

На правах рукописи

М

Ужегова Надежда Ивановна

**РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ АНАЛИЗА
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ
АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ ДЛЯ
ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРЫ И
СВОЙСТВ ЭЛАСТОМЕРНЫХ
НАНОКОМПОЗИТОВ**

Специальность 01.02.04 — Механика деформируемого твёрдого
тела

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Пермь — 2016

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институт механики сплошных сред Уральского отделения Российской академии наук, г. Пермь.

Научный руководитель: **Свистков Александр Львович**, доктор физико-математических наук, зав. лабораторией Микромеханики структурно-неоднородных сред ФГБУН «Институт механики сплошных сред Уральского отделения РАН», г. Пермь.

Официальные оппоненты: **Зингерман Константин Моисеевич**, доктор физико-математических наук, профессор, зав. кафедрой Вычислительной математики ФГБОУ ВО «Тверской государственной университет», г. Тверь.

Аношкин Александр Николаевич, доктор технических наук, профессор, зав. кафедрой Механики композиционных материалов и конструкций ФГБОУ ВО «Пермский национальный исследовательский политехнический университет», г. Пермь.

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского Российской академии наук, г. Москва.

Защита состоится « **15** » **декабря 2016 г.** в 11:00 часов на заседании диссертационного совета Д 004.012.01 при Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институт механики сплошных сред Уральского отделения Российской академии наук по адресу: 614013, г. Пермь, ул. Академика Королева, 1, тел: (342) 237-84-61; факс: (342) 237-84-87.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФГБУН «Институт механики сплошных сред Уральского отделения РАН» и на его сайте: www.icmm.ru.

Автореферат разослан « » _____ 2016 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
доктор физико-математических наук, доцент



/ А.Л. Зув

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования. Полимеры и различные композиты на их основе давно и успешно используются в различных отраслях современной промышленности. Это огромный класс разнообразных по физико-механическим и химическим свойствам материалов. В настоящее время одно из наиболее перспективных направлений дальнейшего улучшения их механических и эксплуатационных характеристик связано с созданием наноструктурированных материалов при использовании нового класса наполнителей (нанотрубок, графена, наноалмазов, монтморилонита и т.д.). Но это требует надежной, достоверной информации, как о морфологии внутреннего строения вещества, так и о локальных механических свойствах материала на наноуровне. Эти знания необходимы для того, чтобы целенаправленно создавать материалы с принципиально новыми потребительскими качествами, недостижимыми в рамках использования традиционных технологий. Атомно-силовая микроскопия (АСМ) является одним из наиболее перспективных инструментов решения этой проблемы. Но для успешной и адекватной расшифровки полученных на АСМ экспериментальных данных необходимо иметь соответствующие математические модели. Построение таких моделей является важной фундаментальной задачей. Решению этой задачи и посвящена данная работа.

Целью диссертационной работы является создание усовершенствованных методов обработки экспериментальных данных, получаемых с помощью атомно-силовой микроскопии, и разработка математических моделей контактного взаимодействия, которые позволят расшифровывать результаты наноиндентирования.

Для достижения поставленной цели были сформулированы следующие **задачи**:

1. Разработка метода анализа рельефа поверхности, позволяющего выделять объекты заданного нанометрового размера;
2. Изучение факторов, которые играют важную роль при взаимодействии зонда АСМ с мягким материалом;
3. Исследование с помощью вычислительного моделирования особенностей взаимодействия зонда АСМ с адсорбированным слоем жидкости на поверхности изучаемого материала с учетом действия сил Лапласа;
4. Разработка более точной модели контактного взаимодействия зонда АСМ с мягким материалом.

Научная новизна диссертационной работы заключается в том, что в ней впервые:

1. Разработан метод выделения объектов заданного размера на существенно криволинейной поверхности;
2. В рамках компьютерного моделирования изучено взаимодействие зонда АСМ с жидкой пленкой на поверхности образца с учетом действия сил Лапласа;

3. Предложена новая модель контактного взаимодействия зонда АСМ с поверхностью мягкого материала.

Теоретическая значимость диссертационной работы включает в себя:

1. Обоснование обязательного учета действия сил Лапласа и гравитационных сил в жидкой среде при анализе взаимодействия зонда АСМ с адсорбированным слоем жидкости на поверхности исследуемого материала;
2. Обоснование возможности использования моделей Дерягина-Мюллера-Топорова и Джонсона-Кендалла-Робертса далеко за пределами областей применимости, которые указали авторы этих моделей;
3. Разработку новой модели наноиндентирования мягкого материала.

Практическая значимость диссертационной работы заключается в следующем:

1. Предложен метод многоуровневого анализа рельефа поверхности материала, позволяющий выделять объекты заданного характерного размера на существенно криволинейной поверхности;
2. Предложена новая модель наноиндентирования материала с помощью АСМ.

Методология и методы диссертационного исследования. Для решения поставленных задач использовались хорошо апробированные методы механики сплошных сред и теории поверхностных явлений в жидких и деформируемых средах. Для задания граничных явлений при решении задачи контакта зонда с жидкостью на поверхности исследуемого материала применялся Level Set метод. Анализ упругого контактного взаимодействия зонда с поверхностью материала выполнялся на основе знаний уравнений теории упругости и механики деформируемого твердого тела. Экспериментальные исследования проводились на АСМ Bruker Dimension Icon, срезы поверхности образцов готовились на ультрамикротоме Leica EMUC7.

На защиту выносятся следующие основные положения работы:

- разработка метода многоуровневого анализа рельефа поверхности исследуемого материала;
- результаты численного моделирования влияния капиллярных сил на взаимодействие зонда АСМ с пленкой жидкости на поверхности образца с учетом действия сил Лапласа;
- анализ возможности использования существующих моделей взаимодействия зонда АСМ с материалом для расшифровки экспериментальных данных наноиндентирования и определение границ их применимости;
- разработка новой модели контактного взаимодействия зонда АСМ с мягким материалом.

Достоверность полученных результатов обеспечивается их согласованием с работами других авторов и соответствием теоретических расчетов экспериментальным данным.

Апробация работы. Результаты работы были представлены на следующих научных конференциях: XX и XXI Всероссийская конференция молодых ученых и студентов "Математическое моделирование в естественных науках" (Пермь, 2011 и 2012 гг.); Всероссийская конференция молодых ученых "Неравновесные переходы в сплошных средах" (Пермь, 2011 и 2012 гг.); XXXX и XXXXI Summer School "Advanced Problems in Mechanics" (Репино, Санкт-Петербург, 2012 и 2013 гг.); Всероссийский симпозиум по растровой электронной микроскопии и аналитическим методам исследования твердых тел (Черноголовка, 2013); XVIII и XIX Зимняя школа по механике сплошных сред (Пермь, 2013 и 2015 гг.); XV International conference "Surface forces" (Вербилки, Московская область, 2014); Шестая Всероссийская Каргинская конференция "Полимеры – 2014" (Москва, 2014); XXV и XXVI Симпозиум "Проблемы шин и резинокордных композитов" (Москва, 2014 и 2015 гг.); The 9th European Conference on Constitutive Models for Rubbers (Прага, 2015 г.), IX Всероссийская конференция (Воронеж, 2016 г.).

Полностью диссертация обсуждалась на научном семинаре Института механики сплошных сред УрО РАН (рук. акад. РАН В.П. Матвеевко).

Значительная часть исследований выполнена в рамках программ ОЭММ-ПУ РАН № 12-Т-1-1004; проектов РФФИ № 11-08-96001, 14-01-96002; научная школа НШ - 5389.2012.1; при поддержке Министерства образования Пермского края по соглашению С-26/627.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 25 работ, в том числе 8 статей в журналах из списка ВАК, Web of Science и Scopus [1–8], 2 статьи в продолжающихся периодических изданиях; 4 статьи в сборниках научных трудов и материалов конференций, 11 тезисов конференций. В данных работах исследования и обработка результатов проведены диссертантом, обсуждение и анализ результатов выполнены совместно с научным руководителем и соавторами.

Получены свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ № 2014617891 от 10.06.2014 г., № 2014617899 от 10.06.2014 г. и № 2016618972 от 10.08.2016 г.

Структура и объем работы, краткое содержание. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы (156 наименований). Работа содержит 72 рисунка, 3 таблицы и одно приложение. Общий объем диссертации 136 страниц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

В первой главе приведен обзор литературы по выбранной тематике исследования. Обоснован выбор атомно-силового микроскопа в качестве инструмента для изучения структуры полимерных нанаккомпозитов и определения их механических свойств на наноуровне. Рассмотрены основные режимы работы АСМ, а также методы обработки получаемых изображений рельефа поверхности исследуемого образца. Выявлены проблемы и ограничения существующих методов анализа. Сформулирована первая проблема, решение которой приводится в следующей главе.

Вторая глава посвящена проблеме выделения объектов на рельефе поверхности, полученном с помощью зондовой микроскопии. Предложен более простой и надежный метод выделения частиц наполнителя, выступающих из связующего, на существенно неровной поверхности образца.

Суть метода заключается в разделении исходного рельефа поверхности на сумму нескольких рельефов, каждый из которых содержит объекты заданного характерного размера. Такой метод предложено называть методом многоуровневой визуализации. В работе рассматривается разделение исходного рельефа на сумму трех поверхностей: 1) рельефа $A(x, y)$, содержащего объекты высокой кривизны поверхности, 2) рельефа с объектами промежуточной кривизны поверхности $B(x, y)$, 3) рельефа малой кривизны $C(x, y)$. Схематично такое разделение показано на рисунке 1.

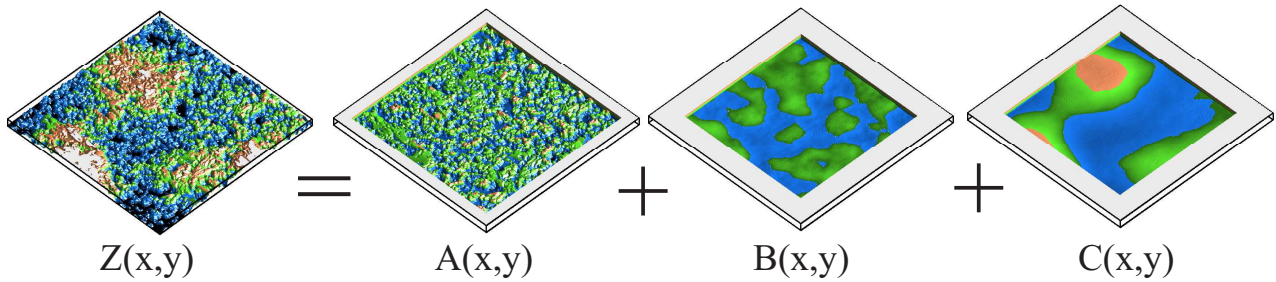


Рис. 1: Представление исходного рельефа в виде суммы трех рельефов

Рельеф с объектами высокой кривизны поверхности получается вычитанием из исходного рельефа $Z(x, y)$ рельефа $Z_1(x, y)$, который в свою очередь является результатом осреднения в окрестности рассматриваемой точки по малой области S_1 :

$$A(x, y) = Z(x, y) - Z_1(x, y) = Z(x, y) - \frac{1}{S_1} \int_{S_1} \Phi_1(x - x_0, y - y_0) Z(x_0, y_0) dx_0 dy_0,$$

где $\Phi_1(x - x_0, y - y_0)$ – ядро интегрального оператора, которое удовлетворяет условию нормирования:

$$\frac{1}{S_1} \int_{S_1} \Phi_1(x - x_0, y - y_0) dx_0 dy_0 = 1.$$

Определенный таким образом рельеф включает в себя объекты, размер которых сопоставим с размером $\sqrt{S_1}$.

Рельефом малой кривизны назван рельеф, полученный согласно формуле

$$C(x, y) = Z_2(x, y) = \frac{1}{S_2} \int_{S_2} \Phi_2(x - x_0, y - y_0) Z(x_0, y_0) dx_0 dy_0,$$

где $\Phi_2(x - x_0, y - y_0)$ – ядро интегрального оператора, которое удовлетворяет условию нормирования:

$$\frac{1}{S_2} \int_{S_2} \Phi_2(x - x_0, y - y_0) dx_0 dy_0 = 1.$$

То есть рельеф малой кривизны поверхности получается осреднением в окрестности рассматриваемой точки по большой области S_2 и содержит объекты, размер которых сопоставим с размером $\sqrt{S_2}$. Величина площади S_2 существенно больше площади S_1 .

Рельеф промежуточной кривизны – это рельеф, который получается вычитанием осредненного рельефа по большой области S_2 из осредненного рельефа по малой области S_1 :

$$B(x, y) = Z_1(x, y) - Z_2(x, y) = \frac{1}{S_1} \int_{S_1} \Phi_1(x - x_0, y - y_0) Z(x_0, y_0) dx_0 dy_0 - \frac{1}{S_2} \int_{S_2} \Phi_2(x - x_0, y - y_0) Z(x_0, y_0) dx_0 dy_0.$$

Данный рельеф содержит объекты средних размеров, которые не вошли в рельефы $A(x, y)$ и $C(x, y)$.

Применение многоуровневого анализа к модельной поверхности, геометрия которой заранее известна, показало, что данный алгоритм позволяет эффективно выделять выступающие на поверхности образцов объекты заданного размера.

Использование предложенного метода к экспериментальным данным, полученным методами атомно-силовой микроскопии, позволило провести сравнительный анализ структуры поверхности образцов, изготовленных по одной рецептуре, но с различными временами смешивания. На рисунке 2 представлены примеры таких рельефов после осуществления выравнивания с помощью вычитания наклонной плоскости из исследуемой поверхности.

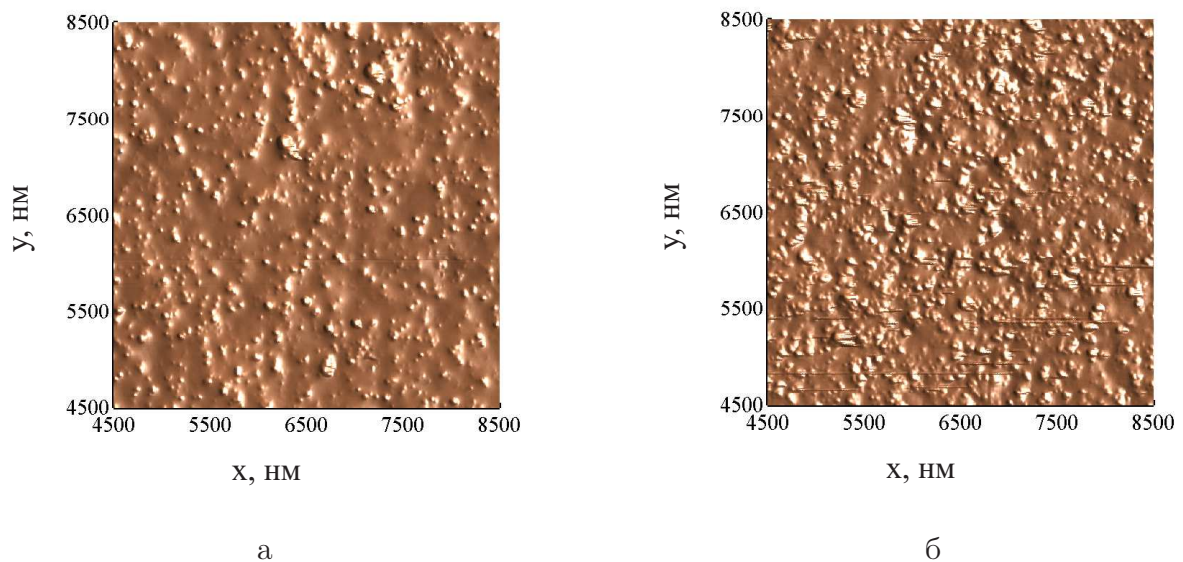


Рис. 2: Увеличенные в четыре раза центральные части рельефов, полученных с помощью АСМ, с добавлением источника света, расположенного близко к горизонту: а – время смешивания 160 секунд, б – время смешивания 330 секунд

Сравнение этих материалов по выделенным рельефам с объектами высокой кривизны (рис. 3) показало, что в материале с большим временем смешивания содержится больше объектов, характерный размер которых около 150 нм, чем в материале с меньшим временем смешивания. Исследование на оптическом

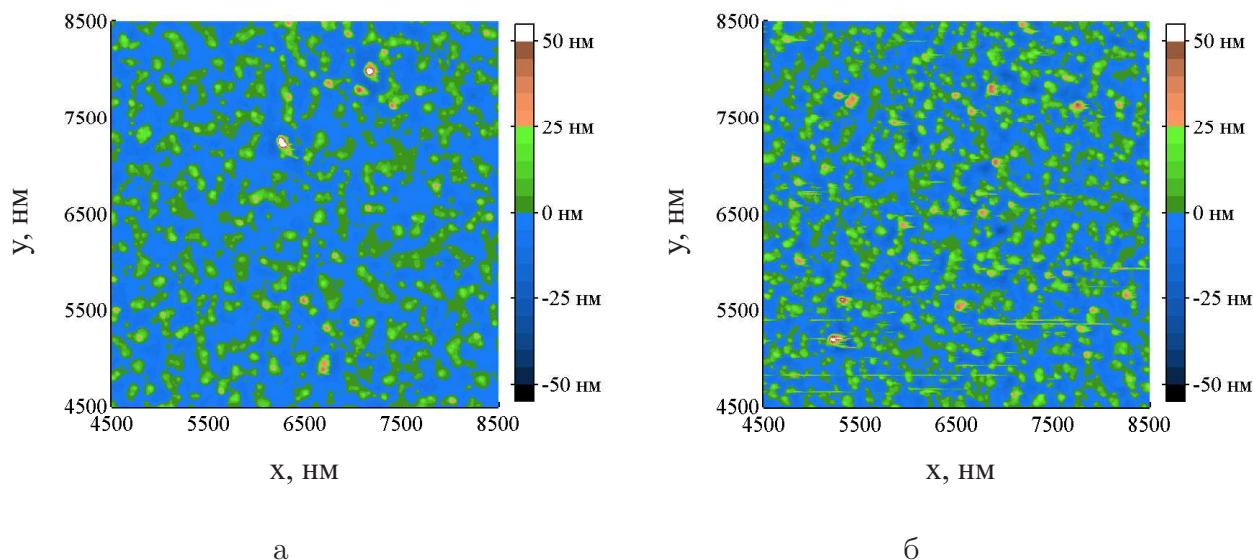


Рис. 3: Выделенные малые объекты на поверхности образца (рельеф высокой кривизны): а – время смешивания 160 секунд; б – время смешивания 330 секунд

микроскопе показало, что это связано с большим количеством непромесов, хорошо видимых как отдельные области материалов.

После выделения агрегатов частиц наполнителя можно перейти к изучению механических характеристик материала. Механические свойства получают путем анализа зависимости глубины погружения зонда от приложенной нагрузки, которая строится в каждой точке рассматриваемой области, на прямом ходе движения кантилевера и на обратном ходе. То есть при подведении его к образцу и при отводе.

Программное обеспечение АСМ позволяет в специальном режиме работы *ReakForce* автоматически на основе регистрируемой зависимости получать следующие параметры материала: параметр адгезия, параметр деформация, параметр диссипация и упругий модуль материала, определенный согласно модели контактного взаимодействия Дерягина-Мюллера-Топорова. Анализ карт распределения перечисленных параметров показал, что между ними нет однозначной зависимости. Таким образом, неясно, какую карту лучше использовать для выделения частиц наполнителя.

Чтобы внести ясность необходимо проанализировать получаемую экспериментальную зависимость изменения вертикального отклонения свободного конца кантилевера d от перемещения относительно закрепленного основания кантилевера z на прямом и обратном ходе (рис. 4). Особенностью силовой кривой является прямолинейный участок на прямом ходе движения кантилевера, где происходит резкое отклонения зонда в сторону поверхности материала. Существует несколько вариантов объяснения этого явления. Во-первых, это может быть связано с действием сил Ван дер Ваальса. Однако расчеты и экспериментальная проверка взаимодействия зонда АСМ с жестким материалом показывают, что величину такого скачка нельзя объяснить действием одних только сил Ван дер Ваальса. Вторая наиболее популярная версия объяснения данного явления – действие капиллярных сил. Дело в том, что при проведении экспериментов в обычных атмосферных условиях, на поверхности образца наблюдается адсорбированный слой жидкости, который вносит вклад во взаимодействие зонда АСМ с материалом.

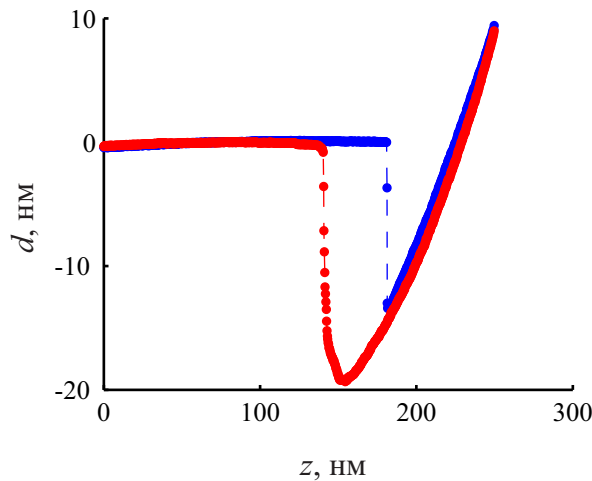


Рис. 4: Экспериментальные данные прямого (синий цвет) и обратного хода (красный цвет) движения кантилевера

В третьей главе в рамках компьютерных экспериментов исследованы особенности контактного взаимодействия зонда атомно-силового микроскопа с пленкой жидкости на поверхности образца. Отличительной особенностью от аналогичных работ других авторов является учет действия сил Лапласа.

Рассмотрена осесимметричная задача внедрения зонда в жидкость при условии, что жидкость занимает полубесконечное пространство. Схематично такой контакт представлен на рисунке 5. Нас интересует перемещение ξ точек во введенном слое очень малой толщины по оси z во время контакта зонда с жидкостью.

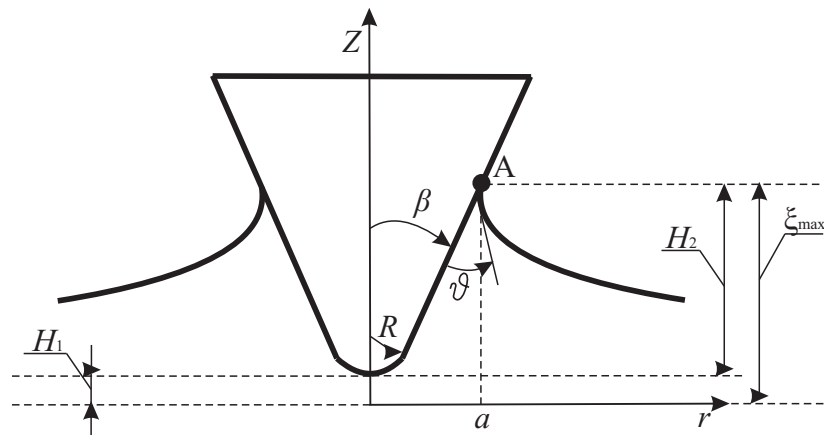


Рис. 5: Схема образования капиллярного мениска: H_1 – расстояние от кончика зонда до уровня жидкости на большом удалении от зонда, другими словами, между кончиком зонда и уровнем невозмущенной поверхности жидкости; H_2 – высота поверхности зонда, смоченной жидкостью; ξ_{\max} – расстояние, на которое поднимается жидкость при погружении в нее зонда; R – радиус скругления зонда; ϑ – краевой угол смачивания

Предложен новый метод получения уравнения, позволяющего определить функцию геометрии межфазной поверхности с учетом действия капиллярных сил. Данный метод использует математический аппарат механики сплошных сред и представление границы раздела фаз жидкость-воздух в виде тонкой

пленки постоянной толщины. Такой подход называется Level Set Method и позволяет получать условия на межфазной границе в общем случае, когда возникает необходимость учитывать не только силы Лапласа, но и энергию деформации границы, связанную с особенностью поведления на границе полимерных цепей.

Полученная зависимость между давлением жидкости p и функцией ξ , определяющей геометрию межфазной поверхности жидкости, представлена уравнением 1

$$p = -\frac{\alpha}{\sqrt{1 + (\xi')^2}} \left(\frac{\xi''}{1 + (\xi')^2} + \frac{\xi'}{r} \right), \quad (1)$$

где α – коэффициент поверхностного натяжения на границе раздела фаз, r – координата рассматриваемой точки границы жидкости в цилиндрических координатах, ξ' , ξ'' – производные функции ξ по координате r .

С учетом полученного уравнения 1 и условия, что давление, действующее на зонд со стороны жидкости, равно $p = -\rho g \xi$, нашли выражение, которое необходимо решить для определения границы жидкости

$$\xi'' = -(1 + (\xi')^2) \left(\frac{-\rho g \xi}{\alpha} \sqrt{1 + (\xi')^2} + \frac{\xi'}{r} \right). \quad (2)$$

Анализируя полученные решения, в первую очередь была отмечена особенность искривления границы жидкости на разных масштабных уровнях. На рисунке 6а на примере кремниевого конического зонда с углом раскрытия конуса 40° и радиусом скругления $R = 10$ нм представлена граница жидкости под действием капиллярных сил при контакте зонда с жидкостью на наноуровне, микроуровне и макроуровне. Решение на наноуровне получается при задании высоты подъема жидкости 1 нм, на микроуровне – 1 мкм, на макроуровне – 1 мм. Высоту подъема задавали в качестве исходного данного. При этом используется всегда только одно уравнение 2 не зависимо от того, какой уровень выбирается. При решении задачи на макроуровне предполагалось, что высота зонда, погружаемого в жидкость, исчисляется мм, хотя в действительности высота зонда порядка микрон. Но в данном случае было интересно посмотреть на предельное расстояние, на котором происходит подъем жидкости при контакте с зондом. Видно, что искривление границы жидкости около зонда на всех масштабных уровнях распространяется на величину, существенно превышающую радиус зонда атомно-силового микроскопа.

Обнаружено, что при заданных начальных и граничных условиях на наномасштабном уровне отсутствуют решения, при которых вершина зонда находилась бы ниже начального уровня жидкости, то есть при контакте с жидкостью зонд должен сразу "нырять" в жидкость на большую глубину, превышающую размеры наномасштабного уровня.

Установлено, что при поднятии зонда жидкость тянется за ним не только около самого зонда, но и на очень большом удалении (на расстоянии до 10 мм). Чем выше поднимается зонд, тем на большую высоту поднимается жидкость по поверхности зонда (рис. 7). Это особенность наномасштабного уровня. На макроскопическом уровне такого эффекта не наблюдается.

Доказано, что нельзя пренебрегать давлением жидкости в уравнении 1. На рисунке 6б решение в пренебрежении силами тяжести показано пунктирной линией. Решение, полученное с учетом действия сил тяжести, показано

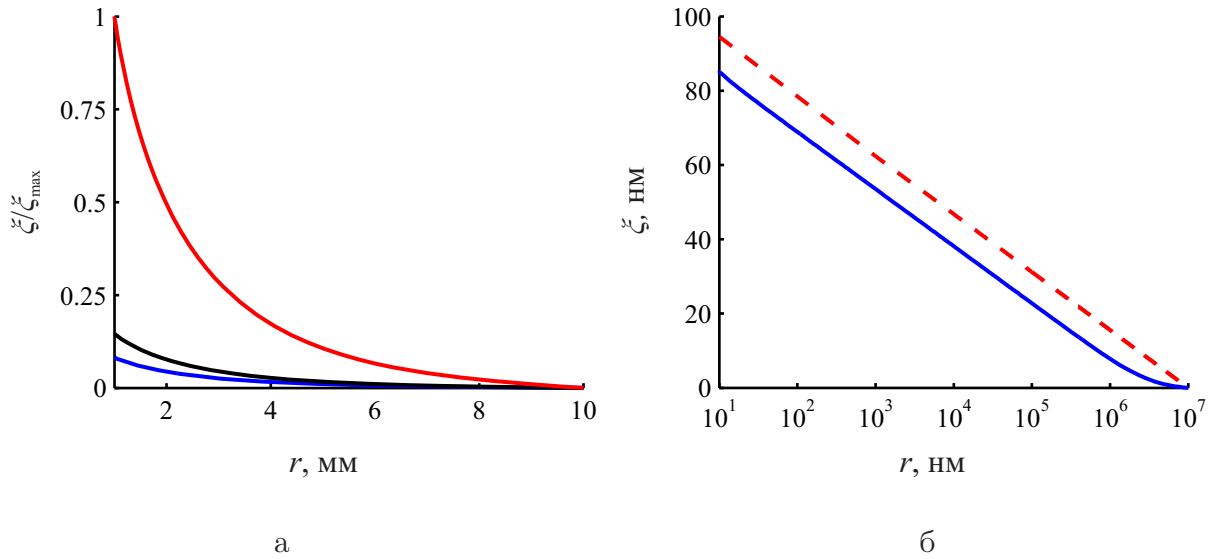


Рис. 6: Искривление границы жидкости под действием капиллярных сил при погружении зонда в жидкость на наноуровне (синий цвет), на микроуровне (черный цвет) и на макроуровне (красный цвет) – а; профиль жидкости около зонда, рассчитанный с учетом давления жидкости (сплошная линия) и в предположении, что гравитационной силой можно пренебречь (пунктирная линия)

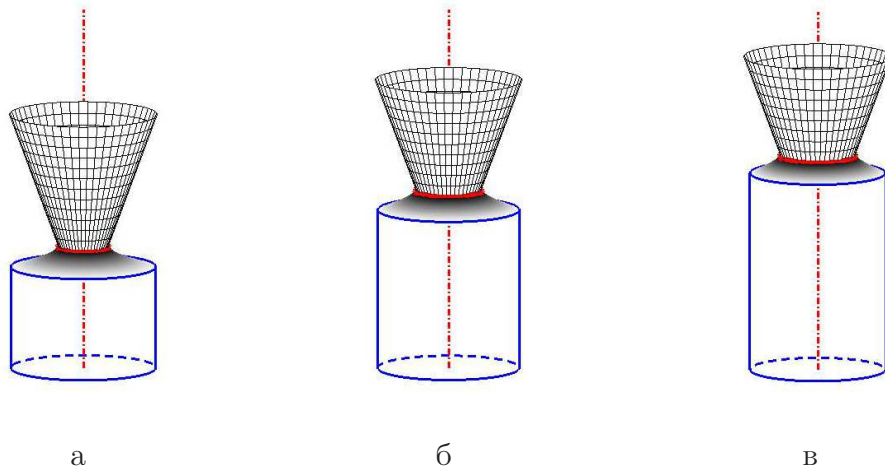


Рис. 7: Решения для значений H_2 а) 27 нм, б) 36 нм, в) 41 нм. Одновременно с увеличением значения H_1 увеличивается уровень подъема жидкости по границе зонда ξ_{max}

сплошной линией. Из рисунка видно, что действие сил тяжести приводит к более низкому профилю жидкости и переход к нулевому значению в этом решении происходит плавно на расстоянии от 1 мм до 1 см.

Показано, что поверхность материала не может быть покрыта тонким слоем жидкости одинаковой толщины. Более вероятна ситуация, когда жидкость заполняет неровности поверхности образца. Это означает, что, несмотря на то, что при контакте с жидкостью зонд должен незамедлительно "нырять" на большую глубину, капиллярные явления не могут служить объяснением скачка, который имеет место на всех участках поверхности.

Поэтому **четвертая глава** посвящена рассмотрению моделей контактного взаимодействия зонда с материалом и третьим способом объяснения причины появления скачка зонда на прямом ходе движения кантилевера.

Проведен анализ наиболее популярных моделей контактного взаимодействия, которые используются для расшифровки экспериментальных данных, получаемых методами атомно-силовой микроскопии. Применение модели Герца, модели Дерягина-Мюллера-Топорова (ДМТ) и модели Джонсона-Кендалла-Робертса (ДжКР) для аппроксимации силовой кривой, снятой на материале полидиметилсилоксан, позволило сделать следующие выводы.

Уравнения модели Герца не описывают скачек зонда на силовой кривой. Согласно этой модели прямой и обратный ход движения кантилевера совпадают, так как она не учитывает действие адгезионных сил.

Модели ДМТ и ДжКР, хотя и берут за основу упругой составляющей контактного взаимодействия теорию Герца, позволяют описать как прямой, так и обратный ход движения кантилевера. Установлено, что согласно этим моделям резкое изменение отклонения свободного конца кантилевера происходит не до контакта с поверхностью образца, а после того, как зонд коснулся поверхности, то есть точка начала контакта соответствует точке А, показанной на рисунке 8.

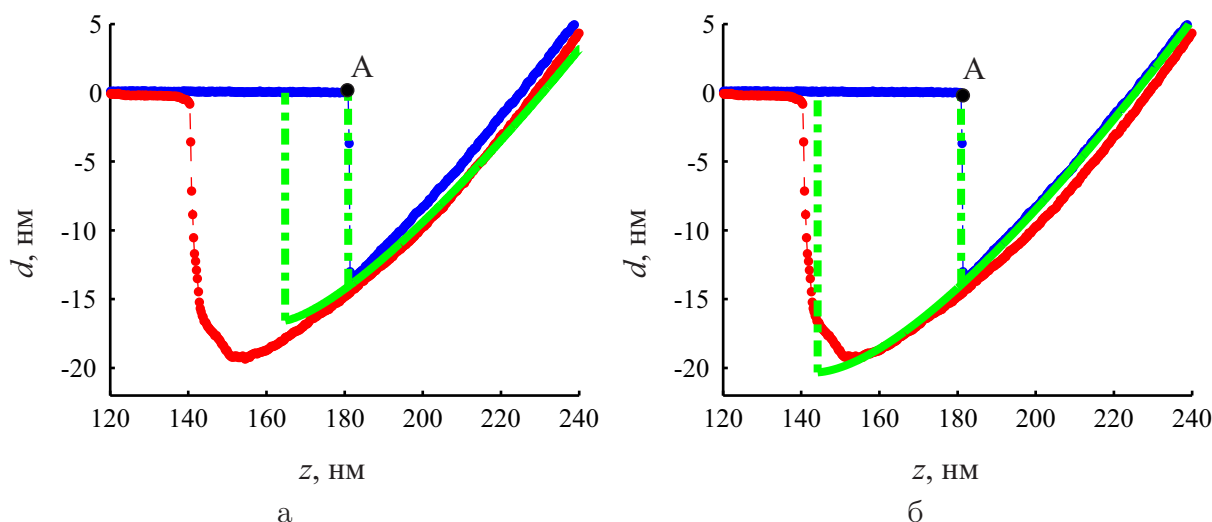


Рис. 8: Аппроксимация экспериментальных данных прямого (синий цвет) и обратного хода (красный цвет) движения кантилевера по модели ДМТ (зеленый цвет на рисунке а) и по модели ДжКР (зеленый цвет на рисунке б), где точка А соответствует точке начала контакта

По модели ДМТ несмотря на то, что она описывает обратный ход движения кантилевера, отрыв зонда от поверхности материала происходит раньше, чем в рассматриваемых экспериментальных данных (рис. 8 а). Хотя именно эта модель используется для построения карты распределения модуля упругости материала в режиме Peak Force.

Расчеты показали, что среди представленных моделей теория ДжКР лучше всего подходит для описания полученной силовой кривой. Она позволяет не только описать скачек на прямом ходе движения кантилевера, но и учитывает налипание материала на зонд при отводе кантилевера от образца. Однако согласно тому, что утверждали авторы модели ДжКР, эта теория не применима к рассмотренным экспериментальным данным, по следующим причинам.

Во-первых, все три рассмотренные модели были получены в рамках линейной теории упругости для малых деформаций. Материал, выбранный в

качестве образца для исследований, является эластомером, для которого характерны большие деформации.

Во-вторых, представленные модели предполагают, что контактная область является частью плоскости, которая на удалении является границей полимерного образца с воздухом. Это означает, что материал образца должен быть абсолютно жестким, а зонд должен быть деформируемым. Хотя в действительности модуль упругости материала зонда на несколько порядком больше модуля упругости полидиметилсилоксана.

В-третьих, в разобранных моделях рассматривается контакт сферы и плоскости. Для получения экспериментальной силовой кривой использовался зонд, геометрия которого может быть представлена как пирамидка со скругленной вершиной. Радиус скругления был определен и соответствует 10 нм. Но значение скачка на прямом ходе, равное 13 нм, превышает эту величину (рис. 8 а). При этом максимальная глубина проникновения зонда для анализируемых экспериментальных данных равна 60 нм. То есть решение о проникновении сферы в полупространство не может быть использовано.

Для того, чтобы понять, почему модель ДжКР тем не менее хорошо описывает экспериментальные данные, для которых она не предназначена, было проведено дополнительное исследование. В ходе которого было установлено, что в действительности уравнения модели Герца позволяют рассматривать контакт не только сферы и плоскости, но и параболоида вращения и плоскости. Это связано с тем, что в основу положено условие о том, что взаимное сближение тел описывается квадратичной зависимостью.

Анализ контактного взаимодействия параболоида вращения и плоского полупространства в рамках малых деформаций и в рамках больших деформаций позволил сделать следующие выводы. Во-первых, зависимость глубины внедрения зонда от приложенной нагрузки для обеих теорий отличается незначительно при внедрении на глубину радиуса. Во-вторых, значение площади поверхности контакта также близко для обоих случаев. Поэтому модель ДжКР, не смотря на то, что она была получена в рамках малых деформаций, хорошо описывает экспериментальные данные для полидиметилсилоксана.

Установлена причина, по которой модели ДМТ и ДжКР описывают скачок на прямом ходе движения кантилевера. Авторы модели ДжКР полагали, как уже отмечалось ранее, что поверхность контакта плоская и задавали отрицательную энергию, идущую на ее образование. Хотя при взаимодействии зонда с полимерным материалом не может быть быть плоской поверхности контакта. Возможно новое объяснение причины хорошего совпадения теории с экспериментом. В уравнениях учтена энергия межфазной границы полимер–воздух. Но при проникновении зонда в материал часть поверхности межфазной границы, обозначенная на рисунке 9 а символом S_1 , исчезает. Поэтому уменьшается энергия, заключенная на межфазной границе полимер–воздух, и зонд начинает втягиваться в полимер. В модели ДМТ предполагается существование отрицательной энергии около линии, определяющей границу зонд–воздух–полимер. Это тоже приводит к втягиванию зонда в материал.

Чтобы учесть этот недостаток моделей ДМТ и ДжКР предложена новая модель контактного взаимодействия, которая дополнительно учитывает энергию, действующую по поверхности контактной области S_2 , показанной на рисунке 9 б и коэффициент жесткости кантилевера. Эта модель предполагает осесимметричный контакт упругого полупространства и параболоида вра-

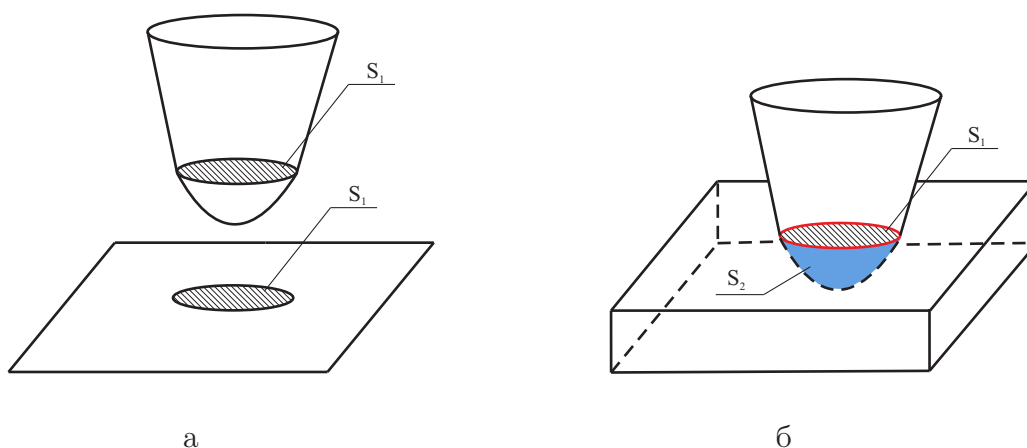


Рис. 9: Схема взаимодействия параболоида вращения с плоскостью а – до контакта; б – во время контакта

щения, показанный на рисунке 9 б. Установлено, что предложенная модель качественно и количественно хорошо описывает экспериментальные данные (рис. 10 а).

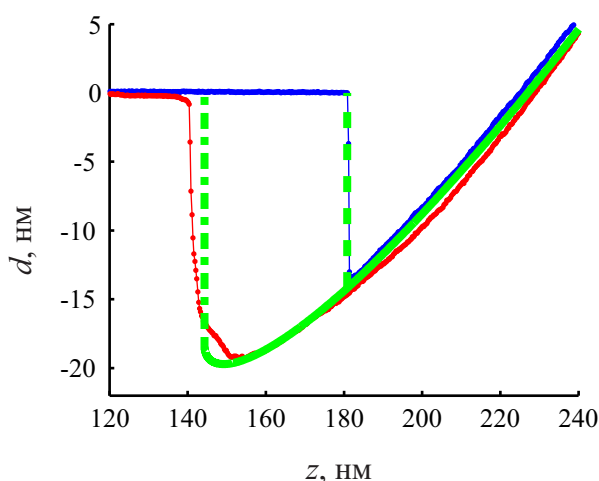


Рис. 10: Данные, рассчитанные по новой модели (зеленый цвет), и экспериментальные данные прямого (синий цвет) и обратного хода (красный цвет) движения кантилевера

Сравнение предложенной модели контактного взаимодействия с моделью ДжКР показало, что новая модель не только не уступает модели ДжКР, но и лучше описывает момент отрыва зонда от образца на обратном ходе движения кантилевера (рис. 11).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В **заключении** диссертации сформулированы основные результаты проведенного исследования:

1. Разработан метод многоуровневой визуализации, который позволяет выделять на криволинейной поверхности объекты заданного характерного размера. Метод позволяет исследовать объекты на разных масштабных уровнях: выделять агрегаты частиц наполнителя, осуществлять анализ

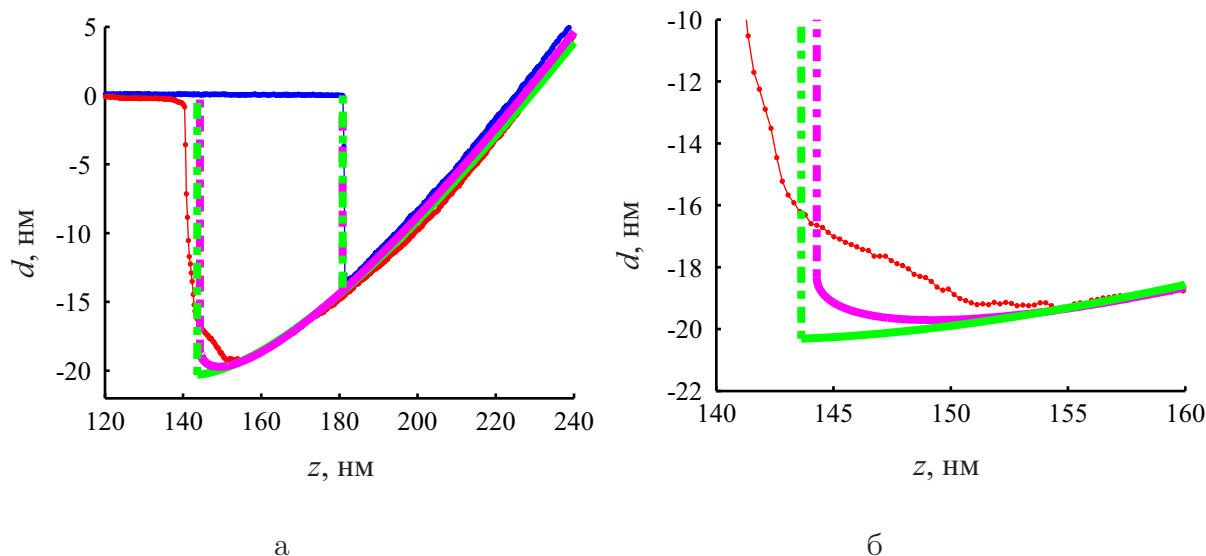


Рис. 11: Аппроксимация экспериментальных данных прямого (синий цвет) и обратного (красный цвет) хода движения кантилевера по новой модели (розовый цвет) и по модели ДжКР (зеленый цвет): а – вся кривая; б – выделенный участок силовой кривой на обратном ходе, где происходит отрыв зонда от поверхности образца

неоднородностей на микронном уровне, что необходимо для исследования особенностей структуры материала и качества его изготовления. Апробация на модельных поверхностях с заранее известным рельефом показала высокую надежность и достоверность данного метода.

2. Проведено вычислительное моделирование взаимодействия зонда атомно-силового микроскопа с образцом при наличии жидкой пленки на его поверхности. Изучены особенности такого взаимодействия на наномасштабном уровне с учетом действия сил Лапласа. На основе полученных теоретических решений показано, что искажение поверхности жидкой пленки, вызванное погружением в нее кончика зонда АСМ, распространяется на расстояние, на несколько порядков превышающее область непосредственного контакта. Показано, что из-за возникающих при контакте с жидкостью капиллярных сил зонд должен незамедлительно нырять на большую глубину, превышающую размеры наномасштабного уровня. Установлено, что нельзя пренебрегать действием гравитационных сил в жидкой среде.
3. Разработана новая модель контактного взаимодействия зонда АСМ с полимерной поверхностью, которая позволяет более точно описывать экспериментальные силовые кривые на прямом и обратном ходе. В отличие от других известных на сегодняшний день моделей, данный подход точнее описывает процесс отрыва зонда АСМ от поверхности материала на обратном ходе, что весьма важно при исследовании адгезионных и диссипативных свойств поверхности.

ПУБЛИКАЦИИ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Ужегова, Н.И. Теоретическое моделирование взаимодействия индентора атомно-силового микроскопа с жидкой нанопленкой на поверхности образца / Н.И. Ужегова, А.Л. Свистков, О.К. Гаришин // Известия Самарского научного центра РАН. – 2013. – Т. 15, № 6(2). – С. 512-516.
2. Ужегова, Н.И. Моделирование контакта зонда атомно-силового микроскопа с жидкой пленкой / Н.И. Ужегова, А.Л. Свистков, О.К. Гаришин // Конденсированные среды и межфазные границы. – 2014. – Т. 16, № 1. – С. 84-90.
3. Uzhegova, N.I. The influence of capillary effect on atomic force microscopy measurements / N.I. Uzhegova, A.L. Svistkov, B. Lauke, G. Heinrich // International Journal of Engineering Science. – 2014. – Vol. 75. – P. 67-78.
4. Морозов, И.А. Определение механических свойств материалов на основе моделей взаимодействия зонда атомно-силового микроскопа с поверхностью образцов / И.А. Морозов, Н.И. Ужегова // Вычислительная механика сплошных сред. – 2014. – Т. 7, № 4. – С. 385-397.
5. Свистков, А.Л. Разработка методов компьютерного моделирования механического поведения эластомерного нанокompозита на основе знаний о структуре материала и активности наполнителя / А.Л. Свистков, В.Н. Солодько, С.Е. Евлампиева, Н.И. Ужегова, К.А. Мохирева // Вестник РФФИ. – 2015. – № 3(87). – С. 15-22.
6. Uzhegova, N.I. The multilevel method for analyzing heightmap data of nanocomposites obtained by atomic force microscopy / N.I. Uzhegova, V.N. Solodko, A.L. Svistkov // Proceedings of the 9th European Conference on Constitutive Models for Rubber. – Prague. – 2015. – P. 81–86.
7. Ужегова, Н.И. Новая модель контактного взаимодействия зонда атомно-силового микроскопа с исследуемым материалом / Ужегова Н.И., Свистков А.Л. // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2016. – Т. 22, № 3. – С. 315-329.
8. Ужегова, Н.И. Многоуровневый анализ рельефа поверхности образца, полученного методами атомно-силовой микроскопии / Н.И. Ужегова, А.Л. Свистков // Вычислительная механика сплошных сред. – 2016. – Т. 9, № 3. – С. 366-374.