

УДК 539.3

О.К. Гаришин, С.Н. Лебедев

Институт механики сплошных сред УрО РАН (г. Пермь)

**МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКОГО
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПОЛИМЕРНОЙ НАНОПЛЕНКИ
С НАНОИНДЕНТОРОМ**

Abstract

The way of polymeric nanofilms elastic constants definition is offered on the basis of the data received with the help of atomic-force microscopy. At calculations assumed that researched «sample» represents highly elastic material. It is known, that at introduction of nano indenter in a sample, deformations near to contact can reach tens and even hundreds percent. Therefore, it was as a first approximation accepted, that mechanical properties of material are described by Neo-Hookean elastic potential. More complex properties, such as plasticity and viscoous-elasticity in the given work were not examined.

Numerical dependences between force applied to indenter, depth of its penetration into a film, thickness of a film and its mechanical constants are received. These results are submitted as empirical approximation formulas (with accuracy of 90 %). With their help, knowing nanofilm thickness and having received with the help of atomic-force microscopy dependence between force and depth of introduction it is possible to calculate elastic properties of a material.

В настоящее время экспериментально установлено, что в дисперсно наполненных полимерных композитах около частиц наполнителя существуют слои связующего с отличными от остальной матрицы механическими свойствами. Причем в случае нанодисперсного наполнителя объемная доля слоев достигает значений, соизмеримых с общим объемом связующего (из-за очень большой площади поверхностей раздела фаз). Именно эти слои в значительной степени определяют особенности механического поведения наноматериала, его упругость, деформации в момент разрушения, прочность. На границе полимера с внешней средой также имеются нанослои, которые активно участвуют в формировании сил поверхностного натяжения, адгезионных свойств при контактах с другими материалами,

проницаемости границы в задачах тепло- и массообмена и т.д. Именно на границе с внешней средой интенсивно идет старение полимера и обычно начинается разрушение изделия. Этим объясняется актуальность проблемы исследования нанослоев, появляющихся на границах раздела фаз и на внешней поверхности композита.

Кроме того, современная техника и применение высоких технологий для модификации поверхностных слоев позволяют формировать пленки и покрытия, в том числе наноразмерные, которые обладают уникальным сочетанием свойств, принципиально отличающимся от сочетания свойств материалов, обработанных традиционными методами. Внедрение нанотехнологий требует измерения физических и механических свойств применяемых материалов на субмикронном и нанометровом уровне.

Методы наноиндентации – анализ механического отклика поверхности образца на вдавливание наносенсора атомно-силового микроскопа (АСМ) – широко применяются в настоящее время для определения механических свойств материала на малых масштабах измерения [1–6], а также для непосредственного наблюдения таких явлений, как появление дислокаций, возникновение сдвиговой нестабильности, фазовых переходов и т.д. Эти технологии открывают новые горизонты для понимания тех структурных механических и физических процессов, которые происходят в материале на наноуровне.

Атомно-силовая микроскопия позволяет получать информацию о геометрии поверхности и механических свойствах материала, но для расшифровки получаемой в экспериментах информации необходимо строить математические модели. Одна из таких моделей и предлагается ниже.

Для того чтобы определить, какими механическими свойствами обладает исследуемый материал, надо знать связь между силой реакции на наносенсоре и глубиной его проникновения в поверхность. Имея решение соответствующей краевой задачи, можно по данной экспериментальной зависимости определить механические константы среды.

Контактную задачу о внедрении наносенсора (зонда) атомно-силового микроскопа в полимерную пленку с неизвестными механическими свойствами решали в нелинейно-упругой осесимметричной постановке (рис. 1). При расчетах радиус вершины зонда R брали

равным 10 и 20 нм, $\alpha = 20^\circ$. Модельные образцы представляли в виде круглых «таблеток» с одинаковым радиусом $R_L = 200$ нм, но с разной толщиной H , которую варьировали от 5 до 100 нм.

Считали, что зонд является абсолютно жестким телом, а механическое поведение нано пленки можно описать с помощью Неогуковского потенциала,

$$W = C_1 (\text{tr } \mathbf{B} - 3), \quad (1)$$

где C_1 – половина начального модуля сдвига, \mathbf{B} – левый тензор Коши–Грина в полярном разложении деформационного градиента среды. Сверху на индентор действовала сосредоточенная сила F_z . На границе контакта зонда и образца выполнялось условие полного прилипания без проскальзывания в процессе нагружения. Нижняя граница образца находилась в полном контакте (без отрывов и проскальзывания) с абсолютно жесткой плоскостью. Задачу решали методом конечных элементов.

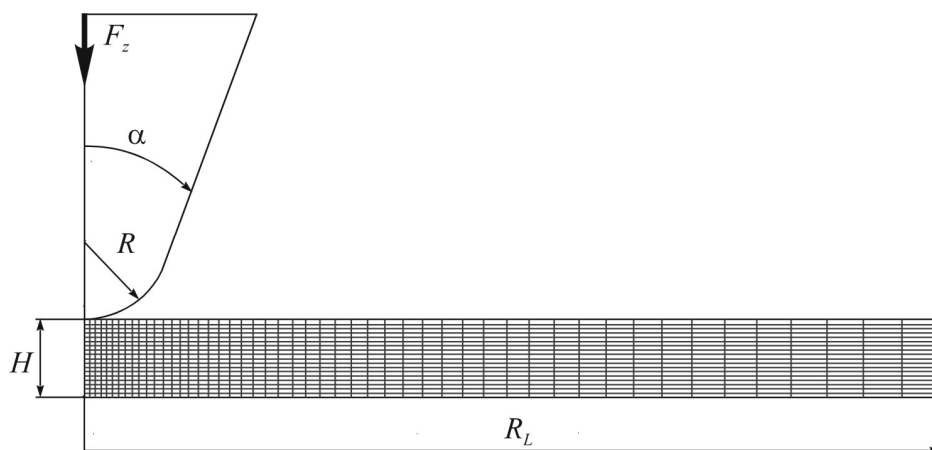


Рис. 1. Расчетная схема конечно-элементной осесимметричной задачи о внедрении наносенсора атомно-силового микроскопа в полимерный образец

В качестве иллюстрации расчетов на рис. 2 и 3 приведены распределения полей гидростатических напряжений и интенсивности напряжений (все отнесено к константе Трелоара C_1) для случая, когда толщина нано пленки равна 18 нм, а радиус вершины зонда – 20 нм.

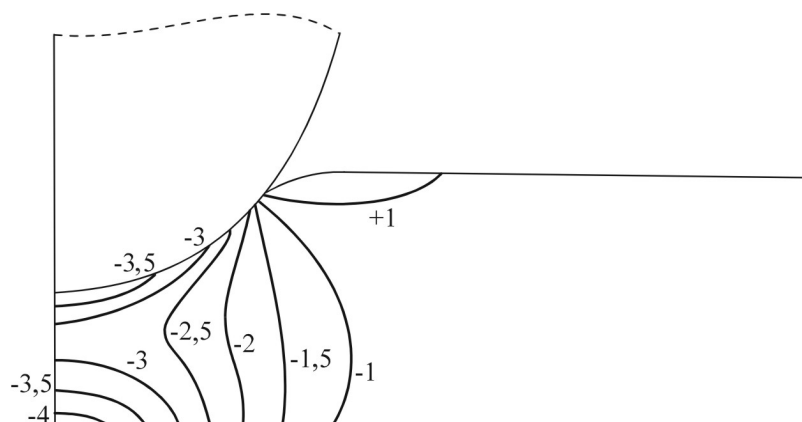


Рис. 2. Распределение гидростатических напряжений σ_0/C_1 для случая $H = 18$ нм (индентор внедрен на 8,3 нм)

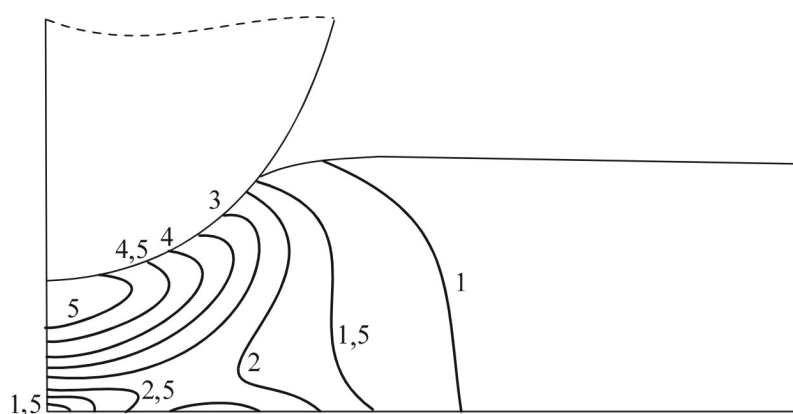


Рис. 3. Распределение интенсивности напряжений σ_{int}/C_1 для случая $H = 18$ нм (индентор внедрен на 8,3 нм)

На рис. 4 представлены зависимости силы реакции F_z , действующей на шуп от глубины его проникновения в материал u_z . Приведены зависимости для образцов с различной толщиной H . Из графиков видно, что чем больше значение H , тем меньшие усилия требуются для внедрения индентора на одну и ту же величину.

Это и понятно, так как в более тонких образцах сильнее «чувствуется» влияние жесткой нижней границы, т.е. чем тоньше слой, тем более жесткой является рассчитываемая конструкция. Следует отметить, что на начальном этапе деформирования параметр H практически не влияет на вид расчетных кривых – все они лежат поблизости друг от друга.

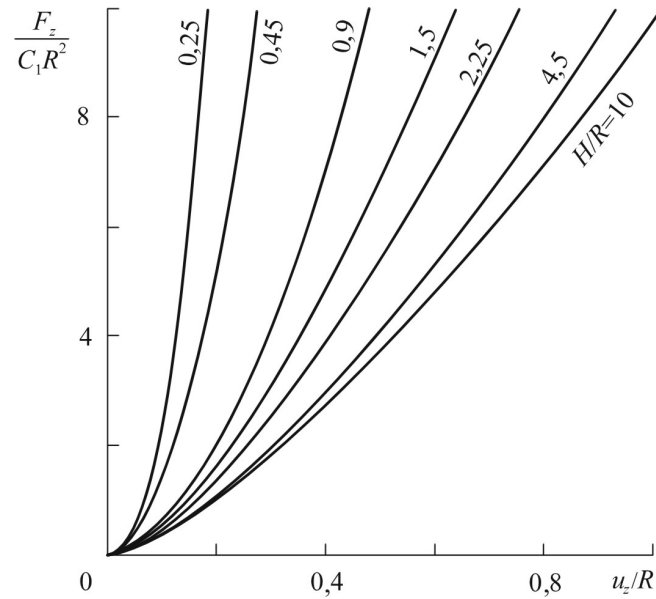


Рис. 4. Зависимости силы реакции F_z , действующей на шуп, от глубины его проникновения в материал u_z : H – толщина образца, R – радиус вершины шупа, C_1 – упругая константа потенциала Трелоара

Данные зависимости были аппроксимированы формулой (2) (с точностью, примерно, 90 %). Таким образом, зная толщину нано пленки и получив с помощью атомно-силовой микроскопии зависимость $F_z(u_z)$, можно достаточно просто определить упругий модуль материала,

$$\frac{F_z}{C_1 R^2} = a \left(\frac{u_z}{R} \right)^m, \quad (2)$$

где

$$a = \begin{cases} 14,90(H/R)^{-2,4} + 13,82, & 0,25 \leq H/R < 0,90, \\ 20,45(H/R)^{-1,525} + 9,00, & 0,90 \leq H/R \leq 10,0, \end{cases}$$

$$m = \begin{cases} 0,82 \exp(-1,56 H/R + 0,29) + 1,448, & 0,25 \leq H/R < 2,25, \\ -0,0129 H/R + 1,5085, & 2,25 \leq H/R \leq 10,0. \end{cases}$$

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Министерства промышленности и природопользования Пермского края (Гранты № 07-08-96016-р_урал_а, № 07-08-96017-р_урал_а).

Библиографический список

1. Schuh C.A. Nanoindentation studies of materials / C.A. Schuh // *Materials Today*. – 2007. – Vol. 9. – № 5. – P. 32–40.
2. Bharat B. Handbook of MicroNanotribology / B. Bharat. – 1999. – P. 859.
3. Computational modeling of the forward and reverse problems in instrumented indentation / M. Dao [at al.] // *Acta Materialia*. – 2001. – Vol. 49. – В. 19. – P. 3899–3918.
4. Fischer-Cripps A.C. Nanoindentation and indentation measurements / A.C. Fischer-Cripps // *Mater. Sci. Eng.* – 2004. – Vol. 44. – P. 91–102.
5. Петржик М.И. Современные методы оценки механических и трибологических свойств функциональных поверхностей / М.И. Петржик, Д.В. Шатанский, Е.А. Левашов // *Высокие технологии в промышленности России: тр. 10-й Международн. науч.-техн. конф.* – М., 2004. – С 406–409.
6. Мачихин В.Б. Двухмерная модель структуры материала в процессе наноиндентирования / В.Б. Мачихин, А.А. Арзамасцов // *Исследовано в России*. – 2003 (Электронный журнал).

Получено 11.05.2007