

2D- И 3D –МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ИНДЕНТАЦИИ И ТРЕНИЯ В КОНТАКТАХ НАНОЗОНДОВ С ПОВЕРХНОСТЬЮ

Г.В.Дедков, С.А.Яковенко

Кабардино-Балкарский госуниверситет, кафедра нано- и микроэлектроники
г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173, e-mail: zeroj@mail.ru; nano@kbsu.ru

Целью работы является разработка компьютерных моделей взаимодействия зонд –образец при вертикальном (индентация) и латеральном (трение) движениях зонда, характерных для атомно – силового микроскопа. Рассмотрены 2D и 3D варианты. Основные принципы, заложенные в расчетные схемы, заключаются в следующем. Используется «квазихолодное» приближение, при котором в начальный момент, соответствующий заданному дискретному интервалу времени с номером « k », система зонд –поверхность рассматривается как «холодная»: имеет нулевые значения скоростей атомов и минимальное значение потенциальной энергии, а положение держателя зонда жестко зафиксировано. При «включении» динамики малые отклонения атомов от «истинно равновесных» положений и погрешности численного решения динамических уравнений движения атомов приводят с течением времени к искусственному «разогреву» системы, при котором ее средняя механическая энергия начинает возрастать независимо от начальных условий и от характера движения зонда. Таким образом, возникает необходимость коррекции температуры. Если используется «горячий» вариант моделирования с конечной температурой и проведением ее постоянной коррекции, то при вычислении энергии, диссипируемой при последующем движении зонда, возникает проблема отделения «паразитного» нагрева, вызванного вычислительным алгоритмом, от «полезного», инициированного самим процессом движения зонда. Для «горячей» модели корректное разделение обоих вкладов выполнить сложно. В противовес этому применение «квазихолодного» приближения в значительной степени упрощает поставленную задачу. В разработанных программах использовались аппроксимации межатомных взаимодействий на основе парных потенциалов типа Леннарда –Джонса, Морза и модели «вмороженного атома». Алгоритм интегрирования уравнений динамики и схема оптимизации количества «эффективных» межатомных связей при вычислении сил на отдельных атомах соответствуют известной статье Верле (Phys.Rev.159/1(1967)98).

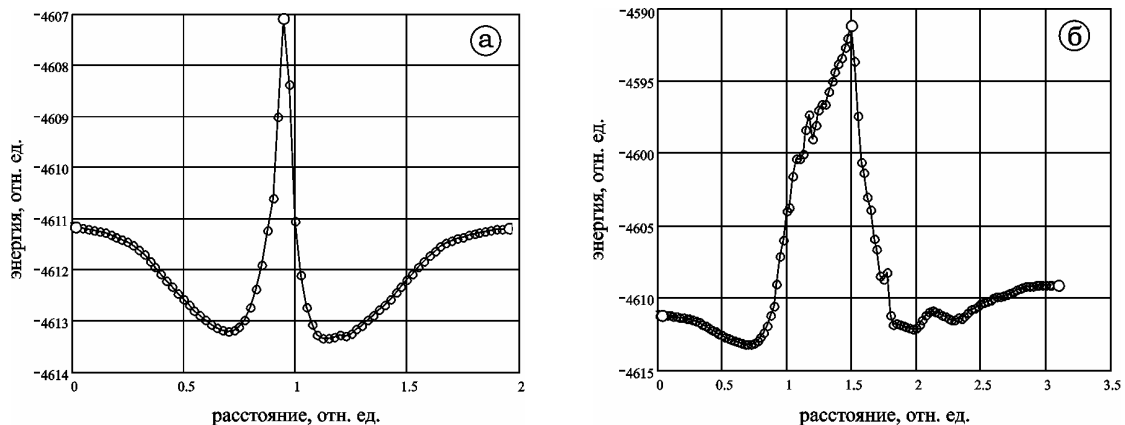


Рис.1(а-в) Эволюция потенциальной энергии системы зонд-поверхность (после «замораживания» системы в точках окончания динамической релаксации) Рис. (а)-(в) соответствуют $h = 0.5, 0, -0.5$

На рис.1-2 показаны результаты моделирования энергии и структуры системы зонд –поверхность в двумерной реализации с потенциалом Леннарда Джонса при «вдавливании» зонда в поверхность с различным параметром индентации h , определяемым как минимальное расстояние между нижним атомом зонда и верхним рядом атомов образца, считая зонд и образец абсолютно жесткими. Количество атомов в зонде 256, в образце -1200. Разность значений энергии в конце и в начале моделирования характеризует величину диссипации.

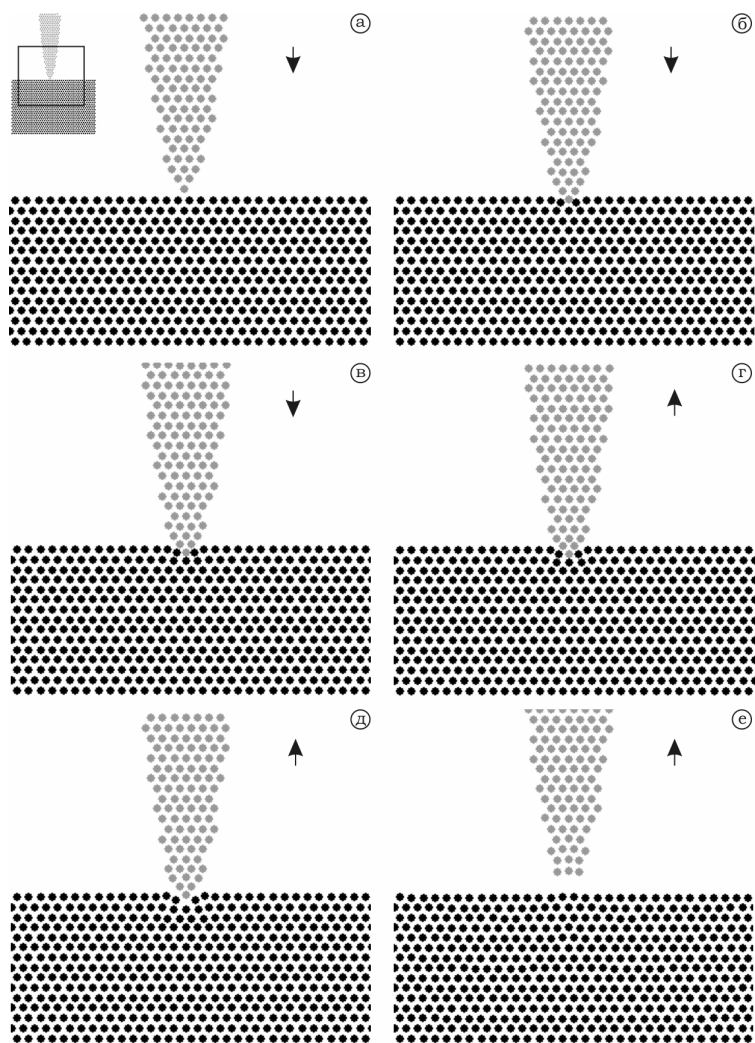
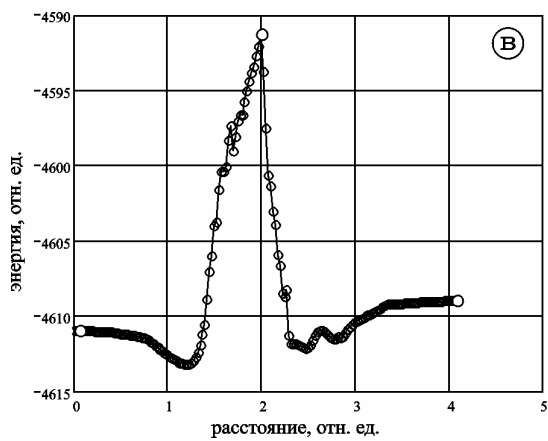


Рис.2 Кадры (а–д) эволюции атомной структуры системы зонд – образец при движении «вниз – вверх», соответствующие минимальным параметрам индентации $h = 1, 0.5, 0, -0.5, -1$. Кружки серого цвета отмечают моменты начала опускания, максимальной индентации и завершения подъема зонда. Вставка показывает часть системы, соответствующую показанным кадрам.