

УДК 53.096

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНОГО НАТЯЖЕНИЯ КЛАСТЕРОВ КАТАЛИЗАТОРОВ НА ПОДЛОЖКЕ Fe – SiO<sub>2</sub>

С.В. Булярский, А.В. Цыганцов

ФГБОУ ВПО «Ульяновский государственный университет»

432017, Ульяновск, ул. Льва Толстого, 42

Tsigantsov@gmail.com

**Аннотация:** Важнейшая задача изучения процессов роста углеродных нанотрубок – это вычисление величины параметров образования кластеров катализаторов. В работе исследуется температурная зависимость коэффициентов поверхностного натяжения на границах наноразмерных кластеров с газовой средой и подложкой, а также влияние этих параметров на распределение кластеров по размеру.

**Ключевые слова:** углеродные нанотрубки, кластеры катализаторов, поверхностное натяжения.

Одна из самых важных задач исследования процессов роста углеродных нанотрубок – вычисление величины параметров образования кластеров катализаторов. В частности, мы исследуем температурную зависимость коэффициентов поверхностного натяжения на границах наноразмерных кластеров с газовой средой и подложкой, а также влияние этих параметров на распределение кластеров по размеру. В качестве подложек используются технически важные поверхности кремния, покрытая двуокисью кремния (см. рис. 1).

Распределения кластеров по размерам приведено на рис. 2. Общая тенденция сдвига максимума распределения влево с ростом температуры сохраняется. Однако это выполняется не столь точно, что связано с ростом числа факторов, определяющих положение максимума.

Распределение кластеров по размерам определяется эффективным коэффициентом поверхностного натяжения [1]. Заметим также, что поверхностное натяжение твердых тел вообще плохо поддается изучению и коэффициенты поверхностного натяжения известны недостаточно хорошо. Эффективный коэффициент поверхностного натяжения можно определить из распределений, приведенных на рис. 2. Сведения о коэффициентах поверхностного натяжения диоксида кремния в литературе есть, и можно вычислить по этим данным коэффициент поверхностного натяжения на границе раздела подложка – кластер. Сделаем это на основании уравнения для эффективного коэффициента поверхностного натяжения:

$$2\gamma_l(1 + \cos \theta) + \gamma_{sl}(1 - \cos^2 \theta) = \gamma_{ef}, \quad (1)$$

где  $\cos \theta = (\gamma_s - \gamma_{sl}) / \gamma_l$ .

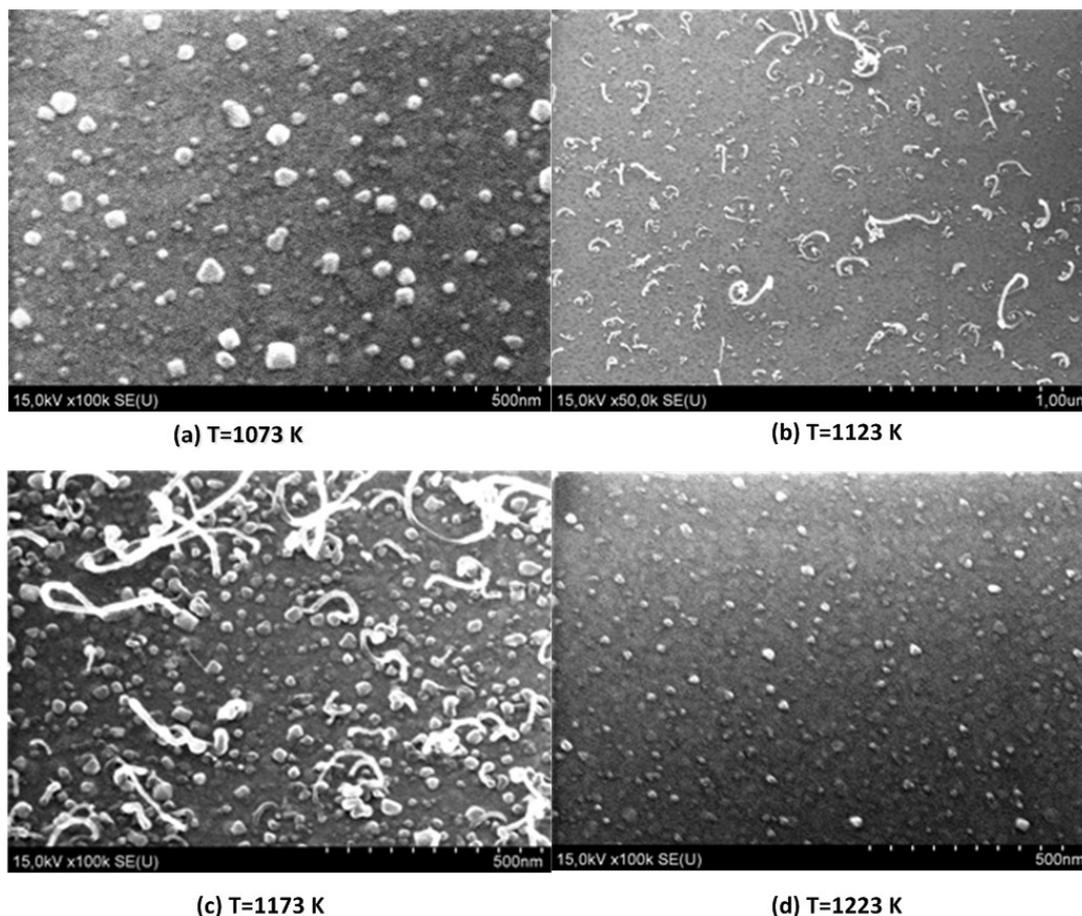


Рис. 1. Электронномикроскопические контрасты кластеров на подложке двуокиси кремния

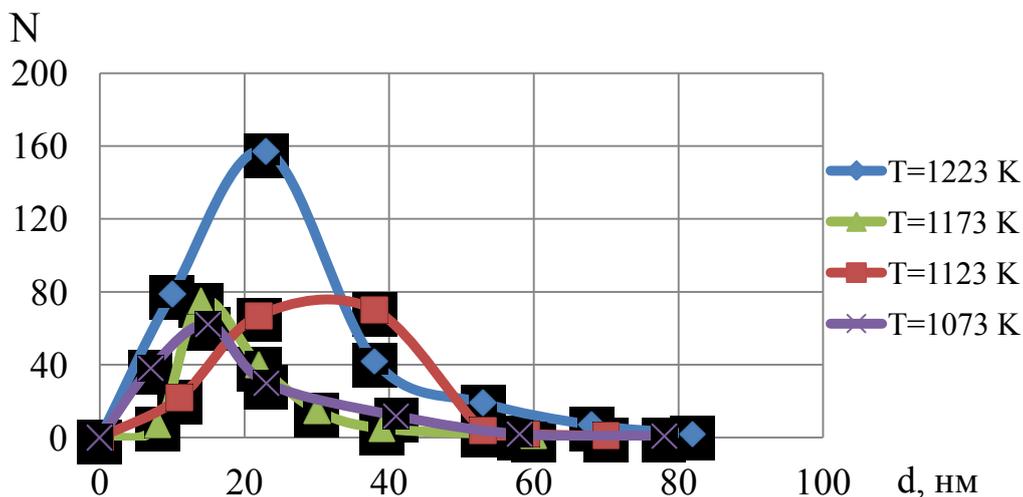


Рис. 2. Распределение кластеров, полученных на подложке двуокиси кремния, по размерам

Подставляя в формулу (1) значение для  $\cos \theta$ , получаем выражение:

$$2\gamma_l \left( 1 + \frac{\gamma_s - \gamma_{sl}}{\gamma_l} \right) + \gamma_{sl} \left( 1 + \frac{(\gamma_s - \gamma_{sl})^2}{\gamma_l^2} \right) = \gamma_{ef}. \quad (2)$$

После некоторых преобразований получаем:

$$\gamma_{sl}^3 - \gamma_s \cdot \gamma_{sl}^2 + (\gamma_l^2 + \gamma_s^2) \cdot \gamma_{sl} + \gamma_{ef} \cdot \gamma_l^2 - 2\gamma_l^3 - 2\gamma_s \cdot \gamma_l^2 = 0, \quad (3)$$

где неизвестный параметр поверхностного натяжения на границе  $\gamma_{sl}$  необходимо найти  $\gamma_{sl}$ . Решение данного уравнения, можно выполнить с помощью формулы Кардано.

Для нахождения поверхностного натяжения подложки воспользуемся понятием поверхностной энергии [2]. Основная характеристика свойств поверхности раздела фаз – удельная свободная поверхностная энергия и численно равная ей величина поверхностного натяжения  $\gamma$ . Таким образом, величина  $\gamma$  может рассматриваться не только как удельная поверхностная энергия, но одновременно и как сила, приложенная к единице длины контура, ограничивающего поверхность, и направленная вдоль этой поверхности. Соответственно величину  $\gamma$  выражают в Дж/м<sup>2</sup>, Н/м или эВ/м<sup>2</sup>. Вследствие изменения температура от  $T_0$  до  $T$  в объёмном материале возникает механическое напряжение  $\sigma_T$  [2]:

$$\sigma_T = K \cdot \alpha_T (T - T_0), \quad (4)$$

где  $\alpha_T$  – коэффициент линейного расширения.

Для кремния температурная зависимость имеет вид

$$\sigma_T^{Si(T)} = 3,72 \cdot 10^{-6} \cdot \{1 - \exp[-5,88 \cdot 10^{-3} (T - 149,15)]\} + 5,55 \cdot 10^{-4} \cdot T, \quad (5)$$

где  $K$  – модуль всестороннего сжатия материала. Для кремния он равен 100 ГПа. Приведенные данные позволяют вычислить коэффициент поверхностного натяжения твердой подложки:

$$\gamma_s = \alpha_T l = \alpha_T 2\pi \cdot r(T). \quad (6)$$

Результаты вычислений коэффициентов поверхностного натяжения для подложки диоксида кремния приведены в Таблице 1.

Таблица 1. Коэффициенты поверхностного натяжения нанокластеров на подложках  $SiO_2$

$T, K$	$\gamma_{Fe}, \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-2}$	$\gamma_{SiO_2}, \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-2}$	$\gamma_{Fe-SiO_2}, \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-2}$
1023	1,7	0,8	0,6
1073	1,6	0,7	0,5
1123	1,5	0,6	0,3
1173	1,3	0,5	-
1223	1,2	0,3	-
1273	1,0	0,2	-

Коэффициент поверхностного натяжения железа на границе с диоксидом кремния с повышением температуры изменяют свой знак с положительного на отрицательный. Это показывает, что при более высоких температурах подложка кремния не смачивается расплавом.

Проведенные термодинамические расчеты позволяют, изменяя параметры технологического процесса, управлять концентрацией кластеров и, соответственно, плотностью нанотрубок в пучке при выращивании их на подложке с заданными характеристиками.

**Библиографический список:**

1. **Булярский, С.В.** Термодинамика формирования кластеров катализаторов для роста углеродных нанотрубок / С.В. Булярский, А.С. Басаев, В.А. Галперин, А.А. Павлов, О.В. Пятилова, А.В. Цыганцов, Ю.П. Шаман // XI школа молодых ученых «Физические проблемы наноэлектроники, нанотехнологий и микросистем»: Труды школы, Ульяновск (19- 26 сентября 2011). – Ульяновск: Издательство УлГУ, 2011 – С. 3-10.
2. **Рехвиашвили, С.Ш.** Формализм Лагранжа с дробной производной в задачах механики / С.Ш. Рехвиашвили // Письма в журнал технической физики. – 2004. – Т. 30. – № 2. – С. 33-37.