01;06;11;12

Контакт иглы кантилевера с поверхностью как машина катастроф

© *А.В. Покропивный*

Институт проблем материаловедения НАН Украины, Киев
E-mail: pokr@ipms.kiev.ua

Поступило в Редакцию 2 июня 2000 г.

Впервые контакт иглы кантилевера с поверхностью в зондовой микроскопии предлагается рассматривать как машину катастроф. Как и в теории катастроф, проанализировано поведение системы в зависимости от внутренних параметров — жесткости и координат держателя кантилевера. Рассчитаны величины скачков иглы и силы адгезии, возникающих как при вертикальном сближении и удалении, так и при горизонтальном скольжении кантилевера. Построены проекции поверхности равновесия и рассматриваются режимы, позволяющие избегать "скачков к контакту" и "микрослипов". Предлагаются метод диагностики поверхностных вакансий и новый алгоритм подвода иглы к контакту.

Исследование трения скольжения с помощью простых теоретических моделей начато в моделях независимых [1] и связанных [2] осцилляторов. В обеих моделях межатомные связи имитировались пружинами, расположенными перпендикулярно или параллельно направлению скольжения [3]. Изобретение атомно-силового [4], фрикционного [5] и адгезионного [6] микроскопов, одним из элементов которых является кантилевер, позволяет по-новому применить эти модели. Действительно, пружинами можно имитировать не только атомные связи, а сам кантилевер [7–11]. Взаимодействие иглы с поверхностью можно имитировать потенциалом, параметры которого в общем случае должны быть найдены исходя из геометрии контакта и типов химических связей.

Устройства, в которых могут происходить "катастрофы", или скачкообразные переходы из одних состояний в другие, называют машинами катастроф [12]. В данной работе конструкция механической части зондовых микроскопов [4–6] рассматривается как адгезионная и фрикционная машины катастроф, схемы которых изображены на рис. 1, *a* и 2, *a* соответственно. Пружина переменной жесткости k с закрепленной на одном из ее концов иглой в виде атома вольфрама имитирует

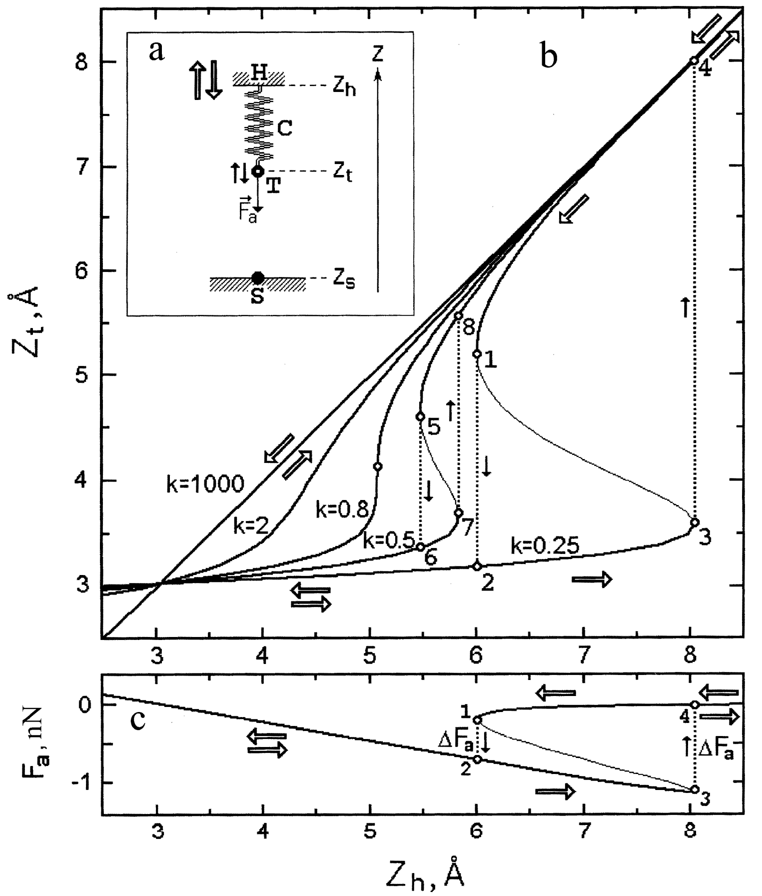

Рис. 1. *a* — схема адгезионной машины катастроф: S — поверхность, T — игла, C — пружина-кантилевер и H — ее держатель. *b* — зависимости координаты иглы Z_t от координаты держателя пружины Z_h для жесткостей $k = 0.25$ N/m, $k = 0.5$ N/m, $k = 0.8$ N/m, $k = 2$ N/m и $k = 1000$ N/m. c — кривая адгезионной силы при сближении и удалении держателя с пружиной жесткостью $k = 0.25$ N/m. ΔF_a — скачки силы в моменты "прилипания" или "отлипания". Большие и малые стрелки указывают направления движения держателя и "скачков" иглы (*a*–*c*). Жирной линией показаны устойчивые ветви, а тонкой — неустойчивые (*b,c*).

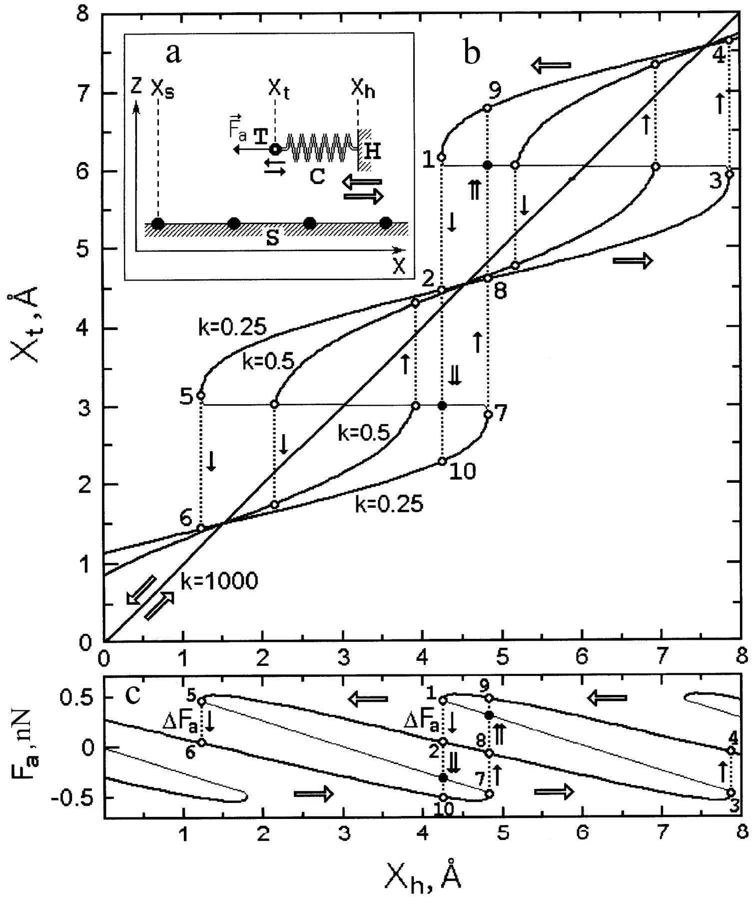

Рис. 2. *a* — схема фрикционной машины катастроф (обозначения такие же, как и на рис. 1, *a*). *b* — зависимости координаты иглы X_t от координаты держателя пружины X_h для жесткостей $k = 0.25$ N/m, $k = 0.5$ N/m и $k = 1000$ N/m. *c* — силовая кривая при горизонтальном движении держателя с пружиной жесткостью $k = 0.25$ N/m. ΔF_a — скачки силы в моменты одиночных "микрослипов". Большие стрелки указывают направления движения держателя, а одиночные и сдвоенные малые стрелки указывают направления одиночных и сдвоенных скачков иглы (*a–c*). Жирной линией показаны устойчивые ветви, а тонкой — неустойчивые (*b,c*).

кантилевер зондового микроскопа. Другой конец пружины прикреплен к держателю. Ось пружины располагается перпендикулярно (рис. 1, a) или параллельно (рис. $2, a$) поверхности. Пружина может растягиваться или сжиматься, с одной стороны, вследствие изменений координат держателя (Z_h или X_h) и иглы (Z_t или X_t), и с другой — вследствие изменения жесткости k. Игла в свою очередь взаимодействует с поверхностью, сымитированной атомом вольфрама (рис. $1, a$) или атомной цепочкой (рис. $2, a$). Без потери общности в качестве потенциала взаимодействия атомов поверхности друг с другом и с атомом иглы был взят потенциал Морзе для вольфрама [13].

Состояние адгезионной и фрикционной машины катастроф описывается тремя числами — координатами иглы (Z_t или X_t) и держателя кантилевера (Z_h или X_h), а также переменной жесткостью k. Если все три числа заданы, то определена потенциальная энергия всей системы. Пружина будет растягиваться так, чтобы эту энергию минимизировать (по меньше мере локально). Будем считать координату держателя и жесткость управляющими параметрами, а координату иглы — внутренним параметром системы. Такой выбор обусловлен тем, что в зондовых микроскопах существует принципиальная возможность устанавливать и контролировать только координату держателя и жесткость кантилевера, а координату иглы можно только регистрировать по отклонению кантилевера.

Состояния, при которых игла находится в равновесии, образуют в трехмерном пространстве состояний машин катастроф гладкие поверхности — поверхности равновесия $Z_t(k, Z_h)$ и $X_t(k, X_h)$. В каждом равновесном положении иглы, представляющей собой точку на этой поверхности, сила адгезионного взаимодействия иглы и поверхности компенсируется силой растяжения пружины. Суммарная потенциальная энергия системы содержит член от взаимодействия игла–поверхность: $U_a(Z_t - Z_s)$ или $U_a(X_t - X_s)$, и член от энергии, запасенной в пружине: $k(Z_t - Z_h)^2/2$ или $k(X_t - X_h)^2/2$. Чтобы получить уравнение поверхности равновесия, минимизируем суммарную потенциальную энергию по внутреннему параметру, учитывая, что $Z_s = X_s = 0$.

Для адгезионной машины катастроф получим уравнение [8,9]:

$$\partial U_{tot}(Z_t, Z_h, k)/\partial Z_t = \partial U_a(Z_t)/\partial Z_t + k(Z_t - Z_h) = 0. \tag{1}$$

Для фрикционной машины катастроф получим уравнение [9–11]:

$$\partial U_{tot}(X_t, X_h, k)/\partial X_t = \partial U_a(X_t)/\partial X_t + k(X_t - X_h) = 0. \tag{2}$$

Решения этих уравнений удобно представить в виде кривых $X_t(X_h)$ и $Z_t(Z_h)$, полученных сечением соответствующих поверхностей равновесия плоскостями постоянной жесткости $k = \text{const}$. На рис. 1, b и 2, b изображены такие кривые для некоторых значений жесткостей, часто встречающихся в экспериментах.

Покажем, как возникают катастрофы в адгезионной машине катастроф при зафиксированной жесткости $k = 0.25$ N/m. Расположим такую систему в точке 4 и будем сближать держатель с поверхностью (рис. 1, b). Катастрофа "прилипания" возникает тогда, когда система попадает в точку 1 (т. 1). Равновесие нарушается, и игла из т. 1 "прыгает к контакту" в т. 2, смещаясь на $\Delta Z \approx 0.2$ nm. Теперь будем удалять держатель от поверхности. Катастрофа "отлипания" возникает тогда, когда система оказывается в т. 3. Равновесие системы снова нарушается, и игла из т. 3 "прыгает от контакта" в т. 4, смещаясь на $\Delta Z \approx 0.44$ nm. Так, система возвращается в исходное состояние. Для "жестких" пружин как величины "скачков к контакту" и "скачков от контакта", так и площадь цикла гистерезиса меньше (см., например, цикл 8–5–6–7–8 в сравнении с циклом 4–1–2–3–4 на рис. 1, b). Для пружин с жесткостями, большими критического значения 0.8 N/m, для $k = 2$ N/m и $k = 1000$ N/m возможность катастроф вообще исключается, т. е. для любого положения держателя существует только одно равновесное положение иглы. Для жесткостей, превышающих 1000 N/m, зависимость $Z_t(Z_h)$ представляет собой прямую $Z_t = Z_h$.

Покажем, как возникают катастрофы во фрикционной машине катастроф с фиксированной жесткостью $k = 0.25$ N/m. Расположим систему в т. 4 и будем двигать держатель против оси X (рис. 2, b). Катастрофа "прилипания" возникает тогда, когда система попадает в т. 1. Равновесие нарушается и происходит "микрослип", при котором игла из т. 1 перепрыгивает в новое положение равновесия, в т. 2 на расстояние $\Delta X \approx 0.17$ nm или в т. 10 на расстояние $\Delta X \approx 0.39$ nm. В последнем случае происходит двойной "микрослип" и перескок на другую устойчивую кривую. При дальнейшем смещении держателя по достижению системой т. 5 равновесие снова нарушается и происходит "микрослип", при котором игла перепрыгивает в новое положение равновесия, в т. 6. Если в т. 1 произошел двойной "микрослип", то система из т. 10 переходит в т. 6 без скачков. Изменим направление движения держателя. Теперь равновесие нарушается тогда, когда система из т. 6 попадает в т. 7. Как и в предыдущем случае, может произойти либо одинарный (в т. 8), либо двойной (в т. 9) "микрослип".

При дальнейшем смещении держателя по достижении системой т. 3 равновесие снова нарушается и происходит "микрослип", при котором игла перепрыгивает в т. 4. Если в т. 7 произошел двойной "микрослип", то система переходит из т. 9 в т. 4 без скачков. Заметим, что для жесткости $k = 0.5\,\mathrm{N/m}$ возможны только одинарные "микрослипы", а для жесткостей, превышающих $30\,\mathrm{N/m}$, гистерезиса нет и зависимость $X_t(X_h)$ представляет собой прямую $X_t = X_h$ (рис. $2, b$). Таким образом, в циклах сканирования держателя могут возникать гистерезисные петли одинарных "микрослипов", например петли 1–2–3–4–1 и 5–6–7–8–5, и более сложные, например петли двойных "микрослипов" 1–10–7–9–1 или чередования одинарных и двойных 1–2–5–6–7–9–1, что уже наблюдалось экспериментально [5]. Интересно, что игла, в принципе, может попасть и на неустойчивую ветвь. В этом случае игла будет располагаться строго над атомом цепочки (см. закрашенные точки на рис. $2, b$).

В моменты "скачков к контакту" и "микрослипов" потенциальная энергия системы уменьшается, и эта разность ΔU_{tot} идет как на возбуждение упругих колебаний, так и на деформацию контактирующих поверхностей. Скачки силы ΔF_a в моменты "микрослипов" [5,11,14] и "отлипаний" [6,14], регистрируемые экспериментально, в том числе зондовыми микрослипами серии SOLVER фирмы NT-MDT, могут быть рассчитаны в данной модели из кривых $F_a(X_h)$ и $F_a(Z_h)$. На рис. $1, c$ и $2, c$ представлены зависимости $F_a(Z_h)$ и $F_a(X_h)$ для жесткости $k = 0.25\,\mathrm{N/m}$. Модуль скачка силы ΔF_a в момент "прилипания" из т. 1 в т. 2 равен 0.53 nN, а в момент "отлипания" из т. 3 в т. 4 — 1.1 nN (рис. $1, c$), т. е. в два раза больше. Модуль скачка силы ΔF_a в момент одинарного "микрослипа" из т. 1 в т. 2 равен 0.43 nN, а в момент двойного из т. 1 в т. 10 — 0.98 nN, т. е. более чем в два раза больше (рис. $2, b$). Площадь циклов гистерезиса как на кривых $X_t(X_h)$ или $Z_t(Z_h)$, так и на силовых кривых $F_a(Z_h)$ или $F_a(X_h)$ для меньших жесткостей больше. Это происходит благодаря тому, что при уменьшении жесткости оба конца всех устойчивых ветвей на кривых "вытягиваются" вдоль координат X_h или Z_h в разных направлениях.

Исходя из вышеизложенного, можно предположить метод диагностики точечных дефектов — вакансий, основанный на том, что скачки иглы будут ощутимы в районе их расположения. Действительно, в районе одиночной вакансии, например, "стыкуются" две устойчивые ветви, а в районе бивакансии — три (и т. д.). Поэтому скачки иглы в районе вакансии будут двойными, в районе бивакансии — тройными.

По кратности скачков иглы можно определить величину вакансионного кластера. Можно предположить, например, что двойные "микрослипы", наблюдавшиеся впервые в работе [5], связаны именно со скачком иглы над вакансией. Однако следует иметь в виду, что после скачка над вакансиями игла может перепрыгнуть не на первую устойчивую ветвь, а на следующую, так как в этом случае высвободится значительная кинетическая энергия. Предлагаемый метод существенно отличается от методов наблюдения точечных дефектов по искривлению линии постоянной силы в атомно-силовом микроскопе [15,16].

Для исследования бифуркаций положений равновесия иглы удобно применять теорию особенностей гладких отображений в теории катастроф [12]. Рассмотрим плоскости управляющих параметров машин катастроф: (k, Z_h) и (k, X_h). Спроецируем на эти плоскости решения уравнений (1) и (2), т.е. гладкие поверхности равновесия. Такое проектирование имеет складки и сборки. Проекции точек складок представляют собой кривые катастроф — линии "прилипания". Эти кривые делят плоскость управляющих параметров на две части (рис. 3).

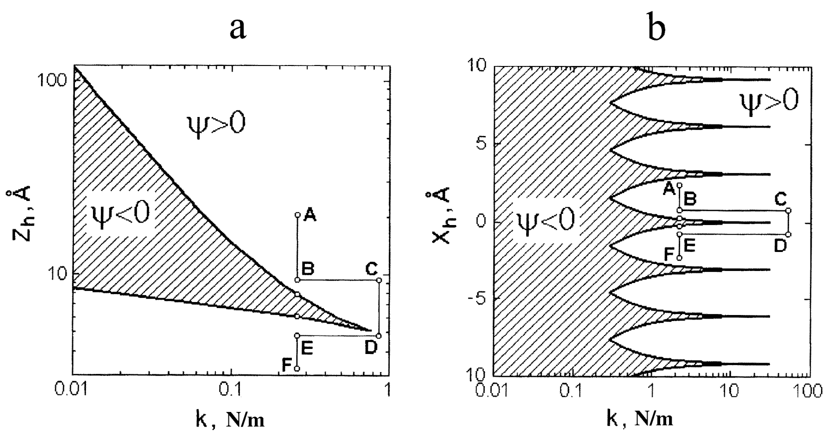

Рис. 3. Проекции поверхностей равновесия: *a* — адгезионной машины катастроф $Z_t(k, Z_h)$ и *b* — фрикционной машины катастроф $X_t(k, Z_h)$ на плоскость управляющих параметров: линии складок и точки сборки, их соединяющие. ψ — градиент положения иглы как функции от положения держателя. В заштрихованную область ($\psi < 0$) проецируется по три точки поверхности равновесия, в незаштрихованную ($\psi > 0$) — только одна.

В точки заштрихованной части проецируется по три (на рис. 3, a) и более трех (на рис. 3, b) точек поверхности равновесия, в точки незаштрихованной части — лишь по одной, в точки кривой — по две (на рис. 3, a) и по три (на рис. 3, b) точки. При пересечении кривой катастроф из заштрихованной части в незаштрихованную два прообраза из трех сливаются, а затем исчезают (в этом месте особенность — складка). При подходе к остриям сливаются три прообраза (в этом месте особенность — сборка). Скачков можно избежать, если заранее знать, каким путем переходить из одного места поверхности равновесий на другое. Например, из рис. 3, a видно, что пересечение линии катастроф при движении по отрезку AF от точки A к точке F вызывает "скачок к контакту" (из т. 1 в т. 2 на рис. 1, b), а при движении от точки F к точке A — "скачок от контакта" (из т. 3 в т. 4 на рис. 1, b). Но при движении по ломаной ABCDEF в обход точки сборки возможность любых катастроф исключается. Для этого в точках B и E при приближении к линии катастроф нужно повысить жесткость выше критического значения, равного 0.8 N/m, и после этого обойти точку сборки справа. Таким же образом можно избежать "микрослипов" в циклах горизонтального скольжения, повышая жесткость при приближении к линии катастроф в точках B и E выше 30 N/m (рис. 3, b).

На основании проведенного анализа состояний машин катастроф можно предложить новый алгоритм подвода иглы кантилевера к поверхности. Для этого в процессе сближения иглы с поверхностью должен контролироваться параметр $\psi(Z_h, k) = \mathrm{grad}[Z_h(Z_t)]$. Положения Z_h, в которых значение параметра ψ становится равным нулю, соответствуют кривой катастроф на плоскости управляющих параметров (рис. 3, a). Значения $\psi < 0$ соответствуют заштрихованной области, а $\psi > 0$ — незаштрихованной. Поэтому, если поддерживать значение ψ всегда большим нуля, это предотвратит возможность катастроф. Суть алгоритма в том, что в моменты, когда значение параметра ψ приближается к нулю (но не становится равным нулю!), цепь обратной связи должна повышать значение жесткости кантилевера. В моменты, когда значение параметра ψ удаляется от нуля, цепь обратной связи может быть отключена.

Найденные закономерности возникновения катастроф должны быть учтены при построении теории атомно-силового микроскопа, в частности в расчетах силы трения [17], при вычислении сдвига фазы в динамическом режиме [18], а также при разработке методов расчета межатомных потенциалов из кривых нагружения иглы [19]. Рассмотренный подход может быть реализован и на более реалистичных моделях, с учетом большего числа атомов в зоне контакта и релаксацией. Кроме того, его можно применить к капиллярным, электростатическим магнитным и другим типам сил между иглой и поверхностью.

Список литературы

[1] *Tomlinson G.A.* // Phil. Mag. 1929. V. 7. P. 905–939.
[2] *Frenkel Y.I., Kontorova T.A.* // Zh. Eksp. Teor. Fiz. 1938. V. 8. P. 1340.
[3] *McClelland G.M.* Adhesion and friction / Eds. M. Grunze, H.J. Kreuzer. Berlin: Springer-Verlag, 1989. P. 1–16.
[4] *Binnig G., Quate C.F., Gerber Ch.* // Phys. Rev. Lett. 1986. V. 56. P. 930–933.
[5] *Mate C.M., McClelland G.M., Erlandsson R., Chiang S.* // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 59. P. 1942–1945.
[6] *Kaneko R., Nonaka K., Yasuda K.* // J. Vac. Sci. Technol. A. 1988. V. 6. P. 291–292.
[7] *Hao H.-W., Baro A.M., Saenz J.J.* // J. Vac. Sci. Technol. B. 1991. V. 9. P. 1323–1328.
[8] *Tomanek D.* Scanning tunneling microscopy III / Eds. R. Weisendanger, H.-J. Guntherodt. Berlin: Springer-Verlag, 1996. P. 269–292.
[9] *Colchero J., Marti O., Mlynek J.* Forces in scanning probe methods Eds. H.-J. Guntherodt et al. Dordrecht: Kluwer Academ. Publ., 1995. P. 345–352.
[10] *Tomanek D., Zhong W., Thomas H.* // Europhys. Lett. 1991. V. 15. P. 887–892.
[11] *Sasaki N., Tsukada M.* // Sci. Rep. RITU. Ser. A. 1997. V. 44. P. 1–15.
[12] *Арнольд В.И.* Теория катастроф. М.: Наука, 1990. 128 с.
[13] *Girifalco L.A., Weiser V.G.* // Phys. Rev. 1959. V. 114. P. 687–690.
[14] *Carpick R.W., Salmeron M.* // Chem. Rev. 1997. V. 97. P. 1163–1194.
[15] *Благов Е.В., Климчицкая Г.Л., Панов В.И.* и др. // Письма в ЖТФ. 1993. Т. 19. В. 8. С. 73–78.
[16] *Покропивный А.В., Покропивный В.В., Скороход В.В.* // Письма в ЖТФ. 1996. Т. 22. В. 2. С. 1–7.
[17] *Дедков Г.В.* // Письма в ЖТФ. 1998. Т. 24. В. 19. С. 44–50.
[18] *Giessibl F.J.* // Phys. Rev. B. 1997. V. 56. P. 16 010–16 015.
[19] *Моисеев Ю.Н., Мостепаненко В.М., Панов В.И., Соколов И.Ю.* // Письма в ЖТФ. 1989. Т. 15. В. 20. С. 5–10.