

05;11

## **Тепловой нагрев и диссипативные потери механической энергии зонда сканирующего микроскопа в динамическом контакте с поверхностью**

© Г.В. Дедков, Е.Г. Дедкова

Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик  
E-mail: gv dedkov@mail.ru

*Поступило в Редакцию 3 сентября 2003 г.*

Проведены расчеты теплового нагрева и диссипативных потерь механической энергии зонда сканирующего микроскопа в динамическом контакте с плоской поверхностью при малом различии температур между ними. Рассчитан ход температуры зонда в зависимости от времени. Показано, что средняя по периоду колебаний мощность теплового нагрева (охлаждения) нанозонда, обусловленная ближним флуктуационно-электромагнитным полем, значительно превышает мощность механических потерь даже при небольшой локальной вариации температуры на поверхности образца. Поэтому тепловой нагрев способен стимулировать дополнительные механизмы демпфирования. Это может объяснить наблюдаемое расхождение теоретических и экспериментальных значений диссипативных сил.

Кинетика теплообмена в контакте иглы сканирующего зондового микроскопа (СЗМ) с поверхностью образца является одним из важнейших факторов, знание которых необходимо для развития и интерпретации данных, получаемых методами СЗМ. Особый интерес представляет развитие методов термической зондовой микроскопии поверхности [1,2] и спектроскопии диссипативных сил [3–5]. Нерешенной до настоящего времени проблемой остается теоретическая интерпретация наблюдаемых диссипативных потерь энергии осциллятора СЗМ в бесконтактном динамическом режиме постоянной амплитуды, когда исключены явления адгезионного гистерезиса [3,4]. В этом случае основную роль играет флуктуационно-электромагнитное взаимодействие зонда с поверхностью, но, как показали теоретические оценки [6,7], вычисленные диссипативные потери механической энергии кантилевера оказываются

на 3–11 порядков величины меньше наблюдаемых для контактов кремний–слюда и алюминий–золото соответственно. Однако недавно мы обратили внимание на оставшуюся в тени важную особенность флуктуационно-электромагнитного взаимодействия [8]: при малом расстоянии частицы от поверхности даже при небольшом различии температуры ( $\Delta T \ll 1$  К) между ними возникает интенсивный тепловой поток, обусловленный туннелированием „нерadiационных“ фотонов, принадлежащих модам флуктуационного электромагнитного поля. Причем отношение усредненной (по периоду колебаний) мощности диссипации механической энергии к скорости теплообмена имеет порядок величины  $f^2/f_W^2$ , где  $f$  и  $f_W$  — частота колебаний зонда и частота Вина. При комнатной температуре  $f_W = kT/h = 3.9 \cdot 10^{13}$  Hz, а типичное значение  $f$  равно  $3 \cdot 10^5$  Hz, поэтому  $f^2/f_W^2 \sim 10^{-16}$ , и в типичной для СЗМ ситуации не зависящий от скорости зонда вклад в тепловой поток, пропорциональный  $\Delta T$ , превалирует над динамическим вкладом, не зависящим от  $\Delta T$ . Поскольку наличие на поверхности образца локальных вариаций температуры на уровне  $1 \div 100$  mK представляется весьма вероятным даже при общем условии изотермичности системы, то возникающий поток тепла может инициировать дополнительные механизмы диссипативных потерь, например путем активации процессов электронного и атомного обмена, перестройки атомной и электронной структуры, фононных возбуждений или (и) изменения внутреннего затухания кантилевера. Заметим, что такие механизмы могут „включаться“ безотносительно к знаку  $\Delta T$ . Целью данной работы является расчет диссипативных потерь и теплового нагрева (охлаждения) зонда СЗМ в целом, а также кинетики установления теплового равновесия при его динамическом контакте с образцом. Если тепловой поток инициирует диссипацию механической энергии и изменение добротности осциллятора СЗМ, то проведение соответствующих измерений может лечь в основу создания бесконтактной термодпары, позволяющей определять локальное поле температуры на поверхности образца в динамическом режиме с разрешением  $\sim 1$  mK по амплитуде и  $\sim 1$  nm по пространственным координатам.

Для проведения теоретических оценок в рамках теории [6,7] необходимо знать свойства контактирующих материалов, которые вводятся с помощью функций диэлектрического отклика

$$\Delta_{1,2}(\omega) = (\varepsilon_{1,2}(\omega) - 1) / (\varepsilon_{1,2}(\omega) + q_{1,2}), \quad (1)$$

где индексы (1) и (2) относятся к зонду и поверхности соответственно,  $q_1 = 2$ ,  $q_2 = 1$ ,  $\varepsilon_{1,2}(\omega)$  — динамические проницаемости материалов. При учете пространственной дисперсии  $\Delta_2(\omega)$  заменяется на

$$\Delta_2(\omega, \mathbf{q}) = \frac{\pi - qI_0}{\pi + qI_0}, \quad I_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_z}{(k_z^2 + q^2)\varepsilon(\omega, \mathbf{k})}, \quad (2)$$

где  $\mathbf{k} = (\mathbf{q}, k_z)$ ,  $\mathbf{q}$  — двумерный волновой вектор в плоскости поверхности образца,  $k_z$  — перпендикулярная к поверхности компонента волнового вектора. В данной работе в целях упрощения диэлектрическая функция  $\varepsilon(\omega, \mathbf{k})$  материалов зонда и образца принимается одинаковой и имеет вид [6,7]

$$\varepsilon(\omega, \mathbf{k}) = 1 + \frac{\omega_p^2}{V_F^2 k^2 [1 - i\pi\omega\theta(2k_F - k)/2kV_F]/3 - \omega(\omega + i\gamma)}, \quad (3)$$

где  $\theta(x)$  — единичная функция Хевисайда,  $V_F$  и  $k_F$  — скорость и волновой вектор Ферми,  $\omega_p$  — плазменная частота,  $\gamma = \omega_p^2/4\pi\sigma$  — фактор затухания плазменных мод,  $\sigma$  — проводимость на постоянном токе. Формула (3) учитывает пространственную дисперсию плазмонов и затухание из-за электрон-дырочных возбуждений (слагаемое с  $\theta(x)$  в знаменателе), а также затухание коллективных (плазменных) мод. Нетрудно видеть, что в низкочастотном приближении без учета пространственной дисперсии (ПД) формула (3) сводится к простейшему виду

$$\varepsilon(\omega) = 1 + 4\pi\sigma i/\omega. \quad (4)$$

Ограничиваясь нерелятивистским приближением [6,7] с использованием формул (1)–(4) и предполагая, что температуры зонда и образца равны  $T + \Delta T$  и  $T$  соответственно, для потока тепла зонд–поверхность и диссипативной силы на зонде — малой сферической частице радиуса  $R$  получим

$$\begin{aligned} \dot{Q} = & - \frac{9\xi(4)}{2\pi^3} \frac{R^3}{z_0^3} \frac{\hbar}{\sigma^2} \left( \frac{k_B T}{\hbar} \right)^4 \frac{\Delta T}{T} F_1(\lambda/z_0, k_{TF} \cdot z_0) \\ & + \frac{3\xi(2)R^3 \hbar V^2}{128\pi^3 z_0^3 \sigma^2} \left( \frac{k_B T}{\hbar} \right)^2 F_2(\lambda/z_0, k_{TF} \cdot z_0), \end{aligned} \quad (5)$$

$$F_1(x, y) = \int_0^{\infty} z^2 e^{-z} dz \frac{1 + \left(\frac{\pi^2}{3}\right)x \cdot z}{\left(1 + \frac{0.75}{y^2} z^2\right)^2} \times \left[ 1 + 0.404x \cdot z - 2.094x \cdot z \cdot \ln\left(\frac{z}{2y}\right) \right], \quad (6)$$

$$F_2(x, y) = \int_0^{\infty} z^4 e^{-z} dz \frac{1 + \left(\frac{\pi^2}{3}\right)x \cdot z}{\left(1 + \frac{0.75}{y^2} z^2\right)^2} \times \left[ 1 + 0.404x \cdot z - 2.094x \cdot z \cdot \ln\left(\frac{z}{2y}\right) \right], \quad (7)$$

$$F_d = -\frac{3\chi\xi(2)}{256\pi^3} \frac{\hbar R^3 V}{\sigma^2 z_0^5} \left(\frac{k_B T_2}{\hbar}\right)^2 F_2(\lambda/z_0, k_{TF} \cdot z_0), \quad (8)$$

где  $\lambda = V_F \sigma / \omega_p^2$ ,  $\xi(n)$  — „дзета“-функция Эйлера,  $V$  — скорость частицы,  $z_0$  — расстояние от поверхности,  $\chi$  — числовой фактор порядка 1, зависящий от направления движения. При параллельном к поверхности движению  $\chi = 1$ , а при перпендикулярном соответственно  $\chi \approx 2 \div 4$ . Без учета пространственной дисперсии (ПД) в (6), (7) нужно положить  $x = y \rightarrow \infty$ , и тогда  $F_1(0, \infty) = 2$ ,  $F_2(0, \infty) = 24$ . Принимая гармоническое приближение для колебаний кантилевера в экспериментах [3,4] ( $A$  и  $f$  — амплитуда и частота колебаний)

$$z(t) = A \cos(2\pi f t),$$

$$V = \dot{z}(t) = -2A\pi f \sin(2\pi f t), \quad (9)$$

найдем усредненные по периоду движения мощности диссипации механической энергии  $\bar{P}$  и тепловой поток  $d\bar{Q}/dt$ :

$$\bar{P} = f \int_0^{1/f} |F_d(z(t), \dot{z}(t), d) \cdot \dot{z}(t)| dt, \quad (10)$$

$$\frac{d\bar{Q}}{dt} = f \int_0^{1/f} \dot{Q}(z(t), \dot{z}(t), d) dt. \quad (11)$$

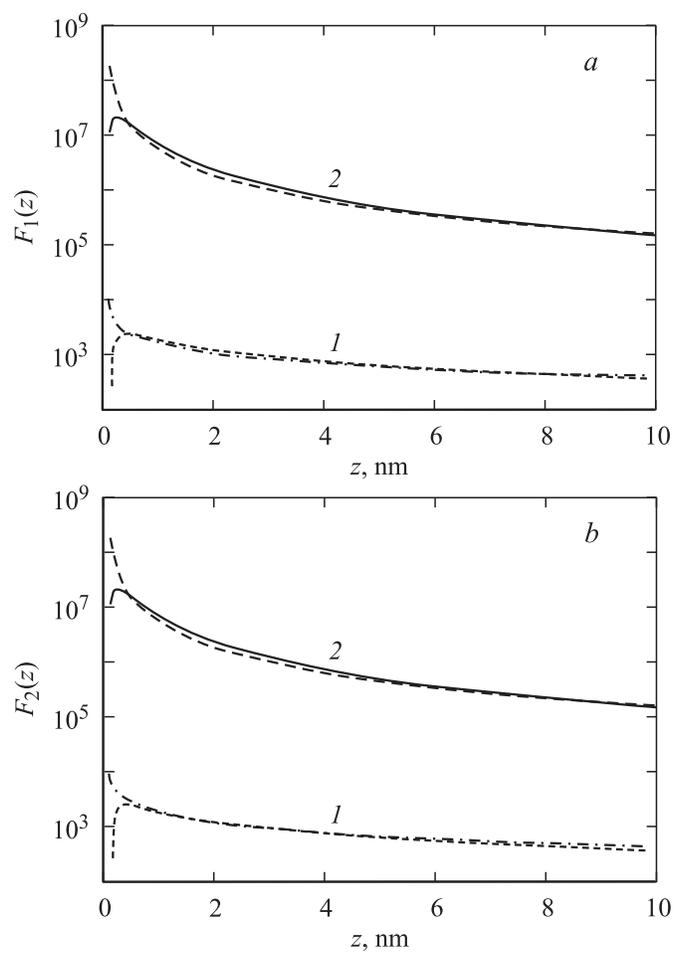
В случае нанозонда параболического сечения с радиусом кривизны  $R$ , материал которого характеризуется диэлектрической функцией (4), подставляя (5) и (8) в (10), (11) и учитывая (9), после интегрирования по объему зонда и усреднения по периоду колебаний получим ( $d$  — начальное расстояние апекса зонда от поверхности,  $d < A$ )

$$\bar{P}(A, d) = -\frac{9\xi(2)\hbar R}{32\pi} \frac{A^2 f^2}{(d^2 - A^2)^{3/2}} \left(\frac{k_B T}{\hbar\sigma}\right)^2, \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{Q}}{dt} &= \frac{27\hbar R}{4\pi^3(d^2 - A^2)^{1/2}} \left(\frac{k_B T}{\hbar\sigma}\right)^2 \\ &\times \left(-\xi(4)\frac{\Delta T}{T}(k_B T/\hbar)^2 + \frac{\pi^2 A^2 \xi(2)}{48(d^2 - A^2)} f^2\right). \end{aligned} \quad (13)$$

Для расчета потери механической энергии (притока тепла) за один период колебаний правые части формул (12) и (13) нужно разделить на частоту  $f$ .

Сравнение величины  $\bar{P}$  и динамического вклада в  $d\bar{Q}/dt$ , пропорционального  $f^2$ , показывает, что они практически одинаковы (отличаясь коэффициентом 1/2). Для условий [4] (динамический контакт алюминиевого зонда с поверхностью (111) золота) из (12), (13) следует, что при  $d - A = z_{\min} = 0.5 \text{ nm}$   $\bar{P} = 4.2 \cdot 10^{-30} \text{ W}$ , а это на 17 порядков меньше, чем следует из эксперимента [4]. Но наряду с этим не зависящий от скорости зонда вклад в тепловой поток (первый член (13)) оказывается на много порядков величины больше даже при небольшой разности температур  $\Delta T$ :  $d\bar{Q}/dt = 2.4 \cdot 10^{-16} \Delta T \text{ W}$ . Отметим также сильную зависимость  $\bar{P}$  и  $d\bar{Q}/dt$  от проводимости материалов: для плохих проводников ( $\sigma \sim 10^{10} \text{ s}^{-1}$ ) обе оценки могут возрасти на  $\sim 14$  порядков величины по сравнению со случаем нормальных металлов ( $\sigma \sim 10^{17} \text{ s}^{-1}$ ). Однако для нормальных металлов расчеты должны основываться на использовании диэлектрических функций более общего вида (3), учитывающих ПД. В этом случае  $\bar{P}$  и  $d\bar{Q}/dt$  находились численным путем, поскольку до подстановки в (12), (13) формулы (5) и (8) необходимо дополнительно проинтегрировать по объему зонда. Тем не менее некоторые выводы общего характера очевидны уже после вычисления функций (6), (7). Так, на рис. 1, *a* и *b* соответственно показаны зависимости  $F_1(x, y)$  и  $F_2(x, y)$  от расстояния  $z$ , рассчитанные для контакта алюминий–алюминий. Кривые (*I*)



**Рис. 1.** Зависимости  $F_1(z)$  (a) и  $F_2(z)$  (b) для контакта алюминий–алюминий. Линии (1) и (2) соответствуют учету пространственной дисперсии только для образца (1) и для зонда и образца (2) соответственно. Пунктирные и штрих-пунктирные линии — результаты аналитической аппроксимации:  $5 \cdot 10^6/z^{1.5}$ ,  $1600/z^{0.6}$  в случае (a) и  $1.1 \cdot 10^8/z^{1.1}$ ,  $6 \cdot 10^4/z^{0.5}$  — в случае (b).

соответствуют учету ПД только для образца, а кривые (2) — для образца и зонда одновременно. Как вытекает из расчетов, при учете ПД величина диссипативных сил и теплового потока возрастает на 3–8 порядков величины. Для условий [4] численные расчеты дают  $\bar{P} = 5.7 \cdot 10^{-24} \text{ W}$  и  $d\bar{Q}/dt = 2.2 \cdot 10^{-9} \cdot \Delta T \text{ W}$  (с полным учетом ПД). Соответственно за один цикл колебаний зонд может получить (потерять) порцию тепла  $\Delta\bar{Q} = 5.1 \cdot 10^4 \Delta T \text{ eV}$ . Для сравнения заметим, что механическая энергия кантилевера с жесткостью  $40 \text{ N/m}$  и амплитудой колебаний  $20 \text{ nm}$  составляет  $5 \cdot 10^4 \text{ eV}$ , а потеря механической энергии вследствие внутреннего затухания кантилевера —  $1 \div 30 \text{ eV}$  за один период. Поэтому наличие столь большого теплового потока между зондом и образцом приводит к необходимости более детального исследования кинетики установления теплового равновесия между ними.

Проведем упрощенное решение этой задачи, рассматривая зонд как полубесконечный стержень, к концу которого (обращенному к поверхности) подводится сосредоточенный тепловой поток  $\dot{Q} = -\alpha\Delta T$ . Для определенности предполагаем, что  $\Delta T < 0$ , т.е. поверхность нагрета сильнее. Такое приближение оправдано, поскольку тепловой поток быстро убывает с увеличением расстояния от поверхности, а вертикальный размер области максимального нагрева (несколько нанометров) существенно меньше высоты иглы СЗМ ( $1 \div 10 \mu\text{m}$ ). Кроме того, мощность нагрева можно заменить средней по периоду колебаний величиной, поскольку время установления теплового равновесия значительно больше периода колебаний. Тогда распределение температуры вдоль зонда будет определяться уравнением теплопроводности с граничным условием 3-го рода

$$\begin{cases} \frac{\partial T}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}, \\ \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z \rightarrow 0} = h(T(0, t) - T_0 - \Delta T), \quad T(z, 0) = T_0, \\ 0 < t < \infty, \quad 0 < z < \infty, \end{cases} \quad (14)$$

где  $a^2$  — коэффициент температуропроводности,  $h$  — параметр теплообмена с поверхностью,  $T_0$  — начальная температура зонда. Общее

решение уравнения (14) удобно представить в виде

$$f(z, t) \equiv (T(z, t) - T_0)/\Delta T \\ = \operatorname{erfc}\left(\frac{z}{2a\sqrt{t}}\right) - \exp(zh + a^2h^2t) \operatorname{erfc}\left(\frac{z}{2a\sqrt{t}} + ah\sqrt{t}\right), \quad (15)$$

где  $\operatorname{erfc}(x)$  — дополнительная функция ошибок. Из (15) следует, что кинетика нагрева зонда определяется безразмерными параметрами  $\beta = ah\sqrt{t}$  и  $\gamma = z/2a\sqrt{t}$ . В точке апекса зонда ( $z = 0$ ) зависимость температуры от времени выражается более простой формулой

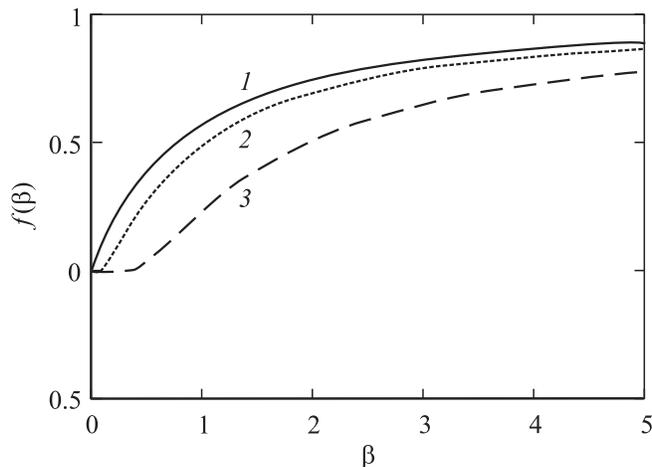
$$f(0, t) = 1 - \exp(\beta^2)\operatorname{erfc}(\beta). \quad (16)$$

Как вытекает из предыдущего, константа  $\alpha$  в выражении для результирующего теплового потока на зонд ( $\bar{Q} = -\alpha\Delta T$ ) может составлять  $\sim 10^{-9}$  W/K. Пусть  $d - A = z_0$  есть минимальное расстояние апекса зонда от поверхности. Так как  $\bar{Q}$  быстро убывает с возрастанием  $z_0$ , то эффективную площадь нагреваемой поверхности зонда параболической формы можно оценить как  $\Delta S = \pi\rho^2 = 2\pi RH_{eff}$ ,  $H_{eff} \approx 10z_0$ . Тогда  $\Delta S \approx 20\pi Rz_0$  и соответственно

$$h = \frac{\alpha}{a^2 \cdot C_p \cdot \rho \cdot \Delta S} \approx \frac{\alpha}{20\pi Rz_0 a^2 C_p \cdot \rho}. \quad (17)$$

При  $z_0 = 0.5$  nm,  $R = 35$  nm,  $\alpha = 10^{-9}$  W/K и параметрах алюминия ( $C_p = 858$  J/kg · K,  $\rho = 2700$  kg/m<sup>3</sup>,  $a^2 = 10^{-4}$  m<sup>2</sup>/s) из (17) получим  $h = 3.9 \cdot 10^3$  m<sup>-1</sup>.

На рис. 2 показана зависимость  $f(z, t)$  от времени в разных сечениях зонда. Видно, что выравнивание температур зонда и поверхности происходит достаточно медленно и даже при  $\beta = 2-5$  теплового равновесия еще нет, поэтому нагрев апекса зонда остается значительным в течение всего времени близкого динамического контакта (времени накопления сигнала в одной точке сканирования). В частности, например,  $f(0.2) = 0.75$  и, следовательно, мощность нагрева еще составляет 25% от начальной, а соответствующее время нагрева равно  $t_0 = \beta^2/a^2h^2 = 0.0026$  s (если  $a$  и  $h$  относятся к алюминию). Эта оценка подтверждает вывод о том, что время установления теплового равновесия значительно больше периода механических колебаний зонда ( $3 \cdot 10^{-6}$  s).



**Рис. 2.** Зависимости распределения температуры зонда от времени в различных сечениях;  $\beta = ah\sqrt{t}$ . Кривые 1–3 соответствуют значениям  $\gamma = zh/2 = 0, 0.1, 0.5$ .

Поскольку время установления теплового равновесия зонда с поверхностью в фиксированной точке сканирования зависит от скорости нагрева и от  $h$  как  $t \sim h^{-2}$ , то при большей скорости теплообмена тепловое равновесие достигается быстрее. По мере приближения к равновесию механизмы „термоиндуцированного“ трения будут становиться менее эффективными, поэтому демпфирование осциллятора СЗМ должно уменьшаться. Следовательно, кинетика установления теплового равновесия может контролироваться по временному увеличению добротности осциллятора, находящегося в динамическом контакте с поверхностью.

## Список литературы

- [1] *Majumdar A., Carrejo J.P., Lai J.* // *Appl. Phys. Lett.* 1993. V. 62. N 20. P. 2501.
- [2] *Xu J.B., Lauger K., Dransfeld K., Wilson I.H.* // *Rev. Sci. Instrum.* 1994. V. 65. N 7. P. 2262.
- [3] *Gotsmann B., Seidel C., Anczykowski B., Fuchs H.* // *Phys. Rev.* 1999. V. B60. N 15. P. 11051.

- [4] *Gotsmann B., Fuchs H.* // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 86. N 12. P. 1872.
- [5] *Gotsmann B., Fuchs H.* // Appl. Surf. Sci. 2002. V. 188. P. 355.
- [6] *Дедков Г.В., Кясов А.А.* // ФТТ. 2002. Т. 44. № 10. С. 1729.
- [7] *Dedkov G.V., Kyasov A.A.* // Phys. Low-Dim. Structures. 2003. V. 1/2. P. 1.
- [8] *Dedkov G.V., Dedkova E.G.* // Scanning Probe Microscopy-2003. Proceedings. Nizhny Novgorod. March 2-5, 2003. P. 255.