

Нанообъекты на поверхности твердых тел и параметры их жесткости

А. Ш. Кахраманов, К. Ш. Кахраманов*

Аннотация. Исследованы процессы формирования нанонитей на поверхности (0001) $A_2^V B_3^{VI}$ <примесь>. В межслоевой среде $Te^{(1)} - Te^{(1)}$ - происходит процесс миграции атомов, перемещение и коагуляция кластеров на основе атомов Zn, Se. В результате диффузионно-ограниченной агрегации формируются структуры с наноостровками (НО), из которых самоорганизуются нанонити. Такие поверхностные структуры играют регулируемую роль при разработке топологических изоляторов и термоэлементов на основе соединений $A_2^V B_3^{VI}$ и увеличивают термоэлектрическую эффективность композита. Рассмотрены методы измерения механических свойств таких систем.

Key Words and Phrases: наноостровки, агрегация, нанонити, самоорганизация, миграция.

2000 Mathematics Subject Classifications: 28A80, 81Q35

1. Введение

В последнее десятилетие производство и внедрение наноразмерных агрегатов и включений становится весьма актуальным в электронике. В связи с этим определилась необходимость анализировать поверхностные нанообъекты на предмет прочности, устойчивости и дефектологии.

В этом отношении представляет интерес методы механики сплошных сред, применительно к проблемам нанотехнологии, а также возможность и необходимость новых научных исследований, ориентированных на задачи наномеханики. Методика определения характеристик наностержней, в которой исследуются жесткостные характеристики наностержня предлагается в [1-3]. Здесь рассматривается подложка в виде тонкой металлической пластинки-полоски, ориентированного вдоль оси x , непрерывно скрепленных с подложкой (рис. 1). Растянув полоску в направлении оси стержня и замерив ее удлинение, можно определить среднюю деформацию системы в этом направлении. Теория регулярных структур дает возможность вычислить средние деформации системы подложка - наностержня в зависимости от микроструктуры фундаментальной ячейки. Сравнив экспериментальные и теоретические значения средних деформаций, получают функциональное уравнение

*Corresponding author.

для определения жесткостных характеристик наностержня. Возникает обратная задача, решение которой может оказаться не единственным и неустойчивым. В качестве примера в [1] рассмотрена задача о растяжении подложки, скрепленной с двоякопериодической системой стержней.

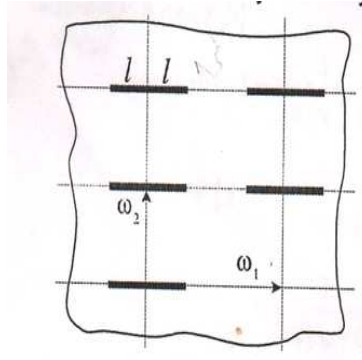


Рис.1

Через ω_1 и ω_2 ($\text{Im}\omega_1 = 0, \text{Im}(\omega_2/\omega_1) > 0$) обозначены основные периоды структуры. Стержень представляет собой отрезок L длиной $2l$ с концевыми точками a, b ($\text{Im}a = \text{Im}b$). Центры стержней образуют двоякопериодическую систему точек $P = m\omega_1 + n\omega_2$.

В области, занимаемой указанной системой, имеют место средние напряжения $\langle \sigma_{ik} \rangle$ ($i, k = 1, 2$). В рамках принимаемой модели передача нагрузки от подложки к стержню осуществляется с помощью касательных напряжений $q_0(t)$. Уравнение равновесия элемента стержня единичной длины в направлении оси x , погонное нормальное усилие в стержне выражено через контактное усилие $q_0(t)$

$$P(t_0) = - \int_{t_0}^b q_0(t) dt, \quad P(b) = 0, \quad P(a) = - \int_a^b q_0(t) dt = 0.$$

Интегральные представления аналитических функций, обеспечивающие периодическое распределение тензора напряжений в пластине, взято в виде [1]:

$$\Phi(z) = 1/2\pi(k+1) \int_L q_0(t) \zeta(t-z) dt + A_1,$$

$$\Psi(z) = \frac{k}{2\pi(k+1)} \int_L q_0(t) \zeta(z-t) dt - \frac{1}{2\pi(k+1)} \int_L q_0(t) \{ \zeta(z-t) + \bar{\xi}(z-t) \} dt + A_2, \quad (1)$$

в котором $k = (3 - \nu)/(1 + \nu)$; ν - коэффициент Пуассона материала подложки; A_1, A_2 - постоянные, определяемые из условия существования в структуре заданных средних напряжений $\langle \sigma_{ik} \rangle$; $\xi(z)$ и $\zeta(z)$ - двоякопериодическая и квазипериодическая функции Вейерштрасса [2]; $p_1(z)$ - специальная меморфная функция [3].

Интегрируя функции (1), находят условия существования в структуре средних напряжений $\langle \sigma_{ik} \rangle$, что приводит к системе уравнений относительно постоянных A_1 и A_2 , решение которой имеет вид:

$$\begin{aligned}
ReA_1 &= \frac{\langle\sigma_{11}\rangle + \langle\sigma_{22}\rangle}{4} \delta + \left(\frac{\pi(1+k)}{2F} - \frac{Re\delta_1}{\omega_1} \right) B, \\
A_2 &= \frac{\delta}{2} (\langle\sigma_{22}\rangle - \langle\sigma_{11}\rangle + 2i\langle\sigma_{12}\rangle) + \left(\frac{k\delta_1 - \gamma_1}{\omega_1} - \frac{\pi(1+k)}{F} \right) B, \\
B &= \frac{1}{2\pi(1+k)} \int_L t q_0(t) dt, \quad F = \omega_1 Im\omega_2.
\end{aligned} \tag{2}$$

Интегральные представления (1) при наличии равенств (2) корректны в том смысле, что они обеспечивают: двоякую периодичность поля напряжений в структуре; квазипериодичность вектора перемещений и главного вектора усилий на дуге, соединяющей конгруэнтные точки; существование заданных средних напряжений $\langle\sigma_{11}\rangle$, $\langle\sigma_{12}\rangle$, $\langle\sigma_{22}\rangle$ при любой плотности $q_0(t) \in H(L)$, удовлетворяющей условию

$$\int_L q_0(t) dt = 0.$$

2. Интегральные уравнения структуры подложка - наностержни

Приравнивая деформацию e_{11} подложки деформации стержня на L , получается сингулярное интегральное уравнение

$$\begin{aligned}
\int_L q_0(t) K(t-t_0) dt + \beta(t_0) \int_{t_0}^b q_0(t) dt + M\{q_0(t)\} &= N, \quad t_0 \in L, \\
K(t-t_0) &= Re \left\{ \zeta(t-t_0) + \frac{(t-t_0) \overline{\xi(t-t_0)} - \xi_1 \overline{\xi(t-t_0)}}{2k-1} \right\}, \\
M\{q_0(t)\} &= \left[\frac{\pi(1+k)^2}{2(2k-1)F} - \frac{(2k-1) Re\delta_1 - Re\gamma_1}{(2k-1)\omega_1} \right] \int_L t q_0(t) dt, \\
\beta\{t_0\} &= \frac{8\pi E\delta}{(1+\nu)(5-3\nu)E_0 F_0(t_0)}, \\
N &= \frac{\pi(k+1)\delta}{2(2k-1)} [(3-k)\langle\sigma_{22}\rangle - (1+k)\langle\sigma_{11}\rangle].
\end{aligned} \tag{3}$$

Здесь E, E_0 - модули упругости материалов подложки и наностержня; δ и ν - толщина и коэффициент Пуассона подложки; $F_0(t)$ - площадь поперечного сечения наностержня. Уравнение (3) в совокупности с дополнительным условием

$$\int_L q_0(t) dt = 0$$

однозначно определяет решение $q_0(t)$ на L .

Вводя безразмерные координаты $\xi = t/l$, $\lambda = 2l/\omega_1$, уравнение (3) приводится к виду

$$\int_{-1}^1 \frac{q(\xi)}{\xi - \xi_0} d\xi \int_{-1}^1 K(\xi - \xi_0) q(\xi) d\xi + \beta(\xi_0) \int_{\xi_0}^1 q(\xi) d\xi = \pi f_1, \quad (4)$$

где

$$K(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{\lambda}{2}\right)^{2j+2} \wedge_j \xi^{2j+1},$$

$$\wedge_0 = \frac{\omega_1}{2k} \left\{ (2k-1) \operatorname{Re} \delta_1 - \operatorname{Re} \gamma_1 - \frac{\pi}{2H} (1+k)^2 \right\}, \quad H = |\omega_2| \sin \alpha,$$

$$\wedge_j = \frac{1}{k} \left\{ (j+1) \operatorname{Re} g_{2j+3}^{(1)} - (j+1-k) \operatorname{Re} g_{2j+2}^0 \right\} \left(\frac{\omega_1}{2}\right)^{2j+2} (j=1, 2, \dots),$$

$$\beta(\xi) = \frac{4\pi E \delta l}{(3-\nu)(1+\nu) E_0 F_0}, \quad q(\xi) = q_0(l\xi),$$

$$g_{2j+2} = \sum_{m,n} \left(\frac{1}{T}\right)^{2j+2}, \quad g_{2j+3}^{(1)} = \sum_{m,n} \frac{\bar{T}}{(T)^{2j+3}},$$

$$T = \frac{1}{2}(m\omega_1 + n\omega_2),$$

$$f_{1=\frac{(1+k)\delta}{4k}} \{(3-k)\langle\sigma_{22}\rangle - (1+k)\langle\sigma_{11}\rangle\}.$$

Уравнение (4) рассматривается совместно с дополнительным условием

$$\int_{-1}^1 q(\xi) d\xi = 0. \quad (5)$$

Из анализа результатов следует, что симбиоз аналитического алгоритма и эксперимента может иметь успех, т.е. привести к определению модуля упругости наностержня в зависимости от его геометрических параметров, только при достаточно плотной упаковке их в системе подложка-наностержни. Эти уравнения вызывают больше вопросов, чем конкретное использование для расчетов.

При изучении стандартных нанообъектов — стержней, пластин и оболочек — было обращено внимание на формулы, связывающие изгибные жесткости и частоты свободных колебаний. Тем самым было предложено обсудить экспериментальные возможности определения частот нанообъектов. При этом в настоящее время существуют две возможности: применять АСМ или оптические методы, причем в обоих случаях главным вопросом является проблема выделения параметров нанообъектов, поскольку в результате эксперимента, как правило, определяется общий параметр нанообъекта, подложки и измерительного оборудования. Ниже показано, как можно решать эту проблему.

Метод определения собственных частот некоторых наноструктур (нанотрубок и нанокристаллов), основанный на измерении собственных частот "большой системы", состоящей из вертикально ориентированного массива (решетки) одинаковых

нанотрубок или нанокристаллов, выращенных на подложке на одинаковом расстоянии друг от друга (рис. 2), предложен в [4].

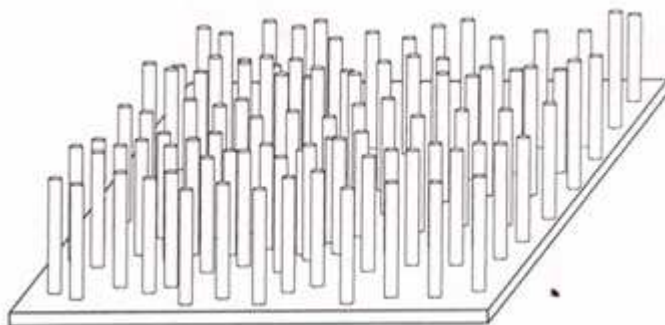


Рис.2.

”Большая система”- решетка нанокристаллов или нанотрубок на подложке [4].

Теоретически показано, что по найденному спектру ”большой системы” (решетка - подложка) и спектру подложки можно определить собственные частоты одного нанобъекта. Это позволяет по экспериментальным данным для ”больших систем” определить собственные частоты нанобъекта, которые трудно непосредственно определить другим способом. Предстоит привести пример расчета собственных частот решетки микро- или нанокристаллов на подложке.

Метод определения собственных частот нанобъектов необходимо распространить на случай нанотрубок, закрепленных горизонтально схема которой представлена на рис.3. Показано, что из спектра ”большой системы”, состоящей из подложки нанотрубок, возможно выделение нескольких первых собственных частот, соответствующих изгибным колебаниям одной нанотрубки, что позволит оценить их изгибную жесткость.

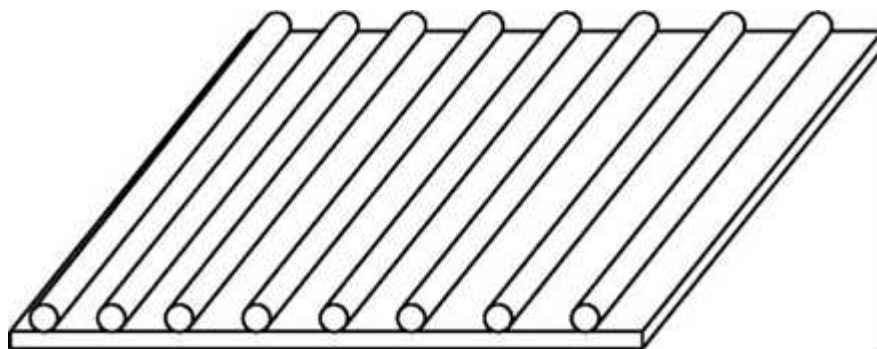


Рис.3.

3. Система параллельных друг другу нанотрубок, лежащих на подложке [4]

При использовании данного метода определяющим фактором может являться правильный подбор соотношения геометрических и физических характеристик нанообъектов и подложки.

Нами проведено конечно-элементное моделирование нано стержней из $A_2^V B_3^{VI}$.

Определенный вид примесей $A_2^V B_3^{VI}$ воздействуя радикальным образом на химическую и электронную структуру слоев выбрасываются в межслоевое пространство, где образуют наноструктуры различной размерности и формы, выстраивающиеся в $2D$ -плоскости.

Ранее нами сообщалось [5-6] о формировании межслоевых наноструктур и влиянии их на кинетические параметры такие, как двумерные примесные слои и одномерные каналы протекания заряда.

Нами изучены процессы формирования межслоевых нанонитей, путем выстраивания кластеров в пространстве $Te^{(1)} - Te^{(1)}$ на поверхности (0001) слоистого кристалла Bi_2Te_3 , легированного Zn и Se посредством атомно-силовой микроскопии (АСМ). АСМ - изображения получали на сканирующем зондовом микроскопе марки Солвер НЕКСТ.

На рис.4. приведены фотографии, полученные на сканирующем зондовом микроскопе : а) цепочка отдельных наноостровков (НО) в $3D$ -масштабе; б) НО, сформировавшие нанонити; в) профилограмма, показывающая высоту и ширину нанонитей.

Миграция и взаимодействие кластеров друг с другом приводит к образованию НО в рамках процесса, имеющего направление “снизу–вверх”. Основная причина вызывающая образование напряженных островков на поверхности, является релаксация упругих напряжений на краях слоев и взаимодействие островков посредством напряжений, создаваемых ими в кристалле. Форма НО может значительно изменяться в процессе зарастивания или постростового отжига. Эти данные демонстрирует конечный результат динамики формирования больших островков из малых и сформированных из НО линейных образований, которые можно назвать наностержнями, которые сформированы из кластеров висмута высотой ~ 80 нм и размером у основания порядка 90 нм. (см.рис.4).

В результате разработанной технологии в процессе самоорганизации сформировался упорядоченный массив НО из висмута. Межслоевые НО располагаются параллельно друг другу (рис.5.).

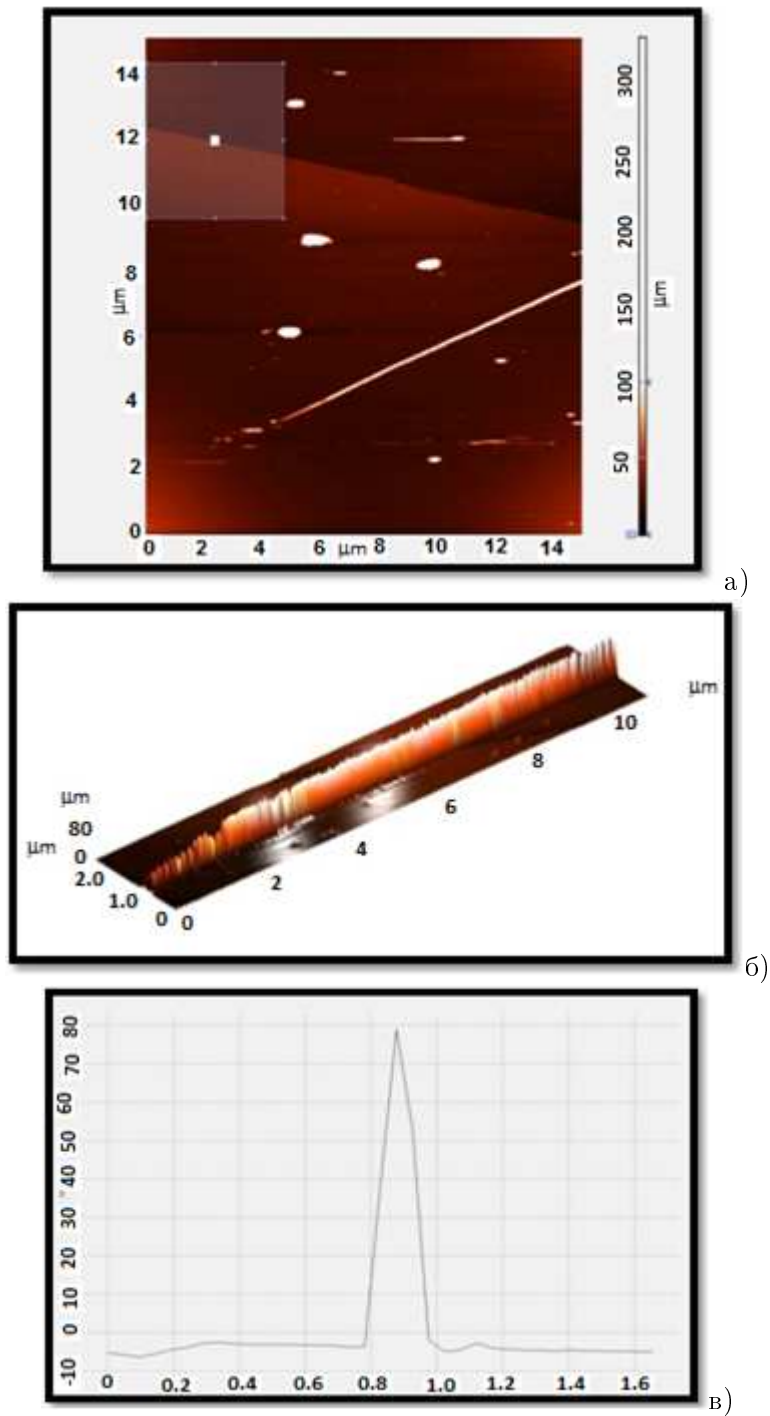


Рис. 4.

АСМ-изображение $\text{Bi}_2\text{Te}_3 < \text{Zn} >$: коагулированные нити (а), фрагмент слившихся НО (б), профилограмма поперечного сечения нанонити (в).

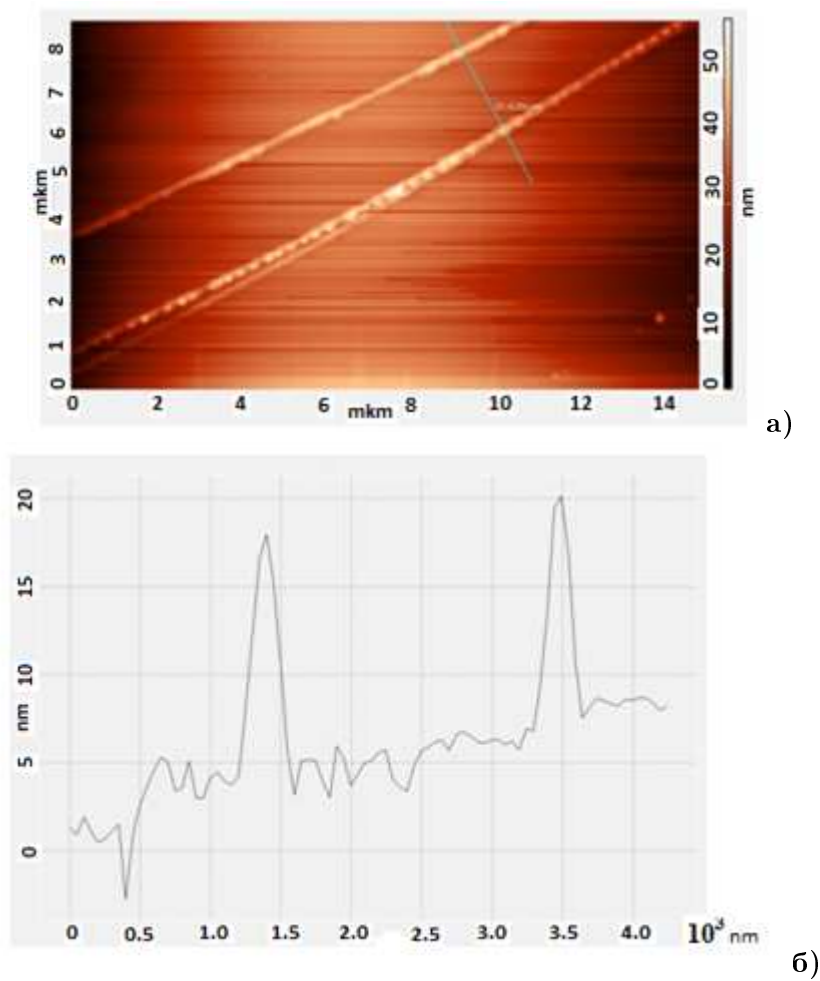


Рис.5.

Наностержни висмута выращенные на поверхности Bi_2Te_3 – а) профилограмма вдоль линии, указанной на рис. 5а; из профилограммы видно, что расстояние между наностержнями составляет $2,7 \mu\text{m}$, а высота колеблется между 12 нм и 15 нм.

На рис.6 представлены наностержни $Bi_2Te_3 < Zn >$ выращенные на поверхности теллурида висмута.



Рис.6

Вертикально выросшие нанострoвки (подобные данным рис.3).

4. Выводы

Можно сделать следующее заключение, связанное с тем, что выращенные нами горизонтальные и вертикальные наностержни составляют неотъемлемую часть поверхности (0001) $A_2^V B_3^{VI} < Zn, Se >$. Измерение их жесткостных характеристик по методике, основанной на явлении динамического гашения колебаний неприемлемо. Этот метод может подойти для свободных нанобъектов физически несвязанных с подложкой.

Список литературы

- [1] *Фильштинский Л. А.* Математическое моделирование эксперимента по определению модуля упругости наностержня. Теоретическая и прикладная механика, 2009, вып. 45, с.162-168.
- [2] *Азаренков Н. А., Береснев В. М., Погребняк А. Д., Маликов Л. В., Турбин Т. В.* Нано-материалы, нано-покрытия, нано-технологии. Учебное пособие, Харьков, 2009, 210 с.
- [3] *Григолюк Э. И., Фильштинский Л. А.* Регулярные кусочно-однородные структуры с дефектами. М.: Физматгиз, 1994, 335 с.
- [4] *Еремеев В. А., Иванова Е. А., Морозов Н. Ф., Соловьев А. Н.* Об определении собственных частот нанобъектов. Доклады РАН, 2006, т. 406, No. 6, с. 756-759.
- [5] *Алиева А. П., Алескеров Ф. К., Кахраманов С. Ш., Насибова С. А.* Механизм формирования межслоевых квантовых нитей в $Bi_2Te_3 < Zn >$. Труды XII Международной Конференции "Современные информационные и электронные технологии", 4-8 июня 2012 г., г. Одесса, Украина, 2012, с.293.
- [6] *Алескеров Ф. К., Кахраманов К. Ш., Кахраманов С. Ш.* Перколяционный эффект в кристаллах Bi_2Te_3 , легированных медью или никелем. Неорганические материалы, 2012, т. 48, No. 5, с. 536-541.

А. Ш. Кахраманов
 Бакинский Государственный Университет,
 ул. З. Халилова, 23, Баку, Азербайджан

К. Ш. Кахраманов
 Научно-производственное объединение "Selen" НАНА,
 ул. З. Халилова, 576, Баку, Азербайджан
 E-mail: kamil.qahramanov@yahoo.com

Received 29 January 2015

Accepted 30 March 2015