

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФУНКЦИЙ СИЛА-РАССТОЯНИЕ В СТАТИЧЕСКОЙ СИЛОВОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ВЯЗКОУПРУГИХ МАТЕРИАЛОВ

Н. В. Балабанова¹, С. А. Чижик², З. Римуза¹, С. О. Пантелей³

¹ Варшавский технический университет, Варшава, Польша

² Институт тепло- и массообмена им А.В. Лыкова НАН Беларуси, Минск, Беларусь

³ Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

Тонкие полимерные покрытия и пленки активно используются в конструкциях МЭМС и ряде микро- и нанотехнологий [1]. Локальные механические свойства материалов и механика их деформирования на наноуровне часто определяет эффективность применения тонких покрытий в контактных сопряжениях. Для оценки механических свойств покрытий нанометровой толщины используются методики атомно-силовой микроскопии (АСМ), в частности, силовой спектроскопии [2]. При этом в исследованиях предполагается упругий характер деформирования в контакте острие-образец, что не соответствует реальному, вязкоупругому поведению полимеров. Особенности вязкоупругого деформирования полимеров в нанобъемах изучены недостаточно, отсутствуют удобные в использовании модели.

В работе предлагается модель вязкоупругого контактного деформирования в системе острие АСМ – образец. Для математического описания процесса вязкоупругого деформирования использовалась модель Максвелла и подход Радока для вычисления параметров контакта [3–7]. Этот метод заключается в замене упругих констант в решении для упругого случая соответствующими интегральными или дифференциальными операторами. Разработан алгоритм расчета вязкоупругого контакта и выполнена его численная реализация. Осуществлено моделирование кривых сила-расстояние в АСМ для различных типов зондов и исследуемых материалов.

Обсуждается возможность использования полученных результатов при наноиндентировании полимеров и при разработке процедур статической и динамической силовой спектроскопии в атомно-силовой микроскопии.

Эксперимент

В качестве примера рассмотрены образцы полимерных резистов для нанопечатания. Задача заключалась в исследовании их локальных свойств на наноуровне. Толщина образцов 130-280 мкм. Были сняты изображения топографии и фазы образцов. Анализ изображений топографии (рис. 1а) показывает, что поверхность образцов очень гладкая: средняя шероховатость составляет 0.2 нм.

Из изображения фазового контраста (рис. 1, б) видно, что материал неоднородный, но свойства его мало изменяются.

Были получены кривые подвода – отвода для данных образцов (рис. 2).

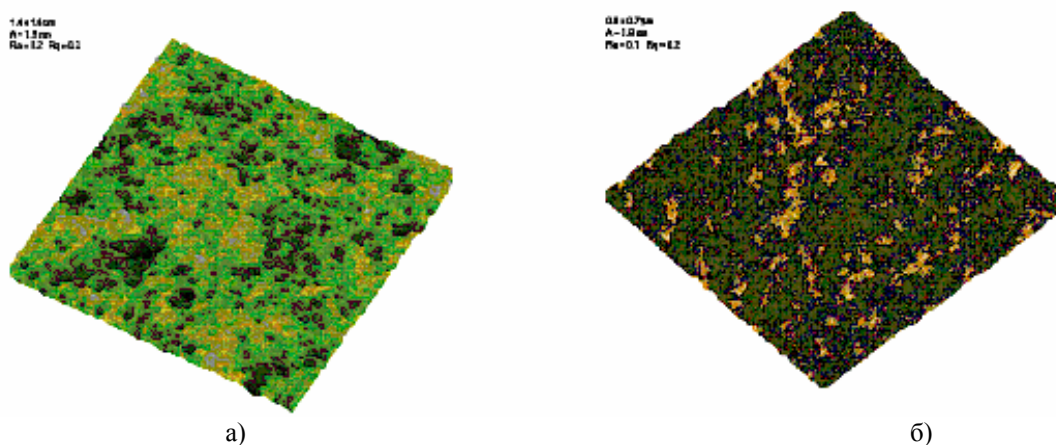


Рис. 1. Характерные АСМ-изображения топографии (скан 1.4x1,4 мкм, Rq= 0,2 нм) и фазового контраста исследуемых поверхностей

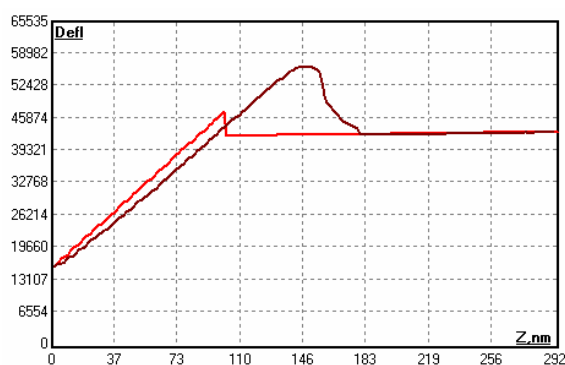


Рис. 2. Типичные кривые нагрузка – разгрузка для исследуемых образцов

После калибровки данных кривых были рассчитаны зависимости изменения модуля Юнга от глубины проникновения (рис. 3). При этом исходили из теории Герца для упругого деформирования в контакте сферическое острие – образец.

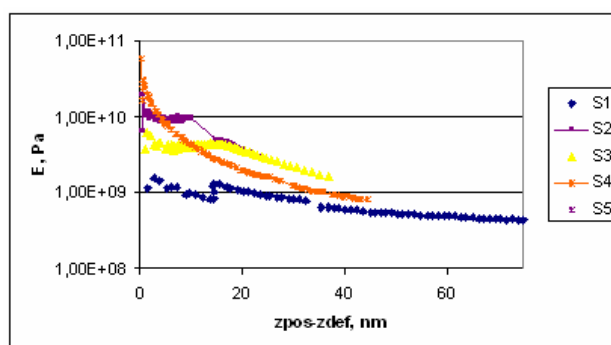


Рис. 3. Расчетные зависимости модуля Юнга от глубины проникновения для различных типов полимерных резистов

Из полученных экспериментальных результатов видно, что с увеличением

глубины проникновения модуль Юнга уменьшается. Это можно объяснить несколькими причинами: 1) материал в полимерном слое действительно изменяет свои свойства с глубиной, 2) свойства материала изменяются со временем. Первое предположение малореально, поскольку толщина слоя является малой, а сам образец лежит на твердой подложке. Более обоснованным объяснением этого эффекта является зависимость модуля Юнга от времени, а, следовательно, вязкоупругое его поведение для полимеров в контакте.

Математическая модель вязкоупругого контакта

Рассматривается контакт острия с поверхностью образца. Поверхность каждого из тел предполагается топографически гладкой в области контакта. На микроуровне это означает отсутствие или неучет поверхностных микронеровностей, которые обуславливали бы неполное прилегание поверхностей контакта или резкие локальные изменения контактных давлений. На макроуровне профили считаются непрерывными в зоне контакта вместе со вторыми производными. Основной теорией, которой пользуются при расчетах, является теория упругого контакта Герца. В рамках теории Герца соотношения между радиусом контакта a , глубиной проникновения и приложенной силой P имеют вид:

$$a = \left(\frac{3PR}{4E^*} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad (1)$$

$$\delta = \frac{a^2}{R} = \left(\frac{9P^3}{16RE^{*2}} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (2)$$

Теория Герца накладывает ряд ограничений на взаимодействующие поверхности. Во-первых, предполагается упругое поведение материала, во-вторых, не учитываются поверхностные силы.

Далее рассмотрим поведение вязкоупругого основания при вдавливании в него жесткого сферического зонда. Под действием постоянной нормальной нагрузки глубина внедрения зонда и площадь области контакта будут увеличиваться со временем.

В случае увеличения контактного радиуса были получены следующие соотношения, выражающие зависимость приложенной нагрузки и радиуса зоны контакта:

$$P(t) = \frac{8}{3R} \int_0^t \psi(t-t') \frac{d}{dt'} a^3(t') dt', \quad (3)$$

$$a^3(t) = \frac{3}{8} R \int_0^t \phi(t-t') \frac{d}{dt'} P(t') dt'. \quad (4)$$

Если задано изменение глубины внедрения $\delta(t)$, то изменение радиуса контакта $a(t)$ непосредственно находится из соотношения (2)

$$a^2(t) = R\delta(t). \quad (5)$$

$$\delta = \left(\frac{\left(\frac{3}{8} \int_0^t \phi(t-t') \frac{d}{dt'} P(t') dt' \right)^2}{R} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (6)$$

Если приложенная нагрузка не зависит от времени, т.е. если задан следующий закон изменения нагрузки: $P(t) = 0, t < 0$; $P(t) = P_0, t > 0$, выражение (4) принимает вид

$$a^3(t) = \frac{3}{8} R P_0 \phi(t), t > 0. \quad (7)$$

Для момента времени t , в который размер области контакта $a(t)$ убывает, определим момент времени t_1 , предшествующий моменту t , такой, при котором радиус области контакта $a(t_1)$ в этот момент возрастает и равен $a(t)$. На основе этого предположения был разработан алгоритм построения контактного радиуса для случая уменьшения размера контакта.

Сравним полученные результаты с теорией Герца. Для вычислительного эксперимента предположим следующие характеристики материала:

$$\nu_1 = \nu_2 = 0.5, E_1 = E_2 = 10^8 \left(\frac{H}{M^2} \right), P_{\max} = 10^{-7} (H), R = 10^{-8} (M), T = 0.1 (сек).$$

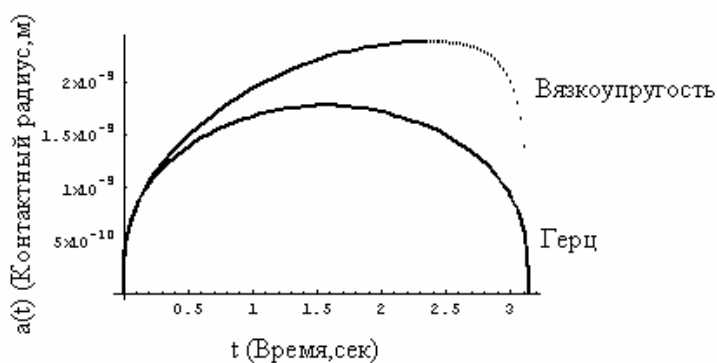


Рис. 4. Зависимость контактный радиус – время в случае применения упругой и вязкоупругой моделей контакта.

Вследствие вязкоупругого поведения время возникновения максимального контактного радиуса всегда больше, чем время возникновения максимума приложенной нагрузки.

Моделирование зависимостей сила – расстояние

Применим полученные результаты для описания основной функции статической силовой спектроскопии типа кривой подвода острия зонда к образцу.

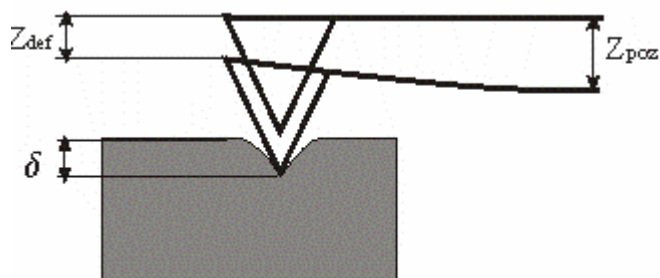


Рис. 5. Геометрическая схема подвода зонда

На рис. 5 показано, что перемещение консоли зонда можно описать двумя параметрами – Z_{poz} и Z_{def} . Очевидна следующая зависимость между этими двумя параметрами:

$$Z_{poz} = Z_{def} + \delta(P), \quad (8)$$

где $\delta(P)$ – глубина проникновения, которая зависит от приложенной к концу острию нагрузки. Нагрузка в этом случае будет задаваться уравнением

$$P = kZ_{def}, \quad (9)$$

где k – жесткость консоли. Следовательно, уравнение (8) примет вид

$$Z_{poz} = Z_{def} + \delta(kZ_{def}). \quad (10)$$

С использованием герцевской зависимости для $\delta(kZ_{def})$ получили следующее уравнение:

$$\left(\frac{9(kZ_{def})^2}{16RE^2} \right)^{1/3} + Z_{def} = Z_{poz}. \quad (11)$$

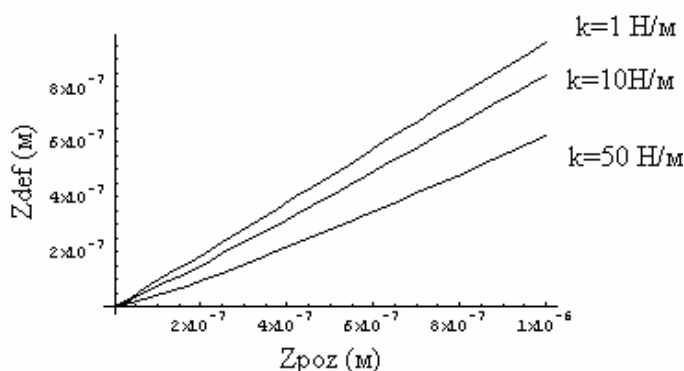


Рис. 6. Кривые $Z_{def}(Z_{poz})$ в рамках теории Герца при различных жесткостях консоли

Результаты вычислений приведены на рис. 6. На графике изображены кривые, соответствующие различным значениям жесткости консоли: 1, 10 и 50Н/м. Видно, что с уменьшением жесткости консоли значение Z_{def} увеличивается и становится сравнимым со значением Z_{poz} , что и следовало ожидать.

Для того чтобы исследовать ту же зависимость для вязкоупругих материалов воспользуемся уравнением (10), но для $\delta(kZ_{def})$ применим зависимость (6). В результате получим уравнение

$$\left(\frac{\left(\frac{3}{8} \int_0^t \phi(t-t') \frac{d}{dt'} (kZ_{def}) dt' \right)^2}{R} \right)^{\frac{1}{3}} + Z_{def} = Z_{poz} \quad (12)$$

Аналитическое решение данного уравнения сложно, поэтому будем использовать следующий алгоритм. Первоначально решим обратную задачу. Нам точно известен вид функции Z_{poz} от времени, поскольку он задается оператором. Будем подбирать вид функции Z_{def} таким образом, чтобы получить ожидаемый вид функции Z_{poz} . Для простоты в нашем эксперименте предположим линейный вид функции $Z_{def} = At^n$. На рис. 7 приведены рассчитанные временные зависимости для Z_{poz} в предположении $Z_{def} = t$ и $Z_{def} = t^2$.

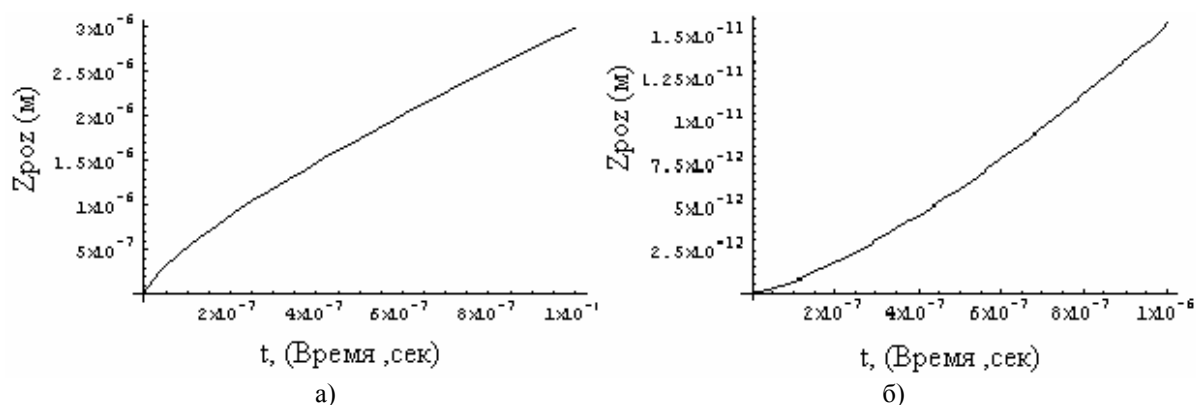


Рис. 7. Кривые Z_{poz} для предполагаемых зависимостей Z_{def} а) $Z_{def}=t$, б) $Z_{def}=t^2$.

Исходя из противоположной по знаку кривизны полученных кривых, можно сделать вывод, что в нашем случае степень функции Z_{def} будет между 1 и 2. Подбором коэффициента A мы сможем добиться нужного наклона кривой, характеризующего скорость нагружения. Вычислительный эксперимент проведем для трех консолей различной жесткости: 1Н/м, 10Н/м, 50Н/м. Результаты вычислений приведены на рис. 8.

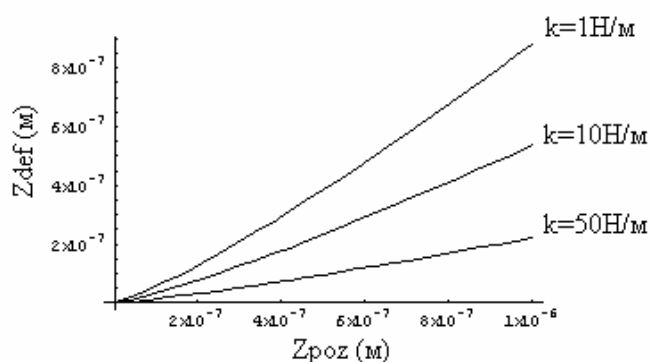


Рис. 8. Кривые $Z_{def}(Z_{poz})$ для вязкоупругой теории при различных жесткостях консоли

Результат моделирования соответствует реальным соотношениям и отличается от результата моделирования поведения консоли в случае упругого деформирования образца (сравнить рис. 6 и рис. 8).

Таким образом, предложена модель кривых сила–расстояние для вязкоупругих образцов, которые могут быть использованы при оценке вязкоупругих свойств полимеров методом статической силовой спектроскопии.

Работа частично финансировалась Белорусским республиканским фондом фундаментальных исследований (проект №Ф03МС-056) и в рамках Европейского проекта ASSEMIC MRTN-СТ-2003-50482.

Литература

1. Bhushan B. (ed.) Modern Tribology Handbook. CRC Press, Boca Raton, 2001. Vol. 1, 2.
2. Суслов А.А., Чижик С.А. Сканирующие зондовые микроскопы // Материалы, технологии, инструменты. 1997.
3. Giri M., Bousfield D. B., Unertl W. N. Dynamic Contacts on Viscoelastic Films: Work of Adhesion // Langmuir. 2001. № 17. P. 2973-2981.
4. Unertl W.N. Creep Effects in Nanometer-Scale Contacts to Linear Viscoelastic Materials // Laboratory for Surface and Technology, University of Main.
5. Johnson K.L. Contact mechanics and the adhesion of viscoelastic spheres. Tsukruk V.V. 1999.
6. Greenwood J.A., Johnson K.L. An alternative to the Maugis model of adhesion between viscoelastic spheres. // J. Phys. D: Appl. Phys. 1998. № 31. P. 3279.
7. Tsukruk V.V., Wahl K. J. Microstructure and Microtribology of Polymer Surfaces.