

02;05;11;12

©1995

О МОДЕЛИРОВАНИИ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ ОСТРИЯ АТОМНО-СИЛОВОГО МИКРОСКОПА ПРИ СКАНИРОВАНИИ В РЕЖИМЕ СИЛ ОТТАЛКИВАНИЯ

*Е.В.Благов, Г.Л.Климчицкая,
А.А.Лобашев, В.М.Мостепаненко*

1. Атомно-силовая микроскопия (АСМ) является одним из наиболее прецизионных методов анализа структуры поверхностей различной природы (см., например, [1-4]). Наибольшее разрешение порядка единиц ангстрем достигается при работе АСМ в режиме сил отталкивания. При этом сканирование острия АСМ над исследуемой поверхностью осуществляется на столь малой высоте, что взаимодействие определяется в основном обменным отталкиванием между ближайшими атомами острия и образца, а ван-дер-ваальсово притяжение составляет менее 10% полной силы [5,6]. Достигаемое при этом разрешение позволяет, в принципе, исследовать точечные дефекты на поверхности твердых тел [7,8].

В результате сканирования острия АСМ над поверхностью образца получают поверхности постоянной силы, для интерпретации которых необходимо проведение соответствующих расчетов. Однако форма рассчитанной поверхности может зависеть от используемой модели острия, причем эта зависимость более существенна именно при работе в режиме сил отталкивания. Действительно, в режиме сил притяжения, когда расстояния от острия до поверхности велики по сравнению с межатомными, существенны только усредненные атомные характеристики. При этом вполне достаточно моделировать острие идеальным параболоидом вращения (см., например, [2-4]). В режиме же сил отталкивания необходимо рассматривать острие как конфигурацию из отдельных атомов.

До настоящего времени в литературе (см., например, [7,9]) использовались только простейшие модели острия. В них предполагалось, что атомы острия расположены внутри параболоида вращения, основной вклад во взаимодействие острия с поверхностью вносит один атом на кончике острия (нулевой слой), а следующий, первый слой, перпендикулярен оси острия и удален от нулевого на расстояние,

равное параметру решетки. Такие модели позволяют достаточно хорошо описать поверхность постоянной силы при сканировании острия непосредственно над данным атомом и даже учесть его смещение вдоль оси сканирования.

Как показано в данной работе, упомянутая простейшая модель оказывается, однако, недостаточной для описания сканирования острия АСМ над цепочкой последовательно расположенных атомов и дефектов. Из приведенных ниже расчетов следует, что при сканировании над межатомными промежутками острие, нулевой слой которого состоит только из одного атома, проваливается ниже исследуемой поверхности. Учет взаимодействия с атомами первого слоя (удаленного от нулевого на расстояние, равное параметру решетки) не меняет этого результата, противоречащего экспериментальным данным. Таким образом, необходимо рассматривать более сложные модели кончика острия, которые и предложены в настоящей работе.

2. Сформулируем основные допущения, используемые ниже при проведении расчетов. Как известно, при расстояниях, приблизительно равных параметру решетки a (ниже выбирается $a = 3\text{Å}$), силы притяжения и отталкивания взаимно уравновешиваются. Работа АСМ в режиме сил отталкивания имеет место, когда кончик острия удален от поверхности на расстояние $d \approx a/2$. Это расстояние превышает суммарный радиус атомов при описании их в режиме модели твердых сфер [10,11]. Таким образом, взаимодействие между атомами, находящимися на расстояниях $r \sim d$, может быть описано потенциалом сил отталкивания

$$V(r) = \frac{\alpha}{r^{12}} \quad (1)$$

с соответствующей константой α .

Вертикальная (вдоль оси z) составляющая силы, действующей на атом острия АСМ с координатами (x_t, y_t, z_t) со стороны атома поверхности с координатами (x_s, y_s, z_s) , имеет вид

$$F_z = -\frac{\partial}{\partial z} V(r) = \frac{12\alpha(z_t - z_s)}{[(x_t - x_s)^2 + (y_t - y_s)^2 + (z_t - z_s)^2]^{7/2}}. \quad (2)$$

Для получения суммарной вертикальной составляющей силы F_z^{tot} , действующей на острие АСМ со стороны поверхности, необходимо провести суммирование величин (2) по близлежащим атомам острия и поверхности.

Поверхность постоянной силы находится в результате решения уравнения

$$F_z^{\text{tot}}(x, y, z) = F_0, \quad (3)$$

в котором F_z^{tot} рассматривается как функция координат кончика острия АСМ, а F_0 — сила, при которой производится сканирование.

3. Покажем теперь, что при сканировании над межатомными промежутками острие, нулевой слой которого состоит только из одного атома, проваливается ниже исследуемой поверхности. Для этого рассмотрим сканирование острия, эффективно состоящего из одного атома, над одним атомом поверхности. На рис. 1 приведено семейство кривых, соответствующих решению уравнения (3) при различных значениях F_0 (различных начальных высотах сканирования d). По оси абсцисс откладывается величина $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$, соответствующая горизонтальному смещению кончика острия относительно атома поверхности, расположенного в начале координат, по оси ординат — значение z (при $\rho = 0$ равное начальной высоте сканирования). Как видно из рис. 1, каждому значению d отвечает такое ρ_0 (касательная в этой точке вертикальна), что при $\rho > \rho_0$ уравнение (3) с данным значением F_0 не имеет решения. Существенно, что во всех случаях $\rho_0 < d$, так что при сканировании острия над цепочкой атомов в режиме сил отталкивания вблизи середины межатомного промежутка существует такая область, в которой уравнение (3) для силы, действующей на един-

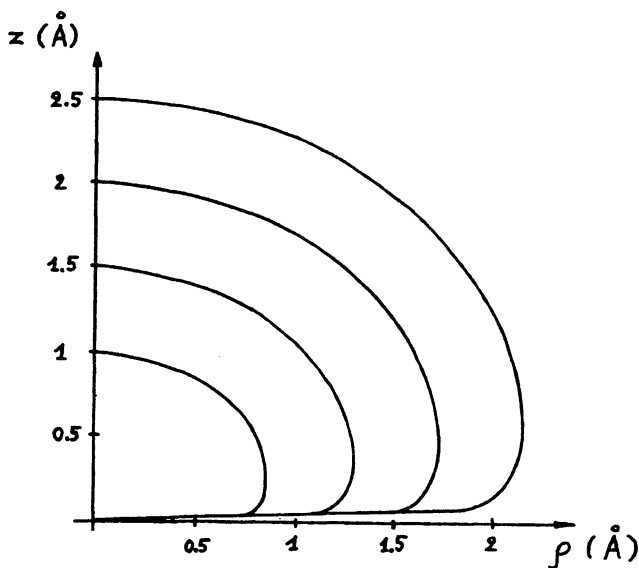


Рис. 1. Зависимость высоты поверхностей постоянной силы от расстояния между рассматриваемым атомом кристаллической поверхности и проекцией на нее вершины острия АСМ.

ственный атом нулевого слоя, не имеет решения, а острие проваливается ниже исследуемой поверхности. Учет взаимодействия атомов поверхности с атомами первого слоя не может изменить этого результата, т. к. взаимодействие с атомами первого слоя может дать существенный вклад лишь тогда, когда кончик острия провалится достаточно глубоко (на глубину порядка $a/2$). Увеличить начальную высоту сканирования d так, чтобы соответствующее значение ρ_0 удовлетворяло условию $\rho_0 > a/2$ нельзя, поскольку при этом АСМ переходит к неустойчивому переходному режиму [6].

Следовательно, для того, чтобы адекватно описывать работу АСМ в режиме сил отталкивания, необходимо предполагать, что нулевой слой острия является кластером из нескольких атомов, расположенных на поверхности кончика острия, представляющего собой параболоид вращения:

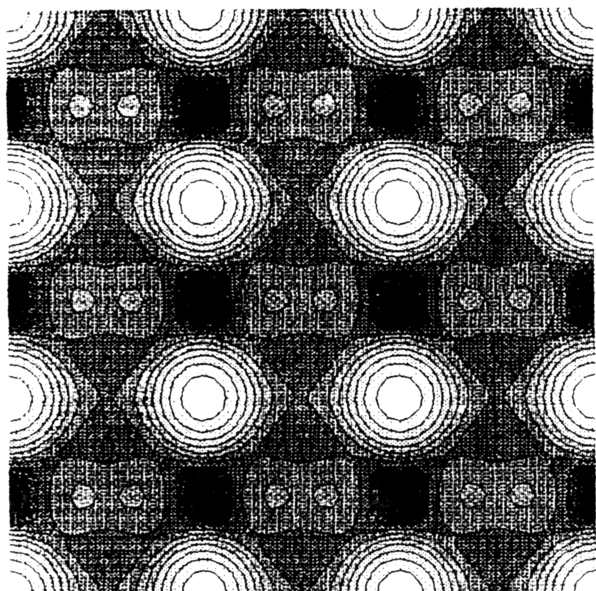
$$z_t = (x_t^2 + y_t^2) / (2R) + d, \quad (4)$$

где R — радиус кривизны острия. При этом за счет взаимодействия с атомами исследуемой поверхности среднее расстояние между атомами такого кластера уменьшается по сравнению с параметром решетки. Число же атомов кластера и его конфигурация должны быть таковы, чтобы, во-первых, сканирование было устойчивым (острие не проваливалось) и, во-вторых, поверхность постоянной силы слабо зависела от ориентации острия относительно направления сканирования.

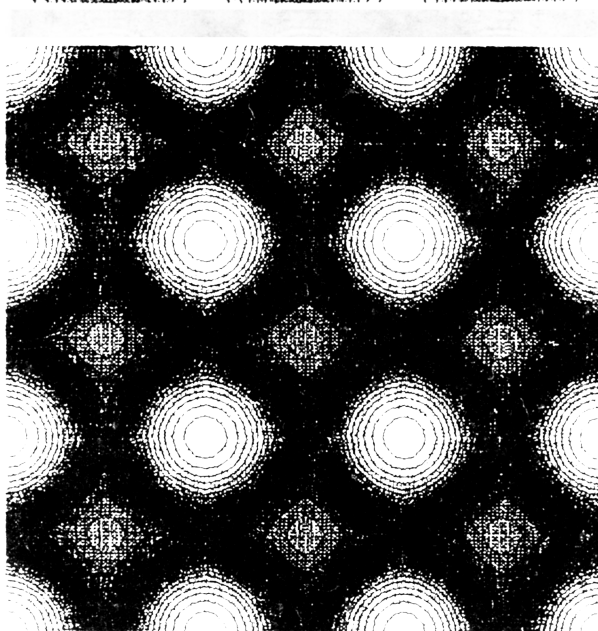
4. Для выбора оптимальной модели атомной структуры кончика острия была проведена серия расчетов поверхностей постоянной силы (3) при сканировании параболоида (4) с радиусом кривизны $R = 5 \text{ \AA}$ над различными типами поверхностных решеток: квадратной и решеткой плотной упаковки.

Заметим, что из общих соображений о взаимодействии атомов [10,11] трудно ожидать, чтобы все атомы кластера на кончике острия были расположены в плоскости, перпендикулярной оси параболоида. Однако, как показали расчеты, выполненные для кластеров, состоящих из 2–6 атомов, такое маловероятное расположение атомов не обеспечивает и устойчивость сканирования острия, которое проваливается — по крайней мере, при некоторых ориентациях острия относительно поверхности. Таким образом, естественно ожидать, что один из атомов кластера расположен ниже других (собственно на кончике острия), а остальные расположены на поверхности параболоида в плоскости, перпендикулярной его оси.

Проведенные расчеты показали, что оптимальной конфигурацией, обеспечивающей устойчивость сканирования



a



b

Рис. 2. Поверхность постоянной силы при сканировании острия со сложной атомной структурой над квадратной решеткой вдоль ее ребер:

a — параллельно диагонали кластера острия, *b* — под углом 15° к ней.

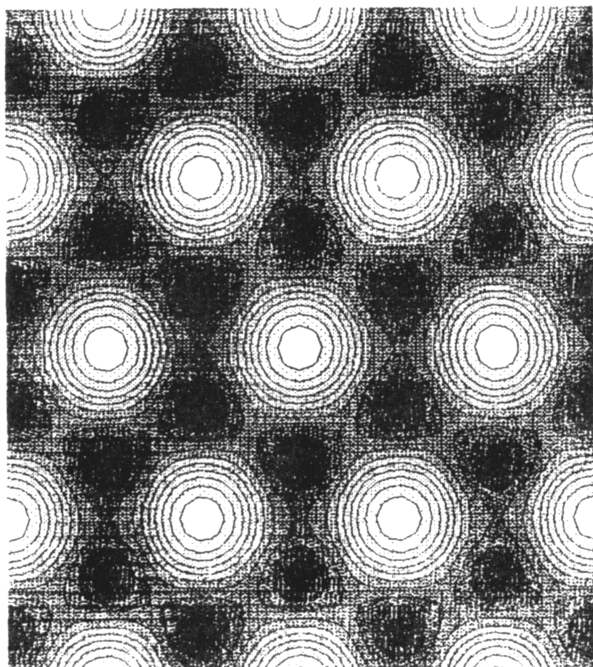


Рис. 3. Поверхность постоянной силы при сканировании острия над решеткой плотной упаковки атомов.

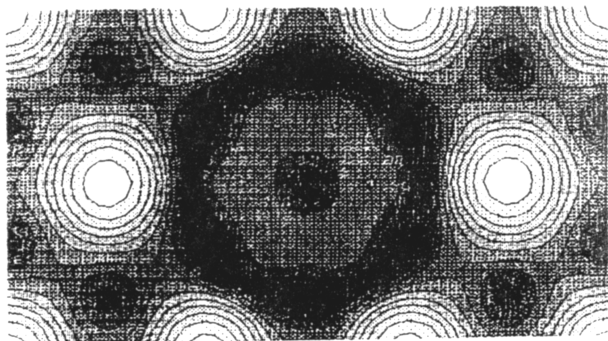


Рис. 4. Поверхность постоянной силы при сканировании острия над дефектом типа вакансии в решетке плотной упаковки атомов.

острия, является кластер из 7 атомов, один из которых опущен на 0.4\AA относительно плоскости остальных 6-и, расположенных в виде шестиугольника со стороной $b = 2\text{\AA}$. Для примера на рис. 2, а, б приведены поверхности постоянной силы, рассчитанные по формулам (2), (3) для сканирования острия слева направо вдоль ребер решетки. Более светлый тон соответствует большей высоте кончика острия над поверхностью. Так, на всех рисунках самый светлый тон отвечает значению высоты 1.5\AA , а самый темный — 0.90\AA на рис. 2, а и 0.99\AA на рис. 2, б. Предполагается, что на кончике острия находится описанный выше кластер из семи атомов, а сканирование производится над квадратной решеткой при различных ориентациях иглы: одна из главных диагоналей шестиугольника в кластере острия параллельна направлению сканирования (рис. 2, а), либо находится под углом в 15° к нему (рис. 2, б). Сравнение рис. 2, а и рис. 2, б демонстрирует практическое совпадение в области непосредственно над атомами исследуемой поверхности.

На рис. 3 приведены аналогичные результаты для случая решетки плотной упаковки атомов при сканировании вдоль главной диагонали шестиугольника (самый темный тон здесь отвечает значению высоты 0.97\AA). В этом случае результат также совершенно не зависит от ориентации острия, а в межатомных областях наблюдаются лишь такие различия, которые не играют существенной роли при интерпретации поверхностей постоянной силы. Для подтверждения этого результата на рис. 4 приведены результаты расчета поверхности постоянной силы при сканировании острия АСМ над дефектом типа вакансии в решетке плотной упаковки атомов (здесь самый темный тон соответствует значению высоты 0.9\AA). Как видно из рис. 4, поверхности постоянной силы в области над вакансией отличаются совершенно специфическим поведением по сравнению со случаем ненарушенной решетки (рис. 3). При этом выбранная конфигурация атомов на кончике острия обеспечивает устойчивость сканирования даже при расстояниях между соседними атомами, равных удвоенному значению параметра решетки.

Приведенные результаты позволяют сделать вывод о том, что для адекватной интерпретации экспериментальных данных, полученных методом АСМ в режиме сил отталкивания, нельзя ограничиваться простейшей моделью острия с единственным атомом на его конце. Математическое моделирование устойчивого сканирования над решетками разных типов, в том числе при наличии дефектов, возможно только при учете сложной кластерной структуры кончика острия АСМ.

Список литературы

- [1] *Binnig G., Quate C.F., Gerber Ch.* // *Phys. Rev. Lett.* 1986. V. 56. N 9. P. 930.
- [2] *Moiseev Yu.N., Mostepanenko V.M., Panov V.I., Sokolov I.Yu.* // *Phys. Lett. A.* 1988. V. 132. N 6,7. P. 354.
- [3] *Sarid D.* *Scanning Force Microscopy with Application to Electric, Magnetic and Atomic Forces.* Oxford series on Optical Science. N.Y., 1991.
- [4] *Marti O.* In: *STM and SFM in Biology.* Academic Press, N.Y., 1993. P. 1-124.
- [5] *Моисеев Ю.Н., Мостепаненко В.М., Панов В.И., Соколов И.Ю.* Письма в ЖТФ. 1989. Т. 15. В. 20. С. 5-11.
- [6] *Мостепаненко В.М., Панов В.И., Соколов И.Ю.* // Письма в ЖТФ. 1993. Т. 19. В. 8. С. 65-72.
- [7] *Благов Е.В., Климчицкая Г.Л., Мостепаненко В.М., Панов В.И., Соколов И.Ю.* // Письма в ЖТФ. 1993. Т. 19. В. 8. С. 73-78.
- [8] *Благов Е.В., Климчицкая Г.Л., Мостепаненко В.М., Панов В.И., Соколов И.Ю.* // Письма в ЖТФ. 1994. Т. 20. В. 1. С. 71-77.
- [9] *Marti O., Colchero J., Mlynek J.* // *Preprint Proceedings NATO ARW.* Lyon, 1992.
- [10] *Torrens I.M.* *Interatomic Potentials.* Academic Press. N.Y.-L., 1972.
- [11] *Israelachvili J.N.* *Intermolecular and Surface Forces.* Academic Press, N.Y.-L., 1985.

Исследовательско-внедренческое
предприятие "Модус"

Москва

Северо-западный

политехнический институт

Санкт-Петербург

ВНИИМ им. Д.И. Менделеева

Санкт-Петербург

Санкт-Петербургский государственный
технологический институт
(технический университет)

Поступило в Редакцию
3 октября 1994 г.