

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СКАНИРОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТИ (100)-ОЦК-Fe С ВАКАНСИЯМИ В АТОМНО-СИЛОВОМ МИКРОСКОПЕ

© *А.В.Покропивный, В.В.Покропивный, В.В.Скороход*

Атомно-силовая микроскопия (АСМ) является одним из наиболее эффективных методов для исследования дефектной структуры поверхностей с атомным разрешением. В работах Панова и других [1-4] впервые разработана методика определения констант межатомного взаимодействия [1], энергии миграции вакансий [2] и диагностики точечных дефектов [3], ступенек [4] и т. п. с помощью АСМ совместно с привлечением модельных представлений о межатомных взаимодействиях острия с поверхностью. При этом для упрощения и решения задачи в аналитическом виде применялись парный межатомный потенциал Ленарда-Джонса и модель острия в виде параболоида вращения. Однако точность расчетов невелика вследствие того, что: а) не контролируется радиус действия межатомных сил и б) не учитывается релаксация поверхности образца и острия.

Можно предположить, что для точного расчета силы взаимодействия острия с поверхностью наиболее подходящей является методика компьютерного моделирования. Задание реалистического межатомного потенциала, контролируемая геометрия острия и структуры поверхности вместе с процедурой динамической релаксации позволят более точ-

но выделить взаимодействия, попадающие в сферу действия потенциала, вычислить длину, энергию и силу межатомных взаимодействий острия с поверхностью, а в итоге — рассчитать линию постоянной силы F_0 и атомную структуру контактной области. Реализация этой идеи и демонстрация первых результатов и составляют цель работы.

Компьютерное моделирование контактных явлений при взаимодействии острия с поверхностью начато в работах Саттона и др. [5,6]. Обнаружено, что система острие-подложка становится механически нестабильной на некотором критическом расстоянии, вследствие чего проводимость увеличивается скачком. Использовался дальнедействующий N -частичный межатомный потенциал [7] с радиусом действия, включающим 8 координационных сфер (140 атомов). Все дальнедействующие потенциалы, однако, обладают рядом недостатков, а именно: неудовлетворительной сходимостью, вызывающей нефизические сингулярности, и неэффективным расходом процессорного времени. Кроме того, Меркл и Вольф, наблюдая структуру контактирующих поверхностей в электронном микроскопе высокого разрешения, сделали вывод о том, что релаксация в области границ зерен определяется короткодействующей природой межатомных взаимодействий [8]. Это служит обоснованием для применения в компьютерных экспериментах короткодействующих потенциалов.

В данной работе для расчета взаимодействия острия АСМ с поверхностью применен стандартный метод молекулярной динамики. Для упрощения в качестве материала острия АСМ и исследуемой поверхности выбрано ОЦК-железо. Использовался надежно зарекомендовавший себя парный межатомный потенциал Джонсона, подогнанный под упругие модули, энергию образования вакансии и постоянную решетки [9]. Острие АСМ моделировалось в виде параболоида вращения — из объемно центрированной кристаллической (ОЦК) решетки вырезались все атомы, попадающие в объем, ограниченный поверхностью $y = [(x - x_0)^2 + z^2]/2R$, где R — радиус округления острия. Подложка моделировалась в виде кристаллита в форме параллелепипеда. Для придания жесткости верхние атомы острия, а также боковые и нижние атомы подложки из динамической релаксации исключались. Изображение плоского среза из двух поверхностей (010) с $z = 0$ и $z = 0.5A$ (A — постоянная ОЦК-решетки) выводилось программой визуализации на экран компьютера. Для моделирования процесса сканирования острия АСМ и расчета изосиловых линий разработана специальная программа. После смещения из начального положения x_0 на шаг $dx \simeq 0.25 A$ вдоль атомного ряда по оси X выполнялась релаксация и рассчитывались

число, энергия и сила взаимодействия межатомных связей между острием и поверхностью, попадающих в сферу действия потенциала $r_k = 1.2 \text{ \AA}$, учитывающую две координационные сферы. Их сумма дает силу взаимодействия острия с поверхностью

$$F_{ts} = - \sum_i \sum_j d\varphi(r_{ij})/dr_{ij},$$

где $\varphi(r_{ij})$ — потенциал взаимодействия между атомами поверхности i и атомами острия j . Далее все атомы острия смещались с шагом $dy \simeq 0.01 \text{ \AA}$ по оси Y , перпендикулярной плоскости поверхности. Методом градиентного спуска искалось конечное положение, при котором упругая сила отталкивания поверхности уравнивала бы задаваемую исходную силу давления острия $F_{ts} = F_0$. Затем изображается отрезок изосиловой линии $F_0 = \text{const}$ между начальным и конечным положением, релаксированная атомная структура и расчет повторяется. В итоге сканирование острия АСМ представляется на экране компьютера в виде мультфильма. Программы написаны на языке MS-Fortran 5.0 с использованием графического пакета на языке СИ.

В тестовых расчетах была установлена сильная зависимость результатов от критерия останова релаксационной процедуры по остаточной кинетической энергии кристаллита на атом W . При $W > 10^{-2} \text{ эВ}$ атомы острия и поверхности не релаксируют, но взаимодействуют между собой и вносят вклад в силу F_{ts} . При $W < 10^{-2} \text{ эВ}$ релаксация атомов в области контакта вызывает дополнительные эффекты взаимодействия.

Рассмотрим сначала результаты без учета релаксации. Этот режим характерен для твердого острия. На рис. 1, а показаны линии постоянной силы над идеальной поверхностью. Здесь и далее темными и светлыми кружками показаны динамические атомы в плоскостях $z = 0$ и $z = 0.5 \text{ \AA}$ соответственно, а квадратиками — вакансии. Видно, что атомно-острая игла с одним атомом на кончике будет чувствовать атомные неровности даже на идеальной поверхности. Как и должно быть, изосиловая линия $F_0 = 20 \text{ эВ/нм}$ проходит выше, чем $F_0 = 220 \text{ эВ/нм}$.

На рис. 1, б, в показан изосиловой рельеф над вакансией и бивакансией. Линии постоянной силы идентичны полученным в работе [3] аналитически, без учета релаксации, тем самым подтверждая высказанную авторами [3] идею о возможности регистрации точечных дефектов методом АСМ. Однако это справедливо только для атомно-острого острия радиусом $R = 0.5 \text{ \AA}$ с одним атомом на кончике. Для острия с четырьмя атомами на кончике радиусом $R = 1.7 \text{ \AA} \simeq 0.5 \text{ нм}$,

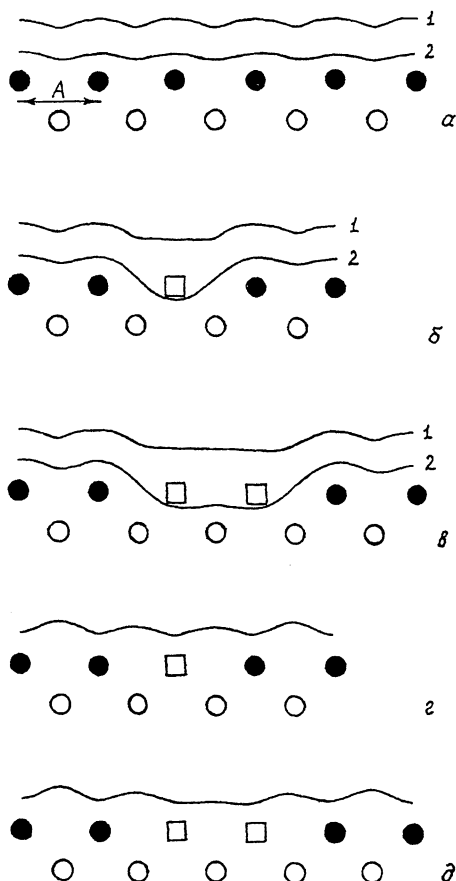


Рис. 1. Линии постоянной силы (1 — $F_0 = 20 \text{ эВ/нм}$; 2 — $F_0 = 220 \text{ эВ/нм}$), рассчитанные без учета релаксации твердого острья: с радиусом $R = 0.5 \text{ \AA}$ ($A = 0.286 \text{ нм}$) над: а — идеальной поверхностью (001); б — вакансией; в — бивакансией; с радиусом $R = 1.7 \text{ \AA}$ над; г — вакансией; д — бивакансией.

превышающим размер вакансии, изосиловая линия уже не чувствует присутствия вакансии, $R > 1 \text{ \AA}$ (рис. 1, г), но чувствует бивакансию, $R < 2 \text{ \AA}$ (рис. 1, в). При этом в отличие от атомно-острого острья минимумы изосиловой линии расположены не в лунках между атомами, а над атомами. Изосиловая линия для плоской тривакансии и атомная структура острья с $R = 0.5 \text{ \AA}$ показана на рис. 2, а, представляющем собой фрагмент черно-белой распечатки с дисплея. В отличие от бивакансии на рис. 1, в яма на изосиловой линии более глубокая.

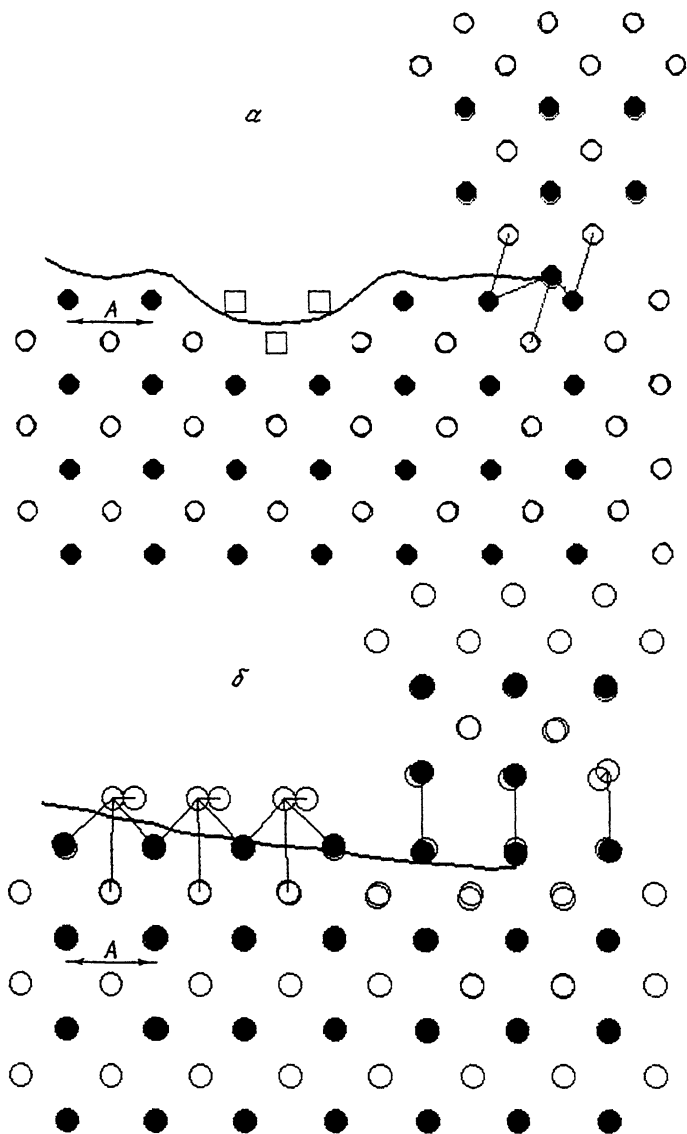


Рис. 2. Изосиловая линия $F_0 = 220 \text{ эВ/нм}$ плоской тривакансии и стабильная атомная структура острья с радиусом $R = 0.5 \text{ \AA}$ (а). Атомный механизм прилипания и отрыва атомов, полученный с учетом релаксации мягкого острья ($F_0 = 20 \text{ эВ/нм}$, $R = 0.5 \text{ \AA}$) (б). Отрезками показаны активные парные связи между атомами острья и подложки, дающие вклад в силу взаимодействия F_{ts} . Светлый кружок под другим показывает стартовое положение атома до релаксации.

Из этих результатов следуют практические выводы: 1) чувствительность АСМ возрастает с увеличением значения постоянной силы F_0 ; 2) разрешающая способность увеличивается с уменьшением радиуса округления острия, причем предел разрешения АСМ больше радиуса иглы $\Delta L > R$.

Рассмотрим теперь, что нового дает учет релаксации. Этот случай характерен для мягкого острия и малых скоростей сканирования. Взаимодействие острия с поверхностью резко уменьшает силу F_{ts} , поскольку к силам отталкивания добавляются силы притяжения новых парных связей, которые возникают вследствие релаксации и подстроечного смещения ближайших атомов острия в направлении к подложке. Изосиловая линия $F_0 = 0$ с релаксацией над идеальной поверхностью почти не отличается от представленной на рис. 1, а. Однако уже небольшая сила давления острия $F_0 = 20$ эВ/нм вызывает неожиданный, с первого взгляда, эффект схватывания и прилипания атомов и заедания острия (рис. 2, б). В присутствии вакансии этот эффект проявляется более выражено.

Поверхностные атомы подложки вне контактной области выгибаются наружу, а в области контакта — прогибаются внутрь. Начальная структура острия такая же, как и на рис. 2, а. Сначала атом первого слоя, находящийся на кончике острия под давлением $F_0/A^2 \approx 30$ МПа, релаксируя вдоль осей Z и Y , встраивается во второй слой острия, увеличивая его площадь контакта с поверхностью и уменьшая локальное давление втрое. В процессе дальнейшего сканирования острие приближается к поверхности. Вследствие релаксации атомы второго слоя острия выстраиваются над поверхностными лунками, продолжая застройку идеальной решетки подложки (своеобразная эпитаксия). Они прилипают к поверхности, так как их сила притяжения к подложке уже превышает силу притяжения к своим атомам острия. Атомы третьего слоя острия сильно смещены из положений равновесия. Происходит схватывание или заедание острия, а при дальнейшем перемещении — отрыв острия от прилипших к подложке атомов (рис. 2, б). Сила взаимодействия F_{ts} уменьшается на величину сил притяжения оторвавшихся атомов, способствуя дальнейшему скольжению до очередного прилипания. Сила тяги острия периодически возрастает в момент схватывания и резко падает в момент отрыва. Подобное периодическое изменение силы тяги при трении обнаружено экспериментально [10]. В итоге острие стирается.

Фактически это атомный механизм схватывания, заедания и адгезионного изнашивания при трении. Это еще один вид механической неустойчивости острия в контакте с по-

верхностью, наряду с адгезионной лавиной [5,6]. В АСМ этот вредный эффект исключается применением тугоплавкого острья. Особенности взаимодействия атомов в области контакта зависят от соотношения твердости острья и подложки, скорости релаксации и сканирования и нуждаются в дальнейшем изучении.

Полученные результаты показывают эффективность компьютерного моделирования при отработке режимов работы, расшифровке результатов и позволяют надеяться, что компьютерный эксперимент в АСМ займет такую же важную роль, как и в электронной, автоионной микроскопии и в комплексе с натурным экспериментом повысит возможности АСМ при исследовании поверхностей и контактных явлений.

Список литературы

- [1] *Моисеев Ю.Н., Мостепаненко В.М., Панов В.И.* и др. // Письма в ЖТФ. 1989. Т. 15. В. 20. С. 5-10.
- [2] *Благов У.В., Климчицкая Г.Л., Мостепаненко В.М.* и др. // Письма в ЖТФ. 1994. Т. 20. В. 1. С. 71-77.
- [3] *Благов Е.В., Климчицкая Г.Л., Панов В.И.* и др. // Письма в ЖТФ. 1993. Т. 19. В. 8. С. 73-78.
- [4] *Мостепаненко В.М., Панов В.И., Соколов И.Ю.* // Письма в ЖТФ. 1993. Т. 19. В. 8. С. 65-72.
- [5] *Todorov T.N., Sutton A.P.* // Phys. Rev. Letters. 1993. V. 70. N 14. P. 2138-2141.
- [6] *Sutton A.P., Todorov T.N.* // J. Phys. Chem. Sol. 1994. V. 55. N 10. P. 1169-1174.
- [7] *Sutton A.P., Chen J.* // Phil. Mag. Letters. 1990. V. 61. N 3. P. 139-146.
- [8] *Merkle K.L., Wolf D.* // Mat. Sci. Forum. 1993. V. 126-128. P. 65-68.
- [9] *Johnson R.A.* // Phys. Rev. 1964. V. 134A. N 5. P. 1329-1336.
- [10] *Feder H.J., Feder J.* // Phys. Rev. Letters. 1991. V. 66. N 20. P. 2669-2672.

Институт проблем
материаловедения
им. И.Н. Францевича
НАН Украины

Поступило в Редакцию
30 октября 1995 г.