

05;11;12

Деформация зоны контакта и адгезионное трение между зондом сканирующего фрикционного микроскопа и атомарно-гладкой поверхностью

© Г.В. Дедков, М.Б. Дышеков

Кабардино-Балкарский государственный университет,
360004, Нальчик, Россия
E-mail: gv dedkov@mail.ru

(Поступило в Редакцию 22 ноября 1999 г.)

Рассмотрена задача о нахождении равновесной атомной структуры нагруженного внешней силой нанотрибоконтакта, образованного жестким зондом, имеющим форму параболоида вращения, с мягкой поверхностью, моделируемой совокупностью параллельных атомных плоскостей. Проведены расчеты структурных, энергетических и силовых характеристик, а также диссипативной силы статического адгезионного трения в зависимости от величины нормальной нагрузочной силы и радиуса кривизны зонда для системы алмаз-графит. Используются несколько аппроксимаций межатомных потенциалов. Показано, что учет деформации контактной зоны приводит к уменьшению сил адгезионного трения в области растягивающих (отрицательных) нагрузок. При положительных нагрузках в диапазоне 0–80 нН характер изменения сил трения (при учете деформации) зависит от радиуса кривизны зонда и типа применяемой аппроксимации потенциала взаимодействия. Зависимость сил трения от радиуса кривизны зонда приблизительно прямо пропорциональная. Проводится сопоставление результатов расчета с имеющимися экспериментальными данными.

Появление и развитие новых перспективных физических направлений — нанотрибологии и нанолитографии [1–3], стимулированные достижениями сканирующей зондовой микроскопии, привели к необходимости детализации наноструктурных механизмов трения.

Согласно современным представлениям, сила трения включает деформационную и адгезионную составляющие, причем в теоретическом плане наибольшие трудности связаны с описанием последней. Существуют два основных подхода к этой проблеме, один из которых опирается на идеи макроскопической контактной теории [4–6], а другой — на применение методов молекулярной динамики [7–11]. В первом случае теория базируется на значениях упругих характеристик, известных на макроуровне, и на полуэмпирическом соотношении Боудена и Тейбора для силы трения [4]

$$F = \tau A,$$

где τ — напряжение сдвига, A — площадь реального контакта.

При переходе к атомным масштабам обе эти величины, вообще говоря, теряют смысл, поэтому результаты, получаемые с помощью контактной теории, нужно воспринимать с осторожностью. В данном случае, кроме того, остается в тени и сам физический механизм необратимых потерь энергии, связанных с трением.

Недостатки компьютерного моделирования связаны прежде всего с ограничением количества частиц, участвующих в динамической релаксации, что затрудняет оценку доли энергии, диссипировавшей в тепло, особенно если изначально рассматривать ”теплую” модель системы. В молекулярно-динамических расчетах неизбежно приходится ограничиваться конечным числом ато-

мов нанозонда и поверхности, поэтому в результате проведения динамической релаксации энергия ”застревает” в контактной зоне, тогда как в действительности она должна рассасываться в объемы контактирующих тел через колебательные моды. В итоге при нагружении контакта реакция модельной системы может существенно отличаться от реальной. Есть трудности и в количественном определении вкладов ”внутреннего” и ”внешнего” трения [9–11], связанных с диссипацией энергии в объемы трущихся тел и обусловленных диссипативной компонентой латеральных сил. Наконец, временные и скоростные масштабы компьютерных экспериментов (типичные скорости составляют 1–1000 м/с) значительно отличаются от скоростей сканирования в зондовой микроскопии ($10^{-4} - 10^{-7}$ м/с).

В наших работах [12] была предложена ”квазистатическая” модель адгезионного трения при скольжении нанозонда вдоль атомарно-гладкой поверхности, в которой каждый элементарный акт скольжения (”микрослип”) сопровождается катастрофическим разрывом имеющихся адгезионных связей между атомами острия и поверхности и лавинообразным образованием новых. Остаточная потенциальная энергия атомов на оборванных и вновь возникших связях трансформируется далее в тепло через колебательные моды. Согласно этой модели, для диссипативной статической (не зависящей от скорости) силы адгезионного трения имеем

$$F = \frac{\sum |\Delta w_m|}{\Delta x}, \quad (2)$$

где Δw_m — изменение энергии m -й связи в результате микрослипа, Δx — соответствующее перемещение зонда.

Исходное положение нанозонда соответствует минимуму энергии трибосистемы. Эксперименты, проводимые с фрикционными микроскопами, свидетельствуют о том, что типичное перемещение Δx приблизительно равно постоянной решетки поверхности независимо от размеров зоны контакта. В рамках рассматриваемой модели этот факт имеет простое геометрическое объяснение, поскольку общее число адгезионных связей и энергия взаимодействия зонда с поверхностью количественно отражают периодичность поверхностной атомарной структуры при латеральном перемещении апекса зонда, а равновесное его положение соответствует минимуму энергии трибосистемы и отстоит на период решетки от других близлежащих положений. При этом каждый микрослип требует наличия "энергии активации" для преодоления соответствующего потенциального барьера, накапливаемой в форме энергии упругой деформации системы кантилевер-зонд-поверхность по мере сканирования подвижной части микроскопа вдоль поверхности.

В [12] рассматривалась упрощенная модель контакта без учета деформации контактной зоны, что оправдано лишь при достаточно больших расстояниях апекса зонда от поверхности. В настоящей работе мы учитываем деформацию с помощью геометрической модели, позволяющей найти форму зоны контакта и расположение атомов в ней путем минимизации энергии системы, а затем рассчитываем силу трения по формуле (2). Конкретные численные расчеты выполнены для контакта жесткого алмазного зонда с поверхностью (0001) графита. Выбор этой системы обусловлен простотой (один тип атомов) и возможностью применения достаточно простых аппроксимаций межатомных потенциалов, а также использованием графита в качестве стандартного тест-объекта в нанозондовой микроскопии.

Предполагается, что алмазный зонд имеет форму параболоида вращения с радиусом кривизны R и ориентирован осью симметрии [111] по нормали к поверхности, а поверхность моделируется семейством атомных плоскостей с расстоянием h_0 между ними. При приложении к зонду внешней нормальной силы P поверхность деформируется приблизительно так, как показано на рис. 1, *a*. На рис. 1, *b* приведены направления перемещений атомов отдельной атомной плоскости (первоначальные положения атомов показаны точками). Мы предполагаем, что форма деформированных атомных слоев повторяет осевую симметрию зонда и может быть задана некоторой модельной функцией $z(r)$. В конкретных расчетах использовались функции вида

$$z(r) = \frac{b^4}{2R(r^2 + b^2 a^{2m})}, \quad (3)$$

где R — радиус кривизны зонда, m — номер атомной плоскости (считая в глубину образца), a и b — вариационные параметры.

Уравнение (3) автоматически учитывает тот факт, что радиус кривизны верхней атомной плоскости в точке

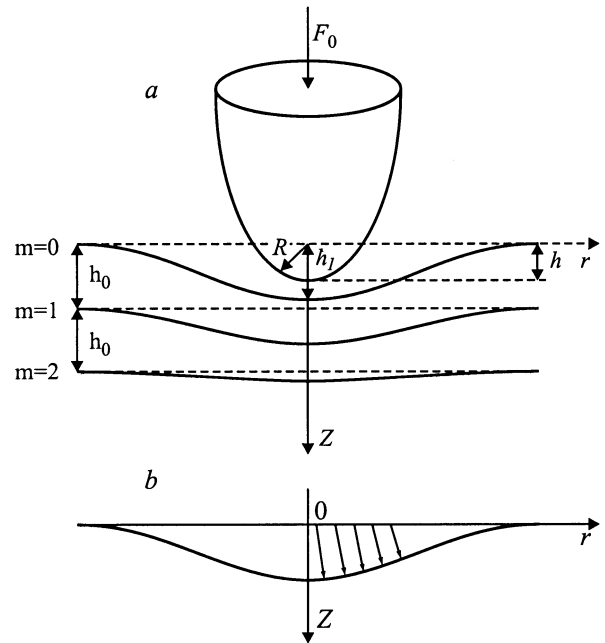


Рис. 1. Схема зоны контакта между острием зондового микроскопа (*a*) и направления перемещений атомов верхней атомной плоскости образца в результате деформации (*b*).

$r = 0$ равен R и по мере перехода в глубину образца при ($a > 1$) происходит "разглаживание" плоскостей. Предположение о радиусе кривизны, однако, не является принципиально важным. С учетом сделанных предположений связь между координатами (x, y) атома на недеформированной плоскости и координатами $(x', y', z'(\sqrt{x'^2 + y'^2}))$ на деформированной дается уравнением (3) с заменой координат на "штрихованные" и формулами

$$r = r' - \frac{2A^2 r'}{(r'^2 + B^2)^3}, \quad r = \sqrt{x'^2 + y'^2},$$

$$r' = \sqrt{x'^2 + y'^2}, \quad x/y = x'/y', \quad (4)$$

где $A = b^4/2R$, $B = b \cdot a^m$.

Энергию контакта представим в виде суммы трех основных вкладов

$$W = W_1 + W_2 + W_3, \quad (5)$$

где W_1 — изменение энергии плоскостей вследствие деформации ковалентных связей, W_2 — изменение энергии взаимодействия плоскостей, W_3 — энергия взаимодействия зонд-поверхность.

Для энергии ковалентной углеродной связи на плоскостях применялась аппроксимация Морзе

$$\varepsilon(d) = -U_0(\exp(-2a(d-d_0)) - 2\exp(-\alpha(d-d_0))), \quad (6)$$

где $d_0 = 0.142 \text{ nm}$ — равновесная длина связи, $U_0 = 3.68 \text{ eV}$, $\alpha = 3.093/d_0$.

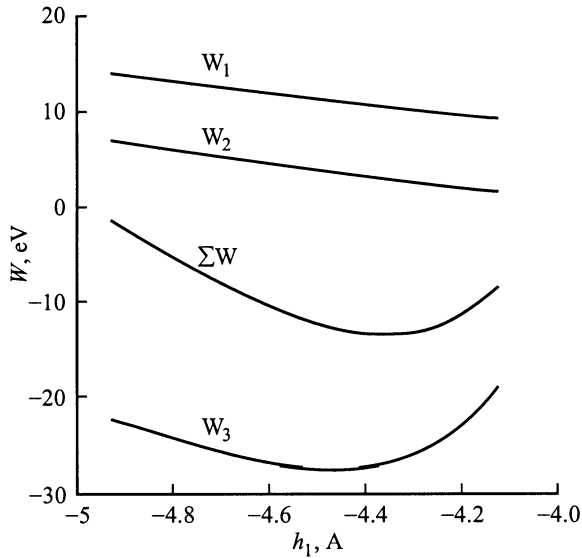


Рис. 2. Отдельные вклады и суммарная энергия контакта алмаз-графит для зонда $R = 15$ нм в зависимости от вертикального смещения верхней плоскости графита, h_1 . Высота зонда относительно несмещенного положения верхней плоскости равна $h = -0.2$ нм.

При этом выборе постоянных энергия малой деформации связи равна $35.2(d - d_0)^2/d_0^2$ eV в согласии с [13]. Взаимодействие зонд–поверхность и взаимодействие атомов углерода различных плоскостей рассчитывались в парном приближении с использованием потенциала C–C, вычисленного по модели электронного газа [12], и с потенциалом Леннарда–Джонса вида

$$U(r) = -C_6(r^{-6} - (r_0^6/2)r^{-12}), \quad (7)$$

где $C_6 = 3.745 \cdot 10^{-18} \text{ J} \cdot \text{Å}^6$ — константа дисперсионного взаимодействия атомов углерода в невалентном состоянии, $r_0 = 3.81$ Å.

Применялся также комбинированный потенциал, совпадающий с потенциалом электронного газа при $r < 0.25$ нм, плавно переходящий в потенциал (7) при $r > 0.25$ нм. В последнем случае более корректно учитывается как область короткодействующего отталкивания, так и область далекодействующего притяжения. Соответствующие приближения для потенциалов будем нумеровать индексами 1, 2, 3.

Равновесные характеристики контакта рассчитывались путем минимизации энергии W по параметрам a , b при фиксированных значениях R и h при каждом конкретном латеральном положении апекса зонда относительно поверхности (рис. 1, а). Величина h считалась положительной, если зонд был смещен вверх относительно верхней недеформированной плоскости графита, и отрицательной в обратном случае. Сила нагрузки контакта P и нормальная контактная жесткость находились дифференцированием энергии (минимизированной по параметрам a , b) по h , а сила трения вычислялась по формуле (2) при заданных значениях величин a , b , h .

На рис. 2 показаны типичные зависимости отдельных вкладов и суммарной энергии контакта от величины вертикального смещения h_1 верхней атомной плоскости в точке $r = 0$ (рис. 1, а). В этом случае высота апекса зонда ($R = 15$ нм) над верхней недеформированной плоскостью графита равнялась -0.2 нм. Величина параметра b связана с h_1 соотношением $b = \sqrt{2R|h_1|}$. Видно, что зависимость W_3 от h_1 качественно повторяет r — зависимость парного потенциала: наличие минимума, резкое возрастание при $h_1 \rightarrow 0$ и более плавное с нулевой асимптотикой при $h_1 \rightarrow -\infty$. Сумма энергий $W_1 + W_2$, напротив, изменяется монотонно, поскольку деформация атомных слоев и их избыточное взаимодействие увеличиваются с ростом b . В итоге суммарная энергия W всегда имеет четко выраженный минимум, если принять во внимание ограничение $|h| \leq |h_1|$, при котором зонд физически не “протыкает” смещенную вниз ближайшую атомную плоскость.

Параметр a характеризует степень релаксации смещений атомных слоев с глубиной. Минимум по a является более пологим и слабо зависит от величины радиуса зонда и расстояния h . В наших расчетах было получено значение $a = 1.054$. При этом амплитуда вертикальных смещений плоскостей уменьшалась в 10 раз при $m = 22$.

На рис. 3 приведены зависимости $b(h)$, отвечающие минимуму энергии контакта, для различных радиусов нанозонда, а на рис. 4 — зависимости нормальной силы P от h . Область положительных значений h соответствует отрыву зонда от поверхности при его подъеме.

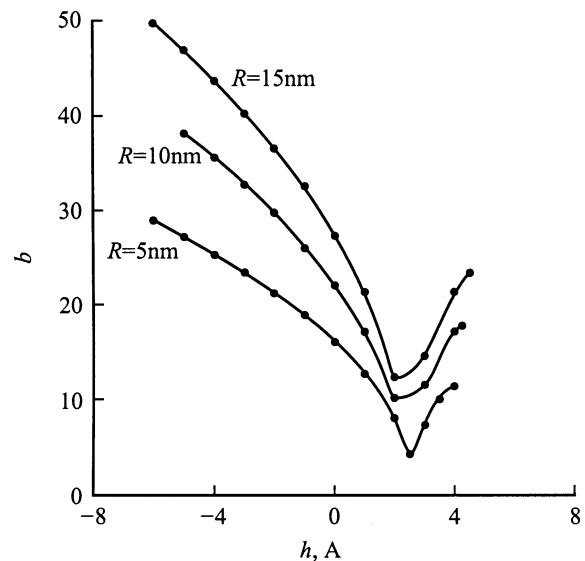


Рис. 3. Зависимость параметра b от высоты h апекса зонда над верхней несмещенной плоскостью графита для различных радиусов кривизны зонда, соответствующая минимуму энергии системы зонд–поверхность. Расчетные кривые соответствуют потенциалу 3. При положительных значениях h поверхность графита, определяемая уравнением (3), “вспучивается” вверх, стремясь образовать с зондом контактную перемычку.

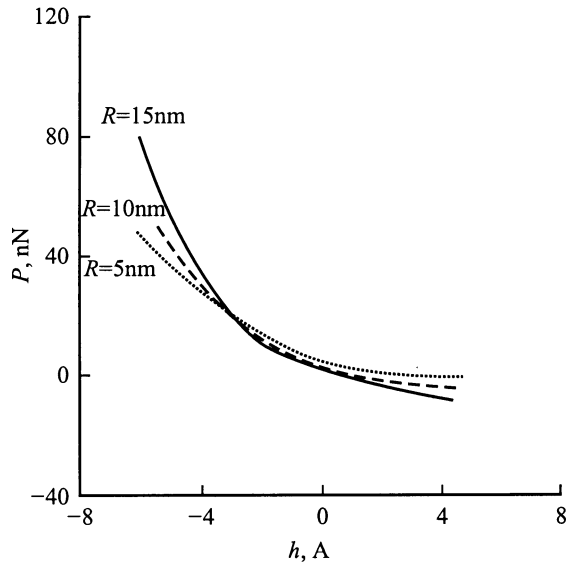


Рис. 4. Зависимость нормальной силы на контакте от высоты апекса зонда различного радиуса. Расчеты соответствуют потенциалу 3.

На рис. 5, *a, b* показаны рассчитанные зависимости силы трения от нормальной силы для потенциалов 1, 2 (соответствующих приближениям электронного газа и Леннарда–Джонса) без учета и с учетом деформации зоны контакта. В этих случаях радиус кривизны зонда равнялся 5 nm. Немонотонный характер расчетных точек в области малых нагрузочных сил обусловлен дискретностью атомной структуры. В этом случае зависимость $W(a, b)$ обнаруживает множество достаточно близких минимумов, затрудняющих определение наиболее вероятной структуры; и небольшое смещение зонда в вертикальном направлении может приводить к немонотонному изменению энергии взаимодействия. В целом, как мы видим, приближение 1 приводит к более высоким значениям сил трения, чем приближение 2, а учет деформации контактной зоны вызывает возрастание сил трения. Для потенциала 1 это увеличение составляет несколько раз в области положительных нагрузок, а для потенциала 2 — от 0 до 50% в диапазоне нагрузок от 0 до 60 nN. При отрицательных нагрузках потенциал 2 с учетом деформации дает несколько меньшие (по модулю) значения сил отрыва зонда, чем без ее учета.

На рис. 6, *a, b* приведены зависимости сил трения от силы нагрузки для нанозондов с радиусами 5, 10 и 15 nm с использованием комбинированного потенциала 3. Сравнение соответствующих кривых на рис. 6, *a* и 6, *b* показывает, что в области нагрузок 0–80 nN учет деформации дает несколько меньшие значения сил трения, чем в ее отсутствие, для зонда с радиусом кривизны 5 nm. Для зондов большего радиуса, напротив, силы трения больше при учете деформации. Результаты расчетов приблизительно свидетельствуют также о пропорциональности величин сил трения радиусу кривизны зонда.

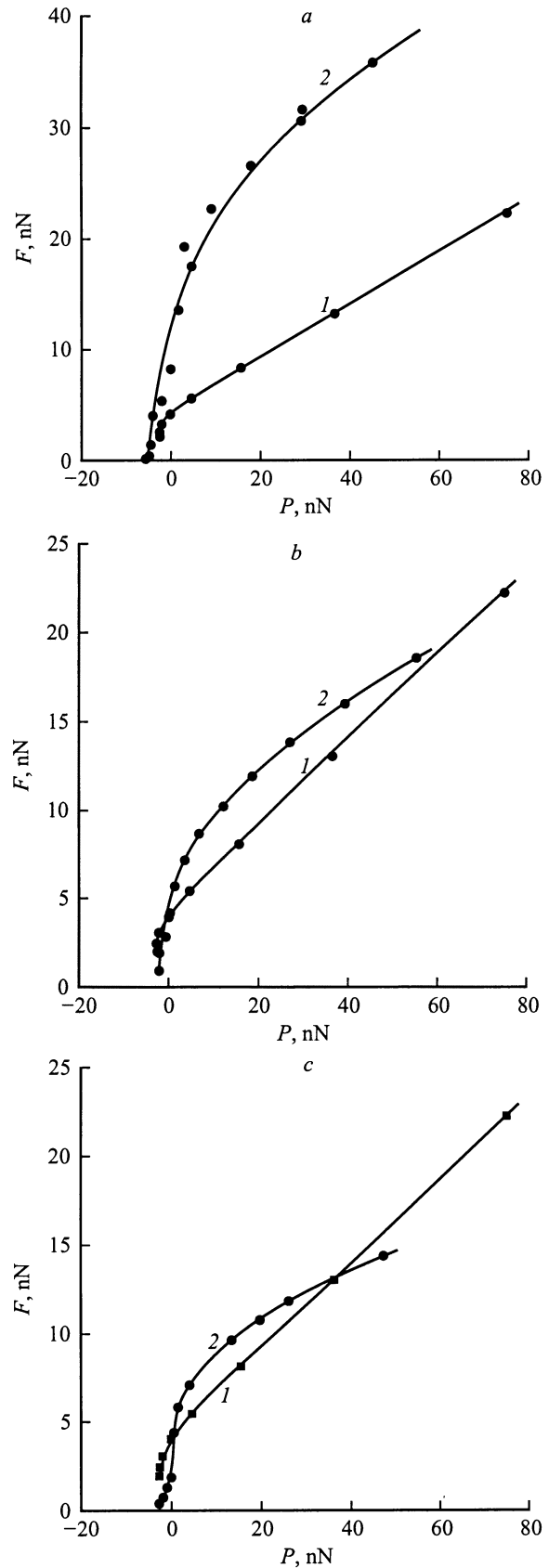


Рис. 5. Зависимости сил трения от силы нагрузки для потенциалов 1(*a*), 2 (*b*) и 3 (*c*). Радиус кривизны зонда 5 nm. Кривые 1 построены без учета деформации контакта, кривые 2 — с учетом.

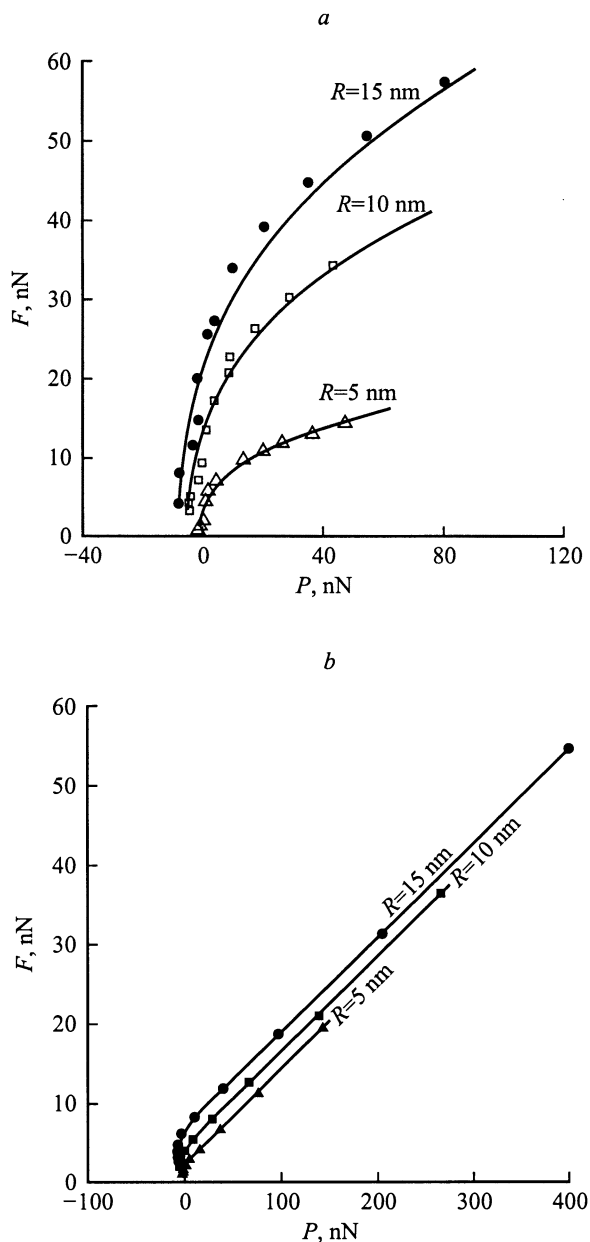


Рис. 6. Зависимости сил трения от силы нагрузки для зондов различного радиуса. Расчеты отвечают потенциалу 3: *a* — без учета деформации контактной зоны, *b* — с учетом.

К сожалению, из-за отсутствия данных мы пока не имеем возможности детального сравнения наших результатов с экспериментальными. Из числа известных работ по измерению "сухого" адгезионного трения в вакууме с помощью сканирующего фрикционного микроскопа можно отметить работы [14–16], в которых приведены зависимости сил трения от сил нагрузки для контактов Si (зонд)–NbSe₂ (радиусы кривизны зондов 12 и 48 nm); алмаз (зонд)–карбид вольфрама (радиус кривизны зонда 110 nm) и Pt (зонд)–слюда (радиус кривизны зонда 140 nm).

Анализируя приведенные в этих работах зависимости, можно, как и в наших расчетах, отметить нерегулярный характер экспериментальных точек при малых нагрузочных силах, причем более заметно эти нерегулярности выражены при малом радиусе зонда, когда дискретность атомной структуры проявляется сильнее. Заметим, что в отсутствие учета деформации контактной зоны теоретические зависимости являются гладкими (ср. *a* и *b* на рис. 6). Результаты нашего расчета при $R = 10$ nm и данные для Si–NbSe₂ [15] при $R = 12$ nm качественно близки, в количественном же отношении значения сил трения, вычисленных нами, выше в 2–3 раза. Различие может быть обусловлено разным типом взаимодействующих атомов и соответственно силовых характеристик трибосистем, погрешностью формулы (2) и (или) экспериментальных данных.

Вывод о пропорциональности сил трения радиусу кривизны зонда подтверждается сравнением экспериментальных данных [14,15] между собой, поскольку для контакта Pt–слюда ($R = 140$ nm) [14] силы трения на порядок выше, чем в случае контакта Si–NbSe₂ ($R = 12$ nm). В эксперименте [16], однако, получены аномально низкие значения сил трения при большом радиусе зонда (110 nm), а также слишком заниженная для такого жесткого контакта величина напряжения сдвига (238 МПа), рассчитанная в контактном приближении Дерягина–Муллера–Топорова [6]. Поскольку форма зонда не контролировалась, то результаты можно объяснить тем, что в действительности зонд имел выступ значительно меньшего размера (при тех же значениях сил трения). Вероятно, радиус кривизны выступающей части был около 10 nm.

Список литературы

- [1] *Mate C.M., McClelland G.M., Erlandsson R., Chiang S.* // Phys. Rev. Lett. 1987. Vol. 59. P. 1942.
- [2] *Fundamentals of Friction: Macroscopic and Microscopic processes* / Ed. G.L. Singer, H.M. Pollock. Dordrecht. Cluwer, 1991.
- [3] *Bhushan B.* // Tribol. Int. 1995. Vol. 28. P. 85.
- [4] *Bowden F.P., Tabor D.F.* The Friction and Lubrication of Solids. Oxford: Clarendon, 1964.
- [5] *Johnson K.L., Kendall K., Roberts A.D.* // Proc. Roy. Soc. London. Ser. A. 1971. Vol. 324. P. 301.
- [6] *Derjaguin B.V., Muller V.M., Toporov Y.P.* // J. Coll. Int. Sci. 1975. Vol. 53. P. 314.
- [7] *Maugis D.J.* // J. Coll. Int. Sci. 1992. Vol. 150. P. 243.
- [8] *Landman U., Luedtke M.D., Ribarsky M.W.* // J. Vac. Sci. Technol. 1989. Vol. 7. N 4. P. 2829.
- [9] *Landman U., Luedtke M.D.* // Fundamentals of Friction: Macroscopic and Microscopic Processes / Ed. G.L. Singer, H.M. Pollock. Dordrecht: Cluwer, 1991. P. 463.
- [10] *Покропивный А.В., Покропивный В.В., Скороход В.В.* // Письма в ЖТФ. 1996. Т. 22. Вып. 2. С. 1. Покропивный В.В., Скороход В.В., Покропивный А.В. // Трение и износ. 1996. Т. 17. № 5. С. 579.

- [11] *Buldum A., Ciraci S., Batra I.P.* // Phys. Rev. 1998. Vol. B57. N 4. P. 2468.
- [12] *Dedkov G.V.* // NORDTRIB'98. Proc. 8th Intern. Conf. on Tribology. Aarhus (Denmark): DTI Tribology Centre, 1998. Vol. 1. P. 47. Письма в ЖТФ. 1998. Т. 24. Вып. 20. С. 766. Materials Lett. 1999. Vol. 38. P. 360. Wear. 1999. Vol. 232. N 2. P. 145.
- [13] *Харрисон У.* Электронная структура и свойства твердых тел. М., Мир, 1983.
- [14] *Carpick R.W., Agrait N., Ogletree D.F., Salmeron M.* // Langmuir. 1996. Vol. 12. P. 3334.
- [15] *Lanz M.A., O'Shea S.J., Welland M.E., Johnson K.L.* // Phys. Rev. 1997. Vol. B55. P. 10776.
- [16] *Enashescu M., van den Oetelaar R.J.A., Carpick R.W.* et al. // Phys. Rev. Lett. 1998. Vol. 81. N 9. P. 1877.