

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
КИЇВСЬКИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ БОРИСА ГРІНЧЕНКА
ІНСТИТУТ ІНФОРМАЦІЙНИХ ТЕХНОЛОГІЙ І ЗАСОБІВ
НАВЧАННЯ НАПН УКРАЇНИ

**Теоретико-практичні проблеми
використання математичних методів та
комп'ютерно-орієнтованих технологій в
освіті та науці**

**Збірник матеріалів
І Всеукраїнської інтернет-конференції**

19 травня 2017 року
м. Київ

Київ – 2017

УДК 004:378(082)
ББК 32.97:74.58я73

Схвалено Вченою радою
Факультету інформаційних технологій та управління Київського університету
імені Бориса Грінченка
(Протокол № 7 від 19.04.2017 р.)

Відповідальні за випуск:

**М.М. Астаф'єва,
О.В. Бушма,
О.М. Глушак,
О.С. Литвин,
І.В. Машкіна,
В.В. Прошкін**

Теоретико-практичні проблеми використання математичних методів та комп'ютерно-орієнтованих технологій в освіті та науці: зб. матеріалів у I Всеукраїнської інтернет-конференції, 19 трав. 2017 р., м. Київ / Київ. ун-т ім. Б. Грінченка; Відповід. за вип.: М.М. Астаф'єва, О.В. Бушма, О.М. Глушак, О.С. Литвин, І.В. Машкіна, В.В. Прошкін. – К. : Київ. ун-т ім. Б. Грінченка, 2017. – 195 с.

УДК 004:378(082)
ББК 32.97:74.58я73
© Автори публікацій, 2017
© Київський університет імені Бориса Грінченка, 2017

Potentially Hazardous Objects with Time Shifts// WSEAS Trans. on Business & Economics. 2004, Issue3, №1, p. 37-43.

3. Jamshid Gharakhanlou, Ivan V. Kazachkov, Oleksandr V. Konoval. Development and Investigation of the Mathematical Models for Potentially Hazardous Nuclear Power Objects with Deviated Arguments// WSEAS Trans. on Applied and Theoretical Mechanics.- 2013.- Vol. 8.- Issue 4.- P. 241-257.

4. Jamshid Garakhanlou, I.V. Kazachkov. Mathematical modeling of potentially hazardous nuclear power objects with shifted arguments// J. Nuclear and Radiation Safety.- 3 (55) .- 2012.- P. 21-26.

5. Jamshid Gharakhanlou, Oleksandr V. Konoval, Ivan V. Kazachkov. About development of the aggregate mathematical models for complex non-linear systems with deviated arguments// Recent advances in mathematical methods, mathematical models and simulation in science and engineering - Interlaken, Switzerland 2014.- P. 42-47.

6. Эльсгольц Л.Э., Норкин С.Б. Введение в теорию уравнений с отклоняющимися аргументами.- Москва: Наука.- 1971.- 296 с.

7. Allen P.M. Evolution, Population Dynamics and Stability/ Proceedings of the National Academy of Sciences of the USA.- 1976.- March.- Vol.73.- No.3.- P.665-668.

8. Понтрягин Л.С., Болтянский В.Г., Гамкрелидзе Р.В., Мищенко Е.Ф. Математическая теория оптимальных процессов.- М.: Наука.- 1976.

9. Пименов В.Г. Функционально-дифференциальные уравнения: численные методы.- Екатеринбург: УрГУ.- 1998.

10. Азбелев Н.В., Максимов В.П., Рахматуллина Л.Ф. Введение в теорию функционально-дифференциальных уравнений.- М.: Наука.- 1991.

11. Бегун В.В., Бегун С.В., Широков С.В., Казачков І.В., Литвинов В.В., Письменний Є.М. Культура безпеки на ядерних об'єктах України. Навчальний посібник.- Київ.- 2012.- 386 с.

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ МЕХАНІЧНОЇ ВЗАЄМОДІЇ ВІСТРЯ ЗОНДОВОГО МІКРОСКОПУ З ПОВЕРХНЕЮ

Моленко А.С.¹, Гребенюк П.М.¹, Литвин О.С.¹,
Прокопенко І.В.², Литвин П.М.²

¹Київський університет імені Бориса Грінченка, м. Київ

²Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України, м. Київ

Одним із високоінформативних засобів діагностики поверхонь на мікронному, нано- та ангстремному рівнях є скануючі зондові мікроскопи. Ці високотехнологічні прилади поєднують передові досягнення цифрових комп'ютерних технологій та фізичних наук про взаємодію між тілами на субнанометровому рівні. Одним із методів зондової мікроскопії є атомно-силова мікроскопія, де інформація про форму поверхні та її механічні

властивості отримується за допомогою кремнієвого вістря, закріпленого на пружній балці (кантилевері) мікронних розмірів. Для опису взаємодії кремнієвого вістря радіусом від 5 до 30 нм із поверхнею розроблено ряд фізичних моделей. Моделі розглядають питання силової взаємодії та контактної механіки. Для макроскопічних тіл сила гравітації є домінуючою між двома взаємодіючими тілами. При зменшенні розміру взаємодіючих тіл сили міжмолекулярних взаємодій мають більший внесок у взаємодію, ніж гравітація. Гравітаційні й міжмолекулярні сили є, відповідно, пропорційними об'єму тіла і площі його поверхні. Кубічний член об'єму буде більшим, ніж квадратичний член площі поверхні, коли розмір об'єкта досить великий. Ця картина стає інверсною, коли масштаби тіл зменшуються і домінуючими стають інші фізичні взаємодії. Нами здійснено різнорівневе моделювання основних взаємодій зонд-поверхня з використанням загальноприйнятих моделей з метою визначення меж їх практичного застосування та з'ясування оптимальних умов проведення вимірювань з використанням мікромеханічних зондових сенсорів.

Для практичних застосувань, у першому наближенні, можна обмежитись розглядом трьох далекодіючих сил взаємодії: капілярних сил, електростатичних та сил Ван-дер-Ваальса. Капілярні сили виникають через поверхневий натяг рідини, яка конденсується з повітря. Кулонівські сили і сили двійного електричного шару складають сили електростатичної взаємодії. У той час як сили Ван-дер-Ваальса складаються з диполь-дипольних, диполь-неполярних та неполярних взаємодій. Ці три складових Ван-дер-Ваальсових взаємодій відомі як орієнтаційна взаємодія (або сила Кізона), індукційна взаємодія (або сила Дебая) та дисперсійна взаємодія (або сила Лондона), відповідно. Поєднання сил двійного зарядженого шару і Ван-дер-Ваальса відоме також як сили Дерягіна-Ландау-Верві-Овербека.

Серед сил взаємодії сила Ван-дер-Ваальса присутня завжди. Кожна Ван-дер-Ваальсова взаємодія є пропорційною відповідній сталій Гамакера.

Для підвищення достовірності моделювання взаємодії між зондом атомно-силового мікроскопу і зразком вводяться інші силові взаємодії окрім сили Ван-дер-Ваальса. Уточнені моделі можуть включати сили взаємодії, такі як адгезія, когезія, капілярні і сили поверхневого натягу між двома взаємодіючими об'єктами.

Найпоширенішими моделями для опису такого типу взаємодій зонд-поверхня є моделі Джонсона-Кендала-Робертса (JKR [1]) та Дерягіна-Мюллера-Топорова (DMT [2]).

Модель JKR включає в себе близькодіючу адгезію, яка по суті є дельта-функцією з ефективністю γ і діє тільки в зоні контакту. DMT крива взаємодії відображає далекодіючі поверхневі сили. Для реальних взаємодій роботі адгезії найкраще відповідає інтеграл притягувальної взаємодії.

На практиці ефект захоплення зонду поверхнею при його наближенні на критичну відстань найчастіше зумовлений силами притягання, такими як сили Ван-дер-Ваальса. А коли зонд приведений у контакт з поверхнею, то виникають

силові взаємодії, найсуттєвішими з яких при роботі на повітрі є капілярні сили, що виникають за рахунок конденсації вологи на поверхнях зонду та зразка.

Правомірність використання JKR, DMT чи перехідної моделі Маугіса [3], для якої два перших наближення є крайніми випадками, можна легко перевірити за критерієм μ , запропонованим Мюллером [4]:

$$\mu = \frac{32}{3\pi} \left(\frac{8\gamma^2 R (1 - \nu^2)}{\pi E^2 Z_0^3} \right)^{\frac{1}{3}}$$

де Z_0 – типова міжатомна відстань, γ – поверхнева енергія. Якщо $\mu \ll 1$ то правомірним є наближення DMT теорії, а при $\mu \gg 1$ – реалізується модель JKR. На рис.1 наведено залежність параметра μ від радіусу зонду для різних поверхневих енергій. Видно, що при малих поверхневих енергіях та типових радіусах вістря мікроскопу μ близьке до 1 (наближення DMT теорії).

Використовуючи потенціал Ленарда – Джонса характерні масштаби Ван-дер-Ваальсової взаємодії можна оцінити за співвідношенням [5]:

$$F = \frac{A_H R}{6Z_0^2} \left(\frac{Z_0^2}{\delta} - \frac{1}{30\delta^9} \right)$$

де A_H – стала Гамакера.

На рис.2 приведено оцінки сили Ван-дер-Ваальсових взаємодій для кремнієвих зондів різного радіусу та при різних енергіях поверхні (сталій Гамакера).

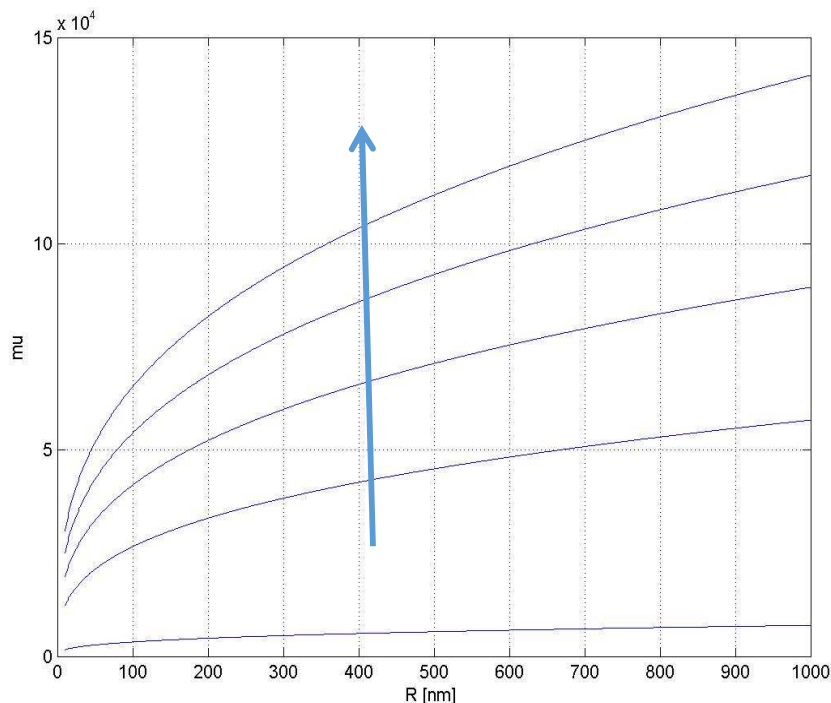


Рис. 1. Залежності параметра Мюллера μ від радіуса вістря зонду АСМ при поверхневих енергіях на одиницю площі від 0,01 до 1 Н/м (крок 0,02 Н/м вказано стрілкою).

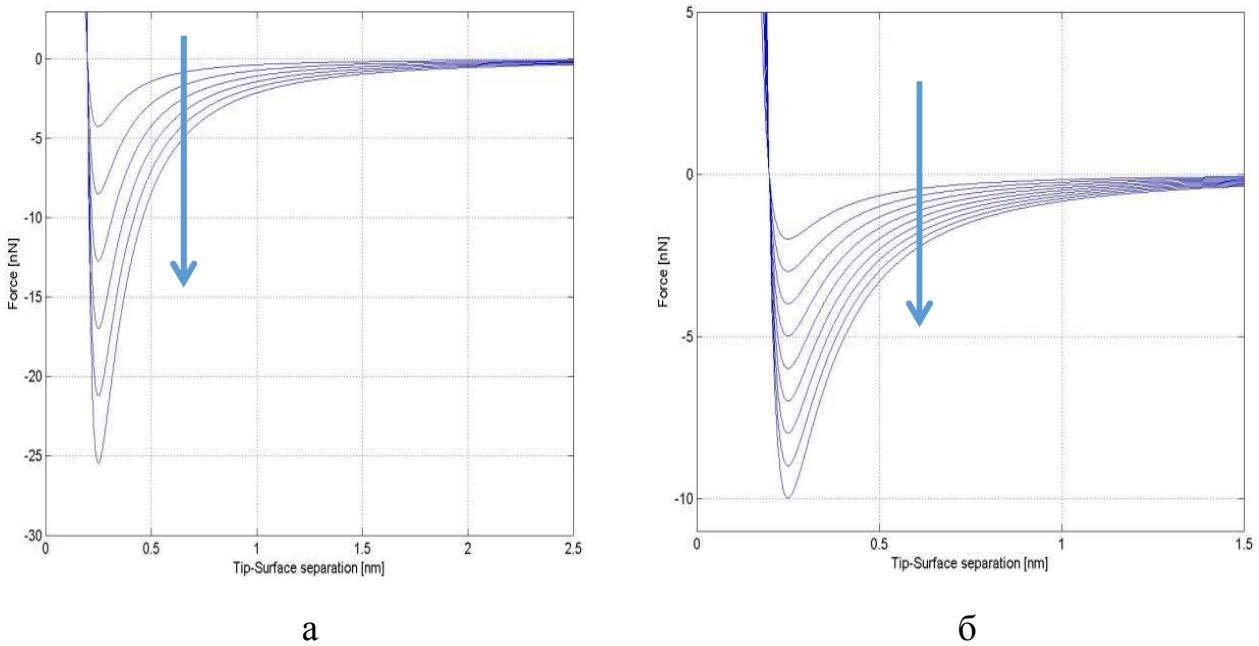


Рис. 2. Залежності сили Ван-дер-Ваальсової взаємодії від відстані зонд-поверхня: (а) – при різних значеннях радіусу зонду (5,10, ..., 30 нм); (б) – при різних значеннях сталої Гамакера (0.1, 0.15, ..., 0.5 аДж).
 $Z_0^2 = 0.35$ нм.

Таким чином, ґрунтуючись на зазначених вище теоретичних підходах та наближеннях, в середовищі для технічного моделювання MathWorks Matlab нами реалізовані математична модель механічної взаємодії вістря зондового мікроскопу з поверхнею та алгоритми практичних розрахунків її параметрів. Проілюстровано межі застосовності моделей, отримано залежності між ключовими параметрами, які визначають характер силових взаємодій вістря зонду з поверхнею.

Отримані результати представляють інтерес для проведення прикладних досліджень засобами скануючої зондової мікроскопії та використання у підготовці майбутніх фахівців у галузі математичного моделювання, комп'ютерних наук та інформаційних технологій.

ДЖЕРЕЛА

1. Джонсон К.Л. Механика контактного взаимодействия / К.Л. Джонсон. – М.: Мир, 1989. – 510 с.
2. Derjaguin B.V. Effect of contact deformations on the adhesion of particles / B.V. Derjaguin, V.M. Muller, Yu.P. Toropov // J. Colloid. Interface Sci. – 1975. – V. 53. – P. 314-326.
3. Maugis D.J. Adhesion of spheres: The JKR-DMT transition using a dugdale model / D.J. Maugis // J. Colloid. Interface Sci. – 1992. – V. 150, N 1. – P. 243-269.
4. Muller V.M. On the Influence of Molecular Forces on the Deformation of an Elastic Sphere and Its Sticking to a Rigid Plane / V.M. Muller, V.S. Yushchenko, B.V. Derjaguin // J. Coll. Interface Sci. – 1980. – V.77. – P. 91-101.