

적합직교분해법을 이용한 AFM 마이크로캔틸레버의 진동해석

Vibration Analysis of the Tapping AFM Microcantilevers Using Proper Orthogonal Decomposition

홍 상 혁*·이 수 일†

Sang Hyuk Hong and Soo Il Lee

(2010년 3월 10일 접수 ; 2010년 3월 30일 심사완료)

Key Words : Atomic Force Microscopy(원자현미경), Proper Orthogonal Decomposition(적합직교분해법), Microcantilever(마이크로캔틸레버)

ABSTRACT

The proper orthogonal decomposition(POD) is used to the vibration analysis of microcantilever in tapping mode atomic force microscopy(AFM). The proper orthogonal modes (POM) are extracted from vibrating signals of microcantilever when it resonates and taps the sample. We present recent ideas based on POD and detailed experiments that yield new perspectives into the microscale structures such as the tapping cantilever. The linearized modeling technique based on POD is very useful to show the principal characteristics of the complex dynamic responses of the AFM microcantilever.

1. 서 론

원자현미경(AFM : atomic force microscope)은 마이크로캔틸레버의 끝에 달려있는 팁을 시료 표면에 접근시켜 팁과 시료간의 원자간 작용력에 의하여 나노스케일의 표면 형상이나 여러 가지 재질 특성을 측정하는 장치이다. 특히 AFM 프로브를 공진시켜 팁과 표면간의 동적 특성 변화를 이용한 비접촉과 탭핑모드는 접촉모드와 같은 정적모드에 비해 위상(phase) 정보 등을 포함하기 때문에 여러 가지 실험의 측정모드로 이용 되고 있다.

적합직교모드(POM : proper orthogonal mode)는 큰 자유도계나 여러 가지 복잡한 물리 현상이 연성된 계의 해석에서 주된 요소(principal component)를 효과적으로 추출할 수 있게 해 주는 방법⁽¹⁾으로

최근 일반적인 구조시스템뿐 아니라 AFM 등 미소 시스템 등과 관련한 응용사례가 보고되고 있다. Kerschen 등⁽²⁾은 선형과 비선형 모델의 구조시스템을 모델링하여 해석하였으며, Azeez 등⁽³⁾은 캔틸레버의 끝단에 작용하는 충격에 의해 발생하는 복잡한 진동 현상을 몇 개의 적합직교분해(POD : proper orthogonal decomposition) 모드로 해석한 결과를 보여주었다. 또, Li 등⁽⁴⁾은 AFM 프로브에 부착된 복잡한 고분자의 진동 특성을 POM으로부터 동정(identification)하는 연구를 진행하였다. 그러나 AFM 마이크로캔틸레버와 같은 미소구조물에서 비선형 작용력에 의한 복잡한 진동현상의 주요 특성에 대한 노력은 부족하다고 할 수 있다. 특히 POD방법을 통하여 복잡한 비선형 응답으로부터 주요성분을 추출하고 선형화 하는 모델링 기법에 대한 연구는 복잡한 모델을 단순화하여 주요 특성 분석과 해석을 진행하기 위한 기본 단계에 해당한다고 할 수 있다. 한편 국내에서도 AFM 마이크로캔틸레버 관련 연구⁽⁵⁾는 이전부터 진행되어 왔으나 일반적으로

† 교신저자 ; 정희원, 서울시립대학교 기계정보공학과
E-mail : leesooil@uos.ac.kr

Tel : (02)2210-5667, Fax : (02)2210-5575

* 서울대학교 대학원 기계항공공학부

기본적인 동적 거동 해석에 대한 것에 한정되어 있고, 실제 실험적인 분석을 통한 연구는 많이 발표되지 않고 있다.

이 연구에서는 실제 이용되는 AFM 마이크로캔틸레버의 비선형 응답을 측정하여 POM을 추출하고 그에 따른 적합직교값(POV: proper orthogonal value)을 비교하여 추출된 모드의 특성 비교를 시도하였다. 즉 강성의 차이가 매우 큰 두 개의 AFM 마이크로캔틸레버를 AFM 시스템에 장착한 다음 공진시의 신호와 시료를 탭핑시의 신호를 측정하여 주파수 영역 해석을 수행하고 POM을 추출하였다. 또한 탭핑하는 시료의 성질에 따른 비선형 응답특성 차이를 구하기 위해 탄성계수 차이가 매우 큰 두 시료에 대하여 실험을 수행하였다. 추가적으로 마이크로캔틸레버의 가진주파수와 주위 환경에 따른 POM 및 POV값도 추출하였다. 동적모드 AFM 마이크로캔틸레버의 비선형 거동을 간략화 분석하기 위한 방법으로 POD에 대한 가능성을 제시하였다.

2. 적합직교분해법(POD)

적합직교분해(POD: proper orthogonal decomposition)는 Karhunen-Loeve 변환으로도 알려져 있으며 매우 큰 자유도거나 여러 가지 복잡한 물리현상이 연성된 계의 해석에 활용되고 있다⁽¹⁻⁴⁾.

진동 해석의 경우 Fig. 1과 같이 일반적인 계의 주어진 영역 Ω 에서 진동 신호를 $v(x,t)$ 라고 하고 일정한 시간 t_i 에서 샘플링 된 신호(일종의 snapshot)를 $v_i(x)$ 라 할 때 POD에서는 이들 snapshot들로부터 원래 구조 진동 모드에 가장 유사한 최적의 $\varphi(x)$ 를 구하게 된다. 최소화 문제로서 이를 식으로 나타내면 다음과 같다.

$$\text{Minimize } \lambda = \sum_{i=1}^n (\varphi(x) - v_i(x))^2 \quad \forall x \in \Omega \quad (1)$$

한편, 식(1)을 최대값 문제로 바꾸면 다음과 같다.

$$\text{Maximize } \left\{ \lambda = \frac{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\int_{\Omega} \varphi(x) v_n(x) d\Omega \right)^2}{\int_{\Omega} \varphi(x) v_n(x) d\Omega} \right\} \quad \forall x \in \Omega \quad (2)$$

결국, 최대값 문제는 다음과 같은 적분 고유치 문제로 귀결된다.

$$\int_{\Omega} K(x, x') \phi(x') dx' = \lambda \phi(x) \quad (3)$$

여기서 K 는 다음 식으로 정의되는 2점 관계함수(two-point correlation function)이다.

$$K(x, x') = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N v_i(x) v_i(x'). \quad (4)$$

이상의 과정을 실제 측정 과정에 적용하기 위해서는 m 개의 각 측정점 x_i 에 대한 다음의 관계행렬(correlation matrix)을 구하고,

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} K(x_1, x_1) & \cdots & K(x_1, x_m) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ K(x_m, x_1) & \cdots & K(x_m, x_m) \end{bmatrix} \quad (5)$$

이러한 관계행렬은 다음과 같이 n 번 샘플링한 측정값 행렬로부터 얻을 수 있다.

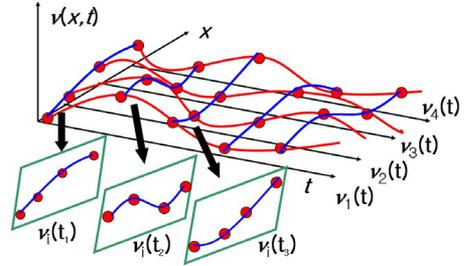


Fig. 1 Snapshot of ensemble signals

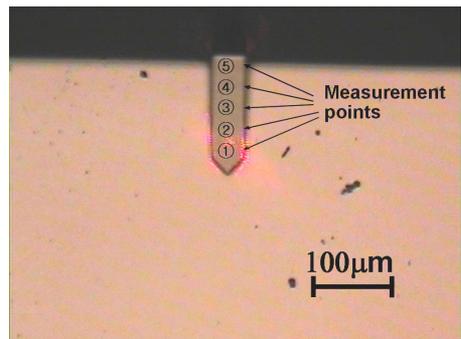


Fig. 2 Atomic force microscopy microcantilever in measurement(NanosensorsTMPPP-NCHR)

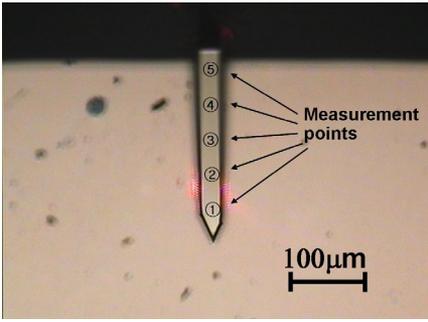


Fig. 3 Atomic force microscopy microcantilever in measurement(OLYMPUSTMOMCL-AC240TC)

$$\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} q_1(t_1) & \cdots & q_1(t_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ q_n(t_1) & \cdots & q_n(t_n) \end{bmatrix} = [\mathbf{q}(t_1) \cdots \mathbf{q}(t_m)]. \quad (6)$$

이때, $\mathbf{G} = \frac{1}{n} \mathbf{Q} \mathbf{Q}^T$ 와 같고, \mathbf{G} 의 고유벡터가 POM, 고유치는 POV가 된다.

3. AFM 실험

3.1 AFM 실험 설정

비선형성을 가지는 AFM 마이크로캔틸레버 주요 모드를 추출하기 위해서 이 실험에서는 Park Systems사의 XE-100 AFM System을 이용했으며, XE-100 System controller에서 추출한 실시간 진동 신호 캡처를 위하여 NI사의 2-channel 고속 데이터 획득장치(NI-5122)를 PC에 장착하여 사용하였다. 복잡한 진동현상 측정을 위하여 우선 Figs. 2, 3과 같이 AFM 마이크로캔틸레버에 대하여 등간격으로 5개 측정점을 설정하였다. 실험에 이용한 프로브 팁은 Nanosensors사의 PPP-NCHR과 Olympus사의 OMCL-AC240TS로 각각의 제원은 Table 1과 같다. 마이크로캔틸레버 기저부에서 고유진동수로 가진할 때, 공진상태의 AFM 캔틸레버의 레이저 변위 측정 기구를 이용하여 각 점 별로 시간 응답을 측정하였다. 상대적으로 강성이 큰 NCHR 팁의 경우는 1차 고유주파수에 대해서, 강성이 작은 OCML 팁의 경우는 1차 및 2차 고유진동수에 대해 각각 시간 신호를 얻을 수 있었다. 또한 AFM 시스템에 장착된 마이크로캔틸레버를 고유진동수로 가진하면서 표면이 상대적으로 단단한 시료인 HOPG(highly oriented pyrolytic graphite)와 상대적으로 연한 폴리머의 종류의 PDMS(poly-dimethylsiloxane) 시료를 탭핑(tapping)하는 경우에 캔틸레버 상 각 5점에 대해 시간 신호를 측정하였다. 두 표면 시료에 대한 상수와 물성치는 Table 2에 나타내었다.

기본적으로 캔틸레버의 1차 및 2차 고유진동수가진을 통하여 공진 모드의 위치별 신호를 측정용 PC에 장착된 2채널 고속 데이터 수집장치(NI-5122)를 통해 저장한다. 각 채널에서 수집되는 데이터는 Fig. 4와 같이 캔틸레버 기저부 가진신호와 캔틸레버 측정점에서 들어오는 레이저 변위 신호에 해당

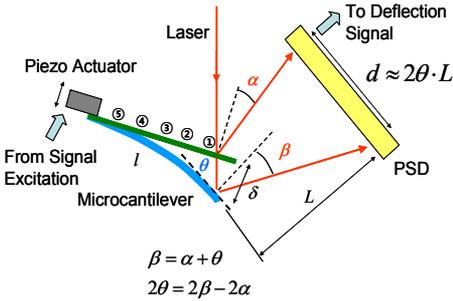


Fig. 4 Cantilever deflection and PSD signals

Table 1 Constants and properties of the micro-cantilevers

Description	NCHR	OMCL
Tip radius (nm) R	10	10
Tip height (um) H	15	14
Cantilever thickness (nm) T	4	2.8
Cantilever length (um) L	125	240
Cantilever width (um) W	30	30
Spring constant (N/m) k	42	1.8
Resonant frequency (kHz) f_0	330	70
Intermolecular distance (Å) a_0	3.8	3.8
Equilibrium separation (nm) z_0	90	90

Table 2 Constants and properties of the samples

Description	HOPG	PDMS
Young's modulus (GPa) E_s	200	0.75
Effective elastic modulus(GPa) E^*	10.2	1.0×10^{-3}
Hamaker constant (J) A	2.96×10^{-19}	2.37×10^{-20}

Where, $\frac{1}{E^*} = \frac{1 - \nu_{tip}^2}{E_{tip}} + \frac{1 - \nu_s^2}{E_s}$

하는 PSD(position sensitive detector) 신호이다^(6,7). 일반적으로 AFM에서 팁의 변위를 측정하는 데는 1개의 레이저 빔을 사용하는 것이 일반적이어서 동시에 다중 빔으로 5개 측정점을 커버하도록 구현하는 것이 쉽지 않다. 따라서 이 연구에서는 개별 진동 특성이 정상상태라고 가정하고 캔틸레버의 각 측정점에서 순차적으로 측정된 신호를 가진신호를 기준으로 위상(phase)을 일치시킨 후 처리를 진행하였다⁽⁸⁾.

Figs. 5, 6은 두 종류의 AFM 캔틸레버가 HOPG 및 PDMS표면을 톱핑 할 때, 캔틸레버 변위의 주파수 특성을 나타낸다. Fig. 7은 공기 중에서는와 물 속에서의 OMCL팁의 1차 고유진동수로 가진한 경우의 주파수특성을 나타낸다. 기본적으로 해당 공진모드의 피크와 고차 조화성분이 잘 나타나는 것을 알 수 있다. 단지 샘플의 특성에 따라 피크의 크기에서 미소한 차이가 발생함을 알 수 있다.

3.2 시료특성 및 접촉모델

Table 2와 같이 실험에 사용된 시료의 특성을 비교해 보면 HOPG가 PDMS에 비해 자체의 영률(Young's modulus)이 약 200배 이상 크고, 프로브 톱 효과를 포함한 유효탄성계수(effective elastic modulus)는 약 10,000배 이상 큰 것을 알 수 있다.

이러한 재질의 톱-시료 접촉 시 특성을 알아보기 위해 Maugis 접촉모델⁽⁹⁾로부터 아래 식의 파라미터 λ 를 구해 볼 수 있다.

$$\lambda = \frac{2.06}{z_0} \left(\frac{RW^2}{\pi K^2} \right)^{1/3} \quad (7)$$

여기서 $\frac{1}{K} = \frac{3}{4} \left(\frac{1-\nu_{tip}^2}{E_{tip}} + \frac{1-\nu_{sample}^2}{E_{sample}} \right) = \frac{3}{4E^*}$, z_0 는 톱-시료 원자간 평형 상태 거리, R 은 팁의 반경, W 는 접착 일(work of adhesion)을 나타낸다. 접착일(W)은 접착력(adhesive force) 또는 분리력(pull-off force)과 반데르발스(van der Waals) 힘을 고려하여 구할 수 있다. 톱-시료 간 접촉이 일어날 때 반데르발스 힘의 영향이 가장 크다고 가정하면 아래 식을 적용할 수 있다.

$$W \propto F_{ad} = F_{vdW} = \frac{AR}{6a_0^2} \quad (8)$$

여기서 F_{ad} 는 접착력, F_{vdW} 는 반데르발스 힘, A 는 Hamaker 상수, a_0 는 분자간 거리를 나타낸다.

식 (7)과 (8)을 이용하여 구한 반데르발스 힘과

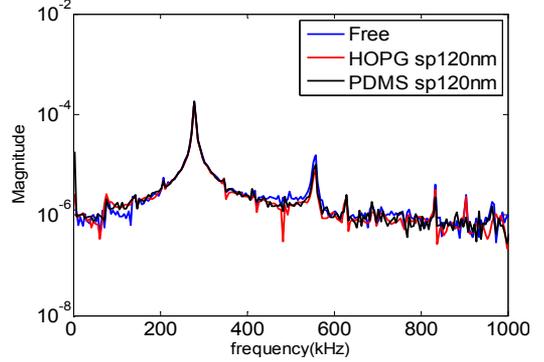
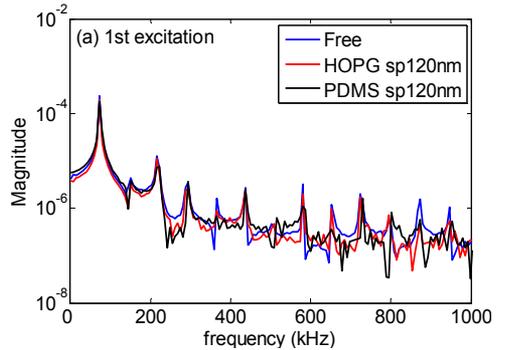
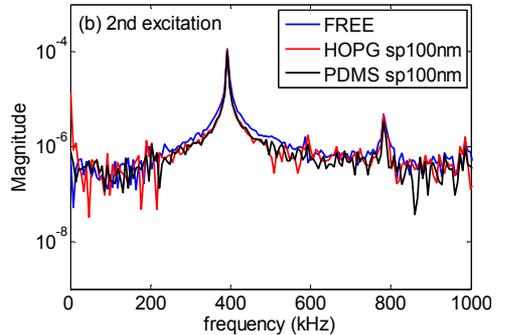


Fig. 5 Frequency spectrum of the NCHR tip deflection signals with and without tapping at the first resonance



(a) 1st excitation



(a) 2nd excitation

Fig. 6 Frequency spectrum of the OMCL tip deflection signals with and without tapping: (a) at the first resonance; (b) at the second resonance

Table 3 Work of adhesion and parameter λ

Sample	van der Waals force (nN)	λ
HOPG	3.4164	0.0011
PDMS	0.2735	0.0971

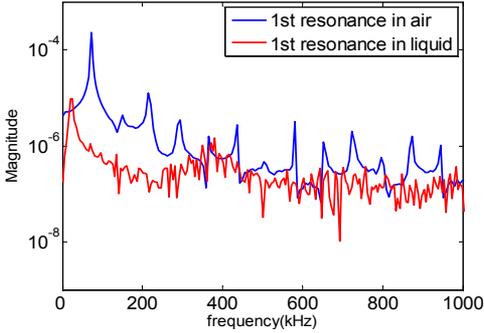


Fig. 7 Frequency spectrum of the OMCL tip deflection signals in air and liquid

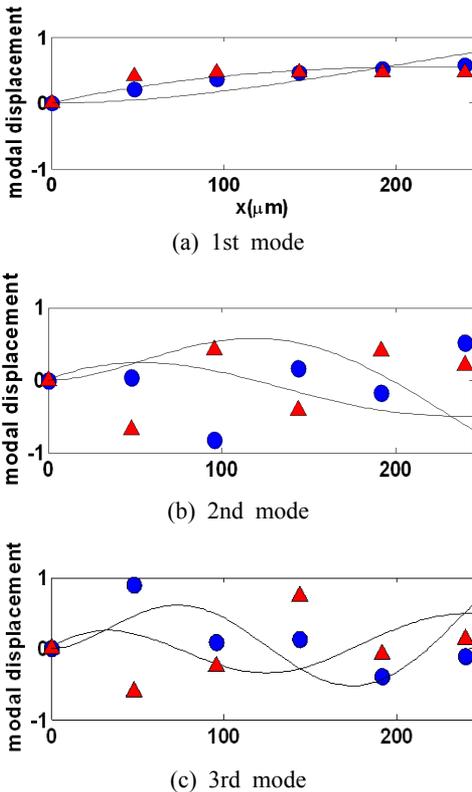


Fig. 8 The POMs at the 1st resonance of NCHR (red \blacktriangle) and OMCL (blue \bullet) microcantilevers. (Stretched to OMCL's length scale for the purpose of comparison)

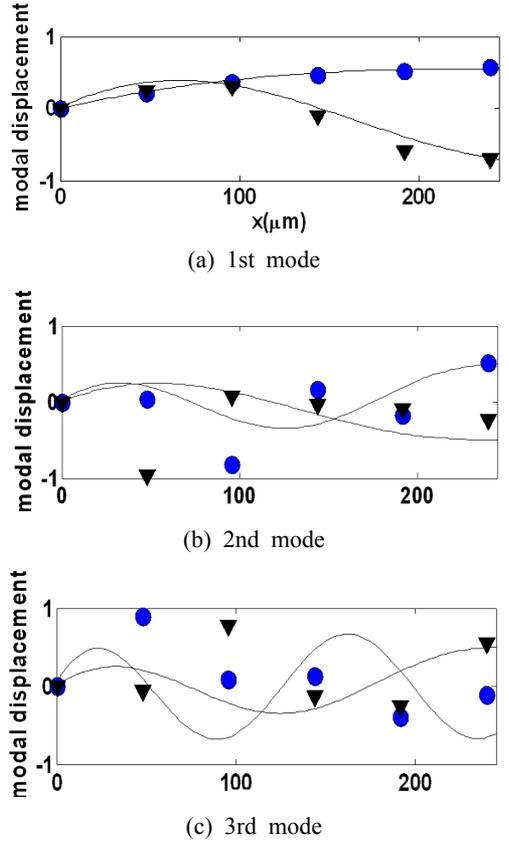


Fig. 9 The POMs at the 1st(blue \bullet) and 2nd(black \blacktriangledown), resonances of OMCL microcantilever

파라미터 λ 값을 Table 3에 나타내었다. PDMS시료의 경우 Hamaker 상수가 HOPG에 비해 1/10정도의 값을 가지므로 반데르발스 힘은 1/10 정도 작은 값을 가지게 된다. 접촉 일과 유효강성을 동시에 고려한 Maugis 모델의 λ 값을 구해보면 PDMS는 HOPG의 약 90배이다. 이것은 PDMS가 작은 Hamaker 상수값을 갖고 있으나 유효강성값이 약 10,000배 정도 큰 값을 갖기 때문으로 판단된다.

4. 적합적교분해법(POD) 결과

4.1 적합적교모드(POM) 추출

NCHR과 OMCL마이크로캔틸레버의 첫 번째 고유진동수로 가진하여 공기 중에서 공진시켰을 때 측정된 AFM 마이크로캔틸레버 상 5점에 대한 시간 신호를 이용하여 POM을 추출하였다(Fig.8). Fig. 8(a)를 보면 POM 1차 모드는 가진 모드와 아

주 유사한 경향을 나타낸다. 즉 AFM의 캔틸레버 모델의 변위를 측정하는 레이저 기구의 특성에 의하여 변위 모드형상(적색선)이 아니고, 기울기 각에 해당하는 각변위 혹은 기울기(slope) 모드 형상(청색선)이 얻어짐을 알 수 있다. 그리고 가진 모드보다 고차 모드에서는 추출된 POM이 선형모드로부터 상당히 동떨어진 복잡한 형상을 나타낼 뿐 아니라, 일정한 경향성이 없음을 알 수 있다(Fig. 8(b) and (c)).

길이가 길고 강성이 작은 OMCL마이크로캔틸레버를 1차와 2차 고유진동수로 가진하여 POM을 구해보면, 역시 가진 주파수의 해당 모드와 유사한 POM 1차 모드가 추출된다(Fig.9(a)). 즉, 1차 고유진동수로 가진한 경우는 1차 모드가, 2차 고유진동수로 가진한 경우는 2차 모드가 첫 번째 POM으로

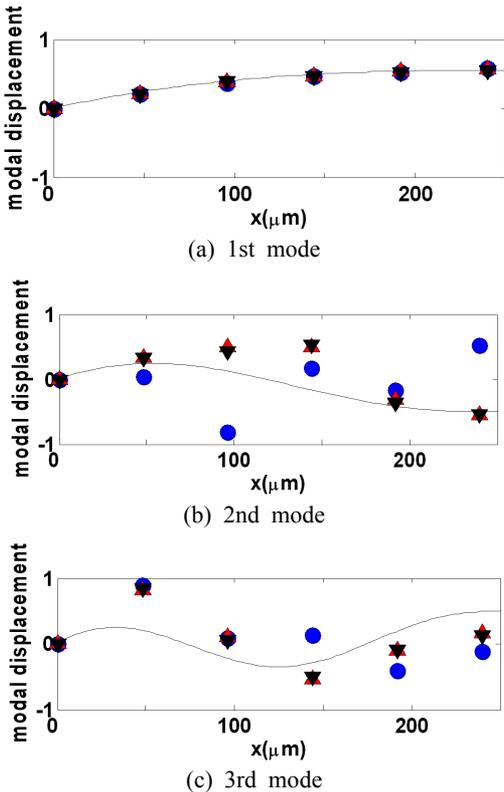


Fig. 10 The POMs at the 1st resonance (excitation at 70 kHz) of OMCL microcantilever with tapping on HOPG (red ▲) and PDMS (black ▼), and without tapping (blue ●)

먼저 추출됨을 알 수 있다. Fig.10(a)와 같이 탭핑이 일어나는 경우에도 첫 번째 POM은 가진주파수의 해당 각 변위 모드와 유사한 형태(청색선)가 추출되는 것을 확인할 수 있다. 가진 모드를 제외하고 고차모드에서는 일정한 경향을 나타내지는 않지만

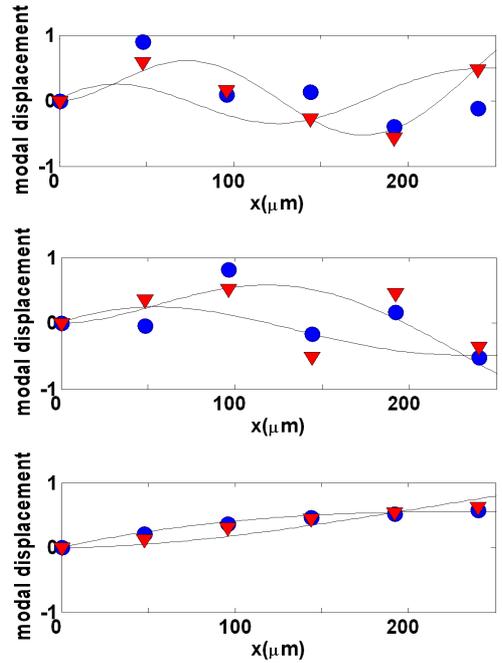


Fig. 11 The POMs at the 1st(blue ●) and 2nd(black ▼), resonances of OMCL microcantilever

Table 4 POVs with respect to the samples at the resonance

Excitations and tapping surfaces	POV (%)				
	1st	2nd	3rd	4th	
NCHR 1st resonance in air	FREE	97.25	2.63	0.06	0.03
	HOPG	93.90	5.92	0.09	0.05
	PDMS	91.81	8.02	0.07	0.06
OMCL 1st resonance in air	FREE	99.75	0.21	0.03	0.01
	HOPG	93.58	6.38	0.02	0.01
	PDMS	91.71	8.25	0.02	0.01
OMCL 2nd resonance in air	FREE	91.56	8.27	0.09	0.06
	HOPG	85.62	14.11	0.19	0.05
	PDMS	84.07	15.75	0.07	0.06
OMCL 1st resonance in liquid	FREE	91.10	2.78	2.44	1.96
	HOPG	72.08	9.16	7.11	6.64
	PDMS	65.78	11.09	9.48	7.31

탭핑 시에는 유사한 POM이 추출됨을 볼 수 있다. 한편 Fig. 11은 물속에서와 공기 중에서의 공진 모드에 대한 POM을 나타낸 것이다. 주위 환경과 무관하게 첫 번째 POM은 가진 주파수 해당 모드와 거의 일치하는 것을 확인할 수 있다.

4.2 적합직교값(POV) 추출

POV값을 통해 각 해당 POM에서의 상대적인 모드 에너지 분포를 파악할 수 있다. Table 4는 POD를 통해 추출한 POV값을 퍼센트(%)로 나타내었다. AFM 마이크로캔틸레버 특성에 따른 POV값을 살펴보면, 두 개의 마이크로캔틸레버 모두 1차 POM이 지배적이지만 작은 강성을 갖는 OMCL이 NCHR에 비해 고차모드에서의 POV값이 작음을 볼 수 있다. OMCL 캔틸레버의 1차 및 2차 고유진동수로 가진한 경우의 POV를 비교하면, 2차 가진의 경우가 고차 모드에서의 에너지 분포가 더 크게 나타난다.

또한 시료의 특성에 따른 POV값을 비교해 보면 (Table 4), 시료의 강성과 접촉 일을 포함하는 파라미터 λ 값이 커질수록, 고차 POM에서 모드 에너지 분포가 증가함을 확인할 수 있다. 즉 λ 값이 큰 PDMS가 HOPG에 비해 고차모드에서 에너지가 커진다. 물속에서의 마이크로캔틸레버의 POV를 살펴보면, 공기 중에서의 POV보다 고차모드에서의 에너지 분포가 커졌다. 특히 탭핑이 일어나는 경우 고차 모드에서 에너지 분포가 10% 정도로 커져서 해석 시에 고차 모드의 영향을 고려해야 함을 알 수 있다.

5. 결 론

이 연구에서는 POM추출과 POV값을 통하여 탭핑모드 AFM 마이크로캔틸레버와 같은 미소구조물의 복잡한 진동신호로부터 유한 개의 유효한 선형 직교모드로 추출하였고, 그 진동 특성의 차이를 정량적으로 나타내었다. 그리고 AFM에서 고차 모드 효과는 공기 중 혹은 물속에서 작동하는 경우라도 1차 및 2차 모드 근사를 통한 2자유도계 모델만으로도 충분히 해석 가능함을 예상할 수 있다. 특히 POV 계산을 통하여 탭핑 모드에서는 해당 주파수의 비접촉일 때 보다 고차 모드의 모드 에너지 분

포가 증가함을 확인할 수 있었다. 또한 같은 탭핑 조건에서도 시료의 특성에 따라서도 POV값이 변화함을 알 수 있었다.

이러한 실험적 적합직교모드 추출을 통하여 복잡한 동적 응답을 나타내는 미소 구조물이라도 효과적으로 모델링 할 수 있는 가능성을 확인하였으며 향후 개별 진동 모드의 정량적 비교와 함께 축소차수모델(reduced order model)의 해석을 가능하게 할 것으로 예상된다.

후 기

이 논문은 2006년도 서울시립대학교 학술연구조성비에 의하여 연구되었음.

참 고 문 헌

- (1) Kerschen, G., Golinval, J. C., Vakakis, A. F. and Bergman, L. A., 2005, "The Method of Proper Orthogonal Decomposition for Dynamical Characterization and Order Reduction of Mechanical Systems: an Overview," *Nonlinear Dynamics*, Vol. 41, pp. 147~169.
- (2) Kerschen, G. and Golinval, J. C., 2002, "Physical Interpretation of the Proper Orthogonal Modes Using the Singular Value Decomposition," *Journal of Sound and Vibration*, Vol. 249, pp. 849~865.
- (3) Holmes, P., Lumley, J. L. and Berkooz, G., 1996, "Turbulence, Coherent Structures, Dynamical Systems and Symmetry," Cambridge University Press.
- (4) Azeez, M. F. A. and Vakakis, A. F., 2001, "Proper Orthogonal Decomposition(POD) of a Class of Vibroimpact Oscillations," *Journal of Sound and Vibration*, Vol. 240, pp. 859~889.
- (5) Park, S. K., Kim, Y. H. and Ha, S. K., 2002, "Analysis of Dynamic Behavior of Piezoelectric Atomic Force Microscope Cantilever," *Transactions of the Korean Society for Noise and Vibration Engineering*, Vol. 12, No. 2, pp. 187~194.
- (6) Sone, H., Fujinuma, Y., Hieida, T. and Hosaka, S., 2003, "Pico-gram Mass Deviation

Detected by Resonance Frequency Shift of AFM Cantilever,” SICE Annual Conference, pp. 2121~2124.

(7) Beaulieu, L. Y., Godin, M., Laroche, O., Tabard-Cossa, V. and Grütter, P., 2007, “A Complete Analysis of the Laser Deflection Systems used in Cantilever-based Systems,” *Ultramicroscopy*, Vol. 107, pp. 422~430.

(8) Lee, S. I., Hong, S. H. and Lee, J. M., 2008, “Nano Scale Surface Property Estimation Using Proper Orthogonal Decomposition in Atomic Force Microscopy,” *CIRPAnnals*, Vol. 57, No. 1, pp. 563~566.

(9) Maugis, D., 1999, “Contact, Adhesion and Rupture of Elastic Solids,” Springer.