infty \frac{dy}{y} \left(\frac{a_3 y^3 + a_2 y^2 + a_1 y + a_0}{b_3 y^3 + b_2 y^2 + b_1 y + b_0} \right)^2, \quad (2.17)$$

де введено позначення

$$\begin{aligned} a_3 &= \frac{1}{4} \frac{v_F}{R} (\tau^\infty - \tau_m); & a_2 &= \omega_p; \\ a_1 &= \gamma_{\text{bulk}} (\tau^\infty - \tau_m); & a_0 &= \omega_p (\tau^\infty - \tau_m); \\ b_3 &= \frac{1}{4} \frac{v_F}{R} \left[\frac{1}{6} \frac{R^2}{d^2} x^2 + \tau_m \left(2 + \frac{R}{d} x \right) \right]; \\ b_2 &= \frac{1}{6} \frac{R^2}{d^2} \omega_p x^2; & b_1 &= \gamma_{\text{bulk}} \left[\frac{1}{6} \frac{R^2}{d^2} x^2 + \tau_m \left(2 + \frac{R}{d} x \right) \right]; \\ b_0 &= \omega_p \left[\frac{1}{6} \frac{R^2}{d^2} x^2 + \tau_m \left(2 + \frac{R}{d} x \right) \right]. \end{aligned}$$

З урахуванням зв'язку параметра Гамакера і вільної енергії вандерваальсівської взаємодії для сферичних тіл [33]

$$F(d) = -\frac{16}{9} A_H \frac{R^6}{d^9} V,$$

отримуємо розмірну залежність даної характеристики

$$A_H = \frac{\hbar \omega_p^2 V}{16 \pi^4} \int_0^\infty x^8 dx K_1^2(x) \int_0^\infty \frac{dy}{y^2} \left[\frac{\tau^\infty - \tau_m + \frac{\omega_p y}{\frac{\omega_p}{y} + \gamma_{\text{bulk}} + \frac{1}{4} \frac{v_F}{R} y^2}}{\tau_m \left(2 + \frac{R}{d} x \right) + \frac{1}{6} \frac{R^2}{d^2} x^2 \left(\tau^\infty + \frac{\omega_p y}{\frac{\omega_p}{y} + \gamma_{\text{bulk}} + \frac{1}{4} \frac{v_F}{R} y^2} \right)} \right]^2,$$

де

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty \frac{dy}{y^2} \left[\frac{\tau^\infty - \tau_m + \frac{\omega_p y}{\frac{\omega_p}{y} + \gamma_{\text{bulk}} + \frac{1}{4} \frac{v_F}{R} y^2}}{\tau_m \left(2 + \frac{R}{d} x \right) + \frac{1}{6} \frac{R^2}{d^2} x^2 \left(\tau^\infty + \frac{\omega_p y}{\frac{\omega_p}{y} + \gamma_{\text{bulk}} + \frac{1}{4} \frac{v_F}{R} y^2} \right)} \right]^2 = \\ &= \int_0^\infty \frac{dy}{y^2} \left[\frac{(\tau^\infty - \tau_m) \left[\frac{\omega_p}{y} + \gamma_{\text{bulk}} + \frac{1}{4} \frac{v_F}{R} y^2 \right] + \omega_p y}{\left[\tau_m \left(2 + \frac{R}{d} x \right) + \frac{1}{6} \frac{R^2}{d^2} x^2 \right] \left[\frac{\omega_p}{y} + \gamma_{\text{bulk}} + \frac{1}{4} \frac{v_F}{R} y^2 \right] + \frac{1}{6} \frac{R^2}{d^2} x^2 \omega_p y} \right]^2 = \\ &= \int_0^\infty \frac{dy}{y^2} \left[\frac{(\tau^\infty - \tau_m) \left[\frac{1}{4} \frac{v_F}{R} y^3 + \gamma_{\text{bulk}} y + \omega_p \right] + \omega_p y^2}{\left[\tau_m \left(2 + \frac{R}{d} x \right) + \frac{1}{6} \frac{R^2}{d^2} x^2 \right] \left[\frac{1}{4} \frac{v_F}{R} y^3 + \gamma_{\text{bulk}} y + \omega_p \right] + \frac{1}{6} \frac{R^2}{d^2} x^2 \omega_p y^2} \right]^2 = \\ &= \int_0^\infty \left(\frac{a_3 y^3 + a_2 y^2 + a_1 y + a_0}{b_3 y^3 + b_2 y^2 + b_1 y + b_0} \right)^2 \frac{dy}{y^2}, \end{aligned}$$

або остаточно

$$A_H = -\frac{\hbar\omega_p}{16\pi^2} \int_0^{+\infty} dx x^8 K_1^2(x) \int_0^\infty \frac{dy}{y} \left(\frac{a_3 y^3 + a_2 y^2 + a_1 y + a_0}{b_3 y^3 + b_2 y^2 + b_1 y + b_0} \right)^2. \quad (2.18)$$

В подальшому співвідношення (2.17) і (2.18) використовуються для розрахунків розмірної залежності вільної енергії та параметра Гамакера у випадку взаємодії наночастинок різних металів, що знаходяться на різних відстанях одна від одної.

2.2 Результати розрахунків та їх обговорення

Розрахунки проводилися для випадку взаємодії наночастинок золота, міді, платини та алюмінію, що знаходяться у повітрі ($\tau_m = 1$). Параметри цих матеріалів вказані в табл. 2.1.

Таблиця 2.1 – Параметри металів [34]

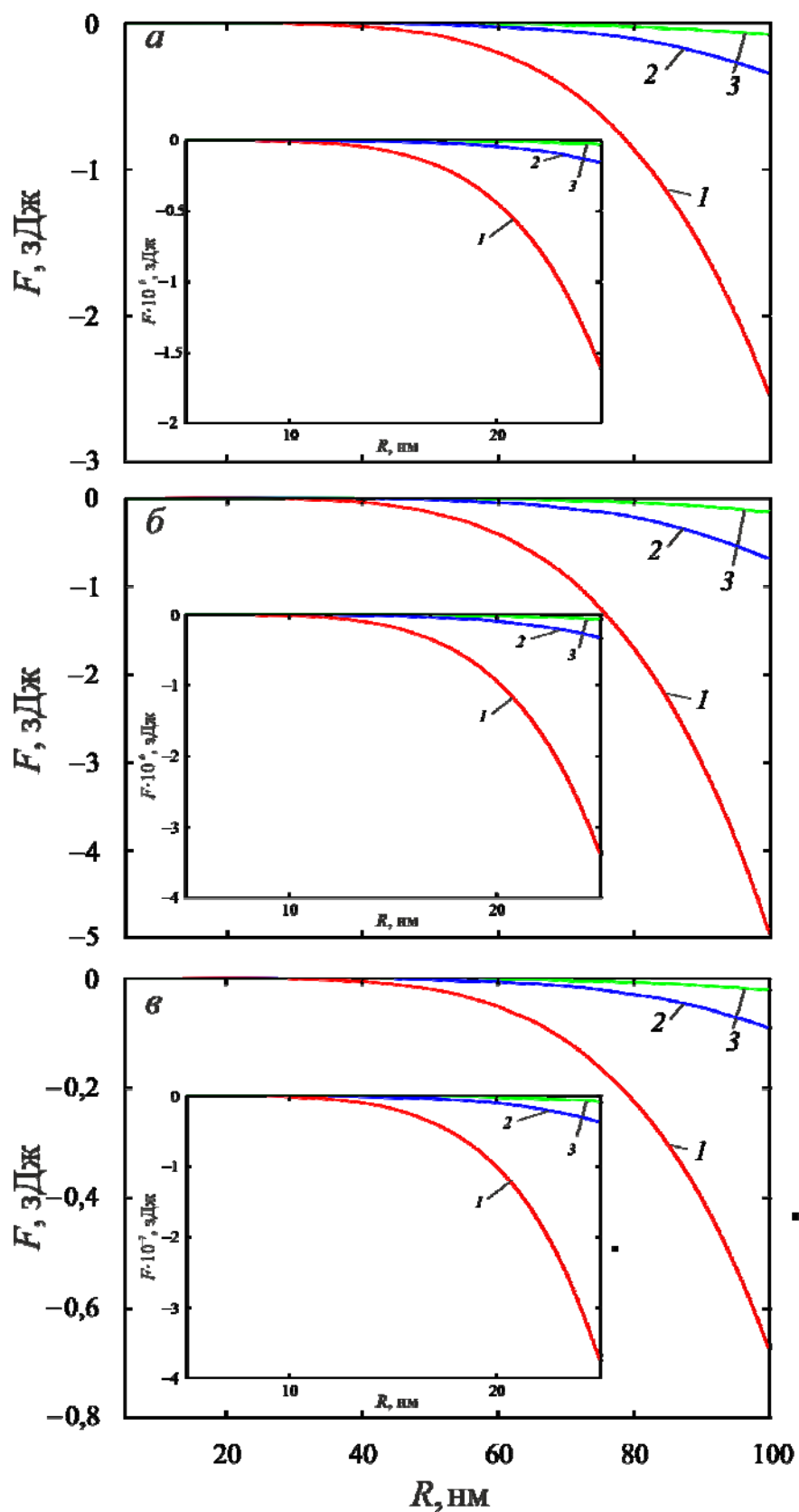
Параметр	Метали			
	Al	Cu	Au	Pt
r_s / a_0	2,07	2,11	3,01	3,27
m^* / m_e	1,06	1,49	0,99	0,54
T^∞	0,7	12,03	9,84	4,42
$\gamma_{\text{bulk}}, 10^{14} \text{ c}^{-1}$	1,25	0,37	0,35	1,05

Перед обговоренням результатів зробимо зауваження відносно розрахунку інтегралів у виразах (2.17) і (2.18). Внутрішні інтеграли у цих виразах є невласними інтегралами другого роду і тому є розбіжними при $y \rightarrow 0$ («ультрафіолетова» катастрофа). Проте, з фізичної точки зору інтерес становить

інтервал частот $\omega \in [0, 0.1\omega_p; 10\omega_p]$ і, відповідно, $y \in [0, 1; 100]$. Тому розрахунок цього інтеграла проводився в цій області частот.

На рис. 2.2 наведено розмірні залежності вільної енергії вандерваальсівської взаємодії для сферичних наночастинок золота, міді та платини. Як бачимо, зі збільшенням розміру наночастинок енергія взаємодії сильно зменшується за відносно невеликих відстанях між частинками, а з його збільшенням практично не залежить від розміру частинок (криві 1 – 3 на рис. 2.2), оскільки в цьому випадку розмір частинок незначний порівняно з відстанню між ними. Для наночастинок відносно малого радіуса такі розмірні залежності показано на вставках до цих рисунків. Якісний характер цих кривих такий самий, як і випадку інтервалу великих радіусів, проте значення вільної енергії менше на три порядки.

На рис. 2.3 продемонстровано розмірні залежності параметра Гамакера для наночастинок тих самих металів, що і у попередньому випадку. Відмітимо, що для всіх металів параметр Гамакера спочатку збільшується, досягаючи максимуму, а потім починає зменшуватися. Однак цей максимум для частинок Au і Cu спостерігається при $R \sim 5$ нм, тоді як для наночастинок Pt і Al при $R \sim 20 \dots 40$ нм, залежно від відстані між ними. Таку поведінку залежності $A_H(R)$ для цих металів можна пояснити суттєвою відмінністю у величині ефективною швидкості релаксації. Так, навіть γ_{bulk} для Pt і Al приблизно втричі більша, ніж для Au і Cu.



a – Au;

б – Cu;

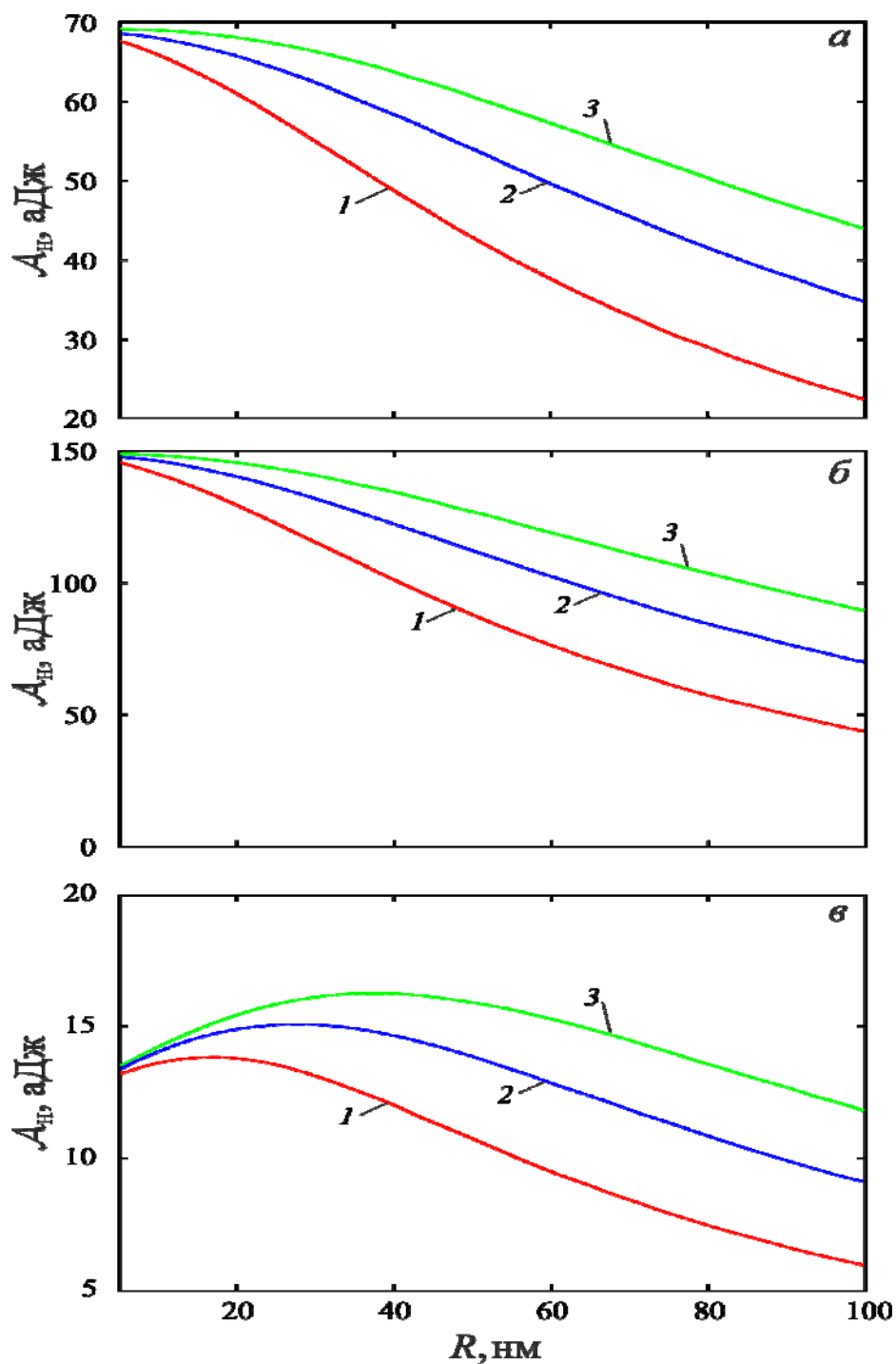
в – Pt;

1 – $d = 500$ нм;

2 – $d = 750$ нм;

3 – $d = 1000$ нм

Рисунок 2.2 – Розмірні залежності вільної енергії взаємодіючих металевих наночастинок, що знаходяться на різних відстанях



a – Au;

б – Cu;

в – Pt

1 – $d = 500$ нм;

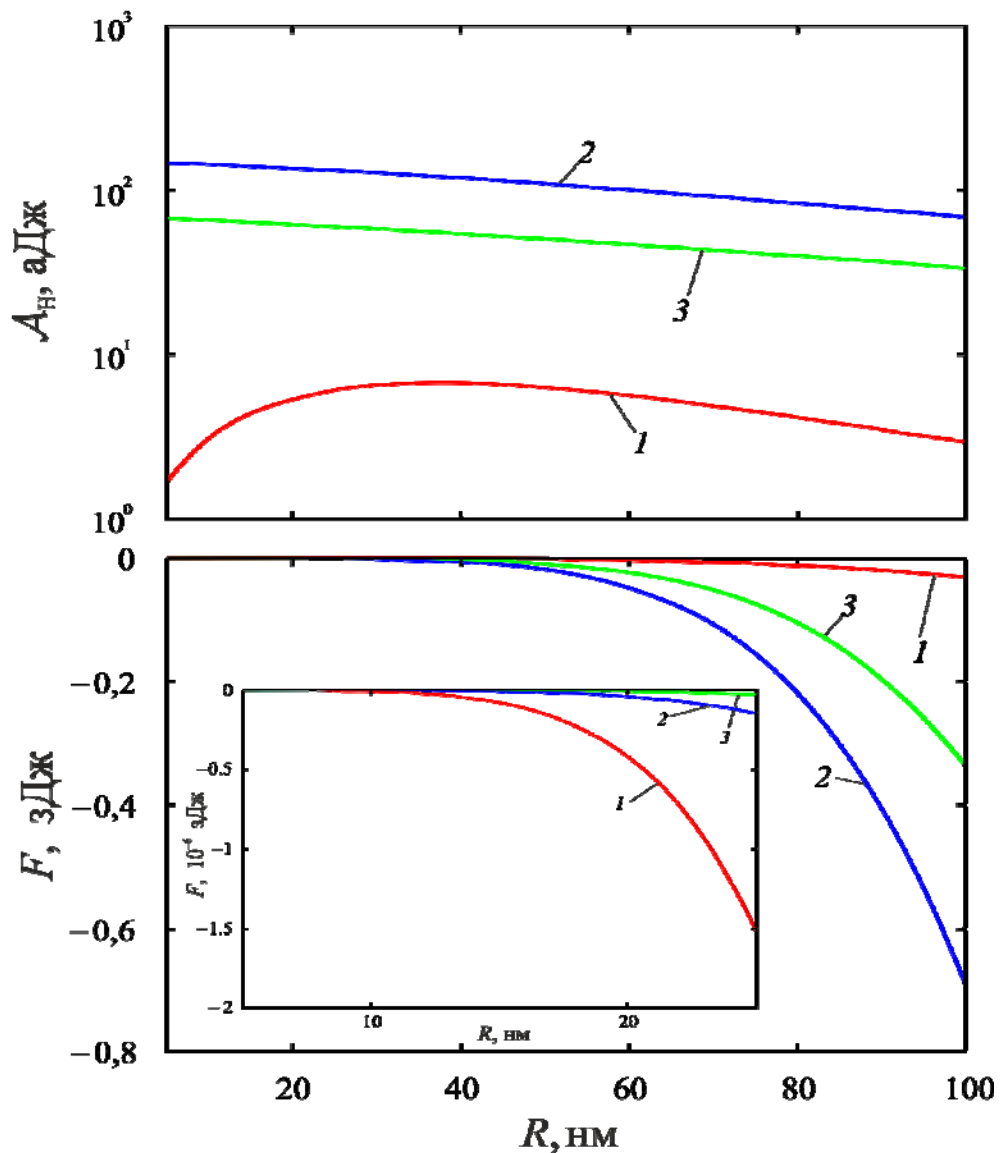
2 – $d = 750$ нм;

3 – $d = 1000$ нм

Рисунок 2.3 – Розмірні залежності параметра Гамакера взаємодіючих металевих наночастинок, що знаходяться на різних відстанях

На рис. 2.4 проводиться порівняння результатів розрахунків розмірних залежностей параметра Гамакера (рис. 2.4, *a*) і вільної енергії (рис. 2.4, *б*) для сферичних наночастинок різних металів, що знаходяться на відстані 500 нм.

Для всіх металів, крім алюмінію має місце зменшення параметра Гамакера при збільшенні розмірів частинок і зменшення вільної енергії, проте для всіх металів, крім золота її зменшення незначне. Криві розмірних залежностей параметра Гамакера для золота та міді якісно подібні, проте в частотному діапазоні, що розглядається, ця величина максимальна для наночастинок міді. Така поведінка вказаних залежностей пов'язана з істотними відмінностями величин ω_p і γ_{bulk} для даних металів.



a – константа Гамакера; b – вільна енергія

1 – Au; 2 – Cu; 3 – Al.

Рисунок 2.4 – Розмірні залежності константи Гамакера та вільної енергії для наночастинок різних металів, що знаходяться на відстані $d = 500$ нм:

3 ОХОРОНА ПРАЦІ ТА БЕЗПЕКА В НАДЗВИЧАЙНИХ СИТУАЦІЯХ

Оскільки тема дипломного проекту «Розмірні ефекти у Ван-дер-Ваальсівській взаємодії металевих наноструктур », передбачає проведення робіт в приміщенні (лабораторії), обладнаному персональними комп'ютерами з візуальними дисплейними терміналами, мікроскоп , ультрафіолетові лампи. Тому нижче розглянемо заходи щодо забезпечення безпеки, виробничої санітарії, гігієни праці і пожежної безпеки для приміщення (лабораторії) з персональними комп'ютерами.

3.1 Аналіз потенційних небезпек

Проаналізуємо основні небезпечні та шкідливі фактори, що можуть призвести до травмування, пошкодження здоров'я працівників:

- поразка електричним струмом у зв'язку з несправністю електрообладнання, невиконанням правил техніки безпеки при користуванні електричним обладнанням, відсутністю захисного заземлення, що призводить до появи травм різного ступеня важкості і в тому числі несумісні з життям.

- вплив електромагнітного випромінювання. Обумовлений тривалою роботою людини у приміщенні з великою кількістю електронної апаратури та комп'ютерів. Може призводити до порушення психічного стану людини та різних захворювань загального характеру.

- статичні фізичні перевантаження. Виникають в наслідок порушень у організації робочого місця, монотонністю роботи коли від робітника потребується тривале статичне напруження м'язів шиї, спини, рук та ніг. Призводять до надмірної перевтоми, захворювань кістково-м'язової системи організму.

- нервово-емоційні навантаження. Викликані стресовими ситуаціями, складними відносинами у колективі, нервовими перевантаженнями, надмірним

ускладненням робочого процесу. Призводять до загальних захворювань нервової системи, головного болю, підвищеної втомлюваності, втрати уваги.

- механічні травми, у зв'язку з недбалістю та неуважністю персоналу та нераціональним плануванням робочого місця, призводять до травматизму .- недостатня освітленість робочого місця. Обумовлена з несправністю освітлювальних приладів, нераціональним освітленням, помилками в проектуванні системи освітлення, світлотехнічною специфікою робочих місць з ПК, недотриманням режиму праці, що призводить до погіршення зору.

- незадовільні кліматичні умови. Можуть бути викликані недостатньою вентиляцією робочого приміщення, слабким опаленням взимку або недостатнім кондиціонуванням повітря влітку. Можуть викликати захворювання органів дихання, призводити до зниження імунітету.

- можливість загоряння. Обумовлена можливістю коротких замикань у обладнанні, наявністю устаткування з високою температурою роботи, порушеннями техніки безпеки. Може призвести до виникнення опіків тіла різного ступеня тяжкості чи отруєння чадним газом.

- неправильні дії персоналу в умовах пожежі. Виникають внаслідок недотримання правил евакуації з палаючого приміщення. Призводять до виникнення паніки та давки серед людей, що евакуюються.

3.2 Заходи з техніки безпеки

Для забезпечення електробезпеки обладнання, що використовується та вибір технічних методів та засобів захисту виконується відповідно до вимог, що приведені у ДСТУ 7237:2011 (“Система стандартів безпеки праці. Електробезпека. Загальні вимоги та номенклатура видів захисту”).

Електроустаткування повинні відповідати вимогам ПУЕ (“Правила експлуатації електроустановок”) та (“Система стандартів безпеки праці. Изделия электротехнические. Общие требования безопасности”). Електричні

установки та обладнання експлуатуються відповідно до «Правил технічної експлуатації електроустановок» (ПТЕ) та «Правилами технічної безпеки при експлуатації електроустановок споживачів» (ПТБ) з доповненнями й змінами.

Заземлення електроустановок виконане відповідно до вимог ПУЕ-2009 і не перевищує 4 Ом. Металеві частини устаткування, які можуть внаслідок ушкодження ізоляції виявитися під напругою, мають заземлюючі затискачі, що відповідають вимогам «Изделия электротехнические. Зажимы заземляющие и знаки заземления. Конструкция и размеры».

Рівні електромагнітних випромінювань моніторів, що вважаються безпечними для здоров'я, регламентуються нормами МРК II 1990:10 Шведського національного комітету по вимірах і випробовуваннях, що вважаються базовими і більш жорсткими нормами ТСО '91, '92, '95, '99, '03 Шведської конфедерації профспілок, а також українськими нормативними документами ДНАОП 0.00-1.31-99 «Правила охорони праці під час експлуатації електронно-обчислювальних машин» та ДСанПіН 3.3.2.007-98 «Державні санітарні правила і норми роботи з візуальними дисплейними терміналами електронно-обчислювальних машин». Виходячи з вище сказаного, вибрали монітор, який відповідає зазначеним нормативним документам – 3.3.2.007-98 «Державні санітарні правила і норми роботи з візуальними дисплейними терміналами електронно-обчислювальних машин ЕОМ» встановлює вимоги до обладнання та організації робочих місць, режимів праці і відпочинку при роботі з ПК.

Приміщення необхідно забезпечити проточним повітрям, що подається до верхньої зони (аерація). Площа робочого місця паяльщика повинна бути не меншою за 4 м².

Характер праці за комп'ютером приводить до обмеженої рухової активності, що супроводжується малими м'язовими зусиллями (гіподинамією). При деяких видах праці (введення і редагування інформації) мається значне, але одноманітне і спрощене навантаження на невеликі групи м'язів рук (гіпокінезія). Для усунення шкідливого впливу гіподинамії і гіпокінезії

вводяться паузи для виконання комплексу вправ, спрямованих на збільшення витрат енергії на м'язову роботу і на усунення змін, викликаних локальним характером м'язових дій.

Сидіння на робочих місцях регульовані (за рахунок повороту і регулювання по горизонталі і вертикалі) відповідно до вимог ДСТУ 8604:2015 «Робоче місце при виконанні робіт сидячи». Конструкцією сидіння передбачені підлокітники, опора для спини і підставка для ніг, що відповідають антропометричним даним і відповідають гігієнічним вимогам.

З метою зниження нервово-емоційного напруження, стомлення зорового аналізатора, поліпшення мозкового кровообігу, подолання несприятливих наслідків гіподинамії, запобігання втоми, згідно ДСан ПіН 3.3.2.007-98 «Державні санітарні правила і норми роботи з візуальними дисплейними терміналами ЕОМ», рекомендується використовувати деякі перерви для психофізіологічного розвантаження.

Механічні травми можуть виникнути у зв'язку з недбалістю та неуважністю персоналу. З метою попередження механічних травм персоналом повинно забезпечуватися незахаращення приміщення.

Організація робочого місця користувача ЕОМ повинна забезпечувати відповідність усіх елементів робочого місця та їх розташування ергономічним вимогам ДСТУ 8604:2015 "ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования"; характеру та особливостям трудової діяльності.

Також, для робіт що виконуються за комп'ютером передбачуються перерви – не менше 5 хвилин за годину роботи.

3.3 Заходи по забезпеченню виробничої санітарії та гігієни праці

У виробничих приміщеннях на робочих місцях з комп'ютерною технікою мають забезпечуватись оптимальні значення параметрів мікроклімату:

температура +22...+24°C, відносна вологість повітря 40...60%, швидкість руху повітря 0,1...0,2 м/с (ГОСТ 12.1.005-88 «ССБТ. Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху санитарной зоны», ДСН 3.3.6.042- 99 «Санітарні норми мікроклімату виробничих приміщень»), рівень позитивних і негативних іонів у повітрі 1,5...3 тис./см³ та 3...5 тис./см³ відповідно (ГН 2152-80). Підтримувати оптимальний рівень легких позитивних і негативних аероіонів у повітрі на робочих місцях рекомендується за допомогою біполярних коронних аероіонізаторів. У приміщеннях з комп'ютерною технікою має бути забезпечений трикратний обмін повітря за годину. Для забезпечення постійних параметрів мікроклімату (температури, вологості, швидкості руху і чистоти повітря) у приміщеннях можуть бути встановлені побутові кондиціонери.

Значення освітлення в процесі життєдіяльності й особливо у виробничій діяльності дуже велике. При незадовільному освітленні зорова здатність очей знижується й можуть з'явитися захворювання. Правильно спроектована система освітлення відіграє велику роль у зниженні травматизму.

У нашому приміщенні застосовується змішане освітлення. При цьому додаткове штучне освітлення застосовується не тільки в темний, але й у світлий час доби. Розрахуємо штучне освітлення у приміщенні розміром 4'5'2,8 м. Нормативну освітленість E_H вибираємо відповідно до норм ДБН В.2.5-28-2006 «Природне і штучне освітлення»: для зорової роботи високої точності, найменшого розміру об'єкта розрізнення 0,3-0,5 мм, розряду зорової роботи IIIв, середнього фону і контрасту об'єкта розрізнення з ним $E_H=300$ лк. Коефіцієнт відбиття стелі $r_{ст}=0,7$ і стін $r_c=0,5$. Для освітлення використовуються люмінесцентні лампи типу ЛБ у світильниках ЛПО.

Індекс приміщення:

$$i = \frac{AB}{h(A+B)} = \frac{4 \cdot 5}{2 \cdot (4+5)} \approx 1,11,$$

де $h=H-h_p=2,8-0,8=2$ м.

Приймаємо коефіцієнт запасу $k=1,6$ і коефіцієнт нерівномірності освітлення $z=1,1$. При індексі $i=1,11$ коефіцієнт використання освітлювальної установки $h=0,45$. Світильники розміщуємо в два ряди $N_p=2$. Світловий потік ламп у кожному ряді

$$\hat{O}_D = \frac{A_i Szk}{N_p \eta} = \frac{300 \cdot 20 \cdot 1,1 \cdot 1,6}{2 \cdot 0,45} \approx 11733 \text{ лм.}$$

У світильниках установлюємо по дві лампи ЛБ ($n=2$) потужністю 30 Вт і світловим потоком $\Phi_{\text{л}}=2180$ лм, тоді необхідне число світильників у ряді

$$N = \frac{\hat{O}_D}{n \hat{O}_E} = \frac{11733}{2 \cdot 2180} \approx 3$$

У такий спосіб у приміщенні для створення необхідної освітленості встановлюємо 12 ламп ЛБ потужністю 30 Вт.

Раціональне колірне оформлення приміщення спрямоване на поліпшення санітарно-гігієнічних умов праці, підвищення його продуктивності і безпеки. Освітлення приміщення й устаткування передбачено м'яким, без блиску.

3.4 Заходи безпеки у надзвичайних ситуаціях

3.4.1 Заходи з пожежної безпеки

Система протипожежного захисту-сукупність організаційних заходів і технічних засобів, спрямованих на запобігання впливу на людей небезпечних факторів пожежі та обмеження матеріальних збитків.

Заходи з пожежної безпеки спрямовані на забезпечення безпеки людей, запобігання пожежі, обмеження її розповсюдження, створення умов для швидкої локалізації вогнища пожежі.

Приміщення (лабораторії) СНиП 2-90-81 “Виробничі будівлі промислового підприємств” відносяться до категорії Д по пожежонебезпеці. З огляду на високу вартість обладнання, обрані приміщення 3 ступеня вогнестійкості. Для запобігання утворення горючого середовища передбачають пожежну профілактику та наступні заходи безпеки.

Пожежна профілактика – це комплекс організаційних і технічних заходів, спрямованих на забезпечення безпеки людей, на запобігання пожежі, обмеження її поширення, а так само на створення умов для успішного гасіння пожежі.

Ці заходи включають:

- ефективно й своєчасне виявлення вогнища загоряння з точною вказівкою місця;
- автоматичне оповіщення служби безпеки, всіх співробітників і клієнтів підприємства (а, можливо й служби міської пожежної охорони) про загоряння;
- вживання заходів по гасінню пожежі, запобігання поширенню вогню й диму, димовидалення;
- організацію евакуації людей з палаючого будинку, включаючи розблокування всіх дверей і ліфтів, включення світлозвукових датчиків, блокування ліфтів.

Основні вимоги й заходи щодо забезпечення пожежної безпеки в приміщенні відповідають ГОСТ 12.1. 004-85 «Пожежна безпека. Загальні вимоги», ДБН.В. 1.1.7-2002 «Захист від пожежі. Пожежна безпека об'єктів».

Для забезпечення пожежної безпеки, варто обов'язково розробити інструкції про міри пожежної безпеки. Всі співробітники повинні допускатися до роботи тільки після проходження протипожежного інструктажу (що відзначається їхнім підписом у спеціальному журналі). Обладнані місця для паління, порядок знеструмлення електроустаткування, плану-схеми евакуації людей, система

оповіщення про пожежу й т.д. - все це елементи системи пожежної безпеки. Необхідно також знати про особливості пожежної безпеки на об'єктах з масовим перебуванням людей. Зокрема, у приміщеннях з одним евакуаційним виходом не допускається одночасне перебування 50 чоловік і більше. Забороняється захаращувати евакуаційні шляхи й виходи.

Відповідно до СНиП 2.09.02-85 «Нормы проектирования. Производственные здания промышленных предприятий» для обчислювального центру, в якому встановлені персональні комп'ютери, встановлена категорія пожежної, вибухової та вибухо-пожежної небезпеки категорії В.

Однією з найбільш важливих задач пожежної профілактики є захист будівельних конструкцій від руйнування і забезпечення їхньої достатньої міцності в умовах впливу високих температур при пожежі. У залежності від меж вогнестійкості будівельних конструкцій СНиП 2.01.02-85 «Противопожарные нормы проектирования зданий и сооружений» для ОЦ і частин будинків іншого призначення, у яких передбачене розміщення ЕОМ, запроектований II ступінь вогнестійкості.

Обладнання лабораторії обчислювального центру відповідає вимогам Правил пожежної безпеки в Україні, оскільки виконано відповідно до ПУЕ «Электробезопасность. Термины и определения».

Для виявлення загоряння і пожеж у приміщенні встановлена система автоматичної пожежної сигналізації з димовими пожежними сповісниками у двох місцях, оскільки площа приміщення становить приблизно 30 м².

У будинку обчислювального центру пожежні крани запроектовані в коридорах, на площадках сходових кліток, біля входів (у нішах на висоті 1,35 м.).

В приміщенні обчислювального центра встановлено 2 ручних вуглекислотних вогнегасника ВВК-3.5 на відстані 5 метрів один від одного.

3.4.2 Заходи по забезпеченню безпеки в надзвичайних ситуаціях

Дослідження стійкості роботи промислового об'єкта (ПО) — це всебічне вивчення обстановки, яка може скластися під час надзвичайної ситуації та визначення її впливу на виробничу діяльність підприємства. Мета дослідження полягає в тому, щоб виявити слабкі місця в роботі об'єкта та виробити найбільш ефективні пропозиції, спрямовані на підвищення його стійкості.

Дослідження стійкості роботи промислового об'єкта проводиться силами інженерно-технічного персоналу із залученням спеціалістів науково-дослідних та проектних організацій. Організатором та керівником досліджень є керівник підприємства.

Увесь процес планування і проведення досліджень поділяється на три етапи:

- I етап — підготовчий;
- II етап — оцінка стійкості роботи ПО;
- III етап — розроблення заходів, які підвищують стійкість роботи промислового об'єкта в умовах надзвичайної ситуації (НС).

На першому етапі розробляються керівні документи, які визначають склад учасників досліджень та організовується їх підготовка. Основними документами для організації досліджень стійкості роботи ПО є:

- наказ керівника підприємства, щодо проведення дослідження;
- календарний план основних заходів з підготовки до проведення досліджень;
- план проведення досліджень.

Наказ керівника підприємства розробляється на підставі вказівок старшого начальника з урахуванням умов пов'язаних з виробничою діяльністю об'єкта. В наказі вказується:

- мета і завдання дослідження;
- терміни проведення робіт;
- склад учасників досліджень;

- склад і завдання дослідницьких груп;
- строки готовності облікової документації.

На підготовчому етапі з керівниками груп проводиться спеціальне заняття, на якому керівник підприємства доводить до виконавців план роботи, завдання кожної групи та визначає терміни дослідження.

На другому етапі проводиться безпосереднє дослідження стійкості роботи об'єкта. В ході, дослідження визначаються умови захисту робітників та службовців від вражаючих факторів, проводиться оцінка уразливості виробничого комплексу від різних вражаючих факторів, оцінюється характер можливих пошкоджень від вторинних вражаючих факторів, вивчається стійкість роботи системи забезпечення та кооперативних зв'язків з іншими об'єктами, з'ясовуються вразливі місця в системі управління виробництвом.

Кожна група оцінює стійкість відповідних елементів виробничого комплексу та робить необхідні розрахунки. До складу групи комплексних, досліджень (керівник — головний інженер) входять керівники всіх груп.

Група досліджень стійкості будівель та споруд (керівник — начальник відділу капітального будівництва) на основі аналізу характеристик і стану виробничих будинків та споруд:

- визначає ступінь їх стійкості до дії вражаючих факторів ЛВ;
- оцінює розміри можливої шкоди від дії вторинних вражаючих факторів; Група досліджень стійкості систем енергозабезпечення (керівник — головний енергетик) оцінює:
 - стійкість системи електро-, газо- та водопостачання, каналізації та переведення котелень на інші види палива;
 - наявність та можливості автономних джерел енергопостачання;
 - характер можливих аварій і можливість виникнення вторинних факторів та їх наслідки;
 - можливі варіанти підвищення стійкості систем енергопостачання;
 - вивчає стійкості існуючих зв'язків з поставниками та користувачами;

- складає розрахунки на потрібну кількість будівельних та інших матеріалів для відновлення виробництва і будівництва сховищ на об'єкті та ПРУ в заміській зоні (на підставі заявок інших груп). Служба оповіщення і зв'язку вивчає і оцінює стійкість зв'язку з органами ЦО, виробничими підрозділами і формуваннями ІДО. Оцінює надійність системи зв'язку і оповіщення, повноту обладнання пунктів управління.

Служба радіаційного та хімічного захисту оцінює можливості роботи об'єкта в умовах радіації і дає пропозиції щодо захисту робітників і службовців від радіоактивного зараження, визначає типові режими радіаційного захисту людей, розробляє графік робочих змін для проведення РіНР. Аналізує забезпеченість робітників і службовців засобами індивідуального захисту, умови зберігання і порядок їх видачі. Готує пропозиції щодо організації і ведення радіаційної і хімічної розвідки, організації санітарної обробки людей, знезараження одягу, транспорту, техніки і споруд.

На третьому етапі підводяться підсумки проведених досліджень. Групи спеціалістів за підсумками досліджень готують підсумки і пропозиції з захисту робітників та службовців і підвищенню стійкості елементів виробництва, які досліджуються.

За результатами досліджень розробляються плани, в яких визначаються відповідні заходи, необхідні кошти на їх проведення, терміни і відповідальні особи за їх виконання.

4 ТЕХНІКО–ЕКОНОМІЧНЕ ОБГРУНТУВАННЯ

Тенденцією розвитку техніки на сучасному етапі - є постійний ріст складності технічних пристроїв. Ця тенденція повною мірою характерна і для сучасного обладнання. Ускладнення схемної побудови і функціональних зв'язків у сучасній РЕА разом із різким збільшенням кількості елементів, породжує діагностичні труднощі для забезпечення необхідної надійності. У результаті виникає цілий ряд специфічних проблем, пов'язаних з якістю та організацією обслуговування й забезпеченням високої ефективності техніки, що обслуговується.

Основним напрямком вирішення сформованого діалектичного протиріччя є удосконалювання якості організації обслуговування в сполученні з комплексною механізацією й автоматизацією всіх процесів технічної експлуатації. Систему обслуговування, в цілому, можна розглянути як замкнуту діагностичну систему керування якістю об'єкта, у якій контроль забезпечує сприйняття інформації про поточний стан об'єкта й прийняття рішення, що визначає керуючий вплив на нього.

Тема магістерської роботи – «Розмірні ефекти у Ван-дер-Ваальсівській взаємодії металевих наноструктур».

Виготовлення якісного покриття для підкладки Ще781700025, виконується в цехових ділянках.

Візьмемо підкладку знежиримо та проведемо хімічну обробку. Проводимо першу фотолітографію та робимо резисторний шар, суміщення експонування, проявляємо малюнок та сушимо. Проводимо травлення а потім заново проводимо хімічну обробку. Потім напилюють хром ,мідь та ванадій та відправляємо на другу фотолітографію. Відправляємо на гальваніку. Потім плату відправляємо на різку та свердління і доводка резистора згідно креслення. Готову плату відправляємо за маршрутом у блок та в виріб. Таким образом із підкладки Ще781700025 стає плата ВЮ7.100.982.

Інтеграція України в європейський та світовий бізнес вимагає адаптації до правил господарювання та імплементації основоположних принципів діяльності в практику українського підприємництва. Ратифікація Україною європейських стандартів потребує на прийняття рішень за ціннісно-орієнтованим підходом, тобто за цінністю для стейкхолдерів. Відносини зі стейкхолдерами є основою сталого розвитку підприємству. Врахування впливу інтересів стейкхолдерів при прийнятті рішень дозволяє підприємству отримати достовірну оцінку своєї діяльності та краще розуміти власні ризики й можливості.

Важливу роль у визначенні взаємовідносин зі стейкхолдерами відіграє обраний інструментарій. У світовій практиці налічується значна кількість корисних інструментів, що використовуються для покращення взаємодії зі стейкхолдерами, проте найефективнішим серед них залишається оцінювання рівня задоволення інтересів (очікувань) стейкхолдерів.

Проаналізуємо опис ідеї та занесемо дані в таблицю 4.1.

Таблиця 4.1 Опис ідеї

Зміст ідеї	Напрямки застосування	Вигоди для користувачів
Удосконалення покриття плати фотолітографії та покриття сріблом	Технологічний процес	Закупівля якісного матеріалу та спеціальне технічне обладнання .
	Виготовлення	Вироблення більш якісної продукції та більш дешевої продукції.

Проаналізуємо ринкові можливості запуску реалізації ідеї та

характеристику потенційного ринку та занесемо дані в таблицю 4.2;

Таблиця 4.2 Попередня характеристика потенційного ринку

№	Показники стану ринку	Характеристика
1	Головні конкуренти	Харківський машинобудівельний завод «ФЕД» , Київський VD MAIS
2	Динаміка ринку	Нейтральна
3	Наявність обмежень для входу	Вузька специфіка ринку
4	Специфічні вимоги до стандартизації та сертифікації	Наявність сертифікатів МО України та УРДДАУ

Визначимо потенційні групи клієнтів, їх характеристики, та сформуємо орієнтовний перелік вимог до послуг для кожної групи, дані занесемо в таблицю 4.3.

Таблиця 4.3 Попередня характеристика потенційних клієнтів

№ п/п	Потреба, що формує ринок	Цільова аудиторія (цільові сегменти ринку)	Відмінності у поведінці різних потенційних цільових груп клієнтів	Вимоги споживачів (користувачів)
1	Виготовлення	Організації які експлуатують військову техніку	Договір	Якісна продукція
2		Організації які		

	Ремонт	експлуатують військову техніку	Договір	Якісний ремонт
--	--------	-----------------------------------	---------	-------------------

Здійснимо SWOT- аналіз середовища реалізації інноваційного проекту та занесемо дані в таблицю 4.4.

Таблиця 4.4 SWOT- аналіз підприємства

Сильні сторони:	Слабкі сторони:
- Сучасне обладнання - Своєчасне постачання - Зменшується вплив людського фактора при виготовленні - Висока кваліфікація виконавців - Наявність держзамовлення	- Закупівля матеріалу за кордоном , та її поставка - Робітники висококваліфіковані пенсіонери
Можливості:	Загрози:
- Якісний ремонт - Можливість збільшити обсяг виготовлення продукції	- Відсутність попиту на ринку збуту - Перебої з фінансуванням замовлень

Ідентифікуємо стейкхолдерів та здійснимо їх пріоритетизацію та побудуємо карту стейкхолдерів (рис.4.1), яка дозволить візуалізувати картину взаємозв'язків стейкхолдерів.

Зацікавлені сторони по відношенню до організації можуть бути як зовнішніми, так і внутрішніми. До зовнішніх зацікавлених сторін відносяться клієнти, кредитори, постачальники, представники органів державної та місцевої влади, громадські організації, засоби масової інформації, а серед внутрішніх зацікавлених сторін називають власників, вище керівництво, робітників.

Відображення взаємозв'язків стейкхолдерів на карті відокремлено в три концентричних області, в яких розміщено всіх зацікавлених осіб інноваційного проекту за можливостями впливу на них ініціатора проекту. Область внутрішніх стейкхолдерів – область повноважень/відповідальності ініціатора.

Ініціатором виступає відділ технічного контролю, який вимагає поліпшення якості покриття підкладки перетворюючи її в плату.

Залежні зацікавлені сторони формально ініціатору проекту не підлеглі, проте тісні ділові стосунки потребують на пошук взаємовигідних рішень та компромісів.

Інвестором виступає адміністрація підприємства, яка забезпечує фінансування проекту.

Науковою організацією виступає технічний відділ підприємства, який забезпечує розробку стенда і технічної документації. На периферії ж знаходяться зовнішні зацікавлені сторони. Це область стейкхолдерів опосередкованого впливу на успішність реалізації інноваційного проекту.

Споживачем є виробництво підприємства, яке експлуатує дані плати і дозволяє виготовляти якісне покриття.

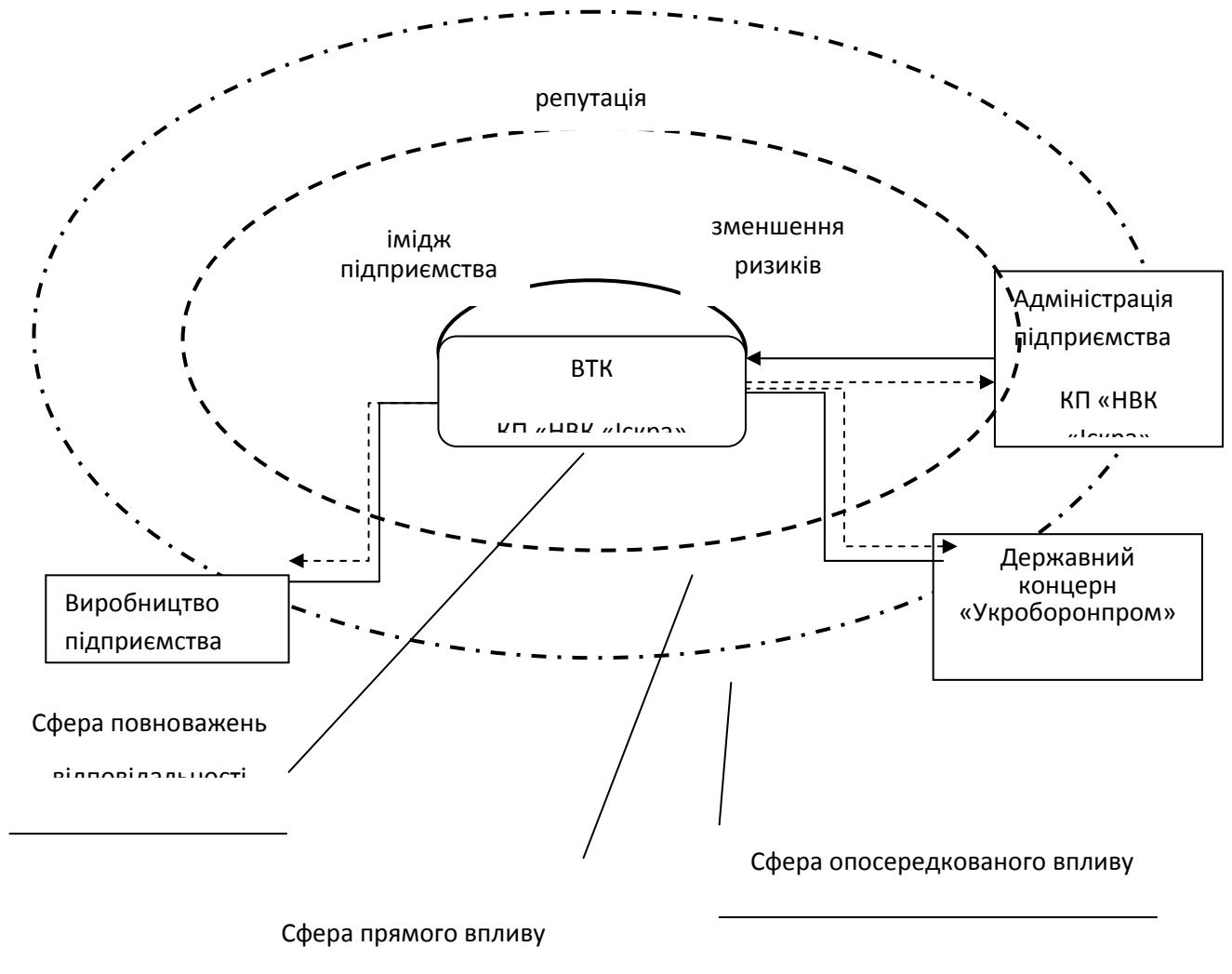


Рисунок 4.1 – Карта стейкхолдерів

Визначимо матеріальні витрати на придбання та введення в дію гальванічної ванни.

Таблиця 4.5 – Розрахунок матеріальних витрат на модернізацію гальванічної ванни

Матеріальні витрати	Ціна, грн.
1	5
Придбання	16000
Доставка	2500
Монтаж	4000
Пуско-налагоджувальні роботи	5000
Освітлення	6000
Разом	33500

Висновок: Так як стара гальванічна ванна вичерпала свої ресурси то її треба замінити на більш нову для поліпшення якісного покриття плат. Витрати на нову гальванічну ванну складають 33500 гривень.

ВИСНОВКИ

Отримано розмірні залежності параметра Гамакера і вільної енергії вандерваальсівської взаємодії сферичних металевих наночастинок з урахуванням об'ємного та поверхневого розсіювання електронів. Розрахунки проводилися в області частот, що становить практичний інтерес.

Для взаємодіючих частинок всіх розглянутих металів вільна енергія сильно зменшується при відносно невеликих відстанях між частинками, а з її збільшенням практично не залежить від розміру частинок, що пов'язане з суттєвим послабленням взаємодії зі збільшенням відстані між наночастинками.

Параметра Гамакера досягає максимуму у випадку взаємодії відносно малих частинок золота і міді та більш крупних частинок алюмінію та платини, що пояснюється суттєвою відмінністю у величині ефективної швидкості релаксації для цих металів.

Зменшення вільної енергії зі збільшенням розміру наночастинок має місце для всіх металів, що розглядаються, однак для всіх металів, крім золота величина цього зменшення незначна.

В досліджуваному частотному діапазоні значення параметра Гамакера при однаковому розмірі взаємодіючих наночастинок найбільші для наночастинок міді. Це можна пояснити різницею у концентрації електронів, а також у значеннях об'ємної швидкості релаксації.

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. **Kuno, M.** Introductory Nanoscience: Physical and Chemical Concepts ed S Scholl [Текст] / M. Kuno // Garland Science, Taylor and Francis Group, – New York, 2012.
2. **Bohren, C. F.** “Absorption and Scattering of Light by Small Particles [Текст] / C. F. Bohren, D. R. Huffman // Weinheim, – Wiley, 2004.
3. **Pinchuk, A. O.** Nanotechnol. Res. [Текст] / A. O. Pinchuk, G. C. Schatz, A. Reinholdt, U. Kreibig J. // 2009. – Vol. 1. – P. 229.
4. **Faure, B.** Hamaker constants of iron oxide nanoparticles [Текст] / B. Faure, G. Salazar-Alvarez, L. Bergström // Langmuir. – 2011. – Vol. 27. – P. 8659–8664.
5. **Pinchuk, A. O.** Size-dependent Hamaker constant for silver nanoparticles [Текст] / A. O. Pinchuk // J. Phys. Chem. C. – 2012. – Vol. 116. – P. 20099–20102.
6. **Yaxue, Luo** Approach to Estimation of Hamaker Constant as Taking Hofmeister Effects into Account [Текст] / Luo Yaxue, Gao Xiaodan, Tian Rui, Li J. Hang // Phys. Chem. C, Just Accepted Manuscript. – April 2018.
7. **Israelachvili, J. N.** Measurement of forces between two mica surfaces in aqueous electrolyte solutions in the range [Текст] / J. N. Israelachvili, G. E. Adams. – P. 0–1000, nm. J. Chem. Soc., Faraday Trans. – 1978. – Vol. 74. – P. 975–1001.
8. **Das, S.** A method to quantitatively evaluate the Hamaker constant using the jump-into-contact effect in atomic force microscopy [Текст] / S. Das, P. A. Sreeram, A. K. Raychaudhuri // Nanotechnology. – 2007, Vol. 18, 035501.
9. **Horn, R. G.** Direct measurement of surface forces between sapphire crystals in aqueous solutions [Текст] / R. G. Horn, D. R. Clarke, and M. T. Clarkson // J. Mater. Res. – 1988. – Vol. 3. – P. 413–416.
10. **Rodriguez, R. D.** Probing the probe: AFM tip-profiling via nanotemplates to determine Hamaker constants from phase-distance curves [Текст] / R. D. Rodriguez, E. Lacaze, J. Jupille // Ultramicroscopy. – 2012. – Vol. 121. – P. 25–30.

11. **Gómez-Merino, A. I.** The Hamaker constant of anatase aqueous suspensions [Текст] / A. I. Gómez-Merino, F. J. Rubio-Hernández, J. F. Velázquez-Navarro, F. J. Galindo-Rosales, P. Fortes-Quesada // J. Colloid Interface Sci. – 2007. – Vol. 316, P. 451–456.
12. **Renne, M. J.** Microscopic derivation of macroscopic Van der Waals forces [Текст] / M. J. Renne, B. R. A. Nijboer // Chemical Physics Letters. – 1967. – Т. 1. – №. 8. – С. 317-320.
13. **Lucas, A.** Collective contributions to the long-range dipolar interaction in rare-gas crystals [Текст] / A. Lucas // Physica. – 1967. – Т. 35. – №. 3. – P. 353-368.
14. **Hough, D. B.** The calculation of Hamaker constants from Lifshitz theory with applications to wetting phenomena [Текст] / D. B. Hough, L. R. White // Advances in Colloid and Interface Science. – 1980. – Т. 14. – №. 1. – P. 3-41.
15. **Rajter, R. F.** Van der Waals–London dispersion interactions for optically anisotropic cylinders: Metallic and semiconducting single-wall carbon nanotubes [Текст] / R. F. Rajter, R. Podgornik, V. A. Parsegian, R. H. French, W. Y. Ching // Physical Review B. – 2007. – Т. 76. – №. 4. – С. 045417.
16. **Dobson, J. F.** Dispersion interaction between crossed conducting wires [Текст] / J. F. Dobson, T. Gould, I. Klich // Physical Review A. – 2009. – Т. 80. – №. 1. – С. 012506.
17. **Garcia, R.** Dynamic atomic force microscopy methods [Текст] / R. Garcia, R. Perez // Surface Sci. Rep. – 2002. – V. 47. – P. 197.
18. **Hofer, W.A.** Theories of scanning probe microscopes at the atomic scale [Текст] / W. A. Hofer, A. S. Foster, A. L. Schluger // Rev. Mod. Phys. – 2003. – V. 75. – P. 1287.
19. **Drakowa, D.** Theoretical modeling of scanning tunneling microscopy, scanning tunneling spectroscopy and atomic force microscopy [Текст] / D. Drakowa // Rep. Prog. Phys. – 2002. – V. 64. – P. 205.
20. **Guggisberg, M.** Separation of interactions by noncontact force microscopy [Текст] / M. Guggisberg, M. Bammerlin, Ch. Loppacher // Phys. Rev. – 2000. – V. B61. – №16. – P. 11151.

21. **Saint Jean, M.** Van der Waals and capacitive forces in atomic force microscopy [Текст] / M. Saint Jean, S. Hudlet, C. Guthmann, J. Berger // J. Appl. Phys. – 1999. – V.86. – №9. – P.5245.
22. **Argento, C.** Parametric tip model and force-distance relation for Hamaker constant determination from atomic force microscopy [Текст] / C. Argento, R. H. French // Appl. Phys. – Dec. 1996. – V. 80 – P.6081.5
23. **Лифшиц, Е. М.** Теория молекулярных сил притяжения между твердыми телами [Текст] / Е. М. Лифшиц // ЖЭТФ. – 1955. – Т.29. – Вып. 1(7).
24. **Дзялошинский, И.Е.** Общая теория ван-дер-ваальсовых сил [Текст] / И. Е. Дзялошинский, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский // УФН. – Март 1961. – TLXXII. – Вып. 3.
25. **Дедков, Г.В.** Флуктуационно-электромагнитное взаимодействие движущихся тел [Текст] / Г. В. Дедков, А. А. Кясов // Наноструктуры. Математическая физика и моделирование. – 2009. – Т. 1. – № 2. – С. 5-59.
26. **Дерягин, Б.В.** Поверхностные силы [Текст] / Б. В. Дерягин, Н. В. Чураев, В. М. Муллер. – М.: Наука, 1985. – С. 34.
27. **Ландау, Л.Д.** Статистическая физика [Текст] / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц // М.: Физматлит. – 2001. – (Часть 2).
28. **Дедков, Г.В.** Нанотрибология: экспериментальные факты и теоретические модели [Текст] / Дедков Г.В. // УФН. – 2000. – Т.170. – №6. – С. 585-618.
29. **Bordag, M.** The developments in the Casimir effect [Текст] / M. Bordag, U. Mohideen, V. M. Mostepanenko // Phys. Rep. – 2001. – V.353. – P. 1.
30. **Israelachvili, J.N.** Intermolecular and Surface [Текст] / J. N. Israelachvili // Forces, Academic Press London. – 1992.
31. **Kreibig, U.** Optical properties of metal clusters [Текст] / U. Kreibig, M. Volmer// Berlin: Springer. – 1995.
32. **Grigorchuk, N. I.** Optical and transport properties of spheroidal metal nanoparticles with account for the surface effect [Текст] / N. I. Grigorchuk, P. M. Tomchuk // Phys. Rev. – 2011. – B 84, 085448.

33. **Barash, Y. S.** Van der Waals Forces [Текст] / Y. S. Barash, // Moscow: Nauka. – 1988.
34. **Коротун, А. В.** Оптическое поглощение композита на основе двухслойных металл-диэлектрических сферических наночастиц [Текст] / А.В. Коротун, А.А. Коваль, И. Н. Титов // Журнал прикладной спектроскопии. – 2020. – Т. 87. – №2. – С. 224–232.