

# 原子力显微镜形貌测量偏差的机理分析及修正方法<sup>1)</sup>

徐金明 \* ,† 白以龙 \* ,2)

\*(中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室, 北京 100190)

†(中国科学院研究生院, 北京 100190)

**摘要** 采用原子力显微镜测量样品表面形貌时, 针尖与样品间的相互作用力会使样品表面不同力学性质的区域变形量不同, 从而使得形貌测量结果产生偏差。首先研究了引起形貌测量偏差的机理, 进一步通过数值计算发现通过引入高频信号与低频信号叠加作为新的形貌测量信号可以近似避免这一类形貌测量偏差。但是对于普通的矩形截面悬臂梁提取高阶信号是比较困难的, 通过外加弹簧的结构设计来调节悬臂梁各阶本征频率相对值, 使得在实验测量过程中可以较方便地提取悬臂梁振动的高频信号。

**关键词** AFM, 形貌测量偏差, 高频信号, 结构设计, 各阶本征频率相对值

中图分类号: TH742.9 文献标识码: A 文章编号: 0459-1879(2011)01-0112-10

## 引 言

自从 Binnig 发明第 1 台原子力显微镜 (atom force microscope, AFM)<sup>[1]</sup> 以来, AFM 已经成为测量样品表面形貌及力学性质<sup>[2-5]</sup> 的常用工具, 相对于通常的测量样品表面形貌的方法, 采用 AFM 进行测量具有精度高、不破坏样品、局域性强的优点<sup>[6]</sup>。AFM 主要有两类操作模式: 接触模式和轻敲模式。对于较硬的样品一般采用接触模式进行测量<sup>[7-8]</sup>; 对于较软的样品, 为了避免对样品造成破坏一般采用轻敲模式进行测量<sup>[9-10]</sup>。由于 AFM 是通过悬臂梁自由端的针尖与样品相互作用来对样品进行测量的, 那么在测量过程中, 有很多因素都会对成像产生影响, 诸如针尖非局域效应、针尖的形状效应、热扰动对悬臂梁的影响。如果要整体上提高 AFM 测量精度需要在这些方面给予分析及修正, 本文仅限于分析变形引起形貌偏差的本源机理, 并试图通过动态方法避免这一形貌测量偏差, 为最终整体提高 AFM 测量精度提供一定的基础。这一部分测量偏差是由于在形貌测量的过程中保持悬臂梁挠度或振幅恒定, 也就是保持样品对针尖的作用力不变, 那么针尖与样品间的相互作用力会使样品发生变形, 更进一步如果样品表面力学性质有所变化将引起变形量也不同, 那么得到的形貌测量结果也会有偏差。这一类问题的实验现象在很多文献中已经有所

报道。Wang 等<sup>[11]</sup> 通过 AFM 实验来测量薄膜厚度, 将一片中心带孔的薄膜附着在一个硬的基底上, 通过轻敲模式测量薄膜与基底之间的台阶高度以表征薄膜厚度。测量结果表明, 在不同的振幅参数设置下得到了不同的厚度测量值, 文章从实验的角度说明了这一测量失真是由于针尖与样品间作用力使得样品发生变形引起的, 但并未从机理上进行更进一步的分析, 也未对如何避免这一偏差提出建议与方法。同一篇文献报道中, 他们采用 AFM 测量样品表面颗粒的大小, 得到的结果与扫描电镜测量结果相差较大。也就是说, 采用 AFM 测量得到的样品表面形貌存在着较大的失真, 但现有文献报道中尚未对这一现象进行机理性的分析, 也就无法提出消除这一测量偏差的方法。Yang 等<sup>[12]</sup> 采用 AFM 测量 DNA 直径时也遇到了类似的问题, 他们将 DNA 链放置于较硬基底上, 通过测量 DNA 直径的峰值高度来表征 DNA 的直径, 采用轻敲模式测量得到的结果为 1.28 nm, 而采用非接触模式测量得到的结果为 1.96 nm, 面对测量结果的不一致, 仅从实验角度来解释无法确定准确的结果, 那么就需要从原子力显微镜的测量原理入手分析造成测量偏差的机理, 进一步提出消除测量偏差的方法以给出准确的测量结果。本文针对这一类样品变形引起的形貌测量失真问题展开研究与讨论, 第一步需要从机理上分析这一类测量失真的原因, 进一步将根据理论分析及数值计算

2010-04-29 收到第 1 稿, 2010-06-22 收到修改稿。

1) 国家自然科学基金资助项目 (10932011)。

2) E-mail: baiyl@lnm.imech.ac.cn

提出一定的方法试图消除这一类的形貌测量失真以得到准确的测量值.

## 1 接触模式样品表面形貌测量偏差的机理分析

AFM 接触模式测量样品表面形貌的原理为探针在样品表面进行扫描, 通过四象限接收器测量悬臂梁的挠度. 反馈电路控制样品台上下移动, 使得扫描过程中每一点  $(x_s, y_s)$  上悬臂梁的挠度值恒定, 也就是针尖与样品间的作用力保持恒定. 这样记录下的每一点处样品台纵向补偿位移即可还原为样品表面的形貌.

接触模式 AFM 实验中悬臂梁自由端施加的集中力与挠度关系可以简化为  $P = K_{e,1}u_c$ , 其中  $K_{e,1}$  为悬臂梁等效刚度 (接触模式悬臂梁等效刚度与悬臂梁动态模式一阶等效刚度一致),  $u_c$  为悬臂梁挠度,  $P$  为悬臂梁对其自由端的反作用力. 此处采用 Hertz 接触模型<sup>[13]</sup> 来描述悬臂梁顶端的针尖与样品间的相互作用力

$$F_C = K_H d^{3/2}$$

其中,  $F_C$  为样品与针尖之间的作用力;  $d$  为针尖压入样品中的深度;  $K_H = K_{\text{eff}} R^{1/2}$ , 式中  $R$  为针尖球头半径,  $K_{\text{eff}} = \frac{4}{3} \left( \frac{1-v_1^2}{E_1} + \frac{1-v_2^2}{E_2} \right)^{-1}$  ( $E_1, E_2$  分别为针尖与样品的弹性模量;  $v_1, v_2$  分别为针尖与样品的泊松比).

样品表面远离针尖时样品对针尖没有作用力, 悬臂梁的挠度为零 (不计重力影响). 采用  $u_s$  来表示样品台的移动距离, 以样品表面与针尖临界接触时的位置为零点, 那么  $u_s = 0$  时  $u_c = 0$ , 如图 1(a) 所示, 当样品继续上移时  $u_s$  与  $u_c$  的关系表示为

$$u_s = u_c + d \quad (1)$$

其关系示意图如图 1(b) 所示.

图 1(b) 中悬臂梁与样品平衡时, 悬臂梁对其自由端的反作用力与针尖 - 样品之间的作用力相等

$$K_H d^{3/2} = K_{e,1} u_c \quad (2)$$

那么

$$d = \left( \frac{K_{e,1} u_c}{K_H} \right)^{2/3} \quad (3)$$

将式 (3) 代入式 (1) 得

$$u_s = \left( \frac{K_{e,1} u_c}{K_H} \right)^{2/3} + u_c \quad (4)$$

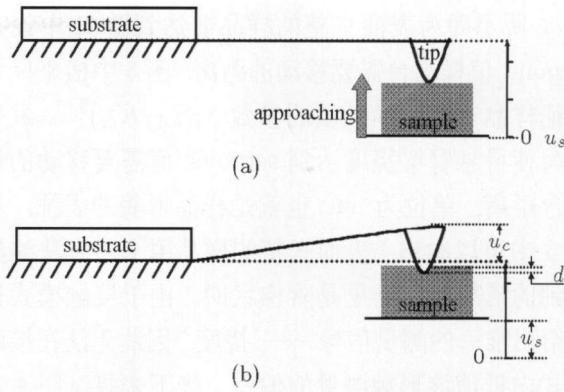


图 1 样品台上升时各几何关系示意图

Fig.1 Schematic diagram of geometric relation when sample approaching to tip

由于  $K_H$  与被测对象的力学性质有关, 所以当平整样品表面不同部分的力学性质不同时,  $u_s-u_c$  曲线不一致, 如图 2 所示, 图中  $(K_{e,1}/K_H)^{2/3}$  分别取为  $0(\text{nm})^{1/3}, 0.5(\text{nm})^{1/3}, 1.0(\text{nm})^{1/3}, 1.5(\text{nm})^{1/3}$ , 其量纲为长度量纲的  $1/3$  次方, 这里长度量纲取为 nm.

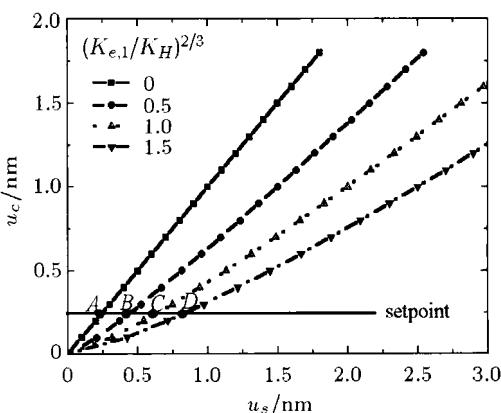


图 2 样品力学性质不同时悬臂梁挠度随样品移动变化曲线

Fig.2 Relation between deflection of cantilever and moving distance of sample with different mechanical properties

图 2 中横坐标为样品从与针尖接触点处 (图 1(a) 所示) 继续上移的距离; 纵坐标为悬臂梁挠度, 单位均为 nm. 在采用该模式进行形貌测量时保持悬臂梁挠度为一设定值, 如图 2 中 setpoint 所示 (接触模式实验中 setpoint 为一设定的挠度值), 对应不同表面情况时样品需要移动的距离如图 2 中 A, B, C, D 4 个点所示, 也就是说为了使悬臂梁达到相同的挠度设定值, 对于样品表面具有不同力学性质的区域需要移动的样品台的距离是不同的, 因此对表面平整的样品测量出来的样品表面形貌就变为不平的了,

图 3 所示即为表面平整的样品要达到图 2 中设定 setpoint 值样品台需要移动的距离, 图 3 中横坐标为表征样品表面力学性质的参数  $(K_{e,1}/K_H)^{2/3}$ , 纵坐标为使得悬臂梁挠度达到 setpoint 值需要移动的样品台距离, 单位为 nm, 也就是样品形貌的表征. 从图 3 中可以看出, 表面平整的样品用上述方法测量得到的形貌测量结果是阶梯状的. 由于接触模式只能给出唯一的测量信号——挠度, 因此无法在接触模式内抵消该形貌测量的偏差. 接下来将试图通过轻敲模式提供更多的信号以消除样品表面力学性质不同引起的形貌测量偏差.

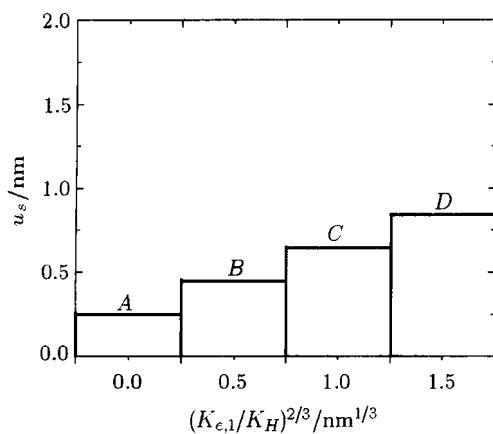


图 3 接触模式下力学性质不同对形貌测量结果的影响

Fig.3 Sample properties effect on topography measurement in contact model

由图 2 可以看出如果接触力足够小(即设定的  $u_c$  较小), 形貌测量偏差也将较小, 但是实验中, 如果设定的  $u_c$ (即图 2 中 setpoint 值) 过小, 将使得测量比较困难, 给测量精度带来另外的挑战. 下面分析一下设定的  $u_c$  与形貌测量偏差值之间的量级关系. 在图 2 中, 系数  $(K_{e,1}/K_H)^{2/3}$  值的范围是 0~1.5, 那么在不同系数下式(4)分别表示为  $u_{s,1} = 0u_c^{2/3} + u_c$ ,  $u_{s,2} = 1.5u_c^{2/3} + u_c$ , 测量形貌时, 保持挠度恒定及  $u_c$  一致. 那么  $u_{s,2} - u_{s,1} = 1.5u_c^{2/3}$ , 这一差值即是形貌测量偏差的值, 从量级上讲, 形貌测量偏差值是设定挠度值的  $2/3$  次方. 在实际 AFM 测量中, 为了便于测量设定的挠度值不能过小, 也就决定了变形引起的形貌测量偏差是不可忽略的.

## 2 轻敲模式样品表面形貌测量偏差的机理分析

AFM 轻敲模式测量样品表面形貌的原理是在悬臂梁固定端施加简谐位移激励, 在扫描过程中保持悬臂梁自由端振幅为一恒定值并记录样品台的纵向

补偿位移即可得到样品表面的形貌. 但是, 为了将位移激励与针尖样品间的作用力统一进行分析, 通常将固定端的简谐位移激励等效为悬臂梁自由端的简谐力激励<sup>[14]</sup>.

轻敲模式悬臂梁的振动方程描述如下<sup>[14]</sup>

$$M_{e,1}\ddot{y}_l + K_{e,1}y_l = P_0 \sin(\Omega t) + F_C(d) \quad (5)$$

该简化方程由悬臂梁的简化振动方程及简谐位移激励与简谐力激励之间的等效原则推导而来<sup>[14]</sup>, 其中  $M_{e,1}$  为悬臂梁的等效质量,  $K_{e,1}$  为悬臂梁的等效刚度, 等效刚度与等效质量的关系式为  $\omega_1^2 = K_{e,1}/M_{e,1}$ , 式中  $\omega_1$  为悬臂梁的一阶本征角频率.  $P_0$  为作用于悬臂梁自由端的简谐激振力幅度,  $\Omega$  为激振角频率,  $F_C(d)$  为针尖与样品间的相互作用模型, 这里将  $F_C(d)$  仍然取为 Hertz 接触模型.

将方程(5)按  $\zeta = \frac{y_l}{P_0/K_{e,1}}$ ,  $\tau = t\sqrt{K_{e,1}/M_{e,1}}$ ,  $\lambda = \Omega/\sqrt{K_{e,1}/M_{e,1}}$ ,  $\tilde{d} = \frac{d}{P_0/K_{e,1}}$  进行无量纲化, 得到无量纲化的方程为

$$\ddot{\zeta} + \zeta = \sin(\lambda\tau) + \frac{K_H P_0^{1/2}}{K_{e,1}^{3/2}} \tilde{d}^{3/2} \quad (6)$$

将方程(6)中表征样品力学性质的无量纲参数  $(K_H P_0^{1/2})/(K_{e,1}^{3/2})$  记为  $K_\alpha$ , 那么轻敲模式下无量纲化的振动方程表示为

$$\ddot{\zeta} + \zeta = \sin(\lambda\tau) + K_\alpha \tilde{d}^{3/2} \quad (7)$$

在  $\lambda = 0.8$  的情况下进行数值实验,  $K_\alpha$  分别取为 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 将样品从远离针尖处逐渐上移. 各几何关系如图 4 所示.

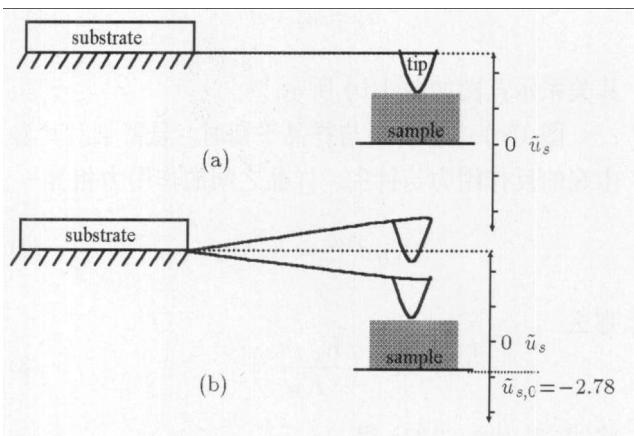


图 4 轻敲模式各几何量关系示意图

Fig.4 Geometric relation in tapping model

图4中,  $\tilde{u}_s = u_s/(P_0/K_{e,1})$  为无量纲的样品位置,  $\tilde{u}_s = 0$  处为样品与静态的悬臂梁顶端针尖处于无力接触状态的位置, 如图4(a)所示, 与第1节中定义一致。由方程(7)可以计算得到, 没有样品作用时悬臂梁自由端的无量纲振动解为  $\zeta = \tilde{A}_1 \sin(0.8\tau)$ , 其中  $\tilde{A}_1 = 2.78$ , 那么样品表面与振动状态的悬臂梁顶端的针尖刚接触时样品的位置为  $\tilde{u}_{s,0} = -2.78$ , 如图4(b)所示。样品与针尖接触后继续上移并记录相应的悬臂梁自由端振幅的无量纲数值计算结果, 如图5所示。

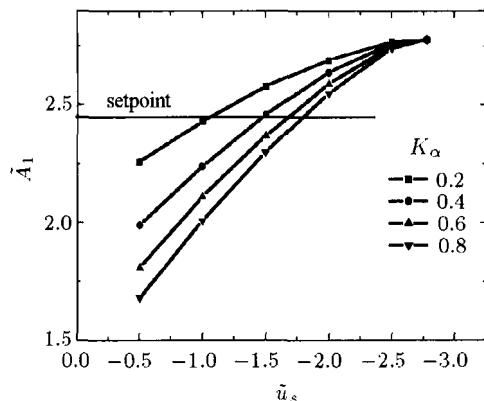


图5 样品力学性质不同时样品上移距离与悬臂梁振幅关系曲线  
Fig.5 Relation between amplitude of cantilever and moving distance of sample with different mechanical properties

图5中横坐标从右向左表示样品逐渐上移, 其相对值表示无量纲上移距离。纵坐标为对应位置悬臂梁自由端的无量纲一阶正弦振幅, 测量样品表面形貌时通过保持自由端振幅为一设定值(图5中setpoint所示, 轻敲模式测量形貌实验中setpoint为一设定的振幅值, 具体实验操作时需设定振幅值与无样品作用时悬臂梁自由端的振幅之比), 记录扫描过程中样品台的移动距离  $\tilde{u}_s - \tilde{u}_{s,0}$  来表征样品表面形貌, 如图6所示。

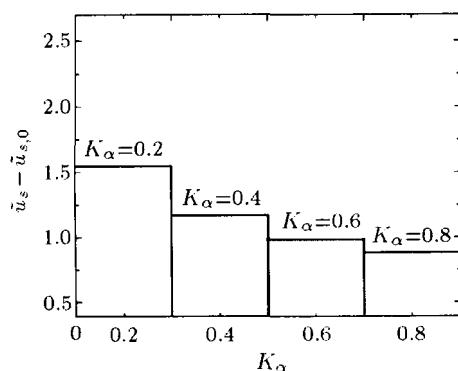


图6 轻敲模式下力学性质不同对形貌测量结果影响  
Fig.6 Sample properties effect on topography measurement in tapping model

图6中横坐标为表征样品力学性质的参数  $K_\alpha$ , 纵坐标为使悬臂梁自由端振幅达到设定值时样品台的补偿位移  $\tilde{u}_s - \tilde{u}_{s,0}$ 。结果表明, 采用轻敲模式进行测量, 对于表面平整的样品, 样品力学性质的不同也会导致样品表面形貌的测量结果出现阶梯状。

### 3 多频信号叠加修正样品表面弹性性质变化引起的形貌测量偏差

多阶频响(这里考虑前两阶)的悬臂梁自由端振动由如下方程描述<sup>[14]</sup>

$$M_{e,1}\ddot{y}_{1,l} + K_{e,1}y_{1,l} = P_0 \sin(\Omega t) + F(d) \quad (8)$$

$$M_{e,2}\ddot{y}_{2,l} + K_{e,2}y_{2,l} = P_0 \sin(\Omega t) + F(d) \quad (9)$$

其中,  $y_{i,l}(i=1,2)$  为悬臂梁自由端的第  $i$  阶振动分量;  $M_{e,2}$  和  $K_{e,2}$  为悬臂梁的二阶等效质量和等效刚度, 将方程(8)和方程(9)按  $\xi_{1,l} = \frac{y_{1,l}}{P_0/K_{e,1}}$ ,  $\xi_{2,l} = \frac{y_{2,l}}{P_0/K_{e,1}}$ ,  $\tau = t\sqrt{K_{e,1}/M_{e,1}}$ ,  $\lambda = \Omega/\sqrt{K_{e,1}/M_{e,1}}$ ,  $\tilde{d} = \frac{d}{P_0/K_{e,1}}$  进行无量纲化得

$$\ddot{\xi}_{1,l} + \xi_{1,l} = \sin(\lambda\tau) + K_\alpha \tilde{d}^{3/2} \quad (10)$$

$$\frac{M_{e,2}}{M_{e,1}}\ddot{\xi}_{2,l} + \frac{K_{e,2}}{K_{e,1}}\xi_{2,l} = \sin(\lambda\tau) + K_\alpha \tilde{d}^{3/2} \quad (11)$$

对于普通的等截面悬臂梁  $\omega_2/\omega_1 = 6.26$ , 其中  $\omega_1$  为悬臂梁一阶本征角频率,  $\omega_2$  为悬臂梁二阶本征角频率, 实验过程中激振角频率  $\Omega \approx \omega_1$ , 为了提高悬臂梁的二阶频响, 通过设计悬臂梁的结构使得  $\omega_2/\omega_1 = 1.67$ , 具体如何设计悬臂梁达到该目标将在本文后面进行论述。

采用如下参数进行数值实验  $M_{e,2}/M_{e,1} = 3.213/2.813 = 1.142$ ,  $K_{e,2}/K_{e,1} = 3.2$ ,  $\omega_2/\omega_1 = 1.67$ ,  $\lambda = 0.83$ , 同样, 针尖与样品间的接触模型  $F(d)$  采用 Hertz 接触模型。  $K_\alpha$  分别取为 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6。将样品从远离针尖处逐渐上移, 样品与针尖接触后继续上移并记录相应的悬臂梁自由端的振动信息, 进一步从振动信息中提取无量纲一阶正弦振动振幅  $\tilde{A}_1 = A_1/(P_0/K_{e,1})$  和二阶余弦振动振幅  $\tilde{A}_2 = A_2/(P_0/K_{e,1})$ , 如图7和图8所示。

图7及图8中, 横坐标从右向左表示样品台逐渐上移的过程, 纵坐标分别为无量纲一阶正弦振动振幅  $\tilde{A}_1$  和二阶余弦振动振幅  $\tilde{A}_2$ , 针尖与样品无接

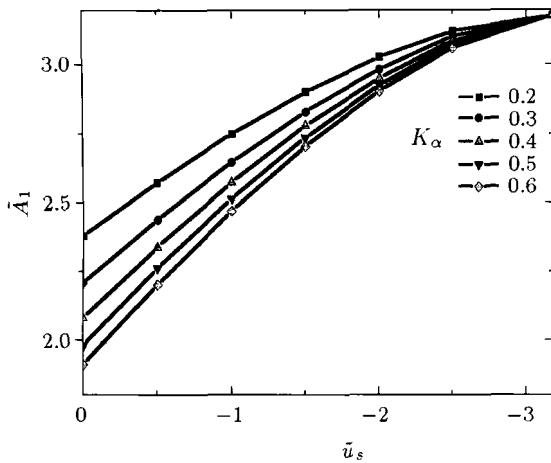


图 7 样品台逐渐上移时悬臂梁一阶正弦振动振幅变化曲线

Fig.7 Trend of first-sine vibration amplitude with sample approaching to tip

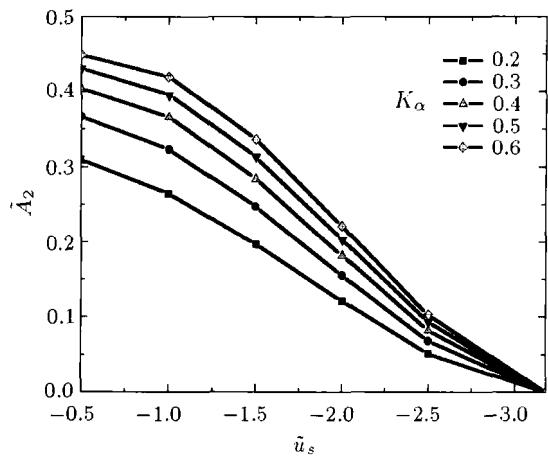


图 8 样品台逐渐上移时悬臂梁二阶余弦振动振幅变化曲线

Fig.8 Trend of second-cosine vibration amplitude with sample approaching to tip

触作用时  $\tilde{A}_1 = 3.18$ ,  $\tilde{A}_2 = 0$ , 将得到的  $\tilde{u}_s$ - $\tilde{A}_1$  与  $\tilde{u}_s$ - $\tilde{A}_2$  信号按某种方式进行组合就可以得到  $\tilde{u}_s$ - $f(\tilde{A}_1, \tilde{A}_2)$  曲线, 其中  $f(\tilde{A}_1, \tilde{A}_2)$  为用于形貌测量的叠加信号, 更进一步将叠加信号的形式取为  $f(\tilde{A}_1, \tilde{A}_2) = \alpha \tilde{A}_1 + \tilde{A}_2$ , 其中  $\alpha$  值用来表征叠加信号中各阶振幅的权重。 $\alpha = 0.8$  时的  $\tilde{u}_s$ - $f(\tilde{A}_1, \tilde{A}_2)$  曲线如图 9 所示。

图 9 中横坐标从右向左表示样品逐渐上移的过程, 纵坐标为叠加信号值  $f(\tilde{A}_1, \tilde{A}_2)$ , 从图中读出, 不同  $K_\alpha$  值的  $\tilde{u}_s$ - $f(\tilde{A}_1, \tilde{A}_2)$  曲线会近似相交于一点, 如果将 setpoint 设置于该点的话就会得到近似无偏差的样品表面形貌。对于  $\alpha = 0.56$  时的  $\tilde{u}_s$ - $f(\tilde{A}_1, \tilde{A}_2)$  曲线如图 10 所示。

与图 9 类似, 图 10 中不同  $K_\alpha$  值的  $\tilde{u}_s$ - $f(\tilde{A}_1, \tilde{A}_2)$  曲线也会近似相交于一点, 如果将 setpoint 设置于

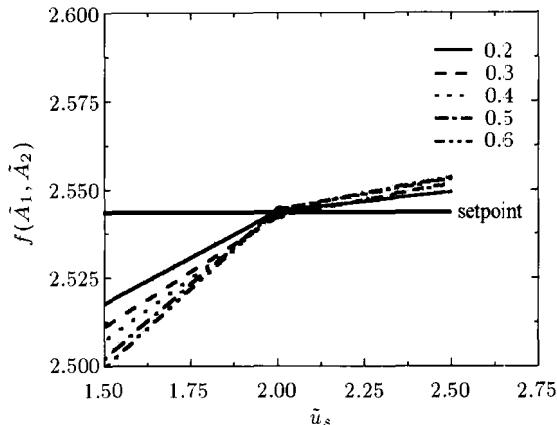


图 9 样品台逐渐上移时力学性质不同的样品对应的  $\tilde{u}_s$ - $f(\tilde{A}_1, \tilde{A}_2)$  曲线 ( $\alpha = 0.8$ )

Fig.9 Trend of mixed amplitude signal with sample approaching to tip ( $\alpha = 0.8$ )

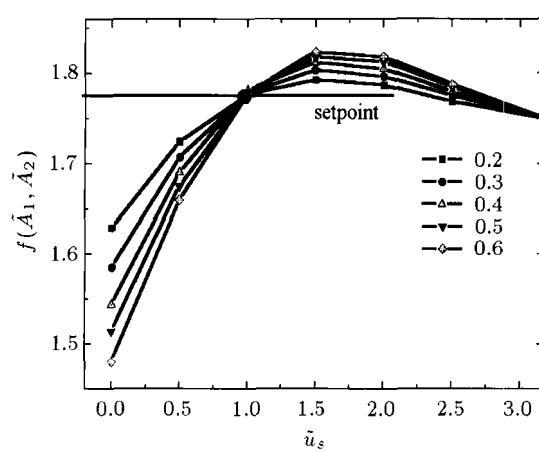


图 10 样品台逐渐上移时力学性质不同的样品对应的  $\tilde{u}_s$ - $f(\tilde{A}_1, \tilde{A}_2)$  曲线 ( $\alpha = 0.56$ )

Fig.10 Trend of mixed amplitude signal with sample approaching to tip ( $\alpha = 0.56$ )

该点的话就会得到近似无偏差的样品表面形貌。更进一步的数值计算可以得到对于上述由参数  $K_{e,2}/K_{e,1} = 3.2$ ,  $M_{e,2}/M_{e,1} = 1.142$ ,  $\lambda = 0.83$  描述的悬臂梁, 为了避免力学性质变化引起形貌测量偏差,  $\alpha$  值与 setpoint 值之间应满足表 1 所列对应关系。

表 1 避免形貌测量偏差参数设置表

Table 1 Relation of parameters for avoiding measurement error

$\alpha$	setpoint / $A_0$	$\alpha$	setpoint / $A_0$
0.25	0.29	0.71	0.71
0.35	0.38	0.80	0.80
0.55	0.56	0.90	0.90

表1中 $\alpha$ 为叠加信号中各阶所占比例, setpoint/ $A_0$ 的值为形貌测量过程中对叠加信号所设定的恒定值与样品远离针尖时悬臂梁自由端的振幅之比, 只要按表1设置信息叠加方式及setpoint值, 即可近似避免样品表面力学性质变化引起形貌测量偏差。

#### 4 调节悬臂梁各阶本征频率相对值的方法

前面提到提取高阶信号需要悬臂梁的二阶本征频率为一阶本征频率的2倍左右, 而普通悬臂梁二阶本征频率是一阶本征频率的6倍多, 本文采用在距离悬臂梁固定端 $l_m$ 处加刚度为 $K_{ad}$ 的弹簧来达到需要的调节目标, 示意图如图11所示。

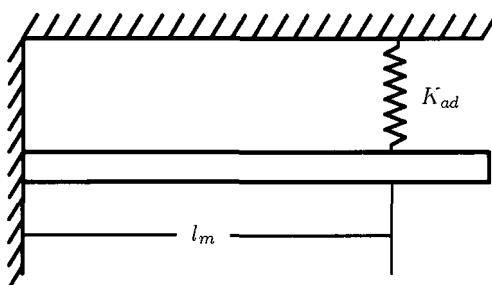


图11 加集中弹簧悬臂梁示意图

Fig.11 Schematic diagram of cantilever with added spring

叠加一个弹簧后, 对悬臂梁的一阶振动和二阶振动影响是不一样的, 如果能适当的放置其位置就可以使其对二阶本征频率没有影响(恰好放置于二阶形函数的零点位置), 却使得一阶本征频率提高很多(相当于提高了刚度), 从而使得一、二阶本征频率相对值发生改变, 也就达到了调节目标。

图11所示结构振动方程可用方程(12)来描述

$$EI\frac{\partial^4 y}{\partial x^4} + \delta(x - l_m)K_{ad}y(x, t) + \rho S\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = 0$$

固定端(左端)边界条件

$$y(0, t) = 0, \quad y'(0, t) = 0$$

自由端(右端)边界条件

$$y''(l, t) = y'''(l, t) = 0 \quad (12) \quad \text{其中}$$

$$A_{11} = \frac{\mu^3(\cos \mu + \cosh \mu) + \frac{1}{2}\alpha_K(\cos \mu\xi_m - \cosh \mu\xi_m)[\sin(\mu - \mu\xi_m) + \sinh(\mu - \mu\xi_m)]}{2\mu^3}$$

$$A_{12} = \frac{\mu^3(\sin \mu + \sinh \mu) + \frac{1}{2}\alpha_K(\sin \mu\xi_m - \sinh \mu\xi_m)[\sin(\mu - \mu\xi_m) + \sinh(\mu - \mu\xi_m)]}{2\mu^4}$$

$$A_{21} = \frac{\mu^3(-\sin \mu + \sinh \mu) + \frac{1}{2}\alpha_K(\cos \mu\xi_m - \cosh \mu\xi_m)[\cos(\mu - \mu\xi_m) + \cosh(\mu - \mu\xi_m)]}{2\mu^2}$$

其中,  $x$ 为悬臂梁上各点距固定端的距离;  $y(x, t)$ 是悬臂梁上距原点 $x$ 处的截面在 $t$ 时刻的横向位移;  $E$ 为悬臂梁的弹性模量;  $\rho$ 为悬臂梁密度;  $S$ 为悬臂梁横截面面积;  $I = bh^3/12$ 为悬臂梁横截面惯性矩, 式中 $b$ 为矩形截面的宽度,  $h$ 为矩形截面的高度;  $l$ 为悬臂梁长度。

采用分离变量法求解, 令 $y(x, t) = \varphi(x)Y(t)$ , 则方程(12)转化为

$$\begin{aligned} EI\varphi^{(4)}(x)Y(t) + \delta(x - l_m)K_{ad}\varphi(x)Y(t) + \\ \rho S\varphi(x)Y''(t) = 0 \end{aligned} \quad (13)$$

进一步得到

$$\frac{EI\varphi^{(4)}(x) + \delta(x - l_m)K_{ad}\varphi(x)}{\rho S\varphi(x)} = -\frac{Y''(t)}{Y(t)} \quad (14)$$

方程(14)等于常数 $\omega^2$ , 那么

$$EI\varphi'''(x) + [\delta(x - l_m)K_{ad} - \omega^2\rho S]\varphi(x) = 0 \quad (15)$$

由振动方程 $Y''(t) + \omega^2Y(t) = 0$ 可以知道 $\omega$ 为悬臂梁的本征角频率, 将方程(15)按如下方式进行无量纲化:  $\xi = \frac{x}{l}$ ,  $\eta = \frac{\varphi(x)}{l}$ . 无量纲化后得到方程(16)

$$\eta^{(4)}(\xi) - [\mu^4 - \alpha_K\delta(\xi - \xi_m)]\eta(\xi) = 0 \quad (16)$$

其中,  $\mu^4 = (\omega^2\rho Sl^4)/EI$ ,  $\alpha_K = K_{ad}/(EI/l^3)$ ,  $\xi_m = l_m/l$ . 边界条件

$$\eta(0) = 0, \quad \eta'(0) = 0, \quad \eta''(1) = 0, \quad \eta'''(1) = 0 \quad (17)$$

解方程(16)的过程中,  $\mu$ 必须满足如下关系式

$$\begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{vmatrix} = 0 \quad (18)$$

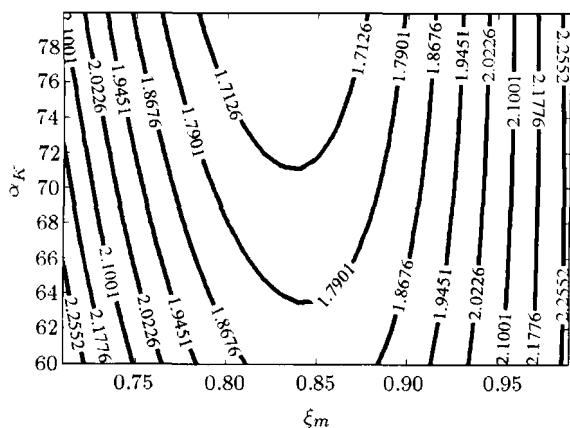
$$A_{22} = \frac{\mu^3(\cos \mu + \cosh \mu) + \frac{1}{2}\alpha_K(\sin \mu \xi_m - \sinh \mu \xi_m)[\cos(\mu - \mu \xi_m) + \cosh(\mu - \mu \xi_m)]}{2\mu^3}$$

方程 (18) 可以表示为

$$F_u(\mu, \xi_m, \alpha_K) = \begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{vmatrix} = 0 \quad (19)$$

其中,  $\xi_m$  和  $\alpha_K$  为可调参数;  $\mu$  为变量.

基于上述分析得到了表示附加弹簧位置和刚度的参数  $\xi_m, \alpha_K$  对悬臂梁各阶本征角频率的影响关系式, 采用  $\omega_1$  表征悬臂梁一阶本征角频率,  $\omega_2$  表征悬臂梁二阶本征角频率,  $\mu_1$  表征方程 (19) 的最小正解,  $\mu_2$  表征方程 (19) 的第二小正解. 由式 (19) 计算得到参数  $(\xi_m, \alpha_K)$  空间内  $\omega_2/\omega_1$  即  $(\mu_2/\mu_1)^2$  的等高线, 如图 12 所示.



$94.01 \mu\text{m}$ ,  $K_{ad} = \alpha K \frac{EI}{l^3} = 2.500 \text{ N/m}$ , 计算得到  $\frac{\omega_2}{\omega_1} = \frac{2.264 \times 10^6}{1.25 \times 10^6} = 1.811$ , 与理论计算的结果一致, 验证了理论方法的正确性.

## 6 该设计方法对测量精度的影响

原子力显微镜使用过程中是通过光路系统测量其悬臂梁挠度来进行实验的. 那么原子力显微镜的测量精度将取决于单位力变化引起悬臂梁自由端的挠度变化量. 悬臂梁自由端振幅与激振力幅度的关系为<sup>[14]</sup>

$$A = \frac{1}{1 - \lambda^2} \frac{P_0}{K_{e,1}} \quad (20)$$

那么

$$\Delta A = \frac{1}{1 - \lambda^2} \frac{\Delta P_0}{K_{e,1}} \quad (21)$$

因此测量精度将依赖于悬臂梁结构的刚度. 本文所述的设计方法虽然达到了要求的本征频率相对值, 但是该设计方法是靠提高一阶本征频率值来达到目的的, 加集中弹簧后悬臂梁的一阶本征角频率由  $\omega_1$  增加为  $\omega_{1,d}$ , 这就使得悬臂梁的刚度相应增加, 从而降低了原子力显微镜的测量精度.

为避免精度降低, 需要选取刚度较低的悬臂梁进行设计加工, 使得加工后的悬臂梁刚度符合精度要求. 其关系式如(22)所示

$$\frac{K_{e,1}}{\omega_1^2} = \frac{K_{e,1,d}}{\omega_{1,d}^2} \quad (22)$$

其中,  $K_{e,1}$  和  $\omega_1$  为不加弹簧时原悬臂梁的等效刚度及一阶本征角频率;  $K_{e,1,d}$ ,  $\omega_{1,d}$  为加弹簧后悬臂梁的等效刚度及一阶本征角频率. 加弹簧后悬臂梁刚度值  $K_{e,1,d}$  由测量精度及其他实验要求来决定,  $\omega_1^2/\omega_{1,d}^2$  则由外加弹簧的位置及刚度值决定, 那么根据式(22)即可确定需要选取的悬臂梁刚度为

$$K_{e,1} = K_{e,1,d} \frac{\omega_1^2}{\omega_{1,d}^2} \quad (23)$$

具体到本文所述实例

$$K_{e,1} = K_{e,1,d} \frac{\omega_1^2}{\omega_{1,d}^2} = 0.084 K_{e,1,d} \quad (24)$$

也就是说, 如果按精度及其他实验要求需要一个刚度为  $K_{e,1,d}$  的悬臂梁来进行实验的话, 那么只需要选取刚度为其 0.084 倍的悬臂梁来按第 4 节方法进行设计即可既满足激发高阶频响的要求又同时不影响实

验测量精度, 鉴于悬臂梁的刚度是悬臂梁的厚度 / 长度比的三次函数, 因此所要设计的悬臂梁的厚度 / 长度比约为原悬臂梁厚度 / 长度比的  $0.084^{1/3} \approx 0.438$  倍.

## 7 相关参数的标定方法

由方程(10)及方程(11)可以知道, 为避免形貌测量偏差,  $\alpha$  与 setpoint 值之间需要满足的对应关系由  $\lambda$ ,  $M_{e,2}/M_{e,1}$ ,  $K_{e,2}/K_{e,1}$  3 个参数确定. 如果能通过一定方法标定具体某次实验所用悬臂梁的  $\lambda$ ,  $M_{e,2}/M_{e,1}$ ,  $K_{e,2}/K_{e,1}$  3 个参数, 之后再采用本文所述的数值方法给出该次实验的  $\alpha$  与 setpoint 值之间的对应关系, 进一步就可以根据 setpoint 值调节叠加信号比例作为形貌测量信号即可避免样品力学性质变化引起的形貌测量偏差. 下面就进一步研究如何标定相关的参数, 含阻尼的悬臂梁振动模型描述如下<sup>[14]</sup>

$$EI \frac{\partial^4 y}{\partial x^4} + \gamma \frac{\partial y}{\partial t} + \rho S \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = \delta(x - l) P_0 \sin(\Omega t) \quad (25)$$

根据分离变量法可以得到激振频率为一阶本征频率时, 悬臂梁自由端振幅为

$$A_{\text{fir}} = \frac{P_0}{K_{e,1}} \frac{\rho S \omega_1}{\gamma} \quad (26)$$

激振频率为二阶本征频率时悬臂梁自由端振幅为

$$A_{\text{sec}} = \frac{P_0}{K_{e,2}} \frac{\rho S \omega_2}{\gamma} \quad (27)$$

那么将两式相比得到

$$\frac{K_{e,2}}{K_{e,1}} = \frac{A_{\text{fir}} \omega_2}{A_{\text{sec}} \omega_1} \quad (28)$$

而在实验中  $\omega_1$ ,  $A_{\text{fir}}$ ,  $\omega_2$ ,  $A_{\text{sec}}$  皆为可测量, 那么对于具体的悬臂梁即可得到  $K_{e,2}/K_{e,1}$  的值, 进一步由  $M_{e,2}/M_{e,1} = (K_{e,2}/K_{e,1})(\omega_1^2/\omega_2^2)$  得到  $M_{e,2}/M_{e,1}$  的值,  $\lambda$  的值为实验操作中的设置值. 由此, 从理论上分析了对于某次实验得到  $\lambda$ ,  $M_{e,2}/M_{e,1}$ ,  $K_{e,2}/K_{e,1}$  三个参数的值的可行性.

采用 ABAQUS 计算来验证式(28), 有限元计算采用悬臂梁的参数如下所示:

长  $l = 120 \mu\text{m}$ , 宽  $b = 20 \mu\text{m}$ , 厚  $h = 0.6 \mu\text{m}$ , 密度  $\rho = 2.33 \text{ g/cm}^3$ , 弹性模量  $E = 170 \text{ GPa}$ , 泊松比  $\nu = 0.3$ , 激振力幅度  $A = 5.31 \text{ nN}$ .

经有限元计算得到振幅结果及一阶二阶本征角频率值及对应的振幅如下

$$\left. \begin{array}{l} A_{\text{fir}} = 58.5 \text{ nm} \\ A_{\text{sec}} = 9.45 \text{ nm} \\ \omega_1 = 0.36121 \times 10^6 \text{ rad/s} \\ \omega_2 = 2.2636 \times 10^6 \text{ rad/s} \end{array} \right\} \quad (29)$$

代入式(28)

$$\frac{K_{e,2}}{K_{e,1}} = \frac{A_{\text{fir}}\omega_2}{A_{\text{sec}}\omega_1} = \frac{2.2636 \times 58.5}{0.36121 \times 9.45} = 38.79 \quad (30)$$

而对于矩形悬臂梁其理论解

$$\frac{K_{e,2}}{K_{e,1}} = \frac{\omega_2^2 \rho S \int_0^l \varphi_2^2(x) dx / \varphi_2(l)}{\omega_1^2 \rho S \int_0^l \varphi_1^2(x) dx / \varphi_1(l)} = 39.27 \quad (31)$$

与前述方法得到的结果基本一致。

那么对于具体的某次实验，就可以确定  $\lambda$ ,  $M_{e,2}/M_{e,1}$ ,  $K_{e,2}/K_{e,1}$  3 个参数。3 节中的数值实验仅仅给出了在参数  $M_{e,2}/M_{e,1} = 3.213/2.813 = 1.142$ ,  $K_{e,2}/K_{e,1} = 3.2$ ,  $\lambda = 0.8$  下  $\alpha$  与 setpoint 值之间的对应关系(表 1 所示)，在将来的实验应用中，针对具体所用悬臂梁可按本节所述标定方法确定  $\lambda$ ,  $M_{e,2}/M_{e,1}$ ,  $K_{e,2}/K_{e,1}$  3 个参数，之后采用式(10)和式(11)所述的数值实验给出该次实验的  $\alpha$  与 setpoint 值之间的对应关系，按此对应关系设定 setpoint 值及调节叠加信号比例，即可避免样品表面力学性质变化引起的形貌测量偏差。

## 8 结语

本文通过理论分析及数值计算研究了采用 AFM 测量样品表面形貌时，测量偏差的根源是针尖与样品间的作用力使得在样品表面不同区域产生了不同的变形，进一步研究表明通过叠加弹簧的结构设计可以使悬臂梁本征频率相对值达到需要的要求以便于提取高频信号，在此基础上通过数值计算阐明了采用高频与低频叠加信号作为新的测量信号可以近似避免形貌测量偏差，最后针对具体悬臂梁提出了参数标定方法，为以后的实验工作提供了一定的依据。

## 参 考 文 献

- 1 Binnig G, Quate CF. Atomic force microscope. *Physical Review Letters*, 1986, 56(9): 930-933
- 2 Erlandsson R, Olsson L, Martensson P. In equivalent atoms and imaging mechanisms in ac-mode atomic-force microscopy of Si(111)7×7. *Physical Review B*, 1996, 54(12): R8309-R8312
- 3 Hitomi J, Ogura S, Umemoto T, et al. Atomic force microscopy in histology and cytology. *Archives of histology and cytology*, 1996, 59(5): 421-431
- 4 李喜德. 探针实验力学. 实验力学, 2007, 22(3): 217-228 (Li Xide. Probe experimental mechanics. *Journal of Experimental Mechanics*, 2007, 22(3): 217-228(in Chinese))
- 5 李凯, 张青川, 刘红. 微梁传感研究大分子构象转变. 实验力学, 2007, 22(3): 395-400 (Li Kai, Zhang Qingchuan, Liu Hong. Investigation on conformation transition of macromolecules using microcantilever sensing. *Journal of Experimental Mechanics*, 2007, 22(3): 395-400(in Chinese))
- 6 Sahin O, Quate CF, Solgaard O, et al. Resonant harmonic response in tapping-mode atomic force microscopy. *Physical Review B*, 2004, 69(16): 165416-1-9
- 7 Melikyan H, Sargsyan T, Babajanyan A, et al. Hard disk magnetic domain nano-spatial resolution imaging by using a near-field scanning microwave microscope with an AFM probe tip. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2009, 321: 2483-2487
- 8 Ohnesorge F, Binnig G. True atomic resolution by atomic force microscopy through repulsive and attractive forces. *Science*, 1993, 260(5113): 1451-1456
- 9 Liang J, Scoles G. Nanografting of alkanethiols by tapping mode atomic force microscopy. *Langmuir*, 2007, 23(11): 6142-6147
- 10 Solares SD. Frequency and force modulation atomic force microscopy: low-impact tapping-mode imaging without bistability. *Measurement Science and Technology*, 2007, 18(7): L9-L14
- 11 Wang Y, Song R, Li YS, et al. Understanding tapping-mode atomic force microscopy data on the surface of soft block copolymers. *Surface Science*, 2003, 530(3): 136-148
- 12 Yang CW, Hwang IS, Chen YF, et al. Imaging of soft matter with tapping-mode atomic force microscopy and non-contact-mode atomic force microscopy. *Nanotechnology*, 2007, 18(8): 084009-1-8
- 13 Hertz J. On the contact of elastic solids. *Journal für die reine und angewandte Mathematik*, 1882, 92: 156-171
- 14 Geradin M, Rixen D. Mechanical Vibrations Theory and Application to Structural Dynamics. Paris: Masson, New York: Wiley, 1994

(责任编辑: 陶彩军)

## ANALYSIS OF TOPOGRAPHY MEASUREMENT ERROR IN ATOMIC FORCE MICROSCOPE (AFM) AND ITS REVISION METHOD<sup>1)</sup>

Xu Jinming\*,† Bai Yilong\*,‡

\*(*State Key Laboratory of Nonlinear Mechanics, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*)

†(*Graduate School of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*)

**Abstract** In measuring topography of sample, the interaction between tip and sample will cause the deformation on the sample surface and the deformations will be different in the regions with different mechanical property. Furthermore, the deformations will cause non-negligible error in topography measurement. Theory analyses are carried out on this measurement error and further numerical research shows that mixed signals with high-frequency components are able to eliminate the measurement error. However, it is difficult to measure high-frequency signal for normal cantilever. In order to gain a proper high-frequency signal, a modified cantilever is introduced. The new designed cantilever can help us to adjust the relative values of eigen-frequencies of a cantilever and then enhance the high-frequency signal.

**Key words** AFM, topography measurement error, high-frequency signal, structural design, relative values of eigen-frequencies

Received 29 April 2010, revised 22 June 2010.

1) The project supported by the National Natural Science Foundation of China (10932011).

2) E-mail: baiyl@lnm.imech.ac.cn