

6. Оценить привносимую дефектность.

Таким образом, в данной работе рассмотрены назначение, особенности, управление и программное обеспечение вакуумно-технологического оборудования на примере SNT Sigma-400V.

Показаны возможности программного обеспечения, установленного на встроенный в ВТО компьютер. Приведены методики проверки скорости напыления металлических пленок Ti, Ni, а также

пленок Cr и Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Показаны допустимые и недопустимые дефекты при проверке на отсутствие дефектов и загрязнений.

#### Литература

1. Мартынов, В. В. Технология сверхбольших интегральных схем и оптико-механическое оборудование для микро- и наноэлектроники / В. В. Мартынов, Я. И. Точицкий. – Минск : Беларуская навука, 2018. – 467 с.

УДК 681.586.7

### ЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ СЛОИ НА ОСНОВЕ ПЛЕНОК ЛЕНГМЮРА–БЛОДЖЕТТ ПОЛИВИНИЛКАРБАЗОЛА С НАНОЧАСТИЦАМИ ДИОКСИДА КРЕМНИЯ ДЛЯ ДАТЧИКОВ АНАЛИЗА СОДЕРЖАНИЯ КАТИОНОВ НИКЕЛЯ В ВОДЕ Сапсалёв Д. В.<sup>1,2</sup>, Мельникова Г. Б.<sup>1</sup>, Аксиучиц А. В.<sup>3</sup>, Баранова А. С.<sup>1</sup>, Толстая Т. Н.<sup>1</sup>, Котов Д. А.<sup>3</sup>, Чижик С. А.<sup>1,4</sup>

<sup>1</sup>Институт тепло- и массообмена имени А. В. Лыкова НАН Беларуси

<sup>2</sup>Белорусский государственный педагогический университет имени М. Танка

<sup>3</sup>Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники

<sup>4</sup>Белорусский национальный технический университет

Минск, Республика Беларусь

**Аннотация.** Разработана методика формирования наноструктурированных чувствительных слоев на основе поливинилкарбазола с наночастицами диоксида кремния методом Ленгмюра–Блоджетт для встречно-штыревых никелевых электродов емкостного датчика анализа катионов никеля в воде. Установлено, что модификация проводящего никелевого слоя емкостного датчика полимерными наноконпозиционными пленками позволяет повысить стабильность работы емкостного датчика до 3 циклов измерений.

**Ключевые слова:** поливинилкарбазол, наноконпозиции, метод Ленгмюра–Блоджетт, емкостные датчики, атомно-силовая микроскопия.

### SENSITIVE LAYERS BASED ON LANGMUIR–BLODGETT POLY(VINYLCARBAZOLE) FILMS WITH SILICON DIOXIDE NANOPARTICLES FOR SENSORS FOR ANALYSIS OF NICKEL CATIONS CONTENT IN WATER

Sapsaliou D.<sup>1,2</sup>, Melnikova G.<sup>1</sup>, Aksiuchyts A.<sup>3</sup>, Baranova A.<sup>1</sup>, Tolstaya T.<sup>1</sup>,  
Kotov D.<sup>3</sup>, Chizhik S.<sup>1,4</sup>

<sup>1</sup>A. V. Luikov Heat and Mass Transfer Institute NAS of Belarus

<sup>2</sup>Belarusian State Pedagogical University named after Maxim Tank

<sup>3</sup>Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics

<sup>4</sup>Belarusian National Technical University

Minsk, Republic of Belarus

**Abstract.** A method for forming nanostructured sensitive layers based on poly(vinylcarbazole) with silicon dioxide nanoparticles by the Langmuir–Blodgett method for interdigitated nickel electrodes of a capacitive sensor for analyzing nickel cations in water has been developed. It has been established that modification of the conductive nickel layer of the capacitive sensor with polymer nanocomposite films allows increasing the stability of the capacitive sensor to 3 measurement cycles.

**Key words:** poly(vinylcarbazole), nanocomposites, Langmuir–Blodgett method, capacitive sensors, atomic force microscopy.

Адрес для переписки: Сапсалёв Д. В., ул. П. Бровки, 15, г. Минск 220072, Республика Беларусь  
e-mail: dsapsalev@list.ru

**Введение.** Тонкопленочные покрытия на основе проводящих полимеров (полианилина, полипиррола, поливинилкарбазола и пр.) и их наноконпозитивов широко используются в различных отраслях науки и техники (фотоника, оптоэлектроника и пр.), в том числе при разработке химических сенсорных систем [1–3]. Метод Ленгмюра–Блоджетт (ЛБ) позволяет контролировать получать покрытия нанометровой толщины на планарных подложках [1, 4].

**Материалы и методы.** В работе использован емкостный датчик встречно-штыревого типа, представляющий собой проводящий слой никеля заданной топологии, сформированный методом ионно-лучевого распыления (установка ВУ-1БСП, СССР) на ситалловой подложке [5].

Тонкопленочные покрытия на основе поливинилкарбазола (ПВК, Sigma-Aldrich,  $M = 1100000$ ) формировали на поверхности датчика методом Ленгмюра–Блоджетт («Автоматизированный комп-

лекса для модифицирования поверхностей мембран молекулярными и ультратонкими слоями», Институт тепло- и массообмена имени А. В. Лыкова НАН Беларуси, Республика Беларусь). Поверхностное давление ( $\pi$ ) формирования нанокомпозитов на основе ПВК определяли экспериментально на основе анализа изотерм сжатия монослоев. Установлено, что наиболее плотные однородные покрытия на основе ПВК формируются при  $\pi = 15$  мН/м.

ЛБ-пленки ПВК формировали из его раствора в хлороформе с концентрацией 0,75 мг/мл. С целью получения структур, обладающих более развитой поверхностью, в состав полимерных покрытий вводили наночастицы диоксида кремния ( $\text{SiO}_2$ ). Для этого раствор ПВК ( $c = 1,5$  мг/мл) смешивали с суспензиями наночастиц  $\text{SiO}_2$  (Sigma-Aldrich,  $d = 10\text{--}20$  нм,  $c = 0,5$  мг/мл и 1 мг/мл) в хлороформе, предварительно выдержанными в ультразвуковой ванне в течение 10 мин в объемном соотношении 1 : 1, после чего повторяли процедуру обработки ультразвуком в течение 5 мин. В результате были приготовлены рабочие суспензии, содержащие  $6,11 \cdot 10^3$  моль и  $12,22 \cdot 10^3$  моль  $\text{SiO}_2$  из расчета на 1 моль ПВК.

Исследование структуры поверхности сформированных покрытий проводили методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) на установке NT-206 (ОДО «Микротестмашины», Республика Беларусь) с использованием кремниевых кантилеверов NSC 11A (жесткость 3 Н/м, «MicroMash», Эстония).

Рабочие характеристики датчика определяли на основании анализа зависимости емкостных характеристик от частоты (измеритель иммитанса E7-25, Республика Беларусь) при выдерживании в растворах сульфата никеля (II) с различными концентрациями. Для определения стабильности работы сенсоров проводили серию измерений. За один цикл принято измерение емкостных характеристик датчика для растворов со следующими значениями концентраций  $\text{NiSO}_4$ :  $1 \cdot 10^{-4}$ ,  $1 \cdot 10^{-3}$ ,  $1 \cdot 10^{-2}$ ,  $1 \cdot 10^{-1}$ , 1, 10, 50 мМ).

**Результаты и их обсуждение.** На основании данных АСМ установлено, что поверхность наноструктурированного проводящего покрытия никеля представлена равномерно распределенными зернами продолговатой формы. Максимальный размер отдельных зерен достигает 800 нм (рисунок 1, а). Исходный (немодифицированный полимерными покрытиями) датчик демонстрирует следующие рабочие характеристики: предел обнаружения ионов  $\text{Ni}^{2+} - 10^{-3}$  мМ, стабильность в течение 1 цикла измерений [5].

Пленки Ленгмюра–Блоджетт поливинилкарбазола и нанокомпозиты состава ПВК– $\text{SiO}_2$  формируют на никеле плотные слои – поверхность металла закрыта монослоями (рисунок 1, б–г); перепад высоты снижается от 61 нм (для исход-

ного металлического покрытия) до 11, 22 и 29 нм для ЛБ-покрытий составов ПВК, ПВК– $\text{SiO}_2$  ( $6,11 \cdot 10^3$  моль) и ПВК– $\text{SiO}_2$  ( $12,22 \cdot 10^3$  моль) соответственно (область сканирования  $5 \times 5$  мкм).

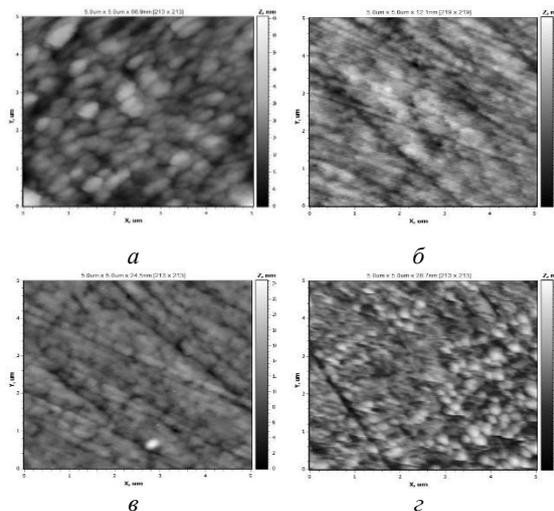


Рисунок 1 – Структура никелевого слоя (а) и покрытий ЛБ состава ПВК – (б), ПВК– $\text{SiO}_2$  ( $6,11 \cdot 10^3$  моль – в;  $12,22 \cdot 10^3$  моль – г), сформированных на поверхности никелевых электродов при  $\pi = 15$  мН/м

Изолированность проводящего никелевого слоя влияет на емкостные характеристики датчиков, модифицированных композиционными ЛБ-покрытиями ПВК, и приводит к снижению предела обнаружения до  $10^{-1}$  мМ. В случае датчиков, модифицированных композиционными покрытиями ПВК– $\text{SiO}_2$ , предел обнаружения катионов никеля не изменяется и составляет  $10^{-3}$  мМ, что обусловлено развитой структурой поверхности, обеспечивающей хорошую сорбционную активность.

Формирование наноструктурированных покрытий ЛБ на поверхности никелевых электродов позволяет повысить стабильность работы емкостного датчика до 2 и 3 циклов измерений для чувствительных слоев ПВК и ПВК– $\text{SiO}_2$  соответственно.

Таким образом, покрытия Ленгмюра–Блоджетт на основе поливинилкарбазола с наночастицами диоксида кремния имеют перспективы применения в качестве чувствительных слоев при разработке емкостных датчиков анализа содержания тяжелых металлов в воде.

**Благодарности.** Работа выполнена в рамках государственной программы научных исследований на 2021–2025 гг. «Энергетические и ядерные процессы и технологии», подпрограммы «Энергетические процессы и технологии» (задание 2.25).

#### Литература

1. Conducting polymer and reduced graphene oxide Langmuir–Blodgett films: a hybrid nanostructure for high performance electrode applications / J. Wen [et al.] // Journal of Materials Science: Materials in Electronics. – 2013. – V. 25. – P. 1063–1071.

2. Room temperature operated ammonia gas sensor using polycarbazole Langmuir–Blodgett film / Vibha Saxena [et al.] // *Sensors and Actuators B Chemical*. – 2005. – V. 107. – P. 277–282.

3. Electrical transport properties characterization of PVK (poly N-vinylcarbazole) for electroluminescent devices applications / P. D'Angelo [et al.] // *Solid-State Electronics*. – 2007. – V. 51. – P. 123–129.

4. Tanami G. / Thin Nanocomposite Films of Polyaniline/Au Nanoparticles by the Langmuir–Blodgett Technique / G. Tanami, V. Gutkin, D. Mandler // *Langmuir*. – 2010. – V. 26, № 6. – P. 4239–4245.

5. Сенсорные слои полиметилметакрилата для емкостных датчиков анализа содержания катионов тяжелых металлов в воде / Д. В. Сапсалёв [и др.] // *Вес. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. хім. навук*. – 2024. – Т. 60, № 1. – С. 81–88.

УДК 004.942, 532.64

## МОДЕЛИРОВАНИЕ СМАЧИВАЕМОСТИ ПОВЕРХНОСТИ ПОЛИМЕРОВ ВОДОЙ

Трухан Р. Э.<sup>1</sup>, Маханёк А. А.<sup>1</sup>, Лапицкая В. А.<sup>1,2</sup>, Чижик С. А.<sup>1,2</sup>, Кузнецова Д. И.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт тепло- и массообмена имени А. В. Лыкова НАН Беларусі

<sup>2</sup>Белорусский национальный технический университет

Минск, Республика Беларусі

**Аннотация.** Представлен обзор, посвященный молекулярно-динамическому моделированию смачиваемости полимерных материалов водой и исследованию механических свойств полимеров с применением пакета GROMACS и использованных при этом силовых полей и инструментов формирования топологических данных.

**Ключевые слова:** полимеры, смачиваемость, молекулярная динамика.

## MODELING OF POLYMER SURFACE WETTABILITY WITH WATER

Trukhan R.<sup>1</sup>, Makhaniok A.<sup>1</sup>, Lapitskaya V.<sup>1,2</sup>, Chizhik S.<sup>1,2</sup>, Kuzniatsova D.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>A. V. Luikov Heat and Mass Transfer Institute of NAS of Belarus

<sup>2</sup>Belarusian National Technical University

Minsk, Republic of Belarus

**Abstract.** This review is devoted to molecular dynamics modeling of wettability of polymeric materials by water and the study of mechanical properties of polymers using the GROMACS package, with the force fields and topological data generation tools used in this case.

**Key words:** polymers, wetting, molecular dynamics.

Адрес для переписки: Трухан Р. Э., ул. П. Бровки, 15, г. Минск 220072, Республика Беларусі

e-mail: ruslan.trukhan@mail.ru

Формирование нанопленок на структурированных твердых поверхностях предполагает измерение краевого угла смачиваемости (КУС) поверхности пленки водой для контроля эффекта от модификации гидрофильно/гидрофобных свойств подложки. Кроме того, методом атомно-силовой спектроскопии измеряются также упругие и адгезионные свойства сформированных пленок. Трудоемкость и продолжительность таких экспериментов побуждает привлечение метода молекулярной динамики для количественной оценки интересующих параметров и выбора оптимальных условий модификации физико-химических свойств поверхности подложки.

Одним из распространенных пакетов молекулярно-динамического (МД) моделирования является GROMACS [1]. Хотя данный пакет ориентирован на исследование органических молекул, множество работ демонстрируют возможность успешного моделирования в нем процессов в искусственных полимерных системах. Наш выбор в пользу GROMACS обусловлен его высокой производительностью [2].

Целью данной работы является обзор публикаций, в которых данный пакет применялся для изучения различных физико-химических и механических свойств искусственных полимеров.

Публикаций, посвященных исследованию смачиваемости и механических свойств полимеров методом МД-моделирования с применением пакета GROMACS немного и, зачастую, они не содержат информацию о программных инструментах, при помощи которых авторы таких публикаций формировали файл топологии. В случае искусственных полимеров создать такой файл средствами GROMACS весьма затруднительно. Поэтому мы акцентируем внимание на работах, в которых имеется информация о полезных для решения подобной задачи скриптах и WEB-ресурсах, а также применявшихся для моделирования силовых полей.

Как правило, МД-моделирование смачиваемости полимеров водой не ограничивается определением КУС, а включает также изменения условий или факторов, влияющих на величину этого угла. Так, в работе [3] изучалось влияние рифле-