

关于轻敲式原子力显微镜动力学系统中能量耗散的研究

刘国林, 曾 瑜, 刘锦灏, 魏 征

STUDY ON ENERGY DISSIPATION IN THE DYNAMIC SYSTEM OF TAPPING MODE ATOMIC FORCE MICROSCOPE

Liu Guolin, Zeng Yu, Liu Jinhao, and Wei Zheng

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.6052/0459-1879-23-300>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

轻敲模式下原子力显微镜的能量耗散

ENERGY DISSIPATION IN TAPPING MODE ATOMIC FORCE MICROSCOPY

力学学报. 2017, 49(6): 1301-1311

轻敲模式下 AFM 动力学模型及能量耗散机理研究

STUDY ON A DYNAMICS MODEL OF TAPPING MODE AFM AND ENERGY DISSIPATION MECHANISM

力学学报. 2020, 52(4): 1106-1119

原子力显微镜在二维材料力学性能测试中的应用综述

REVIEW OF THE APPLICATION OF ATOMIC FORCE MICROSCOPY IN TESTING THE MECHANICAL PROPERTIES OF TWO-DIMENSIONAL MATERIALS

力学学报. 2021, 53(4): 929-943

基于Iwan模型的接合面切向响应建模

TANGENTIAL RESPONSE MODELING OF JOINT SURFACE BASED ON IWAN MODEL

力学学报. 2020, 52(2): 462-471

弹塑性微凸体侧向接触相互作用能耗

THE CONTACT ENERGY DISSIPATION OF THE LATERAL AND INTERACTIONAL BETWEEN THE ELASTIC-PLASTIC ASPERITIES

力学学报. 2017, 49(4): 858-869

双模态振幅调制原子力显微术相互作用区转变研究

INVESTIGATION ON TRANSITION BETWEEN TIP-SAMPLE INTERACTION REGIMES IN BIMODAL AMPLITUDE MODULATION ATOMIC FORCE MICROSCOPY

力学学报. 2018, 50(5): 1104-1114



关注微信公众号, 获得更多资讯信息

关于轻敲式原子力显微镜动力学系统中 能量耗散的研究¹⁾

刘国林 曾瑜 刘锦灏 魏征²⁾

(北京化工大学机电工程学院, 北京 100029)

摘要 原子力显微镜是一种典型的微纳谐振器, 其核心部件是一个对微弱力极敏感的微悬臂梁探针, 当它在不同的环境工作时, 存在着各种不同形式、不同性质的能量耗散, 这些能量耗散与系统的相位图像有着密切的联系. 在众多的耗散机制中, 只有针尖与样品的黏附接触耗散才能真正反映样品的性质, 其他耗散会降低黏附接触耗散在系统总耗散中的占比, 使得图像中的有效信息被削弱. 因而, 明确其他耗散对系统品质因数的量级贡献是十分重要的, 这有助于提高图像的品质. 为了研究这些耗散, 本文根据耗散机理产生的原因对不同的能量耗散进行了细致的分类, 系统总结了各种能量耗散的类型. 之后, 通过理论、实验和仿真的方法探究了在不同环境下、不同位置处微悬臂梁探针的能量耗散, 明确了不同耗散对系统品质因数的量级贡献. 然后, 对于不同流体环境下的能量耗散, 对比了它们的作用机理及量级大小. 最后, 对于在大气环境下工作的原子力显微镜探针, 研究了它在振动过程中从高于样品表面到下降并接触样品这一连续过程中不同阶段存在的能量耗散, 分析表明, 在这些能量耗散中对系统品质因数影响最大的是由空气引起的耗散, 包括空气黏性阻尼, 压膜阻尼及液桥耗散.

关键词 原子力显微镜, 能量耗散, 相位, 品质因数

中图分类号: O326 文献标识码: A doi: 10.6052/0459-1879-23-300

STUDY ON ENERGY DISSIPATION IN THE DYNAMIC SYSTEM OF TAPPING MODE ATOMIC FORCE MICROSCOPE¹⁾

Liu Guolin Zeng Yu Liu Jinhao Wei Zheng²⁾

(College of Mechanical and Electrical Engineering, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China)

Abstract Atomic force microscope is a typical micro-nano resonator and its core component is a micro-cantilever beam probe, which is extremely sensitive to weak force. When it works in different environments, there are various forms and characteristics of energy dissipation mechanisms. These energy dissipations are closely related to the phase image of the system. Among the many dissipation mechanisms, we believe that only the adhesive contact dissipation between the tip of the probe and the sample can truly reflect the nature of the sample, and the other dissipations will reduce the proportion of adhesive contact dissipation in the total dissipation of the system, thus weakening the effective information in the phase image. Therefore, it is important to clarify the quantitative contribution of other dissipations to the quality

2023-07-09 收稿, 2023-10-05 录用, 2023-10-06 网络版发表.

1) 国家自然科学基金资助项目 (11572031).

2) 通讯作者: 魏征, 副教授, 主要研究方向为微纳力学. E-mail: weizheng@mail.buct.edu.cn

引用格式: 刘国林, 曾瑜, 刘锦灏, 魏征. 关于轻敲式原子力显微镜动力学系统中能量耗散的研究. 力学学报, 2023, 55(11): 2599-2613

Liu Guolin, Zeng Yu, Liu Jinhao, Wei Zheng. Study on energy dissipation in the dynamic system of tapping mode atomic force microscope. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2023, 55(11): 2599-2613

factor of the system, which helps us to improve the quality of the phase image. In order to study these dissipations, in this paper, we meticulously classify different energy dissipations according to the causes of the dissipation mechanism and systematically summarize the different types of energy dissipations. Then, we study the energy dissipation of micro-cantilever beam probe in different environments and at different positions by theoretical, experimental and simulation methods, and the magnitude contribution of different dissipation to the quality factor of the system is also clarified. Then, for the energy dissipation in different fluid environments, we compare their mechanism of action and their magnitude contribution to the quality factor of the system. Finally, for an atomic force microscope probe operating in an atmospheric environment, we investigate the energy dissipation at different stages of the vibration process from above the sample surface to descending and touching the sample, and the analysis shows that the most significant impact on the system quality factor is caused by the air, including air viscosity damping, squeeze film damping and liquid bridge dissipation.

Key words atomic force microscope, energy dissipation, phase, quality factor

引言

利用共振原理以实现能量传递、转换和演变的微纳谐振器现在已经成为许多微纳机电系统的核心部件,它具有高灵敏度,高品质因数及高谐振频率等优点^[1-3].原子力显微镜(atomic force microscope, AFM)是研究微观领域的基础工具,是庞大的扫描探针显微镜家族的重要成员^[4],它的出现推动了纳米科技和微纳米工业的发展,受到科学与工业领域的广泛关注.其核心部件探针,在力学上被描述为一微纳悬臂梁,是一种典型的微纳谐振器件.

AFM 存在 3 种工作模式:接触式、非接触式及间歇接触样品的轻敲模式.在 AFM 轻敲模式的工作过程中,针尖与样品之间的作用力会使得微悬臂梁振动参数发生变化,依靠检测这种变化可以得到相应的形貌图和相位图.与得到的样品形貌图相比,由激励信号与微悬臂梁探针自由端响应信号的相位滞后得到的相位图更能反映样品的表面信息.

通常,相位、品质因数和频率的关系可以表示为^[5]

$$\varphi = \arctan \frac{Qs^3}{Q^2(1-s^2)+s^2} \quad (1)$$

其中, φ 表示相位, s 为激振频率 ω 与微悬臂梁固有频率 ω_n 之比, Q 表示品质因数.

从上式可见, AFM 探针在工作过程中,其相位的变化主要与品质因数 Q 和频率比 s 两个因素有关.在正常情况下,扫描样品时会把频率比固定,那么由式(1)可得,相位的变化实际上是由品质因数的变化所引起.而品质因数 Q 与系统的能量耗散和阻尼有关,一方面品质因数的倒数 Q^{-1} 可以用来表征能量耗散,另一方面品质因数可以通过悬臂梁质量 m , 阻

尼系数 c 和频率 ω_n 求得,有 $Q = m\omega_n/c$.这说明扫描出的相位图像也与系统的能量耗散和阻尼有着密切的关系,相位图像可以揭示系统的阻尼和能量耗散情况^[6-7].

在真空中, AFM 的品质因数能达到上万,在空气中品质因数为百这个量级,在液体中品质因数下降到个位数^[8],可见在不同的环境下, AFM 系统的能量耗散情况也不同.在这些耗散中,不同耗散对图像品质的影响也有区别,以实验室的空气环境为例,针尖与样品直接接触的黏附耗散能真实反映样品的性质,是核心耗散.其他耗散,例如,空气黏性阻尼、压膜阻尼、液桥耗散及支撑损耗等,会使系统的品质因数降低,减小核心耗散在系统总耗散中的占比,从而使得样品的真实信息被掩盖.在其他耗散中,我们根据耗散产生的原因将其分为内禀耗散和外部耗散,其中由微悬臂梁自身结构原因所导致的耗散是内禀耗散,由外部环境原因所导致的耗散称为外部耗散.内禀耗散和外部耗散都会对系统的核心耗散产生影响,并使相位图像品质降低,因而明确这些耗散对系统品质因数的量级贡献是十分重要的,这为优化相位图像给出了理论依据.

关于能量耗散的研究, Cleveland 等^[6]从能量流动的角度讨论了 AFM 系统的能量耗散,并推导出了相位与能量耗散的具体关系. Zener^[9]在提出“滞弹性”概念的基础上,推导出了微悬臂梁热弹性耗散的基本公式. Hosaka 等^[10]将微悬臂梁看作是微型小球的集合,并给出了在这一假设下微悬臂梁受空气阻尼的理论模型. Stoffels 等^[11]研究了声波-热声子相互作用中 Akhiezer 阻尼的影响. Hao 等^[12]通过分析界面耗散的物理机制并通过实验验证给出了界面耗

散的贡献. Yang 等^[13] 讨论了超薄微悬臂梁中的 4 种能量损失—热弹性损失、空气阻尼、支撑损失和表面损失, 并探讨了超薄微悬臂梁的尺寸效应对系统品质因数的影响. Imboden 等^[14] 对纳米机电系统中的各个耗散过程进行了综述, 介绍了纳米机电技术在研究和工程中的应用, 明确了耗散机制对微纳器件动态响应的影响. 张文明等^[15] 对微纳谐振器中能量耗散机理及非线性阻尼效应进行了讨论. 魏征等则进一步研究了轻敲式原子力显微镜在工作过程中空气黏性阻尼^[5]、压膜阻尼^[16] 以及液桥^[17-18] 对系统能量耗散的贡献. Herruzo 等^[19] 讨论了原子力显微镜在水和空气等不同环境下的动力学特性, 并对比了机械激励及磁激励的区别. Chen 等^[20] 分析了不同气体环境下微悬臂梁品质因数的大小, 并探究了液体环境下梁的振动.

轻敲式的 AFM 探针在振动过程中是从高于样品表面到下降并接触样品再从样品离开, 这在一个周期中是连续的过程, 在这一过程的不同阶段存在着不同的能量耗散, 但是目前对这一连续的能量耗散过程并没有一个清晰完整的认识, 对其中不同耗散的作用机理也不甚明了. 并且对于 AFM 不同的工作环境, 文献中大多是对某一种特定环境下的耗散进行讨论, 并没有把不同环境的耗散综合起来考虑. 同时, 考虑到不同的能量耗散对系统总品质因数的贡献不同, 明确不同耗散的量级贡献显得尤为重要. 因而, 本文拟把 AFM 中核心部件的微悬臂梁探针作为研究对象, 对探针在不同位置及不同环境下的能量耗散机制进行综合分析, 以期对不同能量耗散的量级贡献有一个清晰完整的认识, 对成像机理和成像质量有更进一步的了解, 并在此基础上为降低系统能量耗散, 进而提高相位像的品质提供理论上的参考.

1 内禀耗散

内禀耗散是由材料自身结构原因所引起, 材料的内耗决定了内禀耗散的大小. 从宏观层面来看, 内禀耗散表现为机械热噪声的形式. 在 AFM 中, 内禀耗散与探针的材料、加工方式等都有关系, 其内禀耗散主要包括: 热弹性耗散、声波—热声子相互作用、表面耗散和界面耗散.

1.1 热弹性耗散

当 AFM 系统在工作过程中进行振荡扫描时, 探

针内部总会产生相应的热应变, 其中受挤压的部分温度上升, 受拉伸的部分温度降低. 但是由于梁受压和受拉部位并不相同, 梁挤压部位和拉伸部位造成的温度梯度将导致热流的产生. 热流会自发的从温度高的部位涌向温度低的部位, 这一过程所导致的能量耗散称之为热弹性耗散. 对于不断振动的微悬臂梁来说, 只要它的热膨胀系数不为 0, 那么就会受到热弹性耗散的影响, 使得系统的品质因数降低.

Zener^[9] 通过计算应力、应变和温度的时间平均值, 推导出了热弹性耗散的理论公式, 具体表达为

$$Q_{\text{the}} = \frac{C_p}{\alpha^2 T E} \frac{1 + \omega^2 \tau_R^2}{\omega \tau_R} \quad (2)$$

式中, C_p 为定压比热容, α 为热膨胀系数, T 为温度, τ_R 为特征时间, E 为弹性模量.

对于矩形类型的微米和纳米尺度谐振器中的热弹性耗散, Lifshitz 等^[21] 根据式 (2) 推导出了更为准确的表达式, 品质因数的计算式为

$$Q_{\text{the}}^{-1} = \frac{\alpha^2 T E}{C_p} \left(\frac{6}{\zeta^2} - \frac{6}{\zeta^3} \frac{\sinh \zeta + \sin \zeta}{\cosh \zeta + \cos \zeta} \right) \quad (3)$$

式中, $\zeta = h \sqrt{\pi f \rho C_p / \kappa}$, $f = \omega / (2\pi)$, h 为梁高, κ 为导热系数, ρ 表示梁的密度.

经过上面的讨论, 能看出热弹性耗散与微悬臂梁的材料和尺寸有着密切的关系. Ergincan 等^[22] 通过实验的方式得出了热弹性耗散的具体数值, 其结果与式 (3) 所估计的理论结果相差不大. 这里为估计热弹性耗散的贡献, 取一根常用的轻敲模式探针, 其尺寸为 $135 \mu\text{m} \times 40 \mu\text{m} \times 4 \mu\text{m}$, 考虑梁的材料为硅, 谐振频率约为 $f = 300 \text{ kHz}$, 则由式 (3) 估计的品质因数为 3.27×10^5 . 由此, 通过上面的分析, 能估计热弹性耗散对 AFM 微悬臂梁探针品质因数的影响在 10^5 量级.

1.2 声波—热声子相互作用

声波—热声子相互作用是内禀耗散的另外一种重要机制, 其主要包括, 声波波长远大于声子平均自由程的 Akhiezer 阻尼和声波波长小于声子平均自由程的 Landau-Rumer 效应^[11]. 由于 AFM 探针的振动频率在 $\sim 10^2 \text{ kHz}$, 对比文献中的阻尼效应, 可知此时 AFM 探针所受阻尼为 Akhiezer 阻尼. Akhiezer 阻尼是指低频/低温声子—高频/高温声子间能量交换造成的耗散. 其详细阐述为, 随着晶体材料非零的体积变化, 低频的应力波将引起晶体材料的简正模频率

做周期性的局部变化, 体积膨胀使简正模频率减小. 这些模式完全被热声子占据. 频率的下降表明瞬态模比平衡温度给定的占有率要低, 由此使这些模式有效的局部温度降低. 体积膨胀对应温度下降, 体积压缩对应温度上升. 这一体积和温度的变化将驱动着声子从温度升高的体积压缩区域向温度下降的体积膨胀区域做扩散运动, 因而从应力波中转移了能量, 由于这种热扩散的不可逆性, 导致了应力波的衰减, 这就是 Akhiezer 阻尼^[23]. 那么, 由热声子的弛豫所导致的能量耗散, 其品质因数可以表示为^[24]

$$Q_{\text{son}} = \frac{\rho v_a}{C_p T \gamma_{\text{avg}}^2} \frac{1 + (\omega \tau_{\text{ph}})^2}{\omega \tau_{\text{ph}}} \quad (4)$$

式中, τ_{ph} 表示热声子的弛豫时间, 当材料为硅时 $\tau_{\text{ph}} = 6.91 \text{ ps}$, v_a 表示声波的波速, γ_{avg} 为平均 Gruneisen 常数, 在这里取为 0.51.

从上面有关热声子的描述, 可知声波-热声子相互作用的弛豫时间由材料性质决定, 在这里同样考虑 AFM 的微悬臂梁探针, 其材料为硅, 谐振频率约为 300 kHz, 在室温条件下, 由上式估计的品质因数为 2.4×10^7 . 通过上面的分析, 可知由声波-热声子相互作用所引起的耗散对 AFM 品质因数的影响在 10^7 量级.

1.3 表面耗散

当微悬臂梁尺寸变小, 表面积与体积之比增大, 表面损失作用加强, 品质因数因阻尼的作用而逐渐减小. 在众多的耗散机制中, 由表面损耗所引起的能量损失机制是最复杂的, 一般对表面耗散的研究主要是从两个方面进行, 一是表面层所引起的损耗, 二是表面化学效应所引起的损耗^[15]. 在本文中主要对表面层的影响进行讨论, 对表面耗散进行建模, 考虑梁的复弹性模量 $E_c = E + iE_d$, 其中 E_c 和 E_d 分别为弹性模量的复数值和弹性模量耗散部分. 对于以正弦规律振动的矩形悬臂梁, 其储存的能量可以表示为

$$W_0 = \frac{1}{6} b h E \int_0^L \varepsilon_{\text{max}}^2(x) dx \quad (5)$$

其中 b 为梁宽, ε_{max} 为梁顶部或底部在振动过程中发生的应变.

考虑表面层厚度 δ , 复数模量 $E_{\text{cs}} = E_s + iE_{\text{ds}}$, 则每个周期表面层造成的能量损失为^[25]

$$\Delta W_s = 2\pi \delta E_{\text{ds}} \left(b + \frac{h}{3} \right) \int_0^L \varepsilon_{\text{max}}^2(x) dx \quad (6)$$

式中, E_s 为表面层的常规弹性模量, E_{ds} 为表面层的耗散弹性模量. 因此与表面损耗相关的品质因数为

$$Q_{\text{sur}} = 2\pi \frac{W_0}{\Delta W_s} = \frac{b h}{2\delta(3b + h)} \frac{E}{E_{\text{ds}}} \quad (7)$$

在式 (7) 中, E_{ds} 作为吸收层的特性及其缺陷, 与表面应力密切相关, 会导致表面损失的产生. 由文献 [15] 知, $\langle \delta E_{\text{ds}} \rangle$ 的取值范围为 0.7 ~ 1.1, 对于无修饰表面梁, $\langle \delta E_{\text{ds}} \rangle \sim 0.9$. 同时, 从式 (7) 也可以看出, 表面损耗的大小与微悬臂梁的尺寸也具有很强的关联. 在这里考虑一个无修饰的 AFM 探针, 探针尺寸一般为几十或几百微米, 令其尺寸为 $135 \mu\text{m} \times 40 \mu\text{m} \times 4 \mu\text{m}$, 材料选择为硅, 则通过上式估计的品质因数为 1.2×10^5 . 由此, 可知由表面耗散所引起微悬臂梁品质因数的变化大概在 10^5 量级.

1.4 界面耗散

多层谐振器的界面耗散是指谐振器在界面处因振动而耗散的能量. 在本质上, 界面耗散是连续介质力学中两个块体区域之间界面移动/变形的行为或者材料科学中两个固体相界面之间在弹性变形影响下内部结构的变化. 从连续介质力学来看, 谐振器在连续界面处其应变是一致的, 但不同材料的界面层具有不同的杨氏模量, 由此在相连的界面层上有应力跳变产生. 这种应力跳变在界面上起到驱动力或摩擦力的作用, 会导致界面滑移, 但不会破坏两界面层之间的黏合, 这意味着界面通过将多层谐振器中的部分振动能量转化为热能耗散掉. 因此, 如果想对谐振器的界面耗散进行分析研究, 就必须更好地理解界面对邻近固相弹性变形的响应.

对于界面耗散品质因数的估计, Hao 等^[12] 通过分析界面耗散的物理机制并通过实验验证, 给出了基频下界面耗散的品质因数表达式. 在 AFM 中, 某些探针表面有一层涂层, 涂层会在界面处产生耗散, 这时品质因数的计算式可以写为

$$Q_{\text{int}} = \frac{3\pi}{\Delta E^2 \eta_1 l} \frac{(Eh + E_p h_p)^{3/2}}{(\rho h + \rho_p h_p)^{3/2}} \quad (8)$$

式中, E_p , h_p 和 ρ_p 分别为涂层的杨氏模量、高度和密度, l 为悬臂梁长度, $\Delta E = E - E_p$, 为两种材料杨氏模量的差值, η_1 为常数, 具体数值通过实验得到^[12], 在

这里估为 $3 \times 10^{-12} \text{ m}^3/(\text{N} \cdot \text{s})$.

考虑 AFM 某一种类型的探针, 在悬臂梁表面镀有 70 nm 厚的金涂层, 悬臂梁尺寸为 $135 \mu\text{m} \times 40 \mu\text{m} \times 4 \mu\text{m}$, 材料为硅, 则通过式 (8) 计算涂层界面耗散的品质因数为 1.67×10^{13} . 由此可以估计界面耗散对 AFM 微悬臂梁探针品质因数的影响在 10^{13} 量级.

2 在不同环境下的外部耗散

外部耗散主要是由外部环境原因所引起, 在 AFM 中, 这一外部环境为非理想的支撑结构及探针自身所处的流体环境. 由非理想的支撑结构引起的耗散为支撑损耗, 由流体环境所引起的外部耗散在不同环境下有所区别, 下面将进行详细的讨论.

2.1 支撑损耗

AFM 在真空环境下工作时, 外部没有气体阻尼的作用, 此时的外部耗散为梁与基底连接处的支撑损耗. 而由于 AFM 中支撑结构的不可避免性, 支撑损耗在任何环境都存在. 支撑损耗的基本原理是, 当微悬臂梁在振动时, 梁与支撑基底接触的部位由于梁的弯曲振动会产生剪切力和弯矩, 这所产生的力的作用可以视为一个激励源并在基底上激发出弹性波. 这些弹性波会经由基底阻尼的作用不断衰减传播, 最后完全耗散掉. 可见, 导致支撑损耗的关键是结构耦合的非固支性, 对于理想的支撑基座而言, 可以假定基座的位移为 0, 探针系统的能量不会传递到基座上, 但现实的支撑基座, 探针系统的能量会通过固支端耦合到基座上, 引起基座振动并导致能量耗散.

1968 年, Jimbo 等^[26] 将悬臂梁振动的能量与悬臂梁根部的剪力和弯矩在弹性介质中引起的应变相关的能量进行了比较. 之后, Photiadis 等^[27] 给出了两种不同情况下从谐振器到其支撑结构的能量损失解析表达式: 一种是可以被视为厚度远大于谐振器本身的板支撑, 另一种是在远大于谐振器厚度的基础上, 大于振动波长的支撑. 他们研究发现, 当梁和支撑介质为同种材料时, 由悬臂梁振动并辐射到支撑介质 (半无限板) 所得到的支撑损耗品质因数为

$$Q_{\text{sup}} \approx 1.053 \frac{l}{b} \left(\frac{h_s}{h} \right)^2 \quad (9)$$

式中, h_s 为支撑介质的高度.

当支撑结构相较于传播波的波长足够厚时, 基

底近似为半无限弹性介质 (半空间), 得到支撑损耗的品质因数为

$$Q_{\text{sup}} \approx 3.226 \frac{l}{b} \left(\frac{l}{h} \right)^4 \quad (10)$$

通过上边两个公式, 可以看出, 支撑损耗与悬臂梁和支撑介质的几何尺寸有着紧密的联系. 为了深入了解这种耗散机制与器件尺寸的关系, 本文通过有限元仿真的方法对其进行了研究. 首先需要对建立的模型进行考虑, 在实际情况下由于微悬臂梁相较于支撑基底往往很小. 同时, 考虑材料自身的阻尼特性, 会使悬臂梁因振动所产生的弹性波在传递过程中逐渐耗散掉. 但在理想化的仿真过程中, 支撑介质基底并不能很好地对这两种特质进行模拟, 所以需要考虑到在仿真建模的有限区域添加吸收边界条件来保证与支撑结构耦合所产生的弹性波能够完全耗散掉. 吸收边界条件有很多种, 如边界阻尼器、无限元、边界积分和完美匹配层 (perfectly matched layer, PML) 等^[28-30]. 在所有吸收边界条件中, PML 具有易于实现, 经济成本低, 计算方便, 并从理论上可以吸收任何入射角度波的优点^[31-32]. 因此, 本文选择利用 PML 作为弹性波耗散的边界条件. 建立的模型如图 1 所示, 在图中支撑介质厚度为 $T_s = 0.1l^2/h$, PML 层的厚度根据参考文献 [33] 推荐为 $\lambda/14 \leq T_{\text{PML}} \leq 2\lambda$, 其中 λ 为在支撑介质中传递的较长波的波长, $\lambda = \frac{2\pi}{\omega} \sqrt{\frac{E_{\text{sup}}}{\rho_{\text{sup}}(1-\nu_{\text{sup}}^2)}}$, 式中 E_{sup} , ρ_{sup} 和 ν_{sup} 分别是支

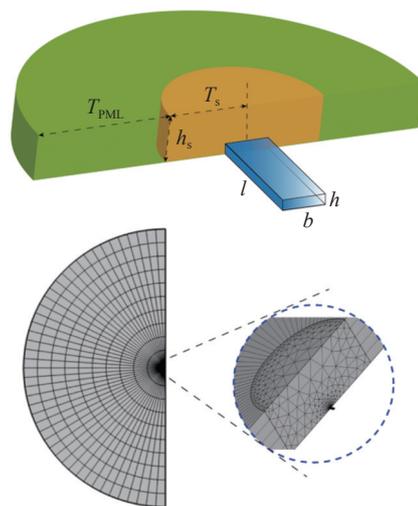


图 1 支撑损耗模型和仿真网格示意图

Fig. 1 Schematic diagram of support dissipation model and simulation grid

撑介质的杨氏模量, 密度和泊松比.

在完成上述模型的建立后, 同样考虑一个尺寸为 $135\ \mu\text{m} \times 40\ \mu\text{m} \times 4\ \mu\text{m}$ 的微悬臂梁, 选择梁和支撑介质的材料都为硅 ($E = 169\ \text{GPa}$, $\rho = 2330\ \text{kg/m}^3$, $\nu = 0.3$). 探针基底的高度根据探针盒上的标注为 $400\ \mu\text{m}$, 即 $h_s = 400\ \mu\text{m}$, 比较梁和支撑介质的高度, $h_s \gg h$, 符合式 (9) 的应用条件. 之后, 计算支撑介质中较长波的波长, $\lambda = 2.67 \times 10^{-2}\ \text{m}$, $h_s \ll \lambda$, 故式 (10) 不适用于 AFM 支撑损耗的估算. 最后, 模型仿真的结果与通过式 (9) 所计算的理论值如表 1 所示.

表 1 支撑损耗的理论及仿真结果

Table 1 Theoretical and simulation results of support dissipation

| Parameter | Value |
|-------------------------------------|--------------------------|
| $l \times b \times h / \mu\text{m}$ | $135 \times 40 \times 4$ |
| $h_s / \mu\text{m}$ | 400 |
| material | Si |
| E/GPa | 169 |
| theory Q | 35 538.75 |
| simulation Q | 32 294 |

从表 1 的结果中可以看出, 通过式 (9) 计算出的品质因数与数值仿真计算出的品质因数近似符合, 这证明了本文模型建立的准确性和可行性. 并且我们知道, 在对支撑损耗的研究过程中, 由于支撑损耗与其他耗散之间的耦合关系使得对于支撑损耗的研究大多停留在理论公式推导的层面, 很难利用实验进行分析. 在本小节, 利用 PML 作为吸收边界, 估计了真实 AFM 探针支撑损耗对系统品质因数的量级贡献在 10^4 . 并且从式 (10) 的表述来看, 如果当支撑基底足够厚的话, 可以有效降低系统中的支撑损耗.

2.2 在空气中的外部耗散

在空气中的外部耗散包含了两个部分, 一是由结构原因引起的支撑损耗, 二是由外部空气环境引起的耗散, 支撑损耗的影响前文已经讨论过了, 而由空气环境引起的耗散在 AFM 工作的不同位置处稍有区别, 在本节主要讨论空气黏性阻尼、压膜阻尼及液桥耗散的影响.

2.2.1 空气黏性阻尼

在非真空环境下, 当环境压强从真空逐渐增压到正常大气压, AFM 系统的品质因数会因压强变化

而改变, 这一变化趋势称之为气体介质的阻尼效应, 一般可以将其分为 3 个阶段: 本征区域、分子区域和黏性区域^[5]. 在本征区域, 空气较为稀薄, 空气压强很低, 工作环境近似为真空环境, 当梁在其中振动时, 能量耗散主要为其他形式的耗散. 在分子区域, 气体分子数量增加, 空气压强逐渐增大, 气体分子与微悬臂梁及样品表面发生作用, 但气体分子自身之间的作用可以忽略. 在黏性区域, 气体分子数量增加到一定程度, 压强对品质因数的影响大幅增强, 该气体环境中的空气可以视为黏性流体, 气体分子不仅与探针和样品发生作用, 自身内部之间也在相互作用, 此时 AFM 系统受到黏性阻尼作用.

通常, AFM 都在实验室大气环境下进行工作, 压强范围位于黏性区域. 当微悬臂梁在距离样品较远的位置时, 微悬臂梁的高频振动会带着空气高频振荡, 其可视为微悬臂梁在空气中的自由振动, 此时, 梁上所受气体阻尼为空气黏性阻尼. 前人已经对这个问题进行了一些研究, Hosaka 等^[10]把悬臂梁近似成由微球组成的形式, 通过理论计算, 得到微悬臂在振动时单位长度的流体绕流阻尼系数为

$$c_1 = 3\pi\eta(1 + 0.375Re) \approx 3\pi\eta \quad (11)$$

式中, η 为气体的动力黏度, 对空气而言 $\eta = 1.8 \times 10^{-5}\ \text{kg}/(\text{s} \cdot \text{m})$, Re 为雷诺数, 对于在空气中振动的微悬臂梁来说 $Re \ll 1$, $0.375Re$ 可忽略.

同时, 考虑到微悬臂梁在空气中是处于高频振动状态, 周围会产生有旋流使阻力增加, 求解斯托克斯方程可得微悬臂梁单位长度受到这一部分有旋流体的阻尼系数为^[34]

$$c_2 = \pi b \sqrt{2\rho_a \eta \omega} \quad (12)$$

式中, ρ_a 是空气密度, $\rho_a = 1.293\ \text{kg}/\text{m}^3$.

微悬臂梁在空气中振动时的等效黏性阻尼可表示为^[5]

$$c_{e1} = \frac{(c_1 + c_2)l}{4} = \frac{3\pi\eta l + \pi b l \sqrt{2\rho_a \eta \omega}}{4} \quad (13)$$

根据振动力学中品质因数与阻尼的关系, 可以得到微悬臂梁在空气中振动时的品质因数为

$$Q_{\text{vis}} = \frac{m_e \omega_n}{c_{e1}} = \frac{4m_e \omega_n}{3\pi\eta l + \pi b l \sqrt{2\rho_a \eta \omega}} \quad (14)$$

其中, m_e 表示梁在空气中的等效质量, 根据振动力学中的等效原则有 $m_e = 0.24 m$.

为了验证空气对微悬臂梁探针的影响, 我们进行了相应实验. 实验所用原子力显微镜为 BRUKER dimension icon, 探针型号为 AN-NSC10, 探针在扫描电子显微镜下的形态如图 2 所示, 各项参数及通过理论计算得出的等效数值见表 2.

在进行实验的过程中, 由于设备具有一定的距离调节范围限定, 无法通过一次性的范围调节完成探针在远离样品时、靠近样品表面过程中以及最后的接触样品这一连续过程的扫频曲线, 因此需要做多次实验. 将实验人为地分为较远处及较近处两个阶段, 同时, 为了使实验数据能够完整包含探针远离样品、靠近样品和接触样品这一连续性过程, 两个距离段的探针行程区域需要有一定程度的重合, 实验中得到探针在距样品较远距离处的实验结果如图 3 所示.

利用半带宽法, 对图 3 中的扫频曲线进行计算, 得到在较远距离处扫频曲线所对应的品质因数如图 4 所示. 图 3 的扫频曲线展示了在不同针尖样品距离下振幅和频率的关系, 从图中能看出当针-样之间距离较大时, 位于最上边的几条曲线出现重叠. 之

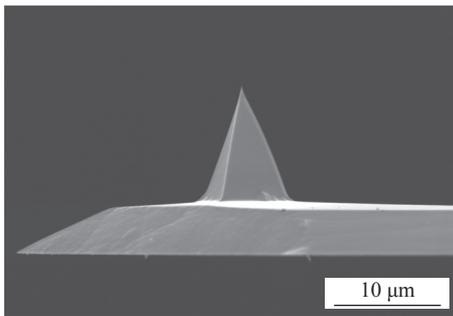


图 2 扫描电子显微镜下的探针

Fig. 2 The probe under scanning electron microscope

表 2 探针各项参数值

Table 2 Parameter values of the probe

| Parameter | Value |
|--|--------------------------|
| $l \times b \times h / \mu\text{m}$ | $135 \times 40 \times 4$ |
| tip height/ μm | 10 |
| material | Si |
| E/GPa | 169 |
| m_c / kg | 1.21×10^{-11} |
| $\omega_n / (\text{rad} \cdot \text{s}^{-1})$ | 1.69×10^6 |
| $c_{cl} / (\text{N} \cdot \text{s} \cdot \text{m}^{-1})$ | 4.33×10^{-8} |

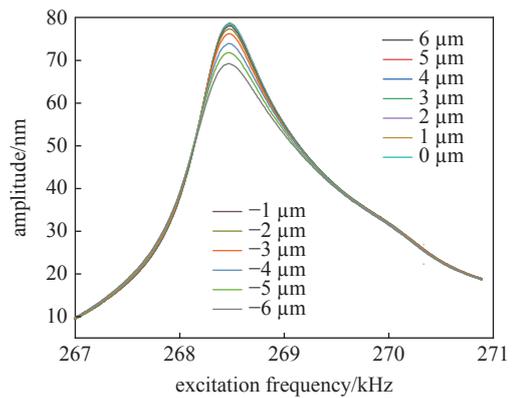


图 3 远距离的扫频曲线

Fig. 3 Sweeping curve at far distance

后, 随着距离减小, 扫频曲线的最大振幅降低, 曲线变得越“胖”. 图 4 的结果很好地对这一现象进行了解释, 当距离较远时, 针-样间距离的变化不对系统的耗散产生影响, 系统的品质因数几乎不变, 此时空气只对其有黏性阻尼作用. 而随着距离进一步减小, 系统的品质因数随之降低, 此时针-样之间有压膜阻尼产生, 压膜阻尼的影响将在后文进行叙述. 对黏性阻尼进行分析, 当梁的长、宽、高分别为 $135 \mu\text{m} \times 40 \mu\text{m} \times 4 \mu\text{m}$ 时, 根据式 (14) 进行理论计算, 得出的品质因数为 472.26, 而通过实验得出梁在远离样品的空气中振动的品质因数为 336. 实验和理论的品质因数存在差距, 这是由于实验中得出的品质因数除了受到空气黏性阻尼的影响外还受到内禀耗散及支撑损耗的影响, 实验得出的品质因数是 $Q^{-1} = Q_{\text{vis}}^{-1} + Q_{\text{other}}^{-1}$, 但是理论计算仅考虑了黏性阻尼的影响, 由此导致了误差的产生. 最后, 无论是从实验结果还是理论结果来看, 都可以估计由于空气黏性阻尼导致系统品质因数的变化在 10^2 量级.

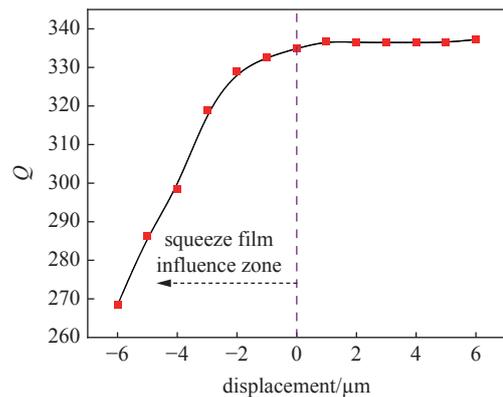


图 4 空气中相对位置与品质因数的关系

Fig. 4 Relationship between relative position and quality factor in air

2.2.2 空气压膜阻尼

随着探针从远离样品逐渐向下移动,与样品表面间的距离减小,探针与样品之间会发生相互作用,这是由于当两物体表面相对运动时,位于其中的空气会随着物体的运动而被吸入、挤出,这其中有力的作用,这种阻尼效应被称为压膜阻尼.压膜阻尼存在于众多不同类型的微纳系统中,如微加速度计和超声悬浮仪等^[14].对于工作中的 AFM 微悬臂梁探针,探针在向样品移动时,会增大薄膜的气体压强,从而促使空气向周边扩散,即被挤出;相反,当探针远离样品移动时,空气薄膜的压强随之减小,周围的空气会被吸入间隙.因而,在对压膜阻尼的研究过程中,AFM 探针与样品之间的距离需要纳入考虑,对于实际的 AFM 探针来说,安装后的探针会与样品存在一个角度(约 15°),并且由于梁的弯曲振动,导致探针在不同位置处与样品之间的距离存在差异,具体情况如图 5 所示.

为探究压膜阻尼对微悬臂梁品质因数的影响,需要考虑探针与样品之间由于挤压所产生的气膜的特性,这里用挤压数来进行表述,当挤压数较大时,薄膜力表现为弹性力的形式,当挤压数较小时,表现为黏性力的形式.挤压数可表示为

$$\tau = \frac{12\mu_{\text{eff}}\omega l_s^2}{P_a h_t^2} \quad (15)$$

式中, μ_{eff} 表示有效空气黏性系数 $\mu_{\text{eff}} = 1.71 \times 10^{-5} \text{N} \cdot \text{s}/\text{m}$, l_s 为物体的特征长度,取为梁宽度 $40 \mu\text{m}$, P_a 为环境压强, h_t 为针样之间距离,取为 $15 \mu\text{m}$. 将具体的数值代入计算,能得到探针与样品系统的挤压数 $\tau \ll 1$, 则能得到在压膜阶段薄膜力表现为黏性力的形式,其弹性效应可以忽略不计.

1968 年 Newell^[35] 研究了运动的两极板间间隙大小与压强的关系. 对于一般的矩形极板或者梁来

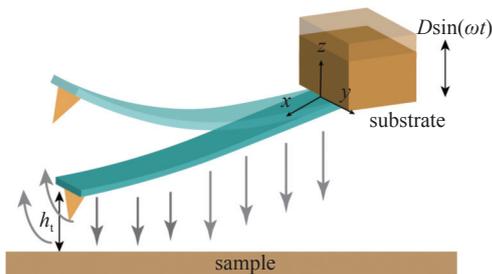


图 5 探针靠近样品表面

Fig. 5 Probe close to sample surface

说,当间隙小于极板或者梁宽度时,压膜作用的效果便较为明显.根据非线性雷诺方程^[36],可以得到描述压膜阻尼效应的表达式

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(h_t^3 P \frac{\partial P}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(h_t^3 P \frac{\partial P}{\partial y} \right) = 12\mu_{\text{eff}} \frac{\partial (Ph_t)}{\partial t} \quad (16)$$

其中, $h_t(x) = d + (l - x)\sin\alpha$ 代表倾斜探针到样品表面的距离(即气膜厚度), d 为悬臂梁自由端与样品表面的距离, α 为探针的倾斜角, $P = P_a + \Delta P$ 为微悬臂梁的表面压强, ΔP 为气膜所引起的偏压.

在此基础上,为了简化运算,可以通过忽略长度方向上的压力梯度变化对式(16)进行进一步改写

$$\frac{\partial^2 P}{\partial y^2} = \frac{12\mu_{\text{eff}}}{h_t^3} \frac{\partial h_t}{\partial t} \quad (17)$$

对式(17)沿宽度方向进行积分,并将其代入设定的边界条件,在悬臂梁的两侧 $y = \pm b/2$, $P = P_a$, 在悬臂梁中间 $y = 0$ 处,压强达到最大,压力梯度为 $\partial P/\partial y = 0$. 根据计算可以得到偏压 ΔP 的计算表达式为

$$\Delta P = \left(\frac{6\mu_{\text{eff}}}{h_t^3} y^2 - \frac{3b^2\mu_{\text{eff}}}{2h_t^3} \right) \frac{dh_t}{dt} \quad (18)$$

对(18)沿宽度方向再次进行积分,最终可以求得单位长度的挤压气膜力 F_s 为

$$F_s = \int_{-b/2}^{b/2} -\Delta P dy = \frac{\mu_{\text{eff}} b^3}{h_t^3} \frac{dh_t}{dt} \quad (19)$$

由式(19)进而可以得到探针系统在压膜阶段的压膜阻尼系数 c_3 的表达式为

$$c_3 = \frac{\mu_{\text{eff}} b^3}{h_t(x)^3} \quad (20)$$

由于上式所求为单位长度的阻尼系数,需要对长度进行积分.同时,为了方便计算,我们将连续梁模型转化为谐振子模型的形式,考虑梁的位置函数为 $u(x, t) = \phi(x)q(t)$, 则通过能量的等效有

$$\int_0^l \int_{-u(x,t)}^{u(x,t)} c_3 \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} du dx = \int_{-u(l,t)}^{u(l,t)} c_{e2} \frac{\partial u(l,t)}{\partial t} du \quad (21)$$

将上式积分,则可求得探针系统在压膜阶段的等效压膜阻尼系数为

$$c_{e2} = \frac{\int_0^l c_3 \phi^2(x) dx}{\phi^2(l)} \quad (22)$$

将等效压膜阻尼系数 c_{e2} 代入方程,可求得在压

膜阻尼作用下, 系统的品质因数为

$$Q_{\text{squ}} = \frac{m_e \omega_n}{c_{e2}} \quad (23)$$

为了对此进行验证, 通过实验的手段对压膜阻尼的影响进行了研究, 实验的操作方法如上文所述, 能得到较近距离的扫频曲线如图 6 所示. 图 6 展示了当探针靠近样品时, 整个扫频曲线的振幅逐渐下降, 特别是在共振频率处, 这一现象尤为明显, 振幅的下降意味着探针所受阻尼增强. 当探针距离样品较远时, 针-样间的距离大于探针的自由振幅, 这时共振曲线为自由振幅的情形. 而随着探针进一步靠近样品, 针-样间的距离小于探针的自由振幅, 此时间距的大小限制了探针自由振幅的大小, 同时针-样间的相互作用力也在其中发挥作用, 使共振曲线的形状发生“截断”, 这一现象如图 6 中最下面的两条曲线所示.

通过半带宽法计算图 3 和图 6 中扫频曲线的品质因数, 并将其与理论计算值进行对比, 理论值由 $Q^{-1} = Q_{\text{vis}}^{-1} + Q_{\text{squ}}^{-1}$ 得到, 其中 Q_{vis} 取为 336, 结果如图 7 所示. 图 7 中存在 3 个不同的区域, 即黏性影响区, 压膜影响区和截断区. 截断区域是针尖与样品发生接触而形成, 此时梁和样品之间还存在间隙, 截断区域的大小与针尖的高度相等. 实际上, 在探针敲击样品时, 针尖尖端也会有压膜阻尼产生, 但由于针尖尖端的表面积远小于梁的表面积, 其所产生的压膜阻尼可以忽略. 考虑梁的影响, 在图中的黏性和压膜影响区, 能发现理论计算与实验符合的很好, 黏性阻尼在其中一直发挥作用, 不随距离的变化而改变, 压膜阻尼则只有在探针靠近样品一定距离时才发挥作用, 并且压膜阻尼的大小随着距离的减小而增大. 从

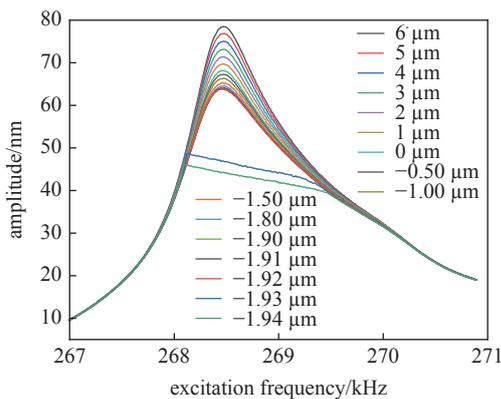


图 6 近距离的扫频曲线

Fig. 6 Sweep curve at close distance

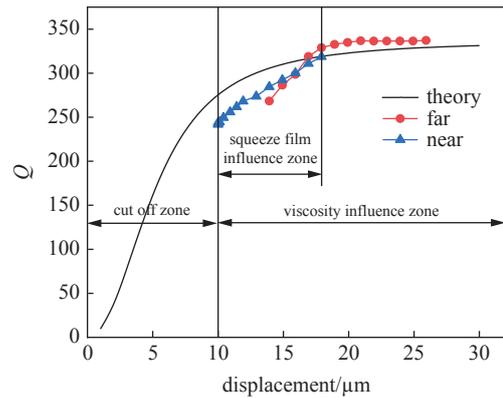


图 7 理论、实验品质因数与探针位置的关系

Fig. 7 The relationship between the quality factor and position of the probe in theory and experiment

图中的具体数值来看, AFM 探针在受压膜影响的范围内, 品质因数大约从 336 降到了 240, 通过品质因数的“并联”特征进行计算, 即 $\Delta Q^{-1} = 240^{-1} - 336^{-1}$, 能得到系统的品质因数改变了 $\Delta Q = 840$, 那么可以估计微悬臂梁在压膜阻尼作用下, 系统品质因数的变化在 $10^2 \sim 10^3$ 量级.

2.2.3 液桥耗散

液桥耗散主要是指由空气湿度引起的针尖与样品之间的耗散, 对于亲水性质的样品, 毛细力在耗散中占据重要地位^[37]. 同样类型的样品在不同湿度下, 扫描出来的结果往往大不相同, 这是因为在扫描过程中毛细力的大小受到液桥形成与破碎的影响. 当毛细力存在时, 其他类型的力往往会被掩盖^[38]. 一般对于 AFM 微悬臂梁来说, 它每振动一个周期, 细长针尖都会与样品接触一次, 因此确定在不同空气湿度下毛细力对能量耗散的贡献是十分重要的. 关于液桥的形成, 可根据以往的研究成果总结为以下模型: 挤出模型、毛细凝聚模型和液膜流动模型^[17].

当 AFM 系统在大气环境中工作时, 对于亲水性质的样品, 它的表面往往会吸附水分子进而形成水膜, 当有针尖的微悬臂梁探针接触样品时, 探针和样品表面的水膜受到力的作用被挤出形成液桥, 从热力学角度来看, 此时的液桥还未达到平衡状态. 当探针接触样品过程中, 两者附近会形成一道狭缝, 狭缝会吸附周围的水分子使其产生凝聚, 这个过程所用时间很短. 之后, 散布在狭缝区外围的水分子也会由于扩散运动而发生凝聚, 这一过程所需时间较长, 因此毛细凝聚的特征时间主要取决于扩散运动的特征时间. 另外, 当探针针尖开始脱离样品表面时, 由针

尖与样品表面分离所产生的负压和分离压会驱动着水膜向液桥方向流动, 这个流动模型的特征时间由流动过程控制. 总之, 在这 3 种液桥形成机理中, 根据文献 [17] 可知, AFM 探针与样品接触的时间极短, 而液膜挤出的特征时间数量级为 10^{-6} s; 毛细凝聚的特征时间数量级为 10^{-3} s; 液膜流动的特征时间数量级为 $10^{-4} \sim 10^{-2}$ s, 据此可以得到在探针针尖接触样品表面并形成液桥这一过程中, 在液桥耗散中贡献最多的是挤出模型.

AFM 系统的探针在亲水样品表面会由于范德华力而形成水膜, 水膜的分离压力为

$$\Pi = \frac{A_H}{6\pi h_l^3} \quad (24)$$

式中, A_H 代表哈梅克常数, h_l 为水膜厚度.

液桥负压受 Young-Laplace 方程控制, 表达式为

$$\Delta p = \gamma_l \left(\frac{1}{r_a} + \frac{1}{r_m} \right) \quad (25)$$

式中, Δp 表示液桥的内外压差, r_a 和 r_m 为液桥的主曲率半径, γ_l 为水的表面张力系数.

当其平衡时, 液膜分离压与液桥内外压差相等, 又由开尔文方程

$$\left(\frac{1}{r_a} + \frac{1}{r_m} \right)^{-1} = r_k = \frac{\gamma_l V_m}{\bar{R} T \ln(p_l/p_s)} \quad (26)$$

式中, r_k 为开尔文半径, p_l 代表气体环境蒸汽压, p_s 代表气体的饱和蒸汽压, p_l/p_s 为相对湿度, \bar{R} 为普适气体常数, T 为开尔文温度, V_m 为水的摩尔体积.

通过上面 3 个式子, 能得到水膜厚度与相对湿度的表达式为

$$h_l = \sqrt[3]{\frac{A_H V_m}{6\pi \bar{R} T \ln(p_l/p_s)}} \quad (27)$$

式中, A_H 取值为 -8.7×10^{21} J, V_m 取值为 1.8×10^{-5} $\text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$, \bar{R} 取值为 8.31 $\text{J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$, T 取值为 293 K. 由式 (27) 可得水膜厚度与相对湿度的关系曲线, 并将理论的结果与其他实验者的实验值^[39-40] 进行比较, 得到如图 8 所示曲线. 从图中可以看出, Kelvin 模型与其他实验者所做的实验曲线符合得很好, 这进一步证明了模型建立的正确性.

文献 [41] 详尽计算了不同液桥生成模型对液桥耗散的贡献, 明确了在 3 种模型中挤出模型占据主

导地位. 液桥模型示意图如图 9 所示, 若不考虑探针针尖与样品表面接触后发生弹性形变, 可以得到液桥挤出模型体积的表达式为

$$V_b = 4\pi R_t h_l^2 + \frac{4\pi h_l^3}{3} \approx 4\pi R_t h_l^2 \quad (28)$$

式中, R_t 为针尖的曲率半径, $R_t \gg h_l$.

一般认为液桥在凝聚和破碎过程中处于等容过程, 即液桥的体积不变. 那么毛细力应是液桥表面张力和液桥内外的 Young-Laplace 压力差之和, 具体表达式为^[42]

$$F_b = \pi r_a^2 \gamma_l \left(\frac{1}{r_a} + \frac{1}{r_m} \right) + 2\pi r_a \gamma_l \quad (29)$$

之后, 当探针离开样品, 微悬臂梁探针需克服毛细力的作用做功, 由此通过积分可以得到因液桥成形与拉断导致的能量耗散大小为

$$\Delta E_b = \int_0^{L_a} F_b dL \quad (30)$$

式中, L 为液桥长度, L_a 为液桥的临界拉断长度, 大小正比于 $\sqrt[3]{V_b}$.

将其视为一单自由度系统, 通过品质因数的定义, 能得到液桥耗散的品质因数为

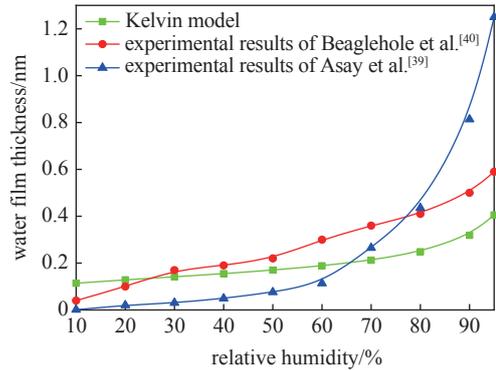


图 8 液膜厚度与相对湿度的关系

Fig. 8 Relationship between water film thickness and relative humidity

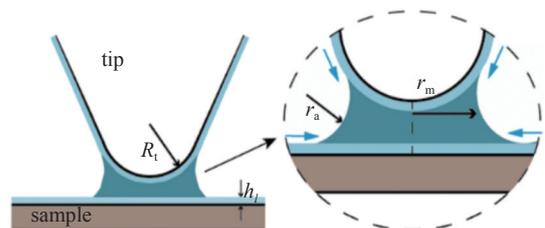


图 9 液桥模型示意图

Fig. 9 Schematic diagram of liquid bridge model

$$Q_{liq} = 2\pi \frac{W}{\Delta E_b} = \frac{\pi k_e D^2}{\Delta E_b} \quad (31)$$

其中, W 是系统存储的总能量, D 是悬臂梁的振幅, 通常是几十纳米, k_e 为悬臂梁的等效刚度.

详细的理论求解可参考文献 [17, 41-42], 通过实验能得到耗散能与相对湿度的关系如图 10 所示, 挤出模型的理论值与实验的结果如图 11 所示.

从图 10 和图 11 中可以看出, 探针在靠近接触样品的过程中 AFM 耗散能会随着相对湿度的增加而增加, 品质因数 Q 会随着相对湿度的增大而减小. 通过实验和理论模型的分析, 能发现挤出模型与实验结果符合得比较好. 并且通过图 10, 得到液桥的耗散能大约为 $10^{-18} \sim 10^{-17}$ J 的量级, 从品质因数的变化来看, 由液桥带来的耗散使 AFM 探针的品质因数从 405 降到了 380. 通过计算, $\Delta Q = 6156$, 那么可以估计微悬臂梁在液桥耗散的影响下, 系统品质因数的变化大概在 10^3 量级.

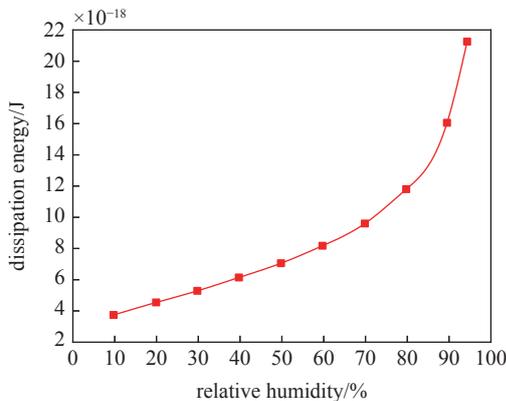


图 10 相对湿度与耗散能的关系

Fig. 10 Relationship between relative humidity and dissipation energy

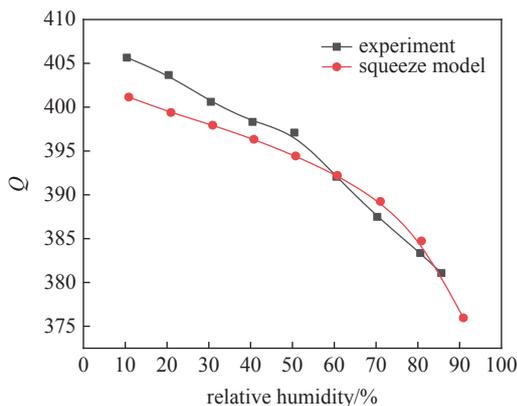


图 11 不同相对湿度下品质因数的关系

Fig. 11 Relationship of quality factor under different relative humidity

2.3 在液体中的外部耗散

AFM 作为一种显微镜技术, 其工作的范围并不仅限于气体环境, 在液体环境也有十分重要的应用. 如在生物学研究领域, 由于几乎所有的生物过程都是在液体中发生的, 这些过程往往依赖于某些盐的存在和溶液的浓度. 另外, 许多生物样品在干燥时会显著发生结构的改变, 导致不能获得样品原本的信息. 因此, AFM 能在缓冲溶液中成像和测量样品的能力对许多生物实验至关重要[20].

AFM 在液体中的成像, 与在大气环境下类似, 会受到自身的内禀耗散, 支撑损耗及外部环境中液体黏性阻尼的作用, 但与大气环境不同的是, 由于液体的不可压缩性及完全处于水分子的环境, 此时系统中压膜阻尼和液桥的影响都不存在. 同时, 与微悬臂梁在空气中的振动相比, 在液体中悬臂梁的振动行为发生了显著的改变. 例如, 对于矩形悬臂梁来说, 其在水中一阶共振模式的频率为在大气环境下的 $1/5 \sim 1/3$ [43]. 共振频率的降低可以用流体载荷的影响来解释, 液体的密度比空气大, 使得微悬臂梁的有效质量增加, 液体的黏滞性增加了流体动力阻尼, 使得品质因数降低. 在这里, 对微悬臂梁探针远离样品表面的振动状态进行讨论, 并且为了研究方便, 可以把微悬臂梁探针看作是一个具有集中质量的振动球的形式, 悬臂梁和振动球的转化示意图如图 12 所示.

一般来说, 当 AFM 在离样品较远处振动时, 由流体带来的附加阻尼力的影响可以用阻尼项和惯性项来表示

$$F_d = c_{e3} \frac{du}{dt} + m_L \frac{d^2u}{dt^2} \quad (32)$$

其中, c_{e3} 表示液体的等效阻尼, m_L 表示液体带来的附加质量, u 表示悬臂梁的位置.

经过上面的分析, 在液体中微悬臂梁的等效质量可表示为

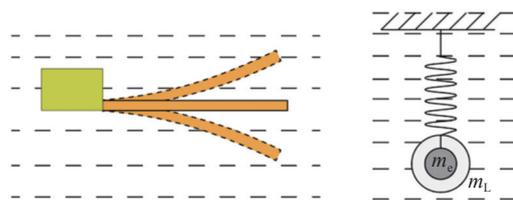


图 12 微悬臂梁在液体中振动示意图

Fig. 12 Schematic diagram of vibration of micro-cantilever beam in liquid

$$m_{\text{liquid}} = m_e + m_L \quad (33)$$

其中, m_e 由式 (14) 可知为 $0.24m$.

为了明确在液体中微悬臂梁等效质量的大小, 使用简化的 Greenspon^[44] 理论来计算液体中梁的振动, 得到表达式为

$$\frac{m_L}{m_e} = \frac{\rho_L}{\rho_a} \frac{l}{h} \frac{A^2}{B} f\left(\frac{b}{l}\right) \quad (34)$$

其中, ρ_L 表示液体的密度, 对于矩形微悬臂梁的一阶模态, 梁函数 $A^2/B \approx 0.6$, 函数 $f(b/l)$ 由 Greenspon 计算得到, 但当 $b/l > 0.1$ 时, 其可以近似为 $f(b/l) = \sqrt{b/l}$. 化简式 (34), 则液体中的等效质量可以表示为

$$m_{\text{liquid}} = 0.24m + 0.144\rho_L(bl)^{3/2} \quad (35)$$

而对于黏性阻尼部分, 分析与大气环境中相同, 两者差别在于两者密度及动力黏度不同, 等效阻尼表示为

$$c_{e3} = \frac{3\pi\eta_L l + \pi b l \sqrt{2\rho_L \eta_L \omega}}{4} \quad (36)$$

其中, η_L 表示液体的动力黏度, 以水为例 $\eta_L = 8.59 \times 10^{-4} \text{ kg/(s}\cdot\text{m)}$, $\rho_L = 997 \text{ kg/m}^3$. 这样能得到液体中梁品质因数的表达式为

$$Q_{\text{liquid}} = \frac{\sqrt{k_e m_{\text{liquid}}}}{c_{e3}} \quad (37)$$

同样讨论尺寸为 $135 \mu\text{m} \times 40 \mu\text{m} \times 4 \mu\text{m}$ 的微悬臂梁探针, 探针材料为硅, 考虑所处液体环境为水环境, 能得到梁在水中的各项参数及品质因数如表 3 所示.

表 3 液体中梁的参数及品质因数

Table 3 Parameters and quality factor of beam in liquid

| Parameter | Value |
|--|--------------------------|
| $l \times b \times h/\mu\text{m}$ | $135 \times 40 \times 4$ |
| material | Si |
| E/GPa | 169 |
| $m_{\text{liquid}}/\text{kg}$ | 5.7×10^{-11} |
| f_n/kHz | 150.5 |
| $c_{e3}/(\text{N}\cdot\text{s}\cdot\text{m}^{-1})$ | 5.67×10^{-6} |
| Q_{liquid} | 8.83 |

从表 3 的结果可以看出, 当 AFM 微悬臂梁探针在液体环境中振动时, 流体的惯性效应使得液体中微悬臂梁的有效质量增加, 同时, 由于流体的黏性力

也比气体环境大很多, 其耗散阻尼增加, 使得品质因数降低. 在这里, 我们分析了微悬臂梁探针在远离样品时由于液体的黏性阻尼对品质因数的影响, 对于尺寸为 $135 \mu\text{m} \times 40 \mu\text{m} \times 4 \mu\text{m}$ 的微悬臂梁来说, 论述了它在液体环境下的等效质量及等效阻尼的影响, 得到了梁在水环境下的理论品质因数为 8.83. 由此能估计微悬臂梁在液体环境下, 由于流体的黏性阻尼所引起的耗散对微悬臂梁品质因数的贡献量级大概在 10 左右. 有文献给出, 溶液中微悬臂梁品质因数的范围为 $1 \sim 5$ ^[19,45], 但考虑到微悬臂梁尺寸、刚度及液体种类不同, 可以认为由本文所计算出的理论品质因数是合理的.

3 讨论

AFM 微悬臂梁探针在一个振动周期中存在着各种不同类型的能量耗散, 其中核心耗散是要重点关注的部分, 其他的耗散会对系统产生影响, 使其品质因数降低. 本文针对一个典型的轻敲式 AFM 探针系统进行了研究, 得到众多耗散的量级示意图如图 13 所示. 在不同的工作环境, AFM 工作过程中的能量耗散机制也稍有区别, 下面将对不同环境下的能量耗散进行讨论, 并明确其具体的贡献量级.

当 AFM 在超高真空下工作时, 此时没有气体作用, 气体阻尼不对微悬臂梁探针产生影响, 能量耗散主要是由内禀耗散及外部耗散中的支撑损耗组成. 根据图 13 所示, 可知内禀耗散中的表面耗散和热弹性耗散对品质因数的影响能达到 10^5 量级, 而其他内禀耗散对品质因数的影响与前两者具有数量级的差距. 同时, 外部耗散的支撑损耗对品质因数的影响在 10^4 量级, 比前两者稍大. 可见此时在这些耗散中占据主导作用的耗散机制为支撑损耗、表面耗散和热弹性耗散, 这就是当 AFM 系统在超高真空中工作时, 品质因数往往会达到上万的原因.

当 AFM 在气体环境中工作时, 如果不考虑水分子的作用, 如在氮气环境下. 此时气体环境中没有水分子的存在, 液桥耗散不纳入考虑, 那么气体对微悬臂梁的品质因数产生影响的是由于气体黏性阻尼和气体压膜阻尼带来的耗散. 虽然此时内禀耗散和支撑损耗也存在, 但相比于气体阻尼产生的耗散来说十分微小. 从图 13 所展示的量级来看, 气体阻尼中黏性阻尼和压膜阻尼对品质因数的影响量级范围在 10^2 左右, 而对系统影响最大的内禀耗散, 如表面损

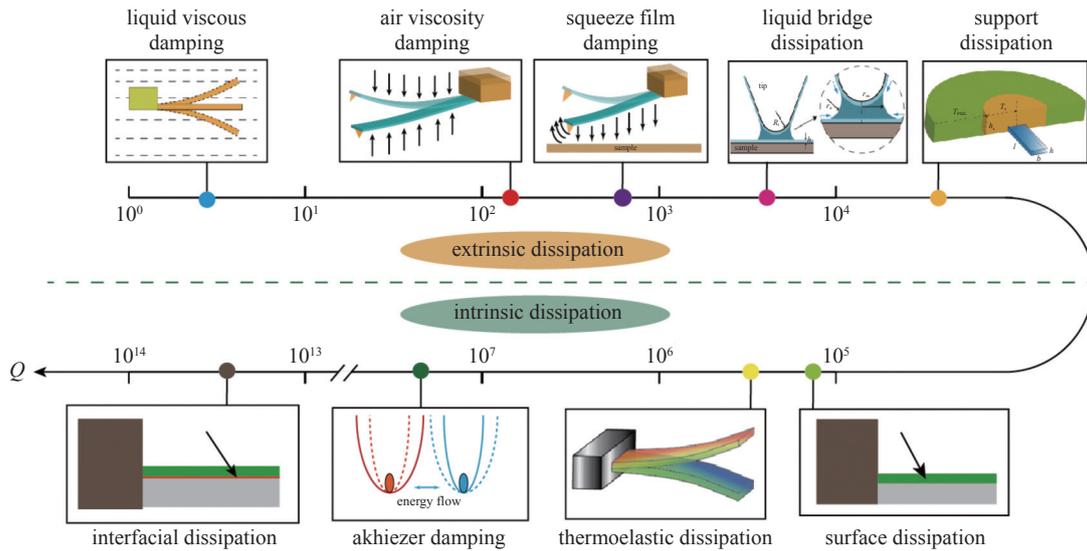


图 13 典型轻敲式 AFM 探针品质因数数量级分布图

Fig. 13 Order of magnitude distribution of quality factor for a typical tapping mode AFM probe

耗和热弹性损耗,对微悬臂梁品质因数的影响量级在 10^5 ,外部耗散的支撑损耗对品质因数的影响量级在 10^4 ,这些耗散都远低于气体阻尼所引起的耗散.可见在氮气环境下起主要耗散作用的是气体黏性阻尼和压膜阻尼.

而当 AFM 在另一个极端环境下工作时,即考虑微悬臂梁在液体中的振动情况.前面有讨论大气中由于水分子的作用针尖和样品表面通常会形成一层薄薄的水膜,受到毛细力的作用,产生液桥耗散.而当探针完全浸没在液体环境中工作时,毛细力的影响消失,此时的耗散是液体黏性阻尼所引起的耗散.由于液体的密度比空气的密度大,惯性作用使液体中微悬臂梁的有效质量增加,同时液体的黏滞性会导致微悬臂梁振动的流体动力阻尼,使得微悬臂梁的品质因数和频率降低.在前文中,通过理论分析给出了当 AFM 的微悬臂梁探针在远离样品的水中振动时,其受到水的黏性阻尼作用使得梁品质因数的量级范围在 10 左右,此时内禀耗散及支撑损耗仍然存在,但相比于液体黏性阻尼所引起的耗散来说几乎可以忽略.可见在液体环境中,主导微悬臂梁品质因数的耗散是由液体黏性阻尼产生的耗散.

对于更一般的情况,AFM 通常都在大气环境中工作,此时,空气中存在多种气体成分.对于探针振动周期中一个连续性过程的能量耗散研究,有如下的阐述.当探针在远离样品时,空气中的黏性阻尼在耗散中占据主导,对梁品质因数的影响量级范围为 10^2 .之后在探针靠近样品的过程中,压膜阻尼需要

纳入考虑,压膜阻尼对探针品质因数的影响量级在 $10^2 \sim 10^3$.然后随着探针接触样品,针-样之间由于空气中水分子所形成的水膜而会有液桥耗散的产生,由液桥对梁品质因数产生的影响量级为 10^3 .同样,内禀耗散和支撑耗散在这一连续过程的各个阶段都存在,但从图 13 的量级分布图可以看出,这些耗散相比于前面的 3 种耗散来说都较小.可见,在这一个连续的振动周期中,虽然在不同位置处主导的耗散不同,但这些耗散都与外部环境的空气有关.

上文已经讨论了不同工作环境下,整个 AFM 系统的品质因数大小.我们发现,内禀耗散和支撑损耗远比流体阻尼引起的耗散低.另外,在不同环境条件下由流体阻尼引起的能量耗散也不尽相同,其中液体的黏性阻尼导致的能量耗散最多,大气环境中由于水分子的作用,存在 3 种不同的能量耗散机制,引起的能量耗散也不小,而氮气环境不考虑水分子的影响,只有两种耗散机制,相较于前两者稍低,最后在真空环境中无流体阻尼作用,其能量耗散最小.总结 AFM 探针在这些环境下的耗散,能得到在不同环境下系统品质因数的大小如表 4 所示.

之后,对于其他耗散与核心耗散的关系,以空气环境为例,当探针在大气环境中扫描样品时,通过实验得到的品质因数依据样品种类不同而有所区别,但在完整的一个过程中,总的耗散包含了核心耗散和其他耗散(内禀耗散及外部耗散)的影响.从上文中关于其他耗散的讨论来看,其中由空气阻尼产生的耗散对系统品质因数的影响最大,影响的量级范

表 4 不同环境条件下其他耗散类型及量级对比

Table 4 Comparison of other dissipation types and magnitudes under different environmental conditions

| | Ultrahigh vacuum | Nitrogen environment | Atmospheric environment | Liquid environment |
|-------------------|--|-------------------------------------|--|-------------------------------|
| dissipation types | $Q_{in}(\text{intrinsic dissipation})^{\ast}, Q_{sup}$ | $Q_{in}, Q_{sup}, Q_{vis}, Q_{squ}$ | $Q_{in}, Q_{sup}, Q_{vis}, Q_{squ}, Q_{liq}$ | $Q_{in}, Q_{sup}, Q_{liquid}$ |
| magnitude | $Q \sim 10^4$ | $Q \sim 10^2$ | $Q \sim 10^2$ | $Q \sim (0 \sim 10)$ |

* includes $Q_{the}, Q_{son}, Q_{sur}, Q_{int}$

围能到 10^2 , 这其中包括了 3 种耗散机制的影响, 空气黏性阻尼、压膜阻尼及液桥耗散. 而若将核心耗散纳入考虑, 根据所测样品种类的不同, 核心耗散的品质因数数量级范围在 $1 \sim 10^5$ ^[18], 此时在众多的能量耗散中, 核心耗散才是我们所重视的. 但是, 其他耗散并没有远低于核心耗散, 甚至在某些样品情况下其他耗散远大于核心耗散, 因而, 研究其他耗散对系统核心耗散的“掩盖”作用是必不可少的.

最后, 在众多的耗散机制中, 所有耗散都会对系统的品质因数产生影响, 然而, 只有探针与样品真正接触的黏附耗散 (核心耗散) 才能反映样品真实的性质, 其所对应的相位信息才是我们需要的. 而其他耗散会降低核心耗散在系统总耗散中的占比, 引起扫描图像对比度降低, 使得图像中的有效信息被削弱. 本文针对这一情况对这些其他耗散的量级范围进行了估计, 明确了在不同环境下存在的耗散机制及量级贡献. 这为减弱其他耗散对系统品质因数的影响从而达到优化系统, 提高系统灵敏度和准确性的目的, 具有十分重大的意义.

4 结论

本文研究了微悬臂梁在一个振动周期中, 不同阶段和不同环境下的能量耗散机理, 明确了各耗散机制对系统总能量耗散的贡献, 为减弱其他耗散对系统品质因数的影响提供了理论参考. 在文中, 根据耗散来源的不同, 对影响 AFM 系统的其他耗散进行了具体分类, 将其分为了内禀耗散及外部耗散, 并在此基础上对它们的作用机理和对总品质因数的量级贡献进行了详细的阐述.

之后, 对于在空气中工作的 AFM, 考虑了不同能量耗散机制之间的耦合关系, 将探针从远离样品到靠近并接触样品表面这一动态连续过程进行了综合考虑, 并利用实验和理论的方法进行了验证, 分析表明, 在这一连续过程中起主导作用的其他耗散包括空气黏性阻尼, 压膜阻尼及液桥耗散. 最后, 讨论

了在不同环境下存在的能量耗散类型, 说明了在真空中, 无水分子的氮气环境, 正常大气及液体中的主要能量耗散机制, 得到了它们在各自环境下对系统总品质因数的量级贡献. 比较这些耗散, 我们发现, 液体环境中的能量耗散作用最强, 正常大气环境次之, 然后是氮气环境以及具有最小耗散的真空环境.

参 考 文 献

- 1 Helena MG, Carlos A, Perez-Madriral MM. Beyond biology: Alternative uses of cantilever-based technologies. *Lab Chip*, 2023, 23(5): 1128-1150
- 2 Zhang WM, Hu KM, Peng ZK, et al. Tunable micro-and nanomechanical resonators. *Sensors*, 2015, 15: 26478-26566
- 3 Ghaemi N, Nikoobin A, Ashory M. A comprehensive categorization of micro/nanomechanical resonators and their practical applications from an engineering perspective: A review. *Advanced Electronic Materials*, 2022, 8: 2200229
- 4 Zeng JW, Dong YJ, Zhang JR, et al. The trend of structured light-induced force microscopy: A review. *Journal of Optics*, 2023, 25: 023001
- 5 魏征, 郑晓挺, 刘晶等. 轻敲模式下 AFM 动力学模型及能量耗散机理研究. *力学学报*, 2020, 52(4): 1106-1119 (Wei Zheng, Zheng Xiaoting, Liu Jing, et al. Study on a dynamics model of tapping mode AFM and energy dissipation mechanism. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2020, 52(4): 1106-1119 (in Chinese))
- 6 Cleveland JP, Anczykowski B, Schmid AE, et al. Energy dissipation in tapping-mode atomic force microscopy. *Applied Physics Letters*, 1998, 72(20): 2613-2615
- 7 Wei Z, Sun Y, Ding WX, et al. The formation of liquid bridge in different operating modes of AFM. *Science China Physics Mechanics & Astronomy*, 2016, 59(9): 694611
- 8 Chen XH, Li BW, Liao ZX, et al. Principles and applications of liquid-environment atomic force microscopy. *Advanced Materials Interfaces*, 2022, 9(35): 2201864
- 9 Zener C. Internal friction in solids I. Theory of internal friction in reeds. *Physics Review*, 1937, 52: 230-235
- 10 Hosaka H, Itao K, Kuroda S. Damping characteristics of beam-shaped micro-oscillators. *Sensors and Actuators A: Physical*, 1995, 49(1-2): 87-95
- 11 Stoffels S, Autizi E, Van HR, et al. Physical loss mechanisms for resonant acoustical waves in boron doped Poly-SiGe deposited with hydrogen dilution. *Journal of Applied Physics*, 2010, 108: 084517
- 12 Hao Z, Liao B. An analytical study on interfacial dissipation in

- piezoelectric rectangular block resonators with in-plane longitudinal-mode vibrations. *Sensors & Actuators A Physical*, 2010, 163(1): 401-409
- 13 Yang JL, Ono T, Esashi M. Energy dissipation in submicrometer thick single-crystal silicon cantilevers. *Journal of Microelectromechanical Systems*, 2002, 11(6): 775-783
- 14 Imboden M, Mohanty P. Dissipation in nanoelectromechanical systems. *Physics Reports*, 2014, 534(3): 89-146
- 15 张文明, 闫寒, 彭志科等. 微纳机械谐振器能量耗散机理研究进展. *科学通报*, 2017, 62(19): 2077-2093 (Zhang Wenming, Yan Han, Peng Zhike, et al. Research progress on energy dissipation mechanisms in micro- and nano-mechanical resonators. *Chinese Science Bulletin*, 2017, 62(19): 2077-2093 (in Chinese))
- 16 Wei Z, Liu J, Zheng XT, et al. Influence of squeeze film damping on quality factor in tapping mode atomic force microscope. *Journal of Sound and Vibration*, 2021, 491(23): 115720
- 17 Wei Z, Liu J, Wei RH, et al. Theoretical model and experimental study on environmental dissipation mechanism of tapping mode atomic force microscope. *Journal of Microscopy*, 2021, 283: 219-231
- 18 魏征, 孙岩, 王冉冉等. 轻敲模式下原子力显微镜的能量耗散. *力学学报*, 2017, 49(6): 1301-1311 (Wei Zheng, Sun Yan, Wang Zairan, et al. Energy dissipation in tapping mode Atomic Force Microscope. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2017, 49(6): 1301-1311 (in Chinese))
- 19 Herruzo ET, Garcia R. Frequency response of an atomic force microscope in liquids and air: Magnetic versus acoustic excitation. *Applied Physics Letters*, 2007, 91(14): 143113
- 20 Chen GY, Warmack RJ, Thundat T, et al. Resonance response of scanning force microscopy cantilevers. *Review of Scientific Instruments*, 1994, 65(8): 2532-2537
- 21 Lifshitz R, Roukes ML. Thermoelastic damping in micro-and nanomechanical systems. *Physical Review B*, 2000, 61: 5600-5609
- 22 Erginçan O, Palasantzas G, Kool BJ. Influence of surface modification on the quality factor of microresonators. *Physical Review B*, 2012, 85: 1-5
- 23 Cleland AN. Foundations of Nanomechanics: From Solid-State Theory to Device Applications. Berlin: Springer-Verlag, 2003: 109-119
- 24 Ghaffari S, Chandorkar SA, Wang S, et al. Quantum limit of quality factor in silicon micro and nano mechanical resonators. *Scientific Reports*, 2013, 3: 3244
- 25 Yasumura KY, Stowe TD, Chow EM, et al. Quality factors in micron- and submicron-thick cantilevers. *Journal of Microelectromechanical Systems*, 2000, 9(1): 117-125
- 26 Jimbo Y, Itao K. Energy loss of a cantilever vibrator. *Journal of the Horological Institute of Japan*, 1968: 1-15
- 27 Photiadis DM, Judge JA. Attachment losses of high Q oscillators. *Applied Physics Letters*, 2004, 85: 482-484
- 28 Wang FY, Kong H, Zheng H. The numerical manifold method for harmonic wave propagation in unbounded domains. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 2022, 145(1): 310-320
- 29 Li YY, Wang R, Zhang, JM. A stepwise artificial boundary condition for wave propagation in elasto-plastic media. *Soil Dynamics and Earthquake Engineering*, 2023, 165: 107733
- 30 Du Y, Zhang JW. Numerical solutions for nonlocal wave equations by perfectly matched layers II: The two-dimensional case. *Journal of Computational Physics*, 2023, 488: 112209
- 31 Savidis S, Bergmann M, Schepers W, et al. Wave propagation in inhomogeneous media via FE/PML method. *Geotechnik*, 2022, 45: 98-107
- 32 Bindel DS, Govindjee S. Elastic pmls for resonator anchor loss simulation. *Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2005, 64(6): 789-818
- 33 Li P, Ou JY, Yan J. Method for optimising the performance of PML in anchor-loss limited model via COMSOL. *IET Science, Measurement & Technology*, 2022, 16: 327-336
- 34 Landau LD, Lifshitz EM. 流体力学. 李值译. 第五版. 北京: 高等教育出版社, 2013: 51-104 (Landau LD, Lifshitz EM. Fluid Mechanics. Li Zhi, Trans. Fifth Edition. Beijing: Higher Education Press, 2013: 51-104 (in Chinese))
- 35 Newell W. Miniaturization of tuning forks. *Science*, 1968, 161: 1320-1326
- 36 Bao M, Yang H. Squeeze film air damping in MEMS. *Sensors and Actuators A-Physical*, 2007, 136(1): 3-27
- 37 Garcia R. Dynamic atomic force microscopy methods. *Surface Science Reports*, 2002, 47(6-8): 197-301
- 38 Wei Z, Zhao YP. Growth of liquid bridge in AFM. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2007, 40(14): 4368-4375
- 39 Asay DB, Kim SH. Evolution of the adsorbed water layer structure on silicon oxide at room temperature. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2005, 109: 16760-16763
- 40 Beaglehole D, Christenson HK. Vapor adsorption on mica and silicon: Entropy effects, layering, and surface forces. *Journal of Physical Chemistry*, 1992, 96: 3395-3403
- 41 魏征, 赵爽, 陈少勇等. 原子力显微镜中液桥生成机理探讨. *应用数学和力学*, 2015, 36(1): 87-98 (Wei Zheng, Zhao Shuang, Chen Shaoyong, et al. Study of growth mechanisms for the liquid bridge in atomic force microscopes. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2015, 36(1): 87-98 (in Chinese))
- 42 魏征, 陈少勇, 赵爽等. 原子力显微镜中等容液桥的毛细力分析. *应用数学和力学*, 2014, 35(4): 364-376 (Wei Zheng, Chen Shaoyong, Zhao Shuang, et al. Capillary force analysis of medium liquid bridge in atomic force microscopy. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2014, 35(4): 364-376 (in Chinese))
- 43 Garcia R. 振幅调制原子力显微术. 程志海, 裘晓辉译. 第一版. 北京: 科学出版社, 2016: 95-99 (García R. Amplitude Modulated Atomic Force Microscopy. Cheng Zhihai, Qiu Xiaohui, Trans. First Edition. Beijing: Science Press, 2016: 95-99 (in Chinese))
- 44 Greenspon J. Vibrations of cross-stiffened and sandwich plates with application to underwater sound radiators. *Journal of the Acoustical Society of America*, 1961, 33(11): 1485-1497
- 45 Butt HJ, Siedle P, Seifert K, et al. Scan speed limit in atomic force microscopy. *Journal of Microscopy*, 1993, 169: 75-84