05;11;12

Флуктуационно-электромагнитное взаимодействие зонда сканирующего микроскопа с поверхностью твердого тела

© Г.В. Дедков, А.А. Кясов

Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик

Поступило в Редакцию 22 декабря 1998 г.

В рамках флуктуационной электромагнитной теории получена общая формула для латеральной фрикционной силы, действующей на зонд сканирующего микроскопа, движущегося параллельно поверхности со скоростью V. Анализируется вклад в эту силу различных механизмов поляризации. Получены зависимости латеральных сил от скорости, радиуса кривизны и расстояния зонда от поверхности, температуры и диэлектрических характеристик трибоконтакта. Впервые показано, что латеральные силы могут менять знак и становиться ускоряющими при определенном сочетании диэлектрических функций зонда и поверхности.

Эксперименты, проводимые с атомно-силовым и другими типами сканирующих зондирующих микроскопов, делают актуальной постановку ряда вопросов, связанных с ролью различных механизмов латерального фрикционного взаимодействия чувствительного элемента — иглы с поверхностью образца. Одним из таких механизмов, как отмечалось в работах [1–4], является динамическое (зависящее от скорости острия) флуктуационно-электромагнитное взаимодействие, приводящее к тормозящей силе вида

$$\mathbf{F} = -\eta \mathbf{V}, \tag{1}$$

где коэффициент η зависит от формы зонда и расстояния z его апекса от поверхности, а также от диэлектрических свойств системы. Формула (1) соответствует первому неисчезающему члену разложения по скорости, справедливому при малых $\mathbf{V}$.

При типичных значениях параметров сканирования (частота покадровой развертки 1–10 kHz, размер кадра 10–1000 nm) скорость движения зонда составляет $10^{-6}-10^{-2}$ m/s, но в вибрационном режиме может достигать 1–10 m/s. Возможно, что такие или даже несколько большие скорости характерны и для наблюдаемого в экспериментах скачкообразного движения острия при более жестком контакте ("stick–slip–motion") [5].

Анализ существующих работ, посвященных расчету η для нерелятивистского сферического атома, движущегося параллельно поверхности, показывает отсутствие ясности как в значении показателя степени зависимости η от расстояния z до поверхности, так и в величине численного коэффициента. Например, в одной из первых работ по этому вопросу была получена зависимость $\eta \sim z^{-10}$ [6], а затем в работах [7–8], а также в нашей работе [9] — зависимость $\eta \sim z^{-5}$. В данной работе, не ограничиваясь условием нулевой температуры T, использованным в [9], нами получена более общая формула для латеральной силы, действующей на движущийся нерелятивистский атом:

$$F(z,V) = \frac{2\hbar}{\pi^2 V}\int d\omega \iint dk_x dk_y k \exp(-2kz)\,\mathrm{cth}\left(\frac{\omega\hbar}{2kT}\right)$$
$$\times \Big\{(\omega + k_xV)\Big[\Delta''(\omega)\alpha''(\omega + k_xV) - \Delta''(\omega + k_xV)\alpha''(\omega)\Big]$$
$$+ (\omega - k_xV)\Big[\Delta''(\omega)\alpha''(\omega - k_xV) - \Delta''(\omega - k_xV)\alpha''(\omega)\Big]\Big\}, \quad (2)$$

где $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, $\alpha''(\omega) = \mathrm{Im}(\omega)$, $\Delta''(\omega) = \mathrm{Im}\left(\frac{\varepsilon(\omega)-1}{\varepsilon(\omega)+1}\right)$, причем $\alpha(\omega)$ — динамическая поляризуемость атома, а $\varepsilon(\omega)$ — диэлектрическая функция поверхности. Интегрирование осуществляется по положительным частотам и положительным значениям проекций волновых векторов k_x и k_y.

Нетрудно видеть, что разложение силы (2) вряд при малых скоростях (скорости, характерные для зондирующих микроскопов, могут считаться малыми) содержит только нечетные степени V. В частности, в линейном приближении для коэффициента η после интегрирования по волновым векторам будем иметь

$$\eta(z) = \frac{3\hbar}{8\pi z^5}\int\limits_0^\infty d\omega\Big\{2\Big[\alpha''(\omega)\frac{d\Delta''(\omega)}{d\omega} - \Delta''(\omega)\frac{d\alpha''(\omega)}{d\omega}\Big]$$
$$+ \omega\Big[\alpha''(\omega)\frac{d^2\Delta''(\omega)}{d\omega^2} - \Delta''(\omega)\frac{d^2\alpha''(\omega)}{d\omega^2}\Big]\Big\}\mathrm{cth}\Big(\frac{\omega\hbar}{2kT}\Big). \quad (3)$$

Главное отличие этой формулы от аналогичной в [8] состоит в том, что под знаком интеграла дифференцируется не распределение Планка, а диэлектрическая часть (заметим, что гиперболический котангенс в (3) в отличие от распределения Планка учитывает также нулевые колебания). Поэтому $\eta(z) \neq 0$ при $T = 0$ (ср. с формулами (63) и (65) в [8]). В последнем случае после упрощений, связанных с интегрированием по частям, формула (7) приводится к более компактному виду

$$\eta(z) = \frac{3\hbar}{4\pi z^5} \int\limits_0^\infty d\omega \alpha''(\omega) \frac{d\Delta''(\omega)}{d\omega}. \tag{4}$$

Заметим, что эта формула отличается дополнительным коэффициентом 1/2 от использованной в [2–3], поскольку в последних работах в (3) не было учтено слагаемое со вторыми производными.

Для расчета силы торможения протяженного тела (зонда микроскопа), движущегося со скоростью V над поверхностью, при строгом решении задачи необходимо рассчитать спектр электромагнитных флуктуаций для произвольной геометрической формы острия, что представляет очень трудоемкую задачу, поэтому в первом приближении воспользуемся аддитивным суммированием сил на основе полученных выше формул. В пользу возможности применения приближения аддитивности свидетельствуют результаты расчета ван-дер-ваальсовых сил в работах [10–12], в которых показано, что геометричекие эффекты не превышают 20–25% в худшем случае (чаще же они значительно меньше) и не влияют на степенной закон изменения силы с расстоянием от поверхности.

Предполагая, что острие имеет форму параболоида вращения (с каноническим уравнением поверхности $z = (x^2 + y^2)/2R + h$, R — радиус кривизны, h — расстояние апекса зонда от поверхности), проинтегрируем формулу (3) по объему острия, причем поляризуемость атома $\alpha(\omega)$ предварительно выразим по формуле Клаузиуса–Моссотти. В результате в линейном по скорости приближении получим

$$\eta(z) = \frac{3}{64\pi} \frac{\hbar R}{h^3} J(\varepsilon_1(\omega), \varepsilon(\omega)), \tag{5}$$

где функционал $J(\varepsilon_1(\omega),\, \varepsilon(\omega))$ определяется выражением

$$J(\varepsilon_1(\omega), \varepsilon(\omega)) = \int\limits_0^\infty \mathrm{cth}\Big(\frac{\omega\hbar}{2kT}\Big)\Big\{2\left[\tilde{\Delta}''(\omega)\frac{d\Delta''(\omega)}{d\omega} - \Delta''(\omega)\frac{d\tilde{\Delta}''(\omega)}{d\omega}\right]$$

$$+\ \omega\Big[\tilde{\Delta}''(\omega)\frac{d^2\Delta''(\omega)}{d\omega^2} - \Delta''(\omega)\frac{d^2\tilde{\Delta}''(\omega)}{d\omega^2}\Big]\Big\}d\omega, \qquad (6)$$

причем $\tilde{\Delta}''(\omega) = \mathrm{Im}\left[\frac{\varepsilon_1(\omega)-1}{\varepsilon_1(\omega)+2}\right]$, а $\varepsilon_1(\omega)$ — диэлектрическая проницаемость острия.

Зависимость функционала $J(\varepsilon_1(\omega), \varepsilon(\omega))$ от температуры велика в том случае, когда $\omega\hbar \leqslant 2kT$ и $\mathrm{cth}(x) \to x^{-1}$, а основной вклад в интеграл связан с низкочастотной областью спектра. Так как при комнатной температуре $2kT \approx 0.05\,\mathrm{eV}$, то к числу соответствующих поляризационных механизмов относятся процессы дипольной релаксации в диэлектриках, инфракрасного поглощения в ионных кристаллах и низкочастотного поглощения в проводящих (в области длин волн $20\,\mu\mathrm{m}{-}0.2\,\mathrm{m}$). В этих случаях, очевидно, коэффициент трения η пропорционален температуре, если не учитывать ее влияние на входящие в интеграл диэлектрические проницаемости. Для оптических механизмов поглощения температурная зависимость подынтегрального выражения в (6) отсутствует и можно пользоваться формулой, аналогичной (4):

$$J(\varepsilon_1(\omega), \varepsilon(\omega)) = 2\int \tilde{\Delta}''(\omega)\frac{d\Delta''(\omega)}{d\omega}d\omega. \qquad (7)$$

Перейдем к численной оценке сил трения в трибоконтактах с различными механизмами поляризуемости, воспользовавшись известными выражениями для диэлектрических функций:

а) диэлектрическая функция для ориентационного механизма в приближении Дебая (τ — время релаксации, $\varepsilon(0)$ — статическая диэлектрическая проницаемость)

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{\varepsilon(0)-1}{1-i\omega\tau}; \qquad (8)$$

б) диэлектрическая функция ионных кристаллов вблизи пика инфракрасного поглощения (ω_0 — частота поперечного оптического фонона,

$\varepsilon(\infty)$ — высокочастотная диэлектрическая проницаемость, γ — ширина линии)

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon(\infty) + \frac{\varepsilon(0) - \varepsilon(\infty)}{1 - (\omega/\omega_0)^2 + i\gamma\omega/\omega_0^2}; \tag{9}$$

в) диэлектрическая функция проводящих кристаллов в приближении Друде (w_p — плазменная частота; $\varepsilon(0) = 1$ в случае металлов)

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon(0) - \frac{(\omega_p\tau)^2}{1 + (\omega\tau)^2} + \frac{i(\omega_p\tau)^2}{\omega\tau(1 + (\omega\tau)^2)}. \tag{10}$$

Конкретные численные расчеты интеграла (14) проводились: 1) для контакта кварцевых стекол (формула (16) при различных значениях $\varepsilon(0)$ и τ) — соответствующие зависимости показаны на рис. 1; 2) контакта ZnS–ZnS (формула (17) при $\omega_0 = 0.005$ eV, $\varepsilon(0) = 5.1$, $\varepsilon(\infty) = 2.93$) — зависимость от ширины линии γ приведена на рис. 2; 3) для контакта проводящих кристаллов (металлов и полупроводников) — результаты расчета при различных значениях времени релаксации приведены в таблице (значения плазменных частот Ag и Au приняты равными 8.83 и 9.2 eV). Во всех случаях температура равнялась 300 K. Подстановка максимальных из рассчитанных значений J в формулы (5) и (1) при

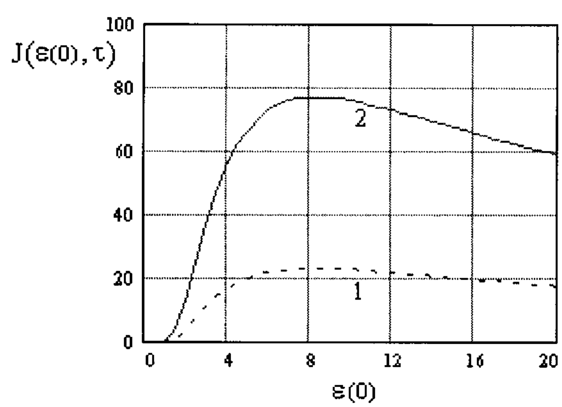

Рис. 1. Зависимость интеграла J от статической диэлектрической проницаемости и времени релаксации контакта кварц–кварц в случае механизма ориентационной дипольной поляризуемости (*1* — $\tau = 3 10^{-10}$ s, *2* — $\tau = 10^{-9}$ s).

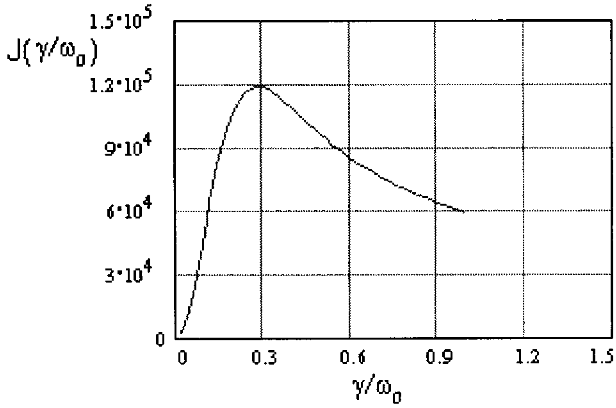

Рис. 2. Зависимость интеграла J от относительной ширины линии инфракрасного поглощения в трибоконтакте ZnS–ZnS.

$z = 0.2\,\mathrm{nm}$, $R = 20\,\mathrm{nm}$, $V = 1\,\mathrm{m/s}$ дает оценки соответствующих сил трения на уровне $11\,pN$, $0.47\,nN$ и $0.36\,pN$. Эти значения находятся в пределах экспериментальных возможностей современной зондовой микроскопии.

Более интригующим результатом расчетов (см. таблицу) является возможность изменения знака коэффициента η, т. е. в итоге мы получаем ускоряющую силу на острие при определенном сочетании диэлектрических функций трибопартнеров.

Результаты расчета интеграла J для проводящих кристаллов

Контакт	τ, s	J
Si–Si	10^{-11}	9.6
Si–Si	10^{-15}	65.4
Ag–Ag	6.10^{-15}	76.2
Au–Au	$3.8 \cdot 10^{-15}$	46.3
Si–Au	$3.8 \cdot 10^{-15}$	16.7
Ge–Si	10^{-14}	-0.23
Ge–Au	$3.8 \cdot 10^{-15}$	-8.2

Таким образом, результаты данной работы свидетельствуют о возможности экспериментального обнаружения флуктуационно-электромагнитных сил разного знака с характерными зависимостями от температуры, радиуса зонда и расстояния его апекса от поверхности. Измерение этих сил может дать основу для применений трибоконтактов в изучении диэлектрических свойств твердых тел на наноструктурном уровне. Кроме того, их необходимо учитывать при прохождении нейтральных пучков в прямых и изогнутых нанотрубках (см., например, [13]).

Список литературы

[1] *Levitov L.S.* // Europhys. Lett. 1989. V. 8. P. 499.
[2] *Dedkov G.V.* // Proc. of the 8th Int. Conf. on Tribology / Ed. by S.S. Eskildsen, D.S. Larsen, H. Reitz, E.L. Bienk, C.A. Straede, Aarhus, Denmark. 1998. V. 1. P. 47. (В ссылке [17] этой статьи вместо цитируемой работы следовало указать работу [9] данного списка).
[3] *Dedkov G.V.* // Materials Lett. 1998 (in print).
[4] *Дедков Г.В.* // Письма в ЖТФ. 1999. Т. 25. В. 2. С. 61–67.
[5] *Lanz M.A., O'Shea J., Welland M.E.* et al. // Phys. Rev. 1997. B55. N 16. P. 10 776.
[6] *Schaich W.L., Harris A.* // J. Phys. F: Metal Phys. 1981. V. 11. N 1. P. 65.
[7] *Mahanti J.* // J. Phys. B: At. Mol. Phys. 1980. V. 13. N 22. P. 4396.
[8] *Tomassone M.S., Widom A.* // Phys. Rev. 1997. B56. N 8. P. 4938.
[9] *Кясов А.А.* // Сб. науч. тр. / Под ред. В.Е. Фортова, Е.А. Кузьменкова. М.: ИФВТАН, 1991. С. 122.
[10] *Moiseev Yu.N., Mostepanenko V.M., Popov V.I.* // Phys. Lett. 1988. V. 132A. N 6–7. P. 354.
[11] *Моисеев Ю.Н., Мостепаненко В.М., Панов В.И.* // ЖТФ. 1990. Т. 60. № 1. С. 141.
[12] *Johansson P., Apell P.* // Phys. Rev. 1997. B56. N 7. P. 4159.
[13] *Dedkov G.V.* // Nucl. Instr. & Meth. 1998. B 143. P. 584.