

01;12

## Особенности силовых взаимодействий в бесконтактном режиме атомно-силового микроскопа

© С.Ш. Рехвиашвили

Институт прикладной математики и автоматизации КБНЦ РАН, Нальчик

Поступило в Редакцию 27 декабря 1999 г.

Проведен расчет сил взаимодействия зонда атомно-силового микроскопа с поверхностью твердого тела с учетом вынужденных колебаний кантилевера. В работе применялось континуальное приближение, не учитывающее дискретность структур образца и зонда. Расчеты проводились для различных форм острия. Теоретически показано, что вибрации кантилевера приводят к увеличению силы взаимодействия.

Атомно-силовой микроскоп (АСМ) является одним из наиболее перспективных приборов для измерения ультрамалых сил и нанотехнологии. В настоящее время техника АСМ достигла высокого уровня совершенства и вместе с тем продолжает интенсивно развиваться [1,2]. Основной задачей в практической зондовой микроскопии является повышение разрешающей способности. В современных конструкциях АСМ достигнут уровень разрешения по силе  $\sim 1$  pN и  $\sim 1$  pm по расстоянию (в вертикальном направлении). Предельные же значения, найденные из квантово-механических принципов, составляют  $\sim 10^{-18}$  N и  $\sim 10^{-15}$  m [3]. Для повышения разрешающей способности применяются так называемые модуляционные методики, осуществляемые на больших расстояниях сканирования (как правило, более 0.5 nm). В этом случае при построении топографии поверхности детектируются амплитуда, частота или фаза колебаний кантилевера, что позволяет свести к минимуму дрейф, шумы, механические вибрации и другие отрицательные факторы.

Рассмотрим колебательный режим кантилевера. Пусть на пьезотрубку подано модулирующее напряжение, изменяющееся по гармоническому закону (рис. 1). Можно ожидать, что смещение кончика зонда будет

описываться следующей формулой:

$$u(z) = a \cos(kz + w), \quad (1)$$

где параметры  $a$ ,  $k$  и  $w$  определяют амплитуду, частоту и фазу колебаний. Из классической механики хорошо известно, что вероятность  $\omega(z)dz$  обнаружить гармонический осциллятор на отрезке от  $z$  до  $dz$  дается соотношением

$$\omega(z)dz = \frac{1}{\pi a} \frac{dz}{\sqrt{1 - \frac{z^2}{a^2}}}. \quad (2)$$

С учетом функции распределения (2) можно найти среднее значение действующей на зонд силы

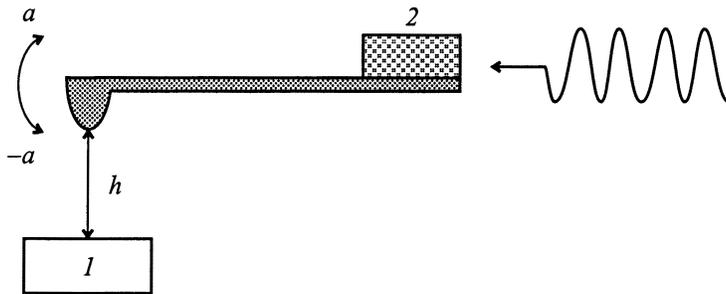
$$\langle F \rangle = \int_{-a}^a F(|h - z|) \omega(z) dz, \quad (3)$$

где  $h$  — расстояние от кончика острия до поверхности образца (рис. 1),  $F$  — сила взаимодействия.

Для вычисления интеграла (3) необходимо знать зависимость силы взаимодействия от расстояния. В расчетах будем использовать континуальное приближение для сил Ван-дер-Ваальса [4]:

$$F = -C \frac{\partial}{\partial h} \iiint \frac{d\Omega}{(z+h)^3}, \quad C = \frac{\hbar \bar{\omega}}{8\pi^2}, \quad (4)$$

где интегрирование проводится по объему иглы,  $C$  — константа ван-дер-ваальсова взаимодействия двух полубесконечных пластин (для ха-



**Рис. 1.** Схема контакта в АСМ: 1 — образец, 2 — пьезотрубка.

Параметры в формулах (5), (6)

Конфигурация зонда	$A_n$	$\varphi_n(h)$	$n$
Полусфера	$\pi R_0 C$	$\frac{h}{\sqrt{(h^2 - a^2)^3}}$	2
Параболоид	$\pi r_0 C$	как полусфера	2
Конус	$\pi R_0^2 C / z_0^2$	$\frac{1}{\sqrt{(h^2 - a^2)}}$	1
Пирамида	$d^2 C / z_0^2$	как конус	1
Цилиндр	$\pi R_0^2 C$	$\frac{(2h^2 + a^2)}{2\sqrt{(h^2 - a^2)^5}}$	3

рактерных сочетаний материалов зонда и образца  $C$  находится в узком интервале от 0.01 до 0.1 eV [5]),  $\bar{\omega}$  — характерная частота спектра поглощения [6]. При записи (4) предполагалось, что размеры зонда значительно превышают расстояние сканирования. В связи с этим не учитывались силы Казимира, действующие на мезоскопическую часть зонда и кронштейн. Заметим, что это предположение справедливо, если расстояние сканирования не превышает 1.5–2 nm [7]. Кроме того, использовано правило перенормировки константы Ван-дер-Ваальса для парного взаимодействия атомов, предложенное в работе [8].

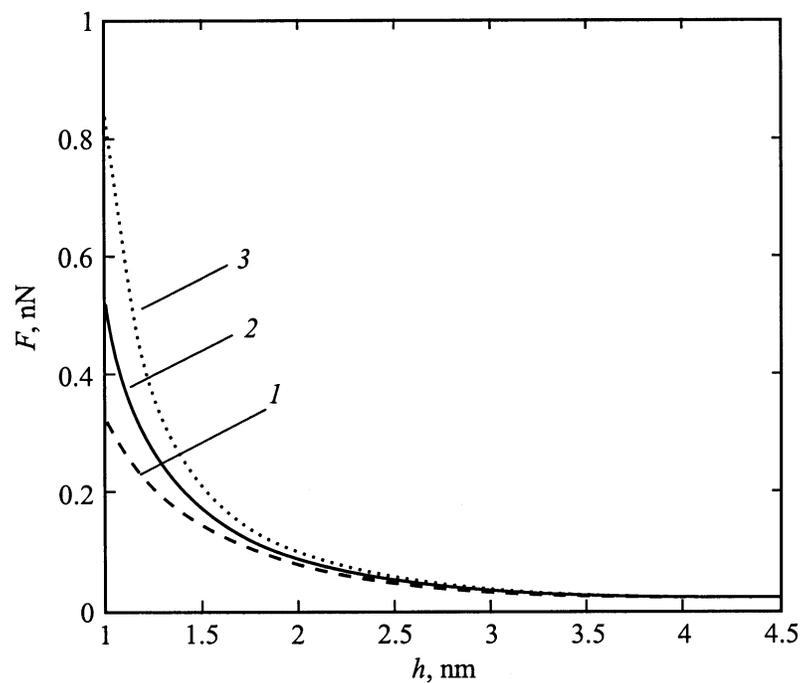
После вычисления интеграла (4) и последующих разумных упрощений для игл различной формы будем иметь

$$F = \frac{A_n}{h^n}, \quad (5)$$

где  $A_n$  — постоянная, зависящая от формы иглы, а также от свойств материалов образца и зонда,  $n = 1$  — для конуса и четырехугольной пирамиды,  $n = 2$  — для полусферы и парабоида вращения,  $n = 3$  — для кругового цилиндра. Если подставить (2), (5) в (3) и провести интегрирование, то можно получить следующее соотношение для силы взаимодействия:

$$\langle F \rangle = A_n \varphi_n(h), \quad (6)$$

где  $\varphi_n(h)$  зависит от геометрической формы острия. Результаты расчетов приведены в таблице.



**Рис. 2.** Зависимость силы взаимодействия от расстояния: 1 — формула (5); 2 и 3 — формула (6) при  $a = 0.5 \text{ nm}$  и  $a = 0.7 \text{ nm}$ .

В таблице используются следующие обозначения:  $R_0$  — радиус полусферы и цилиндра;  $r_0$  — радиус кривизны параболоида;  $d$  — сторона основания пирамиды;  $z_0$  — высота конуса и пирамиды.

Формула (6) справедлива при  $h^2 > a^2$ . Данное условие надежно выполняется в бесконтактном режиме при малых амплитудах колебаний. Легко также убедиться в том, что при  $a^2 \rightarrow 0$  из (6) следует выражение (5), соответствующее случаю статического кантилевера.

На рис. 2 показана зависимость силы взаимодействия от расстояния для зонда параболической формы. В расчетах было принято:  $C = 0.03 \text{ eV}$  (для контакта  $\text{SiO}_2\text{-SiO}_2$ ),  $r_0 = 20 \text{ nm}$ . Как видно из данного графика,

колебания кантилевера могут оказывать существенное влияние даже на больших расстояниях ( $h \sim 1 \text{ nm}$ ) и приводить к общему увеличению силы взаимодействия. Последнее является причиной такого известного артефакта, как "прилипание" зонда к поверхности образца. К этому выводу можно также прийти, если рассматривать относительную девиацию силы. В этом случае будет справедлива следующая формула:

$$\frac{\Delta F}{\langle F \rangle} = \frac{na}{h^{n+1} \varphi_n(h)} \sim \frac{na}{h}. \quad (7)$$

Формула (7) показывает, что с уменьшением расстояния  $h$  роль колебаний возрастает. Примечательным является также то, что для цилиндрического зонда колебательный режим оказывается наиболее критичным.

Таким образом, расчеты позволяют сделать следующий важный вывод: для обеспечения "чистого" бесконтактного режима сканирование следует проводить при малых амплитудах колебаний кантилевера, а именно при  $a < h/n$ .

В заключение отметим, что полученные результаты могут быть использованы для прецизионной калибровки АСМ при измерении сил или при определении формы иглы в эксперименте. Более детальные расчеты, однако, должны проводиться с учетом зависимостей амплитуды, частоты и фазы колебаний от расстояния сканирования. Эти и другие вопросы предполагается рассмотреть в последующих работах.

## Список литературы

- [1] Эдельман В.С. // Приборы и техника эксперимента. 1989. № 5. С. 25.
- [2] Эдельман В.С. // Там же. 1991. № 1. С. 24.
- [3] Рехвиашвили С.Ш., Дедков Г.В. // Шумовые и деградиационные процессы в полупроводниковых приборах (метрология, диагностика, технология): Материалы докл. науч.-техн. семинара М.: МНТОРЭС им. А.С. Попова, МЭИ, 1998. С. 205–209.
- [4] Hartmann U. // Phys. Rev. 1990. V. 42. N 20. P. 1541–1546.
- [5] Butner H., Gerlach E. // Chem. Lett. 1970. V5. N 2. P. 91.
- [6] Лившиц Е.М., Пятаевский Л.П. Статистическая физика. М.: Наука, 1978.
- [7] Дедков Г.В., Рехвиашвили С.Ш. // ЖТФ. 1999. Т. 69. В. 8. С. 124–127.
- [8] Моисеев Ю.Н., Мостепаненко В.М., Панов В.И. и др. // ЖТФ. 1990. Т. 60. В. 1. С. 141–148.