

АНАЛИЗ КИНЕТИЧЕСКОГО И СТАТИЧЕСКОГО ТРЕНИЯ МЕЖДУ ГИБКОЙ НАНОПРОВОЛОКОЙ И ПЛОСКОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ

© 2013

Л.М. Дорогин, Ph.D. по материаловедению, научный сотрудник
Институт физики Тартуского университета, Тарту (Эстония)

Ключевые слова: трибология; трение; нанопроволоки; теория упругости.

Аннотация: Исследуются силы трения упруго изогнутой нанопроволоки на плоскости. Излагаются модели баланса сил в нанопроволоке. Распределенная сила трения определяется в 2-х случаях: 1) нанопроволока равномерно толкается посередине и изгибается силой кинетического трения, 2) нанопроволока изгибается силой статического трения. Метод продемонстрирован для ZnO нанопроволок на кремневой подложке.

ВВЕДЕНИЕ

Монокристаллические нанопроволоки (НП) представляют собой класс перспективных материалов для будущих приложений в электронике и наномеханике из-за выдающихся электронных, механических и пьезорезистивных свойств (см., например [1]). Конструирование устройств на основе НП требует точного контроля позиционирования и поведения НП на различных поверхностях. Таким образом, глубокое понимание трибологических механизмов на разделе НП-подложка важно и с фундаментальной, и с практической точек зрения.

Для исследования взаимодействия НП-подложка может быть применено несколько методов. Наиболее известный способ состоит в манипуляции НП (или нанотрубками) при помощи иглы атомного силового микроскопа (АСМ). Например, в работе [2] проводилась манипуляция многостенными углеродными нанотрубками (УНТ) на графитовой подложке при помощи АСМ с одновременным измерением поперечной силы. Использование АСМ предоставляет высокую точность контроля силы, однако, измерения занимают значительное время из-за необходимости записи изображения после каждого шага манипуляции.

Простой модельный подход для оценки трения между изогнутой НП и подложкой был предложен в работе [3]. В этом подходе принимается, что профиль изогнутой НП является результатом взаимодействия упругих сил и сил трения. Однако, модель не учитывает роль свободных концов НП и возможности варьирования

силы трения вдоль НП. Более сложный метод, который также использовал форму УНТ, изогнутой при помощи АСМ на подложке, чтобы рассчитать статическое трение и энергию деформации, был развит в [4]. Данный метод оказывается чувствителен к неточностям измерения профиля УНТ из-за использования производных высших порядков от локальной кривизны профиля и не учитывает граничные условия на концах НП, что приводит к значительным погрешностям в результатах.

В настоящей работе излагается альтернативный подход, позволяющий рассчитывать распределенную силу статического трения между упруго изогнутой НП и подложкой. Также предлагается оригинальный метод анализа профиля НП, который учитывает граничные условия и тем самым уменьшает возможные погрешности в вычислениях силы трения. Метод реализован на примере ZnO НП, согнутой в дугу сосредоточенной силой приложенной посередине НП. В заключение дается интерпретация рассчитанной статической силы трения и сравнение её с кинетической силой трения для той же НП.

МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ РАСЧЕТОВ

Рассмотрим НП призматической формы длиной L , изогнутую внешними распределенными силами и находящуюся в состоянии динамического равновесия (см. рис. 1a и 1b). Внешние силы могут включать в себя кинетическое (рис. 1a) и статическое (рис. 1b) трение, а также движущую силу иглы АСМ (рис. 1a).

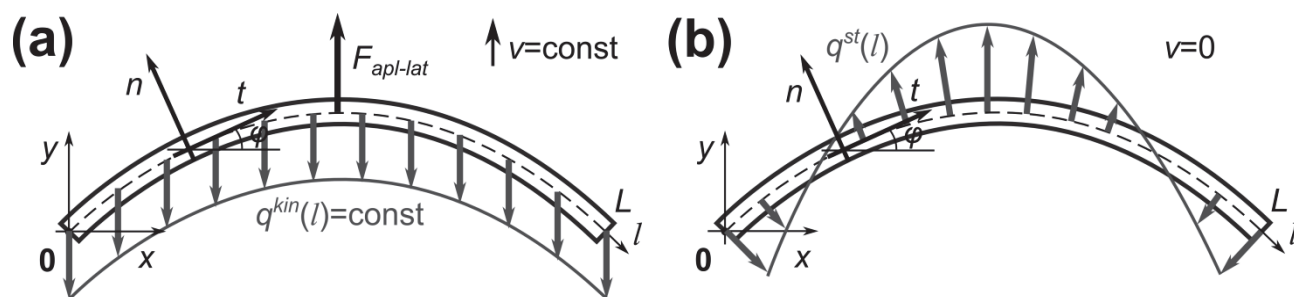


Рис. 1. Схематическое изображение изогнутой НП под воздействием кинетической силы трения q^{kin} и движущей точечной силы $F_{apl-lat}$ (a), и распределенной статической силы трения q^{st} (b).

Система локальных координат обозначена векторами t и n

Обозначим силу и момент сил упругих напряжений в поперечном сечении НП как F и M , соответственно. Их компоненты могут быть записаны как интегралы по поперечному сечению S в заданной точке l оси НП [5]:

$$F_i = \int_S \sigma_{i\gamma} n_\gamma dS \quad (1a)$$

$$M_i = \int_S e_{i\alpha\beta} r_\alpha \sigma_{\beta\gamma} n_\gamma dS, \quad (1b)$$

где $\sigma_{\alpha\beta}$ – компоненты тензора напряжений,
 n_γ – компоненты вектора нормали к элементу поперечного сечения dS ,
 r_α – компоненты радиус-вектора, отсчитываемого от центральной оси НП l , и
 $e_{\alpha\beta\gamma}$ обозначают компоненты единичного антисимметричного тензора.

Упругая сила F и упругий момент сил M считаются функциями координаты l . Полная система уравнений равновесия НП запишется через F и M :

$$\frac{dF}{dl} = -f \quad (2a)$$

$$\frac{dM}{dl} = F \times t, \quad (2b)$$

где f – распределенная внешняя сила на единицу длины НП,
 t – тангенциальный вектор центральной линии НП.
 Сила f может включать как силы трения, так и сосредоточенные внешние силы, но всегда предполагается находящейся в плоскости Oxy , чтобы исключить сложные типы деформации.

В случае чистого изгиба НП призматической формы действует следующее соотношение для момента сил:

$$M = Et \times \frac{dt}{dl}, \quad (3)$$

где E – модуль Юнга материала НП,
 I – момент инерции сечения НП.
 Формула (3) описывает момент упругих сил внутри НП, подверженной чистому изгибу с заданной кривизной κ . В проекции на ось Oz она дает:

$$M = EI \frac{d\varphi}{dl} = EI\kappa, \quad (4)$$

где $\varphi(l)$ – функция тангенциального угла,
 $\kappa(l) = 1/R = d\varphi/dl$ является функцией кривизны, непосредственно связанной с радиусом кривизны R .

Отсутствие упругой силы и момента сил на свободных концах НП задают граничные условия:

$$F|_{l=0} = F|_{l=L} = 0 \quad (5a)$$

$$M|_{l=0} = M|_{l=L} = 0. \quad (5b)$$

Уравнения (2a,b) и (3) вместе с граничными условиями (5a,b) представляют собой полную систему уравнений для определения состояния изогнутой НП при известной внешней силе f .

Рассмотрим также случай, когда НП равномерно движется по поверхности под действие сосредоточенной силы, приложенной посередине НП. Тогда уравнения равновесия (2a,b) также применимы. Сосредоточенная управляющая сила $F_{apl-lat}$ может быть записана через дельта-функцию, а кинетическое трение q^{kin} является константой (см. рис. 1a):

$$f = q^{kin} + F_{apl-lat} \cdot \delta\left(l - \frac{L}{2}\right). \quad (6)$$

Условие отсутствие полной силы приводит к отношению $F_{apl-lat} = -q^{kin}L$. В результате дифференциальное уравнение «кинетического» равновесия НП на интервале $(0, L)$ прямо следует из (2,3):

$$EI \frac{\partial^2 \varphi}{\partial l^2} = -q^{kin} \left[l - LH \left(l - \frac{L}{2} \right) \right] \cos \varphi, \quad (7)$$

где $H(x)$ – функция ступеньки.
 Легко видеть, что решение уравнения (7) вместе с начальным условием $\varphi'(0) = 0$ полностью удовлетворяет граничным условиям (5a,b).

Случай неподвижной и изогнутой НП, уравновешенной силам статического трения, более сложен (см. рис. 1b). Уравнения равновесия изогнутой НП с распределенной силой статического трения $q^{st}(l)$ могут быть записаны как:

$$\frac{dF_t}{dl} - \kappa F_n = -q_t^{st} \quad (8a)$$

$$\frac{dF_n}{dl} + \kappa F_t = -q_n^{st} \quad (8b)$$

$$EI \frac{d\kappa}{dl} = -F_n, \quad (8c)$$

где F_t и F_n , q_t^{st} и q_n^{st} – проекции, соответственно, векторов F и q^{st} на локальные координаты (t, n) .

Пренебрежем тангенциальной компонентой трения $q_t^{st} = 0$, таким образом, приводя систему уравнений (8a,b,c) к полной:

$$F_t = -EI \int_0^l \kappa \frac{d\kappa}{dl} dl = -EI \frac{\kappa^2}{2} \quad (9a)$$

$$q_n^{st} = EI \left(\frac{d^2 \kappa}{dl^2} + \frac{\kappa^3}{2} \right), \quad (9b)$$

решение которой может быть получено при заданном условии $F_t|_{l=0} = 0$.

Полный набор граничных условий (5a,b) запишется как:

$$\kappa|_{l=0} = \kappa|_{l=L} = 0 \quad (10a)$$

$$\frac{d\kappa}{dl}\Big|_{l=0} = \frac{d\kappa}{dl}\Big|_{l=L} = 0. \quad (10b)$$

Заметим, что предположение $q_i^{st} = 0$ продиктовано интуитивным соображением о том, что направление q^{st} должно быть близко к направлению распрямления НП и нормали n . Формально можно считать, что интегральный вклад q_i^{st} вдоль НП пренебрежимо мал по сравнению с q_n^{st} .

РЕЗУЛЬТАТЫ

Теперь рассмотрим изображение сканирующего электронного микроскопа (СЭМ) или АСМ НП с известной геометрией и модулем Юнга на плоской подложке как исходные данные для анализа сил трения. Предложим следующую последовательность действий: 1) фильтрация исходного изображения и идентификация центральной линии НП в виде совокупности точек в декартовых координатах; 2) дифференциальный анализ точек центральной линии для нахождения тангенциального угла; и 3) интерполяция тангенциального угла при помощи специально подобранных многочленов. В результате получаем гладкую функцию-многочлен $\varphi(l)$, который может быть использован для дальнейших вычислений $q_n^{st}(l)$ согласно (9b).

Для интерполяции $\varphi(l)$ следует использовать специальный набор функций-многочленов из-за погрешностей, которые возникают в ходе шагов 1) и 2). Обычная интерполяция многочленами могла бы привести к нарушению граничных условий (5). Таким образом, интерполяция $\varphi(l)$ должна быть проведена через функцию кривизны $\kappa(l)$ с линейной комбинацией избранных многочленов:

$$\frac{d\varphi}{dl} = \kappa(l) = \sum_{i=0}^N A_i l^{i+2} (L-l)^2, \quad (11)$$

где A_i – это неизвестные коэффициенты для интерполяции.

Очевидно, что $\varphi(l)$, определенная согласно (11), будет удовлетворять граничным условиям (5). Следует отметить, что необходима оптимизация степени интерполяции N в соответствии с уровнем сложности изгибов профиля. Высокие значения N могут приводить к артефактам из-за погрешностям в исходных данных.

Распределение силы трения может быть рассчитано с помощью (9b). Выражение для $q_n^{st}(l)$ содержит 2-ю производную $\kappa(l)$ и, следовательно, может иметь более высокую погрешность. Как следствие, профиль трения $q_n^{st}(l)$ может значительно меняться с изменением N .

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

В качестве примера использования предложенного подхода рассмотрим экспериментальные данные для изогнутой НП ZnO на кремниевой подложке. Для измерения трения и одновременного наблюдения профиля изгиба удобно использовать инструмент для наноманипуляций в реальном времени внутри СЭМ, описанный в работе [6]. Игла АСМ точно позиционируется посередине прямой НП и тянет её с постоянной скоростью на дистанции в несколько микрон. При этом НП изгибается в характерную дугу, приобретая характерный профиль, который и регистрируется прибором. Считая модуль Юнга E и геометрию НП известными, можно рассчитать кинетическое трение из уравнения (7), путем совмещения моделированного и экспериментального профилей. Для НП, показанной на рис. 2а, кинетическое трение оказалось $q_{kin} \approx 1.8$ nN/nm.

После остановки и удаления иглы АСМ визуально НП не изменяет свой профиль, однако, распределения упругих сил и сил трения в ней отличаются. Теперь может быть применена модель распределенного статического трения согласно вышеизложенному методу анализа. После построения профиля сил трения $q_n^{st}(l)$, можно отметить наличие трёх экстремумов различных знаков, которым можно поставить в соответствие трем эффективным силам трения Q_1, Q_2, Q_3 (см. рис. 2б). Стоит отметить, что $\kappa(l)$ имеет только 1 экстремум посередине НП, что свидетельствует о нелокальном характере распределенных сил статического трения на границе НП-подложка.

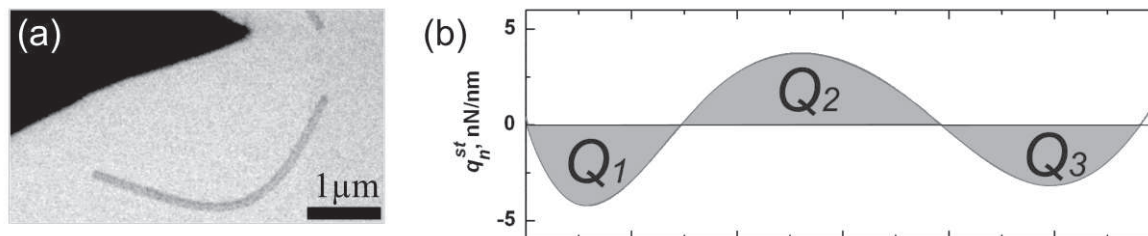


Рис. 2. Анализ внутренних упругих сил и сил статического трения для НП ZnO, лежащей на кремниевой подложке.

Инвертированное изображение СЭМ упруго изогнутой НП на подложке (а), график распределения статического трения q_n^{st} вдоль НП (б).

Расчеты выполнены при использовании следующих параметров:

модуль Юнга $E=57$ GPa (измерен методом, описанным в работе [6]),

диаметр $D=190$ nm, момент инерции гексагонального сечения $I = 5\sqrt{3}D^4 / 256$ (см. [6]),

степень интерполяции $N=3$

Так как после удаления иглы АСМ, профиль НП остался близким к исходному профилю, то можно ожидать, что перераспределенная сила статического трения $\bar{q}_n^{st} = \sum_i |Q_i| / L \approx 2.31$ nN/nm окажется сравнимой с силой кинетического трения ($q^{kin} \approx 1.8$ nN/nm).

ВЫВОДЫ

В статье предложены расчетные модели для распределенного трения на границе упруго изогнутой нанопроволоки и плоской поверхности. Кинетическое трение между подложкой и нанопроволокой, равномерно движимой точечной силой посередине найдено через взаимодействие внешних сил и внутренних упругих сил. При заданных модуле Юнга, поперечном сечении и профиле изгиба величину кинетического трения определена однозначно.

Также предложена модель расчета распределенного статического трения упругой изогнутой нанопроволоки, лежащей на подложке. Показан оригинальный метод анализа профиля нанопроволоки, использующий специально отобранные многочлены, явно удовлетворяющие уравнениям равновесия нанопроволоки.

Обе расчетные модели были экспериментально применены к ZnO нанопроволоке на кремневой подложке. Был продемонстрирован нелокальный характер сил распределенного трения.

Детальное описание теоретического подхода и проведенных экспериментов, рассмотренных в данной работе, можно найти в статьях автора по ссылкам [7, 8].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. P.X. Gao, J. H. Song, J. Liu, Z.L. Wang: Nanowire Piezoelectric Nanogenerators on Plastic Substrates as Flexible Power Sources for Nanodevices, *Adv. Mater.* 19, 67 (2007).

2. M.R. Falvo, J. Steele, R.M. Taylor and R. Superfine: Evidence of commensurate contact and rolling motion: AFM manipulation studies of carbon nanotubes on HOPG, *Trib. Lett.* 9, 73 (2000).
3. M. Bordag, A. Ribayrol, G. Conache, L.E. Fröberg, S. Gray, L. Samuelson, L. Montelius, H. Pettersson: Shear stress measurements on InAs nanowires by AFM manipulation, *Small* 3, No. 8, 1398 (2007).
4. M. Strus, R. Lahiji, P. Ares, V. Lopez, A. Raman, R. Reifengerger: Strain energy and lateral friction force distributions of carbon nanotubes manipulated into shapes by atomic force microscopy, *Nanotechnology* 20, 385709 (2009).
5. L. Landau, E. Lifshitz: *Theory of Elasticity, Volume 7, 3rd edn.* (Butterworth-Heinemann, Oxford, 1986), pp. 70–76.
6. B. Polyakov, L. Dorogin, S. Vlassov, I. Kink, A. Lohmus, A. Romanov, R. Lohmus: Real-time measurements of sliding friction and elastic properties of ZnO nanowires inside a scanning electron microscope, *Solid State Commun.* 151, 1244 (2011).
7. L.M. Dorogin, B. Polyakov, A. Petruhins, S. Vlassov, R. Lohmus, I. Kink, A.E. Romanov: Modeling of kinetic and static friction between an elastically bent nanowire and a flat surface, *J. Mater. Res.* 27, 580 (2012).
8. L.M. Dorogin, B. Polyakov, S. Vlassov, M. Antsov, R. Lohmus, I. Kink and A.E. Romanov: Real-time manipulation of ZnO nanowires on a flat surface employed for tribological measurements: experimental methods and modeling, *Phys. Stat. Sol. (b)* 250, 305 (2013).

ANALYSIS OF KINETIC AND STATIC FRICTION BETWEEN A FLEXIBLE NANOWIRE AND A FLAT SURFACE

© 2013

L.M. Dorogin, PhD in Materials Science, research fellow
Institute of Physics, University of Tartu, Tartu (Estonia)

Keywords: tribology; friction; nanowires; theory of elasticity.

Annotation: Friction forces for nanowire elastically bent on flat surface are investigated. Models based on elastic beam theory are proposed. Distributed friction force is determined for 2 cases: 1) nanowire is uniformly dragged at its midpoint and bent by kinetic friction forces, 2) nanowire is held in bent state by static friction forces. The described method is demonstrated for ZnO nanowires on Si wafer.