

동적모드 AFM 마이크로캔틸레버의 적합직교모드 추출

Proper Orthogonal Mode Extraction of AFM Microcantilevers in Dynamic Mode

조 흥 모*·홍 상 혁**·권 원 태***·이 수 일†
 Hong Mo Cho, Sang Hyuk Hong, Won Tae Kwon and Soo Il Lee

Key Words : Proper Orthogonal Mode(적합직교모드), AFM(원자현미경), Microcantilever(마이크로캔틸레버)

ABSTRACT

Proper orthogonal decomposition(POD) is a method for extracting bases for modal decomposition from the ensemble of signals. We verified the connection of the proper orthogonal modes(POMs) and the linear normal modes(LNMs) through MATLAB simulation for the simple cantilever and AFM microcantilever models. Using the POMs, we can analyze and model effectively the dynamic mode of AFM microcantilevers.

1. 서 론

원자현미경(AFM: Atomic Force Microscopy)은 마이크로캔틸레버의 끝에 달려있는 팁을 시료 표면에 접근시켜 팁과 시료간의 원자간 작용력에 의하여 나노스케일의 표면 형상이나 여러가지 재질 특성 등을 측정하는 장치이다. 이러한 AFM 프로브와 관련한 다양한 역학적 현상에 대한 연구가 여러 역학 분야에서 전개되고 있다. 이 중 AFM 프로브를 공진시켜 팁과 표면 간의 동적 특성 변화를 이용한 비접촉(non-contact)과 탭핑(tapping) 모드는 접촉(contact)모드와 같은 정적(static)모드에 비해 위상(phase)정보등을 포함하기 때문에 여러가지 실험의 측정모드로 이용 되고 있다.[1]

적합직교모드(POM: proper orthogonal mode)는 큰 자유도계나 여러가지 복잡한 물리 현상이 연성된 계의 해석에서 유용하게 이용되는 방법이다. 이와 관련하여 캔틸레버의 끝단에 작용하는 충격에 의해 발생하는 복잡한 진동 현상을 몇 개의 POD 모드로 해석한 결과를 보여주고 있으며[2], 또 다른 응용 예에 의하면 AFM 프로브에 부착된 복잡한 고분자의 진동 특성을 POD 모드로부터 동정(identification)하는 연구가 진행되었다.[3]

본 연구에서는 적합직교모드에 대하여 이론적인 정리와 수치해석을 통하여 알아보고, AFM의 동적(dynamic)모드 응답을 측정해서 POM 를 추출하였다.

2. 적합직교분해법(POD)

적합직교분해법(POD: proper orthogonal decomposition)은 Karhunen-Loeve 변환으로도 알려져 있으며 매우 큰 자유도계나 여러 가지 복잡한 물리 현상이 연성된 계의 해석에서 종종 활용되고 있다.[4-6].

진동 해석에 POD 를 이용하는 과정은 다음과 같다. 먼저 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 POD 에서는 이들 snapshot 들로부터 원래 구조 진동 모드에 가장 유사한 $\phi(x)$ 를 다음 최적화 과정을 통하여 식(1)과 같이 구하게 된다.

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

이렇게 구한 POM $\phi(x)$ 는 다음 정규조건 식(2)을 만족하게 된다.

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

한편 위 식(1)는 다음과 같은 문제로 바꾸어 쓸 수 있다. [4]

Maximize

$$\left\{ \lambda = \frac{\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \left(\int_{\Omega} \phi(x) v_n(x) d\Omega \right)^2}{\int_{\Omega} \phi(x)^2 d\Omega} \right\} \quad \forall x \in \Omega \quad (3)$$

최종적으로는 다음과 같은 적분고유치문제로 귀결된다.

* 서울시립대학교 대학원 기계정보공학과

** 서울대학교 대학원 기계항공공학부

*** 서울시립대학교 대학원 기계정보공학과

† (Corresponding Author)

서울시립대학교 기계정보공학과

E-mail : leesooil@uos.ac.kr

$$\int_{\Omega} K(x, x')\phi(x')dx' = \lambda\phi(x). \quad (4)$$

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

$$K(x, x') = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N v_i(x)v_i(x'). \quad (5)$$

이상의 과정으로부터 m 개의 각 측정점 x_k 에 대한 다음의 관계행렬(correlation matrix)을 구하고,

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} K(x_1, x_1) & \cdots & K(x_1, x_m) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ K(x_m, x_1) & \cdots & K(x_m, x_m) \end{bmatrix} \quad (6)$$

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

$$\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} q_1(t_1) & \cdots & q_1(t_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ q_n(t_1) & \cdots & q_n(t_n) \end{bmatrix} = [\mathbf{q}(t_1) \cdots \mathbf{q}(t_n)] \quad (7)$$

이때, $\mathbf{G} = \frac{1}{n} \mathbf{Q} \mathbf{Q}^T$ 와 같고, \mathbf{G} 의 고유벡터 곧, POM 이 된다.

식(7)의 식은 다음과 같이 시간 변위벡터의 조합으로 나타낼 수 있다.[4]

$$\begin{aligned} \mathbf{Q} &= [\mathbf{q}(t_1) \cdots \mathbf{q}(t_m)] \\ &= \left[\sum_{i=1}^m \mathbf{e}_i(t_1) \mathbf{x}_{(i)} \cdots \sum_{i=1}^m \mathbf{e}_i(t_n) \mathbf{x}_{(i)} \right] \\ &= \begin{bmatrix} \mathbf{x}_{(1)} & \cdots & \mathbf{x}_{(m)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_1(t_1) & \cdots & e_1(t_n) \\ \vdots & & \vdots \\ e_m(t_1) & \cdots & e_m(t_n) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \mathbf{x}_{(1)} & \cdots & \mathbf{x}_{(m)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{e}_1^T & \cdots & \mathbf{e}_m^T \end{bmatrix}^T \\ &= \mathbf{X} \mathbf{E}^T = \mathbf{X} [\mathbf{I} \mathbf{Z}] [\mathbf{E} \mathbf{R}]^T, \end{aligned} \quad (8)$$

식(8)에서 모달행렬 \mathbf{X} 의 열은 이 시스템의 고유 모드이다. 행렬 \mathbf{E} 는 t_1, \dots, t_n 에서의 함수 $e_i(t)$ 이며, \mathbf{I} 는 항등행렬이고, \mathbf{Z} 는 모든 항이 0인 행렬이고 \mathbf{R} 은 임의행렬이다.

그리고 $e_i = [e_i(t_1) \cdots e_i(t_n)]$ 이다.

식(8)는 다음과 같이 특이값분해(SVD:singular value decomposition)으로도 볼 수 있다.

$$\mathbf{Q} = \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{X} \end{bmatrix}}_{\mathbf{U}} \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{Z} \end{bmatrix}}_{\mathbf{S}} \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{E} & \mathbf{R} \end{bmatrix}^T}_{\mathbf{V}^T} = \mathbf{U} \mathbf{S} \mathbf{V}^T \quad (9)$$

3. 수치해석

3.1 외팔보의 진동응답

POD 해석에 필요한 진동응답을 구하기 위하여 Fig. 1 과 같은 외팔보 구조를 모델링하고 각위치별 시간응답을 구하였다.

일반적인 외팔보의 운동방정식과 경계조건은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} -\frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[EI(x) \frac{\partial^2 y(x,t)}{\partial x^2} \right] + f(x,t) \\ = m(x) \frac{\partial^2 y(x,t)}{\partial t^2}, \quad 0 < x < L \\ y(0,t) = 0, \quad \frac{\partial y(0,t)}{\partial x} = 0 \end{aligned} \quad (10)$$

$$EI(L) \frac{\partial^2 y(L,t)}{\partial x^2} = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[EI(L) \frac{\partial^2 y(L,t)}{\partial x^2} \right] = 0$$

이와 같은 외팔보의 선형 정규 모드(LNM : Linear Normal Mode) 함수는 다음과 같다.

$$\begin{aligned} Y_r(x) &= (\cosh \beta_r x - \cos \beta_r x) \\ &\quad - a_r (\sinh \beta_r x - \sin \beta_r x) \end{aligned} \quad (11)$$

이때 a_r, β_r 의 값은 각각

$$a_r = \frac{\sinh \lambda_r - \sin \lambda_r}{\cosh \lambda_r + \cos \lambda_r}, \quad \beta_r = \frac{\lambda_r}{L} \text{ 이다.}$$

식(11)의 LNM 을 이용하여 외팔보 운동방정식 (10)을 이산화하는 갤러킨(Galerkin) 방법을 수행하였다. 그결과 다음과 같은 강성행렬요소 k_{ij} 와 질량행렬요소 m_{ij} 를 구할 수 있다.

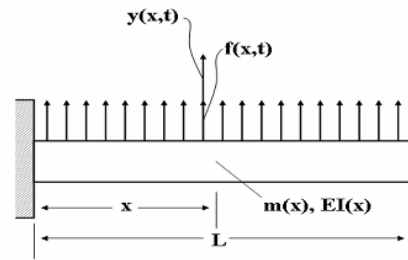


Fig. 1 Cantilever beam

$$k_{ij} = k_{ji} = \int_0^L \frac{d^2}{dx^2} \left[EI(x)Y_i(x) \frac{d^2 Y_j(x)}{dx^2} \right] dx, \quad (12)$$

$$i, j = 1, 2, \dots, n$$

$$m_{ij} = m_{ji} = \int_0^L m(x)Y_i(x)Y_j(x)dx, \quad (13)$$

$$i, j = 1, 2, \dots, n$$

위에서 구한 강성행렬과 질량행렬을 이용하여 다음과 같은 상미분 방정식을 구할 수 있다.

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{q}}(t) + \mathbf{K}\mathbf{q}(t) = \mathbf{Q}(t) \quad (14)$$

여기서 $\mathbf{q}(t), \mathbf{Q}(t)$ 는 일반화된 변위벡터와 일반화된 힘벡터이다. 위에서 구한 식(14)로부터 Runge-Kutta 방법을 이용하여 외팔보의 시간 응답 $q_i(t)$, ($i=1, \dots, n$)를 구할 수 있다.

3.2 단순예제

2절에서 언급한 POD 방법의 적용성을 검증하기 위하여 가장 단순한 예제를 설정하였다.

식(10)으로부터 $EX(x)=1$, $m(x)=1$, $L=1$ 을 적용하고, 식(14)와 같은 상미분 방정식을 구해 해석하였다. 가진력 벡터 $\mathbf{Q}(t)$ 는 1차~5차의 고유진동수로 조화가진을 주었다. 시간응답은 보의 길이를 5등분하여 각 위치별로 $\Delta t = 0.018$ 초 간격으로 400개 샘플링 값을 MATLAB을 이용하여 구하였다.

Fig.2는 MATLAB으로 구한 5점의 시간응답 $[q(t_1) \dots q(t_{400})]$ 을 식(8)과 같이 SVD를 통해 얻은 POM을 나타낸다. 기본적으로 조화가진에 의한 POM은 LNM과 거의 유사함을 알 수 있다.

3.3 AFM 마이크로캔틸레버 예제

실제 AFM에 이용되는 마이크로캔틸레버의 모델에 대한 POM을 추출하였다. 마이크로캔틸레버에 대한 사항은 Table.1과 같다. 식(10)으로부터 $L = 2.4 \times 10^{-4} \text{ m}$, $EI = 9.65888 \times 10^8 \text{ Nm}^2$, $m(x) = 1.95 \times 10^{-7} \text{ kg/m}$ 로 하여 3.2절에서와 같은 방법으로 마이크로캔틸레버 상 5점에 대한 시간응답을 $\Delta t = 0.14 \times 10^{-6}$ 초 간격으로 400개 샘플링 값을 구하였다.

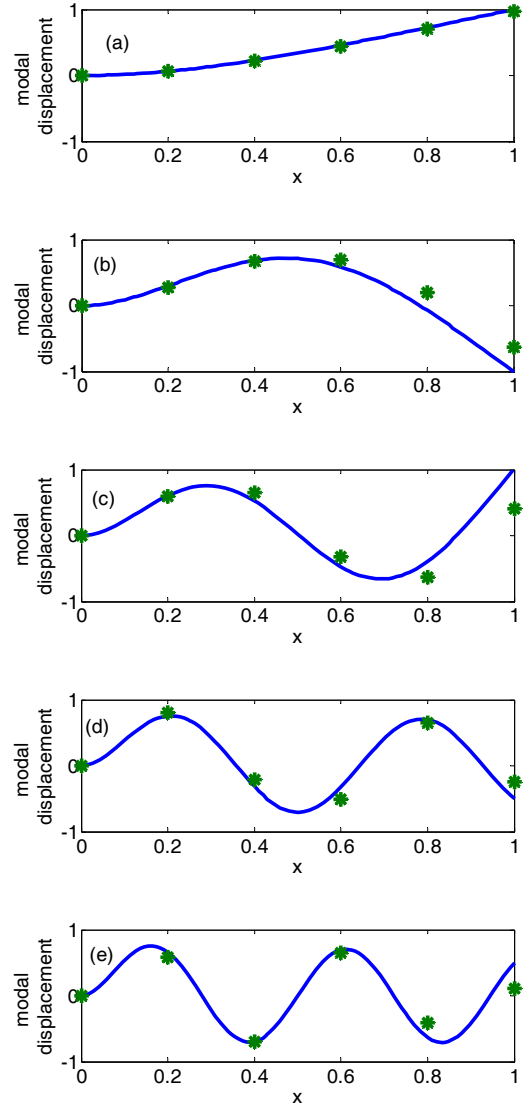


Fig. 2 The first five LNMs of an undamped cantilevered beam are plotted with solid lines, ‘-’. The corresponding POMs are plotted with symbols, ‘*’. (a) 1st mode, (b) 2nd mode, (c) 3rd mode, (d) 4th mode, (e) 5th mode.

Table. 1 Constants and properties of AFM microcantilever (OLYMPUS™ OMCL-AC240TC)

| Description | OMCL |
|---------------------------|------|
| Tip radius (nm) | 10 |
| Tip height (μm) | 14 |
| Cantilever thickness (μm) | 2.8 |
| Cantilever length (μm) | 240 |
| Cantilever width (μm) | 30 |
| Spring constant (N/m) | 1.8 |
| Resonant frequency (kHz) | 70 |

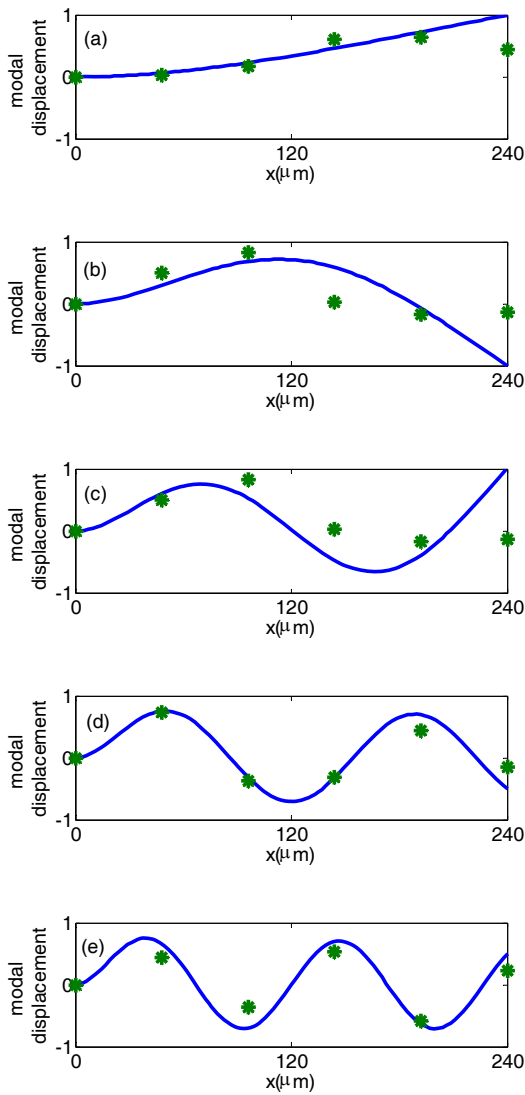


Fig. 3 The first five LNMs of an undamped AFM's microcantilever are plotted with solid lines, '-'. The corresponding POMs are plotted with symbols, '*'. (a) 1st mode, (b) 2nd mode, (c) 3rd mode, (d) 4th mode, (e) 5th mode.

Fig.3 은 MATLAB 으로 구한 5 점의 시간응답 $[q(t_1) \cdots q(t_{400})]$ 을 식(8)과 같이 SVD 를 통해 얻은 POM 을 나타낸다.

기본적으로 마이크로캔틸레버에 대한 POM 은 LNM 과 다소 차이는 있으나 1 차모드를 포함하여 전반적으로 거의 유사함을 알 수 있다.

4. 실험 결과

실제 마이크로캔틸레버의 동적모드 시 POM 추출을 시도하였다. 실험에서는 PSIA 사의 XE-100

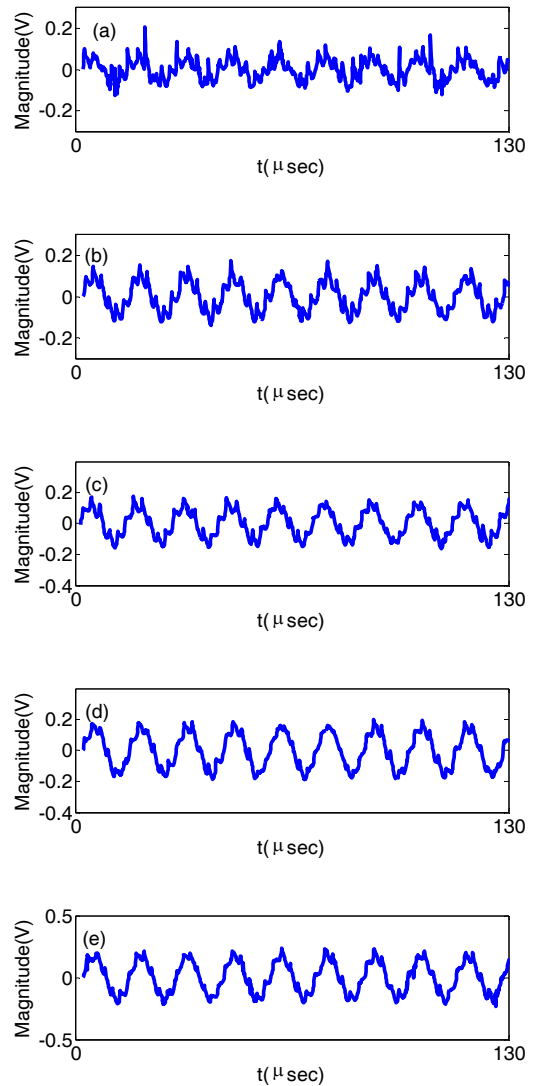


Fig. 4 Measured real-time tip deflection signal, (a) $x = 24 \times 10^{-6} \text{ m}$, (b) $x = 72 \times 10^{-6} \text{ m}$, (c) $x = 120 \times 10^{-6} \text{ m}$, (d) $x = 168 \times 10^{-6} \text{ m}$, (e) $x = 216 \times 10^{-6} \text{ m}$.

System 을 이용했으며, XE-100 System 에서 측정된 실시간 진동 신호 캡처를 위하여 NI 사의 2 채널 고속 데이터 획득장치(NI-5122)를 이용하였다. 마이크로캔틸레버는 그 길이가 길고 비교적 낮은 고유진동수를 가지는 Olympus 사 OMCL-AC240TS-C2 팁을 이용하여 실험을 수행하였다. Fig.4 는 이러한 실험장치를 이용하여 얻은 AFM 마이크로캔틸레버의 탐침의 모드별 실시간 진동 신호이며, Fig.5 은 이때 나온 실시간 진동신호 POM 이다. 일반적으로 AFM 측정에서는 마이크로캔틸레버의 1 차 고유진동수로 가진하는 공진모드를 이용하므로 이 경우에도 1 차모드와 POM 이 유사하게 나타남을 확인할 수 있다.

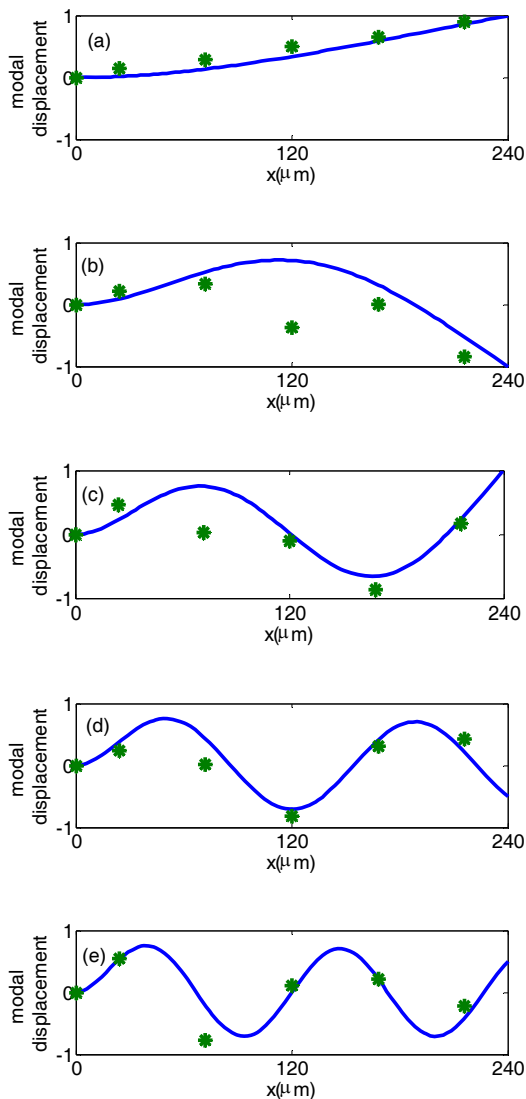


Fig. 5 The first five LNMs of an AFM's cantilevered beam are plotted with solid lines, '-'. The corresponding experimental POMs are plotted with symbols, '*'. (a) 1st mode, (b) 2nd mode, (c) 3rd mode, (d) 4th mode, (e) 5th mode.

5. 결론

본 연구에서는 AFM 마이크로 캔틸레버의 POM 추출을 위하여 SVD 방법을 통해 효과적으로 POM을 계산할수 있음을 보였다.

단순한 예제와 마이크로 캔틸레버모델의 MATLAB 시뮬레이션을 통하여 POM 과 LNM의 유사성을 확인하였다.

실제 마이크로캔틸레버의 실험을 통하여 가진 모드에서는 같은 현상의 POM이 추출됨을 확인하였다. 실제 동적모드 AFM 마이크로 캔틸레버의 거동은 비선형 작용력등의 영향에 의해 상당히 복잡하므로 향후 POM 추출 및 데이터 처리를 통하여 효과적인 결과를 얻을 수 있을 것으로 생각한다.

후기

이 논문은 2006년도 2 단계 두뇌한국 21 사업에 의하여 지원되었음.

참고문헌

- (1) Lee, S. I, Howell, S. W., Raman, A. and Reifenger, R., 2002, "Nonlinear dynamics of microcantilevers in tapping mode atomic force microscopy: A comparison between theory and experiment," *Physical Review B*, Vol. 66, 115409.
- (2) 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.
- (3) Aiqin Li, Dowell, Earl. H., 2006, "Modal reduction of mathematical models of biological molecules", *Journal of Computational Physics*, Vol. 211, pp262-288.
- (4) 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.
- (5) Feeny. GF, Liang. Y., 2003, "Interpreting proper orthogonal modes of randomly excited vibration systems" *Journal of Sound and Vibration*, Vol. 265, pp. 953-966.
- (6) 이수일, 황철호. 2005. "적합직교모드를 이용한 AFM 마이크로캔틸레버의 진동해석에 대하여" *한국소음진동공학회 2005 추계학술대회논문집*, PP.756~759.