

原子力显微镜探针耦合变形下的微观扫描力研究*

张向军 孟永钢 温诗铸

(清华大学摩擦学国家重点实验室, 北京 100084)

(2003 年 2 月 26 日收到, 2003 年 7 月 2 日收到修改稿)

原子力显微镜 (AFM) 的微探针系统是典型的微机械构件, 它在接触扫描过程处于耦合变形状态. 采用数值模拟方法探究恒力模式下探针耦合变形对微观扫描力信号、微观形貌信号的影响. 研究表明, AFM 的恒力模式扫描中, 法向扫描力并不是恒定大小, 与轴向扫描力存在耦合作用. 在粗糙峰峰值增加阶段, 二力均增加; 在粗糙峰峰值减小阶段, 二力均减小. 该耦合作用随形貌坡度、针尖长度等增加而加强. 微观形貌的测试信号和横向扫描侧向力信号受探针耦合变形影响较小, 但侧向力与形貌斜率密切相关, 且其极值点与形貌极值点存在位置偏差. 这些结果均与原子力显微镜的摩擦信号测试结果一致.

关键词: 原子力显微镜, 探针悬臂梁, 耦合变形, 扫描力

PACC: 0779

1. 引 言

原子力显微镜 (AFM) 是微纳米研究最核心的工具之一, 是微纳米尺度下探究材料、表面的性质, 继而进行微纳米操纵的基本手段^[1-5]. 在摩擦学领域, AFM 也已经成为研究微观形貌、微观摩擦的主要手段. AFM 的接触工作模式 (contact mode) 仍是纳米摩擦、纳米压痕测量、接触力测量的主要方式.

AFM 的基本原理是将针尖和探测表面间微小的作用力转换为与针尖相连的微悬臂梁 (探针) 的变形, 该变形通过光路放大, 转变为可输出的电信号. 由于探针针尖非常尖细 (几个或几十个纳米), 微悬臂梁非常柔软 (弹性常数为几个到几十个牛·米⁻¹), 所以 AFM 能在原子尺度上反映接触表面的形貌和作用力. 其核心部件是能在微小外力 (nN 级) 作用下变形的微悬臂梁, 以及连接在其端部的针尖, 二者合称探针系统.

目前, AFM 已经能够获得非常精确的形貌信息 (精确到 nm), 但在微尺度力的测量方面, 尤其是动态扫描中, 只能定性观测扫描力、摩擦力的相对大小, 难以提供定量信息, 而且测试信号还常常存在偏差、假象, 甚至错误. 其根本原因之一在于, 对微探针的各种复杂受力与变形、以及运动规律的掌握尚不

完全, 这也一直是所有开发和应用 AFM 的研究人员关注的焦点.

现有的研究主要采用微悬臂梁的弹性常数 (spring constant) 来涵盖其变形规律, 分别采用法向弹性常数、侧向弹性常数表示梁的弯曲变形规律和侧向扭转规律. 已有大量的研究从理论分析^[6-8]、数值模拟^[6]和实验的角度^[6, 9-11]来确定微探针系统的弹性常数, 并详细研究了针尖形状^[10, 12]、针尖偏差^[7, 13]、微悬臂几何参数^[11]、材料^[7]、表面涂层^[11]等的影响, 以期能准确掌握微探针系统的变形规律, 进而精确获取针尖与表面间的作用力信息.

但是实际接触扫描过程中, 由于粗糙峰曲率、斜率, 以及表面粘附等表面效应的作用, 针尖与表面的作用十分复杂, 针尖所受的力是空间力, 从而使微探针悬臂梁处于耦合变形状态, 并非单纯的法向弯曲或侧向扭转, 各方向的扫描力也发生耦合. 所以结合微悬臂系统的真实受力状态, 研究其耦合变形时的扫描力变化就显得尤为重要和迫切.

也有研究者^[14]从 AFM 探测系统光路不对中的角度, 研究了微观形貌信号中侧向信号的耦合作用, 建议在高度低于 10 nm 左右的微观形貌的信号处理中加入源自侧向信号的耦合修正因子. 但目前结合微探针耦合变形, 针对扫描力变化的研究尚未见报道.

* 国家自然科学基金重点项目 (批准号: 50135040) 和国家博士后科学基金 (批准号: 2002-17) 资助的课题.

本文将 AFM 的微探针系统作为典型的微机械构件,结合其在接触扫描过程中的耦合变形规律,探究探针耦合变形对扫描力信号、微观形貌测试信号的影响,为 AFM 的信号解释、微观力的定量确定、消除测试假象等提供依据。

2. 恒力模式下微探针系统的耦合变形分析

AFM 接触模式的扫描方向主要有沿探针轴向(长度方向)和侧向(垂直于长度方向)两种。无论哪种扫描方式,针尖的受力都可分为法向力 F 、轴向力 N 和侧向力 M 。探针将同时发生法向弯曲和侧向扭转。目前 AFM 中采用的 4 相位光电探测器可以分别探测到梁端部法向弯曲转角,以及侧向扭转角的大小。由于大多 AFM 都采取恒力方式,所以反馈电路保证微梁端部的法向弯曲转角恒定,并与扫描初始设定的 setpoint 电压值对应。

2.1. 法向弯曲变形中的耦合作用

扫描过程中,梁的法向弯曲变形是针尖法向力 F 和轴向力 N 耦合作用的结果,如图 1。由于微悬臂梁厚度非常小,梁长厚比悬殊,针尖长度 h 又相对较大,所以轴向力 N 易于引起弯曲变形,并随弯曲挠度的增加进一步增大作用弯矩。

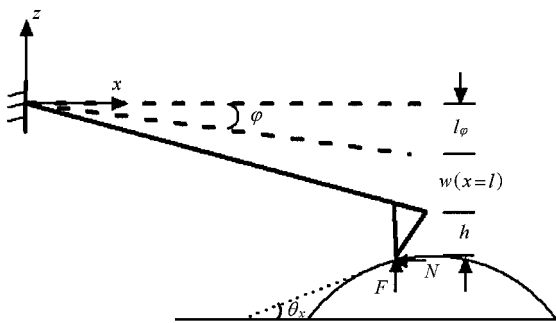


图 1 轴向扫描时探针梁的受力分析图

如图 1 所示,探针扫过表面粗糙峰的高度增加阶段时,设梁的法向位移为 $w(x)$,可以得到在距梁端部 x 处截面上的弯矩为

$$M_y(x) = F(l-x)\cos\varphi - N(l-x)\sin\varphi - Nh - Nu(x), \quad (1)$$

其中 l 为探针长度, φ 为探针向样品的倾角, h 为针尖高度。当针尖扫过粗糙峰高度减小阶段时,弯矩方

程中的 N 用 $-N$ 代入。

由于薄梁的几何方程存在^[15],

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} = \frac{(1-\nu^2)M_y(x)}{EI_y}, \quad (2)$$

其中 E, ν 为微梁材料的弹性模量和泊松比, I_y 为梁的惯性矩,等于 $bt^3/12$, b 为矩形梁的宽度, t 为梁厚度。本文的计算算例为: $l = 200\mu\text{m}$, $t = 1\mu\text{m}$, $b = 20\mu\text{m}$, $E = 169\text{GPa}$, $\nu = 0.27$ 。

令系数

$$S = \frac{(1-\nu^2)}{EI_y},$$

所以有

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + SNu(x) = SF(l-x)\cos\varphi - SM(l-x)\sin\varphi - SNh. \quad (3)$$

固定端的边界条件为

$$u(0) = 0; \quad \left. \frac{du(x)}{dx} \right|_{x=0} = 0. \quad (4)$$

由此,可以求出耦合力作用下微探针端部转角 ϕ 和作用力 F 及 N 的关系,又由于

$$N = F\tan\theta_x, \quad (5)$$

其中 θ_x 为轴向扫描线上针尖-样品接触点的斜率,则在恒力模式下,有

$$\phi(F, N, \theta_x, h, l, \dots) = \text{const}. \quad (6)$$

可见恒力模式扫描中随着微观形貌的不同,法向力 F 不再是恒定值,轴向力 N 也相应地发生变化。而目前的 AFM 信号分析中认为法向力保持恒定,而且

$$F = K\delta_0 = \text{const}. \quad (7)$$

K 为微探针法向变形的弹性常数,理论上 $K = 3EI_y/l^3$, δ_0 为扫描初始设定对应的挠度值。

2.2. 侧向扭转变形中的耦合作用

由于微观形貌粗糙峰是三维的凸起,所以无论轴向扫描或侧向扫描,空间作用力使探针悬臂梁同时发生弯曲变形和侧向扭转变形。其中侧向扭转变形对应 AFM 的侧向力信号,主要由侧向力 M 单独引起。但侧向力 M 也随针尖的法向压力改变,存在

$$M = F\tan\theta_y, \quad (8)$$

其中 θ_y 为侧向扫描线(垂直于图 1 中轴向扫描线的方向)上针尖-样品接触点的斜率。结合(6)式可见,由于弯曲变形中的耦合作用, F 的变化也会影响到扫描侧向力信号。

3. AFM 扫描力的耦合变化

3.1. 轴向扫描时扫描力的耦合变化

结合(5)和(6)式,给定探针结构及 δ_0 ,针对不同微观形貌特点,可以模拟出恒力模式下轴向扫描力的变化曲线.图2为数值模拟结果.图2(a)为扫描线上的形貌变化曲线,(b)为对低粗糙度表面的模拟结果,(c)为高粗糙度表面的结果,(d)为增加探针针尖长度的结果.分析图形可见:

1)随着样品表面形貌和斜率的变化,法向扫描力与轴向扫描力均发生波动.对低斜率形貌,扫描力波动幅值有限;对高斜率形貌,扫描力波动幅值增

加,其中轴向力的幅值增加迅速.文中进一步研究了形貌坡度与扫描力幅值的关系,表明扫描力与斜率密切相关.

2)在扫描线上的粗糙峰高度增加阶段,法向力和轴向力对微探针悬臂梁弯曲变形的作用相互抵消,所以耦合作用的结果是法向力、轴向力均增加幅值.在粗糙峰高度减小阶段,法向力与轴向力对弯曲变形的作用一致,耦合作用的结果是法向力、轴向力均减小幅值.这样扫描力信号在粗糙峰峰值的左右阶段出现较大的幅值差.

3)随着针尖长度的增加,耦合作用加剧,则由图2(d)可见,粗糙峰幅值增加阶段轴向力的幅值也加大,由128nN增加到145nN.而粗糙峰幅值减小阶段轴向力改变不大,仍约为52nN.

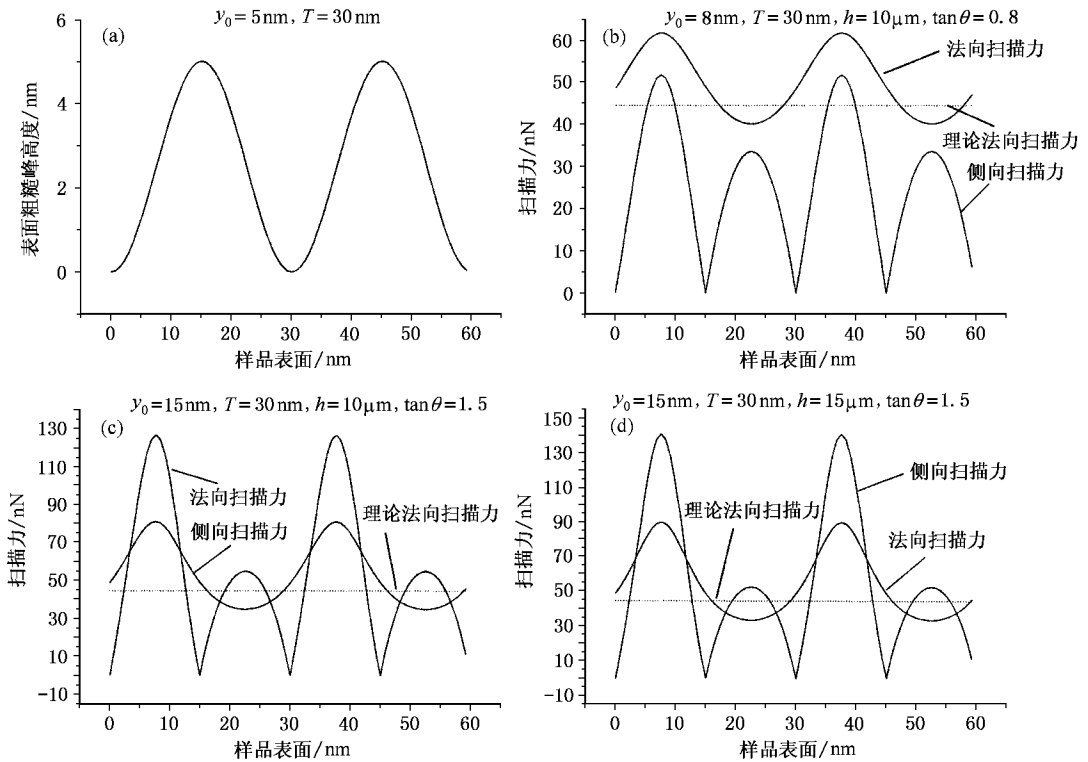


图2 轴向扫描时扫描力的耦合变化 y_0 为粗糙峰微凸体的高度, T 为微凸体的波长, h 为探针针尖长度, $\tan\theta$ 为粗糙峰最大斜率值. 为了比较幅值, 粗糙峰峰值减小阶段的轴向扫描力信号由负号变为正号

3.2. 侧向扫描时扫描力的耦合变化

侧向扫描是 AFM 研究微观摩擦的主要工作方式.图3为同一形貌分别沿图4中粗糙峰微凸体的1-1'线和2-2'线的扫描力曲线.图3(a)为法向扫描力的比较,均为正值,但幅值相差较大;图3(b)为轴向扫描力的比较,1-1'线和2-2'线符号相反,且幅值

有差异;图3(c)为1-1'线和2-2'线上侧向扫描力的比较,有细微的不同,但差别不大.这说明微探针耦合变形对侧向力信号影响不大,侧向力信号的主要影响因素是表面粗糙峰的斜率.

AFM 侧向力信号在微观摩擦研究中有重要意义,决定了微观摩擦的特点. Bhushan 等人^[16]的微观摩擦测试结果显示, AFM 侧向力信号与形貌斜率变

化对应,这与本文的模拟结果一致.但值得一提的是,AFM 的侧向力是否就代表微观摩擦力仍是一个值得商榷的问题,有关研究将另文专述^[17].

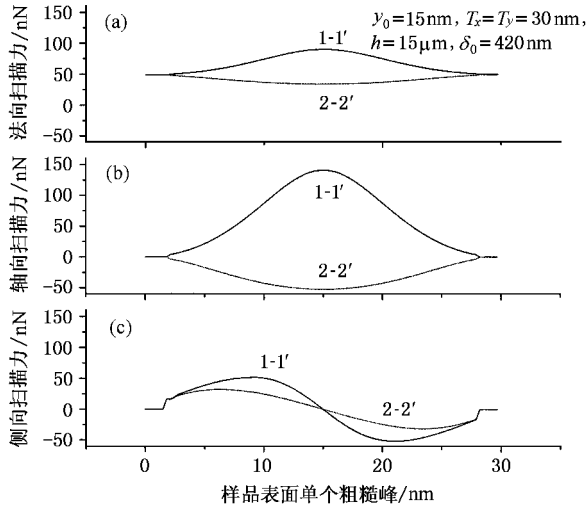


图3 AFM 侧向扫描时扫描力的耦合变化 y_0 为粗糙峰微凸体的高度, h 为探针针尖的长度, T_x 和 T_y 为粗糙峰在图 4 中 x 和 y 扫描方向的形貌波长, δ_0 为扫描时探针的初始设置变形量

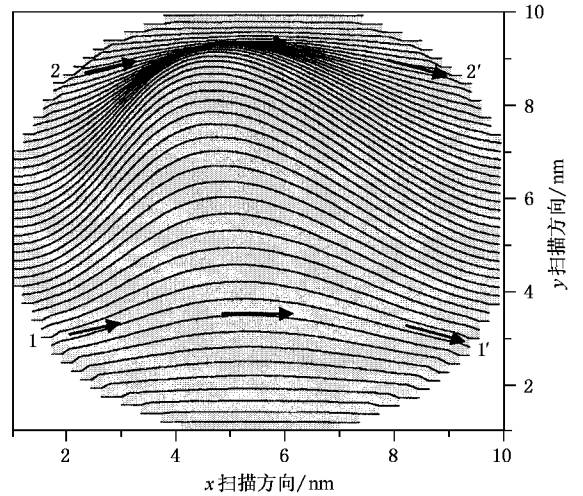


图4 样品表面粗糙峰微凸体的扫描曲线

3.3. 扫描力的三维耦合变化

进而模拟出理想粗糙峰微凸体(图 4)侧向扫描时扫描力的三维信号.图 5(a)为法向扫描力的三维图像(b)为轴向扫描力的三维图像(c)为侧向扫描力的三维图像.

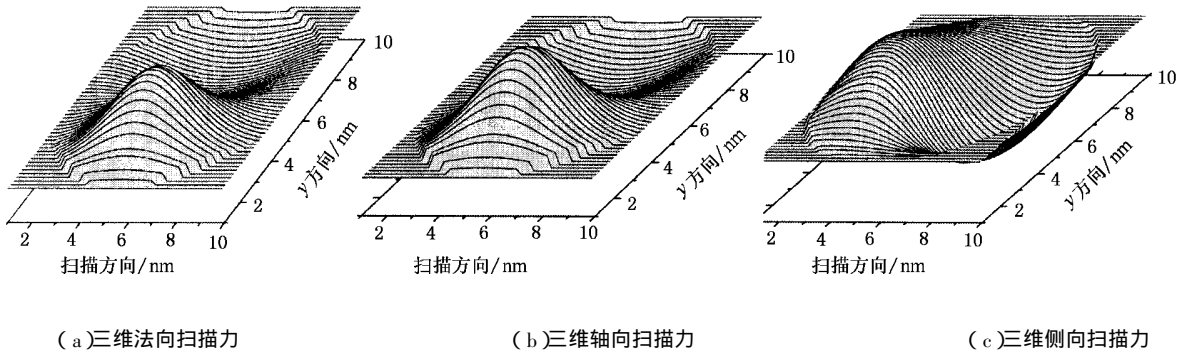


图5 侧向扫描时三维扫描力(nN)信号

可见侧向力峰值出现在斜率的极值点,与表面形貌的极值点存在位置偏差.这一点在 Bhushan 等人^[16]的微观摩擦实际测试中也明显地观测到.

4. 耦合变形对三维扫描形貌信号的影响

扫描力耦合作用的结果,使得扫描过程中针尖-样品的接触作用力不均匀.根据 AFM 恒力模式的工作原理,压电扫描仪在扫描力增大的接触点需要上移,以增加表面斥力,这样它输出的形貌信号变为

$$z(x, y) = z_0(x, y) - \epsilon(x, y), \quad (9)$$

其中 $z_0(x, y)$ 为真实的微观形貌, $\epsilon(x, y)$ 为扫描力作用下接触点的变形量,每一个扫描接触点的变形

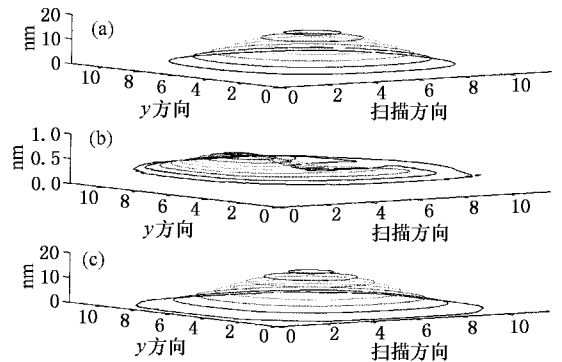


图6 AFM 接触模式下样品形貌、接触点变形量,以及输出形貌的模拟信号

量可以根据接触作用力用 Hertz 接触公式求得^[1,12]. 计算结果如图 6 所示. 图 6(a)为粗糙峰真实形貌 $z_0(x, y)$ 的等高图 (b)为微观接触变形量 $\epsilon(x, y)$ 的等高图 (c)为仪器输出形貌信号 $z(x, y)$ 的等高图. 可见, 一般情况下针尖-样品的接触变形非常微小, 图 6(b)的纵坐标幅值只有图 6(a)和(c)的 1/10, 所以接触变形并不能明显改变形貌的扫描图像. 当然, 如果扫描样品为软体样品, 如生物样品, 针尖的作用会造成加大的变形, 甚至引起材料的迁移和表面的重构, 详细内容可参见文献 [12].

5. 结 论

1. AFM 的接触模式恒力扫描中, 法向扫描力并

不是恒定大小, 与轴向扫描力存在耦合作用. 在粗糙峰峰值增加阶段, 二力均大幅度增加; 在粗糙峰峰值减小阶段, 二力小幅度减小. 该耦合作用与样品形貌斜率、探针针尖长度等密切相关.

2. 侧向扫描是 AFM 应用于微观摩擦研究的主要方式. 侧向力信号受探针耦合变形影响较小. 但侧向力与形貌斜率密切相关, 且其极值点与形貌极值点存在位置偏差, 这些结果均与 AFM 微观摩擦测试结果一致.

3. 一般情况下, 由于针尖-样品接触变形较小, 探针耦合变形而引起的扫描力的变化对微观形貌的测试信号影响不显著.

-
- [1] Bai C L, Bai F and Luo K 2000 *Scan Force Microscopy* (Beijing : Science Press [in Chinese] 白春礼、白 芳、罗 克 2000 扫描力显微术(北京 科学出版社)]
- [2] Binnig G, Quate C F and Gerber Ch 1986 *Phys. Rev. Lett.* **56** 930
- [3] Gu C Z, Braun K F and Rieder K H 2002 *Chin. Phys.* **11** 1042
- [4] Lou S T, Gao J X, Xiao X D, Li X J, Li G L, Zhang Y, Li M Q, Sun J L and Hou J 2001 *Chin. Phys.* **10** 108
- [5] Chu J R, Huang W H, Maeda R, Itoh T and Suga T 2001 *Chin. Phys.* **10** 167
- [6] Sader J E and White L 1993 *J. Appl. Phys.* **74** 1
- [7] Sader J E, Larson L and Mulvaney P 1995 *Rev. Sci. Instrum.* **66** 3789
- [8] Neumeister J M 1994 *Rev. Sci. Instrum.* **65** 2527
- [9] Cleveland J P, Manne S and Bocek D 1993 *Rev. Sci. Instrum.* **64** 403
- [10] Hutter J L and Bechhoefer J 1993 *Rev. Sci. Instrum.* **64** 1868
- [11] Walters D A, Cleveland J P and Thomson N H 1996 *Rev. Sci. Instrum.* **67** 3583
- [12] Zhang J and Sun R G 2002 *Chin. Phys.* **11** 776
- [13] Bogdanovic G, Meurk A and Rutland M W 2000 *Colloids Surf. B* **19** 397
- [14] Piner R and Ruoff R S 2002 *Rev. Sci. Instrum.* **73** 3392
- [15] Budynas R G 2001 *Advanced Strength and Applied Stress Analysis* 2nd ed (Beijing : Tsinghua University Press)
- [16] Bhushan B 2001 *Principles and Application of Tribology* (New York : Wiley)
- [17] Zhang X J, Meng Y G and Wen S Z 2003 *Sci. China E* **46** 537

On micro scanning forces under the coupling deformation of atomic force microscope probe *

Zhang Xiang-Jun Meng Yong-Gang Wen Shi-Zhu

(*State Key Laboratory of Tribology , Tsinghua University , Beijing 100084 ,China*)

(Received 26 February 2003 ; revised manuscript received 2 July 2003)

Abstract

Micro cantilever probe of atomic force microscope (AFM) is a typical micro mechanical component , which is under a coupling deformation during the contact scanning process. Numerical simulations of micro scanning forces and micro topography are presented to investigate the influence of the coupling deformation of AFM probe under the AFM contact mode. It is demonstrated that the normal scan force is actually not constant , which is coupled with the lateral force on an asperity of sample surface , increasing together uphill and decreasing together downhill. The coupling relationship increases with the surface slope , tip height , etc. Coupling deformation of the probe proves to play a minor role on the AFM micro topography image and the perpendicular scan force. However , surface slope plays an important role on the variation of lateral force , and the peak positions of lateral force are not accordant with that of surface topography. These results are in good agreement with those previous AFM experiments.

Keywords : atomic force microscope , micro cantilever probe , coupling deformation , scan force

PACC : 0779

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50135040) and the Science Foundation for Post Doctorate of China (Grant No. 2002-17).