

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЗОНДА АТОМНО-СИЛОВОГО МИКРОСКОПА С УПРУГИМ ОБРАЗЦОМ

Ю.Ю. Маховская

Институт проблем механики им. А.Ю.Ишлинского РАН, Москва, Россия.
E-mail: makhovskaya@mail.ru

Моделирование взаимодействия зонда атомно-силового микроскопа (АСМ) с поверхностью образца существенно осложняется наличием сил адгезии, которые на этом масштабном уровне соизмеримы с упругими напряжениями в контакте. Для описания адгезии упругих тел обычно используются классические модели Дерягина-Муллера-Топорова (ДМТ) [1] и Джонсона-Кендалла-Робертса (ДЖКР) [2]. Преимуществом этих моделей являются простые аналитические соотношения, однако, они не учитывают некоторые тонкие эффекты, связанные с зависимостью силы адгезионного взаимодействия от величины зазора между деформированными поверхностями. В данной работе модель взаимодействия между зондом АСМ и поверхностью образца (рис. 1) строится на основе решения контактной задачи с использованием аппроксимации потенциала адгезионного взаимодействия кусочно-постоянной функцией [3,4].

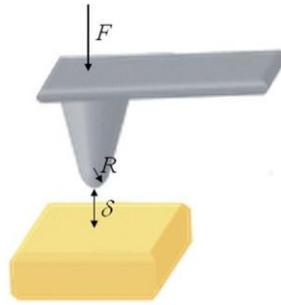


Рисунок 1. Схема взаимодействия зонда АСМ с образцом.

Модель основана на решении контактной задачи для жесткого осесимметричного зонда заданной формы $f(r)$, взаимодействующего с упругим полупространством при наличии сил адгезионного притяжения. Условия на границе $z = 0$ упругого полупространства имеют вид

$$\begin{aligned} u(r) &= -f(r) - \delta, & 0 < r < a \\ p(r) &= -p_a(h), & a \leq r \leq b \end{aligned} \quad (1)$$

где $u(r)$ — нормальное смещение поверхности полупространства с учетом его деформирования, $p(r)$ — давление на поверхности образца, δ — расстояние между вершиной зонда и невозмущенной поверхностью образца. Зависимость нормального смещения $u(r)$ от давления $p(r)$ определяется известным выражением для осесимметричного нагружения упругого полупространства [2]

$$u(r) = \frac{4(1-\nu^2)}{\pi E} \int_0^b p(r') \mathbf{K} \left(\frac{2\sqrt{rr'}}{r+r'} \right) \frac{r' dr'}{r+r'}, \quad 0 \leq r \leq b \quad (2)$$

где E и ν — упругие модули полупространства, $\mathbf{K}(x)$ — полный эллиптический интеграл первого рода. Кроме того, выполняется условие равновесия

$$F = 2\pi \int_0^b r p(r) dr \quad (3)$$

где F — нормальная внешняя сила, действующая на зонд.

Зависимость адгезионного давления $p_a(h)$ от величины зазора между поверхностями зонда и полупространства описывается в форме потенциала Леннарда-Джонса, соответствующего случаю межмолекулярного Ван-дер-Ваальсовского взаимодействия поверхностей [1]

$$p_a(h) = -\frac{8w_a}{3z_0} \left(\left(\frac{z_0}{h} \right)^3 - \left(\frac{z_0}{h} \right)^9 \right) \quad (4)$$

где z_0 — равновесное расстояние между поверхностями, w_a — удельная работа адгезии.

Решение задачи (1)-(4) строится на основе представления зависимости силы адгезионного притяжения поверхностей от зазора между ними (4) кусочно-постоянной функцией. Получены аналитиче-

ские выражения для величин внешней силы и расстояния между телами. Построенное решение использовано для расчета зависимости силы, действующей на зонд АСМ, от расстояния между кончиком зонда и образцом.

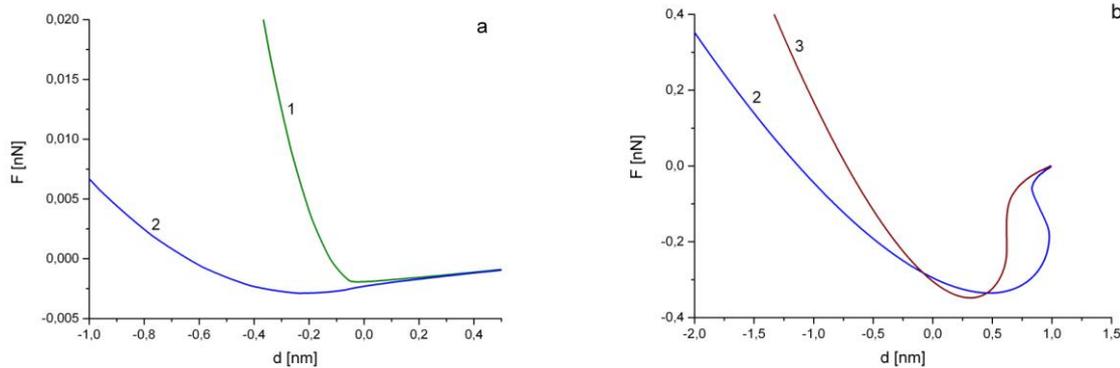


Рисунок 2. Зависимости силы, действующей на зонд, от расстояния между зондом и образцом.

На рис. 2 представлены зависимости силы F от расстояния δ для зонда конической формы с углом раствора 40° (а) и параболической формы с радиусом закругления вершины 10 нм (б). Параметры функции адгезионного взаимодействия (4) взяты следующими: удельная работа адгезии $w_a = 0.008$ Дж/м², равновесное расстояние $z_0 = 0.5$ нм. Приведенный модуль упругости образца $E^* = E / (1 - \nu^2)$ равен 1 МПа (кривая 1), 100 МПа (кривые 2) и 50 ГПа (кривая 3).

Результаты, представленные на рис. 2, позволяют заключить, что форма зонда оказывает существенное влияние на вид кривых подвода-отвода и, следовательно, должна аккуратно учитываться при моделировании взаимодействия зонда с образцом. Кроме того, результаты показывают, что сила отрыва (минимальная величина F на графиках, представленных на рис. 2) не является независимой от упругих свойств образца, как это предполагается в классических моделях ДКР и ДМТ.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 18-19-00574.

Литература

1. Дерягин Б.В., Чураев Н.В., Муллер В.М. Поверхностные силы. М.: Наука, 1985. 398 с.
2. Джонсон К. Механика контактного взаимодействия. М.: Мир, 1989. 509 с.
3. Горячева И.Г., Маховская Ю.Ю. Об одном подходе к решению задач о взаимодействии упругих тел при наличии адгезии // Докл. АН. 2004. Т. 398. № 3. С. 323-327.
4. Маховская Ю.Ю. Моделирование взаимодействия индентора с упругим полупространством при наличии адгезионного притяжения произвольного вида // Трение и износ. 2016. Т. 37. №4. С. 393-400.

MODELING OF INTERACTION BETWEEN AN ATOMIC FORCE MICROSCOPE PROBE AND AN ELASTIC SAMPLE

Yu. Yu. Makhovskaya

Ishlinsky Institute for Problems in Mechanics RAS, Moscow, Russia.
E-mail: makhovskaya@mail.ru

Modeling of the interaction between a deformable surface of a sample and a probe of the atomic force microscope (AFM) is a complicated problem because of the adhesion forces whose magnitude is in this case comparable with the magnitude of the elastic stresses at the interface. A model is suggested based on the solution of an axisymmetric contact problem for an indenter of specified shape (spherical, conical, or spherical-conical) and an elastic half-space in the presence of the adhesive stress whose dependence on the gap between the surfaces is described by the Lennard-Jones potential of intermolecular interaction. The solution of the contact problem is constructed by using a piecewise constant approximation of the adhesive potential. Analytic relations for the normal force and distance between the interacting surfaces are obtained. The solution constructed is used to analyze the influence of the AFM probe shape, elastic and adhesive properties of a sample on the force-distance diagrams.