УДК 621.385.833

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКОГО КОНТАКТА ЗОНД–ОБРАЗЕЦ

А. М. Дубравин

Институт механики металлополимерных систем им. В. А. Белого НАН Беларуси ул. Кирова 32a, г. Гомель, Беларусь

Проведено моделирование динамического контакта зонд-образец с одной степенью свободы с учетом действия как консервативных, так и диссипативных сил путем решения дифференциального уравнения второго порядка методом Рунге-Кутта четвертого порядка точности с использованием пакета MathLab 6.5. Проводился расчет максимальной силы взаимодействия за период колебаний консоли в режиме кратковременного контакта зонда с образцом в зависимости от: относительной амплитуды колебаний консоли, изгибной жесткости консоли, начальной амплитуды колебаний консоли, добротности зонда. Моделировалось изменение резонансной частоты системы в режиме автоколебаний консоли в зависимости от: начальной амплитуды колебаний консоли, расстояния между зондом и образцом и модуля упругости образца. Путем проведения полного факторного эксперимента были получены соотношение для оценки максимальной силы взаимодействия за период колебаний консоли между зондом и образцом в режиме кратковременного контакта, а также линейная зависимость изменения резонансной частоты колебаний зонда от расстояния зонд-образец для начальной амплитуды колебаний консоли ~10 нм в режиме автоколебаний зонда.

### Введение

Динамическая АСМ является многообещающим методом не только с точки зрения получения информации о поверхности, но и как инструмент воздействия на нее (динамическая литография, манипулирование частицами на поверхности образца). Для данных приложений расчет силы взаимодействия между зондом и образцом является первостепенной задачей. Анализ литературных данных показал, что упрощенные методы описания динамического взаимодействия зонда с поверхностью, привлекающие своей простотой, оперируют усредненными параметрами и лишь в общих чертах объясняют механизм взаимодействия. Компьютерные модели, к сожалению, не позволяют на базе полученного результата прогнозировать поведение системы с учетом изменения одного из ее параметров, необходимо проведение дополнительного расчета [1]. Тем не менее, в большинстве случаев перед численным решением дифференциального уравнения от реальных параметров взаимодействия переходят к нормировочным [2], одним из которых является коэффициент 1/k<sub>c</sub>. Данный подход позволяет использовать результат численного решения применительно к широкому спектру всевозможных вариантов изменения жесткости консоли и свойств поверхности при условии, что нормировочные параметры останутся постоянными.

Компьютерная модель динамического контакта представляет собой синтез существующих решений в области ACM и базируется на дифференциальном уравнении второго порядка с одной степенью свободы с учетом действия различ-



ных как по природе, так и по величине за период колебаний консоли консервативных и диссипативных сил  $F(\dot{x}, x)$  взаимодействия зонд – образец (3–O). Уравнение решалось методом Рунге–Кутта четвертого порядка точности путем приведения к задаче Коши:

$$x = \omega^2 (A_d \cos \omega t - x) - \frac{\omega}{Q_0} x - F(x, x) \frac{\omega^2}{k_c}, \qquad (1)$$

где  $x, \dot{x}, \ddot{x}$  – перемещение, скорость и ускорение движения иглы зонда;  $\omega$  – циклическая частота вынужденных колебаний консоли;  $A_d$  – амплитуда возбуждающих колебаний консоли;  $Q_0$  – добротность консоли;  $k_c$  – изгибная жесткость консоли;  $F(\dot{x}, x)$  – консервативные и диссипативные силы взаимодействия 3–О.

Синтезированная компьютерная модель [3] для описания консервативных сил во время контакта зонда с образцом позволяет использовать контактные модели Дерягина–Муллера–Топорова (ДМТ), Джонсона–Кендалла–Робертса (ДКР) и Бернхэм–Колтона–Поллока (БКП). Представленная компьютерная модель не описывает эффекты нанометрового масштаба, и приемлемой является точность ±1 нм.



Рис. 1. Механическое представление компьютерной модели

На рис. 1 представлен механический аналог компьютерной модели. Зонд моделировался с одной степенью свободы. Механическая модель зонда представляла собой параллельно соединенные пружину с жесткостью  $k_c$ , демпфер с коэффициентом демпфирования  $c_0$  и последовательно соединенный с ними инерционный элемент m – сосредоточенная масса зонда с радиусом, равным радиусу закругления острия зонда R. Образец представлен в виде модели Кельвина–Фойта. До контакта 3–O ( $x - Z_c < 0$ , включая область I рис. 1) консервативные силы моделировались в виде Ван-дер-Ваальсовых сил притяжения [2] и выражены через силу адгезии ( $F_a$ ) в точке равновесного межатомного расстояния ( $z_0$ ):

$$F_{att} = F_a \frac{z_0^2}{\left(z_0 - (Z_c - x)\right)^2},$$
(2)

где  $Z_c$  – расстояние между зондом и образцом.

В дальнейшем при моделировании принималось, что данная точка соответствует нулевому сближению  $\delta = x - Z_c = 0$ , и при ненулевой величине силы адгезии подразумевается наличие сил притяжения  $F_{att}$ .



Во время контакта 3–О консервативные силы взаимодействия, возникающие за счет упругих элементов  $k_s$  и  $k_v$ , описывались контактной моделью ДМТ. Влияние подложки  $k_s$  в данной постановке задачи не учитывалось ( $h = \infty$ ). В этой модели используются два коэффициента динамической вязкости ( $\eta_v$ ,  $\eta_s$ ) с учетом различного механизма потерь энергии до деформирования зондом образца и после начала деформирования. В выражение для силы диссипации входит радиус закругления иглы зонда [4, 5]. В частности, во время контакта 3–О (область II) диссипативная сила в объеме деформируемого материала

$$F_{dissV} = -\eta_V \sqrt{R} (x - Z_c)^{1/2} \dot{x} .$$
 (3)

Для обобщения результатов компьютерного моделирования и проведения полного факторного эксперимента использовались следующие коэффициенты: жесткости системы

$$K_{stiff} = \beta \frac{K \sqrt{R}}{k_c} \,, \tag{4}$$

потерь энергии

$$K_{loss} = \beta \frac{\eta \omega \sqrt{R}}{k_c} \,, \tag{5}$$

адгезии

$$K_{adh} = \frac{F_a}{A_d k_c},\tag{6}$$

где K – эффективный модуль упругости;  $\beta = 3,1623 \text{ E}-5 \text{ м}^{1/2}$  – нормировочный коэффициент.

Модель создана в пакете MathLab 6.5. Шаг моделирования устанавливался равным 1e-8 с. При частоте колебаний 100 кГц один период колебаний консоли рассчитывался по 1000 точкам. Для расчета силы взаимодействия использовалось ускорение иглы зонда ( х ). За период колебаний сохраняли наибольшее значение силы взаимодействия. Для оценки амплитуды колебаний и фазового сдвига в колебаниях консоли включали данные изгиба консоли зонда (x). Амплитуду колебаний определяли как корень квадратный из суммы квадратов проекции вектора амплитуды на ортогональные оси координат, а фазу – как арктангенс отношения этих проекций. Скорость подвода зонда устанавливалась такой, чтобы обеспечивать на каждом шаге подвода квазиравновесное состояние системы, т. е. после подвода на один шаг к поверхности необходимо время, чтобы амплитуда колебаний уменьшилась и стабилизировалась на новом уровне либо за счет увеличения потерь энергии системы 3-О, либо за счет уменьшения подвода энергии к зонду в результате фазового сдвига в колебаниях консоли, либо за счет двух вышеприведенных факторов. Это время зависит в основном от добротности консоли зонда. Полученные данные выводили на экран и записывали в файл для дальнейшей обработки. Для проведения полного факторного эксперимента использовались следующие факторы и диапазоны их варьирования: K<sub>stiff</sub> (0,01-10), A<sub>d</sub> (0,1-1), Q (100 - 1000).



Компьютерная модель тестировалась путем сравнения экспериментальных и численно рассчитанных результатов, полученных в работе [1], с результатами, полученными при использовании данной модели.

В случае моделирования автоколебательного режима частота возбуждающих колебаний зонда изменялась так, чтобы фазовый сдвиг  $\varphi$  между колебаниями зонда консоли без взаимодействия 3–О и во время взаимодействия оставался равным нулю.

## Обсуждение результатов

С помощью приведенной модели для режима кратковременного контакта 3–О установлена нелинейная зависимость максимальной силы взаимодействия от относительной амплитуды колебаний консоли, причем в случае отсутствия диссипативных сил взаимодействия эта зависимость приобретала явно немонотонный характер с максимумом при относительной амплитуде колебаний  $A/A_0 = 0.5$  (рис. 2, а).



Рис. 2. Зависимость от относительной амплитуды колебаний  $A/A_0$  максимальной силы взаимодействия 3–О за период колебаний консоли (*a*) и фазового сдвига в колебаниях консоли (*б*)

Установлено также, что сила взаимодействия 3–О может быть как силой притяжения, так и силой отталкивания. Критерием является отношение между максимальной силой взаимодействия 3–О за период колебаний консоли ( $F_{max}$ ) и силой притяжения 3–О в момент касания зонда поверхности ( $F_a$ ). Если для поддержания заданной относительной амплитуды колебаний ( $A/A_0$ ) требуется бо́льшая сила взаимодействия ( $F_{max}$ ), чем сила притяжения 3–О, существующая в момент касания зондом поверхности ( $F_a$ ), эта сила является упругой силой отталкивания (дуга 1), в противном случае – силой притяжения (дуга 2).

Путем проведения полного факторного численного эксперимента в случае преобладающего влияния консервативных сил взаимодействия (рис. 2, а) получено выражение для оценки максимальной силы взаимодействия 3–О за период колебаний консоли при  $A/A_0 = 0.5$ :

$$F_{\max} = \alpha \frac{k_c A_0}{Q_0} = \alpha k_c A_d \,. \tag{7}$$

Значение безразмерного коэффициента а варьируется от 10 до 30 и зависит от радиуса закругления острия зонда, эффективного модуля упругости и добротности консоли зонда:



$$\alpha \approx 7R^{*\frac{1}{8}}K^{*\frac{1}{4}} \left(\frac{Q_0}{100}\right)^{\frac{1}{2}},\tag{8}$$

где  $R^* = \frac{10^9 R}{M}$  – относительный радиус закругления острия иглы зонда;  $10^{-9} K$  $K^*$ 

$$T = \frac{10^{10} \text{ н}}{10^{10}}$$
 – относительный эффективный модуль упругости.

Многочисленные результаты компьютерного моделирования свидетельствовали о том, что величина фазового сдвига зависит от соотношения между консервативными и диссипативными силами в системе, в общем случае – от вязкоупругих свойств образца и его поверхностной энергии. Таким образом, локальное изменение модуля упругости образца, конечно же, приводит к фазовому сдвигу в колебаниях консоли, однако говорить о том, что изменение фазового сдвига в первую очередь связано с локальным модулем упругости на основании компьютерного моделирования, нельзя. В равной мере это изменение может быть вызвано также локальным изменением динамической вязкости или поверхностной энергии. В случае моделирования взаимодействия зонда с поверхностью "гипотетического" образца, у которого коэффициент динамической вязкости равен нулю, фазовый сдвиг не зависел от модуля упругости образца и его величина определялась лишь относительной амплитудой колебаний консоли. Знак фазового сдвига зависел от того, какие силы преобладают при взаимодействии 3-О: силы притяжения или отталкивания (рис. 2, б).

В режиме автоколебаний зонда при входных параметрах системы, описанных в работе [6], получена зависимость изменения частоты колебаний зонда от расстояния между зондом и образцом, рассчитанная аналитически в той же работе:

$$\Delta \omega = \alpha \sqrt{\delta \omega_0}, \tag{9}$$

где  $\alpha$  – коэффициент пропорциональности, зависящий от модуля упругости образца.

Тем не менее при увеличении амплитуды колебаний консоли с 1 до 10 нм эта зависимость приобретала линейный характер:

$$\Delta \omega = \alpha \delta \omega_0. \tag{10}$$

Для проверки результатов численного моделирования проведен натурный эксперимент с использованием жесткого зонда ( $k_c \sim 10^4 - 10^5$  H/м), работающего в автоколебательном режиме с начальной амплитудой колебаний порядка 10 нм. В качестве тестовых образцов использовались кремний, сталь и полистирол.

Зависимость изменения частоты от расстояния 3-О во всех случаях носила линейный характер, что подтверждает результаты компьютерного моделирования (рис. 3), причем коэффициент  $\alpha$  (угол наклона кривых на графике) зависел от материала образца.

### Выводы

Путем компьютерного моделирования динамического кратковременного контакта 3-О и проведения полного факторного эксперимента получено соотноше-



ние для оценки максимальной силы взаимодействия за период колебаний консоли зонда при относительной амплитуде колебаний консоли  $A/A_0 = 0,5$ . Результаты хорошо согласуются с литературными данными, объясняют механизм бистабильного состояния системы, а также основное достоинство режима кратковременного контакта, которое заключается в том, что сила взаимодействия 3–О в  $Q/\alpha$  раз меньше (по крайней мере, в 10 раз), чем сила, отрывающая зонд от поверхности при  $A/A_0 = 0,5$ .



Рис. 3. Кривые спектроскопии изменения частоты зонда в режиме автогенерации от расстояния 3-О. Образец: *1* – кремний (α = 5.72 усл. ед.); *2* – сталь (α = 3.23 усл. ед.); *3* – полистирол (α = 0.42 усл. ед.)

В случае использования жесткого зонда ( $k_c \sim 10^4 - 10^5$  H/м), работающего в режиме автоколебаний, показано, что зависимость изменения частоты колебаний консоли от сближения между зондом и образцом может носить линейный характер, когда амплитуда колебаний консоли  $\sim 10$  нм.

## Литература

- 1. Phase imaging: Deep or superficial? / O. Behrend, L. Odoni, J. Loubert, N. Burnham // Appl. Phys. Lett. 1999. Vol. 75. P. 2551.
- 2. How does a tip tap? / N. Burnham, O. Behrend, F. Oulevey et al. // Nanotechnology. 1997. Vol. 8. P. 67.
- 3. Дубравин А. М. Выбор оптимальных режимов СЗМ и интерпретация фазового изображения применительно к поверхностям трения // Трение и износ. 2004. Т. 25, № 6. С.612–623.
- 4. Tamayo J., Garcia R. Deformation, contact time, and phase contrast in tapping mode scanning force microscopy // Langmuir. 1996. Vol. 12. P. 4430.
- 5. Wang L. The role of damping in phase imaging in tapping mode atomic force microscopy // Surf. Sci. 1999. Vol. 429. P. 178.
- Гоголинский К. В., Усеинов А. С. Измерение модуля упругости сверхтвердых материалов с помощью сканирующего силового микроскопа "НАНОСКАН" // 6-й Белорусский семинар по сканирующей зондовой микроскопии. Минск, 2004. С. 47–53.

