

## НОВАЯ МОДЕЛЬ КОНТАКТНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЗОНДА АТОМНО-СИЛОВОГО МИКРОСКОПА С ИССЛЕДУЕМЫМ МАТЕРИАЛОМ\*

Ужегова Н.И.<sup>1</sup>, Свистков А.Л.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>ФГБУН Институт механики сплошных сред УрО РАН, г. Пермь, Россия

<sup>2</sup>Пермский государственный национальный исследовательский университет, г. Пермь, Россия

### АННОТАЦИЯ

Полимерные нанокompозиты находят большое применение в различных областях промышленности. Механические и эксплуатационные свойства таких материалов напрямую зависят от структуры материала на наноуровне. Поэтому актуальным является задача исследования влияния взаимодействия наполнителя со связующим и его вклад в формирование макроскопических свойств материала. Наиболее перспективным инструментом, который позволяет исследовать не только структуру материала на наноуровне, но и его локальные механические свойства, является атомно-силовой микроскоп (АСМ). Суть работы данного прибора заключается в сканировании поверхности образца и получении зависимости глубины проникновения зонда от приложенной нагрузки. Расшифровка такой экспериментальной зависимости предполагает применение специальных математических моделей контактного взаимодействия. В настоящее время чаще всего для этого применяются модели Дерягина-Мюллера-Топорова (ДМТ) и Джонсона-Кендалла-Робертса (ДжКР). Они берут за основу упругой составляющей контактного взаимодействия решение Герца и учитывают энергию межмолекулярного взаимодействия. Модель ДМТ рассматривает энергию межмолекулярного взаимодействия за пределами контактной области, а теория ДжКР – внутри контактной области. Особенностью модели Дерягина-Мюллера-Топорова является то, что в ней нет возможности рассчитать, как тянется прилипший к зонду материал при его отведении от поверхности. Модель Джонсона-Кендалла-Робертса позволяет аппроксимировать экспериментальные данные и при подведении зонда к поверхности образца, и при его отведении. Но эта модель не учитывает жесткость используемого кантилевера атомно-силового микроскопа. Это должно отразиться на точности результатов вычисления. В данной работе представлена новая модель контактного взаимодействия зонда атомно-силового микроскопа и мягкого материала. Важным ее элементом является учет особенностей упругого поведения кантилевера при анализе величины подъема зонда за счет действия поверхностных сил и использование геометрии зонда в виде параболоида вращения.

**Ключевые слова:** нанокompозиты; атомно-силовая микроскопия; наноиндентирование; силовая кривая; геометрия зонда; механические свойства материала; модели контактного взаимодействия; модель Герца; модель Дерягина-Мюллера-Топорова; модель Джонсона-Кендалла-Робертса

---

\* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 16-08-00914-р\_а и 14-01-96002-р\_урал\_а).

# A NEW MODEL FOR CONTACT INTERACTION BETWEEN AN ATOMIC FORCE MICROSCOPE PROBE AND A SAMPLE

Uzhegova N.I.<sup>1</sup>, Svistkov A.L.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Continuous Media Mechanics UB RAS, Perm, Russia*

<sup>2</sup>*Perm State University, Perm, Russia*

## ABSTRACT

Polymer materials have found increasing use in various industries. The mechanical properties of these materials and their operational characteristics are directly dependent on the material structure at the nanoscale. In this context, investigation of filler-matrix interactions and their contribution to generation of the macroscopic properties of the material is the problem of current interest. Using of an atomic force microscope (AFM) opened new possibilities for studying not only the structure of the material at the nanoscale, but also its local mechanical properties. The AFM images the topography of a sample surface by scanning the cantilever over the sample and yields a relationship between the applied load and the penetration depth. An understanding of this relationship requires special mathematical contact interaction models. The most common models for this purpose are the Derjaguin-Muller-Toporov (DMT) and Johnson-Kendall-Roberts (JKR) models. In both models the Hertz solution is used as a basis for the elastic component of contact interaction. However, in contrast to the Hertz model, they are able to take into account intermolecular interaction energy: the DMT model – out of the contact region, and the JKR model – within the contact region. A specific feature of the DMT model is that it does not allow one to evaluate how the probe moving away from the sample surface drags the material. The JKR model makes it possible to approximate experimental data in both cases, i.e. when the cantilever approaches and retracts the sample surface. However, it neglects the stiffness of the AFM cantilever, which should affect the accuracy of the calculation results. In the present paper, a new model for contact interaction between the AFM cantilever and the sample made of soft material is proposed. It takes into account the peculiarities of the elastic behavior of a cantilever by analyzing the value of probe lifting due to surface forces and by considering the probe as a rotational paraboloid.

**Keywords:** nanocomposites; atomic force microscopy; force-distance curve; probe geometry; mechanical properties of material; contact interaction models; Hertz model; DMT model; JKR model

## ВВЕДЕНИЕ

В последнее десятилетие большое внимание уделяется новому типу композиционных материалов – нанокомпозитам. Под ними понимается класс композитов, в которых хотя бы один компонент представляет собой объект нанометрового размера. Особое место среди них занимают полимерные нанокомпозиты, применяемые в промышленности. В этом случае, часто в качестве матрицы используются эластомерные материалы (бутадиен-стирольный каучук, натуральный каучук, полипропилен, полистирол и др.). Наполнители могут быть самые различные: частицы технического углерода, монтмориллонита, графена, нанотрубки, наноалмазы и т.д.

Для получения полимерных нанокомпозитов с улучшенными свойствами, необходимо знать не только свойства наполнителя и матрицы, но и как формируются на наноуровне макроскопические свойства материала, и какие процессы происходят около частиц наполнителя. Таким образом, необходимо

проводить не только макроскопические испытания, но и анализировать структуру материала на наномасштабном уровне.

Наиболее перспективным методом изучения материала на наноуровне, который позволяет не только исследовать особенности структуры образца, но и получать информацию о его механических характеристиках, является атомно-силовая микроскопия. Основной деталью атомно-силового микроскопа, осуществляющей получение информации о рельефе поверхности и свойствах исследуемого образца, является кантилевер, один конец которого жестко закреплен, а на втором конце расположен зонд (рис.1).

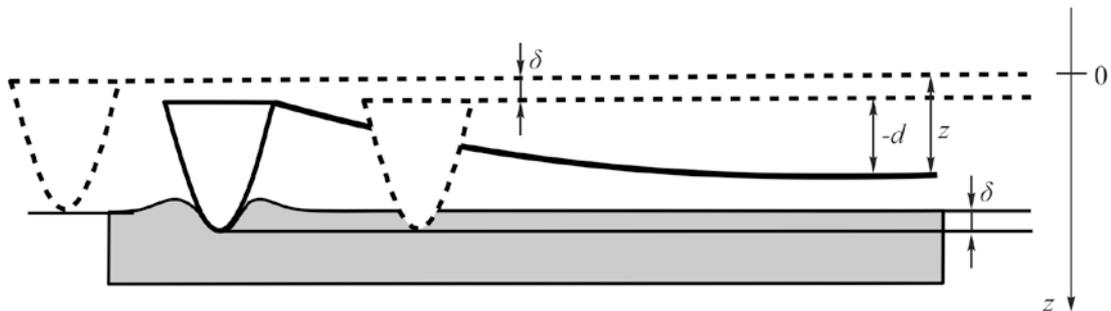


Рис.1. Схематичное представление перемещения основания кантилевера вдоль оси  $z$  при его подводе к образцу и соответствующее отклонение его свободного конца  $d$ , где  $\delta$  – глубина погружения зонда.

Механические свойства материала получают при работе в силовой моде, которая предполагает непосредственный контакт зонда атомно-силового микроскопа с поверхностью исследуемого материала. В этом случае регистрируется силовая кривая – зависимость отклонения свободного конца кантилевера  $d$ , на котором расположен зонд, от перемещения его основания по направлению к поверхности образца и обратно (рис.2а). Координату положения основания кантилевера обозначим символом  $z$  и направим ось вертикально вниз (рис.1). За нулевую координату возьмем точку касания материала с зондом. В математических моделях она хорошо известна. В экспериментальных данных определение такой точки представляет определенную проблему. В моделях Дерягина-Мюллера-Топорова и Джонсона-Кендалла-Робертса не учитывается скачек к поверхности образца под действием сил Ван-дер-Ваальса [1-2]. Имеет место только скачек зонда внутри материала. В экспериментальных данных оба явления воспринимаются как один большой скачек к поверхности (участок АВ силовой кривой на рис.2а). Зная значение коэффициента жесткости кантилевера, данную зависимость можно перестроить в координатах приложенная сила – глубина проникновения зонда (рис.2б). Для расшифровки получаемой силовой кривой и определения механических свойств образца применяются различные модели контактного взаимодействия.

Методы атомно-силовой микроскопии развиваются быстрыми темпами и находят применение при изучении самых разных материалов: от металлов до биологических объектов [3-11]. Несмотря на то, что большое количество численных и аналитических моделей контактного взаимодействия разработаны к настоящему времени, создание новых моделей контактного взаимодействия, учитывающих те или иные свойства исследуемых образцов, является актуальной задачей. Основное отличие существующих моделей заключается в определении точки начала контакта, контактного радиуса взаимодействия, значения силы,

которую необходимо приложить для прерывания контакта, учет трения или проскальзывания, а также такой особенности поверхности, как шероховатость [12].

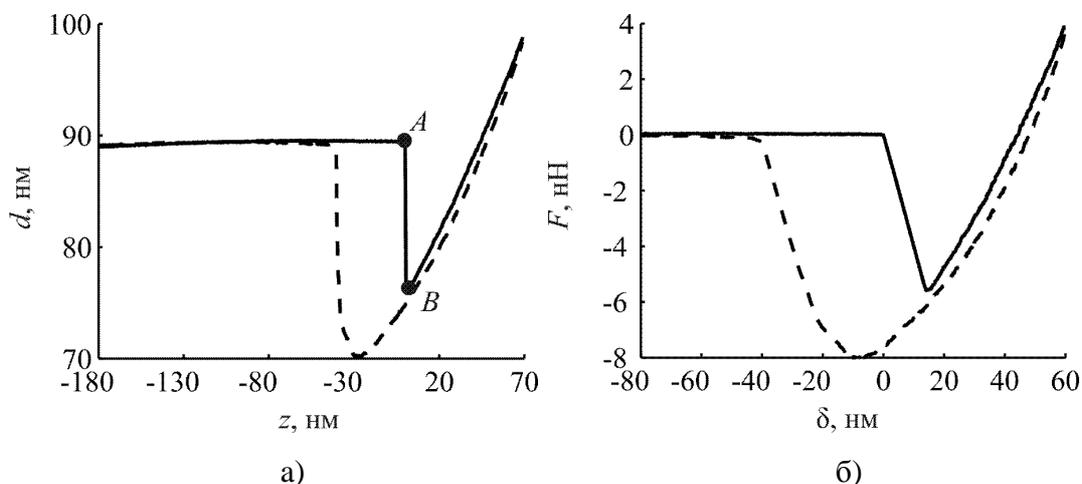


Рис.2. Типичная силовая кривая, получаемая с помощью АСМ, где сплошная линия – прямой ход движения кантилевера (приближение к поверхности образца), пунктирная линия – обратный ход движения кантилевера (отвод кантилевера от поверхности образца).

Как правило, применительно к обработке силовых кривых АСМ выделяют три основные модели контактного взаимодействия: теория Герца, теория Дерягина-Мюллера-Топорова и теория Джонсона-Кендалла-Робертса [1-2,13-15]. Остальные модели являются уточняющими для перечисленных теорий или комбинируют их решения.

Первые работы, связанные с определением упругих свойств материала с помощью модели Герца на основе данных, полученных методами атомно-силовой микроскопии, были проведены для графита и золота и имели неплохое согласование с макроиспытаниями [16-17]. Однако дальнейшие исследования выявили несоответствие теоретических и экспериментальных данных для других материалов [18]. Это объяснялось тем, что, во-первых, невозможно точно определить механические и геометрические параметры кантилевера, во-вторых, рассматриваемые модели не учитывали влияние вязкоупругих и пластических свойств материала [19]. В настоящее время считается, что из всех представленных моделей теория Маугиса лучше всего подходит для описания упругой деформации материала [15]. Маугис показал, что теории ДМТ и ДжКР являются предельными случаями одной теории и ввел в рассмотрение ряд параметрических уравнений, решив которые можно определить контактный радиус и деформацию [20]. Таким образом, его модель – это не что иное, как переход от одной теории контактного взаимодействия к другой.

Важно отметить, что обе модели ДМТ и ДжКР берут за основу упругой составляющей силы контактного взаимодействия решение Герца и отличаются только учетом межмолекулярной энергии взаимодействия. Модель Дерягина-Мюллера-Топорова рассматривает энергию межмолекулярного взаимодействия за пределами контактной области, а теория Джонсона-Кендалла-Робертса – внутри контактной области. Особенностью модели ДМТ является то, что в ней нет возможности рассчитать, как тянется прилипший к зонду материал при его

отведении от поверхности. Модель ДжКР лишена этого недостатка и позволяет аппроксимировать экспериментальные данные и при подведении зонда к поверхности образца, и при его отведении. Но эта модель не учитывает жесткость используемого кантилевера атомно-силового микроскопа.

В данной статье предлагается более точная модель контактного взаимодействия зонда АСМ с поверхностью мягкого материала для определения его механических характеристик. Данная модель близка к теории ДжКР, но в отличие от нее учитывает жесткость кантилевера.

## 1. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Рассмотрим контактное взаимодействие зонда АСМ с материалом. Для упрощения задачи представим геометрию зонда в виде параболоида вращения. Исследуемый образец будем считать бесконечным полупространством. Важно отметить, что нас интересует контактное взаимодействие, при котором модуль Юнга одного тела (зонда) гораздо больше, чем модуль Юнга другого тела (образца). Таким образом, зонд можно считать абсолютно жестким телом.

Рассмотрим осесимметричный контакт упругого полупространства и параболоида вращения, поверхность которого описывается уравнением

$$z = \frac{x^2}{2R},$$

где  $R$  – кривизна поверхности в точке  $x = 0$ . Схематично такое взаимодействие показано на рис.3.

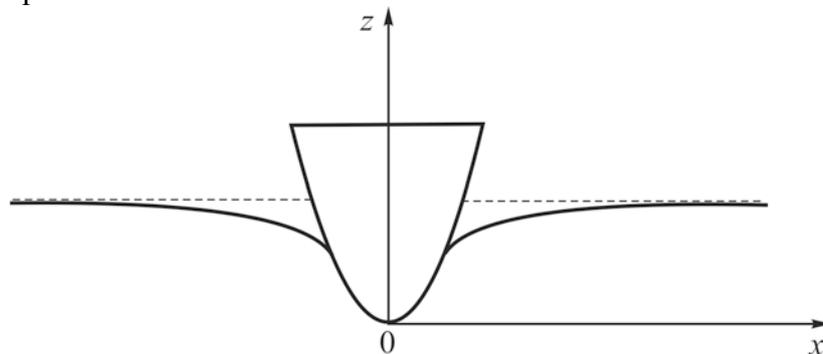


Рис.3. Схема контактного взаимодействия параболоида вращения и плоскости.

Будем считать, что тела являются гладкими на микро- и наноуровне. Это означает, что неровности, которые могли бы привести к неполному контакту на этих уровнях, не учитываются. То есть профили поверхностей считаются непрерывными в зоне контакта вместе со своими вторыми производными. Нас интересует сила  $F$ , с которой взаимодействуют два рассматриваемых тела.

Представим искомое решение в виде суммы двух слагаемых: одно слагаемое будет отвечать за действие упругих сил, второе слагаемое – за действие адгезионных сил, то есть сил, возникающих за счет учета поверхностной энергии взаимодействия двух тел.

Будем считать, что упругая составляющая силы  $F_{el}$  соответствует решению Снеддона для задачи внедрения штампа в виде параболоида вращения в плоскость [21]

$$F_{el}(\delta) = \frac{4}{3} E^* \sqrt{R} \delta^{1.5},$$

где  $\delta$  – глубина проникновения зонда в поверхность материала,  $E^*$  – приведенный модуль упругости, определяемый в общем виде по формуле

$$\frac{1}{E^*} = \frac{1-\nu_1^2}{E_1} + \frac{1-\nu_2^2}{E_2}, \quad (1)$$

где  $\nu_1, \nu_2$  – коэффициенты Пуассона,  $E_1, E_2$  – модули Юнга для каждого из контактирующих тел. Мы рассматриваем зонд как абсолютно твердое тело. Поэтому выражение (1) можно переписать следующим образом

$$\frac{1}{E^*} = \frac{1-\nu^2}{E},$$

где  $\nu$  и  $E$  – коэффициент Пуассона и модуль Юнга образца соответственно.

Глубина внедрения зонда  $\delta$  и радиус контактного взаимодействия  $a$  связаны зависимостью

$$\delta = \frac{a^2}{R}.$$

Введем адгезионные силы аналогично тому, как это реализовано в теории ДжКР [2]. Контакт параболоида вращения и плоскости по кругу радиуса  $a$  с учетом только упругой составляющей силы можно описать несколькими параметрами: глубина проникновения  $\delta$  – расстояние от кончика зонда до исходной поверхности образца, и параметр  $h$ , который равен высоте части зонда, покрытой материалом. Положение зонда в этом случае показано на рис.4 пунктирной линией.

После того как адгезионные силы включаются в рассмотрение линия контакта зонда с материалом поднимается. Новое состояние системы представлено на рис.4.

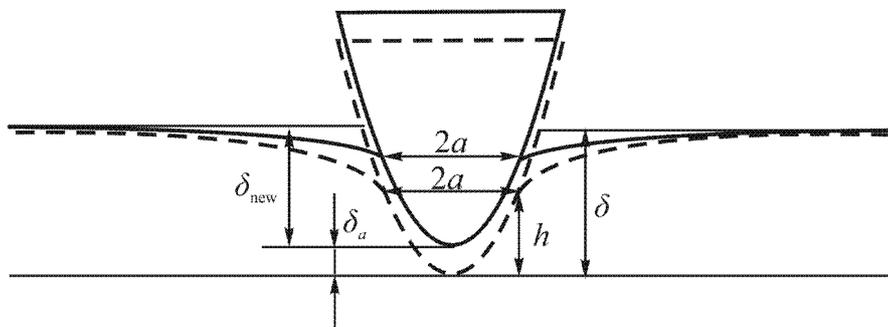


Рис.4. Новое состояние системы после введения в рассмотрение адгезионных сил, где сплошная линия – новое положение контакта параболоида вращения и плоскости с учетом адгезионных сил, пунктирная линия – начальное положение контакта.

Считаем, что радиус контакта остался прежний  $a$ . Расстояние, на которое поднялся зонд за счет действия адгезионных сил, соответствует величине  $\delta_a$ . Глубина проникновения зонда в новом состоянии равна  $\delta_{new}$  (рис.4). Для определенности будем считать оба параметра  $\delta_a$  и  $\delta_{new}$  положительными. Так как радиус контакта остался таким же, то новое значение глубины внедрения зонда вычисляется по формуле

$$\delta_{new} = \delta - \delta_a = \frac{a^2}{R}.$$

Согласно решению Снеддона упругая составляющая силы  $F_{el}(\delta_{new})$  в этом случае

равна

$$F_{el}(\delta_{new}) = \frac{4}{3} E^* \sqrt{R} (\delta_{new})^{1.5} = \frac{4}{3} E^* \sqrt{R} (\delta - \delta_a)^{1.5}.$$

В новое рассматриваемое состояние системы можно прийти, если в исходном состоянии системы приложить распределенную нагрузку по площади контакта таким образом, чтобы за пределами этой области не возникало дополнительных растягивающих напряжений, а внутри области граница поднялась вертикально на заданную величину. Таким образом, дополнительную силу, которая возникает в результате подъема материала по границе зонда, можно учесть с помощью решения задачи контакта цилиндра с упругим полупространством. Задача эта была решена Снеддоном [21]. Схематично данная процедура представлена на рис.5, где исходное положение представлено пунктирной линией, новое положение – сплошной линией, решение для контакта цилиндра и плоскости – штрихпунктирной линией.

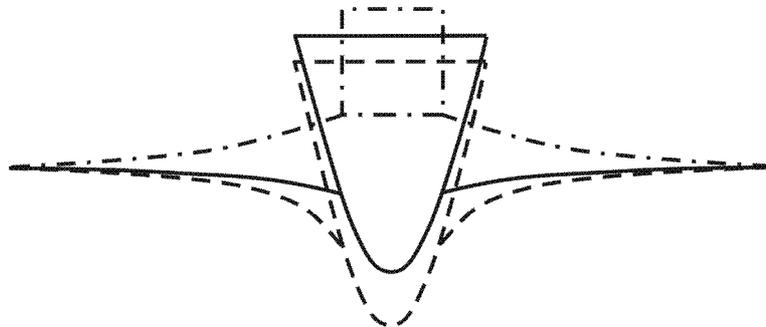


Рис.5. Представление исходного положения (штриховая линия) системы как нового положения (сплошная линия) и адгезионной поправки (штрихпунктирная линия).

Обозначим упругую силу контактного взаимодействия цилиндрического штампа с упругой плоскостью через  $F_{cyl}$ . Согласно уравнению Снеддона сила эта определяется следующим образом [21]

$$F_{cyl}(\delta, \delta_a) = 2a \delta_a E^* = 2\sqrt{R} \sqrt{\delta} \delta_a E^*.$$

Для сохранения равновесия введенная таким образом адгезионная сила должна быть компенсирована действием поверхностных сил и силой упругости кантилевера.

В нашей модели появилась новая переменная  $\delta_a$ . Необходимо ее определить. Поступить можно следующим образом. Обозначим силу, действующую на кантилевер, через  $F_K$ . Введение в рассмотрение адгезионных сил не предполагает смещение основания кантилевера. Изменяется только отклонение его свободного конца на величину  $\delta_a$ . Это означает, что в результате подъема зонда на расстояние  $\delta_a$  изменение действующей упругой изгибной силы кантилевера равно  $F_K = K \cdot \delta_a$ , где  $K$  – коэффициент жесткости кантилевера.

При движении зонда в материале изменяется площадь контакта зонда с образцом. В результате становится другой энергия в рассматриваемой системе, которая зависит от значений плотности поверхностной энергии контактирующих тел. Необходимо в модели учитывать возникающие при этом силы. Действие поверхностных сил представим в виде суммы двух слагаемых: силы, действующей на границе области  $S_1$ , и силы, действующей на границе поверхности контакта  $S_2$  (рис.6). Обозначим их соответственно  $F_1$  и  $F_2$ .

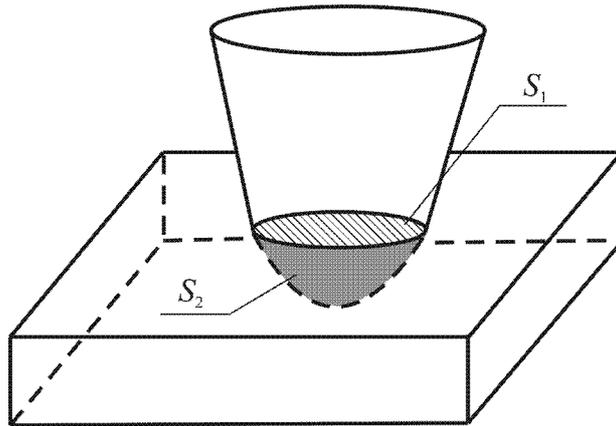


Рис.6. Контакт параболоида вращения и плоскости, где  $S_1$  – граница контактного взаимодействия на плоскости, ограниченная линией взаимодействия трех сред,  $S_2$  – граница поверхности контакта, образованная при внедрении зонда на некоторую глубину.

Рассмотрим сначала энергию поверхностного взаимодействия  $W_1$ , действующую по поверхности  $S_1$ . Это часть плоскости, которая была границей образца до момента проникновения в него зонда АСМ. Пусть  $\gamma_1$  – плотность поверхностной энергии на границе исследуемого материала с воздухом. При внедрении зонда в материал это та часть энергии, которую необходимо вычесть из общей энергии системы, поскольку именно на этой поверхности перестает материал взаимодействовать с воздухом. В нашем случае контактная область является кругом, поэтому энергия вычисляется по формуле

$$W_1 = -\gamma_1 \cdot S_1 = -\gamma_1 \cdot \pi a^2 = -\gamma_1 \cdot \pi \delta R.$$

Зная энергию, можно найти силу взаимодействия

$$F_1 = \frac{\partial W_1}{\partial \delta} = -\gamma_1 \pi R$$

Перейдем к энергии  $W_2$ , действующей на вновь появившейся поверхности контакта зонда с материалом  $S_2$ . Эта энергия необходима для формирования новой площади контакта. Пусть  $\gamma_2$  – плотность поверхностной энергии, представляющая собой разность между плотностями поверхностных энергий, действующих на границе зонда с воздухом, и действующей на границе зонда с исследуемым материалом. Мы рассматриваем абсолютно жесткий зонд. Он не может деформироваться. При внедрении зонда в материал изменяется на участке контакта  $S_2$  только взаимодействие зонд-воздух на взаимодействие зонд-материал. Все это приводит к результату, что энергия взаимодействия по поверхности  $S_2$  вычисляется следующим образом

$$W_2 = -\gamma_2 \cdot S_2.$$

Для параболоида вращения известно, что площадь поверхности находится по формуле

$$S_2 = \frac{2\pi}{3R} \left( (2hR + R^2)^{1.5} - R^3 \right),$$

где  $h = \delta_{new} - \delta_a$  – высота параболоида (рис.4). Тогда энергия взаимодействия, действующая по поверхности контакта, определяется по формуле

$$W_2(\delta_{new}) = -\gamma_2 \frac{2\pi}{3R} \left( (2R\delta_{new} - 2R\delta_a + R^2)^{1.5} - R^3 \right).$$

Аналогично находим силу взаимодействия

$$F_2(\delta_{new}) = \frac{\partial W_2}{\partial \delta_{new}} = -2\pi\gamma_2 \sqrt{2R\delta_{new} - 2R\delta_a + R^2} = -2\pi\gamma_2 \sqrt{2Rh + R^2}.$$

Чтобы определить расстояние, на которое поднялся зонд за счет действия адгезионных сил, то есть параметр  $\delta_a$ , необходимо составить уравнение равновесия. Как было уже сказано, ось  $z$  направлена вниз. Тогда поверхностная сила, действующая по области  $S_1$ , является притягивающей и направлена вниз. Поверхностная сила  $F_2$ , затрачиваемая на образование новой поверхности контакта, является отталкивающей и направлена вверх. Сила  $F_{cyl}$  направлена вниз и сила  $F_K$  направлена вверх. С учетом всех проделанных выкладок уравнение равновесия выглядит следующим образом

$$F_{cyl} - F_1 - F_2 - F_K = 0. \quad (2)$$

Решив представленное уравнение (2) относительно параметра  $\delta_a$ , можно найти силу контактного взаимодействия  $F$  параболоида вращения и плоскости с учетом двух поверхностных сил

$$F = F_{el} + F_{cyl} + F_1 + F_2. \quad (3)$$

Получили новую модель контактного взаимодействия, которая учитывает поверхностные силы, действующие по области  $S_1$  и по поверхности зонда  $S_2$ , а также коэффициент жесткости кантилевера.

Рассмотрим применение предложенной модели контактного взаимодействия к экспериментальным данным, полученным с помощью АСМ.

## 2. ПРИМЕНЕНИЕ К ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМ ДАННЫМ

С помощью АСМ BrukerDimensionIcon в силовом режиме зондом типа ScanAsyst-Air получена силовая кривая для полидиметилсилоксанового образца (рис.2а). Рассмотрим применение разработанной модели контактного взаимодействия для расшифровки имеющейся зависимости. Чтобы это сделать необходимо в первую очередь определить геометрию зонда, в частности нас интересует радиус скругления его кончика.

Это не является тривиальной задачей и в настоящее время существуют различные методики определения геометрии зонда. В нашем случае было проведено дополнительное исследование, путем сканирования специальной калибровочной решетки с известной геометрией. Результаты сканирования были обработаны в программном обеспечении Gwyddion по алгоритму «слепой оценки». Найденный таким образом радиус скругления зонда составил 10 нм.

Для перехода к зависимости глубина погружения зонда – приложенная нагрузка необходимо знать коэффициент жесткости кантилевера. Нахождение значения этого коэффициента является отдельной ветвью исследования, которая выходит за рамки поставленной задачи [22]. Мы воспользовались встроенным программным обеспечением АСМ, которое позволяет определить коэффициент жесткости кантилевера по данным собственных частот колебаний. Определенное таким образом значение коэффициента равно  $K = 0.42$  нН/нм. Силовая кривая в новых координатах показана на рис.2б.

И последнее, что необходимо знать, это – координаты точки начала контакта. Данный вопрос также до сих остается открытым, несмотря на большое количество опубликованных работ. При приближении зонда АСМ к поверхности материала происходит скачок на силовой кривой (рис.2а), величина которого

зависит от жесткости кантилевера. Для мягких кантилеверов значение скачка может достигать 10-15 нм. Экспериментально фиксируются две точки: точка А и точка В (рис.2а). Проведенные численные расчеты показывают, что скачок к поверхности только за счет сил притяжения Ван дер Ваальса может быть не более 2-3 нм [23]. Наиболее распространенным объяснением является действие капиллярных сил, так как на поверхности исследуемого материала в обычных атмосферных условиях всегда есть адсорбированная пленка жидкости [24-27]. Анализ влияния капиллярных явлений на взаимодействие зонда АСМ с поверхностью образца с учетом действия сил Лапласа показал, что капиллярные силы не могут быть объяснением данной особенности на силовой кривой [28]. Будем считать, что точка начала контакта – это перегиб на прямом ходе движения кантилевера, то есть точка А на рис.2а.

Материал, выбранный в качестве образца для исследования, является калибровочным для АСМ с известным значением модуля упругости 2.6 МПа. Возьмем это значение за основу для аппроксимации силовой кривой.

Новая модель содержит два неизвестных параметра  $\gamma_1$  и  $\gamma_2$ . Варьируя эти параметры, подбирается кривая, наиболее близкая к экспериментальным данным. Аппроксимация силовой кривой для найденных значений параметров  $\gamma_1$  и  $\gamma_2$ , равных соответственно  $\gamma_1 = -0.016$  нН/нм и  $\gamma_2 = 0.275$  нН/нм, показана на рис.7.

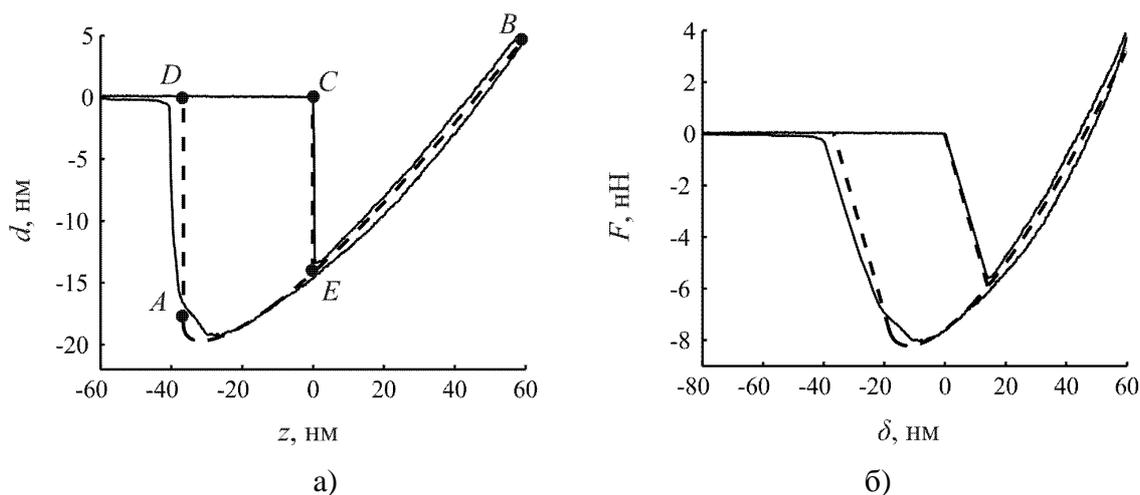


Рис.7. Аппроксимация экспериментальной силовой кривой по новой модели контактного взаимодействия в разных осях, где сплошная линия – экспериментальные данные, пунктирная линия – теоретические данные.

В действительности согласно уравнению (3) получается только часть силовой кривой АВ на рис.7а. До контакта параболоида с поверхностью положение системы описывается точкой С, в которой сила взаимодействия и глубина внедрения зонда равны нулю. Как только происходит контакт параболоида вращения и поверхности материала, то появляется энергия поверхностного взаимодействия, которая определяется параметрами  $\gamma_1$  и  $\gamma_2$ . За счет этого происходит скачок из равновесного положения, обозначенного точкой С на рис.7а, в точку Е, которая соответствует полученному решению. Далее считаем, что прямой и обратный ход движения кантилевера на участке ЕВ совпадает, потому что в модели не учитывается пластичность и вязкоупругость. Отрыв зонда на обратном ходе движения кантилевера происходит в точке А. Ближайшая равновесная точка, в которой сила взаимодействия и глубина

проникновения зонда равны нулю, – точка *D*. Таким образом прямой ход движения кантилевера соответствует участкам силовой кривой *CE*, *EB*; обратный ход – *BE*, *EA*, *AD*. Зависимость глубины погружения зонда от приложенной нагрузки представлена на рис.7б.

Анализируя представленные изображения, можно сделать вывод о том, что предложенная модель качественно и количественно хорошо описывает экспериментальные данные.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе представлена новая модель контактного взаимодействия зонда АСМ и мягкого материала. Важным ее элементом является учет особенностей упругого поведения кантилевера при анализе величины подъема зонда за счет действия поверхностных сил и использование геометрии зонда в виде параболоида вращения. Получено хорошее соответствие теоретических расчетов с экспериментальными данными по наноиндентированию полидиметилсилоксанового образца.

*Авторы выражают благодарность Морозову И.А. за предоставленные экспериментальные данные, полученные с помощью атомно-силового микроскопа.*

## ЛИТЕРАТУРА

1. Derjaguin B.V., Muller V.M., Toporov YU.P. *Effect of contact deformations on the adhesion of particles* // J. of Colloid and Interface Science. – 1975. – Vol.53. – No.2. – Pp.314-326.
2. Johnson K.L., Kendall K., Roberts A.D. *Surface energy and contact of elastic solids* // Proc.Roy. Soc.Lond. – 1971. – Vol.324. – Pp.301-313.
3. Attard P., Paker J.L. *Deformation and adhesion of elastic bodies in contact* // Phys. Rev. A. – 1992. – Vol.46. – No.12. – Pp.7959-7971.
4. Greenwood J.A. *Adhesion of elastic spheres* // Proc.R. Soc.Lond. A. – 1997. – Vol.453. – Pp.1277-1297.
5. Feng J.Q. *Contact behavior of spherical elastic particles: a computational study of particle adhesion and deformations* // J. Colloids and Surfaces A. – 2000. – Vol.172. – Pp.175-198.
6. Greenwood J.A. *On the DMT theory* // Tribology Letters. – 2007. – Vol.26. – Pp.203-211.
7. Chaundhury M.K., Weaver T., Hui C.Y., Kramer E.J. *Adhesive contact of cylindrical lens and a flat sheet* // J. Appl. Phys. – 1996. – Vol.80. – Pp.30-37.
8. Leng Y.S., Hu Y.Z., Zheng L.Q. *Adhesion of smoothy flat-ended wedges* // J. Proc.R. Soc.Lond. A. – 2000. – Vol.456. – Pp.185-204.
9. Johnson K.L., Greenwood J.A. *A Maugis analysis of adhesive line contact* // J. of Physics D: Applied Physics. – 2008. – Vol.41. – Pp.155315.
10. Wu J. *Adhesive contact between a cylinder and a half-space* // J. of Physics D: Applied Physics. – 2009. – Vol.42. – Pp.155302.
11. Belikov S., Magonov S. *Tip-sample interaction force modeling for AFM simulation, control design, and material property measurement* // American Control Conference. Proceedings. – San Francisco, USA, 2011. – Pp.2867-2872.
12. Горячева И.Г., Маховская Ю.Ю. *Моделирование трения на разных*

- масштабных уровнях // Известия Российской академии наук. Механика твердого тела. – 2010. – №3. – С.100-110.
13. Джонсон К. *Механика контактного взаимодействия*. – М.: Мир, 1989. – 510 с.
  14. Maugis D. *Contact, adhesion and rupture of elastic solids*. – Berlin: Springer, 2000. – 414 p.
  15. Butt H.-J., Capella B., Kappl M. *Force measurements with the atomic force microscope: Technique, interpretation and application* // Surface Science Report. – 2005. – Vol.59. – Pp.1-152.
  16. Burnham N.A., Colton R.J. *Measuring the nanomechanical properties and surface forces of materials using an atomic force microscope* // J. VaC.Sci. Technol. – 1989. – Vol.7. – No.4. – Pp.2906-2913.
  17. Cohen S.R., Neubauer G., McClelland G.M. *Nanomechanics of a AU-IR contact using a bidirectional atomic force microscope* // J. VaC.Sci. Technol. – 1990. – Vol.8. – No.4. – Pp.3449-3454.
  18. Hao H.W., Baro A.M., Saenz J.J. *Electrostatic and contact forces in force microscopy* // J. VaC.Sci. Technol. – 1991. – Vol.9. – No.2. – Pp.1323-1328.
  19. Aime J.P., Elkaakour Z., Odin C., Bouhacina T., Michel D., Curely J., Dautant A. *Comments on the use of the force mode in atomic-force microscopy for polymer-films* // J. Appl. Phys. – 1994. – Vol.76. – No.2. – Pp.754-762.
  20. Maugis D. *Adhesion of Spheres: The JKR - DMT transition using a Dugdale model* // Journal of Colloid and Interface Science. – 1992. – Vol.150. – No.1. – Pp.243-269.
  21. Sneddon I.N. *The relation between load and penetration in the axisymmetric boussinesq problem for a punch of arbitrary profile* // Intern. J. of Engineering Science. – 1965. – Vol.3. – No.1. – Pp.47-57.
  22. Grutzik S.J., Gates R.S., Gerbig Y.B., Smith D.T., Cook R.F., Zehnder A.T. *Accurate spring constant calibration for very stiff atomic force microscopy cantilevers* // Review of Scientific Instruments. – 2013. – Vol.84. – No.11. – Pp.113706.
  23. Гаришин О.К. *Моделирование контактного режима работы атомно-силового микроскопа с учетом немеханических сил взаимодействия с поверхностью образца* // Вычислительная механика сплошных сред. – 2012. – Т.5. – №1. – С.61-69.
  24. Weisenhorn A.L., Hansma P.K., Albrecht T.R., Quate C.F. *Forces in atomic force microscopy in air and water* // J. Appl. Phys. Lett. – 1989. – Vol. 54. – N.26. – Pp.2651-2653.
  25. Baselt D.R., Baldeschwieler J.D. *Imaging spectroscopy with the atomic force microscope* // J. Appl. Phys. – 1994. – Vol.76. – No.1. – Pp.33-38.
  26. Elkin B., Mayer J., Shindler B., Vohner U. *Wettability, chemical and morphological data of hydrophobic layers by plasma polymerization on smooth substrates* // Surface and Coating Technology. – 1999. – Vol.116-119. – Pp.863-840.
  27. Рехвиашвили С.Ш., Розенберг Б.А., Дремов В.В. *Влияние размерной зависимости поверхности натяжения жидкой пленки на капиллярную силу в атомно-силовом микроскопе* // Письма в ЖЭТФ. – 2008. – Т.88. – №11. – С.887-891.
  28. Uzhegova N.I., Svistkov A.L., Lauke B., Heinrich G. *The influence of capillary effect on atomic force microscopy measurements* // Intern. J. of Engineering Science.

## REFERENCES

1. Derjaguin B.V., Muller V.M., Toporov YU.P. *Effect of contact deformations on the adhesion of particles*. J. of Colloid and Interface Science, 1975, Vol.53, No.2, Pp.314-326.
2. Johnson K.L., Kendall K., Roberts A.D. *Surface energy and contact of elastic solids*. Proc.Roy. Soc.Lond, 1971, Vol.324, Pp.301-313.
3. Attard P., Paker J.L. *Deformation and adhesion of elastic bodies in contact*. J. Phys. Rev. A, 1992, Vol.46, No.12, Pp.7959 - 7971.
4. Greenwood J.A. *Adhesion of elastic spheres*. Proc.R. Soc.Lond. A, 1997, Vol.453, Pp.1277-1297.
5. Feng J.Q. *Contact behavior of spherical elastic particles: a computational study of particle adhesion and deformations*. J. Colloids and Surfaces A, 2000, Vol.172, Pp.175-198.
6. Greenwood J.A. *On the DMT theory*. Tribology Letters, 2007, Vol.26, Pp.203-211.
7. Chaundhury M.K., Weaver T., Hui C.Y., Kramer E.J. *Adhesive contact of cylindrical lens and a flat sheet*. J. Appl. Phys, 1996, Vol.80, Pp.30-37.
8. Leng Y.S., Hu Y.Z., Zheng L.Q. *Adhesion of smoothy flat-ended wedges*. J. Proc.R. Soc.Lond. A, 2000, Vol.456, Pp.185-204.
9. Johnson K.L., J.A. Greenwood *A Maugis analysis of adhesive line contact*. J. of Physics D: Applied Physics, 2008, Vol.41, Pp.155315.
10. Wu J. *Adhesive contact between a cylinder and a half-space*. J. of Physics D: Applied Physics, 2009, Vol.42, Pp.155302.
11. Belikov S., Magonov S. *Tip-sample interaction force modeling for AFM simulation, control design, and material property measurement*. American Control Conference. Proceedings. San Francisco, USA, 2011, Pp.2867-2872.
12. Goryacheva I.G., Makhovskaya Y.Y. *Modeling of friction at different scale levels*. Mechanics of Solids, 2010, Vol.45, No.3, Pp.390-398.
13. Johnson K.L. *Contact mechanics*, UK: Cambridge university press, 1985 – 452 p.
14. Maugis D. *Contact, adhesion and rupture of elastic solids*, Berlin: Springer, 2000, 414 p.
15. Butt H.-J., Capella B., Kappl M. *Force measurements with the atomic force microscope: Technique, interpretation and application*. Surface Science Report, 2005, Vol.59, Pp.1-152.
16. Burnham N.A., Colton R.J. *Measuring the nanomechanical properties and surface forces of materials using an atomic force microscope*. J. VaC.Sci. Technol, 1989, Vol.7, No.4, Pp.2906-2913.
17. Cohen S.R., Neubauer G., McClelland G.M. *Nanomechanics of a AU-IR contact using a bidirectional atomic force microscope*. J. VaC.Sci. Technol, 1990, Vol.8, No.4, Pp.3449-3454.
18. Hao H.W., Baro A.M., Saenz J.J. *Electrostatic and contact forces in force microscopy*. J. VaC.Sci. Technol, 1991, Vol.9, No.2, Pp.1323-1328.
19. Aime J.P., Elkaakour Z., Odin C., Bouhacina T., Michel D., Curely J., Dautant A. *Comments on the use of the force mode in atomic-force microscopy for polymer-films*. J. Appl. Phys, 1994, Vol.76, No.2, Pp.754-762.
20. Maugis D. *Adhesion of Spheres: The JKR - DMT transition using a Dugdale model*. J. of Colloid and Interface Science, 1992, Vol.150, No.1, Pp.243-269.
21. Sneddon I.N. *The relation between load and penetration in the axisymmetric*

- boussinesq problem for a punch of arbitrary profile*. Intern. J. of Engineering Science, 1965, Vol.3, No.1, Pp.47-57.
22. Grutzik S.J., Gates R.S., Gerbig Y.B., Smith D.T., Cook R.F., Zehnder A.T. *Accurate spring constant calibration for very stiff atomic force microscopy cantilevers*. Review of Scientific Instruments, 2013, Vol.84, No.11, Pp.113706.
23. Garishin O.K. *Modelirovanie kontaktnogo rezhima raboty atomno-silovogo mikroskopa s uchetom nemekhanicheskikh sil vzaimodeistviia s poverkhnost'iu obraztsa* [Simulation of atomic-force microscope contact mode operation taking into account nonmechanical forces of interaction with a specimen surface]. Vycisl. meh. splos. sred - Computational Continuum Mechanics, 2012, Vol.5, No.1, Pp.61-69.
24. Weisenhorn A.L., Hansma P.K., Albrecht T.R., Quate C.F. *Forces in atomic force microscopy in air and water*. J. Appl. Phys. Lett, 1989, Vol.54, N.26, Pp.2651-2653.
25. Baselt D.R., Baldeschwieler J.D. *Imaging spectroscopy with the atomic force microscope*. J.Appl. Phys, 1994, Vol.76, No.1, Pp.33-38.
26. Elkin B., Mayer J., Shindler B., Vohner U. *Wettability, chemical and morphological data of hydrophobic layers by plasma polymerization on smooth substrates*. Surface and Coating Technology, 1999, Vol.116-119, Pp.863-840.
27. Rekhviashvili S.Sh., Rozenberg B.A., Dremov V.V. *Influence of the size-dependent surface tension of a liquid film on a capillary force in an atomic force microscope*, 2008, Vol.88, No.11, Pp.772-776.
28. Uzhegova N.I., Svistkov A.L., Lauke B., Heinrich G. *The influence of capillary effect on atomic force microscopy measurements*. Intern. J. of Engineering Science, 2014, Vol.75, Pp.67-78.

Поступила в редакцию 27 мая 2016 года.

---

Сведения об авторах:

Ужегова Надежда Ивановна – инж.-исследователь, ФГБУН Институт механики сплошных сред УрО РАН, г. Пермь, Россия; e-mail: [uzhegova@icmm.ru](mailto:uzhegova@icmm.ru)

Свистков Александр Львович – д.ф.-м.н., проф., зав.лаб., Пермский государственный национальный исследовательский университет, г. Пермь, Россия; e-mail: [a.svistkov@yandex.ru](mailto:a.svistkov@yandex.ru)