

УДК 539.3:539.4

ОБ ОПРЕДЕЛЕНИИ ПАРАМЕТРОВ ЖЕСТКОСТИ НАНООБЪЕКТОВ

© 2006 г. Е. А. Иванова, Д. А. Индейцев, академик Н. Ф. Морозов

Поступило 16.09.2005 г.

Целью данной работы является разработка теоретической основы экспериментального определения параметров жесткости нанообъектов. Один из наиболее эффективных методов определения упругих модулей, используемых в макромеханике, основан на измерении собственных частот исследуемого объекта. В работе обсуждаются нюансы, возникающие при использовании этого метода применительно к нанообъектам. Предлагается метод экспериментального определения параметров жесткости, основанный на явлении динамического гашения колебаний (“антирезонанса”). Достоинством этого метода является возможность выделения собственных частот исследуемого нанообъекта из спектра системы нанообъект–кантилевер атомного силового микроскопа (АСМ).

В настоящее время актуальной является задача определения упругих модулей объектов наноразмерного масштабного уровня. Многие исследователи отмечали несоответствие между значениями модулей упругости, полученными из микро- и макроэкспериментов. В работах [1, 2] на примере двумерной монокристаллической полосы теоретически исследована зависимость значений модуля Юнга и изгибной жесткости от числа атомарных слоев монокристалла. Сравнение результатов работ [1, 2] показывает, что три выражения для изгибной жесткости стержня: выражение, известное из континуальной теории, выражение, полученное путем подстановки в формулу континуальной теории модуля Юнга, вычисленного для дискретной модели [1], и выражение, полученное непосредственно для дискретной модели [2], – при малом числе атомарных слоев существенно различаются. Таким образом, важной задачей является разработка методов непосредственного определения упругих характеристик тонкостенных нанообъектов без использования каких-либо формул, связывающих упругие модули нанообъекта с его толщиной и модулем Юнга материала. В частности, актуальной является за-

дача экспериментального определения механических характеристик нанообъектов [3]. Один из наиболее эффективных методов определения упругих модулей, используемых в макромеханике, основан на измерении собственных частот исследуемого объекта. Ниже обсуждаются нюансы, возникающие при использовании этого (резонансного) метода применительно к нанообъектам, и предлагается метод, основанный на явлении “антирезонанса”.

Исследование свойств нанообъектов, в том числе измерение их собственных частот, в настоящее время осуществляется с помощью зондовой микроскопии. В частности, для этих целей широко используется АСМ [4, 5]. Важнейшей составляющей АСМ является сканирующий зонд – кантилевер [6, 7]. В настоящее время стандартные промышленные кантилеверы имеют габаритные размеры порядка $200 \times 35 \times 1.5$ мкм и резонансные частоты порядка 10–400 кГц; радиус кривизны иглы может изменяться в пределах 10–50 нм. Основной проблемой, возникающей при измерении частот исследуемого объекта с помощью АСМ, является известное в механике перераспределение собственных частот колебаний системы кантилевер–исследуемый нанообъект между собственными частотами каждого из них в отдельности [8]. Причем характер смещения спектра существенно зависит от расстояния между острием иглы и поверхностью.

Вышесказанное указывает на принципиальное отличие условий, в которых проводятся эксперименты с нанообъектами, от условий экспериментов с макрообъектами. При исследовании макрообъектов размеры измерительных приборов (например, тензодатчиков) существенно меньше размеров исследуемого объекта. При исследовании объектов наноразмерного масштабного уровня используется микроразмерное оборудование. Поэтому важное значение приобретает задача исследования взаимодействия нанообъектов с измерительным оборудованием. Далее эта проблема обсуждается применительно к задаче экспериментального определения упругих характеристик нанообъектов с помощью АСМ. Фактически, возникают две задачи, лежащие на стыке механики и экспериментальной физики. Первая задача –

*Санкт-Петербургский государственный
технический университет
Институт проблем машиноведения
Российской Академии наук, Санкт-Петербург*

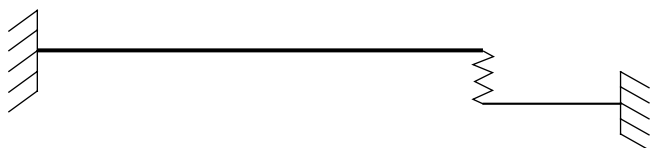


Рис. 1. Кантилевер (слева) и наностержень (справа).

определение упругих модулей нанообъектов по частотам системы нанообъект–кантилевер. Вторая задача – разработка условий эксперимента, при котором из спектра системы нанообъект–кантилевер можно выделить собственные частоты нанообъекта.

Постановка задачи и описание исследуемой системы кантилевер–исследуемый нанообъект в настоящем сообщении является естественным продолжением работы [6]. Основное отличие заключается в изучении нанообъекта, обладающего собственной динамикой. В качестве механической модели последней могут рассматриваться элементы тонкостенных (наноразмерных) конструкций, таких, как стержни, оболочки, спирали. Приводится теоретическая основа определения собственных частот колебаний стержневых конструкций с помощью АСМ.

Итак, рассмотрим следующую механическую модель объекта исследования (рис. 1). Стержень, изображенный слева, моделирует кантилевер. Левый конец стержня жестко закреплён, правый конец взаимодействует с исследуемым объектом. Вертикальный прогиб кантилевера определяется функцией $u(x_1, t)$, где x_1 – координата вдоль стержня, причём значение $x_1 = 0$ соответствует левому концу кантилевера. Используются обозначения: L_1 – длина кантилевера, D_1 и ρ_1 – его изгибная жесткость и погонная плотность. Стержень, изображенный справа, моделирует исследуемый объект, изгибную жесткость которого требуется определить [9, 10]. Правый конец стержня жестко закреплён, левый конец взаимодействует с кантилевером. Вертикальный прогиб наностержня определяется функцией $v(x_2, t)$, где x_2 – координата вдоль стержня, значение $x_2 = 0$ соответствует правому концу наностержня. Приняты обозначения: L_2 – длина наностержня, D_2 и ρ_2 – его изгибная жесткость и погонная плотность. Полевое взаимодействие между наностержнем и кантилевером моделируется линейной пружинной жесткостью C , что соответствует линеаризации потенциала Леннард-Джонса (или любого другого потенциала взаимодействия) в области статически равновесного состояния. В отсчетной конфигурации стержни считаются недеформированными, а пружина ненапряженной.

Основные уравнения динамики, описывающие свободные колебания рассматриваемой механической системы, имеют следующий вид:

$$D_1 u^{IV} + \rho_1 \ddot{u} = 0, \quad D_2 v^{IV} + \rho_2 \ddot{v} = 0. \quad (1)$$

Уравнения (1) дополняют необходимые краевые условия:

$$\begin{aligned} u(0) = 0, \quad u'(0) = 0, \quad u''(L_1) = 0, \\ D_1 u'''(L_1) = C[u(L_1) - v(L_2)], \\ v(0) = 0, \quad v'(0) = 0, \quad v''(L_2) = 0, \\ D_2 v'''(L_2) = -C[u(L_1) - v(L_2)]. \end{aligned} \quad (2)$$

Спектральная задача, соответствующая уравнениям (1), (2), формулируется для нахождения собственных частот колебаний системы, т. е. решение ищется в виде

$$u(x_1, t) = u_0(x_1)e^{i\omega t}, \quad v(x_2, t) = v_0(x_2)e^{i\omega t}.$$

Решение полученной спектральной задачи приводит к следующему частотному уравнению:

$$\begin{aligned} [1 + \cos(\lambda L_1) \operatorname{ch}(\lambda L_1)](1 + \cos(\mu L_2) \operatorname{ch}(\mu L_2) + \\ + \frac{C}{D_2 \mu^3} [\sin(\mu L_2) \operatorname{ch}(\mu L_2) - \cos(\mu L_2) \operatorname{sh}(\mu L_2)]) + \\ + \frac{C}{D_1 \lambda^3} [\sin(\lambda L_1) \operatorname{ch}(\lambda L_1) - \cos(\lambda L_1) \operatorname{sh}(\lambda L_1)] \times \\ \times (1 + \cos(\mu L_2) \operatorname{ch}(\mu L_2)) = 0. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь использованы обозначения

$$\lambda^2 = \sqrt{\frac{\rho_1}{D_1}} \omega, \quad \mu^2 = \sqrt{\frac{\rho_2}{D_2}} \omega,$$

где ω – собственная частота системы. Как видно из уравнения (3), все собственные частоты зависят от всех параметров системы и из частотного спектра системы невозможно выделить собственные частоты наностержня. Установим соотношение между величинами $\frac{C}{D_1 \lambda^3}$ и $\frac{C}{D_2 \mu^3}$, раскрыв известные значения изгибных жесткостей D_1, D_2 и волновых чисел λ, μ . В результате получим следующее неравенство:

$$\frac{C}{D_1 \lambda^3} \ll \frac{C}{D_2 \mu^3}. \quad (4)$$

Таким образом, частотное уравнение (3) может быть приближенно представлено в виде

$$\begin{aligned} [1 + \cos(\lambda L_1) \operatorname{ch}(\lambda L_1)](1 + \cos(\mu L_2) \operatorname{ch}(\mu L_2) + \\ + \frac{C}{D_2 \mu^3} [\sin(\mu L_2) \operatorname{ch}(\mu L_2) - \cos(\mu L_2) \operatorname{sh}(\mu L_2)]) = 0 \end{aligned} \quad (5)$$

Уравнение (5) имеет два спектра собственных частот. Первый спектр определяет собственные частоты колебаний кантилевера:

$$1 + \cos(\lambda L_1) \operatorname{ch}(\lambda L_1) = 0. \quad (6)$$

Второй спектр определяет собственные частоты колебаний наностержня с подпружиненным концом. Этому спектру соответствует уравнение

$$1 + \cos(\mu L_2) \operatorname{ch}(\mu L_2) + \frac{C}{D_2 \mu^3} [\sin(\mu L_2) \operatorname{ch}(\mu L_2) - \cos(\mu L_2) \operatorname{sh}(\mu L_2)] = 0. \quad (7)$$

Таким образом, проблема, связанная с идентификацией спектров каждого из объектов, при не очень сильном допущении (4) оказалась разрешенной, так как удалось выделить спектры каждого из них в отдельности. Естественной проблемой является определение форм колебаний кантилевера на найденных выше частотах, поскольку форма колебаний кантилевера существенно влияет на качество измерений при фиксировании резонанса с помощью лазерного луча, представляющего собой пятно определенного диаметра.

Рассмотрим вынужденные гармонические колебания системы. Пусть

$$u(0, t) = A \sin(\Omega t), \quad A = \text{const}. \quad (8)$$

Решением поставленной задачи являются функции

$$\begin{aligned} u(x_1, t) &= [P_1 \cos(\lambda_* x_1) + P_2 \sin(\lambda_* x_1) + \\ &+ P_3 \operatorname{ch}(\lambda_* x_1) + P_4 \operatorname{sh}(\lambda_* x_1)] \sin(\Omega t), \\ v(x_2, t) &= [Q_1 \cos(\mu_* x_2) + Q_2 \sin(\mu_* x_2) + \\ &+ Q_3 \operatorname{ch}(\mu_* x_2) + Q_4 \operatorname{sh}(\mu_* x_2)] \sin(\Omega t), \end{aligned} \quad (9)$$

где $\lambda_*^2 = \sqrt{\frac{\rho_1}{D_1}} \Omega$, $\mu_*^2 = \sqrt{\frac{\rho_2}{D_2}} \Omega$. Константы P_i , Q_i

определяются из граничных условий; они не приводятся здесь из-за громоздкости. Заметим, что знаменатели выражений для констант P_i , Q_i обращаются в нуль, когда частота вынужденных колебаний Ω совпадает с одной из собственных частот системы ω_n , определяемых уравнением (3). При значениях $\Omega = \omega_n$ амплитуда колебаний кантилевера в рассматриваемой модели становится бесконечной, а в реальном эксперименте резко возрастает, что и позволяет фиксировать резонансные частоты, совпадающие с собственными частотами системы.

Эффект динамического демпфирования колебаний. Экспериментально можно фиксировать не только резкое возрастание амплитуды колебаний, но и обращение амплитуды колебаний в нуль. В системах с распределенными параметрами, состоящими из несколь-

ких тел, обращение амплитуды колебаний в нуль может иметь место в двух случаях: когда точка, в которой измеряется амплитуда, является узлом данной формы колебаний и когда происходит динамическое демпфирование колебаний одного тела на парциальной частоте другого тела (зачастую это явление называют “антирезонанс”). Поставим вопрос так: существуют ли частоты вынужденных колебаний Ω , при которых правый конец кантилевера, контактирующий с нанообъектом, остается неподвижным в любой момент времени? Ответом на этот вопрос будет решение уравнения

$$u(L_1, t) = 0. \quad (10)$$

Подставив в (10) выражение (9) для $u(x_1, t)$, после несложных преобразований с учетом выражений для констант P_i , Q_i получим уравнение

$$\begin{aligned} &AD_1 D_2 \lambda_*^3 \mu_*^3 [2 \operatorname{ch}(\lambda_* L_1) \sin(\lambda_* L_1) + \\ &+ 2 \operatorname{sh}(\lambda_* L_1) \cos(\lambda_* L_1) + \operatorname{sh}(2\lambda_* L_1) + \\ &+ \sin(2\lambda_* L_1)] (1 + \cos(\mu_* L_2) \operatorname{ch}(\mu_* L_2) + \\ &+ \frac{C}{D_2 \mu_*^3} [\sin(\mu_* L_2) \operatorname{ch}(\mu_* L_2) - \\ &- \cos(\mu_* L_2) \operatorname{sh}(\mu_* L_2)]) = 0. \end{aligned} \quad (11)$$

Решив уравнение (11), можно определить частоты Ω_n , при которых амплитуда колебаний правого конца кантилевера обращается в нуль. Нетрудно понять, что уравнение (11) распадается на два независимых уравнения. Первое уравнение имеет вид

$$2 \operatorname{ch}(\lambda_* L_1) \sin(\lambda_* L_1) + 2 \operatorname{sh}(\lambda_* L_1) \cos(\lambda_* L_1) + \operatorname{sh}(2\lambda_* L_1) + \sin(2\lambda_* L_1) = 0. \quad (12)$$

Второе уравнение выглядит так:

$$\begin{aligned} &1 + \cos(\mu_* L_2) \operatorname{ch}(\mu_* L_2) + \\ &+ \frac{C}{D_2 \mu_*^3} [\sin(\mu_* L_2) \operatorname{ch}(\mu_* L_2) - \\ &- \cos(\mu_* L_2) \operatorname{ch}(\mu_* L_2)] = 0. \end{aligned} \quad (13)$$

Уравнение (12) зависит только от параметров кантилевера и не представляет интереса. Уравнение (13) зависит от параметров наностержня и жесткости связи между кантилевером и наностержнем. Именно оно определяет “антирезонансные” частоты, при которых происходит динамическое гашение колебаний правого конца кантилевера. Заметим, что уравнение (13) в точности совпадает с уравнением (7), определяющим собственные частоты подпружиненного наностержня. Поскольку уравнение (7) было получено из частотного уравнения системы (3) путем

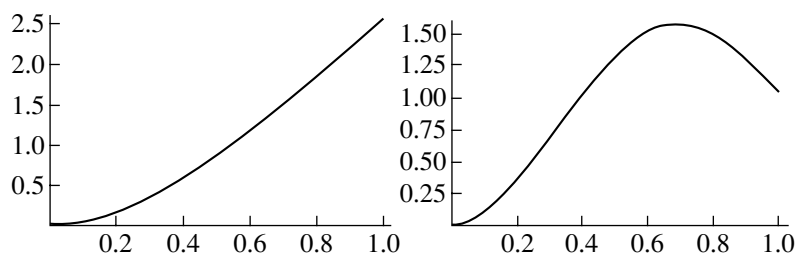


Рис. 2. Резонансные формы. $\frac{L_2}{L_1} = 1.0$, $\frac{h_2}{h_1} = 1.0$.

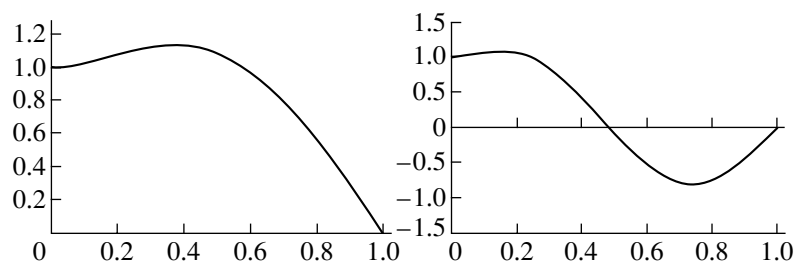


Рис. 3. “Антирезонансные” формы. $\frac{L_2}{L_1} = 1$, $\frac{h_2}{h_1} = 1$.

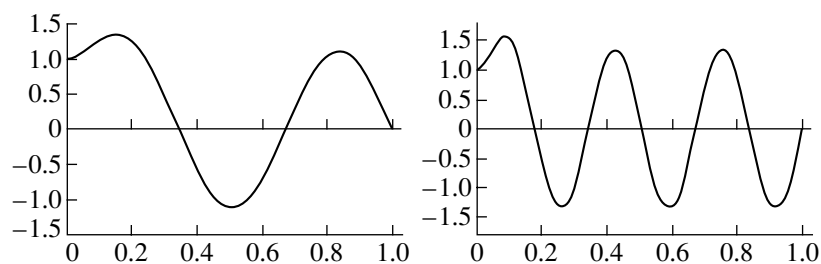


Рис. 4. “Антирезонансные” формы. $\frac{L_2}{L_1} = 0.1$, $\frac{h_2}{h_1} = 0.1$.

пренебрежения малыми величинами порядка $\frac{C}{D_1 \lambda^3}$, можно утверждать, что “антирезонансные” частоты Ω_n близки к собственным частотам системы ω_n и отличаются от них на малые величины указанного порядка.

На рисунках 2–4 приведены первые две формы колебаний кантилевера при резонансе и “антирезонансе”. Резонансные формы колебаний представлены на рис. 2 (на этом и последующих рисунках по вертикальной оси отложены перемещения точек кантилевера, а по горизонтальной – безразмерная координата $\frac{x_1}{L_1}$.) Рисунок 2 соответствует случаю одинаковых размеров кантилевера

и исследуемого стержня. При уменьшении размеров исследуемого стержня формы колебаний кантилевера качественно не меняются. Фиксировать резонансы с помощью АСМ достаточно легко и единственным существенным недостатком метода является то, что резонансные частоты характеризуют не исследуемый объект, а систему исследуемый объект – кантилевер. В связи с этим исключительно важен “антирезонанс”, так как он позволяет определить собственные частоты колебаний исследуемой наноструктуры. Формы колебаний кантилевера, соответствующие “антирезонансным” частотам, многоузловые. Количество узлов определяется порядковым номером формы и параметром

$$\sqrt[4]{\frac{D_1 \rho_2 L_2}{D_2 \rho_1 L_1}} \sim \sqrt[4]{\frac{h_1 L_2}{h_2 L_1}},$$

где h_1 и h_2 – характерные размеры сечений кантилевера и исследуемого стержня. Если размеры кантилевера и исследуемого стержня одинаковы, первая “антирезонансная” форма колебаний кантилевера безузловая, а вторая имеет один узел (рис. 3). При уменьшении всех линейных размеров исследуемого стержня в 10 раз значения “антирезонансных” частот увеличиваются в 10 раз, а первые формы колебаний кантилевера становятся многоузловыми (рис. 4). Увеличение “антирезонансных” частот может привести к тому, что они выйдут за рамки частотного диапазона измерительных приборов. При попытке зафиксировать “антирезонанс” по многоузловой форме могут возникнуть проблемы, связанные с тем, что луч лазера, который используется в оптической системе регистрации отклонений АСМ кантилевера [11], это не точка, а пятно конечного размера и при измерении определяется не амплитуда в точке, а ее среднее значение на некотором участке стержня. Если длина исследуемого стержня уменьшается не столь существенно, как характерные размеры его сечения, то значения “антирезонансных” частот и количество узлов на формах колебаний кантилевера увеличиваются не так быстро. Таким образом, при определенных соотношениях параметров кантилевера и исследуемого объекта формы колебаний кантилевера позволяют использовать существующие лазерные устройства для фиксирования “антирезонанса”.

Вопрос об определении жесткостных характеристик наноразмерных объектов рассматривался в работе [12]. В данном случае изгибную жесткость наностержня можно определять как по резонансным частотам, воспользовавшись уравнением (3), так и по “антирезонансным” частотам, воспользовавшись уравнением (13). Оба уравнения содержат два неизвестных параметра: изгибную жесткость наностержня D_2 и жесткость связи иглы кантилевера с наностержнем C . (Параметры кантилевера известны; массу m_2 и длину L_2 наностержня можно измерить, погонная плотность для однородного стержня вычисляется по формуле $\rho_2 = \frac{m_2}{L_2}$.) Если измерены две частоты (резонансные или “антирезонансные”), их значения

можно подставить в соответствующие уравнения (3) или (13), в результате чего задача определения изгибной жесткости наностержня сведется к решению системы двух трансцендентных уравнений относительно двух неизвестных. Следует отметить, что уравнение (13) для “антирезонансных” частот проще уравнения (3) и в отличие от уравнения (3) уравнение (13) не содержит малого параметра $\frac{C}{D_1 \lambda^3}$. Таким образом, с вычислительной

точки зрения метод определения изгибной жесткости наностержня по “антирезонансным” частотам имеет преимущество. Однако для повышения достоверности результатов имеет смысл воспользоваться двумя методами и сравнить полученные значения D_2 и C .

Авторы благодарят А.В. Анкудинова и А.Н. Титкова за обсуждение работы.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проекты 03-01-00721, 05-01-00094, и гранта Президента РФ МД-3475.2005.1.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Кривцов А.М., Морозов Н.Ф.* // ДАН. 2001. Т. 381. № 3. С. 825–827.
2. *Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф.* // ДАН. 2002. Т. 385. № 4. С. 494–496.
3. *Дунаевский М.С., Grob J.J., Забродский А.Г. и др.* // ФТП. 2004. Т. 38. В. 11. С. 1294.
4. *Binning G., Quate C.F., Gerber C.* // Phys. Rev. Lett. 1986. V. 31. P. 22–26.
5. *Gorsmann B., Fuchs H.* // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 86. P. 2597.
6. *Rabe U., Janser K., Arnold W.* // Rev. Sci. Instrum. 1996. V. 67. № 9. P. 3281–3293.
7. *Gibson C.T., Smith D.A., Roberts C.J.* // Nanotechnology. 2005. V. 16. P. 234–238.
8. *Гулд С.* Вариационные методы в задачах о собственных значениях. Введение в метод промежуточных задач Вайнштейна. Мг., 1970.
9. *Принц В.Я.* // Изв. ВУЗов. Физика. 2003. Т. 6. С. 35–43.
10. *Prinz V.Ya* // Microelectron. Eng. 2003. V. 69. Iss. 2/4. P. 466–475.
11. <http://www.ntmdt.ru/SPM-Techniques/Principles/AFM-mode2.html>
12. *Иванова Е.А., Морозов Н.Ф.* // ДАН. 2005. Т. 400. № 4. С. 475–479.