

11;12

Дислокационный механизм трения при взаимодействии нанозонда с поверхностью твердого тела

© С.Ш. Рехвиашвили

Институт прикладной математики и автоматизации КБНЦ РАН,
360000 Нальчик, Россия

(Поступило в Редакцию 18 июня 2001 г.)

Предлагается дислокационный механизм силы трения между зондом атомно-силового микроскопа и атомарно-гладкой поверхностью твердого тела, согласно которому контактная зона представляется краевой дислокацией. С помощью атомно-силового микроскопа измерена трибоакустическая эмиссия, особенности которой указывают на дислокационный характер трения. Проведен аналитический расчет силы трения для иглы параболической формы.

Введение

Согласно современным представлениям, прямая пропорциональность между силой трения и силой нагрузки при трении макроскопических тел (закон Амонтона) обусловлена наложением и взаимодействием отдельных множественных микро- и наноконтактов трущихся поверхностей. В результате этого суммарная площадь касания этих поверхностей на несколько порядков меньше кажущейся площади [1]. Для исследования трения в наноконтактах в настоящее время применяется атомно-силовой микроскоп (АСМ). Сейчас этот прибор является одним из наиболее мощных инструментов для изучения поверхностей твердых тел на уровне отдельных атомов и молекул, измерения ультрамалых (порядка 1 рN) сил и нанотехнологии. Принцип работы АСМ основан на механическом сканировании поверхности (в контактном или безконтактном режиме) специальным чувствительным элементом — кантилевером, состоящим из держателя и упругой микробалки с маленькой иглой на конце.

Атомистическая теория трения пока находится в стадии разработки. На данный момент в основе большинства теоретических работ лежат либо слабо обоснованные модельные представления, не позволяющие получать в явном виде формулы для сил трения [2], либо численное моделирование методами молекулярной динамики [3,4] и Монте-Карло [5,6], результаты которого критически зависят от количества атомов в системе и выбранной аппроксимации для потенциала взаимодействия. В последнем случае, однако, имеется возможность моделировать изображения и следить за процессами, происходящими непосредственно в контактной зоне.

В настоящей работе впервые предлагается дислокационный механизм трения между нанозондом и атомарно-гладкой поверхностью твердого тела. В этом случае контактная зона представляется краевой дислокацией, петля которой охватывает область площадью Ω . На целесообразность данного предположения указывают, в частности, нижеследующие обстоятельства.

1. Из данных рентгеноструктурного анализа следует, что смещение дислокации кратно вектору Бюргера (т.е. фактически периоду решетки). Движение

дислокации происходит скачкообразно в поле сил Пайерлса–Набарро, что объясняет эффект прилипания–скольжения, часто наблюдаемый в экспериментах с АСМ.

2. Из теории дислокаций известно, что касательное напряжение минимально при скольжении плотноупакованных плоскостей или плоскостей с несоизмеримыми структурами. С этим, по-видимому, связаны малые значения коэффициентов трения и скорости износа при трении твердых тел на наноструктурном уровне.

3. Компьютерное моделирование контактного взаимодействия зонда АСМ с поверхностью твердого тела методами молекулярной динамики и Монте-Карло подтверждает образование области “плохого” кристалла [3–6].

4. Как правило, скольжение краевой дислокации сопровождается генерацией низкочастотных звуковых волн. Вектор скорости элементов среды в волновой зоне пропорционален интегралу вида [7]

$$\mathbf{v} \sim \int \frac{\partial^2}{\partial t^2} j_{ks} \, d\mathbf{r},$$

где j_{ks} — тензор плотности потока дислокаций, имеющих в нашем случае одну компоненту; \mathbf{r} — вектор, определяющий положение дислокации.

Из приведенного выражения следует, что акустическая эмиссия должна наблюдаться при нестационарном движении зонда, т.е. когда вторая производная от плотности потока дислокации не равна нулю. Этот факт, как показано ниже, находит экспериментальное подтверждение.

Экспериментальная часть

Для проверки предположения о дислокационном механизме трения использовался специально разработанный АСМ, блок-схема которого приведена на рис. 1, а. Принцип работы прибора заключается в следующем. С задающего генератора 1 переменный сигнал прямоугольной формы подается на пьезоэлемент 2. В результате этого тонкая вольфрамовая игла 3, закрепленная на пьезоэлементе, совершает механические колебания, скользя при

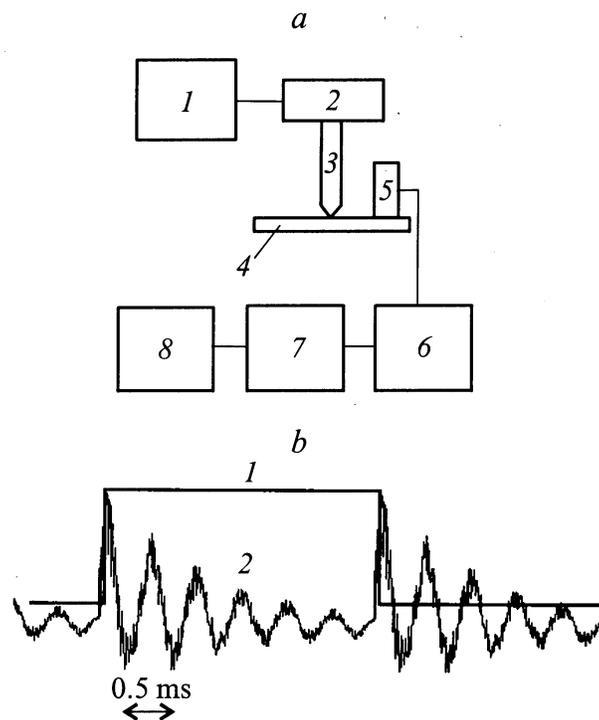


Рис. 1. Блок-схема атомно-силового микроскопа (а) и осциллограмма трибоакустической эмиссии (b) при взаимодействии вольфрамового зонда с поверхностью монокристаллического кремния (111). Радиус кривизны зонда составлял около 100 нм. Сила нагрузки не более 0.1 μN .

этом по поверхности исследуемого образца 4. Амплитуда колебаний иглы и скорость скольжения зависят от величины прикладываемого к пьезоэлементу напряжения и частоты задающего сигнала. Звукосниматель 5 в процессе сканирования измеряет интенсивность звуковых волн, возникающих в результате трения иглы об поверхность образца. Сигнал с звукоснимателя поступает на маломощный усилитель 6 и перестраиваемый полосовой фильтр 7. Далее сигнал подается на осциллограф 8.

На рис. 1, b показана осциллограмма трибоакустической эмиссии, полученная с помощью АСМ: 1 — сигнал, подаваемый на пьезоэлемент; 2 — выходной сигнал. В моменты времени, соответствующие переднему и заднему фронтам задающего сигнала 1, происходят смещения зонда в противоположные крайние положения. В каждом из этих положений пьезоэлемент резко останавливается, а зонд по инерции продолжает совершать затухающие колебания вблизи исследуемой поверхности. При этом, как показали многочисленные эксперименты, интенсивность акустической эмиссии приблизительно линейно увеличивается с возрастанием прикладываемой к зонду нагрузки. Пикам на кривой 2 соответствуют точки поворота траектории зонда. Это означает, что максимальная трибоакустическая эмиссия имеет место при максимальном ускорении зонда, что характерно для дислокационного механизма генерации звуковых волн [7].

Теоретический анализ

Аналитический расчет силы трения основывается на классическом понятии краевой дислокации. Работа, которую необходимо затратить на перемещение дислокации, равна $A = \tau b \Omega$, где τ — касательное напряжение, b — длина вектора Бюргерса, Ω — площадь дислокации [8]. Если предположить, что элементарное скольжение зонда АСМ (микрослип) происходит на величину b , то для тангенциальной силы будем иметь следующую формулу:

$$F = \tau \Omega. \quad (1)$$

В изобарно-изотермических условиях для разрыва отдельных межатомных связей требуется сила

$$\Delta F = \frac{\Delta G}{d N_A},$$

где ΔG — энергия Гиббса, d — межатомное расстояние, N_A — число Авогадро.

Число атомов в зоне контакта есть $N = n_s \Omega$ (n_s — слоевая концентрация атомов), поэтому сила, которую нужно приложить для разъединения всего контакта, будет равна

$$F = \Delta F N = \frac{\Delta G n_s \Omega}{d N_A}. \quad (2)$$

Сравнивая выражения (1) и (2), находим

$$\tau = \frac{n_b}{N_A} \Delta G, \quad (3)$$

где $n_b = n_s/d$ — объемная концентрация атомов.

В подтверждение справедливости формулы (3) (прямой пропорциональности между τ и ΔG) на рис. 2 показана коррелятивная зависимость модуля сдвига от теплоты сублимации для различных твердых тел. Предполагалось, что касательное напряжение пропорционально модулю сдвига, а энергия Гиббса пропорциональна теплоте сублимации. Квадратиками обозначены экспериментальные данные, взятые из [9,10]. Кривая — линия регрессии,

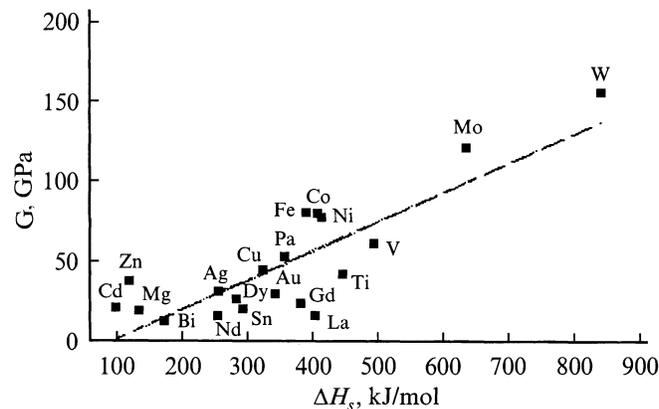


Рис. 2. Коррелятивная зависимость модуля сдвига от теплоты сублимации.

задаваемая уравнением $y(x) = 0.186x - 19.132$. Коэффициент корреляции составляет 0.842.

Эксперименты с АСМ показывают, что в отсутствие внешней нагрузки трение не исчезает [11,12]. Это связано с тем, что после разгрузки контакта на зонд продолжают действовать сила адгезии и капиллярная сила, появляющаяся при работе АСМ во влажной атмосфере. При расчете площади контакта Ω эти силы можно учесть в приближении Дерягина–Муллера–Топорова (ДМТ) [13]. В итоге получается следующая формула для силы трения

$$F = \frac{\pi n_b \Delta G}{N_A} \left[\frac{R}{E} (F_{\perp} + 2\pi R\gamma + F_c) \right]^{2/3},$$

$$\frac{1}{E} = \frac{3}{4} \left[\frac{1 - \mu_1^2}{E_1} + \frac{1 - \mu_2^2}{E_2} \right], \quad (4)$$

где R — радиус кривизны кончика зонда, F_{\perp} — сила нагрузки, γ — удельная энергия адгезии плоских поверхностей, F_c — капиллярная сила, $E_{1,2}$ и $\mu_{1,2}$ — модули упругости и коэффициенты Пуассона иглы и образца.

Отметим, что зависимость силы трения от нагрузки вида $F \sim F_{\perp}^{2/3}$ характерна для большинства экспериментов с АСМ [11,12].

Заключение

В настоящей работе проанализированы различные физические процессы, происходящие в системе зонд–образец АСМ. Проведенные экспериментальные и теоретические исследования целиком подтвердили “дислокационную природу” взаимодействия нанозонда с атомарно гладкой поверхностью.

В заключение отметим один момент. Численное моделирование скольжения кластера из небольшой группы атомов вдоль кристаллической поверхности в рамках дислокационной модели обнаруживает, что АСМ изображения должны обладать типичными для фракталов свойствами — достаточно хорошо выраженным самоподобием при изменении масштаба (в нашем случае при изменении размера контактной зоны) и дробной фрактальной размерностью, которая находится в интервале от 2 до 3. Изображения могут претерпевать значительные искажения, вплоть до полного исчезновения контраста или его инверсии, когда минимумы и максимумы на скане меняются местами. Эти явления, очевидно, требуют специального рассмотрения.

Список литературы

- [1] Физический энциклопедический словарь / Под ред. А.М. Прохорова. М.: Сов. энциклопедия, 1983. С. 765–766.
- [2] Дедков Г.В. // ПЖТФ. 1998. Т. 24. № 19. С. 44. ЖТФ. 2000. Т. 70. Вып. 7. С. 96.
- [3] Landman U. et al. // Science. 1990. Vol. 248. P. 454.
- [4] Покропивный А.В. и др. // ПЖТФ. 1996. Т. 22. № 2. С. 1. ЖТФ. 1997. Т. 67. Вып. 12. С. 70.

- [5] Good B.S., Banerjee A. // J. Phys. Condens. Matter. 1996. Vol. 8. N 8. P. 1325.
- [6] Рехвиашвили С.Ш. // IV Всероссийский симпозиум “Математическое моделирование и компьютерные технологии”. Сб. науч. тр. / Под ред. А.А. Самарского. Кисловодск, 2000. Т. 2. Ч. 1. С. 25.
- [7] Нацик В.Д., Чижко К.А. // ФТТ. 1972. Т. 14. Вып. 11. С. 3126.
- [8] Фридель Ж. Дислокации. М.: Мир, 1967. 49 с.
- [9] Физические величины. Справочник / Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Михайлова. М.: Наука, 1991.
- [10] Регель А.Р., Глазов В.М. Периодический закон и физические свойства электронных расплавов. М.: Наука, 1978.
- [11] Tanaka H. et al. // Thin Solid Films. 1999. Vol. 342. P. 4.
- [12] Carpick R.E., Salmeron M. // Chem. Rev. 1997. Vol. 97. N 4. P. 1163.
- [13] Burnham N.A., Kulik A.J. Surface Forces and Adhesion. Handbook of Micro and Nanotribology. Boca Raton, FL.: CRC Press, 1997. P. 21.