

СХЕМА ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССА ФОРМИРОВАНИЯ СТМ-ИГЛ МЕХАНИЧЕСКИМ СПОСОБОМ

А.В. Тюриков, Е.Ю. Шелковников, П.В. Гуляев, Б.Л. Жуйков, П.А. Стаханова
Институт механики УрО РАН
Ижевский государственный технический университет им. М.Т. Калашникова
г. Ижевск

Статья посвящена вопросам численного моделирования разрыва шейки заготовок платиновых игл сканирующего туннельного микроскопа, обеспечивающих его атомное разрешение.

Ключевые слова: сканирующий туннельный микроскоп, зондирующее острие, моделирование

Проблема изготовления атомарно острых зондирующих острий, используемых для получения изображений исследуемой поверхности с атомным разрешением, имеет первостепенное значение для сканирующей туннельной микроскопии. Применение вольфрама для изготовления игл сканирующего туннельного микроскопа (СТМ) является традиционным, но сопряжено с трудностями технологического характера (в частности, сложностью их изготовления методом комбинированного химического и электрохимического травления, некоторой химической нестойкостью, обуславливающей постепенное «загрязнение» атомарно острого кончика, обеспечивающего атомарное разрешение СТМ и др.) [1-3]. Использование платины и платиноидового сплава для изготовления зондов позволяет избежать вышеописанные технологические проблемы, при этом инертность платины обеспечивает беспрецедентную «чистоту» острия. Следует отметить, что существующие методы изготовления платиновых зондов позволяют достоверно получать с их помощью СТМ-изображения поверхности с атомным разрешением. Простая механическая обработка не позволяет формировать атомарно острые острия, поэтому существующие методики требуют использования специально заточенных ножниц, которыми производится разрезание заготовки из платиновой проволоки под строго определенным углом с одновременным вытягиванием до разрыва места среза заготовки. Тем не менее, такая технология изготовления также обладает существенными недостатками. Например, значительные касательные напряжения прикладываемые к проволоке при ее разрезании ножницами, приводят к «штопороподобной» форме зондирующего острия, что,

во-первых, негативно сказывается на простоте эксплуатации подобных игл, а во-вторых, не гарантируют полной вероятности появления атомарно острых нановыступов кончика острия, направленных строго по нормали к исследуемой поверхности. Исследования, проводимые в Институте Механики УрО РАН в настоящее время, имеют целью разработать технологию создания атомарно-острых платиновых острий СТМ, использующую доступные и быстрые механические методы, но лишенную вышеперечисленных недостатков. Данная работа посвящена решению этой, без сомнения важной и актуальной проблемы сканирующей туннельной микроскопии.

Ранее [3] при исследовании характера атомарных нановыступов, образующихся при разрыве вольфрамовой заготовки в процессе изготовления зондирующих острий СТМ методом химического травления, было показано, что необходимые для формирования туннельного тока нановыступы на кончике иглы образуются при разрыве шейки вольфрамовой заготовки в процессе ее колебаний, возникающих в заключительном этапе травления. При этом для моделирования применялся хорошо зарекомендовавший себя метод молекулярной динамики (ММД) [4]. Этот же метод применяется и в исследовании механического разрыва платиновой заготовки.

Прямой механический разрыв платиновой проволоки сопряжен с существенным усилием, приложение которого не позволяет производить его строгий контроль как по величине, так и по направлению. Поэтому актуальной становится задача подготовки шейки платиновой заготовки одним из следующих способов:

- химическое травление;

СХЕМА ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССА ФОРМИРОВАНИЯ СТМ-ИГЛ МЕХАНИЧЕСКИМ СПОСОБОМ

– формирование шейки механическим способом.

Поскольку использование первого способа требует создания специальных условий для обеспечения безопасности человека (из-за применения для травления сильных неорганических кислот, обладающих отравляющим эффектом) и довольно длительного технологического процесса травления – для формирования шейки заготовки платиновой иглы целесообразно использовать механические методы. Это возможно выполнить в специально изготовленном устройстве, принцип действия которого приведен на рисунке 1.

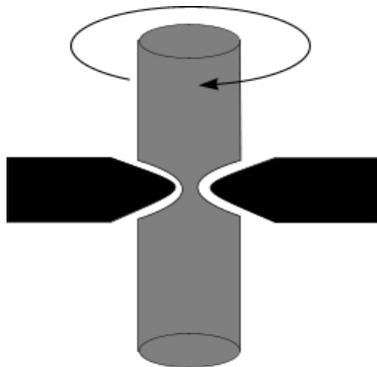


Рисунок 1 – Формирование шейки платиновой заготовки

Проволока из платины, вращаясь, равномерно срезается двумя сжимающимися экстремально острыми резцами с одновременным контролем глубины реза. При достижении диаметра ~1 мкм в наиболее тонкой части шейки ее можно считать сформированной.

Моделирование разрыва шейки с применением контролируемого вытягивания производится методом ММД по схеме, представленной на рисунке 2. Область шейки моделируется большим, но конечным кластером атомов платины. Массивные (бесконечные) части заготовки зонда задаются специальными граничными условиями на границе области шейки. Уравнения метода молекулярной динамики описывают движение взаимодействующих классических частиц вещества. Пусть система состоит из N частиц. Тогда уравнения движения имеют вид [5]:

$$\begin{cases} \vec{V}_i = \frac{d\vec{r}_i}{dt}; \\ \vec{F}_i = \frac{m_i d\vec{V}_i}{dt}, \end{cases} \quad i = \overline{1, N}, \quad (1)$$

где \vec{r}_i , \vec{V}_i , m_i - радиус-вектор, скорость, масса и сила, i -й частицы, соответственно.

ПОЛЗУНОВСКИЙ АЛЬМАНАХ №1 2013

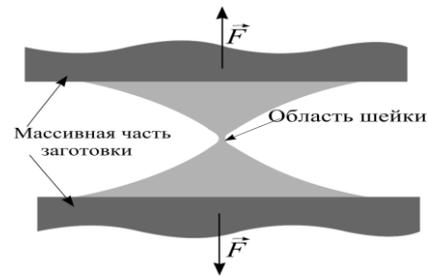


Рисунок 2 – Вытягивание шейки заготовки путем приложения контролируемой силы \vec{F}_i

Сила \vec{F}_i , действующая на i -ю частицу, равна сумме сил, обусловленных взаимодействием с остальными частицами, а также внешними силами, определяемыми в зависимости от моделируемого объема и условий, в которых он находится.

Таким образом, в работе разработана и описана схема численного моделирования методом ММД механического разрыва шейки заготовки платинового зонда СТМ, позволяющая производить моделирование поведения острия и характера образующихся на его конце нановыступов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Липанов А.М., Тюриков А.В., Шелковников Е.Ю., Гудцов Д.В. Исследование области разрыва «шейки» заготовки зондирующей иглы СТМ при ее изготовлении методом электрохимического травления // Химическая физика и мезоскопия. – 2005. – Т.7. – №2. – С.162-168.
2. Липанов А.М., Тюриков А.В., Шелковников Е.Ю., Гудцов Д.В., Гуляев П.В. Численные исследования микротопологии острия зондирующей иглы СТМ при его формировании электрохимическим методом // Ползуновский Альманах. – Барнаул: АлтГТУ, 2006.
3. Липанов А.М., Тюриков А.В., Горохов М.М. Моделирование процесса химического травления зондирующих игл сканирующего туннельного микроскопа // Вестник ИжГТУ. – 2006. – №2. – С.3-8.
4. Skeel R., Bhandarkar M., Phillips J., et al. NAMD2: Greater scalability for parallel molecular dynamics // Journal of Computational Physics. – 1999. – V. 151. – P. 283-312.

Тюриков Александр Валерьевич – к.ф.-м.н., доцент, тел.: (3412) 21-89-55, e-mail: iit@udman.ru; Шелковников Евгений Юрьевич – д.т.н., профессор; Гуляев Павел Валентинович – к.т.н., Жуйков Богдан Леонидович – аспирант; Стаханова Полина Александровна – ст. преподаватель.