УДК 547.022.1/.4

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКИ, КАК ЗОНДА АТОМНО-СИЛОВОГО МИКРОСКОПА, С КРИСТАЛЛОМ АЛМАЗА

М. А. Брич, С. А. Чижик

Институт тепло- и массообмена им. А. В. Лыкова НАН Беларуси, ул. П. Бровки 15, г. Минск, Беларусь E-mail: mabritch@hmti.ac.by

Введение

Расширение аналитических возможностей ACM во многом связано с модифицированием острия зонда. «Наращивание» острия одностенной углеродной нанотрубкой (HT), в частности, увеличивает точность измерений топологии и делает более локализованными измерения физико-механических свойств наноструктур. В этом случае для оценки локального модуля упругости и контактной адгезии используется торцевое сжимающее и растягивающее нагружение HT. Поэтому важно изучить особенности деформирования нанотрубки при осевом сжатии и растяжении. В качестве индентируемого образца был выбран кристалл алмаза. В этом случае в общем деформировании контактной системы преобладает деформирование нанотрубки, и индентирование материала близкого к абсолютно жесткому позволяет теоретически и экспериментально изучать особенности наномеханического поведения HT. Кроме того, сродство атомов индентора и образца при их максимальном приближении приводит к образованию прочных связей, позволяющих реализовать процесс растяжения HT без дополнительного защемления ее свободного конца.

Постановка задачи и метод решения

В работе представлены результаты моделирования методом молекулярной динамики последовательных процессов приближения зонда к поверхности образца, его вдавливания в образец и обратного движения зонда от поверхности образца. В качестве зонда рассматривалась одностенная углеродная нанотрубка типа armchair (5,5) с открытыми концами, в качестве образца – нанокристалл алмаза (рис. 1, а). При проведении расчетов нижний слой атомов образца считался жестко закрепленным, а верхний слой атомов НТ (основание зонда) – перемещающимся с постоянной скоростью. Величина скорости перемещения основания зонда принята равной ±10 м/с (в соответствии с разными направлениями движения). Движение остальных атомов системы рассчитывалось путем интегрирования уравнений Ньютона при заданной потенциальной функции взаимодействия между атомами.

Для описания взаимодействия атомов на расстояниях менее 0.2 нм использо-



вался потенциал межатомного взаимодействия в форме Терсоффа–Бреннера [1]. Полная потенциальная энергия системы U выражается как сумма энергий связи всех пар атомов, составляющих систему

$$U = \sum_{i} \sum_{j>i} [V_{R}(r_{ij}) - B_{ij}^{*}V_{A}(r_{ij})],$$

где r_{ij} – расстояние между *i*-ым и *j*-ым атомами; $V_A(r)$ и $V_R(r)$ – экспоненциальные функции типа потенциала Морзе, отвечающие за описание притяжения и отталкивания между атомами, B_{ij}^* – функция, выражающая зависимость энергии связи между атомами *i* и *j* от углов θ_{ijk} между связью *i-j* и всеми соседними связями *i-k*, *j-k*.

Дальнодействующая составляющая взаимодействия (потенциал Ван-дер-Ваальса) учитывалась на основании данных, приведенных в [2].

Результаты моделирования и их обсуждение

На рис. 1 показаны конфигурации атомов рассматриваемой системы, соответствующие разным стадиям процесса, а на рис. 2-4 – диаграммы смещение – усилие (z-F). По мере сближения зонда и подложки между их крайними атомами вначале действует притяжение Ван-дер-Ваальса, которое вследствие своей малой величины практически не проявляется на диаграммах деформирования. При дальнейшем сближении притяжение сменяется отталкиванием, чему соответствует первый максимум на диаграмме (z-F) (рис. 2). Преодоление этого барьера связано с перестройкой электронных конфигураций атомов и изменением преимущественного типа связей от sp^2 , характерного для НТ, к sp^3 , характерному для алмаза. В результате перестроек при сближении атомов на торце НТ и поверхности кристалла алмаза образуются ковалентные связи между атомами зонда и подложки (рис. 1, б).

На начальном этапе нагружения наблюдается упругий характер деформирования НТ (зависимость перемещение – усилие является близкой к линейной). При дальнейшем перемещении зонда происходит деформация сжатия, в итоге приводящая к сминанию НТ (рис. 1, в). Потеря устойчивости атомарной структуры НТ наблюдается при усилии около 27 нН и сопровождается снижением ее жесткости, которая изменяется ступенчато (около 5 нН на 0,2 нм, рис. 2). Смещение НТ рассматриваемой длины до наступления потери упругой устойчивости составляет около 0,3 нм.

Характер изменения атомной структуры системы и характер зависимости F(z) при обратном движении зонда кардинальным образом зависят от того, производится ли смена направления движения до (рис. 3) или после (рис. 4) установления прочных ковалентных связей между атомами зонда и подложки. В первом случае процесс сближения – удаления сопряжен с действием ван-дер-ваальсовых сил величиной до 1 нН и практически полностью обратим (гистерезис отсутствует). Во втором происходит деформация растяжения, сопровождающаяся существенной перестройкой межатомных связей (рис. 1, г) и, как следствие, повышением температуры системы. Имеет место значительное удлинение НТ без ее разрыва





Рис. 1. Начальное положение углеродной нанотрубки (зонда) и кристалла алмаза (образца) – а; состояние системы после образования ковалентных связей между атомами образца и зонда – б; сминание НТ в результате дальнейшего перемещения основания зонда по направлению к образцу – в; г – структурные превращения и деформация системы НТ – алмаз, имеющие место при обратном движении зонда из состояния, соответствующего рис. 1, б.



Рис. 2. Диаграмма смещение – усилие, соответствующая прямому движению зонда





Рис. 3. Диаграмма смещение – усилие, соответствующая прямому (1) и обратному (2) движению зонда

(в отличие от аналогичного процесса, осуществляемого при скорости удаления зонда, равной 100 м/с [3]). Представленная на рис. 4 диаграмма, описывающая процесс растяжения, позволяет оценить прочность НТ при растяжении. Минимум в зоне отрицательных усилий соответствует потере устойчивости при растяжении и составляет около 60 нН, что превышает соответствующее значение для процесса сжатия.



Рис. 4. Диаграмма смещение – усилие, соответствующая прямому (1) и обратному (2) движению зонда



Выводы

Проведенное моделирование наномеханики углеродной одностенной нанотрубки позволило выявить особенности поведения НТ при использовании ее в качестве острия зонда АСМ, в частности в процедурах наноиндентирования. Моделирование процесса деформирования в наиболее жестких условиях торцевого контакта НТ с нанокристаллом алмаза позволило оценить предельную прочность НТ в условиях осевого сжатия и растяжения.

Литература

- 1. Brenner D. W. Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films. // Phys. Rev. B. 1990. Vol. 42, No. 15. Pp. 9458-9471.
- 2. Sinnott S. B., Shenderova O. A., White C. T. and Brenner D.W. Mechanical properties of nanotubule fibers and composites determined from theoretical calculations and simulations // Carbon. 1998. Vol. 36, No. 1–2, Pp. 1–9.
- 3. Britch M. A., Dobrego K. V., Krasovskaya L. I., Zhdanok S. A. Molecular dynamics modelling as a tool for the study of nanoobjects and the mechanisms of elementary processes they are involved // Nonequilibrium Processes in Combustion and Plasma Based Technologies. Int. Workshop. Minsk, 2006. Pp. 29–32.

