

01;05;11

Адгезионный механизм трения в нанотрибоконтактах

© Г.В. Дедков

Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик

Поступило в Редакцию 8 апреля 1998 г.

Предлагается адгезионный механизм силы трения между острием атомно-силового (фрикционного) микроскопа и поверхностью, согласно которому сила трения определяется энергией разрыва и образования адгезионных связей на дискретном шаге микроскольжения с длиной, близкой к величине атомных радиусов трущихся тел. Рассчитаны зависимости силы трения от радиуса кривизны и расстояния между его вершиной и поверхностью для контактов кремний-кремний и вольфрам-железо.

В настоящее время отсутствует удовлетворительная количественная теория сил адгезионного трения на атомарном уровне (об этом свидетельствуют обзорные работы [1,2]), хотя в этом направлении и достигнут определенный прогресс [3–8]. Теория контактного взаимодействия [9–14], не являющаяся строго атомистической, содержит ряд упрощающих предположений относительно формы зоны контакта, типа адгезионных сил и упругих модулей трибосистемы, взятых из макрофизики, поэтому рассмотрение элементарного акта адгезионного трения для простейшего трибоконтакта, например острия атомно-силового (фрикционного) микроскопа и плоской поверхности, является актуальной задачей.

Основная физическая идея, развиваемая в данной работе, фактически была намечена Тейбором [1]. Каждый элементарный дискретный акт скольжения острия вдоль поверхности сопровождается резким (необратимым) разрывом адгезионных связей между атомами контактирующих тел и, с другой стороны, таким же внезапным образованием новых связей (у последнего процесса есть и название — ”адгезионная лавина” [4]). Атомы, вовлеченные в эти процессы, приходят в колебательное движение, увлекая за собой соседние атомы и передавая им излишек потенциальной энергии, в результате чего, в конечном итоге, и происходит диссипация энергии в тепловой форме.

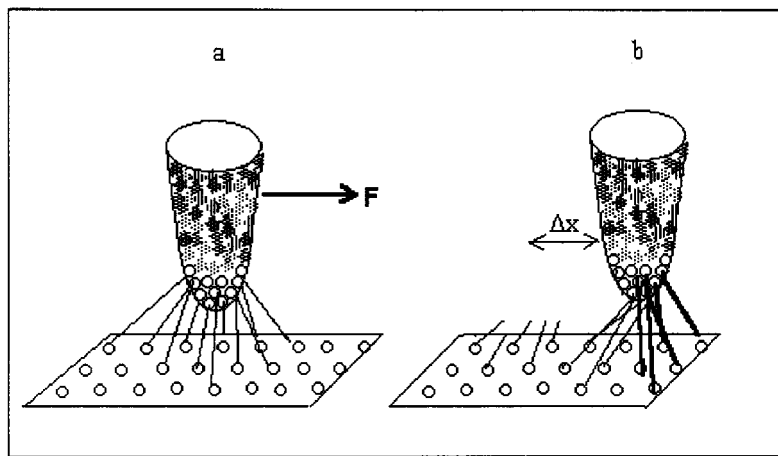


Рис. 1. Иллюстрация механизма адгезионного трения: начальное положение острия (*a*); то же после резкого сдвига на малое расстояние Δx (*b*). Разорванные "старые" адгезионные связи показаны обрывающимися линиями, а вновь возникшие — жирными.

Описанный механизм схематически показан на рис. 1. Первоначальное положение острия (рис. 1, *a*) характеризуется минимумом энергии трибосистемы и наличием установившихся адгезионных связей, некоторые из которых показаны сплошными линиями, соединяющими контактирующие атомы. Если приложенная к острию сила F превышает критическое значение, происходит "микрослип", в результате которого острие сдвигается вправо на расстояние Δx . Характерная величина Δx по порядку величины должна быть равна межатомному расстоянию или периоду решетки, поскольку при бесконечно медленном сдвиге атомная конфигурация острия и участка поверхности в этом случае окажется близкой к исходной, а значит, не изменится и общая энергия системы. Это согласуется с экспериментально наблюдавшимся дискретным характером разрыва адгезионных связей при работе атомно-силового микроскопа [15], а также с геометрической моделью скачкообразного движения острия (в английской терминологии "stick-slip motion") [16]. По существу, аналогичные идеи высказывались еще Дерягиным Б.В. [17].

При резком внезапном смещении острия адгезионные связи не успевают релаксировать, поэтому происходит их разрыв, с одной стороны, и образование новых — с другой. Разорванные связи показаны на рис. 1, *b* оборванными линиями с левой стороны острия, а вновь возникшие — жирными линиями с правой стороны.

Центральным моментом количественной оценки силы трения является расчет энергии оборванных и возникших адгезионных связей. В данной работе предлагается следующая простая формула

$$\Delta W = \sum_k |\Delta w_k|, \quad (1)$$

где Δw_k — изменение энергии k -й связи. Суммирование распространяется на все связи, дающие вклад в полную энергию адгезионного контакта. С учетом (1) для диссипативной силы трения получим

$$F = \Delta W / \Delta x. \quad (2)$$

Сила трения, определяемая формулами (1)–(2), принципиально отличается от ”силы внутреннего трения”, вычисленной в [6–8] через изменение полной энергии: в нашей трактовке последняя близка к нулю. Необратимость элементарного акта скольжения отражена в формуле (1) знаком модуля. При этом изменение энергии у любой адгезионной пары порождает ее диссипацию через колебательное движение атомов контакта. В этой связи теряет значение и введенное авторами [6–8] понятие ”силы внешнего трения”, искусственно определенной как разность тангенциальных составляющих сил, действующих на острие, относящихся к двум последовательным шагам скольжения в процессе моделирования. Такого рода силы не являются диссипативными, поскольку совершаемая ими средняя работа тоже оказывается близкой к нулю.

В пользу предлагаемого механизма свидетельствует также следующее обстоятельство. Предположим, что зона сильного адгезионного контакта имеет площадь A , и пусть, для простоты, контакт образован однородными материалами. Тогда полную энергию адгезии трибосистемы можно записать в виде $W = \gamma A$, где γ — удельная поверхностная энергия. Если происходит внезапное смещение острия, то при полном разрыве старых адгезионных связей и аналогичном числе вновь образованных энергия, трансформирующаяся в хаотическое движение атомов контакта, очевидно, будет приблизительно равна $\Delta W = 2\gamma A$. Тогда,

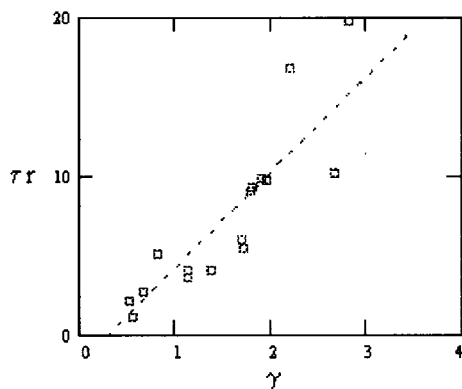


Рис. 2. Корреляция между модулем сдвига τ , поверхностной энергией γ и атомным радиусом r твердых металлов. Значения τr и γ приведены в J/m^2 .

с учетом (1)–(2) и полагая $\Delta x = d$ (d — период решетки), для силы трения получим

$$F = 2\gamma A/d. \quad (3)$$

С другой стороны, еще в пионерской работе Боудена и Тейбора [18] было показано, что в случае металлов адгезионная сила трения равна

$$F = \tau A, \quad (4)$$

где τ — модуль сдвига, а A — площадь реального контакта. Из (3)–(4) следует, что

$$\tau = 2\gamma/d. \quad (5)$$

Наличие этого соотношения представляется не случайным фактом, поскольку числовые значения порядков величин, входящих в (5), внутренне согласованы между собой: $\tau \approx 10^9$ Па, $\gamma \approx 1$ J/m^2 , $d \approx 10^{-9}$ м.

На рис. 2 показана зависимость произведения τr от γ (где r — атомный радиус), построенная для ряда твердых металлов с известными значениями поверхностной энергии и модуля сдвига. Все численные значения были взяты из справочника [19]. Пунктирная прямая получена аппроксимацией экспериментальных точек по методу наименьших квадратов.

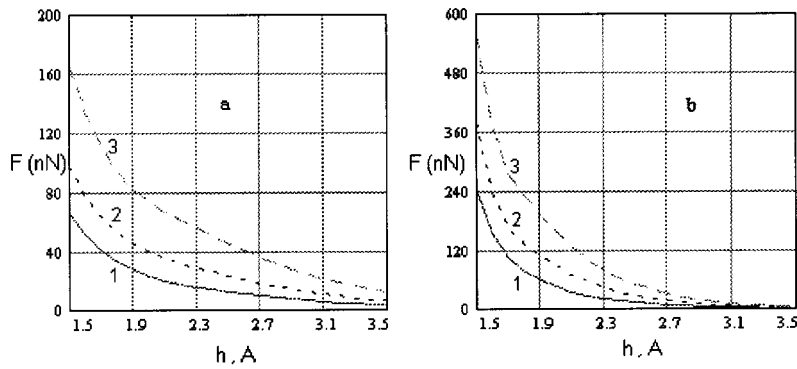


Рис. 3. Зависимость силы трения от радиуса кривизны R и высоты острия h над поверхностью: 1 — $R = 10$ nm, 2 — $R = 20$ nm, 3 — $R = 40$ nm. Острие кремния над условной квадратной решеткой атомов кремния (период 0.206 nm) (а); острие из вольфрама над плоскостью (100) кристалла α — Fe (б). Значения сил приведены в наноньютонах.

Несомненная корреляция, вытекающая из рисунка, подтверждает правильность предлагаемой модели. То, что коэффициент наклона приведенной зависимости несколько выше теоретической величины 4 (вместо d при построении графика использована величина $r = d/2$), можно объяснить тем, что характерная площадь обрыва (образования) адгезионных связей при движении острия должна превышать удвоенное значение площади статического контакта.

Интересно отметить, что, применяя формулу (5) для вычисления модуля сдвига в случае эксперимента [14], в котором измерялись силы трения между кремниевым острием и поверхностью NbSe_2 , получим значения $6.8 \cdot 10^8$ и $5.8 \cdot 10^8$ N/m², соответствующие радиусам острия 12 и 45 nm, если в качестве d взять сумму радиусов Nb и Se, а в качестве γ — энергию адгезии данного контакта. Аналогичные расчеты, сделанные в [14] по достаточно сложной теории [9], дают $6.1 \cdot 10^8$ и $6.6 \cdot 10^8$ N/m². Различие наших значений τ обусловлено разной величиной энергии адгезии γ при разных радиусах острия по данным [14]: 0.099 J/m² и 0.087 J/m², соответственно, для радиусов 12 и 45 nm (в статическом режиме).

Заметим также, что из формул (3)–(5) следует и закон Амонтона для трения макроскопических тел, поскольку реальная площадь контакта пропорциональна величине прижимающей силы [18].

В режиме бесконтактного скольжения острия на расстоянии h от поверхности сила трения должна зависеть от h и от радиуса кривизны R вершины острия. Для нахождения этих зависимостей были проведены прямые расчеты по формулам (1)–(2), результаты которых показаны на рис. 3, a, b в случае трибоконтакта между кремниевым острием и условной квадратной решеткой атомов кремния с периодом 0.207 nm (рис. 3, a), а также для контакта вольфрамового острия с плоскостью (100) кристаллической решетки железа. В обоих случаях форма острия выбиралась в виде параболоида вращения, потенциалы взаимодействия атомов кремния рассчитывались в приближении электронного газа [20], а атомов железа и вольфрама — в аппроксимации Морзе [21]. Для упрощения расчетов (что оправдано при достаточно больших h) атомная структура острия и образца принималась жесткой, без учета релаксации.

Из приведенных рисунков следует, что сила трения приблизительно линейно возрастает с увеличением радиуса кривизны R острия и экспоненциально убывает с ростом h . Линейная зависимость силы трения от радиуса согласуется с экспериментальными данными [14] (ср. рис. 11–12) при близких к нулю значениях прижимающей силы, т. е. в режиме слабого контакта.

Корректные расчеты силы трения в зависимости от величины нагрузки требуют учета релаксации атомной конфигурации в моменты ”прилипания” острия к поверхности.

Рассмотренный механизм можно условно назвать ”статическим”, поскольку сила трения не зависит от скорости острия. В режиме скольжения с постоянной скоростью появляются также и другие эффекты, приводящие (в первом приближении) к силе трения, пропорциональной скорости. Например, передача импульса от острия к поверхности может осуществляться с помощью электромагнитных флуктуаций (аналогично силам Ван-дер-Ваальса) или через фононную подсистему. Эти вопросы требуют специального обсуждения.

Список литературы

- [1] *Тейбор Д.* // Трение и износ. 1994. Т. 15. С. 296–315.
- [2] *Bhushan B., Israelashvili J.N., Landman U.* // Nature. 1995. V. 374. N 3. P. 607–616.
- [3] *Zhong W., Tomanek D.* // Phys. Rev. Lett. 1990. V. 64. N 25. P. 3054–3057.
- [4] *Landman U., Luedtke W.D., Burnham N.A., Colton R.J.* // Science. 1990. V. 248. P. 454–461.
- [5] *Sokoloff J.B.* // Phys. Rev. 1995. V. B52. N 10. P. 7205–7214.
- [6] *Покропивный А.В., Покропивный В.В., Скороход В.В.* // Письма в ЖТФ. 1996. Т. 22. № 2. С. 1–7.
- [7] *Покропивный В.В., Скороход В.В., Покропивный А.В.* // Трение и износ. 1996. Т. 17. № 5. С. 579–588.
- [8] *Pokropivny V.V., Skorohod V.V., Pokropivny A.V.* // Mat. Lett. 1996. V. 31. P. 49–54.
- [9] *Maugis D.* // J. Colloid Interface Sci. 1992. V. 150. P. 243.
- [10] *Carpick R.W., Agrait N., Ogletree D.F., Salmeron M.* // J. Vac. Sci. Technol. 1996. V. B14. P. 1289.
- [11] *Meyer E., Luthi R., Howald L.* // J. Vac. Sci. Technol. 1996. V. B14. P. 1285.
- [12] *Johnson K.L.* // Proc. Roy. Soc. London. 1997. Ser. A453. P. 163.
- [13] *Lantz M.A., O'Shea S.J., Hoole A.C.F., Welland M.E.* // Appl. Phys. Lett. 1997. V. 70. P. 970.
- [14] *Lantz M.A., O'Shea S.J., Welland M.E., Johnson K.L.* // Phys. Rev. 1997. V. B55. P. 10776.
- [15] *Hoh J.H., Cleveland J.P., Prater C.B., Revel J.P., Hansma P.K.* // J. Am. Chem. Soc. 1992. V. 114. P. 4918.
- [16] *Kerssemakers J., De Hosson J.Th.M.* // J. Appl. Phys. 1996. V. 80. N 2. P. 623.
- [17] *Дерягин Б.В.* Что такое трение? М.: Изд. Акад. наук СССР, 1963.
- [18] *Bowden F.P., Tabor D.F.* The Friction and Lubrication of Solids. Clarendon, Oxford, 1950.
- [19] *Физические величины / Справочник под ред. Григорьева И.С. и Михайлова Е.З.* М.: Наука, 1991.
- [20] *Дедков Г.В.* // УФН. 1995. Т. 165. № 8. С. 919–953.
- [21] *Torrens I.M.* Interatomic potentials. N.Y.: Wiley, 1972.