

间歇模原子力显微镜非线性振动的数值模拟

吴昆裕, 邵继红

(中国科学技术大学, 电子工程与信息科学系, 合肥 230027)

中图分类号: O422.7 文献标识码: A

Numerical simulation of nonlinear vibration of tapping mode atomic force microscopy

WU Kun-yu, SHAO Ji-hong

(Department of Electronic Engineering and Information Science, University of Science and Technology of China, Hefei 230027, China)

1 引言

原子力显微镜(简记为 AFM)是利用其微悬臂梁的机械振动响应于力敏探针和实验样品表面之间的相互作用力来成像的, 由于具有原子和分子级的分辨率, 已成为表面成像及材料微结构研究的新工具, 在科学技术的各种领域获得了广泛的应用^[1-2]。有几种不同模式的 AFM 相继被开发使用。在 AFM 的接触模工作中, 其力敏探针始终保持同样品表面相接触, 力敏探针和样品之间的相互作用力被微悬臂梁位移产生的弹性力所平衡, 这种接触模式有极高的分辨率, 但力敏探针上存在横向力, 对实验样品有较大的损伤; 在 AFM 的非接触模工作中, 力敏探针的振幅相当小, 力敏探针始终处于引力场作用中, 而这种引力场梯度能使其谐振频率有所偏移, 导致力敏探针振动的相位和振幅有所变化并用来进行表面成像, 这种模式的缺点是分辨率较低, 力敏探针还有被样品表面俘获的可能, 其优点是灵敏度有所增加; 在 AFM 的间歇模工作中, 力敏探针的振幅较大, 在每个振荡周期中, 力敏探针绝大部分时间经受引力作用, 极短的时间经受接触斥力作用, 间歇模 AFM 的主要优点是能极大地降低对样品表面的损伤, 又能保持与接触模相比的高分辨率, 特别适用于较软材料(如生物样品)的表面成像, 故间歇模工作代表了 AFM 技术的一种新进展^[3-4]。

AFM 间歇模工作有较复杂的 Piece-wise 型非线性相互作用力, 这种非线性相互作用力连同微悬臂梁, 力敏探针及实验样品组成一个非线性振动系统。本文使用简单的单自由度非线性受迫谐振子模

型来分析 AFM 微悬臂梁的机械振动响应, 计算力敏探针的位移振幅相位和非线性相互作用力同受迫频率, 力敏探针-样品间初始距离及其弹性参数的关系, 解释实验上观察到的频响特性的间断性跳变和弛豫等非线性现象^[5-6]。

2 间歇模 AFM 的非线性受迫谐振子模型

间歇模 AFM 工作的单自由度非线性受迫谐振子模型示于图 1, 这个非线性振动系统可由下面的微分方程来描述:

$$\frac{d^2z}{dt^2} + \frac{0}{Q} \frac{dz}{dt} + \omega_0^2(z - z_0) = \frac{1}{m} F(z) + a_0 \cos(\omega t) \quad (1)$$

式中 Q 是微悬臂梁的等效机械品质因数, m 是等效质量, k_c 是等效弹性常数, $\omega_0 = (k_c/m)^{1/2}$ 是谐振角频率, a_0 是受迫振动角频率和驱动振幅, $F(z)$ 是力敏探针和样品表面之间的相互作用力。固体间相互作用斥力由宏观连续体接触理论, 如 Hertz, Johnson-Kendall-Roberts (JKR)、Derjaguin-Muller-Toporov(DMT) 模型来描述^[7-8]。在模拟计算中, 我们使用修正的 Hertz 模型, 相互作用力和沉陷形变的关系是:

$$F(z) = K \sqrt{R} (-z)^{3/2} - F_{FF}, \quad z < 0 \quad (2)$$

式中第一项是经典 Hertz 接触斥力, 第二项是修正

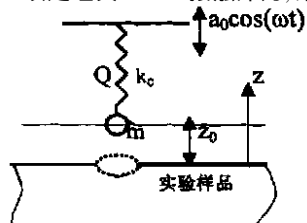


图 1 间歇模 AFM 的非线性受迫谐振子模型

收稿日期: 2000-01-20; 修订日期: 2000-05-23

近代声学国家重点实验室资助项目

作者简介: 吴昆裕(1938-)男, 教授。

粘附引力, $1/K = 3/4(1 - v_s^2)/E_s + (1 - v_c^2)/E_c$, v_s 和 v_c 是样品和微悬臂梁的泊松比, E_s 和 E_c 是样品和微悬臂梁的杨氏模量, R 是力敏探针半径; 和

$$F(z) = \frac{-F_{FF}}{[(z/d_0) + 1]^2}, \quad z > 0 \quad (3)$$

是 Van Der Waals 型长程引力, d_0 为归一化系数。引入振速 $v = dz/dt$, 方程(1) 化做两个一阶微分方程, 可用四阶 Runge-Kutta 数值程序方便求解。

3 数值结果与讨论

在数值求解计算中, 我们使用单晶 Si 力敏探针的典型弹性参数如下: $E_c = 1.69 \times 10^{11} \text{N/m}^2$, $k_c = 40 \text{N/m}$, $R = 50 \text{nm}$, $Q = 100$, $f_0 = 200 \text{kHz}$, $a_0 = 1.0 \text{nm}$, $z_0 = (40 - 60) \text{nm}$, $E_s = (10^8 - 10^{11}) \text{N/m}^2$ 。解方程(1) 得到位移随时间的变化关系是最基本的结果, 它包含了间歇模 AFM 和实验样品之间相互作用的所有信息, 当振动系统达到稳定状态后, 计算间歇模 AFM 微悬臂梁非线性受迫振动的位移振幅和相位, 沉陷形变, 相互作用力依赖于驱动频率、探针-样品间初始距离及实验样品弹性参数的变化关系。对几种初始距离 z_0 , 图 2、图 3 给出了位移振幅和相位的频率响应。我们发现在所示曲线的高频段存在间断性跳变, 当驱动频率由低频向高频变化时, 位移振幅和相位都存在跳变, 由较高的振幅跳至较低的振幅, 由较大的相位跳到较小的相位; 当驱动频率由高频向低频变化时, 间断跳变点的位置不同, 且由较低的振幅跳至较高的振幅, 由较小的相位跳至较大的相位, 此结果显示 AFM 受迫振动系统具有复杂的非线性行为, 数值模拟与实验上观察到的现象完全相符^[5-6]。间歇模 AFM 在此频率区域工作是不稳定的, 应予避免, 对不同的力敏探针-样品初始距离 z_0 , 图 4 和图 5 给出位移振幅和相互作用力依赖于等效弹性常数 K 的关系, 若力敏探针的杨氏模量为已知, 可利用这种关系测量材料的微结构力学参数。

4 结论

单自由度非线性受迫谐振子模型能较好的描述间歇模 AFM 在其一阶谐振频率附近的非线性复杂行为, 选择间歇模 AFM 的工作频率应稍低于谐振频率, 高频端工作是不稳定的, 应予避免。

参考文献:

- [1] Binnig G, et al. [J]. Phys. Rev. Lett., 1986, 56: 930.
- [2] Martin Y. et al. [J]. Appl. Phys., 1987, 61: 4723.
- [3] Sarid D. et al. [J]. J. Vac. Sci. Technol., 1996, B14: 864.
- [4] Spatz J P. et al. [J]. Nanotechnology, 1995, 6: 40.
- [5] Kuhle A. et al. [J]. J. Appl. Phys., 1997, 81: 6562.
- [6] Anczykowski R. et al. [J]. Phys. Rev., 1996, B53, 15485.
- [7] Johnson K J. Contact Mechanics. [M]. Cambridge University Press, 1985.
- [8] Burnhan N A et al. [J]. Nanotechnology, 1993, 4: 64.

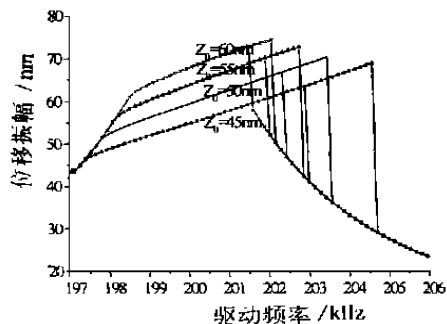


图 2 间歇模 AFM 的振动幅度的频率响应图

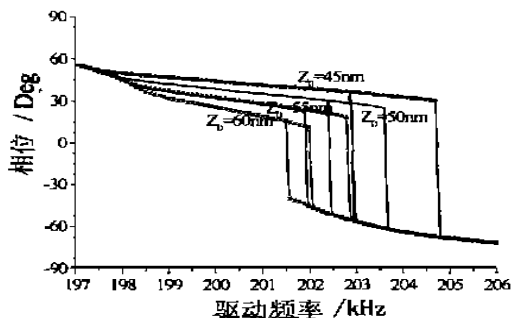


图 3 间歇模 AFM 振动相位的频率响应

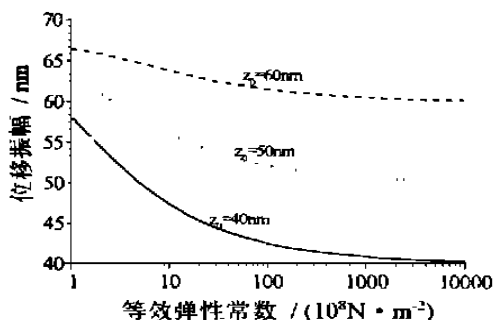


图 4 位移振幅随等效弹性常数 K 的变化关系

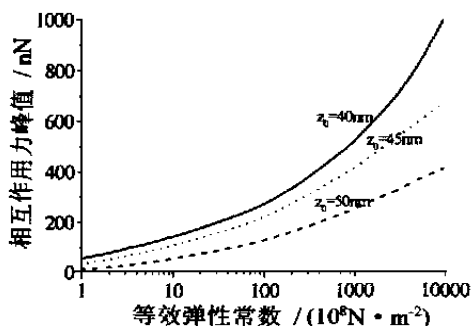


图 5 相互作用力随等效弹性常数 K 的变化关系