

# 적합직교모드를 이용한 AFM 마이크로캔틸레버의 진동 해석에 대하여

## On the Vibration Analysis of AFM Microcantilevers Using Proper Orthogonal Modes

이수일\* · 황철호\*

Soo Il Lee and Cheol Ho Hwang

**Key Words** : Proper Orthogonal Mode(적합직교모드), AFM(원자현미경), Lennard-Jones Potential(레너드-존스 포텐셜)

### ABSTRACT

Dynamic force microscopy 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 ideas based on proper orthogonal decomposition (POD) and detailed experiments that yield new perspectives and insight into AFM. A dynamic cantilever model with Lennard-Jones interaction potential which includes attractive and repulsive van der Waals demonstrates the reasonable tapping mode response in time and frequency.

### 1. 서 론

원자현미경(AFM: Atomic Force Microscopy)은 나노스케일의 대상을 직접 관찰할 수 있는 장비로 프로브 팁을 시료 표면에 접근시켜 나타나는 프로브(캔틸레버)의 정적, 동적 변형과 주파수 특성을 이용하여 나노 표면 형상을 측정하는 원리로 작동한다. 이러한 AFM 프로브와 관련한 다양한 역학적 현상에 대한 연구가 전통적인 기계공학 및 역학 분야에서 새롭게 전개되고 있다. 이 중 AFM 프로브를 공진시켜 팁과 표면 간의 동적특성 변화를 이용한 비접촉(non-contact)와 탭핑(tapping) 모드가 새로운 측정 기법과 원자간 작용력 및 기타 나노스케일 물리량 규명에 많은 정보를 주기 때문에 큰 관심 대상이 되어오고 있다.[1-3] 이러한 연구와 관련하여 현재까지 많은 연구자들이 AFM 프로브의 동특성 해석을 시도하였으나,[4-8] 팁의 비선형 동특성에 대한 이해나 정확한 분석이 아직 미흡한 상태라고 할 수 있다.

따라서 본 연구에서는 실제 이용되는 AFM 탭핑모드 응답을 기준으로 실험과 팁-표면 사이를 원자간 작용력 모델

인 Lennard-Jones(LJ) 포텐셜 모델을 통하여 해석적인 접근을 시도하였다. 실험적으로는 실리콘(Si) 팁과 HOPG(Highly oriented pyrolytic graphite)시료표면에 대하여 고속으로 캡처한 신호 및 주파스 스펙트럼을 분석하고, 실제 탭핑이 발생할 때의 비선형 작용력의 영향을 분석하였다. 또한 탭핑 과정에서 팁이 표면에 순간적으로 충격을 가하는 관점에 대하여 보다 효과적으로 분석하기 위한 새로운 해석 도구인 적합직교모드(proper orthogonal mode)[9-12]에 대한 가능성을 제시하고자 한다. LJ 포텐셜 모델에서 AFM 프로브의 비선형 동역학에 대한 기본적인 해석은 참고문헌[13-14] 등에 상세히 기술되어 있다.

### 2. AFM 프로브 모델링

다양한 AFM 프로브의 해석에서 많은 경우 밴더발스(van der Waals)힘과 접촉력과 같은 반발작용력을 모델링을 적용하는 경우가 많다. 그러나 접촉모델을 포함한 팁-표면 작용력 함수의 경우 불가피하게 발생하는 작용력의 불연속점 혹은 미분불능점 등의 존재로 인해 해석에 상당한 주의가 요하게 된다. 따라서 분자동역학(molecular dynamics) 해석에서 흔히 사용되는 대표적 원자간 작용력인 LJ 포텐셜을 이용하여 프로브-표면 간 작용력 모델로 사용하기도 한다.[3] 이럴 경우 등가 반경  $R$  인 프로브 팁과 표면사이의 LJ포텐셜은 식(1)로, 이로부터 유도되는 작용력은 식(2)로 표시된다.

† (Corresponding Author)

서울시립대학교 기계정보공학과

E-mail : leesooil@uos.ac.kr

Tel : (02) 2210-5337, Fax : (02) 2248-5110

\* 한남대학교 기계공학과

$$U_{LJ} = \frac{A_1 R}{1260z^7} - \frac{A_2 R}{6z}, \quad (1)$$

$$P_{LJ} = -\frac{\partial U_{LJ}}{\partial z} = \frac{A_1 R}{180z^8} - \frac{A_2 R}{6z^2}. \quad (2)$$

여기에서  $A_1$ 과  $A_2$ 는 각각 흡입 및 반발 포텐셜에 대한 Hamaker 상수를 나타내며,  $z$ 는 순간 팁-표면 간격을 나타낸다.

AFM 프로브가 위에서와 같은 LJ포텐셜 상에서 작동하고 있다고 가정할 때, 다음 Fig 1과 같은 과정으로 기본적인 프로브의 거동을 살펴 볼 수 있다. 먼저 팁-표면 간에 아무 작용력이 작용하지 않는다고 하면 최초 팁-표면 간격은 Fig 1(a)와 같이  $Z$ 로 나타날 것이다. 이 때 팁-표면 작용력이 작용하면 그에 따라 팁이 표면 쪽으로 변형을 하게 되고 프로브의 강성에 의한 탄성력과 팁-표면 간의 밴더발스 힘이 평형을 이루는 위치( $\eta^*$ )에서 해당하는 변형( $w^*$ )이 생기게 된다.(Fig. 1(a)) 그리고 다음으로 프로브가 고정되는 기저부에서부터 가진  $y(t)$ 가 추가되면 프로브는 진동하게 되고, 공진상태에서 다양한 동적모드(비접촉, 탭핑) 측정이 이루어지게 된다.

기저가진  $y(t) = Y \sin \Omega t$ 가 포함된 진동하는 프로브의 전체 변위는

$$w(x, t) = u(x, t) + w^*(x) + y(t) \quad (3)$$

과 같다. 프로브 캔틸레버를 Euler-Bernoulli 보로 이상화할 때, 캔틸레버의 동변위  $u(x, t)$ 에 대한 운동방정식을 유도하면 다음과 같다.

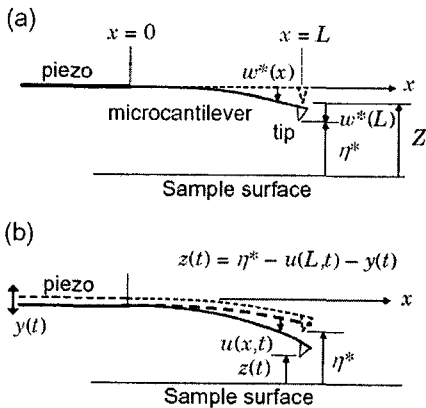


Fig. 1. Configuration of AFM probe's (a) static and (b) dynamic behaviors

$$\rho A \ddot{u} + EI(u'''' + w''''') = P_{LJ} \delta(x-L) + \rho A \Omega^2 Y \sin \Omega t \quad (4)$$

여기에서 팁 끝단의 비선형 작용력  $P_{LJ}$ 에는 식(2)에서의  $z$  대신 기저가진 및 작용력에 의한 전체 변형 등이 포함된 식  $\eta^* - u(L, t) - Y \sin \Omega t$  이 대입되게 된다.(Fig 1(b))

이상에서 유도된 운동방정식 (4)는 팁 끝단에 작용하는 비선형 작용력  $P_{LJ} \delta(x-L)$ 를 해당 팁-표면 간격에서 선형화한 스프링상수  $k^*$ 인 강성요소가 경계조건으로 작용하는 보에 대한 모드로서 이상화할 수 있다.[3] 이렇게 구한 모드 중 첫 번째 굽힘 모드  $\phi_1$ 에 대하여 Galerkin과정을 통해 이상화된 무차원 상미분 방정식은 다음 식(5)와 같고, 각각 해당 상수 및 무차원화 계수들은 참고문헌 [3]에 나타난 것과 같다.

$$\overline{\eta}_1 + d_1 \overline{\eta}_1 + \overline{\eta}_1 = B_1 + \frac{C_{11}}{z^8} + \frac{C_{12}}{z^2} + \overline{y} \Omega^2 E_1 \sin \overline{\Omega} \tau \quad (5)$$

위 방정식 (5)를 MATLAB에서 시간영역 해를 구하고 주파수에 대하여 해석한 대표적인 예가 Fig. 2에 나타나 있다.

### 3. AFM 실험결과

Fig. 3은 동적모드 AFM에서 프로브의 진동을 측정하기 위한 기본 실험 셋업을 나타낸다. 본 실험에서는 Nanotec사의 AFM을 이용했으며 프로브 팁의 변위를 AFM에서 피드백으로 이용하는 자체 레이저를 이용하여 상대적으로 측정하는 방법을 적용하였다. 기본적인 진동 진폭과 위상 신호의 처리를 위하여 Lock-In 앰프(EG&G 7260)를 이용하고, 또한 추가의 실시간 진동 신호 캡처를 위하여 NI사의 1-CH 고속 데이터 획득장치(NI-5911)를 활용하였다. Fig. 4는 500 kHz 샘플링 주파수로 고속 데이터 획득장치로부터 얻은 프로브(공진주파수 약 52 kHz)의 실시간 진동 신호(a, c)와 파워스펙트럼(b, d)이다.

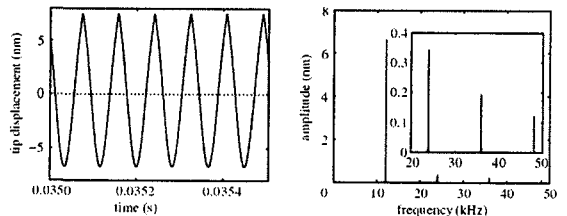


Fig. 2. Time history and DFT spectrum at excitation frequency of 12 kHz with  $\overline{y}=0.006$ .

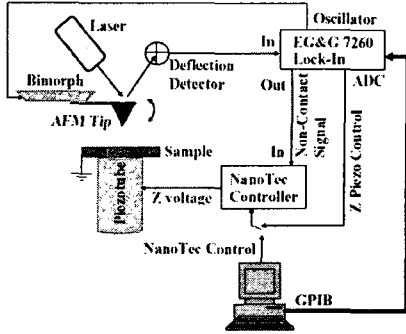


Fig. 3. Experiment setup

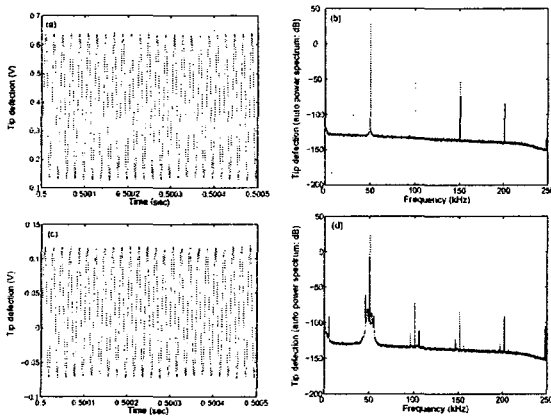


Fig. 4. Measured real-time tip deflection signal and its auto-power spectrum: (a, b) when the tip oscillates without sample; (c, d) when the tip taps the sample.

실제 이러한 실험결과는 기본적으로는 2절에서 제시한 모델의 해석 결과와 어느 정도 경향이 일치하는 것을 알 수 있다. 그러나 Fig 3(d)에서와 같이 주 조화성분의 주변에 사이드 피크가 나타나는 것 등은 1자유도 모델을 통해서서는 예측이 불가능하다. 특히 텀핑과 같은 복잡한 현상이 개입된 경우에는 보다 효율적인 모델링 기법이 절실히 요구된다.

#### 4. 적합직교모드

적합직교분해법(POD: proper orthogonal decomposition)은 Karhunen-Loeve 변환으로도 알려져 있으며 역학 분야의 응용으로는 매우 큰 자유도 계나 여러 가지 복잡한 물리 현상이 연성된 계의 해석에서 종종 이용되던 방법이다.[10-12] 특히 충격에 의한 보의 진동 해석에 활용된 예 [9]에 의하면 캔틸레버의 끝단에 작용하는 충격에 의해 발생하는 복잡한 진동 현상을 몇 개의 POD모드를 이용한 결과를 보여주고 있으며, 또 다른 응용 예[12]에 의하면 AFM

프로브 끝단과 표면 사이에 부착된 복잡한 단백질 분자의 진동 특성을 POD모드로부터 동정(identification)하는 방법을 보여주고 있다.

이러한 진동 해석에 POD를 이용하는 과정은 다음과 같이 정리할 수 있다. 먼저 일반적인 계의 주어진 영역  $\Omega$ 에서 시간( $t$ )과 공간( $x$ )에 대한 진동 신호를  $v(x, t)$ 라 하자. 일정한 시간  $t_i$ 에서 샘플링된 형상(일종의 snapshot)을  $v_i(x)$ 라 할 경우 POD에서는 이들 snapshot들로부터 원래 구조의 진동 모드에 가장 가깝도록 하는  $\phi(x)$ 를 다음 최적화 과정을 통하여 구하게 된다.

$$\text{Minimize } \lambda = \sum_{i=1}^n (\phi(x) - v_i(x))^2 \quad \forall x \in \Omega \quad (6)$$

이렇게 구한 POD모드  $\phi(x)$ 들 중 다음 정규조건을 만족하는 것을 고르게 된다.

$$\int_{\Omega} \phi(x)^2 dx = 1 \quad (7)$$

한편, 위 식(2)는 다음과 같은 문제로 바꾸어 쓸 수 있고, [10]

$$\text{Maximize } \left\{ \lambda = \frac{\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \left( \int_{\Omega} \phi(x) v_n(x) d\Omega \right)^2}{\int_{\Omega} \phi(x)^2 d\Omega} \right\} \quad \forall x \in \Omega, \quad (8)$$

따라서 최종적으로는 다음과 같은 적분고유치문제에 귀결된다.[10]

$$\int_{\Omega} K(x, x') \phi(x') dx' = \lambda \phi(x), \quad (9)$$

여기서  $K$ 는 다음 식으로 정의되는 2점 관계함수이다.

$$K(x, x') = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N v_i(x) v_i(x'). \quad (10)$$

이상의 과정으로부터  $m$ 개의 각 측정점  $x_k$ 에 대한 다음의 관계행렬(correlation matrix)이 구해지고,

$$G = \begin{bmatrix} K(x_1, x_1) & \cdots & K(x_1, x_m) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ K(x_m, x_1) & \cdots & K(x_m, x_m) \end{bmatrix} \quad (11)$$

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

$$Q = \begin{bmatrix} q_1(t_1) & \cdots & q_1(t_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ q_m(t_1) & \cdots & q_m(t_n) \end{bmatrix} \quad (12)$$

이 때,  $G = \frac{1}{n} QQ^T$  와 같다.

이와 같이 POD는 비선형 경계 특성 등이 포함된 구조진동 해석에 효과적으로 활용할 수 있으며, 실험으로부터 적합된 모드를 사용하여 단순 이론모드 해석의 단점을 극복할 수 있는 장점이 있다.

### 5. 토론 및 향후 연구

이상에서 나누어 살펴본 AFM 프로브 해석 및 실험과 POD 방법의 적용 가능성에 대하여 다음과 같은 연구 방향을 설정할 수 있다.

먼저 기존의 선형화된 팁 작용력이 포함된 캔틸레버의 모드를 이용한 상미분방정식의 수치해로부터 추출된 POD 모드를 적용하여 AFM 프로브의 동적 거동을 재구성함으로써 기존의 1자유도 모델의 결과와 비교한다. 이 경우 선형화 모드를 저차부터 2개 이상 선정하고 그에 맞추어 팁-표면의 비선형 작용력도 효과적으로 처리해야 한다. 특히 비선형 작용력의 경우 복잡한 접촉모델보다는 매끄러운(smooth) 곡선형태인 LJ포텐셜부터 접근하는 것이 타당할 것으로 보인다.

다음으로는 실제 실험으로부터 위 (12)식의 측정값 행렬을 구하고, 다시 관계행렬(식(11))에서 POD모드를 구하는 과정으로 진행되는 경우이다. POD에서는 구조의 진동 측정점이 여러 점일 경우에 그 효과가 커지기 때문에 실제 AFM의 측정 기구를 변형하여 레이저 측정 위치를 조금씩 변경해 가면서 데이터를 수집해야할 것이다. 그러나 1점 레이저의 위치를 바꾸어 가면서 실험할 경우에 발생하는 실험데이터의 신뢰성이나 측정 오차 등과 관련하여 세심한 주의가 필요할 것이다.

### 참고문헌

(1) Garcia, R and Perez, R., 2002, "Dynamic atomic force microscopy methods," *Surface Science Reports*, Vol. 47, pp. 197-301.  
 (2) Lee, S. I, Howell, S. W., Raman, A. and Reifenberger, R., 2002, "Nonlinear dynamics of microcantilevers in tapping mode atomic force microscopy: A comparison

between theory and experiment," *Physical Review B*, Vol. 66, 115409.  
 (3) Ruetzel, S., Lee, S. I. and Raman, A., 2003, "Nonlinear dynamics of atomic-force-microscope probes driven in Lennard-Jones potentials," *Proceedings of the Royal Society of London, A*, Vol. 459, pp. 1925-1948.  
 (4) Chen, X., Davies, M. C., Roberts, C. J., Tendler, S. J. B., Williams, P. M. and Burnham, N. A., 2000, "Optimizing phase imaging via dynamic force curves," *Surface Science*, Vol. 460, pp.292~300.  
 (5) Garcia, R. and San Paulo, A., 2000, "Dynamics of a vibrating tip near of in intermittent contact with a surface," *Physical Review B*, Vol.61, R13381.  
 (6) Garcia, R. and San Paulo, A., 2000, "Amplitude curves and operating regimes in dynamic atomic force microscopy," *Ultramicroscopy*, Vol.82, pp. 79~83.  
 (7) Anczykowski, B., Kruger, D., Babcock, K. L. and Fuchs, H., 1996, "Basic properties of dynamic force spectroscopy with the scanning force microscope in experiment and simulation," *Ultramicroscopy*, Vol.66, pp. 251~259.  
 (8) Nony, L., Boisgard, R. and Aime, J. P., 2001, "Stability criteria of an oscillating tip-cantilever system in dynamic force microscopy," *Eur. Phys. J. B*, Vol. 24, pp. 221~229.  
 (9) Azeez, M. F. A. and Vakakis, A. F., 2001, "Proper orthogonal decomposition (POD) of a class of vibroimpact oscillators," *Journal of Sound and Vibration*, Vol. 240, pp. 859-889.  
 (10) 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.  
 (11) Han, S. and Feeny, B., 2003, "Application of proper orthogonal decomposition to structural vibration analysis," *Mechanical Systems and Signal Processing*, Vol. 17, pp. 989-1001.  
 (12) Dowell, E. H. and Tang, D., 2003, *Dynamics of Very High Dimensional Systems*, World Scientific.  
 (13) van de Water, W. and Molenaar, J., 2000, "Dynamics of vibrating atomic force microscopy," *Nanotechnology*, Vol. 11, pp. 192-199.  
 (14) Basso, M., Giarre, L., Dahleh, M. and Mezic, I., 2000, "Complex dynamics in a harmonically excited Lennard-Jones oscillator: microcantilever-sample interaction in scanning probe microscopes," *Transactions of ASME, Journal of Dynamic System, Measurement, and Control*, Vol. 122, pp. 240-245.