

## Краткие сообщения

01;05

### Моделирование контактной жесткости полусферического островкового включения

© Г.С. Батог, А.С. Батурин, Е.П. Шешин

Московский физико-технический институт (государственный университет),  
141700 Долгопрудный, Московская область, Россия  
e-mail: georgysb@mail.ru

(Поступило в Редакцию 18 января 2007 г.)

С помощью численного моделирования получена модель, выражающая связь контактной жесткости, измеряемой с помощью зондов атомно-силовой микроскопии с постоянным контактным радиусом средстами атомно-силовой акустической микроскопии, с радиусом одиночного полусферического островкового включения и индентационными модулями материалов включения и матрицы. Анализ проводился методом конечных элементов с использованием изотропной модели материалов. Возможная область применения — исследование нанокompозитных материалов.

PACS: 82.37.Gk

#### Введение

В последнее время атомно-силовая микроскопия (АСМ) получила широкое распространение при исследовании свойств поверхностей различных материалов. В настоящее время наиболее распространенной АСМ-методикой для исследования упругих свойств материалов является атомно-силовая акустическая микроскопия (АСАМ) [1,2], позволяющая количественно характеризовать упругие свойства материалов с латеральным разрешением порядка единиц нанометров. Методика заключается в экспериментальном определении контактной жесткости, которая, в свою очередь, определяется по значению резонансной частоты системы кантилевер—образец. Измеренное значение контактной жесткости  $k_{\text{cont}}$  может быть использовано для вычисления индентационного модуля  $M_s$ , характеризующего упругие свойства исследуемого однородного материала

$$k_s = 2M_s a, \quad (1)$$

где  $k_s$  — жесткость исследуемой структуры, выделенная из общей контактной жесткости  $k_{\text{cont}}$ ;  $a$  — контактный радиус [3];

$$k_{\text{cont}}^{-1} = k_{\text{tip}}^{-1} + k_s^{-1}, \quad (2)$$

где  $k_{\text{tip}}$  — жесткость зонда, которая в случае использования обычного „круглого“ зонда [3] определяется следующим образом:

$$k_{\text{tip}} = 2M_{\text{tip}} a, \quad (3)$$

где  $M_{\text{tip}}$  — индентационный модуль материала зонда.

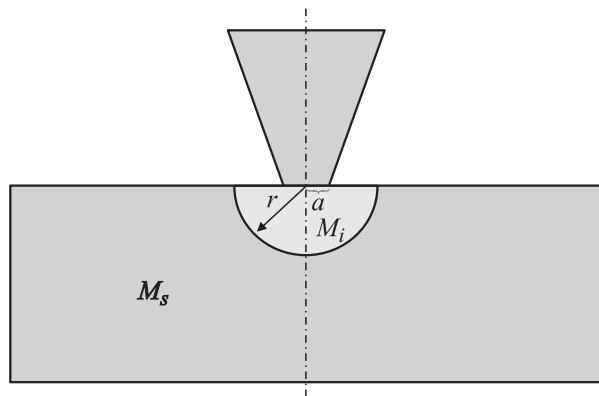
В случае измерения контактной жесткости на каких-либо наноструктурированных объектах, таких как сверхтонкие пленки либо нанокompозиты, становится заметным влияние размеров исследуемых включений на

значение измеряемой жесткости структуры  $k_s$ , что делает простой расчет индентационного модуля  $M_s$  по формуле (1) некорректным.

Как ранее было показано в работе [3], для исследования наноструктурированных материалов, таких как сверхтонкие пленки, необходимо применение особых зондов, обеспечивающих постоянство контактного радиуса. Это обусловлено тем, что глубина проникновения механического напряжения в исследуемом материале пропорциональна контактному радиусу  $a$ , следовательно, и вклад различных областей исследуемой структуры в жесткость структуры  $k_s$  будет определяться контактным радиусом. При наличии заметной зависимости контактного радиуса от силы прижима зонда и упругих свойств исследуемой поверхности количественный анализ контактной жесткости станет практически невозможным. По тем же причинам это заключение справедливо при количественном исследовании композитных материалов, представляющих собой островковые включения одного материала в матрице из другого материала.

#### Моделирование островковой структуры

Для изучения влияния параметров островковой структуры на значение ее эффективного индентационного модуля  $M_{\text{eff}}$  было проведено численное моделирование одиночного включения в бесконечно протяженной подложке методом конечных элементов в среде ANSYS 8.1. Осесимметричная контактная задача решалась методом штрафных функций [4]. Геометрические параметры подложки и густота расчетной сетки выбирались из соображений минимизации ресурсов, необходимых для множественных расчетов, при сохранении необходимой точности результатов.



**Рис. 1.** Рассматриваемая модель полусферического островкового включения и „плоского“ [3] зонда.

Островковое включение моделировалось полусферой радиуса  $r$  из изотропного материала с индентационным модулем  $M_i$ , внедренной в полупространство из изотропного материала с индентационным модулем  $M_s$  (рис. 1). Зонд моделировался в виде бесконечно жесткого усеченного конуса с контактной площадкой радиуса  $a$ .

Контактная жесткость структуры определялась по смещению зонда под действием вертикально приложенной силы. Жесткость вычислялась как отношение приложенной силы к смещению, что было обусловлено линейной зависимостью смещения от приложенной силы при постоянном контактном радиусе. По полученному значению жесткости с помощью формулы (1) вычислялся эффективный индентационный модуль данной островковой структуры  $M_{\text{eff}}$  при различных сочетаниях значений радиуса включения  $r$  и индентационных модулей материала включения  $M_i$  и материала матрицы  $M_s$ .

Погрешность полученных в процессе моделирования значений жесткости островковой структуры, обусловленная конечным размером как отдельных элементов расчетной сетки, так и всей моделируемой области, составила менее 1%. Она определялась как отклонение полученного эффективного индентационного модуля  $M_{\text{eff}}$  от значения индентационного модуля материала включения  $M_i$  при условии  $M_i = M_s$ .

### Анализ результатов моделирования

Результаты проведенного численного моделирования сведены в семейство сеточных функций (рис. 2). Несмотря на тот факт, что моделирование было проведено для ограниченного числа сочетаний геометрических параметров и механических свойств материалов островковой структуры, универсальные безразмерные координаты, в которых приведены результаты моделирования, позволяют анализировать островковые структуры практически с любыми сочетаниями параметров.

На рис. 2 приведены также аппроксимационные кривые, определяемые следующим аналитическим выраже-

нием:

$$\frac{M_{\text{eff}}}{M_i} = \left( 1 + \gamma \left( \frac{M_i}{M_s} \right) \frac{M_i a}{M_s r} \right)^{-1}, \quad (4)$$

где

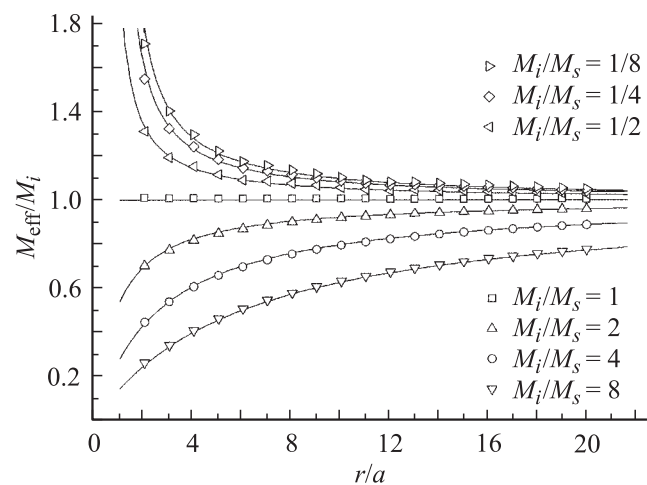
$$\gamma(\xi) = \begin{cases} 0.85 \frac{\xi - 1}{\xi}, & \text{при } \xi > 1; \\ \frac{\xi - 1}{\xi}, & \text{при } \xi < 1. \end{cases} \quad (5)$$

Данная формула выведена из предположения, что жесткость рассматриваемой островковой структуры последовательно складывается из жесткости взаимодействия зонда с материалом островка (1) и жесткости взаимодействия самого островка как целого с материалом матрицы. В последнем случае в роли контактного радиуса выступает радиус островка  $r$  с поправочным множителем  $1/\gamma$ , являющимся функцией отношения индентационных модулей материалов островка и матрицы  $M_i/M_s$  (5).

Используя полученное выражение, можно с хорошей точностью находить эффективный индентационный модуль данной структуры по геометрическим параметрам и упругим свойствам материалов исследуемой структуры, а также решать обратную практическую задачу нахождения одного неизвестного параметра данной структуры по значению эффективного модуля, определяемого экспериментально, например с помощью атомно-силовой акустической микроскопии.

### Заключение

На основании результатов проведенного численного моделирования построена количественная модель зависимости контактной жесткости, измеряемой АСАМ, от размеров включения и упругих свойств материалов включения и матрицы.



**Рис. 2.** Зависимость модуля  $M_{\text{eff}}$  островковой структуры, нормированного на  $M_i$ , от радиуса включения  $r$ , нормированного на контактный радиус  $a$ . Результаты численного моделирования (значки) и аппроксимационные кривые (сплошные линии).

Данная модель является предельно упрощенной и не претендует на исчерпывающее описание механических свойств нанокompозитных структур в связи с тем, что моделирует одиночное включение и не учитывает, например, влияние соседних включений, анизотропию упругих свойств материала, структурные дефекты и влияние поверхностной энергии наноразмерных включений на их объемные механические свойства. В связи с этим разработанная модель скорее предназначена для оценки влияния подобных факторов на механические свойства структур по степени отклонения получаемых экспериментальных результатов от идеализированной модели.

Работа выполнена в УЦН „Нанотехнологии в электронике“ при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (грант РНП.2.1.9353).

### Список литературы

- [1] *Rabe U., Amelio S., Kester E. et al. // Ultrasonics. 2000. Vol. 38. P. 430–437.*
- [2] *Hurley E.C., Shen K., Jennett N.M. et al. // J. Appl. Phys. 2003. Vol. 94. P. 2347–2354.*
- [3] *Батог Г.С., Батурич А.С. и др. // ЖТФ. 2006. Т. 76. Вып. 8. С. 124–129.*
- [4] *Федоренко Р.П. Введение в вычислительную физику. М.: Изд-во МФТИ, 1994. 528 с.*