

11;12

## Расчет сил локального трения при атомно-силовой микроскопии поверхности металлов

© Е.В. Благов<sup>1</sup>, Г.Л. Климчицкая<sup>2</sup>, В.М. Мостепаненко<sup>3</sup>, М.З. Смирнов<sup>4</sup>

<sup>1</sup> Исследовательско-внедренческое предприятие "Модус",  
125047 Москва, Россия

<sup>2</sup> Северо-Западный заочный политехнический институт,  
191041 Санкт-Петербург, Россия

<sup>3</sup> Санкт-Петербургский государственный технологический институт (Технический университет),  
198052 Санкт-Петербург, Россия

<sup>4</sup> Институт точной механики и оптики,  
197101 Санкт-Петербург, Россия

(Поступило в Редакцию 12 января 1996 г.)

### Введение

В последние годы значительное внимание уделяется измерению горизонтальной составляющей силы, действующей на острие атомно-силового микроскопа (АСМ) со стороны исследуемой поверхности (см., например, [1–5]). Это связано прежде всего с тем, что трение само по себе является одним из наиболее общих и сложных физических явлений. Поэтому детальное изучение соответствующих процессов с помощью АСМ представляет несомненный интерес. Кроме того, силы трения, возникающие между зондирующим острием и исследуемой поверхностью, могут оказывать значительное влияние на пространственное разрешение АСМ и топографию получаемых с помощью АСМ изображений [4]. В то же время получение в процессе сканирования двух независимых рельефов — поверхности постоянной вертикальной составляющей силы и соответствующего рельефа для ее горизонтальной составляющей — дает дополнительную информацию об исследуемом образце.

Технические трудности, связанные с одновременным измерением вертикальной и горизонтальной составляющих силы, действующей на зондирующее острие, к настоящему времени в значительной мере преодолены (см., например, [5,6]). Однако теоретическая интерпретация полученных результатов требует дополнительных исследований.

В настоящей работе предлагается подход, позволяющий не только описать сканирование в режиме сил отталкивания, но и вычислить значения горизонтальных составляющих силы, действующей на острие АСМ. В качестве примера приводятся результаты расчетов для сканирования над поверхностью решетки плотной упаковки атомов, как невозмущенной, так и содержащей точечные дефекты различных типов. Подобные расчеты, как указывалось ранее [7,8], могут быть использованы при диагностике точечных дефектов на поверхности металлов методом АСМ.

### Методика расчета

В предположении о парном взаимодействии атомов острия и поверхности потенциальную энергию взаимодействия можно записать в виде

$$U(x, y, z) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m u(x_i, y_i, z_i, x+x_j, y+y_j, z+z_j). \quad (1)$$

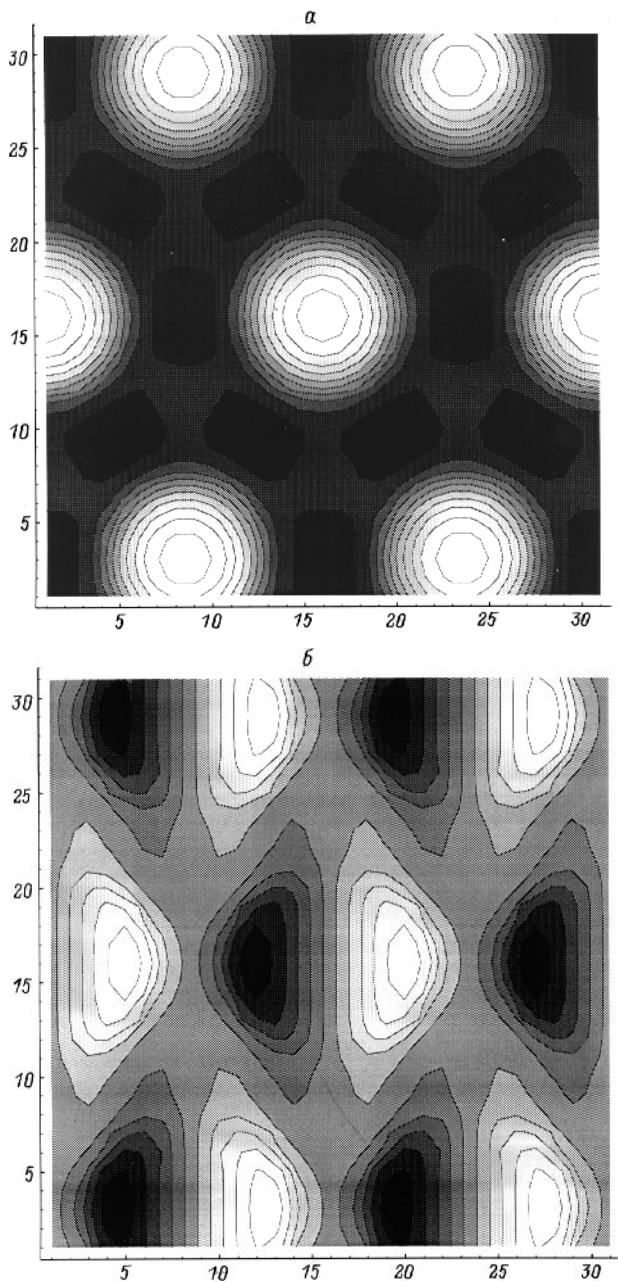
Здесь  $x, y, z$  — координаты кончика острия относительно исследуемой поверхности; индекс  $i$  нумерует атомы поверхности с координатами  $x_i, y_i, z_i$ ; индекс  $j$  нумерует атомы острия, имеющие координаты  $x_j, y_j, z_j$ , в системе координат, начало которой совпадает с кончиком острия. Если пренебречь смещением атомов поверхности и острия в процессе сканирования (что во всяком случае, безусловно, справедливо при силе сканирования  $F_0 \sim 10^{-9}$  Н [9,10]), вертикальную и горизонтальную (вдоль оси сканирования  $x$ ) составляющие силы, действующей на острие, то можно найти в результате дифференцирования потенциальной энергии (1)

$$F_z(x, y, z) = -\frac{\partial}{\partial z} U(x, y, z),$$

$$F_x(x, y, z) = -\frac{\partial}{\partial x} U(x, y, z). \quad (2)$$

При сканировании на постоянной высоте  $z = \text{const}$  сила  $F_x$  в (2) представляет собой собственно силу локального (атомного) трения. Сканирование в АСМ, однако, проводится вдоль поверхности постоянной силы  $F_z = \text{const}$  (точнее, постоянной вертикальной составляющей силы). Соответственно измеряемая при этом горизонтальная составляющая силы представляет собой функцию

$$\tilde{F}_x(x, y) = F_x(x, y, z) \Big|_{F_z(x, y, z) = \text{const}} = \text{const}. \quad (3)$$



**Рис. 1.** Двумерное изображение поверхности постоянной силы (а) и профиля горизонтальной составляющей силы  $\vec{F}_x$  (б) при сканировании острия АСМ над решеткой плотной упаковки атомов. а —  $h_{\max} = 0.5a$ ,  $h_{\min} = 0.367a$ ; б —  $\vec{F}_{x \max} = 0.473F_0$ ,  $\vec{F}_{x \min} = -0.473F_0$ ,

Для того чтобы найти величину (3), необходимо в каждой точке (x,y) решить относительно z уравнение

$$-\frac{\partial}{\partial z}U(x, y, z) = F_0, \tag{4}$$

где  $F_0$  — сила сканирования.

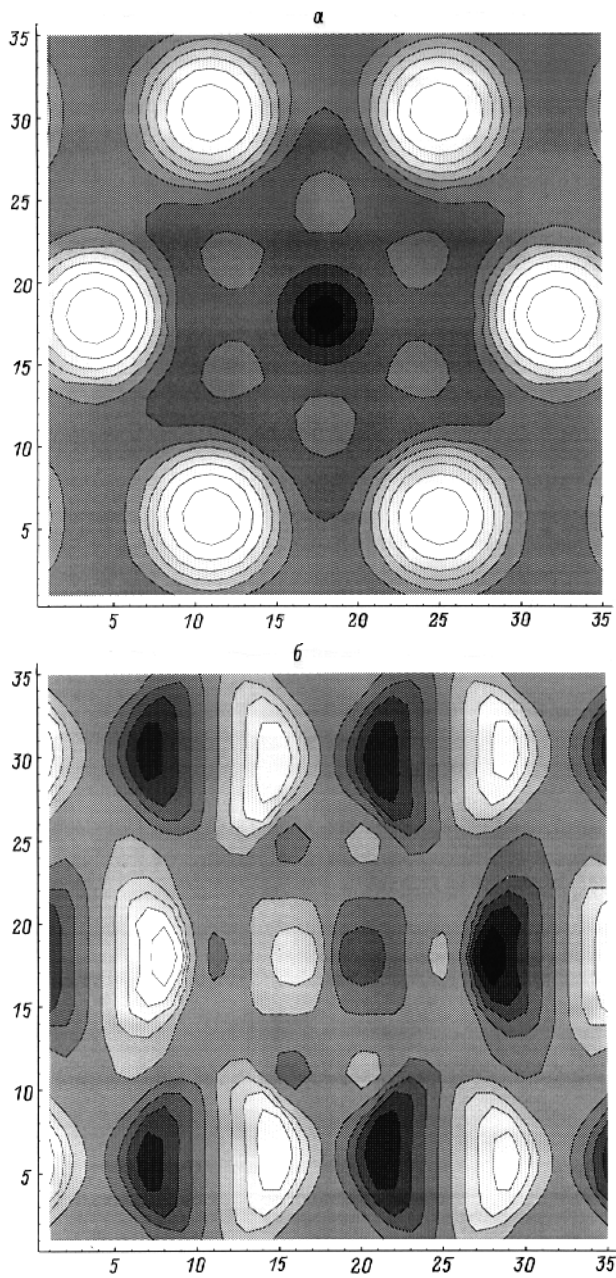
При этом будет получена поверхность постоянной силы  $z = z(x, y)$ . Затем в каждой точке этой поверхности следует вычислить силу  $F_x(x, y, z(x, y))$ . Результаты такого расчета, естественно, чувствительны

к выбору потенциала парного взаимодействия, особенно в режиме сил отталкивания, к выбору модели атомного строения острия. Простейшая модель одноатомного острия (см., например, [7,9,10]) позволяет при любых начальных высотах (т.е. при любых силах сканирования) достаточно хорошо описать поверхность постоянной силы в области непосредственно над атомами исследуемой поверхности. Однако при достаточно малых начальных высотах найти непрерывную поверхность постоянной силы в области между атомами оказывается невозможным [10,12,13]. Для создания более сложных моделей кончика острия, позволяющих адекватно описывать экспериментальные результаты, используются два пути. Первый связан с моделированием той или иной кластерной структуры кончика острия (см., например, [12–15]). Второй путь состоит в представлении кончика острия в виде некоторого квазиатома и подборе подходящего модельного потенциала взаимодействия этого квазиатома с атомами поверхности [16]. При этом, однако, вполне может оказаться, что модельный потенциал, подобранный так, чтобы обеспечить соответствие теоретических и экспериментальных результатов для поверхности постоянной силы, не обеспечивает адекватное описание горизонтальной составляющей силы, действующей на острие. Поэтому более естественным представляется моделирование кончика острия атомным кластером, соответствующим структуре материала (решетка плотной упаковки [12,13] либо тетрагональная структура [15]).

В настоящей работе используется модель параболического острия [8,17], на кончике которого находится кластер из 7 атомов [12,13], один из которых опущен на расстояние  $h = 0.22a$  относительно плоскости остальных шести, расположенных в виде шестиугольника со стороной  $b = 0.85a$  ( $a$  — равновесное расстояние между атомами в решетке плотной упаковки). Такая модель острия позволяет непротиворечиво описать процесс сканирования на начальных высотах  $d \sim (0.5 - 0.6)a$ , когда силами притяжения можно пренебречь по сравнению с силами отталкивания. В этом случае парный потенциал в (1) можно взять, например, в виде [18]

$$u(x_i, y_i, z_i, x + x_j, y + y_j, z + z_j) = \frac{\alpha}{[(x + x_j - x_i)^2 + (y + y_j - y_i)^2 + (z + z_j - z_i)^2]^{6/5}} \tag{5}$$

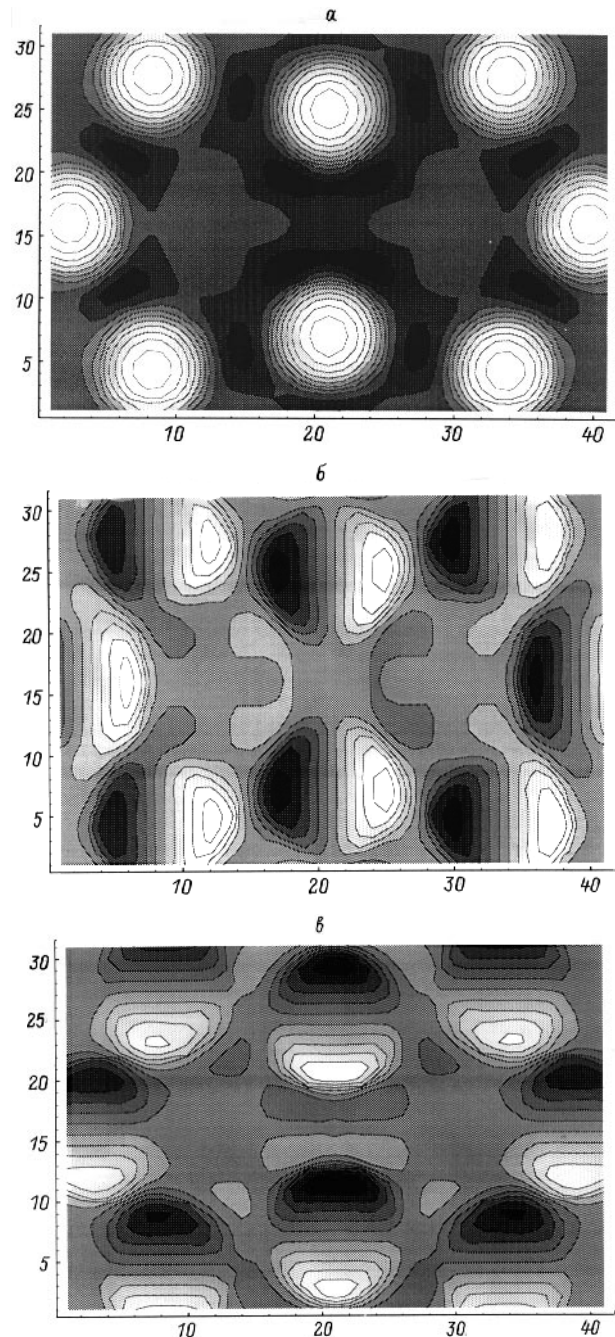
Для того чтобы избежать зависимости результатов от значения полуэмпирической постоянной  $\alpha$ , удобно все расчеты проводить в относительных величинах, измеряя все расстояния в единицах межатомного равновесного расстояния  $a$ , а силы в единицах силы сканирования  $F_0$ . Кроме того, поверхность постоянной силы, полученная при решении уравнения (1), и соответствующая горизонтальная составляющая



**Рис. 2.** Двумерное изображение поверхности постоянной силы (а) и профиля горизонтальной составляющей силы  $\bar{F}_x$  при сканировании острия АСМ над вакансией в решетке плотной упаковки атомов: а —  $h_{\max} = 0.5a$ ,  $h_{\min} = 0.284a$ ; б —  $\bar{F}_{x \max} = 0.588F_0$ ,  $\bar{F}_{x \min} = -0.456F_0$ .

вляющая силы зависит от ориентации острия относительно кристаллографических осей поверхности. При этом методика расчетов существенно зависит от того, как производится сканирование. Если при сканировании ориентация микрокластера на кончике острия остается строго фиксированной относительно поверхности, то необходимо проводить все расчеты именно для этой фиксированной ориентации. Если же в процессе сканирования ориентация микрокластера относительно поверхности случайным образом

меняется, то необходимо проводить соответствующее усреднение [12,13]. Ниже приводятся результаты расчетов усредненных поверхностей постоянной силы и соответствующих средних значений горизонтальной составляющей силы для решетки плотной упаковки, моделирующей поверхность металлов.



**Рис. 3.** Двумерное изображение поверхности постоянной силы (а) и профилей горизонтальных составляющих силы  $\bar{F}_x$  (б) и  $\bar{F}_y$  (в) при сканировании острия АСМ над дивакансией в решетке плотной упаковки атомов. а —  $h_{\max} = 0.5a$ ,  $h_{\min} = 0.34a$ ; б —  $\bar{F}_{x \max} = 0.508F_0$ ,  $\bar{F}_{x \min} = -0.532F_0$ ; в —  $F_{y \max} = 0.585F_0$ ,  $F_{y \min} = -0.585F_0$ .

## Сканирование над решеткой плотной упаковки

На рис. 1, *a* приведены результаты расчета усредненной поверхности постоянной силы при сканировании острия АСМ над невозмущенной решеткой плотной упаковки. Двумерные изображения здесь и далее представляют собой сечения соответствующих поверхностей, полученных при решении уравнения (4), десятью горизонтальными плоскостями, проведенными с шагом  $\Delta z = (z_{\max} - z_{\min})/10$ . Более светлый тон соответствует большей высоте, более темный — меньшей. Во всех рассматриваемых случаях  $z_{\max} = 0.5a$ .

На рис. 1, *b* приведено двумерное изображение профиля горизонтальной силы (3). Белый тон на двумерных изображениях силы соответствует максимально положительному значению  $\bar{F}_{x\max}$ , когда горизонтальная сила действует на острие в направлении сканирования. Черный тон соответствует минимальному, т. е. максимальному по модулю отрицательному, значению  $\bar{F}_{x\min}$ , когда горизонтальная сила действует на острие в направлении, противоположном направлению сканирования. Каждое изменение тона от более светлого к более темному соответствует уменьшению силы на  $\Delta \bar{F}_x = (\bar{F}_{x\max} - \bar{F}_{x\min})/10$ .

Как видно из сравнения рис. 1, *a* и *b*, горизонтальная составляющая силы обращается в нуль непосредственно над атомами исследуемой поверхности и в точках между ними, что согласуется с экспериментальными результатами (см.: например, [6]). Полученная глубина рельефа для горизонтальной составляющей  $(\bar{F}_{x\max} - \bar{F}_{x\min}) \approx F_0$  также хорошо согласуется с экспериментальными данными [6].

## Вакансия и дивакансия в решетке плотной упаковки

Рассмотрим теперь некоторые типы точечных дефектов в решетке плотной упаковки. На рис. 2 приведены результаты расчетов для дефекта типа вакансии: двумерное изображение усредненной поверхности постоянной силы (рис. 2, *a*) и соответствующего профиля горизонтальной составляющей силы  $\bar{F}_x$  (рис. 2, *b*). Сравнение рис. 1, *a, б* с рис. 2, *a, б* соответственно наглядно демонстрирует возможность обнаружения на поверхности образца дефектов типа вакансии по данным АСМ. Для дивакансии двумерное изображение поверхности постоянной силы приведено на рис. 3, *a*. Заметим, что при сканировании острия АСМ вблизи дивакансии вдоль взаимно перпендикулярных осей  $x$  и  $y$  горизонтальные составляющие совершенно различны и уже не могут быть выражены друг через друга с использованием свойств симметрии решетки, как в случаях невозмущенной решетки и вакансии. Поэтому были подробно исследо-

дованы режимы сканирования вдоль обеих осей. Полученные профили горизонтальных компонент силы  $\bar{F}_x$  и  $\bar{F}_y$  приведены на рис. 3, *б* и *в* соответственно.

Полученные результаты ясно показывают, что наличие на исследуемой поверхности точечных дефектов заметно изменяет не только характер поверхности постоянной силы, но и профиль горизонтальной составляющей силы, действующей на острие в процессе сканирования в режиме сил отталкивания. Следовательно, измерение горизонтальной составляющей силы дает дополнительную информацию для диагностики точечных дефектов методом АСМ.

## Список литературы

- [1] *Mate C.M., McClelland, Erlandsson R.* // Phys. Rev. Lett. 1987. Vol. 59. N 4. P. 1942–1948.
- [2] *Marti O., Colchero J., Mlynek J.* // Nanotechnology. 1990. Vol. 1. N 1. P. 141–144.
- [3] *Meyer G., Amer M.N.* // Appl. Phys. Lett. 1990. Vol. 57. N 20. P. 2089–2091.
- [4] *Моисеев Ю.Н., Панов В.И., Савинов С.В.* // Письма в ЖТФ. 1991. Т. 17. Вып. 10. С. 24–28.
- [5] *Marti O.* // Physica Scripta. 1993. Vol. 149. N 1. P. 599–604.
- [6] *Marti O.* // Surface and Coating Technology. 1993. Vol. 62. P. 510–516.
- [7] *Благов Е.В., Климчицкая Г.Л., Мостепаненко В.М.* и др. // Письма в ЖТФ. 1993. Т. 19. Вып. 8. С. 73–78.
- [8] *Благов Е.В., Климчицкая Г.Л., Мостепаненко В.М.* и др. // Письма в ЖТФ. 1994. Т. 20. Вып. 1. С. 71–77.
- [9] *Gould S.A.C., Burke K., Hansma P.K.* // Phys. Rev. B. 1989. Vol. 40. N 8. P. 5363–5366.
- [10] *Abraham F.F., Batra I.R.* // Surf. Sci. 1989. Vol. 209. N 1/2. P. L125–L132.
- [11] *Albrecht T.R., Quate C.F.* // J. Appl. Phys. 1987. Vol. 62. N 7. P. 2599–2602.
- [12] *Благов Е.В., Климчицкая Г.Л., Лобашев А.А., Мостепаненко В.М.* // Письма в ЖТФ. 1995. Т. 21. Вып. 3. С. 73–80.
- [13] *Blagov V., Klimchitskaya G., Lobashev A., Mostepanenko V.* // Surf. Sci. In press. Preprint Friedmann Laboratory Publishing. N FL-030495. St. Petersburg, 1995.
- [14] *Abraham F.F., Batra I.P., Ciraci S.* // Phys. Rev. Lett. 1988. Vol. 60. N 13. P. 1314–1317.
- [15] *Tang H., Joachim C., Devillers J.* // Surf. Sci. 1993. Vol. 291. N 3. P. 439–450.
- [16] *Overnay G., Tomanek D., Zhong W.* et al. // J. Phys. C. 1994. Vol. 4. N 17. P. 4233–4249.
- [17] *Bordag M., Klimchitskaya G., Mostepanenko V.* // Surf. Sci. 1995. Vol. 328. N 1/2. P. 129–134.
- [18] *Israelachvili J.N.* Intermolecular and Surface Forces. New York; London; Academic Press, 1985.