

접촉모델에 따른 AFM 팁의 비선형 동역학 비교

Nonlinear Dynamics of AFM Tip with Different Contact Models

홍 상 혁*·이 수 일**·이 장 무***

S. H. Hong, S. I. Lee and J. M. Lee

Key Words : Atomic Force Microscopy(원자현미경), Tapping Mode(탭핑 모드), DMT Contact Model (DMT 접촉모델), JKR Contact Model(JKR 접촉모델)

ABSTRACT

Tapping mode atomic force microscopy (TM-AFM) utilizes the dynamic response of a resonating probe tip as it approaches and retracts from a sample to measure the topography and material properties of a nanostructure. We present recent results based on numerical techniques that yield new perspectives and insight into AFM. It is compared that the dynamic models including van der Waals and Derjaguin-Muller-Toporov(DMT) or Johnson-Kendall-Roberts(JKR) contact forces demonstrates that periodic solutions can be represented with respect to the approach distance and excitation frequency.

기호설명

A	Hamaker constant
R	tip radius
z	instantaneous tip-sample gap
E*	effective elastic modulus
E _{tip}	Young's modulus of tip
E _{sample}	Young's modulus of sample
ν _{tip}	Poisson's ratio of tip
ν _{sample}	Poisson's ratio of sample
a ₀	intermolecular distance
η*	equilibrium gap between the tip and sample
Z	approach distance
k	bending stiffness
F _i	total tip-sample interaction forces
ρ _c	cantilever material density
E _c	cantilever Young's modulus

접촉(contact)모드 AFM 이 쓰여 왔으나, 최근에는 공진하는 마이크로 캔틸레버 팁의 동적 특성을 이용한 비접촉(noncontact) 또는 탭핑(tapping) 모드가 더 일반적으로 쓰인다. 탭핑모드와 같은 동적 모드를 이용하면 접촉모드에서 발생하는 팁-시료 마멸이나 파괴 현상을 줄일 수 있을 뿐만 아니라 동특성으로부터만 구할 수 있는 위상 정보 등을 활용하여 보다 나은 나노스케일 이미지를 얻을 수 있는 장점이 있다. 이러한 연구와 관련하여 많은 연구자들이 AFM 마이크로캔틸레버의 동특성 분석을 시도하였으나[2-6] 팁의 비선형 동특성에 대한 이해나 정확한 분석이 아직 미흡한 상태라고 할 수 있다.

한편 본 저자들[7]에 의해서 DMT(Derjaguin-Muller-Toporov) 접촉 모델[8]을 이용한 탭핑모드에서의 비선형 특성을 해석한 바 있다. 그러나 이는 고전 접촉모델을 이용해서 일반적인 무기재료 간에는 어느 정도 적용이 가능하여 잘 맞는 결과를 얻을 수 있었지만, 실제 AFM 이 많이 적용되는 생체 재료 혹은 다양한 이방성재료들에 대해서는 또다른 접촉모델인 JKR (Johnson-Kendall-Roberts) 모델[9]의 적용 문제가 대두하게 되었다. 따라서 본 연구에서는 DMT 접촉 모델과는 다른 양상을 보이는 JKR 접촉모델을 도입하여 기존 DMT 모델에 의한 해석과의 비교를 통하여 새로운 비선형 나노 동역학 모델의 해석을 시도하고자 한다. 특히 JKR 모델에는 기존 모델에서는 포함되지 않은 표면에너지 개념과 팁-시료간 진입/후퇴시 내재적으로 발생하는 이력(hysteresis)현상에 의해 팁의 동적 거동도 좀 더 복잡하리라 예측할 수 있다.

1. 서론

1986년 Binnig 등[1]에 의해 개발된 원자현미경(AFM: Atomic Force Microscopy)은 나노스케일의 대상을 직접 관찰할 수 있는 장비로 마이크로캔틸레버 팁을 시료 표면에 접근시켜 나타나는 캔틸레버의 정적, 동적 변형과 주파수 특성을 이용하여 나노 표면 형상을 측정하게 된다. 전통적으로는 마이크로캔틸레버의 정적 변형을 이용한

* 서울대학교 대학원 기계항공공학부
E-mail : hughie13@vib.snu.ac.kr
Tel : (02) 880-7152, Fax : (02) 876-9434

** 서울시립대학교 기계정보공학부

*** 서울대학교 기계항공공학부

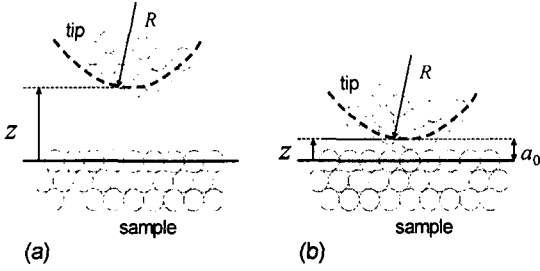


Fig. 1 Two different tip-sample interaction regimes: (a) when the tip is located far from the sample ; and (b) when the tip-sample contact is initiated

2. 모델링

2.1 팁과 시료간의 상호력

AFM 마이크로컨택트레버 팁과 시료 사이의 상호작용을 분석하기 위해서는 구(팁)와 평평한 표면(시료)사이에 반데르발스힘과 접촉력을 가정하였다. Fig.1 에서 보는 바와 같이 팁이 시료와 떨어져 있을 때는 반데르발스 힘(Fig.1(a))만을 적용하고 시료와 접촉을 하면 비로소 접촉력(Fig.1(b))이 적용하는 구간별 비선형 모델을 설정하였다.

DMT 접촉모델을 적용했을 경우 팁-시료 간의 상호력은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$F_{vdw}(z) = -\frac{AR}{6z^2} \quad \text{for } z > a_0 \quad (1)$$

$$F_{DMT}(z) = -\frac{AR}{6z^2} + \frac{4}{3}E^*\sqrt{R}(a_0 - z)^{3/2} \quad \text{for } z \leq a_0 \quad (2)$$

$$\frac{1}{E^*} = \frac{1 - \nu_{tip}^2}{E_{tip}} + \frac{1 - \nu_{sample}^2}{E_{sample}}$$

위 방정식 (1), (2)를 이용하여 팁-시료 간격에 대한 상호력을 나타내면 Fig.2 와 같다. 팁-시료 상호력에서 둘 사이의 인력(attractive force)은 주로 반데르발스힘에 기인하는 반면에 척력(repulsive force)은 DMT 접촉력으로 모델링할 수 있다.

JKR 접촉모델에서 팁-시료간의간격(z)과 접촉력(F_{JKR})간의 관계를 무차원화하면 식(3)과 같이 나타낼 수 있다.

$$(a_0 - z) = \left(3\sqrt{1 + F_{JKR}} \left(\frac{1 + \sqrt{1 + F_{JKR}}}{9} \right)^{1/3} \right)^{1/3} \quad (3)$$

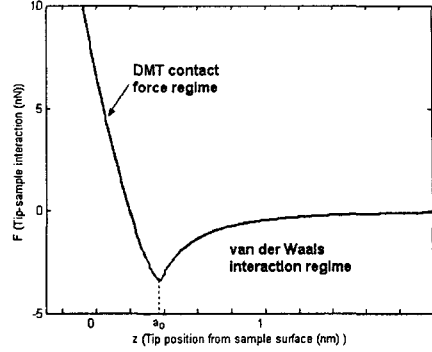


Fig. 2 Interaction model described by van der Waals and DMT contact forces.

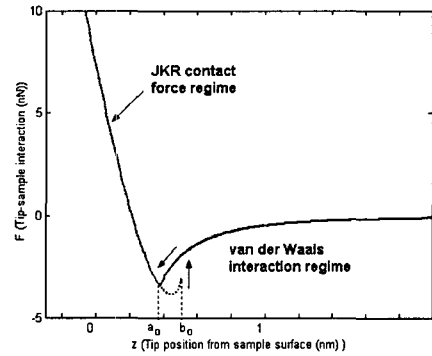


Fig. 3 Interaction model described by van der Waals and JKR contact forces.

역함수 관계를 이용하면 접촉력을 팁-시료간의 간격에 대한 함수(식(4))로 나타낼 수 있다.

$$F_{JKR} = g(z) \quad (4)$$

JKR 접촉모델을 적용하면 팁이 시료에 접근할 때와 멀어질 때 접촉력이 작용하는 구간을 다르게 하여 다음과 같이 모델링 할 수 있다.

$$F_{vdw}(z) = \frac{AR}{6z^2} \quad \text{for } z > a_0 \text{ approach} \quad (5)$$

$$\text{for } z > b_0 \text{ withdrawal}$$

$$F_{JKR}(z) = g(z) \quad \text{for } z > a_0 \text{ approach} \quad (6)$$

$$\text{for } z > b_0 \text{ withdrawal}$$

위 방정식 (5), (6)를 이용하여 팁-시료 간격에 대한 상호력을 나타내면 Fig.3 와 같다.

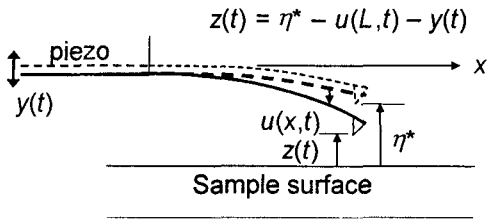


Fig. 4 Schematic diagram of the cantilever: Dynamic configuration as cantilever vibrates about its electrostatic equilibrium.

2.2 동적 방정식

압전가진기로부터 마이크로캔틸레버의 기저 가진 운동(Fig.4)에 대한 팁의 처짐 $u(t)$ 의 운동방정식은 연속 캔틸레버 모델의 단일 모드의 이산화를 통하여 다음과 같이 유도할 수 있다.

$$\rho_c A_c \ddot{u}(x, t) + E_c I_c (u''''(x, t) + w''(x)) = F_1 (Z - w(L, t)) \delta(x - L) + \rho_c A_c \Omega^2 Y \sin \Omega t \quad (7)$$

팁 끝단에 등가 상호력이 작용하고 비선형 강성 요소를 갖는 마이크로캔틸레버의 선형 모드와 고유 주파수를 계산하였다. 이 때 첫 번째 굽힘 모드만을 적용하여 이산화하는 갤러킨(Galerkin)방법[10]을 사용하였다. 따라서 팁의 변위 $u(t)$ 는 다음과 같이 변수분리 할 수 있다.

$$u(x, t) = \Phi_1(x) q_1(t) \quad (8)$$

여기서 $\Phi_1(x)$ 는 캔틸레버의 첫 번째 근사 고유 함수이고 $q_1(t)$ 는 시간에 종속인 일반화된 좌표계이다. 식(8)를 식(7)에 대입하고 갤러킨 이산화 과정을 거치면 AFM 마이크로캔틸레버의 운동방정식은 다음과 같다.

$$\frac{d^2 \bar{\eta}}{d\tau^2} + D \frac{d\bar{\eta}}{d\tau} + \bar{\eta} = -C_1 + \bar{F}_i(\bar{z}) + B \bar{\Omega}^2 \bar{y}^3 \sin \bar{\Omega} \tau \quad (9)$$

$$\bar{\eta} = \frac{u(L, \tau)}{\eta^*}, \quad \bar{y} = \frac{Y}{\eta^*}, \quad \bar{\Omega} = \frac{\Omega}{\omega_1}, \quad \tau = \omega_1 t$$

$$D = \frac{1}{Q}, \quad B = \frac{\Phi_1(L) \int_0^L \Phi_1 dx}{\int_0^L \Phi_1^2 dx},$$

$$C_1 = -\frac{AR\Phi_1^2(L)}{6(\eta^*)^3 \omega_1^2 \rho_c A_c \int_0^L \Phi_1^2 dx}$$

Table 1 Constants and properties of the Si microcantilever and HOPG sample used in numerical computation.

Description	Value
Tip radius	$R = 10\text{nm}$
Cantilever cross-section area	$A_c = 8.09 \times 10^{-11} \text{m}^2$
Cantilever area moment	$I_c = 3.57 \times 10^{-23} \text{m}^4$
Cantilever material density	$\rho_c = 2300 \text{kg/m}^3$
Cantilever Young's modulus	$E_c = 130 \text{GPa}$
Effective elastic modulus	$E^* = 10.2 \text{GPa}$
Static bending stiffness	$k = 0.87 \text{N/m}$
1st natural frequency	$f_1 = 44.0 \text{kHz}$
Q factor (in air)	$Q = 33.3$
Hamaker constant (Si-HOPG)	$A = 2.96 \times 10^{-19} \text{J}$
Intermolecular distance	$a_0 = 3.8 \text{\AA}$

DMT contact

$$\bar{F}_i(\bar{z}) = \begin{cases} C_1 / \bar{z}^2, & \text{for } \bar{z} > \bar{a}_0 \\ C_1 / (\bar{a}_0^2) + C_2 (\bar{a}_0 - \bar{z})^{3/2}, & \text{for } \bar{z} \leq \bar{a}_0, \end{cases}$$

$$C_2 = \frac{4E^* \sqrt{R\eta^*} \Phi_1^2(L)}{3\omega_1^2 \rho_c A_c \int_0^L \Phi_1^2 dx}$$

JKR contact

$$\bar{F}_i(\bar{z}) = \begin{cases} C_1 / \bar{z}^2, & \text{for } \bar{z} > \bar{a}_0 \text{ approach} \\ & \text{for } \bar{z} > \bar{b}_0 \text{ withdrawal} \\ g(\bar{z}), & \text{for } \bar{z} \leq \bar{a}_0 \text{ approach} \\ & \text{for } \bar{z} \leq \bar{b}_0 \text{ withdrawal}, \end{cases}$$

$$\bar{z} = 1 - \bar{\eta}(\tau) - \bar{y} \sin \bar{\Omega} \tau, \quad \text{and} \quad \bar{a}_0 = \frac{a_0}{\eta^*}.$$

2.3 팁과 시료의 특성

정적 평형뿐만 아니라 비선형 동적 계산에 필요한 모든 파라미터를 Table.1에 나타내었다. Table.1에 나타난 일부 시스템 파라미터는 마이크로캔틸레버의 진동실험으로부터 얻어진 것이고, 그 밖의 값들은 다른 참고문헌으로부터 얻었다.

3. 비선형 응답

Table 1의 시스템 파라미터를 이용하여 MATLAB에서 계산하였다. 각각 응답의 진폭과 위상은 Fig.5에 나타난 바와 같고, 본 프로그램의 계산에는 가진 진폭 값($\bar{y} = 0.0209$)을 사용하였다. 가진 주파수를 증가시키는 경우만 계산하여 두 모델의 진폭과 위상 응답을 비교하였다.

4. 결론

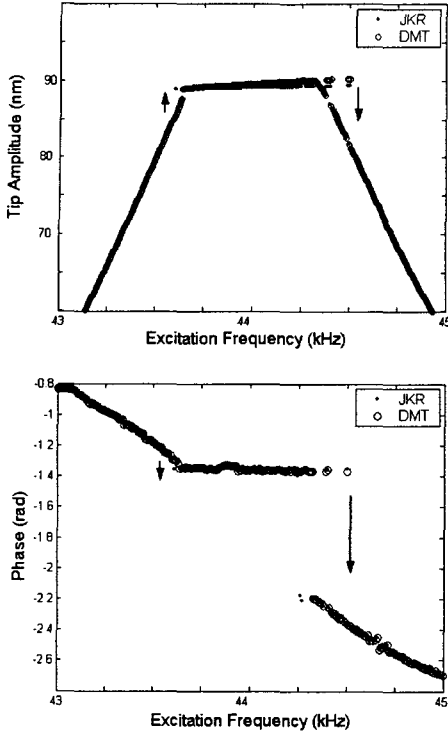


Fig. 5 Tapping mode response prediction: Circle/dotted points indicate DMT/JKR contact model, respectively. Tip amplitude indicates the peak-to-peak tip oscillation amplitude of the microcantilever. Phase between the first harmonic of response and the base excitation is computed.

해석 결과 진폭과 위상에서는 DMT 모델과 JKR 모델을 적용한 두 경우 모두 유사한 것을 알 수 있다. 두 모델의 진폭의 응답과 점프의 위치에 대해서 검토해보면, 진폭 응답은 가진 주파수가 증가함에 따라 DMT 접촉모델과 JKR 접촉모델 모두 증가하다가 어느 순간에 진폭이 점프하는 것을 볼 수 있다. JKR 모델이 DMT 모델보다 더 작은 주파수에서 처음 점프가 일어나고, 두 번째 점프는 거의 같은 주파수에서 일어남을 볼 수 있다. 첫 번째 점프가 일어난 후 거의 일정하게 진폭이 유지되는데 JKR 모델이 DMT 모델보다 좀 더 작은 기울기를 갖고 있다. 위상의 경우 역시 진폭이 점프가 일어났던 주파수에서 점프 현상이 일어나고 JKR 모델이 DMT 모델보다 더 작은 주파수에서 첫 번째 점프 현상이 일어나는 것을 관찰할 수 있다.

DMT 모델과 JKR 모델을 적용하여 AFM 팁-시료 간의 탭핑모드에 대한 나노 비선형 접촉 진동 문제를 해석한 결과 다음과 같이 결론지을 수 있다.

(1) 연속체에 대한 DMT/JKR 접촉 모델을 활용하여 AFM 팁의 탭핑 과정에 대한 비선형 동역학 해석이 가능하다. 즉, 원거리에서는 반데르발스 힘으로 근거리에서는 접촉력으로 혼합모델을 구성하여 매끄럽지않은(nonsmooth) 상호작용에 대하여 비선형 수치해석을 진행하였다.

(2) JKR 모델의 경우 메커니즘 자체가 가지고 있는 이력특성 등에 의해 비선형 진폭응답과 위상응답에서 DMT 모델을 적용한 경우와 다른 경향을 보이며, 점탄성 재질 등에 대하여는 유사한 경향을 보인다고 유추할 수 있다.

향후 이러한 해석을 바탕으로 다양한 물성치와 표면에너지 변화등을 고려한 해석으로 확장할 수 있으며, SPM 기반 기억장치계의 해석이나 나노스케일 감쇠 특성의 분석 등에 적용할 수 있다.

참고 문헌

- (1) G. Binnig, C. Gerber, C. Quate, 1986, "Atomic Force Microscope," *Physical Review Letters*, Vol.56, pp. 930-933.
- (2) X. Chen, M. C. Davies, C. J. Roberts, S. J. B. Tendler, P. M. Williams, N. A. Burnham, 2000, "Optimizing phase imaging via dynamic force curves," *Surf. Sci.*, Vol. 460, pp.292-300.
- (3) R. Garcia, A. San Paulo, 2000, "Dynamics of a vibrating tip near of in intermittent contact with a surface," *Physical Review B*, Vol.61, R13381.
- (4) R. Garcia, A. San Paulo, 2000, "Amplitude curves and operating regimes in dynamic atomic force microscopy," *Ultramicroscopy*, Vol.82, pp. 79-83.
- (5) B. Anczykowski, D. Kruger, K. L. Babcock, H. Fuchs, 1996, "Basic properties of dynamic force spectroscopy with the scanning force microscope in experiment and simulation," *Ultramicroscopy*, Vol.66, pp. 251-259.
- (6) L. Nony, R. Boisgard, J. P. Aime, 2001, "Stability criterions of an oscillating tip-cantilever system in dynamic force microscopy," *Eur. Phys. J. B*, Vol. 24, pp. 221-229.
- (7) 이수일 등, 2003, "AFM 마이크로캔틸레버의 나노 비선형 동역학", 추계기계학회 논문집, 대한기계학회, pp. 1560-1565.
- (8) B. V. Derjaguin, V. M. Muller, Y. P. Toporov, 1975, "Effect of Contact Deformation on the Adhesion of Particles," *Journal of Colloid and Interface Science*, Vol.53, pp.314-326
- (9) K. L. Johnson, K. Kendall, A. D. Roberts, 1971, "Surface Energy and the Contact of Elastic Solids" *Proc. Roy. Soc. Lond. A*, Vol.324, No.1588, pp. 301-313.
- (10) L. Meirovitch, 1997, "Principles and Techniques of Vibration," Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey