

ВАН-ДЕР-ВААЛЬСОВО ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ ТЕЛ С ПЛОСКОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ

Канаметов А.А.

Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова

kanametov_a@mail.ru

Рассматривается динамическое взаимодействие нейтрального тела цилиндрической формы с плоской поверхностью в случае, когда движение тела происходит параллельно поверхности. Показано, что как для параллельной, так и для перпендикулярной ориентации ван-дер-ваальсова сила трения значительно меньше силы, статического притяжения.

Ключевые слова: сила Ван-дер-ваальса, ван-дер-ваальсово трение, нанотрубка, атомно-силовая микроскопия и спектроскопия.

VAN-DER -WAALS INTERACTION OF CYLINDRICAL BODIES WITH A FLAT SURFACES

Kanametov A.A.

Kabardino-Balkarian State University

Dynamical interaction of an neutral cylindrical body moving parallel to the flat surface is considered. For the both of perpendicular and parallel orientation of nanotube dynamical frictional forces are much smaller than the static attractional one.

Keywords: Van der Waals forces, Van der Waals friction, nanotube, atomic force microscopy and spectroscopy.

Статья является продолжением работы [1], в которой рассматривалось динамическое ван-дер-ваальсово (ВДВ) взаимодействие между зондом атомно-силового микроскопа (АСМ) и плоским образцом в модели сплошной среды. В этот раз акцент сделан на тела цилиндрической формы (наностержни, нанотрубки, нановискеры и т.д.).

С одной стороны, это вызвано тем, что тела цилиндрической формы часто рассматриваются в качестве рабочих элементов устройств нано- и микросистемной техники. В частности, в сканирующей зондовой микроскопии нанотрубки углерода, как показано в работе [2] могут быть эффективными чувствительными элементами, обеспечивающими атомарное разрешение, а в [3] показано, что модифицированные углеродные нанотрубки могут быть химически чувствительными сенсорами. Не меньший интерес при этом представляют и неуглеродные нанотрубки, многочисленность модификаций которых хорошо известна [4]. Простота геометрии нанотрубки, частично упрощающая методы контроля ее формы в сочетании с уникальными механическими свойствами являются дополнительными факторами, определяющими перспективность ее применения в методиках сканирующей зондовой микроскопии (СЗМ) в качестве зондирующего элемента.

С другой стороны, те же факторы играют положительную роль при решении вопросов фундаментального характера, связанных с механизмами возникновения флуктуационно-электромагнитного взаимодействия между покоящимися и движущимися друг относительно друга телами.

В статье будут рассматриваться тела сравнительно малых размеров (относительно размеров серийных зондов АСМ), однако, полученные результаты могут быть применены и для тел микронных размеров, при условии корректного учета эффектов запаздывания. В отсутствии электрических и магнитных полей для нейтральных (незаряженных и немагнитных) тел взаимодействие обусловлено

динамическими силами ВДВ. В режиме латерального движения, когда пробное тело движется вдоль поверхности образца, возникают силы ВДВ притяжения (ВДВП) и силы ВДВ трения (ВДВТ).

Первые применения аддитивного приближения для расчета притягивающих сил ВДВ между нанотрубкой и плоским образцом, по-видимому, были предприняты в работе [2]. При этом рассматривалось только консервативное взаимодействие, а отталкивательная часть потенциала взаимодействия моделировалась комбинацией потенциала Морзе и отталкивательной части потенциала Леннарда-Джонса. Учет же динамических эффектов не проводился до сих пор. Кроме того, известно, что для калибровочных целей в АСМ и в вопросах уточнения фундаментальных механизмов ВДВ взаимодействия ключевое значение имеет корректный учет не только геометрии взаимодействующих тел, но и их взаимной ориентации. В этой связи представляется актуальной задача разработки теоретической модели динамического ВДВ взаимодействия тел цилиндрической формы с плоской проводящей поверхностью с учетом их относительного движения и взаимной ориентации.

Следуя алгоритму рассуждений работы [1] воспользуемся общим выражением для динамической силы ВДВ, действующей на нейтральную наночастицу, движущуюся параллельно поверхности (см. формулу (1) в [1]). При одинаковой температуре частицы и образца, силы, действующие между ними, запишутся в виде двух выражений:

$$F_z = -\frac{3}{4\pi} \frac{\hbar}{z^4} r^3 I_z(\omega), \quad (1)$$

$$F_x = -\frac{3}{8\pi} \frac{\hbar^2 V}{z^5} \frac{r^3}{k_B T} I_x(\omega), \quad (2)$$

где z – расстояние между наночастицей и образцом, V – скорость частицы, T – температура частицы и образца, \hbar и k_B – постоянные Планка и Больцмана, F_z – сила ВДВП, F_x – сила ВДВТ, а функции $I_z(\omega)$ и $I_x(\omega)$ определяются так же, как и в [1]. В силу того, что рассматриваемые расстояния, на которые пробное тело отдалено от поверхности не превышает 100 нм, эффекты запаздывания не принимаются в расчет. Рассуждая далее так же, как и в работе [1] после интегрирования по объему пробного тела, получим конечные выражения для сил ВДВТ и ВДВП. Для нанотрубки при нормальной к поверхности ориентации (НО) будем иметь

$$F_z = -\frac{9\hbar}{16\pi^2} I_z(\omega) (G_z(z, R, H, d)), \quad (3)$$

$$F_x = -\frac{9}{32\pi^2} \frac{\hbar^2 V}{k_B T} I_x(\omega) (G_x(z, R, H, d)), \quad (4)$$

где геометрические факторы $G_z(z, R, H, d)$ и $G_x(z, R, H, d)$ зависят только от параметров геометрии полый нанотрубки толщиной d , радиусом R и длиной H и имеют вид

$$G_z(z, R, H, d) = -\frac{\pi}{3} (R^2 - (R-d)^2) \left(\frac{1}{(z+H)^3} - \frac{1}{z^3} \right), \quad (5)$$

$$G_x(z, R, H, d) = -\frac{\pi}{4} (R^2 - (R-d)^2) \left(\frac{1}{(z+H)^4} - \frac{1}{z^4} \right). \quad (6)$$

Заметим, что полученные выражения справедливы для полых нанотрубок с открытыми концами и при незначительной модификации (3) и (4) могут быть применены для нанотрубок с закрытыми концами, в том числе заполненных другим веществом. Отметим так же, что выражения (5) и (6) полностью согласуются с результатами, следующими из [5].

При параллельной ориентации (ПО) силы притяжения и трения после интегрирования по объему нанотрубки принимают вид:

$$F_z = -\frac{9\hbar}{16\pi^2} I_z(\omega) (G_z^e(z, R, H) - G_z^i(z, R, H, d)), \quad (7)$$

$$F_x = -\frac{9}{16\pi^2} \frac{\hbar^2 V}{k_B T} I_x(\omega) (G_x^e(z, R, H) - G_x^i(z, R, H, d)), \quad (8)$$

а соответствующие геометрические факторы $G_z^e(z, R, H)$, $G_x^e(z, R, H)$, $G_z^i(z, R, H, d)$, и $G_x^i(z, R, H, d)$, имеют вид

$$G_z^e(z, R, H) = \pi H \left(\frac{R^2(z+R)}{((z+R)^2 - R^2)^{5/2}} \right), \quad (9)$$

$$G_z^i(z, R, H, d) = \pi H \left(\frac{(R-d)^2(z+R)}{\left((z+R)^2 - (R-d)^2 \right)^{5/2}} \right), \quad (10)$$

$$G_x^e(z, R, H) = \frac{\pi H R^2}{4} \left(\frac{4(z+R)^2 + R^2}{\left((z+R)^2 - R^2 \right)^{7/2}} \right), \quad (11)$$

$$G_x^i(z, R, H, d) = \frac{\pi H (R-d)^2}{4} \left(\frac{4(z+R)^2 + (R-d)^2}{\left((z+R)^2 - (R-d)^2 \right)^{7/2}} \right). \quad (12)$$

Выражения (7)–(12), как следует из литературного обзора, ранее не были получены другими авторами. Как и в [1] в качестве материалов пробного тела и образца выберем золото, нанотрубки и наностержни которого теоретически исследовались в работе [6]. В силу малой изученности диэлектрических свойств наноструктур золота, в качестве модели диэлектрической проницаемости для них, так же, как и для объемного образца, используем низкочастотное приближение (см. (4) в [1]), причем для дипольной поляризуемости $\alpha(\omega)$ частички вещества нанотрубки воспользуемся классической моделью

$$\alpha(\omega) = r^3 \frac{\varepsilon(\omega) - 1}{\varepsilon(\omega) + 2}, \quad (13)$$

где r – радиус наночастицы, $\varepsilon(\omega)$ – частотно зависящая диэлектрическая проницаемость материала нанотрубки. В статье [6] показано, что с ростом числа атомов в нанотрубке из золота ее свойства становятся ближе к свойствам хороших проводников, поэтому принимая с удовлетворительной точностью статическую проводимость золота равной $\sigma = 1.85 \cdot 10^{17} \text{ с}^{-1}$ получим, что частотные интегралы $I_z(\omega)$ и $I_x(\omega)$ дадут значения, различающиеся на 5 порядков величины, причем значения $I_z(\omega)$ больше значений $I_x(\omega)$. Таким образом, как и ожидалось для выбранной модели, функции диэлектрической проницаемости силы ВДВТ будут значительно слабее сил ВДВП. При $T=300 \text{ К}$, $V=1 \text{ м/с}$ (скорости движения нанотрубки выберем равными типичным скоростям движения зондов АСМ), $R=5 \text{ нм}$, $H=50 \text{ нм}$ и $d=0.5 \text{ нм}$, проведем расчеты для нанотрубки, ориентированной перпендикулярно поверхности.

Результаты расчетов приведены в виде универсальных зависимостей абсолютных значений силы от относительного расстояния, нормированного на радиус нанотрубки (рис. 1а, 1б). Как видно из рис. 1а абсолютные значения сил ВДВТ очень малы и примерно на 4 порядка величины меньше сил ВДВП для протяженных зондов АСМ микронных размеров. Это значит, что измерение сил ВДВТ между хорошо проводящими наночастицей и образцом еще более затруднительно, чем для протяженных зондов АСМ.

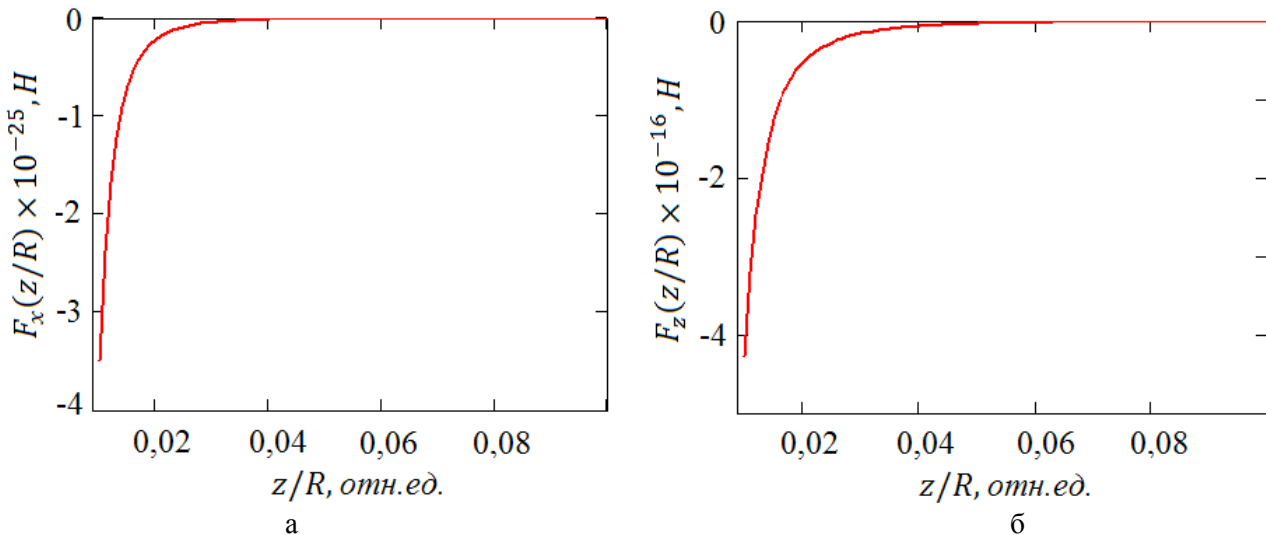


Рис. 1. Абсолютные значения силы ВДВ в зависимости от относительного расстояния z/R между нанотрубкой из золота (НО) и поверхностью золота:
а) – сила ВДВТ, б) – сила ВДВП. R – внешний радиус нанотрубки

Значения сил ВДВП (рис. 1б) нанотрубки к образцу меньше типичных значений для зондов АСМ на 2–3 порядка величины. Такое расхождение между величинами сил ВДВТ и ВДВП при сравнении с

силами на протяженном зонде объясняется разницей в значениях функций $I_z(\omega)$ и $I_x(\omega)$. В целом же, полученные значения ВДВП хорошо согласуются с результатами других авторов. Отметим, что на рисунках 1а и 1б показаны результаты только для НО нанотрубки.

При рассмотрении результатов для ПО ничего принципиально нового не наблюдается и все выводы, сделанные для рис. 1, справедливы и в этом случае тоже. Единственная особенность результатов расчета при ПО состоит в том, что значения сил, полученных для нее немного (примерно на порядок) выше значений для НО. Это хорошо видно из рис. 2, на котором показано отношение сил при НО к силам при ПО для ВДВТ (а) и ВДВП (б). Практически во всем диапазоне расстояний силы при НО меньше сил при ПО, причем на расстояниях примерно 0,25 отн. ед. наблюдается минимум отношения их значений, а на далеких расстояниях, очевидно, они сравниваются по величине.

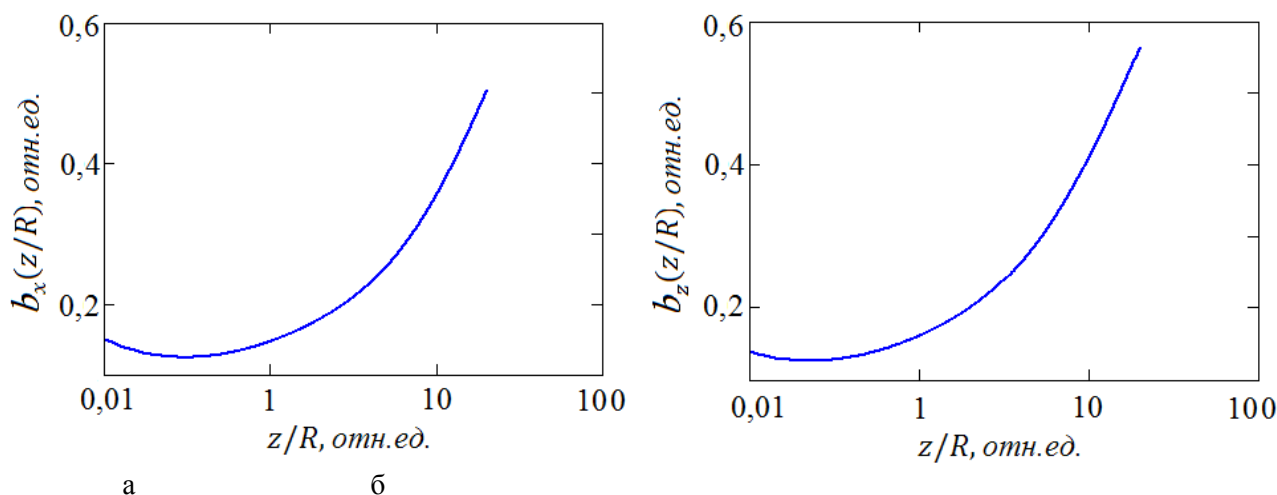


Рис. 2. Отношение сил ВДВ при НО к силам при ПО в зависимости от относительного расстояния z/R между нанотрубкой из золота и поверхностью золота: а) – отношение сил ВДВТ, б) – отношение сил ВДВП. R – внешний радиус нанотрубки

Таким образом, из результатов расчета следует, что в устройствах нано – и микросистемной техники, и в частности в СЗМ, где проводящие нанотрубки используются в качестве подвижных чувствительных элементов динамические силы ВДВТ не играют ощутимой роли. Однако, как следует из [6], чем меньше атомов в нанотрубке из золота, тем ближе ее свойства к полупроводникам и диэлектрикам, а значит – абсолютные значения сил ВДВТ могут значительно возрасти.

Библиография

1. Канаметов А.А., Кодзоков А.Х. Динамическая сила Ван-дер-Ваальса при движении зонда АСМ параллельно поверхности // Известия КБГУ. 2023. Т. 13, № 1. С. 21–24.
2. Дедков Г.В., Рехвиашвили С.Ш. Нанотрубки и силовые взаимодействия в атомно-силовом микроскопе // ЖТФ. 1999. Т. 69, № 8. С. 124–127.
3. Запороцкова И.В., Борозина Н.П., Пархоменко Ю.Н., Кожитов Л.В. Сенсорные свойства углеродных нанотрубок // Известия ВУЗов. Материалы электронной техники. 2017. Т. 20, № 1. С. 5–21.
4. Ivanovskii A.L. Non-carbon nanotubes: synthesis and simulation // Russian Chemical Reviews. 2002. V. 71, N 3. P. 175–194.
5. Дедков Г.В., Канаметов А.А., Дедкова Е.В. Электростатические и ван-дер-вальсовы силы в воздушном контакте зонда атомно-силового микроскопа с проводящей поверхностью // ЖТФ. 2009. Т. 79, № 12. С. 79–85.
6. Миронов Г.И., Пекпатрова А.Г. Электронная структура золотых нанотрубок хиральности (5,0) в модели Хаббарда // Известия ВУЗов. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2021. № 4. С. 140–154.