

## РАСЧЕТ ОСЦИЛЛИРУЮЩЕГО ДВИЖЕНИЯ МИКРОЗОНДА АСМ В «TAPPING» И «SHEAR FORCE» РЕЖИМАХ

С. О. Пантелей

Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

### Введение

В статье представлены результаты численного расчета некоторых параметров и моделирования колебательного движения микроконсоли в полуконтактном режиме работы АСМ, а также численного и аналитического расчета влияния силы трения на амплитуду колебаний “shear force” микроконсоли в режиме трибометра.

### Движение микроконсоли в «tapping» режиме

При сканировании поверхности между острием зонда и поверхностью образца возникают взаимодействия, которые оказывают значительное влияние на колебания консоли зонда АСМ. Взаимодействия имеют различную природу: это могут быть взаимодействия дальнего и ближнего действия, капиллярные, адгезионные, электростатические силы. Все взаимодействия объединяет характерная черта – зависимость от расстояния между острием и поверхностью [1].

При решении задачи описания колебаний консоли в полуконтактном режиме были рассмотрены притягивающие взаимодействия ван-дер-ваальсова типа и отталкивающие взаимодействия ближнего действия. Они универсальны, что делает их постоянно присутствующими, и, когда нет дополнительных внешних полей, являются доминирующими.

За основу для расчета движения консоли берется дифференциальное уравнение второго порядка

$$m \frac{\partial^2 z}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial z}{\partial t} + kz = a_{bm} \sin(\omega t) + F(z). \quad (1)$$

Здесь  $m$  – масса консоли (острие считается невесомым),  $\gamma$  – коэффициент диссипации,  $k$  – изгибная жесткость консоли,  $a_{bm}$  – амплитуда биморфного пьезоэлемента, создающего вынужденные колебания консоли,  $\omega$  – частота колебаний биморфного пьезоэлемента,  $F(z)$  – силы взаимодействия острия, закрепленного на свободном конце консоли, с поверхностью острия.

Учитывая, что  $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$  и  $Q = \frac{m\omega_0}{\gamma}$ , удобно привести уравнение (1) к виду:

$$\frac{\partial^2 z}{\partial t^2} + \frac{\omega_0}{Q} \frac{\partial z}{\partial t} + \omega_0^2 z = \omega_0^2 a_{bm} \sin(\omega t) + \frac{\omega_0^2}{Q} F(z), \quad (2)$$

где  $Q$  – добротность консоли.

Для расчета притягивающей силы  $F_{att}$  был использован потенциал Леннард–Джонса:

$$F_{att}(z) = -\frac{\partial}{\partial z} W_{LJ},$$

где

$$W_{LJ}(z) = \left[ \frac{AR_{tip}}{6\sigma} \right] \left[ \frac{1}{210} \left( \frac{\sigma}{z} \right)^{12} - \frac{\sigma}{z} \right].$$

Сила отталкивания

$$F_{ret} = k_s R^{1/2} (-d^{3/2})$$

рассчитана по формуле Герца для контакта сферы и плоскости (например, [3]).

Здесь  $A$  – постоянная Гамакера,  $\sigma$  – межатомное расстояние,  $R$  – радиус закругления острия,  $d$  – глубина внедрения острия в поверхность образца.

$$d = z - z_{F_0},$$

$$k_s = \frac{4}{3\pi} \frac{1}{\kappa_{eff}} = \frac{4}{3\pi} \frac{1}{\kappa_1 + \kappa_2},$$

$$\kappa_i = \frac{1 - \nu_i^2}{\pi E_i}, \quad i = \overline{1, 2},$$

$\nu_i$  – коэффициент Пуассона и  $E_i$  – модуль упругости острия образца,  $z_{F_0}$  – расстояние, при котором силы притягивания и отталкивания уравновешиваются.

Тогда сила взаимодействия острия и образца во время сканирования запишется следующим образом [2]:

$$F(z) = \begin{cases} F_{att}(z), & z > z_{F_0} \\ F_{ret}(z), & z \leq z_{F_0} \end{cases}. \quad (3)$$

При подстановке силы (3) в уравнение движения консоли (2) получим нелинейное дифференциальное уравнение, которое не имеет аналитического решения в общем случае. При использовании численных методов (пакет *Mathematica*) получены графические зависимости, демонстрирующие вид колебаний острия консоли: рис. 1,а – неустановившийся режим колебаний (консоль раскачивается), рис. 1,б – установившийся режим колебаний (амплитуда постоянна). Использовались следующие параметры осциллирующей консоли:  $k=20$ Н/м,  $Q=100$ ,  $a_{bm}=1$ нм,  $z_0=75$ нм (начальное положение острия консоли),  $f=f_0=100$ кГц. Штриховой линией для сравнения показаны гармонические колебания консоли вдали от поверхности ( $F=0$ ). Как видно из графика (рис. 1,б), под влиянием сил взаимодействия острия и поверхности амплитуда колебаний уменьшается.

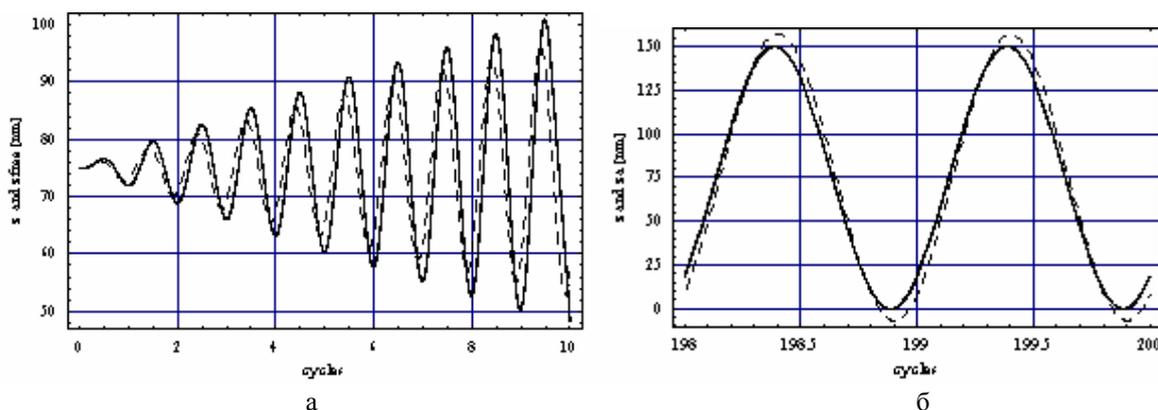


Рис. 1. Колебания микроконсоли в неустановившемся режиме (а) и в установившемся режиме (б)

Рассчитаны также глубина внедрения острия в поверхность и сила отталкивания при этом для некоторых материалов (сталь, кремний, твердый и мягкий полимеры). Материал острия – кремний (рис. 2).

Результаты следующие:

максимальная деформация мягкого полимера при внедрении в него кремниевого острия  $d_{\max} = 3,1 \text{ нм}$ , максимальная сила отталкивания при этом  $F_{\max} = 10 \text{ нН}$ ;

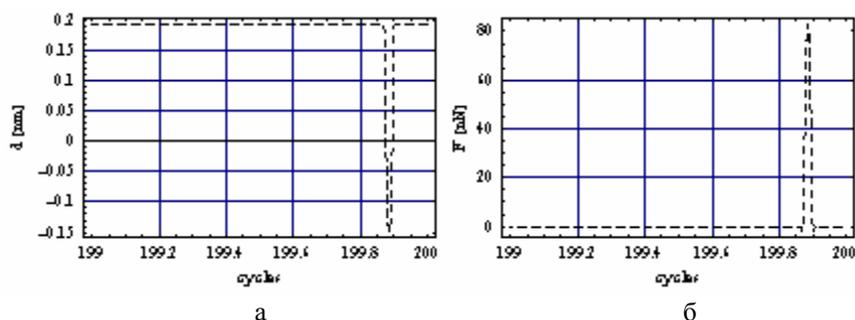


Рис. 2. Внедрение острия в поверхность кремния (а) и сила отталкивания при этом (б).

максимальная деформация твердого полимера при внедрении в него кремниевого острия  $d_{\max} = 1,25 \text{ нм}$ , максимальная сила отталкивания при этом  $F_{\max} = 30 \text{ нН}$ ;

максимальная деформация кремния при внедрении в него кремниевого острия  $d_{\max} = 0,3 \text{ нм}$ , максимальная сила отталкивания при этом  $F_{\max} = 140 \text{ нН}$ ;

максимальная деформация стали при внедрении в него кремниевого острия  $d_{\max} = 0,34 \text{ нм}$ , максимальная сила отталкивания при этом  $F_{\max} = 170 \text{ нН}$ .

Таким образом, сила отталкивания пропорциональна модулю упругости материала; деформация – обратно пропорциональна. Заметим, что в наших результатах деформация стали больше деформации кремния, хотя сталь тверже. Данный результат объясняется тем, что при обстукивании стали острием кремниевое острие сминается.

### Движение микроконсоли в «shear force» режиме

С помощью той же математической модели (1) при использовании той же расчетной схемы в пакете *Mathematica* можно получить графические зависимости для амплитуды и фазы колебаний консоли, расположенной вертикально. Эта задача актуальна в связи с использованием приборов типа “shear force” микротрибомер. Сила  $F(x)$  в данном случае является силой трения:

$$F = F \operatorname{sgn} x(t).$$

Исследуемая физическая модель показана на рис. 3. Вертикально расположенная балка консольно закреплена верхним концом на биморфном пьезоэлементе, генерирующем колебания по закону  $a_{bm} \sin(\omega t)$ . Нижний конец консоли приводится в контакт с горизонтальной поверхностью и испытывает действие силы трения, модуль которой  $F$ . Важно определить характер влияния силы трения на движение гармонического осциллятора.

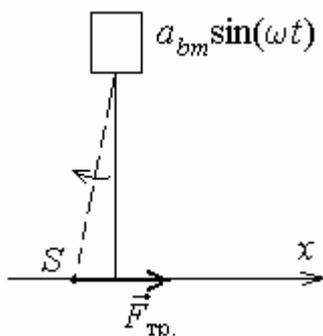


Рис. 3. Рассматриваемая физическая модель

В режиме установившихся колебаний система биморф-консоль проявляет автоколебательные свойства и уравнение движения представляет собой дифференциальное уравнение квазилинейной автоколебательной системы с одной степенью свободы, на которую действует гармоническая возмущающая сила. При этом частота силы близка к собственной частоте линеаризованной системы, поскольку обычно возбуждение консоли происходит при резонансе либо при частоте колебаний, близкой к резонансной. Тогда уравнение движения запишется в виде

$$\frac{\partial^2 x}{\partial t^2} + \frac{\omega_0}{Q} \frac{\partial x}{\partial t} + \omega_0^2 x = \omega_0^2 a_{bm} \sin(\omega t) + \frac{\omega_0^2}{Q} F \operatorname{sgn}(x). \quad (3)$$

Отметим, что здесь имеет значение то, что декремент затухания  $\gamma$  складывается из двух составляющих:  $\gamma = \gamma_c + \gamma_a$ , где  $\gamma_c$  – декремент затухания собственно консоли,  $\gamma_a$  – декремент затухания при контакте с поверхностью, зависящий от вязких свойств поверхности образца. На рис. 4 представлены графики колебаний микроконсоли в установившемся и неустойчивом режимах соответственно. Штриховой линией показаны колебания биморфа, увеличенные в  $Q$  раз, сплош-

ной линией – колебания консоли вдали от поверхности (большая амплитуда) и колебания под действием силы трения (меньшая амплитуда).

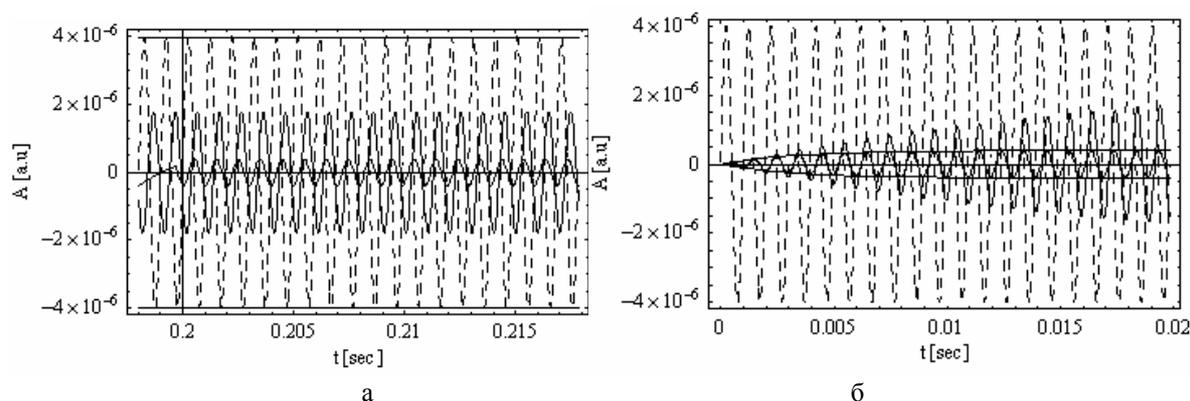


Рис. 4. Колебания микроконсоли в установившемся (а) и неуставившемся (б) режимах

Получены также численные значения для амплитуды и фазы колебаний, по которым построены графики для амплитуды и фазы в зависимости от добротности системы и силы трения вблизи резонанса.

Данная задача решена также аналитически. По методу Ван дер Поля (см., например, [1, стр. 216-223]) получено выражение для амплитуды колебаний. Уравнение для определения амплитуды:

$$\left( -\frac{A\pi\omega\omega_0}{Q} - \frac{4F\omega_0^2}{k} \right)^2 + A^2\pi^2\omega^4 \left( -1 + \frac{\omega_0^2}{\omega^2} \right) = a_{bm}^2\pi^2\omega_0^4.$$

Решая данное уравнение относительно амплитуды колебаний консоли, получили

$$A = \frac{Q\omega_0^2}{k\pi(\omega^2\omega_0^2 + Q^2(\omega^2 - \omega_0^2)^2)} \left( \pm \sqrt{(ka_{bm}\pi\omega\omega_0)^2 + Q^2(a_{bm}^2\pi^2k^2 - 16F^2)(\omega^2 - \omega_0^2)^2} - 4F\omega\omega_0 \right). \quad (4)$$

Теперь выразим из формулы (4) силу трения. После преобразований получим:

$$F = \frac{\pi k}{4Q\omega_0^2} \left( -A\omega\omega_0 + Q\sqrt{a_{bm}^2\omega_0^4 - A^2(\omega^2 - \omega_0^2)^2} \right). \quad (5)$$

Чаще всего интересен случай резонанса, когда  $\omega = \omega_0$ . При этом

$$A_0 = a_{bm}Q, \quad (6)$$

где  $A_0$  – амплитуда гармонических колебаний (при  $F=0$ ). С учетом (6) выражение для силы трения (5) при резонансе примет вид

$$F = \frac{\pi k}{4Q}(A_0 - A).$$

На рис. 5 представлены графики амплитуды колебаний в зависимости от добротности и силы трения при тех же параметрах. Численные значения амплитуды мало отличаются от значений, вычисленных аналитически по формуле (4) (на 0,21%).

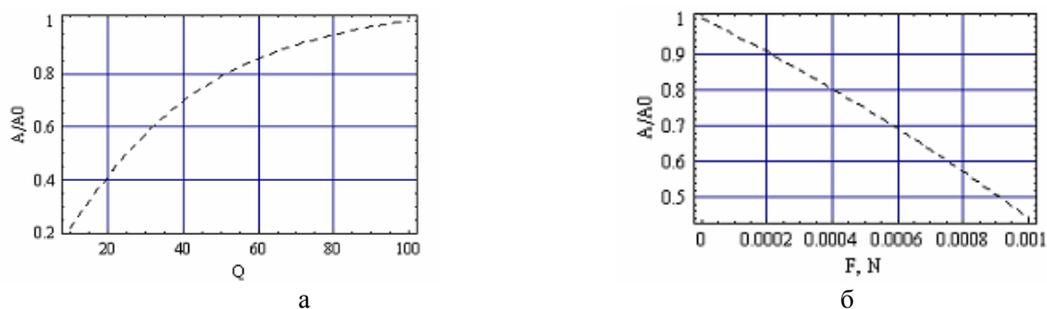


Рис. 5. Зависимости амплитуды колебаний от добротности (а) и силы трения (б)

### Обсуждение результатов

Таким образом, рассчитаны глубина внедрения кремниевого острья в поверхность образца (мягкий полимер, твердый полимер, сталь, кремний) и сила отталкивания между острием и образцом для «tapping» режима работы АСМ. Получены численные значения для амплитуды колебаний микроконсоли консоли в режиме «shear force» и аналитические выражения для амплитуды и силы трения.

Работа частично финансировалась Белорусским республиканским фондом фундаментальных исследований (проект №Ф03МС-056).

### Литература

1. Garcia R., Perez R. Dynamic atomic force microscopy methods // Surface Science Reports. 2002. № 47. P. 197-301.
2. Sarid D. Exploring scanning probe microscopy with Mathematica. N.-Y.: Jonh Wilei & sons, Inc., 1997.
3. Свириденко А.И., Чижик С.А., Петроковец М.И. Механика дискретного фрикционного контакта. Мн.: Навука і тэхніка, 1990.